

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL



DOCTORADO EN INGENIERÍA

Simulación Computacional del flujo multifásico agua-vapor ante la inundación de emergencia del núcleo de reactores nucleares

Alirio Johan Sarache Piña

FICH

FACULTAD DE INGENIERÍA

Y CIENCIAS HÍDRICAS

INTEC

INSTITUTO DE DESARROLLO TECNOLÓGICO

PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA

CIMEC

CENTRO DE INVESTIGACIÓN

DE MÉTODOS COMPUTACIONALES

$\text{sinc}(i)$

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN SEÑALES,

SISTEMAS E INTELIGENCIA COMPUTACIONAL

Tesis de Doctorado **2025**

Doctorado en Ingeniería

Mención mecánica computacional

Título de la obra:

**Simulación Computacional del flujo
multifásico agua-vapor ante la inundación
de emergencia del núcleo de reactores
nucleares**

Autor: Alirio Johan Sarache Piña

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

Mecánica computacional, flujo multifásico,
modelo de dos fluidos, volumen de fluido,
flujo segregado, código de sistemas,
flujo a co-corriente, flujo a contra-corriente,
formulación de densidad variable, rama caliente,
modelos de turbulencia en dos fluidos, CFD.



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

Simulación Computacional del flujo multifásico agua-vapor ante la inundación de emergencia del núcleo de reactores nucleares

Alirio Johan Sarache Piña

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado
como parte de los requisitos para la obtención
del grado de

DOCTOR EN INGENIERÍA

Mención Mecánica Computacional

de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2025

Secretaría de Posgrado, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Ciudad Universitaria,
Paraje "El Pozo", S3000, Santa Fe, Argentina.



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

Simulación Computacional del flujo multifásico agua-vapor ante la inundación de emergencia del núcleo de reactores nucleares

Alirio Johan Sarache Piña

Lugar de trabajo:

CIMEC

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Universidad Nacional del Litoral

Director:

Damian Enrique Ramajo

CIMEC (CONICET-UNL) / FICH - UNL

Co-director:

Santiago Francisco Corzo

CIMEC (CONICET-UNL) / FICH - UNL

Jurado Evaluador:

Dr. _____

Dr. _____

Dr. _____

2025

Declaración legal del autor

Esta Tesis ha sido remitida como parte de los requisitos para la obtención del grado de Doctor ante la Universidad Nacional del Litoral y ha sido depositada en la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas para que esté disponible a sus lectores bajo las condiciones estipuladas por el Reglamento de la mencionada Biblioteca.

Citaciones breves de esta disertación son permitidas sin la necesidad de un permiso especial, en la suposición de que la fuente sea correctamente citada. Solicitudes de permiso para una citación extendida o para la reproducción de este manuscrito en un todo o en parte serán exigidas por el portador legal del derecho de propiedad intelectual de la misma.

Alirio Johan Sarache Piña

*Dedicado a mis padres
y a la memoria de mis abuelos.*

Agradecimientos

En primer lugar, agradezco a Dios y a la Virgen María por la vida y por la oportunidad de alcanzar este momento. Sin Su gracia y bendición, nada de esto habría sido posible.

Mi profunda gratitud se extiende a las instituciones que hicieron posible mi formación y la realización de esta tesis: la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT), el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas de la Universidad Nacional del Litoral (FICH-UNL) y el Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC). Como venezolano que ha tenido el privilegio de realizar sus estudios de doctorado en Argentina, valoro enormemente el esfuerzo de todos los argentinos y argentinas que trabajan día a día para que la educación en este país sea pública y accesible para todos.

Mi reconocimiento especial para el Dr. Juan Carlos Álvarez Hostos, quien fue el primero en mostrarme la esencia de la investigación y en motivarme a embarcarme en este camino doctoral.

Agradezco también a las doctoras Antonella Lombardi y Claubia Pereira por abrirme las puertas de sus grupos y acogerme como a uno más de sus alumnos durante mi estadía en el Departamento de Ingeniería Nuclear de la Universidad Federal de Minas Gerais. Del mismo modo, agradezco al programa Escala de Estudiantes de Posgrado de la Asociación de Universidades Grupo Montevideo por facilitar estas valiosas experiencias formativas.

Mi gratitud se extiende a todas las personas con las que tuve el placer de colaborar a lo largo de este doctorado, y muy especialmente a mi grupo de investigación, conformado por Darío Godino y Melisa Mendoza. De cada uno de ellos he aprendido mucho, y atesoro con afecto el recuerdo de nuestro trabajo conjunto.

Deseo expresar mi reconocimiento más profundo a mi director, el Dr. Damián Ramajo, y a mi co-director, el Dr. Santiago Corzo. Su dedicación, paciencia y generosidad constantes han sido pilares fundamentales durante estos años. Les agradezco por compartir conmigo su pasión y entusiasmo por la ciencia, y por haber estado siempre dispuestos a trabajar codo a codo en cada etapa de esta tesis.

A mis compañeros del CIMEC, en especial a quienes comparten conmigo la oficina 49, gracias por hacer más llevaderos los días con su apoyo y camaradería.

Finalmente, se expresa un profundo agradecimiento a la familia, y en particular a los padres, María Ana y Alirio, por haber acompañado a la distancia con un apoyo incondicional, siempre presente pese a la lejanía. Su amor, confianza y fortaleza resultaron fundamentales para alcanzar este objetivo. También se agradece especialmente a la compañera María Victoria, cuyo sostén emocional y compromiso cotidiano fueron un pilar esencial durante todo el trayecto del doctorado.

Resumen

Esta tesis desarrolla una **metodología numérica integrada** para predecir la *limitación de flujo a contracorriente* (*Counter-Current Flow Limitation*, CCFL) en escenarios relevantes de seguridad de plantas nucleares, combinando **CFD 3D** basado en OPENFOAM y el **código de sistema RELAP5-Mod3**. El enfoque aborda tres ejes complementarios: (i) la selección y verificación de la estrategia multifásica y de captura de interfase para flujos segregados; (ii) el modelado de la *turbulencia en la interfase* con formulaciones de densidad variable; y (iii) la articulación de resultados CFD con correlaciones de CCFL en análisis a escala de planta.

En primer término, se compararon formulaciones Eulerianas de *dos fluidos* (TF) y *Volumen de Fluido* (VOF) —incluyendo variantes estándar, con *Adaptive Mesh Refinement* (AMR) y reconstrucción geométrica IsoAdvector— contra datos controlados de inyección rápida de aire en columna de agua. La evidencia muestra que **VOF es más robusto y preciso** para capturar la topología de la interfase y métricas globales, alcanzando errores del orden de 1 % en mallas 3D finas, mientras que TF requiere tratamientos específicos y sufre difusión numérica de la interfase aun con esquemas de *blending*.

En segundo lugar, se evaluó la turbulencia en la vecindad de la interfase para flujos co- y contracorriente. Las formulaciones de densidad constante subestiman la disipación e ignoran el salto turbulento interfacial, afectando perfiles de velocidad, pérdidas de carga y altura líquida. En cambio, las versiones de **densidad variable** (ρ -var) en modelos de dos ecuaciones —con $k - \epsilon$ **RNG** como compromiso óptimo entre costo y fidelidad— mejoran sustancialmente la predicción.

Con estos elementos se construyó un **modelo VOF-RANS 3D con turbulencia ρ -var** que reproduce, en una *hot-leg* experimental a escala representativa, fenómenos característicos como el *CCFL elevado*, con **errores** $< 10\%$ en caída de presión y umbral de bloqueo. En contraste, RELAP5 —con correlación lineal tipo Wallis— presenta un *sesgo conservador*, adelantando el bloqueo hasta en $\sim 25\%$. Estudios paramétricos indican que la formulación ρ -var reduce el *arrastre interfacial* excesivo frente a la variante incompresible y que refinamientos de malla por debajo de ~ 10 mm producen cambios marginales en magnitudes globales.

Finalmente, en un LOCA del 40 % en un reactor CANDU-6, el **impacto del modelado CCFL sobre variables globales de planta** (caudales, inventario y efectividad del ECCS) resulta acotado; no obstante, se recomienda extender el análisis a SBLOCA donde la interacción contracorriente es dominante. La tesis aporta **directrices prácticas**: (a) para $J_f^{*0.5} < 0.15$ un enfoque 1D con correlaciones adecuadas es suficiente para barridos paramétricos; (b) para $J_f^{*0.5} > 0.20$ o geometrías con curvaturas/codos pronunciados, **CFD con captura explícita de interfase es esencial** para evitar sobreestimaciones conservadoras del bloqueo. En conjunto, la metodología propuesta permite integrar de forma trazable la física local de la interfase en evaluaciones de seguridad a escala de planta.

Abstract

This thesis develops an **integrated numerical methodology** to predict *Counter-Current Flow Limitation* (CCFL) in safety-relevant scenarios of nuclear power plants by combining **3D CFD** based on OPENFOAM with the **system code** RELAP5-Mod3. The approach addresses three complementary pillars: (i) selecting and verifying the multiphase and interface-capturing strategy for segregated flows; (ii) modelling *interfacial turbulence* with variable-density formulations; and (iii) linking CFD results with CCFL correlations in plant-scale analyses.

First, Eulerian *two-fluid* (TF) and *Volume of Fluid* (VOF) formulations—covering the standard approach, *Adaptive Mesh Refinement* (AMR), and the IsoAdvector geometric reconstruction—were benchmarked against controlled fast air–injection tests in a water column. The evidence shows that **VOF is more robust and accurate** to capture interface topology and global metrics, reaching errors of 1 % on fine 3D meshes, while TF requires specific treatments and still suffers from numerical diffusion of the interface even with *blending* schemes.

Second, turbulence in the interfacial vicinity was assessed for co-current and counter-current regimes. Constant-density formulations underestimate dissipation and miss the turbulent jump across the interface, biasing velocity profiles, pressure losses, and liquid height. In contrast, **variable-density** (ρ -var) versions of two-equation models—with $k - \epsilon$ **RNG** as an optimal compromise between cost and fidelity—substantially improve predictions.

Building on these elements, a **3D VOF–RANS model with ρ -var turbulence** is constructed that reproduces, in a representative-scale experimental *hot-leg*, characteristic phenomena such as *elevated CCFL*, achieving **errors** $< 10\%$ in pressure drop and blockage onset. In contrast, RELAP5—with a linear Wallis-type correlation—exhibits a *conservative bias*, advancing blockage by up to $\sim 25\%$. Parametric studies indicate that the ρ -var formulation reduces excessive *interfacial drag* relative to the incompressible variant and that mesh refinements below ~ 10 mm produce marginal changes in global outcomes.

Finally, for a 40 % LOCA in a CANDU-6 reactor, the **impact of CCFL modelling on plant-scale variables** (loop flow rates, core inventory, and ECCS effectiveness) is bounded; nevertheless, extension to SBLOCA is recommended where counter-current interaction is dominant. The thesis provides **practical guidelines**: (a) for $J_f^{*0.5} < 0.15$, a 1D approach with suitable correlations suffices for parametric sweeps; (b) for $J_f^{*0.5} > 0.20$ or geometries with pronounced bends, **interface-capturing CFD is essential** to avoid overly conservative blockage estimates. Altogether, the proposed methodology enables a traceable integration of local interfacial physics into plant-scale safety evaluations.

Prólogo

Esta tesis ha sido elaborada bajo la modalidad de *tesis por compilación*, cuyo objetivo es mantener un vínculo asociativo sólido con los trabajos científicos derivados del proceso de investigación. El cuerpo principal se ha redactado con la intención de presentar, de manera sintética, la secuencia de aprendizajes adquiridos a lo largo del doctorado, procurando reflejar con fidelidad tanto las dificultades enfrentadas como la fundamentación de las soluciones adoptadas.

Esta estructura busca facilitar la lectura e interpretación de las publicaciones incluidas en los apéndices, las cuales recopilan los aportes específicos del trabajo realizado. En consecuencia, se ha evitado deliberadamente la repetición de explicaciones metodológicas o de resultados ya presentados en dichos artículos.

De los cuatro artículos incorporados, dos han sido publicados en revistas científicas de alto impacto en el área; el tercero se encuentra actualmente en proceso de revisión por pares (*under review*) y el cuarto se halla en etapa final de preparación para su envío a una revista especializada.

La estructura general de la tesis se compone de cinco capítulos: (I) Introducción, (II) Metodología empleada para la investigación, (III) Principales resultados y aportes en el estudio del CCFL, (IV) Conclusiones, y (V) Apéndices. A continuación, se describen sus contenidos de manera sintética:

- **Capítulo I: Introducción.** Presenta el contexto general de la investigación, así como los objetivos globales y específicos que guían el desarrollo de la tesis.
- **Capítulo II: Metodología.** Expone los enfoques computacionales empleados para el análisis del flujo multifásico y la problemática del CCFL, ofreciendo un panorama sobre los métodos y herramientas seleccionados.
- **Capítulo III: Principales resultados y aportes.** Desarrolla los hallazgos más destacados y describe la secuencia de la investigación. Incluye las simulaciones y discusiones en torno a la aplicación de los diferentes métodos en el estudio del CCFL.
- **Capítulo IV: Conclusiones.** Resume los logros alcanzados con respecto a los objetivos definidos, reflexiona sobre las limitaciones encontradas y sugiere posibles líneas de investigación futura.
- **Capítulo V: Apéndices.** Contiene los artículos publicados a partir de este trabajo doctoral, así como material complementario que respalda y amplía la información presentada en los capítulos anteriores.

Índice general

1	Introducción	1
1.1	Motivación	1
1.2	Aportes, relevancia y originalidad de la tesis	4
1.3	Objetivos	5
1.3.1	Objetivo general	5
1.3.2	Objetivos particulares	6
1.4	Estado del arte en la simulación computacional del fenómeno CCFL	6
1.4.1	Desarrollo y aplicaciones del método VOF en flujos bifásicos	7
1.4.2	Comparación de modelos TF y VOF en flujos con transición de régimen	8
1.4.3	Turbulencia interfacial en flujos bifásicos: enfoques VOF–RANS y TF	9
1.4.4	Estudios experimentales y correlaciones geométricas del CCFL	10
1.4.5	Modelado del CCFL en códigos de sistemas RELAP5 y CFD-3D	11
2	Metodología	15
2.1	Modelos multifásicos TF y VOF	16
2.1.1	Ecuaciones Gobernantes del Método VOF	16
2.1.2	Ecuación de Transporte de α en el Método VOF estandar	18
2.1.3	Ecuación de Transporte de α en IsoAdvector	18
2.1.4	Refinamiento Adaptativo de Malla	19
2.1.5	Ecuaciones de gobierno del Modelo Euleriano de Dos Fluidos	20
2.2	Modelado de la Turbulencia	22
2.3	Formulación incompresible (ρ -con)	24
2.3.1	Modelo $k - \epsilon$	24
2.3.2	Modelo $k - \epsilon$ Realizable	24
2.3.3	Modelo $k - \epsilon$ RNG	25
2.3.4	Modelo $k - \omega$ SST	26
2.3.5	Modelo de pared basado en la ley logarítmica	27
2.3.6	Modelo de Transporte de Esfuerzos de Reynolds (RST)	28
2.4	Formulación compresible (ρ -var)	29
2.4.1	Modelo $k - \epsilon$ RNG	29
2.4.2	Modelo $k - \omega$ SST	29
2.4.3	Modelo de Transporte de Esfuerzos de Reynolds (RST)	30
2.5	Formulación matemática de los modelos RELAP5	31
2.5.1	Avance Temporal en el Esquema Semi-Implícito	32
2.5.2	Modelo CCFL	33
2.6	Estudio de casos	35
2.7	CASO 1: Columna agua–aire	36
2.7.1	Condiciones de Contorno e Iniciales	37
2.7.2	Modelo Computacional CASO 1	38

2.8	CASO 2: Flujo a co-corriente y contra-corriente	39
2.8.1	Flujo en co-corriente	40
2.8.2	Flujo en contra-corriente	42
2.8.3	Modelo computacional CASO 2	43
2.9	CASO 3: CCFL en una geometría tipo <i>hot-leg</i>	44
2.9.1	Modelo geométrico 3D	44
2.9.2	Descripción de la malla 3D	45
2.9.3	Nodalización en <i>RELAP5Mod3</i>	45
2.9.4	Casos de estudio	47
2.9.5	Modelo Computacional CASO 3	49
2.10	CASO 4: Pérdida de refrigerante en un reactor CANDU-6	49
2.10.1	Modelo en RELAP5	50
2.10.2	Sistemas de seguridad considerados	52
2.10.3	Modelo de rotura	53
3	Resultados y aportes	55
3.1	CASO 1. Columna agua-aire	55
3.1.1	Resultados con los distintos modelos	57
3.2	CASO 2. Flujo a Co-corriente y contra-corriente	59
3.2.1	Experimento co-corriente	60
3.2.2	Experimento contra-corriente	64
3.3	CASO 3. CCFL en una geometría tipo <i>hot-leg</i>	65
3.3.1	Test 1 – Incremento y reducción del flujo de aire en la Región 1 (bajo caudal de agua)	66
3.3.2	Test 2 – Incremento del caudal de aire en torno al CCFL para distintos caudales de agua	67
3.4	CASO 4. Pérdida de refrigerante en un reactor CANDU-6	72
4	Conclusiones	77
A	Air injection in vertical water column: Experimental test and numerical simulation using volume of fluid and two-fluid methods	81
A.1	Introduction	84
A.1.1	Volume of Fluid methods	85
A.1.2	Two-fluid method vs Volume of Fluid method	86
A.2	Benchmark: water column with air injection.	87
A.3	MATHEMATICAL MODEL	88
A.3.1	Governing equations of the Volume of Fluid method	88
A.3.2	Transport equation of α in SVOF	89
A.3.3	Transport equation of α in VOF-PLIC	89
A.3.4	Adaptive mesh refinement	90
A.3.5	Governing equations for Eulerian two-fluid model	91
A.3.6	Boundary and initial conditions	93
A.3.7	Turbulence modeling	93
A.4	COMPUTATIONAL MODEL	94
A.5	RESULTS AND DISCUSSION	95
A.5.1	Experimental results	95
A.5.2	Numerical results	98
A.6	Conclusions	105

B	Volume of Fluid simulation of air-water co-current and counter-current flow with variable density turbulence formulation	107
B.1	Introduction	110
B.2	Mathematical model	111
B.2.1	Continuity and Momentum Equations	111
B.2.2	Void fraction transport equation	112
B.2.3	Boussinesq hypothesis	113
B.2.4	$k - \epsilon$ RNG Model	113
B.2.5	$k - \omega$ SST Model	114
B.2.6	Reynolds Stress Transport Model	114
B.3	Computational Model	116
B.4	Tests description	116
B.4.1	Co-current Flow	117
B.4.2	Counter-current flow	120
B.5	Results and discussions	120
B.5.1	Co-current Flow	120
B.5.2	Counter-current flow	129
B.6	Conclusions	133
C	Numerical Analysis of Counter-Current Flow Limitation in a Horizontal Hot-Leg with Elbow Using RELAP5 and VOF-RANS Models	135
C.1	Introduction	138
C.2	Mathematical models	141
C.2.1	3D VOF model in OpenFOAM	141
C.2.2	ρ -var $k - \epsilon$ RNG turbulence modeling	142
C.2.3	1D two-fluid model in RELAP5Mod3	143
C.3	METHODOLOGY	144
C.3.1	Geometric 3D model	144
C.3.2	3D mesh description	144
C.3.3	RELAP5Mod3 model nodalization	145
C.3.4	Case Studies	147
C.3.5	Computational Model	148
C.4	RESULTS AND DISCUSSION	149
C.4.1	Test 1. Air flow increase and reduction in region 1 (low water flow)	149
C.4.2	Test 2 - Increase of the air flow around the CCFL for different water flow rates	151
C.4.3	RELAP5Mod3 Results	156
C.5	Conclusions	158
D	Large loss of coolant accident in the pump suction line in a CANDU-6 nuclear power plant: Assessment of the LOCA 40 % break size and CCFL models	161
D.1	Introduction	163
D.2	Computational model	164
D.2.1	Nuclear power plant Model	164
D.2.2	Break model	167
D.3	Results and discussion	168
D.3.1	Analysis of LOCA 40% in 3312-PM4 pump suction line.	168
D.3.2	Sensitivity analysis of CCFL Models and PHTS pump operation.	172
D.4	Conclusions	174
	Bibliografía	177

Índice de figuras

1.1	Esquema general de una central nuclear PWR: circuitos primario, secundario	2
1.2	Representación esquemática de una rama caliente con inyección de agua en régimen a contracorriente	2
1.3	(a) Regiones del CCFL: <i>flooding</i> , <i>Partial Delivery</i> y <i>Zero liquid Penetration</i> . (b) Comportamiento de la curva límite en distintos L/D	3
1.4	Sketch of flow topology found in horizontal two-phase flows.	6
2.1	Construcción de la isosuperficie mediante la intersección con la cara de celda. Imagen cortesía de Roenby et al. [1]	19
2.2	Funciones de ponderación del método de blending.	22
2.3	Esquema de discretización escalonada en RELAP5.	33
2.4	Banco de pruebas experimental.	37
2.5	Esquema de la geometría utilizada para a) flujo en co-corriente y b) pruebas de flujo en contra-corriente.	41
2.6	Malla M5-2D para co-corriente Caso 250.	41
2.7	Malla 2D-M3 para el test de flujo en contra-corriente.	43
2.8	Modelo geométrico 3D-CFD para el caso CCFL tipo hot leg.	45
2.9	Vista tridimensional, frontal y transversal de la malla M1. La sección transversal del conducto permite visualizar la variación en el tamaño promedio de celda en las zonas críticas del flujo.	46
2.10	Nodalización para el experimento de la hot-leg.	47
2.11	Condición inicial: Distribución de líquido y aire.	48
2.12	Diagrama de CANDU6 PHTS.	50
2.13	CANDU-6 PHTS nodalización en RELAP5.	51
2.14	Circuito secundario de uno de los cuatro GV.	52
3.1	Cantidad de líquido remanente en el lado izquierdo al final de los ensayos para diferentes caudales de aire	56
3.2	Resultados experimentales: Secuencia de imágenes filtradas para un caudal de aire de 30 l/min	56
3.3	Comparación de métodos numéricos con mallas 3D para un caudal de aire de 30 l/min.	57
3.4	Estudio de convergencia con mallas 3D para un caudal de aire de 10 l/min.	58
3.5	Estudio de convergencia con mallas 3D para un caudal de aire de 30 l/min.	58
3.6	Volumen de líquido remanente en el compartimento izquierdo al finalizar el ensayo.	59
3.7	Ensayo de flujo co-corriente. Comparación entre las formulaciones ρ -var y ρ -con con el modelo $k-\omega$ SST: (a) perfil de velocidad U_x y (b) energía cinética turbulenta k	60
3.8	Modelos $k-\epsilon$ RNG y RST con formulaciones ρ -con y ρ -var.	60
3.9	Distribución de energía cinética turbulenta k con el modelo $k-\epsilon$ RNG: (a) formulación ρ -var (M4-2D), (b) formulación ρ -con (M4-2D) y (c) formulación ρ -con (M1-2D).	61

3.10	Ensayo de flujo co-corriente. Análisis de convergencia de malla con formulación ρ -var utilizando los modelos de turbulencia $k-\epsilon$ RNG y RST, con reconstrucción de interfaz algebraica e <i>IsoAdvector</i> (ISO).	62
3.11	Ensayo de flujo co-corriente. Resultados con malla 3D utilizando el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ RNG y formulación ρ -var: (a) perfil de velocidad U_x y (b) energía cinética turbulenta k .	63
3.12	Ensayo de flujo co-corriente. Gradiente de presión obtenido con malla 3D utilizando el modelo $k-\epsilon$ RNG y formulación ρ -var.	63
3.13	Ensayo en contracorriente. Comparación entre diferentes modelos de turbulencia: (a) perfil de velocidad U_x en MP1 y (b) perfil de velocidad U_x en MP2.	64
3.14	Ensayo en contracorriente. Comparación de la energía cinética turbulenta k utilizando formulaciones de turbulencia con ρ constante (ρ -con) y variable (ρ -var) en MP1.	65
3.15	Test 1. Caída de presión entre la entrada y la salida del flujo de aire.	67
3.16	Test 1. Comparación entre datos experimentales y simulación 3D-VOF para distintos valores de $J_g^{*0.5}$ en la Región 1.	67
3.17	Test 2. Caudal de agua en función del tiempo en la salida de la rama caliente: resultados numéricos con 3D-VOF y RELAP5.	68
3.18	Test 2. Caída de presión en función del tiempo entre la entrada y la salida de la rama caliente: resultados numéricos con 3D-VOF y RELAP5.	69
3.19	Resultados numéricos de RELAP5: distribución de fracción volumétrica líquida (α) en la rama caliente para: a) Región 1, b) Región 3.	70
3.20	Límite de inundación obtenido con los modelos 3D-VOF y RELAP5. Relación entre $J_f^{*0.5}$ y $J_g^{*0.5}$ para las diferentes regiones.	71
3.21	Secuencia del evento.	72
3.22	(a) Caudal total descargado a través de la rotura, el lado del generador de vapor y el lado de la bomba; (b) Presión en los cuatro colectores de salida.	73
3.23	Caudal en el circuito primario durante el evento de rotura en el lazo 4: (a) Bombas del circuito primario; (b) Pasos del núcleo.	74
3.24	Average void fraction for the sensitive evaluation cases: a) Pass 3 without LOF, b) Pass 4 without LOF, c) Pass 3 with LOF, d) Pass 4 with LOF.	75
A.1	Sketch of flow topology found in horizontal two-phase flows.	84
A.2	Experimental test facility.	87
A.3	Construction of the isosurface by interception with the cell face. Courtesy of Roenby et al. [1]	90
A.4	Linear weighting functions of the blending method.	92
A.5	Liquid remained at the left compartment at the end of the tests for all air flow rates	95
A.6	Experimental results: Left: Image of the test. Right: liquid front position after filter the image.	95
A.7	Experimental Results: Filtered image sequence with air flow rate of 10 l/min	96
A.8	Experimental Results: Filtered image sequence with air flow rate of 30 l/min	97
A.9	Convergence with 2D meshes for 10 l/min.	97
A.10	Convergence with 3D meshes for 10 l/min.	98
A.11	Convergence with 2D meshes for 30 l/min.	99
A.12	Convergence with 3D meshes for 30 l/min.	99
A.13	Iso-surface and α profiles with SVOF with the M3D-2 mesh for 30 l/min.	100
A.14	Comparison of flow patterns between the SVOF and the experiment for 30 l/min with 2D and 3D meshes.	101
A.15	Comparison between different numerical methods with 3D meshes for air flow of 30 l/min.	102

A.16 Comparison of flow patterns with SVOF and TFBE models with air flow of 10 l/min for 2D and 3D meshes.	103
A.17 Case 30l/min, the patterns of the y component of liquid velocity at 0.25 s obtained with (SVOF) and (TFBE) model with 3D meshes	103
A.18 Liquid remained at the left compartment at the end of test	104
B.1 Construction of the isosurface by interception with the cell face. Courtesy of Roenby et al. [1]	113
B.2 Sketch of the geometry used for a) co-current flow and b) counter-current tests.	119
B.3 Mesh M5-2D for co-current Case 250.	119
B.4 Mesh 2D-M3 for counter-current test.	120
B.5 Co-current flow test. Comparison ρ -var and ρ -con with $k - \omega$ SST: a) velocity profile U_x and b) turbulent kinetic energy k	121
B.6 $k - \epsilon$ RNG and RST with ρ -con and ρ -var formulation.	121
B.7 Co-current flow test. Comparison of velocity profiles for 5 different meshes and ρ -var.	122
B.8 Co-current flow test. Turbulent kinetic energy profiles for 5 different meshes.	123
B.9 Kinetic energy k with $k - \epsilon$ RNG: a) ρ -var formulation (M5-2D) b) ρ -con formulation (M5-2D) c) ρ -con formulation (M1-2D).	123
B.10 Co-current flow test. Mesh convergence analysis for ρ -var: $k - \epsilon$ RNG and RST turbulence models with algebraic and ISO interface reconstruction.	124
B.11 Co-current test. 3D mesh results with $k - \epsilon$ RNG and ρ -var: a) velocity profile U_x and b) turbulent kinetic energy k	125
B.12 Co-current flow test. Pressure gradient for 3D mesh with ρ -var $k - \epsilon$ RNG.	125
B.13 Co-current flow test. Mesh M2-2D results with ρ -var, $k - \epsilon$ RNG, RST and $k - \omega$ SST: a) velocity profile U_x and b) turbulent kinetic energy k for case 400.	127
B.14 Co-current flow test. Mesh M2-2D and M3-3D results with ρ -var, $k - \epsilon$ RNG, RST and $k - \omega$ SST: a) velocity profile U_x and b) turbulent kinetic energy k for case 600.	127
B.15 Counter-current test. Comparison of M1, M2 and M3 with the RST model: a) velocity profile U_x at MP1 and b) velocity profile U_x at MP1.	129
B.16 Counter-current test. Comparison of M1, M2 and M3 with the $k - \epsilon$ RNG model: a) velocity profile U_x at MP1 and b) velocity profile U_x at MP1.	130
B.17 Counter-current test. Comparison of M1, M2 and M3 with the $k - \omega$ SST model: a) velocity profile U_x at MP1 and b) velocity profile U_x at MP1.	130
B.18 Counter-current test. Comparison with different turbulence models: a) velocity profile U_x at MP1 and b) velocity profile U_x at MP2.	131
B.19 Counter-current test. Comparison with different turbulence models: a) α at MP1 and b) α at MP2.	131
B.20 Counter-current test. Comparison of turbulent kinetic energy k for ρ -con and ρ -var turbulence formulations at MP1.	132
C.1 Illustrative diagram of $J_f^{0.5}$ vs. $J_g^{0.5}$. Group 1 corresponds to partial delivery or deflooding conditions in a horizontal pipe ($L/D = 5$), while Groups 2 to 4 represent flooding onset in inclined geometries with $L/D = 9.55$, 11.6, and 42.4, respectively [2–5].	139
C.2 Geometric model 3D-CFD.	145
C.3 Three-dimensional and front views of mesh M1 (most used in the simulations), along with a cross-sectional view of the pipe showing the variation in mesh refinement in the critical CCFL region for meshes M1 (10 mm), M2 (5 mm), and M3 (2.5 mm).	146
C.4 Nodalization in RELAP5Mod3.	146
C.5 Liquid distribution obtained with the three meshes for Test 1-R1.	149
C.6 Test 1. Pressure drop results for $J_f^{*0.5} = 0.105$	150

C.7	Test 1. Comparison between experiments and 3D-VOF (ρ -var $k-\epsilon$ RNG) simulation at different $J_g^{*0.5}$ in region 1 for $J_f^{*0.5} = 0.105$	150
C.8	Test 2. Liquid flow rate at the hot-leg outlet: numerical predictions from 3D-VOF and RELAP5. (a) Region 1: $J_f^{*0.5} = 0.105$, (b) Region 2: $J_f^{*0.5} = 0.155$, (c) Region 3: $J_f^{*0.5} = 0.225$, (d) Region 4: $J_f^{*0.5} = 0.285$	152
C.9	Test 2. Pressure drop along the hot-leg: numerical predictions from 3D-VOF and RELAP5. (a) Region 1: $J_f^{*0.5} = 0.105$, (b) Region 2: $J_f^{*0.5} = 0.155$, (c) Region 3: $J_f^{*0.5} = 0.225$, (d) Region 4: $J_f^{*0.5} = 0.285$	153
C.10	Test 2. Comparison between experiments and 3D VOF simulation at different $J_G^{*0.5}$ in region 2.	154
C.11	Test 2. Comparison between experiments and 3D VOF simulation at different $J_G^{*0.5}$ in region 3.	154
C.12	Test 2. Comparison between experiments and 3D VOF simulation at different $J_G^{*0.5}$ in region 4.	154
C.13	Numerical Results from RELAP5: Liquid Fraction (α) distribution in the Hot-Leg for (a) Region 1 and (b) Region 3.	156
C.14	Flooding limit with the 3D-VOF and RELAP5 model. $J_f^{*0.5}$ vs $J_g^{*0.5}$ for the different regions.	157
D.1	Description of the of CANDU-6 PHTS.	165
D.2	CANDU-6 PHTS nodalization in RELAP5.	166
D.3	Secondary circuit for one of the four SGs.	167
D.4	Event sequence during the accident.	169
D.5	(a) Total flow discharged through the break, the SG side and the pump side, (b) Pressure in the four outlet headers.	170
D.6	Flow rate through the four pumps	171
D.7	Mass flow rate injected through the High, medium, and low-pressure ECCS systems.	172
D.8	Void fraction in channels of : a) Pass 4 and b) Pass 3.	173
D.9	Pressure in secondary circuit of SGs.	173
D.10	Average void fraction for the sensitive evaluation cases: a) Pass 3 without LOF, b) Pass 4 without LOF, c) Pass 3 with LOF, d) Pass 4 with LOF.	174

Índice de tablas

2.1	Propiedades de los fluidos.	37
2.2	Condiciones de contorno para los modelos 3D.	38
2.3	Parámetros de las mallas utilizadas en la simulación.	39
2.4	Parámetros de la malla para la prueba de flujo en co-corriente.	41
2.5	Condiciones de contorno para las pruebas de flujo en co-corriente y contra-corriente.	42
2.6	Parámetros de la malla para la prueba de flujo en contra-corriente.	42
2.7	Parámetros de los perfiles de velocidad de entrada para la prueba de flujo en contra-corriente.	43
2.8	Parámetros principales de las mallas utilizadas en la simulación del fenómeno CCFL.	45
2.9	Coeficientes de pérdidas k	46
2.10	Condiciones de contorno en el modelo de OpenFOAM.	48
A.1	Fluid properties.	88
A.2	Boundary Conditions for 3D models.	92
A.3	Mesh parameters.	93
A.4	Computing time and liquid remaining with air flow rate of 30 l/min.	104
B.1	Fluid properties.	118
B.2	Boundary Conditions for co-current/counter-current tests.	118
B.3	Mesh parameters for co-current test.	118
B.4	Mesh parameters counter-current test.	118
B.5	Parameters for inlet velocity profiles of counter-current test.	119
B.6	Co-current flow test. Computing time and pressure gradient error.	126
B.7	Co-current flow test. Error (L_2) for U_x and k	128
B.8	Counter current flow test. Error (L_2) for U_x and k	128
C.3	Fluid properties.	145
C.4	Mesh parameters counter-current test.	146
C.5	Pressure loss coefficients k	147
C.6	Computation conditions for the five simulated cases.	148
C.7	Boundary Conditions in OpenFOAM model.	148
D.1	Description of the main features in each system.	169

Capítulo 1

Introducción

1.1 Motivación

La *limitación del flujo a contracorriente* (*Counter-Current Flow Limitation*, CCFL) es un fenómeno de **flujo bifásico**, caracterizado por la interacción en contracorriente de las fases líquida y gaseosa, de gran relevancia en la ingeniería de procesos y, en particular, un parámetro de seguridad clave para la industria nuclear, pues puede manifestarse bajo condiciones accidentales. El CCFL ocurre cuando el arrastre del vapor ascendente impide el paso del líquido descendente en un conducto, comprometiendo la eficacia de los sistemas de reinyección de refrigerante en situaciones de emergencia.

La bibliografía especializada indica que el CCFL puede presentarse en distintas secciones del circuito primario de una central nuclear y describirse de formas diversas, en función de la geometría y de las condiciones de operación. Su importancia práctica quedó evidenciada durante el accidente de Three Mile Island (1979), donde el flujo ascendente de vapor bloqueó el retorno de refrigerante desde el presurizador al núcleo del reactor, agravando la secuencia accidental. Este episodio subrayó la necesidad de desarrollar metodologías predictivas que permitan identificar y mitigar la ocurrencia de CCFL en escenarios transitorios.

A raíz de ello, la comunidad científica ha profundizado el estudio del fenómeno mediante enfoques experimentales y numéricos. Entre estos últimos destacan la dinámica de fluidos computacional (CFD) y los códigos termo-hidráulicos de sistema, como RELAP5, cuyo objetivo es incrementar la seguridad de los reactores mediante una comprensión detallada del comportamiento del flujo bifásico en condiciones accidentales.

Para contextualizar el análisis, conviene describir brevemente la configuración de un reactor de agua a presión (*Pressurized Water Reactor*, PWR), representada en la Figura 1.1. En estas instalaciones, el calor generado por la fisión controlada de uranio se transfiere al circuito secundario —que opera a menor presión— para producir vapor y, en última instancia, electricidad. El circuito primario, que trabaja típicamente por encima de 100 bar y alrededor de 300 °C, comprende las ramas frías y calientes, las bombas de circulación, el presurizador, los generadores de vapor (GV) y el núcleo del reactor. El refrigerante ingresa por las ramas frías y desciende por el *downcomer*, es decir, el conducto anular que conecta el colector de entrada con la base de la vasija y garantiza la distribución uniforme del fluido hacia el núcleo. A continuación, atraviesa las barras del núcleo y asciende por el interior de la vasija hasta su parte superior. Desde allí, fluye por las ramas calientes hacia los GV, donde cede calor al circuito secundario.

Entre los accidentes de diseño considerados en centrales nucleares, el más severo corresponde a la rotura del circuito primario, conocida como *Loss of Coolant Accident* (LOCA). Aunque su probabilidad de ocurrencia es baja, sus consecuencias pueden ser significativas si no se logra evacuar adecuadamente el calor residual, el cual representa aproximadamente un 5 % de la potencia térmica nominal (del orden de 100 MW_t en un reactor PWR típico). Para mitigar este tipo de escenario se dispone del sistema de inyección de refrigerante de emergencia (*Emergency Core Cooling System*, ECCS), cuya función

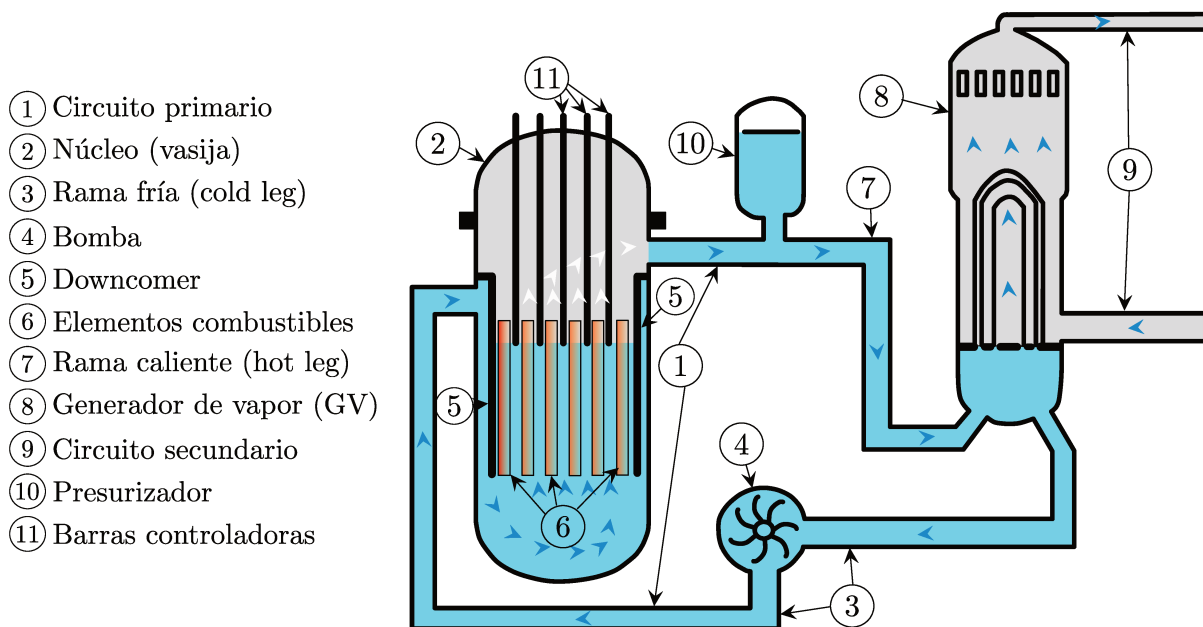


Figura 1.1: Esquema general de una central nuclear PWR: circuitos primario, secundario

principal es reinundar el núcleo del reactor. Sin embargo, durante esta etapa, el vapor que asciende por el circuito puede oponerse al flujo descendente de agua y dar lugar a una situación de CCFL. Este fenómeno puede manifestarse en diversas regiones del circuito primario, tales como las ramas calientes (*hot-leg*), el downcomer, el *upper plenum* —la cámara situada por encima del núcleo donde converge el flujo ascendente antes de ramificarse hacia las ramas calientes— o el presurizador. La Figura 1.2 ilustra de forma esquemática el proceso de inyección de agua en una rama caliente.

Numerosos estudios experimentales y numéricos han caracterizado las condiciones que conducen al bloqueo parcial o total del flujo de líquido en regímenes a contracorriente. Estos ensayos, generalmente realizados a escala reducida y a presión atmosférica, emplean geometrías representativas de la rama caliente. En cada prueba se mantiene constante el caudal de líquido y se incrementa progresivamente el flujo de gas hasta alcanzar el inicio del fenómeno —conocido como *onset* del CCFL o *flooding*—, momento en el cual puede producirse la inversión del flujo debido al arrastre gaseoso. A partir de los resultados obtenidos se elaboran mapas que delimitan los rangos de operación libres de bloqueo.

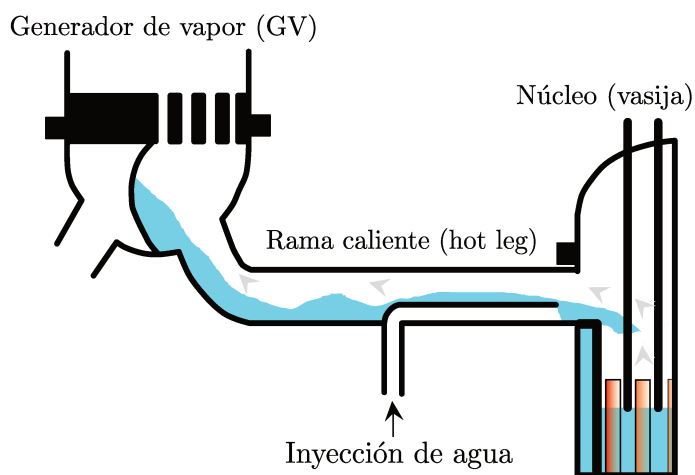


Figura 1.2: Representación esquemática de una rama caliente con inyección de agua en régimen a contracorriente

Para cuantificar estas observaciones, Wallis et al. [6, 7] llevó a cabo uno de los primeros avances significativos en la comprensión del CCFL al estudiar tuberías verticales de pequeño diámetro e introducir el parámetro adimensional de velocidad superficial $J_{g,f}^{*0.5}$, definido en la Ec. (1.1).

$$J_{g,f}^{*0.5} = \sqrt{v_{g,f} \sqrt{\frac{\rho_{g,f}}{g D (\rho_f - \rho_g)}}} \quad (1.1)$$

En dicha expresión, $v_{g,f}$ denota la velocidad superficial de la fase (subíndice g para gas y f para líquido), g la aceleración gravitatoria, D el diámetro interno de la tubería y $\rho_{g,f}$ la densidad de cada fase. Wallis observó que para tuberías de 13 mm a 18 mm de diámetro se cumplía una relación lineal

$$J_g^{*0.5} + m J_f^{*0.5} = c, \quad (1.2)$$

confirmada con datos experimentales previos [8, 9], aunque advirtió que su extrapolación a geometrías de diámetro muy distinto debe hacerse con cautela.

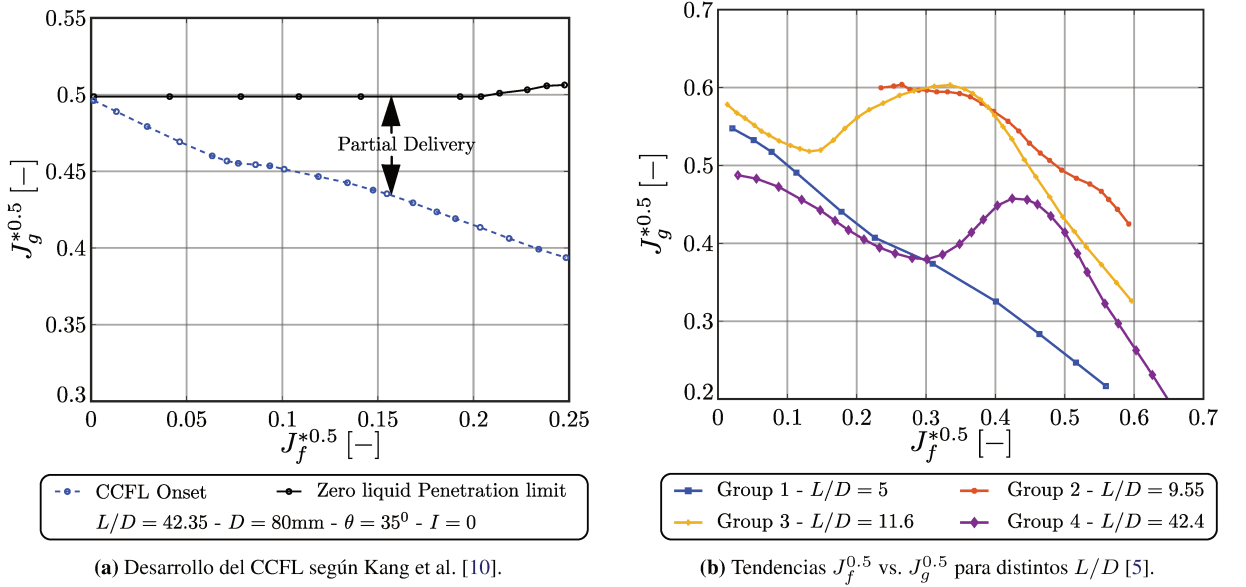


Figura 1.3: (a) Regiones del CCFL: *flooding*, *Partial Delivery* y *Zero liquid Penetration*. (b) Comportamiento de la curva límite en distintos L/D .

Más allá de la escala geométrica, el CCFL se describe hoy como un proceso progresivo que comprende como se muestra en la Figura 1.3a:

1. Inicio del *flooding*: inestabilidad en la interfaz líquido–vapor.
2. Régimen de entrega parcial (*partial delivery*, PD), en el que parte del líquido aún penetra hacia abajo.
3. Límite de penetración cero de líquido (*zero liquid penetration*, ZP), donde el flujo descendente resulta despreciable [10, 11].

Al reducir posteriormente el flujo de gas, se produce el *deflooding* —el proceso inverso al *flooding*, en el que la fase líquida recupera gradualmente su penetración descendente al disiparse el arrastre gaseoso—, restableciéndose así el flujo de refrigerante.

Estos experimentos presentan ciertas limitaciones: (i) su elevado coste y complejidad logística; (ii) la imposibilidad de reproducir simultáneamente todas las variables termohidráulicas que intervienen en un accidente real tipo LOCA; y (iii) la dificultad de extrapolar sus resultados a geometrías reales de

planta, caracterizadas por relaciones L/D —siendo L la longitud del tramo recto de la rama caliente— significativamente mayores que las ensayadas en laboratorio.

En este contexto, el análisis numérico ha adquirido un papel fundamental como herramienta complementaria. Los modelos CFD permiten resolver localmente las ecuaciones de Navier–Stokes para flujos multifásicos, capturando ondas interfaciales, la formación de *slugs* —tapones líquidos que se desplazan de forma discontinua a lo largo del conducto— y mecanismos de arrastre que escapan a las correlaciones simplificadas de Wallis. A diferencia de los códigos de sistema, el CFD no impone una relación funcional entre las velocidades de gas y líquido, aspecto especialmente relevante cuando, como demostró Issa [5, 12, 13], la pendiente de la curva límite varía según la geometría y el valor de $J_f^{*0.5}$.

La Figura 1.3b, basada en la clasificación de Issa [5] y respaldada por Minami et al. [2], Kinoshita et al. [3] y Al et al. [4], ilustra los regímenes de CCFL en el diagrama $J_f^{*0.5} - J_g^{*0.5}$ para distintas relaciones L/D . En el *Grupo 1* ($L/D = 5$, tubería horizontal) predominan los regímenes de entrega parcial o deflooding, donde la correlación lineal del tipo Wallis describe adecuadamente el fenómeno. En contraste, en los *Grupos 2* ($L/D = 9.55$), *3* ($L/D = 11.6$) y *4* ($L/D = 42.4$), correspondientes a tuberías inclinadas, dichas correlaciones pierden validez, especialmente a velocidades líquidas moderadas o altas. Además, Issa advirtió que parte de los datos reportados como CCFL corresponden en realidad a etapas posteriores al flooding, lo que subraya la importancia de distinguir entre el inicio de la inundación y las fases de entrega parcial o reinundación.

No obstante, la elevada fidelidad del CFD impone exigencias computacionales importantes: requiere mallas finas, tratamiento cuidadoso de la interfaz y números de Courant reducidos para mantener la estabilidad numérica, lo que se traduce en tiempos de simulación prolongados y la necesidad de recursos de computación de alto rendimiento (*High-Performance Computing*, HPC).

Por su parte, los códigos de sistema unidimensionales como RELAP5 modelan el circuito completo mediante balances promediados y utilizan correlaciones empíricas para cerrar la interacción gas–líquido. En el caso particular del CCFL, una de las ecuaciones de cantidad de movimiento es reemplazada por una relación lineal del tipo Wallis, donde c y m se ajustan con base en datos experimentales. Su principal fortaleza radica en la rapidez de ejecución y la capacidad de realizar múltiples análisis paramétricos, aunque su precisión está condicionada a la validez de las correlaciones empleadas.

1.2 Aportes, relevancia y originalidad de la tesis

El presente trabajo doctoral representa un avance significativo en la comprensión y predicción de fenómenos multifásicos críticos en sistemas nucleares, en particular del fenómeno de CCFL. La investigación integra de forma articulada el desarrollo experimental, el análisis numérico y la evaluación comparativa de modelos. Las contribuciones originales de esta tesis se sintetizan en los siguientes puntos:

1. **Nuevo banco experimental para regímenes mixtos.** Se utilizó el banco de ensayos desarrollado por Godino et al. [14] para llevar a cabo una serie de experimentos originales de inyección rápida de aire en una columna de agua. Mediante cámaras de alta velocidad y transductores de presión, se registró la transición controlada desde flujo burbujeante hasta flujo tapón y de gotas. Los datos obtenidos, publicados en [15], constituyen una referencia experimental valiosa para la validación de códigos numéricos en regímenes que combinan dispersión y segregación de fases.
2. **Comparación exhaustiva entre variantes TF y VOF.** Por primera vez se contrastaron tres submodelos TF (TFBU, TFDO y TFBE) con tres formulaciones VOF (SVOF, VOF–PLIC e interfaz adaptativa VOF–AMR). El estudio demostró que la mezcla dinámica (TFBE) reduce de forma sustancial los errores de presión y fracción de volumen, mientras que VOF–PLIC reproduce con alta fidelidad la topología interfacial a un coste computacional moderado [15].

3. **Modelación de la turbulencia interfacial con VOF–RANS.** Se evaluó en [16], la influencia de cierres turbulentos promediados en el tiempo (RANS) dentro de un marco VOF para flujos co- y contracorriente. El modelo de Tensor de Esfuerzos de Reynolds (RST) y la formulación de densidad variable (ρ -var) mostraron la mejor relación entre precisión y costo, evidenciando el potencial del enfoque VOF–RANS para aplicaciones industriales.
4. **Primera validación cruzada VOF–RANS vs. RELAP5 en CCFL.** En [17] se llevó a cabo la primera comparación sistemática entre un modelo VOF–RANS ρ -var en OpenFOAM-v2206 y el código de sistema RELAP5Mod3 para el fenómeno de CCFL en una geometría hot-leg. La base de datos *Collider* permitió analizar cuatro regímenes definidos por $J_f^{*0.5}$, cuantificando el efecto de la resolución de malla y de la correlación tipo Wallis sobre la predicción del bloqueo líquido.
5. **Evaluación termo-hidráulica del escenario LLOCA en un reactor CANDU-6 y análisis de modelos de CCFL.** En [18] se desarrolló una simulación detallada de un LLOCA, correspondiente a una rotura del 40 % en la línea de succión de bomba de una planta CANDU-6. El estudio, realizado íntegramente con el código RELAP5, permitió caracterizar las etapas principales del evento —*blowdown*, secado del núcleo y reinyectado— y cuantificar los efectos del fenómeno de CCFL mediante diversas correlaciones empíricas tipo Wallis aplicadas a las ramas horizontales y zonas de alimentación del circuito primario.
6. **Análisis integral de interacciones LOCA/LOFA y su impacto en la seguridad nuclear.** Asimismo, se exploró la interacción potencial entre escenarios de LOCA y pérdida de flujo LOFA, proporcionando información clave sobre el comportamiento termo-hidráulico del sistema primario en condiciones transitorias severas. Este enfoque permitió identificar posibles efectos combinados adversos y subrayó el rol fundamental de las herramientas de simulación en el análisis y mejora de la seguridad operativa de reactores tipo CANDU.

En conjunto, la tesis ofrece herramientas experimentales y numéricas que permiten:

- Reducir la incertidumbre en la predicción del CCFL y del reflujo de refrigerante bajo accidentes severos.
- Establecer criterios de diseño y operación de sistemas ECCS que garanticen la reinyección efectiva de agua hacia el núcleo.
- Integrar resultados de CFD de alta resolución en códigos de sistema 1-D, mejorando las evaluaciones de seguridad a escala planta completa.

Estos aportes sitúan el trabajo como una referencia para futuros estudios sobre flujos bifásicos complejos y fortalecen la base cuantitativa para la seguridad operativa de reactores nucleares de potencia.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo general

El objetivo general de esta tesis doctoral consiste en desarrollar herramientas computacionales en el entorno de *OpenFOAM* y *RELAP5Mod3* para la simulación de flujo bifásico (líquido-gas) en diversos regímenes (burbuja, separado y tapón), con aplicación en los ECCS. En particular, se pretende modelar y analizar el fenómeno de CCFL, un mecanismo en el cual el flujo de vapor puede obstaculizar o incluso impedir la circulación de agua hacia el núcleo.

1.3.2 Objetivos particulares

- Seleccionar la estrategia de simulación más adecuada para un flujo segregado entre los métodos basados en Volumen de Fluido (*Volume of Fluid*, VOF) y los métodos de dos fluidos (Eulerianos).
- Validar las herramientas de CFD frente a ensayos de flujo multifásico disponibles en la literatura y facilidades experimentales desarrolladas *ad hoc* para evaluar la capacidad del CFD de resolver flujos con variaciones en el régimen.
- Validar las herramientas CFD en test específicos de CCFL y determinar la capacidad de los modelos CFD.
- Reproducir los test de CCFL mediante *RELAP5Mod3* y determinar la capacidad de este código para representar el fenómeno.
- Aplicar *RELAP5Mod3* al estudio de un reactor de potencia real ante un evento de pérdida de refrigerante LOCA y evaluar el efecto del uso de modelos CCFL en la evolución de los eventos.

1.4 Estado del arte en la simulación computacional del fenómeno CCFL

En las ciencias de la ingeniería, la formulación, implementación y validación de métodos numéricos para flujos bifásicos líquido–gas ha sido objeto de intensa investigación debido a su amplia presencia en la industria, desde columnas de burbujas y tanques de proceso hasta calderas, generadores de vapor y reactores nucleares. Estos sistemas pueden presentar fases dispersas (gas inyectado en un líquido en reposo o en movimiento) o fases estratificadas que circulan co- o contracorriente en conductos, como en las líneas principales de refrigerante de plantas nucleares y oleoductos.

La topología típica de un flujo bifásico horizontal (Figura 1.4) revela la coexistencia de escalas interfaciales grandes y pequeñas, lo que ha llevado al desarrollo de distintos enfoques. Para regímenes muy dispersos con pequeñas escalas interfaciales —como flujo de gotas (zona A) o burbujeante (zona B)—, el modelo de mezcla resulta eficiente y de bajo costo, pues trata el medio como uno solo con propiedades mixtas y añade una ecuación para la concentración de la fase dispersa, imponiendo una velocidad de deriva [19]. No obstante, cuando las interfases son de gran escala, este método pierde precisión.

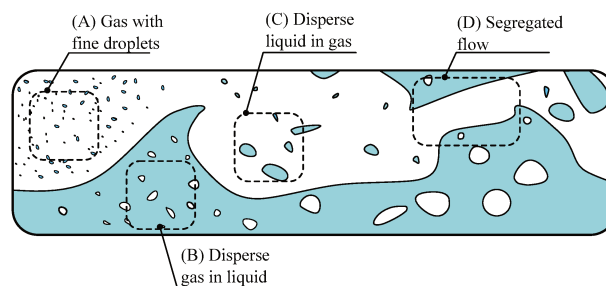


Figura 1.4: Sketch of flow topology found in horizontal two-phase flows.

El método Euleriano Two–Fluid (TF) [20, 21] aborda esta limitación al resolver por separado las ecuaciones de masa, momento y energía de cada fase, acopladas mediante términos interfaciales de masa (Γ_k), momento (M_k) y energía (E_k) que dependen del régimen de flujo (burbujas, gotas, segregado, etc.) [14]. TF es adecuado tanto para flujos muy dispersos como para escalas de interfaz grandes (zona D), aunque requiere modelos de arrastre específicos para un seguimiento más detallado de la interfase.

Por su parte, el método VOF [22] captura explícitamente la posición de la interfaz mediante la solución de una ecuación de transporte para la fracción de volumen α . Lejos de la interfaz, resuelve las

ecuaciones de una sola fase y emplea propiedades mixtas en la zona interfacial. Con mallas finas ofrece gran precisión, lo que lo hace ideal para flujos segregados, superficies libres o dominios pequeños, pero su alto coste computacional —ligado al refinamiento necesario— no es recomendable en flujos muy dispersos.

En el límite de mallado extremadamente fino, mediante Simulación Numérica Directa (DNS) es posible resolver las escalas turbulentas más pequeñas y describir detalladamente la interfaz [23], aunque el coste crece con el cubo del número de Reynolds (Re^3), limitando su uso a estudios de laboratorio.

1.4.1 Desarrollo y aplicaciones del método VOF en flujos bifásicos

El método VOF fue propuesto por Hirt y Nichols [22, 24] con el nombre de método SOLA. Consiste en resolver una ecuación de transporte puramente advectiva para la función indicadora α , junto con una reconstrucción geométrica explícita. En cada celda, el valor de α se redistribuye en direcciones paralelas a los ejes de la malla y los flujos a través de las caras se calculan mediante polígonos fluidos $\alpha_f \mathbf{U}_f$ con $\alpha = 1$. Para reducir el espesor de la capa de interfaz, Suraj et al. [25] añadieron un término de compresión a la ecuación de advección. Ambas formulaciones son de primer orden en la interfaz $O(h)$ y se conocen en conjunto como VOF estándar (SVOF).

Los métodos SVOF combinados con modelos RANS para turbulencia se han aplicado con éxito en problemas hidráulicos. Hargreaves et al. [26] simulaban flujos de superficie libre sobre un vertedero de cresta ancha empleando mallas bidimensionales y el modelo $\kappa-\epsilon$ RNG, obteniendo excelente concordancia con datos experimentales de presión y perfil de velocidades. Compararon asimismo el modelo $\kappa-\epsilon$ estándar y el *Reynolds Stress Model*, hallando resultados muy similares y una ligera mejora al pasar de mallas 2D a 3D. Cagatay y Kocaman [27] estudiaron experimental y numéricamente el conocido caso de ruptura de presa con obstáculo, usando SVOF con $\kappa-\epsilon$ en mallas 3D y modelos de aguas poco profundas; ambas aproximaciones reprodujeron bien la posición de la superficie libre, aunque el SVOF resultó más preciso en la onda reflejada tras el impacto.

Más recientemente, Issakhov et al. [28] compararon experimental y numéricamente la ruptura de presa con obstáculos de distinta geometría, evaluando SVOF acoplado a $\kappa-\epsilon$, $\kappa-\epsilon$ RNG, $\kappa-\epsilon$ realizable, $\kappa-\omega$ SST y *Detached Eddy Simulation* (DES). Todos los modelos mostraron precisión y tiempos de cómputo comparables en la localización de la superficie libre y la presión sobre el obstáculo. Otro referente es el ascenso de burbujas: Adelsberger et al. [29] contrastaron SVOF implementado en OpenFOAM con dos métodos level-set para razones de densidad líquido-gas de 10 y 1000, logrando muy buen acuerdo en forma y velocidad de burbuja para la razón baja, aunque la precisión disminuyó al aumentar la velocidad de ascenso. Pham et al. [30] replicaron esta prueba con SVOF y Simulación de Vórtices a Gran Escala (*Large Eddy Simulation*, LES), alcanzando resultados análogos.

La representación de la interfaz en SVOF sólo mejora refinando la malla, por lo que la técnica de *Adaptive Mesh Refinement* (AMR) es especialmente atractiva. AMR realiza refinamiento dinámico según criterios definidos por el usuario—por ejemplo, en torno a valores de α cercanos a la interfaz—y fue descrita en detalle por Joshi [31]. Jasak et al. implementaron AMR en OpenFOAM sobre mallas hexaédricas mediante división y fusión de celdas en las tres direcciones [32–34]. Cooke et al. [35] compararon tiempos de cómputo entre mallas estáticas y AMR en la simulación de película líquida en plano inclinado, hallando que el refinamiento parcial costaba 4 veces más y el completo 15 veces más que la malla estática. Rek [36] obtuvo mejora ligera en la trayectoria de burbujas con AMR, aunque a un coste 23 veces superior.

Para aumentar la precisión sin refinar excesivamente la malla, se han desarrollado técnicas de reconstrucción de interfaz de segundo orden, como el *Piecewise-Linear Interface Calculation* (PLIC) [37, 38]. En PLIC, la ecuación de advección se resuelve de modo similar al algoritmo SOLA, pero la redistribución de α se alinea con el vector normal $\mathbf{n} = \nabla\alpha/|\nabla\alpha|$, logrando aproximación $O(h^2)$ según la precisión del sistema lineal. Este método ha reproducido con calidad los regímenes de flujo bifásico co-corriente

horizontal del diagrama de Baker [39]. Una variante geométrica denominada IsoAdvector, propuesta por Roenby et al. [40, 41] e implementada en el solver InterFlow de OpenFOAM, obtuvo excelentes resultados frente a los esquemas clásicos MULES, HRIC y CICSAM. En este trabajo, se adoptará el término PLIC para referirse al método IsoAdvector.

1.4.2 Comparación de modelos TF y VOF en flujos con transición de régimen

En flujos multifásicos complejos, la topología de las fases puede cambiar en el espacio y en el tiempo. Los métodos VOF son capaces de adaptarse a estas variaciones siempre que la malla sea lo suficientemente fina para resolver la interfaz; por ello, en la práctica se emplean principalmente en problemas de flujo segregado con escalas interfaciales grandes. En cambio, el método TF ha sido tradicionalmente evaluado para flujos dispersos, aunque la modelación de los términos de intercambio interfacial depende del régimen de flujo. En los modelos TF estándar (STF), dicha modelación recae en el usuario, lo que implica definir la topología de las fases a priori en todo el dominio.

Para superar esta limitación, Höhne y Vallée propusieron una estrategia de mezcla dinámica (*Blending*), en la cual la definición de la topología de fases se basa en parámetros de flujo—por ejemplo, la fracción de volumen o la velocidad relativa—y cambia de régimen (burbujas, segregado, gotas) de forma continua [42]. Esta metodología fue validada en problemas de laboratorio por los mismos autores [43–46] y posteriormente implementada en OpenFOAM por Marschall para ensayos de flujo segregado [47, 48]. Corzo et al. la aplicaron al flujo agua–vapor en un generador de vapor a escala real [49], y más recientemente Godino et al. evaluaron su eficacia en cinco casos de referencia que abarcan flujos de gotas, burbujeantes y segregados, demostrando mejoras significativas con la mezcla dinámica [14]. A pesar de estos avances, persisten limitaciones en la capacidad de TF para capturar con precisión la interfaz en problemas transitorios.

La selección del modelo más adecuado para simular flujos multifásicos complejos depende tanto del régimen de flujo como de los recursos computacionales disponibles. Guerrero et al. [50] llevaron a cabo una comparación entre el modelo STF y el método SVOF, aplicados al flujo burbujeante ascendente y al flujo anular en una columna vertical. Cuando la fracción volumétrica media α_{avr} era inferior a 0,25, el modelo STF mostró menor error y resultados prácticamente independientes del mallado, mientras que el método SVOF evidenció mejoras progresivas al aumentar la resolución espacial. Con la malla más refinada, ambos métodos arrojaron valores medios similares de α , aunque con topologías de fase significativamente distintas. Los autores concluyeron que mallas de baja resolución espacial, incapaces de capturar con precisión la interfaz, sólo permiten soluciones macroscópicas aceptables con STF—si bien sacrifican la representación topológica—, mientras que SVOF requiere un mallado fino para estimar correctamente tanto los valores globales como la estructura de la interfaz.

Para mejorar las predicciones del enfoque SVOF en flujos dispersos, se ha propuesto la incorporación de métodos lagrangianos de seguimiento de burbujas. Asad et al. [51] integraron el método VOF con el modelo *Discrete Bubble Model* (DBM) en OpenFOAM, obteniendo buena concordancia con datos experimentales. En dicho estudio, la elección del modelo de arrastre fue determinante, destacándose el modelo propuesto por Roghair¹ por su capacidad de incorporar el efecto de enjambre. Pham et al. [30] compararon SVOF+DBM y STF en tres pruebas (ascenso de burbuja única, ruptura de presa y columna burbujeante) y concluyeron que SVOF describía con precisión la forma y velocidad de burbujas aisladas, pero era menos eficaz en flujos dispersos, mientras que STF ofrecía simulaciones simultáneas de flujos segregados y dispersos con menor coste computacional.

A pesar de los numerosos estudios disponibles, la eficacia comparativa de los enfoques TF y VOF en flujos que combinan dispersión y segregación no ha sido completamente esclarecida, dado que la

¹El modelo de Roghair ajusta el coeficiente de arrastre interfacial en función de la fracción de gas local para capturar el efecto de enjambre, es decir, la reducción del arrastre que experimenta cada burbuja debido a la presencia de otras burbujas cercanas en el flujo, fenómeno característico de medios dispersos densos.

mayoría de las investigaciones se centran en regímenes puramente dispersos o puramente segregados. En este contexto, y en el marco de la presente tesis doctoral, Sarache et al. en [15] utilizaron el banco de ensayos construido por Godino et al. [14], basado en la inyección rápida y transitoria de aire en una columna de agua, capaz de reproducir transiciones de régimen desde flujo burbujeante hasta flujo tapón y flujo de gotas, mediante el incremento progresivo de la tasa de inyección. Con dicha instalación, se llevaron a cabo múltiples experimentos con adquisición de imágenes de alta velocidad y registros de presión, con el objetivo de caracterizar la evolución topológica y dinámica del sistema bifásico.

De forma complementaria, se desarrolló un estudio numérico comparativo en el que se evaluaron tres variantes del modelo TF —TFBU (burbujas), TFDO (gotas) y TFBE (mezcla dinámica)— junto con tres formulaciones del método VOF: SVOF, VOF-PLIC (IsoAdvector) y VOF-AMR. Los resultados obtenidos indicaron que la estrategia de mezcla dinámica mejora las predicciones de presión y fracción de volumen, mientras que la formulación VOF-PLIC proporciona una representación más precisa de la topología interfacial sin implicar un incremento prohibitivo del coste computacional. Las simulaciones reprodujeron adecuadamente las transiciones de régimen observadas en los experimentos, permitiendo identificar con claridad las fortalezas y limitaciones de cada enfoque numérico para representar flujos que combinan segregación y dispersión de fases.

1.4.3 Turbulencia interfacial en flujos bifásicos: enfoques VOF-RANS y TF

El flujo multifásico presenta retos significativos debido a la interacción entre fases en la interfase y a la necesidad de determinar con precisión su posición. Brackbill et al. [52] propusieron incorporar un término adicional en la ecuación de momento para equilibrar las fuerzas superficiales y de presión en la interfase, mientras que la ubicación de ésta se resuelve mediante una función indicadora que representa ambas fases y su transición. Esta metodología fundamenta el método VOF, el cual ha demostrado eficacia en la simulación de flujos bifásicos inmiscibles. Más recientemente, este enfoque se ha extendido a simulaciones DNS, permitiendo modelar flujos bifásicos turbulentos e incompresibles con cambio de fase [53, 54].

Para superar las limitaciones computacionales de la Simulación DNS, se han desarrollado técnicas multiescala que combinan mallados gruesos—resueltos mediante Simulación LES o RANS—con DNS localizada en regiones de interés, a fin de capturar con mayor precisión la física de pequeña escala. Por ejemplo, Gabriele et al. [55] emplearon un mallado grueso con el método VOF para modelar la fase gaseosa, combinado con el Método de Elementos Discretos (*Discrete Element Method*, DEM) para representar partículas grandes, y DNS en mallas finas para resolver el comportamiento de partículas pequeñas. Niklas et al. [56] estudiaron la dinámica de burbujas mediante un enfoque multiescala que integró un modelo pseudospectral desarrollado por Sardina et al. [57, 58] para las escalas mayores, junto con VOF-DNS en mallas refinadas para las burbujas más pequeñas. No obstante, el uso de múltiples dominios o mallados continúa representando un desafío significativo; por ello, diversos autores han optado por mantener modelos de mallado único basados en LES y RANS, a pesar de que el proceso de filtrado introduce términos adicionales que afectan la tensión superficial, la turbulencia y la difusión en la interfase. Mahdi [59] propuso modelos de cierre específicos para dichos términos, obteniendo resultados satisfactorios en casos académicos y experimentos de laboratorio con mallas de baja resolución.

En aplicaciones industriales multifásicas, las técnicas multiescala no resultan viables por su elevado coste computacional, y métodos más aproximados como el modelo TF suelen ser la única alternativa. El modelo TF ha sido objeto de numerosos estudios para mejorar las estimaciones de turbulencia en la interfase y representar eficientemente el flujo de gran escala. Es la técnica predominante en simulaciones termo-hidráulicas de instalaciones nucleares, por ejemplo en el CCFL donde se impide el reingreso de líquido al núcleo. Egorov et al. [60] compararon simulaciones TF con $k - \omega$ frente a DNS en flujo contracorriente [53], concluyendo que TF sobreestima la viscosidad sin amortiguar las fluctuaciones turbulentas, lo que provoca una sobreestimación de la disipación viscosa en la interfase; propusieron

añadir un término fuente S_k a la ecuación de ω para atenuar estas fluctuaciones y mejorar la predicción de la energía cinética turbulenta y los perfiles de velocidad. Porombka [61] perfeccionó los mecanismos de detección de la morfología multifásica e implementó un modelo de arrastre interfacial, mejorando los resultados de Establer et al. [62]. Frederix et al. [63] extendieron la función de amortiguamiento al modelo $k - \epsilon$, incorporando términos fuente en k y ϵ , y finalmente Höhne [64] y Yan [65] añadieron términos para representar ondas subescala inducidas por inestabilidades de Kelvin–Helmholtz.

En el marco de la presente tesis, Sarache et al. en [16] realizaron una evaluación detallada de la modelación de la turbulencia en la interfase mediante modelos promediados en el tiempo (RANS) acoplados al método VOF, aplicada a flujos bifásicos co-corriente y contracorriente. Se demostró que, al localizarse la interfase en una región delgada del dominio, el método VOF no implica necesariamente un mayor costo computacional en comparación con el modelo TF. El estudio consideró dos enfoques de cierre turbulento: (i) el modelo del Tensor de Esfuerzos de Reynolds (RST), y (ii) modelos basados en la hipótesis de Boussinesq. En este último caso, se analizaron los modelos $k-\epsilon$ y $k-\omega$ SST bajo dos formulaciones: una con densidad constante (ρ -con) y otra con densidad variable (ρ -var) [66, 67]. Los resultados, comparados con datos experimentales y simulaciones de referencia, indicaron que el modelo RST ofrece la mayor precisión, mientras que el esquema $k - \epsilon$ con formulación ρ -var proporciona soluciones satisfactorias. Por el contrario, la formulación ρ -con mostró limitaciones significativas tanto para $k-\epsilon$ como para $k-\omega$ SST. Esta contribución destaca el potencial del enfoque VOF-RANS para representar con precisión la interacción turbulenta en la interfase de flujos bifásicos, proponiéndose como una alternativa viable para aplicaciones industriales donde se requiere un equilibrio entre exactitud y eficiencia computacional.

1.4.4 Estudios experimentales y correlaciones geométricas del CCFL

El inicio del CCFL ha sido objeto de numerosas investigaciones debido a la fuerte influencia de las fuerzas de arrastre interfacial y los efectos geométricos. Entre los parámetros geométricos más relevantes se encuentran el diámetro de la tubería, la longitud de los tramos horizontales e inclinados, los ángulos de inclinación y la presencia de codos. Diversos estudios han utilizado modelos a escala de hot-leg en condiciones isotérmicas aire-agua para explorar estos efectos [11].

En este contexto, varios autores extendieron los estudios sobre el CCFL a configuraciones más realistas de los circuitos de refrigeración. Por ejemplo, Siddiqui et al. [68] investigaron transiciones de tuberías verticales a horizontales, evaluando el efecto del diámetro de la tubería, el radio de curvatura de los codos, la longitud horizontal, pequeñas inclinaciones y la geometría de entrada. Estos resultados fueron posteriormente analizados desde el punto de vista teórico por Ardron et al. [69]. De manera similar, Ohnuki et al. [70] estudiaron el fenómeno de CCFL en configuraciones tipo hot-leg de reactores PWR con tubos horizontales e inclinados, bajo condiciones aire-agua y vapor-agua, validando una correlación tipo Wallis y proponiendo una función empírica dependiente de la geometría para el coeficiente c de la Eq. (1.2). Más adelante, Ohnuki [71] amplió el análisis a configuraciones de hot-leg con y sin *hutz* (boquilla interna usada para dirigir el agua inyectada hacia el núcleo), aumentando la representatividad física de su modelo.

A lo largo del tiempo, diversos investigadores intentaron caracterizar los regímenes de flujo asociados a CCFL mediante distintos enfoques de modelado. Wang et al. [72] identificaron tres regiones de flujo basadas en la fracción volumétrica de líquido, mientras que Kawaji et al. [73] analizaron tuberías con transiciones vertical-inclinada y diferentes radios de curvatura en los codos, definiendo también tres regímenes de flujo, pero en función del parámetro de Wallis ($J_f^{*0.5}$). Wongwises [74] concluyó que el régimen de CCFL puede clasificarse principalmente en función de la velocidad del agua. Más recientemente, Navarro et al. [75] realizaron ensayos con distintos ángulos y longitudes de tubería, proponiendo una correlación para el inicio de CCFL en función de $J_g^{*0.5}$ y $J_f^{*0.5}$. A pesar de las diferencias en los parámetros utilizados, el crecimiento de ondas interfaciales sigue siendo identificado como el mecanismo dominante que conduce al flooding en conductos horizontales o casi horizontales, resultando en la

formación de flujo tapón [76].

La posibilidad de extrapolar resultados de experimentos a pequeña escala hacia sistemas a escala real también ha sido objeto de estudio. Futatsugi et al. [77] realizaron ensayos con aire y agua en un modelo a escala 1/10 de la línea de conexión al presurizador de un reactor PWR, observando que la CCFL puede producirse en tres ubicaciones distintas: la unión superior, la propia línea de conexión y la unión inferior. El comportamiento del fenómeno está gobernado por la región que impone la mayor restricción al flujo. Además, se identificó que la presencia de codos incrementa las restricciones dentro de la línea, pero tiene escaso impacto en las uniones superior e inferior.

Finalmente, se han reportado discrepancias significativas entre las distintas curvas predictivas de CCFL. Kang et al. [10] realizaron un estudio exhaustivo sobre la influencia de parámetros geométricos, concluyendo que la curva de CCFL tiende a la linealidad conforme aumenta la relación L/D . Sin embargo, también observaron que la longitud absoluta del conducto L afecta el comportamiento del flujo. En una línea de trabajo similar, Kim et al. [78] encontraron que el ángulo de inclinación θ tiene poca influencia sobre la CCFL. No obstante, a diferencia de los resultados de Kang, los experimentos de Kim no mostraron la dependencia no lineal de L/D previamente observada para valores altos de esta relación. Estas discrepancias evidencian la necesidad de investigaciones adicionales que permitan aclarar los resultados contrastantes reportados en la literatura.

Issa y Zhu [5, 11] compilaron una base de datos integral de experimentos sobre el fenómeno de CCFL, analizando el efecto del diámetro de la tubería, la longitud del canal y la razón geométrica L/D sobre el comportamiento del flujo a contracorriente. Además, resumieron diversas correlaciones empíricas tipo Wallis asociadas a distintas configuraciones experimentales.

Issa también amplió el rango de velocidades para reportar el inicio del CCFL en términos de velocidades adimensionales del agua, proponiendo una nueva correlación tipo Wallis para describir el fenómeno de deflooding, válida para distintos intervalos de $J_f^{*0.5}$ y diversas razones L/D . Estas correlaciones alcanzaron errores relativos inferiores al 20 % para la mayoría de los datos analizados [12, 13, 79]. Sin embargo, predecir con precisión el inicio del CCFL y el deflooding sigue siendo un reto, particularmente en el rango de velocidades líquidas intermedias a altas, donde muchas correlaciones existentes tienden a perder exactitud.

1.4.5 Modelado del CCFL en códigos de sistemas RELAP5 y CFD-3D

El fenómeno de CCFL fue implementado inicialmente en el código RELAP5 por Riemke [80], quien calibró el modelo con datos experimentales obtenidos en un tubo vertical [81]. Este primer modelo fue capaz de simular tuberías verticales e inclinadas hasta 45°. Posteriormente, Kim et al. [78] ampliaron la capacidad del modelo para incluir tuberías horizontales, compilando un total de 356 experimentos y logrando resultados comparables con estas mejoras. Desde entonces, los modelos de CCFL han sido aplicados exitosamente en diversas instalaciones experimentales. Por ejemplo, Cho et al. [82] utilizaron RELAP5 para simular la instalación del Korea Atomic Energy Research Institute, obteniendo buenos resultados tanto en tubos verticales simples como en conjuntos de barras de combustible. Más recientemente, Li et al. [83] reprodujeron un experimento en una hot-leg horizontal y extendieron el uso de RELAP5 para analizar el downcomer de la instalación *Upper Plenum Test Facility* [84].

A pesar de la capacidad de estos códigos de sistemas para representar fenómenos complejos, es importante destacar que la curva de inicio de CCFL es definida por el usuario mediante una función lineal entre $J_f^{*0.5}$ y $J_g^{*0.5}$. Debido a la naturaleza unidimensional de estos códigos, muchos de los procesos interfaciales deben ser representados mediante restricciones. En el caso particular del CCFL, una de las ecuaciones de momento que describe la interacción entre fases es reemplazada por una relación lineal entre $J_f^{*0.5}$ y $J_g^{*0.5}$. De este modo, si el flujo excede ese límite en cualquier punto del dominio, el código recalcula el régimen utilizando dicha restricción.

Simulaciones detalladas en tres dimensiones también han sido empleadas para reproducir experi-

mentos y predecir el inicio del fenómeno CCFL. Muchos de estos estudios se basan en el método TF [21, 43]. Por ejemplo, Höhne et al. [42] validaron el modelo TF utilizando datos experimentales de un flujo en canal, y posteriormente lo aplicaron con éxito al estudio del CCFL en una instalación tipo hot-leg a escala reducida [44]. De manera similar, Kinoshita et al. [85] evaluaron la capacidad del enfoque TF para capturar la relación entre el CCFL y los parámetros de Wallis, mientras que Issa et al. [13] llevaron a cabo simulaciones basadas en TF, comparando los resultados numéricos con datos experimentales. Cabe destacar que el enfoque TF permite modificar las fuerzas interfaciales: la fuerza de arrastre, dominante en flujo segregado, puede ajustarse manipulando la estimación del área interfacial dentro del submodelo. Sin embargo, el método TF enfrenta también desafíos importantes, como la transición de turbulencia cerca de la interfaz, que suele tratarse mediante funciones de amortiguamiento incorporadas en el cierre de turbulencia [45, 86]. En consecuencia, la efectividad del método TF depende fuertemente de una calibración previa.

La revisión de Zhu et al. [11] constituye la primera síntesis integral de estudios experimentales y numéricos sobre CCFL en geometrías tipo hot-leg de reactores PWR, conformadas por una tubería horizontal, un codo y una sección inclinada. Entre sus principales aportes se incluyen la actualización de correlaciones empíricas confiables—aplicables tanto en códigos de sistemas como en modelos CFD—y un análisis comparativo entre simulaciones bidimensionales y tridimensionales. Los autores resaltan las limitaciones de los enfoques VOF estándar y sugieren el uso de modelos bifásicos con fricción interfacial dependiente del régimen para mejorar la precisión. Esta revisión proporciona un marco de referencia actualizado para la validación de modelos numéricos y el diseño de futuros estudios experimentales centrados en configuraciones tipo hot-leg.

A diferencia de los modelos interpenetrantes, el método VOF [22], aplicado con éxito en la predicción del CCFL en configuraciones prototípicas de hot-leg [87] y en la caracterización transitoria de estructuras de flujo y eventos de obstrucción durante escenarios de LOCA mediante el acoplamiento VOF- $k-\omega$ [88], permite un seguimiento explícito de la interfaz gas-líquido. Esto lo hace especialmente adecuado para estudiar fenómenos de superficie libre como el CCFL. No obstante, su aplicación requiere mallas refinadas para resolver adecuadamente la interfaz, lo cual incrementa el costo computacional.

Avances recientes han mejorado la modelación de la fricción interfacial en flujos segregados mediante formulaciones de turbulencia con densidad variable (ρ -var) dentro del marco RANS, utilizando modelos como RNG $k-\epsilon$ y $k-\omega$ [66]. En particular, se ha demostrado que, con resoluciones de malla similares, el enfoque VOF-RANS logra resultados más precisos que el método TF, alcanzando un mejor equilibrio entre exactitud y costo computacional [16].

El enfoque VOF ofrece ventajas significativas frente a los modelos interpenetrantes, tales como la capacidad de capturar explícitamente la interfaz gas-líquido, una representación más realista del frente de contacto sin promedios volumétricos, lo cual permite identificar fenómenos locales como la entrada de burbujas o la acumulación de líquido; mayor fidelidad en la simulación de transiciones entre regímenes estratificados e intermitentes; y menor dependencia de modelos empíricos, al no suponer la coexistencia de fases dentro de una misma celda computacional, reduciendo así la incertidumbre del modelo.

A pesar de los numerosos esfuerzos experimentales y numéricos dedicados al estudio del CCFL, persisten tres desafíos técnicos clave que dificultan su modelado confiable en configuraciones tipo hot-leg de reactores PWR: (i) la existencia de *discrepancias significativas* entre las correlaciones tipo Wallis y el bloqueo completo del líquido observado bajo condiciones de alto $J_f^{*0.5}$; (ii) la *ausencia de estudios comparativos directos* que validen simultáneamente códigos de sistemas unidimensionales y modelos CFD-3D frente al mismo conjunto de datos experimentales; y (iii) la *fuerte sensibilidad* de los resultados CFD a la resolución de malla y al modelo de turbulencia cerca de la interfaz gas-líquido, lo cual limita su implementación en aplicaciones de ingeniería.

En el marco de esta tesis doctoral, Sarache et al. en [17] desarrollaron un estudio cuyo objetivo principal fue **evaluar la capacidad predictiva** de dos enfoques numéricos complementarios para la simulación del fenómeno de CCFL en una configuración experimental tipo hot-leg a escala reducida: (i)

un modelo tridimensional VOF–RANS con formulación de densidad variable (ρ -var), implementado en OpenFOAM-v2206, y (ii) el código de sistemas RELAP5Mod3, basado en una correlación tipo Wallis para representar el fenómeno de deflooding. El estudio constituyó la primera comparación sistemática entre ambos enfoques numéricos utilizando la base de datos experimental *Collider*, que contempla cuatro regímenes representativos de CCFL definidos por el parámetro adimensional $J_f^{*0.5}$. Además, se realizó un análisis cuantitativo del impacto de la formulación ρ -var y de la resolución de malla sobre la caída de presión, la dinámica interfacial y la predicción del bloqueo completo del flujo líquido. Finalmente, se llevaron a cabo validaciones cruzadas y se propusieron recomendaciones prácticas sobre la aplicabilidad de ambos métodos en simulaciones de seguridad nuclear, destacando tanto la precisión del modelo CFD como la eficiencia computacional del código de sistemas. En conjunto, este trabajo proporcionó lineamientos concretos para la selección, calibración y aplicación de modelos numéricos robustos orientados a predecir con fiabilidad el comportamiento del CCFL en escenarios operativos de plantas nucleares a escala real.

Capítulo 2

Metodología

Tal como se expuso en el Capítulo 1, el fenómeno de CCFL puede presentarse durante escenarios de pérdida de refrigerante del reactor, tanto de tipo LLOCA como LOCA, y comprometer la reinundación del núcleo incluso con la activación del ECCS [75, 89]. En dicho capítulo se ofrece una descripción del fenómeno y de las regiones del circuito primario donde puede manifestarse (por ejemplo, hot leg, upper plenum, downcomer), así como un análisis del estado del arte.

El propósito del presente capítulo es definir y fundamentar la estrategia metodológica adoptada para estudiar el CCFL en configuraciones representativas de la hot leg, combinando:

- CFD mediante OpenFOAM [90] —focalizado en modelos multifásicos tipo VOF y esquemas Eulerianos TF—, y
- Códigos termo-hidráulicos de sistema basados en la formulación de dos fluidos promediados 1D, en particular *RELAP5Mod3* [91].

El CCFL es un fenómeno altamente complejo debido a su naturaleza multifásica y turbulenta, lo que dificulta su modelado numérico. En la interfase entre las fases líquida y gaseosa, se combinan diversos efectos interfaciales, tales como el arrastre (*drag*), la sustentación (*lift*) y las fuerzas de masa agregada. Pero, sin dudas las de drag son las preponderantes y en ellas la turbulencia juega un rol significativo en los métodos RANS, al modificar la viscosidad local de las fases.

Existen diferentes enfoques numéricos para modelar el CCFL. Por un lado, los modelos unidimensionales (1D) basados en la formulación de dos fluidos promediados en el tiempo y espacio permiten describir el comportamiento global del flujo en la dirección axial de la tubería. Sin embargo, estos modelos requieren la incorporación de ecuaciones adicionales que actúan como restricciones, ya que, si bien los esfuerzos interfaciales están modelados, estos no consideran la totalidad del fenómeno y subestiman el CCFL [78, 80, 92]. Por otro lado, el uso de CFD ofrece una herramienta 3D capaz de modelar estos efectos con mayor nivel de detalle. No obstante, esta técnica presenta una limitación computacional significativa, ya que una forma rigurosa de representar el flujo multifásico es mediante Simulación Numérica Directa (DNS), en la cual la interacción entre las fases se incorpora a través de un término fuente asociado a la tensión superficial [52]. Para ello, el tamaño de la malla debe ser lo suficientemente pequeño para capturar tanto las interfases de menor escala (gotas y burbujas) como las estructuras turbulentas en la microescala, lo cual resulta computacionalmente inviable, no solo por la escala espacial involucrada sino también por la extensión temporal en que ocurren los fenómenos.

Una forma posible de reducir el costo computacional es mediante modelos promediados en el tiempo de tipo RANS (Reynolds Average Navier Stokes). Entre estos modelos destacan el modelo de dos fluidos (TF) y el modelo de Volumen de Fluido (VOF). El primero trata a ambas fases como interpenetradas, ocupando todo el dominio con una fracción volumétrica que va desde 0 hasta 1, donde 0 indica la ausencia de fase de referencia y 1 indica que esa región está completamente ocupada por dicha fase. En este

enfoque, cada fase tiene su ecuación de momento y por ello se requieren términos adicionales que representen los efectos interfaciales tales como la fuerza de arrastre, la sustentación, la interacción turbulenta y los efectos de cambio de fase, y de ese modo acoplen las ecuaciones. Estos efectos son normalmente incorporados mediante modelos o correlaciones basadas en datos empíricos, lo que complejiza el cálculo y en general requiere una calibración mediante parámetros de modelado [42–44, 46, 64].

Otra alternativa es el uso de la formulación VOF-RANS. Este modelo permite un seguimiento explícito de la interfase sin considerar fases interpenetradas. Sin embargo, su principal limitación radica en la representación del tensor de esfuerzos turbulentos de Reynolds en la interfase, debido a que los modelos RANS han sido validados principalmente para flujos monofásicos.

En esta tesis se hace uso de ambas aproximaciones (TF y VOF), y se define cuál de ellas resulta más apropiada para representar flujos multifásicos segregados. Además, TF se aplica tanto en simulaciones 3D CFD como 0/1D empleando el código de sistema RELAP5Mod3:

- Modelo VOF-RANS, basado en la resolución explícita de la interfase con ecuaciones de turbulencia promediadas en el tiempo y tratamiento compresible de la turbulencia.
- Modelos TF: a) RELAP5Mod3, un enfoque basado en la formulación de dos fluidos que incorpora términos adicionales para modelar las interacciones interfaciales. b) OpenFOAM: modelo clásico de dos fluidos y uso del modelo blending para representar la fenomenología cambiante de las fases.

Los siguientes apartados detallarán las tres aproximaciones numéricas empleadas en esta tesis, haciendo énfasis en el uso de modelos que han permitido una mejora significativa en los resultados.

2.1 Modelos multifásicos TF y VOF

Esta sección expone los fundamentos matemáticos de los métodos VOF y TF empleados en la presente investigación. En primer término se describe el método VOF estándar (SVOF), detallando las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y transporte de la fracción volumétrica que define la interfase. A partir de dicha formulación se analizan tres estrategias de reconstrucción de la interfaz: el esquema algebraico estándar, el esquema de reconstrucción de flujos en la interfaz *IsoAdvector*, y la combinación del esquema estándar con *Adaptive Mesh Refinement* (AMR). En el Anexo A, correspondiente al primer artículo compilado en esta tesis, la técnica de reconstrucción de flujos en la interfaz se denominó *PLIC* (*Piecewise Linear Interface Calculation*). En adelante se utilizará la denominación *IsoAdvector*, más representativa de la implementación específica disponible en OpenFOAM; ambos términos remiten, no obstante, al mismo enfoque general de reconstrucción y advección de la interfase.

A continuación se presentan las ecuaciones gobernantes del modelo TF, con énfasis en los términos de acoplamiento interfacial de drag, lift y masa agregada. Asimismo, se introduce el modelo de mezcla dinámica (*blending*), que identifica el régimen de flujo dominante (*bubbly*, *droplet* o segregado) y ajusta en consecuencia los cierres interfaciales. Cabe señalar que la correlación de *drag* propuesta por Grace [93] no se encuentra incluida en las versiones recientes de OpenFOAM y fue implementada específicamente para este trabajo, siguiendo la metodología descrita en [14].

2.1.1 Ecuaciones Gobernantes del Método VOF

Las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento en el método VOF, propuesto por Hirt y Nichols [22, 24], coinciden con las de la formulación monofásica. No obstante, en las celdas atravesadas por la interfaz —donde coexisten ambas fases— las propiedades termodinámicas y de transporte se evalúan como promedios ponderados según la fracción volumétrica de cada fase. En dichas celdas se añade, además, un término adicional en la ecuación de cantidad de movimiento que representa la fuerza de tensión superficial.

El seguimiento de la interfase se lleva a cabo mediante la función indicadora α , definida como la fracción de volumen de la fase líquida, acotada en el intervalo $0 \leq \alpha \leq 1$. Los valores extremos $\alpha = 0$ y $\alpha = 1$ representan celdas que contienen exclusivamente fase gaseosa o líquida, respectivamente, mientras que los valores intermedios identifican las celdas interfaciales. Con estas definiciones, las ecuaciones de gobierno para flujo compresible se escriben de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho U_j}{\partial t} + U_i \frac{\partial \rho U_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p_d}{\partial x_j} - g_i x_i \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \rho \langle u_i u_j \rangle \right] + \underbrace{\sigma \kappa \frac{\partial \alpha}{\partial x_j}}_{f_{si}} \quad (2.2)$$

donde U_i es la velocidad, μ es la viscosidad dinámica, ρ es la densidad, g_i es la aceleración gravitatoria y p_d es la presión modificada, definida como $p_d = p - \rho g_i x_i$. El último término en el lado derecho de la Ec. (2.2) representa la fuerza de tensión superficial, la cual es nula fuera de la interfase. Esta se calcula a partir del coeficiente de tensión superficial σ y la curvatura local de la superficie libre κ . Por ello, luego resulta fundamental tener una buena metodología de computo de la función indicadora, ya que este término es directamente afectado por la forma de la interfase. κ se expresa como:

$$\kappa = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_i} / \left| \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right| \right) \quad (2.3)$$

Los valores de ρ y μ en la interfase se calculan como un promedio ponderado por α , según las expresiones:

$$\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g \quad (2.4)$$

$$\mu = \alpha \mu_l + (1 - \alpha) \mu_g \quad (2.5)$$

En la Ec. (2.2) la variable u_i denota la fluctuación de velocidad, mientras que el término $\langle u_i u_j \rangle$ corresponde al tensor de tensiones de Reynolds, obtenido al promediar temporalmente el término advectivo dentro del marco de la metodología RANS. Dicho tensor puede evaluarse de dos maneras: (i) resolviendo ecuaciones de transporte para cada componente—lo que conduce al modelo de Tensiones de Reynolds (*Reynolds Stress Tensor*, RST) [94, 95]—o (ii) mediante la hipótesis de Boussinesq, que lo expresa en función de los gradientes de velocidad media y de una viscosidad turbulenta μ_t , tal como se muestra en la Ec. (2.6):

$$\rho \langle u_i u_j \rangle - \frac{2}{3} k \delta_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.6)$$

Ambas aproximaciones—con y sin la hipótesis de Boussinesq—se desarrollarán y evaluarán más adelante en esta tesis, considerando sus respectivas ecuaciones de transporte tanto para flujo incompresible de densidad constante (ρ -con) como para flujo compresible o de densidad variable (ρ -var).

Vale la pena mencionar que la aproximación de la viscosidad como una función lineal de la fracción indicadora no suele constituir una representación adecuada. Un ejemplo claro se observa en las mezclas agua–petróleo, donde la viscosidad de la mezcla puede superar ampliamente a la de las sustancias puras. Este modelo de mezcla es el único implementado en OpenFOAM para el modelo VOF; sin embargo, distintos autores han reportado resultados satisfactorios al aplicarlo en estudios de mezclas agua–petróleo [96, 97].

2.1.2 Ecuación de Transporte de α en el Método VOF estandar

La ecuación de transporte de α en el método VOF estandar (en adelante SVOF) se expresa como:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha U_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial (\alpha U_{ri}(1 - \alpha))}{\partial x_i} = 0 \quad (2.7)$$

Como se observa en la Ec. (2.7), dicha expresión representa una ecuación de advección pura para la variable α , a la cual se añade un término adicional de compresión basado en la velocidad relativa $U_{ri} = U_{li} - U_{gi}$. En esta formulación, U_{li} y U_{gi} corresponden a las velocidades de la fase líquida y gaseosa, respectivamente, evaluadas en la interfase. El término de compresión tiene como objetivo minimizar la difusión numérica de α en la zona interfacial, mejorando así la definición espacial de la interfaz. Esta ecuación se resuelve mediante un esquema de sub-ciclos adaptativos, en el cual cada paso de tiempo Δt se subdivide en sub-pasos adaptativos Δt_{sts} . Para cada sub-paso, la ecuación se resuelve utilizando el método MULES (*Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution*), el cual está basado en la técnica de *Flux Corrected Transport* (FCT) [98]. Durante cada sub-ciclo, la Ec. (2.7) se discretiza de la siguiente manera:

$$\frac{\alpha^{n+\nu+1} - \alpha^n}{\Delta t} + \sum_f (\alpha)_f F^{L,n+\nu} + \sum_f [\alpha(1 - \alpha)]_f F^{NL,n+\nu} = 0 \quad (2.8)$$

donde ν denota la iteración de punto fijo empleada para tratar la no linealidad de los flujos. Los términos de flujo se definen sobre las caras f de cada celda del dominio computacional, de la siguiente manera:

$$F^{L,n} = U_i^f S_i^f \quad (2.9)$$

$$F^{NL,n} = U_{ri}^f S_i^f \quad (2.10)$$

donde $F^{L,n}$ es el flujo debido a la velocidad en el centro de celda, mientras que $F^{NL,n}$ corresponde al flujo generado por la velocidad adicional introducida por el término compresible añadido en la Ec. (2.7).

2.1.3 Ecuación de Transporte de α en IsoAdvector

En contraste con el modelo estandar, en la formulación IsoAdvector el término de compresión no es incluido, por lo que se mantiene la ecuación de transporte en su forma pura:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha U_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.11)$$

En este caso, los flujos no se calculan utilizando los valores en las caras, obtenidos a partir de MULES, sino que se determinan a partir de la cantidad de fluido que atraviesa una dada iso-superficie, la cual representa a la interfase dentro de cada celda, en cada tiempo [1, 40, 41, 99]. Para lograr esto, al inicio de cada iteración se construye una iso-superficie α_0 con una normal $\hat{\mathbf{n}}_s$, como se muestra en la Figura 2.1. Esta superficie separa a los fluidos A y B y la fracción de volumen en la celda v_i se expresa en términos de los flujos que atraviesan las superficies f_i , según la Ec. (2.12):

$$\alpha_i^{n+1} = \alpha_i^n - \frac{1}{V_i} \sum_{j \in B_i} \Delta V_{ij}^n \quad (2.12)$$

donde α_i^n y α_i^{n+1} representan las fracciones de volumen al inicio y al final de la iteración, respectivamente. V_i es el volumen de la celda y B_i es el conjunto de caras frontera f_j . El término ΔV_{ij} representa el volumen de fluido A que atraviesa la cara f_j durante el intervalo de tiempo Δt . Si se asume que la

velocidad del fluido es constante, entonces el flujo volumétrico ϕ_{ij}^n a través de f_j es $\tilde{\phi}_{ij}^n$, y ΔV_{ij} puede aproximarse según la Ec. (2.13):

$$\Delta V_{ij}^n \approx \frac{\tilde{\phi}_{ij}^n}{|\mathbf{S}_f|} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{f_j} \alpha(\tau) dA d\tau \quad (2.13)$$

El término $\int_{f_j} \alpha(\tau) dA$ en la Ec. (2.13) representa la integral temporal del área sumergida de la cara f_j , calculada conforme a la Ec. (2.14). En este contexto, $|\mathbf{S}_f|$ denota la magnitud del vector normal asociado a cada cara f de la celda, el cual define tanto la orientación como el área de dicha cara en el dominio computacional.

$$A_j \equiv \int_{f_j} \alpha(\tau) dA \quad (2.14)$$

La intersección de la iso-superficie con las caras de celda f_j en cada instante de tiempo define un conjunto de áreas $A(\tau_1), A(\tau_2), \dots, A(\tau_M)$, como se ilustra en la parte derecha de la Figura 2.1. Estas áreas corresponden a la región a través de la cual el fluido atraviesa la cara f_j . La figura muestra la cara superior de la celda y la intersección del área A_j en distintos tiempos. Para realizar la integración del área en el tiempo, se emplea un polinomio cuadrático por partes $A_j(\tau)$.

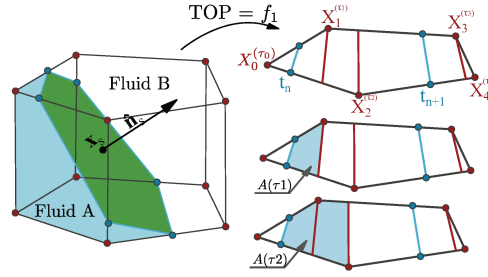


Figura 2.1: Construcción de la isosuperficie mediante la intersección con la cara de celda. Imagen cortesía de Roenby et al. [1]

2.1.4 Refinamiento Adaptativo de Malla

Como es bien sabido, el método SVOF depende en gran medida del refinamiento de la malla. En este contexto, AMR constituye una estrategia eficaz para incrementar dinámicamente la resolución en la región de la interfaz, refinando únicamente en sus proximidades y permitiendo así una mejor captación de su forma y evolución. Esta herramienta está disponible en OpenFOAM para mallas de tipo hexaédrico.

El criterio de refinamiento se basa en el cálculo de una variable de control ψ definida en cada celda del dominio. Cuando el valor de ψ se encuentra dentro de un rango especificado por el usuario, la celda se subdivide en ocho subceldas hijas. Por el contrario, si ψ se halla fuera del rango definido, la celda se desrefina progresivamente hasta alcanzar su tamaño original. La cantidad máxima de niveles de refinamiento y desrefinamiento también es determinada por el usuario.

En el presente trabajo, se seleccionó la fracción de volumen α como variable de control ψ , estableciendo un umbral entre 0,01 y 0,99, de modo que el refinamiento se concentre exclusivamente en la vecindad de la interfaz, utilizando α como único criterio. No obstante, en otros enfoques es posible emplear criterios más complejos que incluyan, por ejemplo, gradientes de velocidad o presión. Cabe señalar que el método AMR fue aplicado únicamente en las simulaciones realizadas con el modelo SVOF.

2.1.5 Ecuaciones de gobierno del Modelo Euleriano de Dos Fluidos

El modelo TF implementado en OpenFOAM ha sido ampliamente descrito por Weller [100] y Jasak [101]. Este modelo resuelve un conjunto de ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento y energía para cada fase, mientras que satisface ciertas restricciones globales, como la conservación de la masa total. La clave del modelo radica en los términos de intercambio interfacial de masa, momento y energía, los cuales están representados mediante leyes constitutivas o modelos empíricos. Para sistemas binarios gas-líquido, la ecuación de balance de masa para cada fase en forma diferencial se expresa como:

$$\frac{\partial(\alpha_f \rho_f)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_f \rho_f U_i^f) = 0 \quad (2.15)$$

donde el subíndice y superíndice f puede indicar agua o aire segun corresponda. Como se observa, en la Ec. (2.15) el lado derecho es cero, ya que no se considera transferencia de masa entre fases en los problemas analizados. Al sumar las ecuaciones de conservación de masa de cada fase se obtiene la ecuación de conservación global de masa a satisfacer:

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_l \rho_l U_i^l + \alpha_g \rho_g U_i^g) = 0 \quad (2.16)$$

donde los subíndices y superíndices l y g corresponden a las fases líquida y gaseosa, respectivamente. Este balance global representa una restricción que debe ser satisfecha por el algoritmo de acoplamiento presión-velocidad [100].

El balance de cantidad de movimiento se formula de manera independiente para cada fase, pero las ecuaciones están acopladas mediante términos interfaciales. Luego de aplicar el promedio de Reynolds [102], las ecuaciones RANS se expresan como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_f \rho_f U_i^f)}{\partial t} + U_i^f \frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_f \rho_f U_j^f) = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu_f \alpha_f \left(\frac{\partial U_i^f}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j^f}{\partial x_i} \right) - \alpha_f \rho_f \langle u_i^f u_j^f \rangle \right] \\ & - \alpha_f \frac{\partial p_d}{\partial x_i} + \alpha_f \rho_f g_i + M_i^{\text{eff}} \end{aligned} \quad (2.17)$$

donde M_i^{eff} representa una fuerza interfacial efectiva.

Reformulación de la Velocidad de Fase

En OpenFOAM, la velocidad de cada fase es reescrita en términos de una velocidad de mezcla de ambas fases U_i y una velocidad relativa U_{ir} de cada fase respecto a la media:

$$U_i = \frac{\alpha_l \rho_l U_i^l + \alpha_g \rho_g U_i^g}{\rho_m} \quad (2.18)$$

$$U_{ir} = U_i^l - U_i^g \quad (2.19)$$

donde ρ_m representa la densidad de la mezcla ($\rho_m = \alpha_l \rho_l + \alpha_g \rho_g$). Luego, la velocidad de la fase l se puede reescribir como:

$$U_i^l = U_i + \alpha_g U_{ir} \quad (2.20)$$

Dado que la suma de las fracciones volumétricas satisface $\alpha_l + \alpha_g = 1$, en general, solo se resuelve la ecuación de continuidad para la fase dispersa y se calcula la otra como fracción a partir de dicha relación. Siguiendo el enfoque propuesto por Weller et al. [103], la Ec. (2.15) se reformula algebraicamente con el objetivo de mejorar la estabilidad numérica del modelo. Esta reformulación permite evitar errores de desbordamiento numérico, que pueden surgir por la presencia de productos o cocientes entre variables con alto contraste de magnitud (por ejemplo, densidades o fracciones volumétricas cercanas a cero), y

que afectan la precisión de los cálculos en punto flotante. Sustituyendo la Ec. (2.20) en la ecuación de continuidad de la fase l Ec. (2.15), se obtiene la siguiente forma alternativa:

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_l \rho_l U_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\alpha_l \alpha_g \rho_l U_{ir}) = 0 \quad (2.21)$$

La ecuación de balance de energía no se incluye en este análisis, ya que en todas las simulaciones CFD se asume flujo isotérmico. En cuanto a los efectos de compresibilidad, la variación de la densidad del aire es tenida en cuenta al tratar a la fase gas mediante la ecuación de estado del gas ideal.

Intercambio de Cantidad de Movimiento en la Interfase

Como se mencionó anteriormente, en las simulaciones desarrolladas en este trabajo, el único término interfacial considerado es el correspondiente al intercambio de cantidad de movimiento. El acoplamiento entre las fases en la ecuación de cantidad de movimiento Ec. (2.17) está representado por el término M_i^{eff} , el cual se define por componente direccional. Este término sintetiza el conjunto de fuerzas interfaciales que actúan entre las fases y que dependen del régimen de flujo, incluyendo típicamente fuerzas de arrastre (*drag*), sustentación (*lift*) y dispersión turbulenta (*turbulent dispersion*), entre otras.

$$M_i^{\text{eff}} = M_i^D + M_i^L + M_i^{WL} + M_i^{TD} + M_i^{VM} \quad (2.22)$$

donde M_i^D es la fuerza de arrastre o *drag*, M_i^L es la fuerza de sustentación o *lift*, M_i^{WL} es la fuerza de lubricación en la pared, M_i^{TD} es la fuerza de dispersión turbulenta, y M_i^{VM} es la fuerza de masa agregada. Una descripción detallada de estos términos y la selección de los modelos adecuados para cada régimen de flujo fue abordada en estudios previos de Godino et al. [14]. Las fuerzas de sustentación y lubricación en pared se modelaron mediante los modelos de Tomiyama [104] y Frank [105], respectivamente. Para la fuerza de dispersión turbulenta, se utilizó el modelo de Burns et al. [106], mientras que el coeficiente de masa agregada se mantuvo en el valor estándar de 0.5 para todos los casos [107]. Esta elección se fundamenta en que, bajo condiciones de baja compresibilidad y relaciones de densidad típicas de sistemas gas-líquido, diversos estudios han reportado que el valor de 0.5 constituye una aproximación robusta e independiente del tamaño de partícula. Dicho valor refleja adecuadamente la inercia añadida por el desplazamiento de la fase circundante, y permite representar los efectos de masa virtual sin introducir parámetros adicionales de ajuste, motivo por el cual ha sido ampliamente adoptado en la literatura de modelos multifásicos. Como se mencionó, la fuerza de arrastre representa el término de mayor relevancia en flujos a cocorriente y contracorriente. En este caso se seleccionaron los modelos propuestos por Grace [93] para flujo de burbujas (*bubbly*) y Tomiyama para gotas dispersas (*droplet*). En el caso del flujo segregado, se empleó el modelo propuesto por Marschall [47], siendo este último el más relevante en la simulación de flujo a co y contracorriente.

Método de mezcla dinámica (*Blending Method*)

En un sistema aire-agua, pueden existir tres regímenes de flujo principales: de burbujas, segregado/estratificado y de gotas. Estos regímenes han sido ampliamente caracterizados de manera individual, y las fuerzas interfaciales varían significativamente dependiendo de cuál es la fase continua y cuál es la fase dispersa, mayormente debido a la forma que asumen las gotas o burbujas cuando la velocidad relativa entre fases se incrementa. Además, la transición entre los flujos dispersos (burbujas o gotas) y el flujo segregado, suele ser poco clara.

El método de blending maneja estas transiciones mediante la superposición de modelos a través de un conjunto de funciones de ponderación f , las cuales pueden ser definidas por el usuario en términos de variables locales del flujo, siendo la fracción de volumen de la fase dispersa la variable más usada. Estas funciones afectan cada uno de los términos interfaciales M_{ix}^{eff} según la siguiente expresión:

$$M_{ix}^{\text{eff}} = M_{ix}^{ld} f_{1d} + M_{ix}^{gd} f_{2d} + M_{ix}^{fs} f_{fs} \quad (2.23)$$

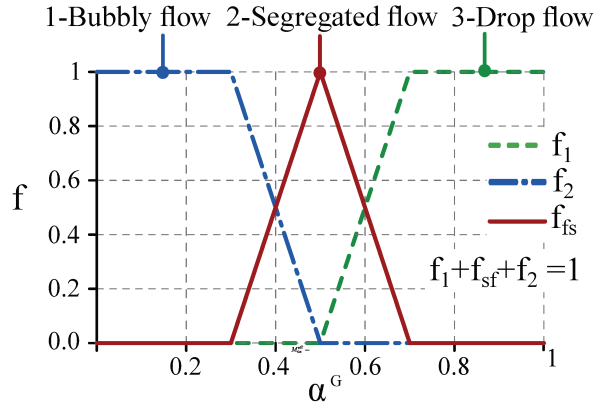


Figura 2.2: Funciones de ponderación del método de blending.

Para un sistema gas-líquido, los coeficientes M_{ix}^{ld} , M_{ix}^{gd} y M_{ix}^{fs} representan regímenes bien definidos: burbujas en un líquido continuo, gotas en un gas continuo y flujo segregado, respectivamente. La transición entre estos regímenes se lleva a cabo mediante las funciones de ponderación f_{1d} , f_{2d} y f_{fs} , las cuales pueden ser descritas mediante funciones lineales o más complejas, como funciones hiperbólicas. La forma más sencilla de determinar el tipo de flujo es a través de α , aunque también pueden considerarse criterios adicionales, como el gradiente de α y las velocidades de fase. De hecho, la mayoría de los modelos empleados en códigos uno-dimensionales y correlaciones hacen uso de la velocidad superficial, la cual combina la velocidad real de cada fase y la fracción de volumen de la misma. En esta tesis se adoptó el criterio más simple, considerando funciones lineales de α .

Como se muestra en la Figura 2.2, cada una de las tres funciones está acotada entre 0 y 1, y la suma de todas ellas también se mantiene dentro de estos límites. Además, la transición entre flujo completamente disperso y flujo segregado está definida por dos umbrales, establecidos por el usuario, adoptando en este caso 0.3 y 0.7, respectivamente.

2.2 Modelado de la Turbulencia

Tal como se expuso en la Sección 2.1.1, los modelos de cierre RANS pueden abordarse mediante dos enfoques principales: (i) aplicando la hipótesis de Boussinesq —Ec. (2.6)—, donde el tensor de tensiones de Reynolds se relaciona con los gradientes de velocidad media a través de una viscosidad turbulenta, o bien (ii) resolviendo in extenso las ecuaciones de transporte para cada componente del tensor $\langle u_i u_j \rangle$, en lo que se conoce como la aproximación de *Reynolds Stress Transport* (RST) [94, 95].

En el enfoque (i), resulta necesario estimar la viscosidad turbulenta μ_t . La mayoría de los modelos asume que las variables turbulentas satisfacen ecuaciones de tipo advección-difusión con términos de producción y disipación, lo que implica la incorporación de dos ecuaciones adicionales por fase. Siguiendo trabajos previos [14], se seleccionó el modelo $k-\omega$ SST para las simulaciones TF, dado que combina el modelo $k-\omega$ en la vecindad de la pared con el $k-\epsilon$ en la región central, y ha sido validado en flujos con superficie libre.

Por su parte, el enfoque (ii) permite obtener el tensor de esfuerzos de Reynolds $\langle u_i u_j \rangle$ sin recurrir a la hipótesis de Boussinesq. En la formulación RST se resuelven de forma directa seis ecuaciones de transporte —una por cada componente independiente del tensor— junto con una ecuación adicional para la disipación turbulenta ϵ . Esta estrategia presenta diversas ventajas:

- captura de forma explícita la *anisotropía* de la turbulencia, fundamental en flujos con separación, inversión de capas límite o presencia de grandes gradientes de densidad;
- representación adecuada de la *redistribución de energía* entre las distintas direcciones principales del flujo, sin asumir proporcionalidad lineal con los gradientes de velocidad; y
- mejora en la predicción de las tensiones turbulentas en presencia de curvatura de las líneas de corriente o rotación, condiciones en las que los modelos basados en μ_t tienden a subestimar o sobrestimar la producción de turbulencia.

No obstante, la aproximación RST conlleva un mayor coste computacional y requiere modelos de cierre adicionales para representar las correlaciones que involucran fluctuaciones de presión —en particular, las correlaciones presión-deformación (ϕ_{ij})—, así como para la disipación y la difusión turbulenta de los esfuerzos de Reynolds. También cabe señalar que los modelos de tipo RST, si bien son tensoriales en la estimación de las escalas asociadas a la energía cinética generada por los mecanismos que promueven la cascada de energía en el transporte turbulento, presentan una limitación común con los modelos de viscosidad turbulenta efectiva (EVM). En particular, ambos comparten la misma formulación para la ecuación de disipación turbulenta ϵ , de modo que el modelado de la escala de longitudes asociadas a la disipación de la energía turbulenta continúa siendo un punto débil de esta aproximación.

En este trabajo se probó el modelo propuesto por Launder [94, 95], implementado en OpenFOAM. El modelo fue comparado con modelos de cierres basados en μ_t y resultados experimentales, evaluando su impacto sobre la hidrodinámica global y las predicciones de interacciones gas-líquido con y sin densidad variable.

La influencia de la fase dispersa sobre la turbulencia ha sido abordada, entre otros, por Sato [108], quien propuso el modelo $k-\omega$ -SATO. Este introduce una corrección sobre μ_t en función del diámetro y la velocidad de las burbujas. Comparaciones previas con el modelo $k-\omega$ SST en una columna vertical aire-agua no evidenciaron diferencias significativas en la distribución de fracción líquida ni en los perfiles de velocidad [14], por lo que dicho modelo no fue considerado en las simulaciones TF.

En el caso 3D-VOF, el modelo $k-\omega$ -SATO no se encuentra implementado en OpenFOAM; por lo tanto, la turbulencia inducida localmente por la fase dispersa en las proximidades de la interfaz no se considera de forma explícita. Además, los modelos RANS clásicos aplicados a VOF presentan limitaciones asociadas a la fuerte variación de densidad en la región interfacial. Fan y Anglart [66] incorporaron efectos de compresibilidad en las ecuaciones de transporte turbulento dentro del marco VOF y observaron alteraciones en la energía cinética turbulenta cerca de la interfaz. No obstante, los parámetros macroscópicos —posición del frente líquido, morfología de gotas y velocidad de fase— se mantuvieron próximos a los obtenidos con VOF estándar y modelos RANS convencionales.

Por otra parte, diversos estudios han evidenciado la capacidad del método SVOF combinado con modelos de cierres RANS tradicionales para reproducir flujos multifásicos complejos [109, 110]. Por ejemplo, Bricker et al. [109] modelaron la rotura de una presa con y sin obstáculos mediante SVOF y TF: el primero logró capturar con precisión la interfaz principal del frente líquido, mientras que el segundo reprodujo adecuadamente el avance macroscópico del frente, aunque sin reflejar la formación de burbujas. A la luz de lo anterior, se evaluaron los siguientes modelos de turbulencia:

Formulación incompresible (ρ -con)

- $k-\epsilon$ estándar
- $k-\epsilon$ realizable
- $k-\epsilon$ RNG
- $k-\omega$ SST
- RST

Formulación compresible (ρ -var)

- k - ϵ RNG
- k - ω SST
- RST

Todos los modelos de cierre listados fueron probados y contrastados en el marco de esta tesis.

2.3 Formulación incompresible (ρ -con)

2.3.1 Modelo $k - \epsilon$

El modelo $k - \epsilon$ calcula la viscosidad turbulenta ν_t a partir de la energía cinética turbulenta k y la tasa de disipación turbulenta ϵ , según la siguiente expresión:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (2.24)$$

donde k y ϵ se obtienen a partir de ecuaciones de transporte, que generalmente se expresan en su forma incompresible, eliminando la dependencia de la densidad en las ecuaciones finales. Las ecuaciones de transporte se expresan como:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i k) = P_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \epsilon \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i \epsilon) = \frac{P_k \epsilon}{k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} + \nu \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.26)$$

donde P_k representa la producción de energía cinética turbulenta, definida como:

$$P_k = 2\nu_t S_{ij} S_{ji} \quad (2.27)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.28)$$

donde S_{ij} representa el tensor tasa de deformación. Los valores de las constantes del modelo utilizadas en este estudio se presentan a continuación:

$$C_\mu = 0.0845, \quad C_2 = 1.68, \quad C_2 = 1.68, \quad \sigma_k = 0.71942, \quad \sigma_\epsilon = 0.71942$$

2.3.2 Modelo k - ϵ Realizable

El modelo k - ϵ Realizable es una mejora del modelo k - ϵ estándar que busca aumentar la precisión en flujos con fuertes gradientes de velocidad, geometrías que poseen curvaturas complejas o expansión compresible. Esta variante introduce modificaciones tanto en la formulación de la viscosidad turbulenta como en las ecuaciones de transporte, permitiendo representar de manera más realista ciertos efectos físicos que el modelo estándar no capta adecuadamente. En particular, la viscosidad turbulenta ν_t se calcula con la Ec. (2.24) donde, a diferencia del modelo estándar, el coeficiente C_μ no es constante, sino que se evalúa dinámicamente a partir de propiedades locales del flujo. En la implementación de OpenFOAM, C_μ se calcula mediante una función no lineal que depende de la deformación del flujo y la energía cinética turbulenta:

$$C_\mu = \left[A_0 + A_s U_s \frac{k}{\epsilon} \right]^{-1} \quad (2.29)$$

donde $A_0 = 4.0$ es un coeficiente ajustado empíricamente, A_s depende de funciones trigonométricas del invariante del tensor de deformación y U_s representa una escala local del esfuerzo cortante total. Esta dependencia permite una mayor adaptabilidad del modelo frente a diferentes tipos de flujos. Las ecuaciones de transporte de k y ϵ en la implementación de OpenFOAM adoptan la siguiente forma:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i k) = P_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \epsilon \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i \epsilon) = C_1 S \epsilon + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] - C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} \quad (2.31)$$

donde:

- P_k es la producción de energía cinética turbulenta, dada por la Ec. (2.27).
- S representa la tasa efectiva de deformación, calculada a partir del tensor simétrico de tasa de deformación según la Ec. (2.28), es decir: $S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}$.
- El término de disipación de ϵ incluye una corrección $\sqrt{\nu \epsilon}$ en el denominador para evitar inestabilidades numéricas cuando k tiende a cero.

Las constantes empíricas utilizadas en las simulaciones fueron:

$$A_0 = 4.0, \quad C_2 = 1.9, \quad \sigma_k = 1.0, \quad \sigma_\epsilon = 1.2$$

Este modelo ha mostrado un mejor comportamiento en flujos con separación o anisotropía fuerte, gracias a la dependencia dinámica de C_μ , que le permite ajustarse a variaciones locales del flujo sin requerir calibraciones adicionales. Además, su implementación incluye mecanismos de corrección de condiciones de contorno y limitaciones en viscosidades negativas para garantizar robustez numérica durante la simulación.

2.3.3 Modelo k - ϵ RNG

El modelo k - ϵ RNG (*Renormalization Group*) constituye una extensión del modelo k - ϵ estándar, derivada a partir de técnicas de teoría de grupos de renormalización aplicadas a las ecuaciones de Navier-Stokes. Esta formulación introduce correcciones adicionales que mejoran la capacidad predictiva del modelo frente a flujos con alta tasa de deformación, recirculaciones o regiones con fuerte anisotropía. Al igual que en otros modelos basados en la hipótesis de Boussinesq, la viscosidad turbulenta efectiva se calcula mediante la expresión dada por la Ec. (2.24). En este modelo, sin embargo, se incorpora un término adicional R en la ecuación de transporte de ϵ , que actúa como corrección a la producción turbulenta, permitiendo una respuesta más realista frente a cambios locales en la estructura del flujo. En su formulación incompresible, las ecuaciones de transporte de k y ϵ adoptan la siguiente forma:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i k) = P_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \epsilon \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (U_i \epsilon) = \frac{P_k \epsilon}{k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} + \nu \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} - R \quad (2.33)$$

donde P y S_{ij} representa la producción de energía cinética turbulenta y el tensor tasa de deformación. El término R , característico del modelo RNG, está ausente en el modelo estándar y se define como:

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \epsilon^2}{1 + \beta \eta^3} \frac{1}{k} \quad (2.34)$$

siendo:

$$\eta = \frac{Sk}{\epsilon}, \quad S = (2S_{ij}S_{ji})^{1/2}$$

Este término corrige la disipación en función del régimen local del flujo, lo cual permite evitar su sobrestimación en zonas con tasas de deformaciones elevadas o baja producción turbulenta, una limitación típica del modelo estándar. Las constantes empleadas en las simulaciones con el modelo RNG en OpenFOAM fueron:

$$C_\mu = 0.0845, \quad C_1 = 1.42, \quad C_2 = 1.68, \quad C_3 = -0.33, \\ \sigma_k = 0.71942, \quad \sigma_\epsilon = 0.71942, \quad \eta_0 = 4.38, \quad \beta = 0.012$$

Gracias a la inclusión del término de corrección R , el modelo $k-\epsilon$ RNG mejora notablemente la representación de flujos con alta anisotropía, rotación o curvatura, condiciones en las que el modelo estándar tiende a fallar. Por esta razón, se adoptó esta formulación en la presente tesis como alternativa robusta para el tratamiento de flujos multifásicos con variaciones intensas de velocidad y presencia de interfaz.

2.3.4 Modelo $k - \omega$ SST

El modelo de turbulencia $k-\omega$ SST (Shear Stress Transport), desarrollado por Menter [111, 112] y extendido posteriormente por Hellsten [113], combina las ventajas de los modelos $k-\omega$ y $k-\epsilon$ para brindar una representación más precisa de la turbulencia en distintos regímenes de flujo. En las regiones cercanas a la pared, donde los gradientes de velocidad son intensos, el modelo $k-\omega$ ofrece un mejor desempeño al capturar fenómenos como la separación inducida por gradientes adversos de presión. Por otro lado, en el interior del flujo (región *bulk*), el modelo $k-\epsilon$ proporciona una descripción más adecuada de la turbulencia casi isotrópica. La transición entre ambas formulaciones se lleva a cabo mediante una función de mezcla denominada F_1 , tal que cuando $F_1 \rightarrow 1$ se activa el modelo $k-\omega$ y cuando $F_1 \rightarrow 0$ se activa el modelo $k-\epsilon$. Para flujos incompresibles, es decir, aquellos que satisfacen $\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0$, las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta k y la frecuencia específica de disipación ω se escriben como:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial(U_i k)}{\partial x_i} = \tilde{P}_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\alpha_k \nu_t + \nu) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \beta^* \omega k + S_k \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial(U_i \omega)}{\partial x_i} = \gamma S^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\alpha_\omega \nu_t + \nu) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] - \beta \omega^2 - (F_1 - 1) CD_{k\omega} + S_\omega \quad (2.36)$$

donde S es la tasa efectiva de deformación y ν_t es la viscosidad turbulenta, cuya expresión se detalla más adelante. La función de mezcla F_1 , que gobierna la interpolación entre modelos, se define como:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left[\min \left(\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500 \nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4 \rho \alpha_\omega k}{CD_{k\omega} y^2}, 10 \right) \right]^4 \right\} \quad (2.37)$$

En la ecuación anterior, y representa la distancia normal a la pared más cercana, y $CD_{k\omega}$ es un coeficiente corrector que se define de la siguiente forma:

$$CD_{k\omega} = \max \left(2 \rho \alpha_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right) \quad (2.38)$$

La producción de energía turbulenta se encuentra limitada para evitar sobreestimaciones en regiones de estancamiento. Esta producción limitada se expresa como:

$$\tilde{P}_k = \min (P_k, 10\beta^* \rho k \omega) \quad (2.39)$$

donde P_k es la producción convencional de energía turbulenta. Los coeficientes del modelo α_k , α_ω , γ y β se determinan como combinaciones lineales ponderadas entre los valores cercanos a la pared (subíndice 1) y los valores en el flujo libre (subíndice 2), de acuerdo con la función de mezcla F_1 . Por ejemplo, el coeficiente β se calcula como:

$$\beta = F_1 \beta_1 + (1 - F_1) \beta_2 \quad (2.40)$$

La viscosidad turbulenta ν_t utilizada en las ecuaciones de transporte se define mediante la siguiente relación:

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max (a_1 \omega, b_1 F_{23} S)} \quad (2.41)$$

donde a_1 y b_1 son constantes del modelo, F_{23} es otra función de mezcla utilizada para limitar la producción de turbulencia en ciertas regiones del flujo. Esta función se define como:

$$F_{23} = \tanh \left\{ \left[\min \left(\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500 \nu}{y^2 \omega} \right), 100 \right) \right]^2 \right\} \quad (2.42)$$

Finalmente, los valores numéricos de las constantes utilizadas en este estudio se presentan a continuación:

$$\begin{aligned} \alpha_{k_1} &= 0.85, & \alpha_{k_2} &= 1.0, & \alpha_{\omega_1} &= 0.5, & \alpha_{\omega_2} &= 0.856, \\ \beta_1 &= 0.075, & \beta_2 &= 0.0828, & \gamma_1 &= 5/9, & \gamma_2 &= 0.44, \\ a_1 &= 0.31, & b_1 &= 1.0, & c_1 &= 10.0, & \beta^* &= 0.09. \end{aligned}$$

Con esta formulación, el modelo k - ω SST logra predecir con precisión la separación turbulenta inducida por gradientes adversos de presión, al tiempo que mantiene una descripción adecuada de la turbulencia en el núcleo del flujo.

2.3.5 Modelo de pared basado en la ley logarítmica

Para capturar los efectos turbulentos cerca de la pared, se empleó la clásica ley logarítmica propuesta por Prandtl:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(B y^+) + 1 \quad (2.43)$$

donde B es una constante dependiente de la rugosidad de la pared, y κ es un valor obtenido experimentalmente. Las variables adimensionales u^+ , y^+ y u_τ se definen como:

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu}, \quad u^+ = \frac{u}{u_\tau}, \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.44)$$

2.3.6 Modelo de Transporte de Esfuerzos de Reynolds (RST)

El modelo de Transporte de Esfuerzos de Reynolds RST permite resolver directamente cada componente del tensor de esfuerzos turbulentos $\langle u_i u_j \rangle$, sin necesidad de recurrir a la hipótesis de Boussinesq Ec. (2.6). Esta aproximación es especialmente útil para representar fenómenos turbulentos complejos, tales como anisotropía, curvatura de líneas de corriente, inversión de capas límite, efectos de rotación y gradientes de presión no homogéneos.

En este contexto, la expresión “inversión de capa límite” no se refiere al fenómeno atmosférico asociado a perfiles de temperatura, sino a situaciones en dinámica de fluidos donde se produce una separación y reversión del flujo dentro de la capa límite debido a gradientes adversos de presión o a la interacción con geometrías complejas. Bajo estas condiciones, las fluctuaciones turbulentas muestran un comportamiento altamente anisotrópico, lo que justifica la necesidad de modelos como el RST para representar de manera más realista la redistribución de energía turbulenta en dichas regiones.

El modelo propuesto por Launder, Reece y Rodi [94, 95], implementado en OpenFOAM bajo el nombre LRR, resuelve un sistema de seis ecuaciones de transporte para las componentes simétricas independientes de $\langle u_i u_j \rangle$, junto con una ecuación adicional para la disipación turbulenta ϵ . La formulación general, en su forma incompresible, puede expresarse como:

$$\frac{\partial \langle u_i u_j \rangle}{\partial t} + U_k \frac{\partial \langle u_i u_j \rangle}{\partial x_k} = P_{ij} - C_2 P_{ij}^{\text{dev}} + \frac{\partial}{\partial x_k} [D_{ijk}] - \frac{2}{3}(1 - C_1)\delta_{ij}\epsilon - C_1 \frac{\epsilon}{k} \langle u_i u_j \rangle \quad (2.45)$$

donde P_{ij} representa el tensor de producción, P_{ij}^{dev} su parte desviada, y D_{ijk} los términos de difusión modelados. El término de redistribución está modelado mediante una aproximación lineal con C_1 , y la disipación se incluye explícitamente en forma isotrópica y anisotrópica. La energía cinética turbulenta se obtiene directamente como:

$$k = \frac{1}{2} \text{tr}(\langle u_i u_j \rangle) \quad (2.46)$$

y no mediante una ecuación de transporte adicional, a diferencia de los modelos basados en $k-\epsilon$. La ecuación para la disipación turbulenta ϵ asociada al modelo RST se expresa como:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + U_i \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(C_\epsilon \frac{k}{\epsilon} \langle u_i u_j \rangle \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon_1} \frac{P_k \epsilon}{k} - C_{\epsilon_2} \frac{\epsilon^2}{k} \quad (2.47)$$

donde $P_k = \frac{1}{2} |\text{tr}(P_{ij})|$ representa la producción escalar de energía cinética turbulenta. Para las simulaciones se emplearon las constantes originalmente propuestas por Launder:

$$\begin{aligned} C_s &= 0.25, & C_1 &= 1.8, & C_2 &= 0.6, \\ C_\epsilon &= 0.15, & C_{\epsilon_1} &= 1.44, & C_{\epsilon_2} &= 1.92 \end{aligned}$$

Adicionalmente, se consideró un término de reflexión de pared opcional, que mejora la representación del rebote de fluctuaciones turbulentas cerca de superficies sólidas. En este contexto, el “rebote” hace referencia a la tendencia de las componentes normales de las fluctuaciones turbulentas a reducirse o invertirse al aproximarse a una superficie rígida, mientras que las componentes tangenciales tienden a incrementarse. Este mecanismo busca representar la redistribución anisotrópica de la energía turbulenta en la vecindad de la pared, evitando que las tensiones normales se anulen de manera no física en la aproximación a la frontera. También incluye mecanismos de corrección del esfuerzo cortante en condiciones de contorno y control de la positividad del tensor de esfuerzos. Estas características hacen del modelo LRR una herramienta robusta y precisa para el análisis de flujos turbulentos altamente anisotrópicos en geometrías complejas.

2.4 Formulación compresible (ρ -var)

Con el objetivo de evaluar y contrastar el comportamiento de los parámetros turbulentos en la región interfacial —previamente analizados en la Sección 2.3 bajo la hipótesis de incompresibilidad—, se adoptó la formulación de densidad variable (ρ -var) en los modelos de turbulencia seleccionados: k - ϵ RNG, k - ω SST y RST. Esta aproximación permite representar con mayor fidelidad los efectos asociados a los gradientes de densidad, especialmente relevantes en flujos multifásicos cercanos a la interfaz.

La metodología adoptada se basa en el trabajo de Fan et al. [66], quienes reformularon las ecuaciones de transporte de las variables turbulentas (k , ϵ , ω y $\langle u_i u_j \rangle$) bajo un enfoque compresible. Dicho enfoque introduce modificaciones en los términos de producción, disipación y difusión, a fin de capturar los efectos de compresibilidad en la dinámica turbulenta de zonas cercanas a la interfaz líquido-gas.

Asimismo, se incluye la evaluación del modelo RST [94, 95] en su versión ρ -var, con el propósito de analizar críticamente la validez de la hipótesis de Boussinesq en flujos segregados. Dicha hipótesis relaciona la viscosidad turbulenta con los gradientes de velocidad media, pero puede no ser adecuada en presencia de anisotropía o gradientes pronunciados de densidad.

A continuación, se presentan las ecuaciones de transporte para cada modelo turbulento considerado bajo la formulación de densidad variable.

2.4.1 Modelo $k - \epsilon$ RNG

Con el fin de capturar los gradientes de densidad que se desarrollan en la vecindad de la interfaz líquido-gas, se adoptó la versión compresible del modelo k - ϵ RNG. Esta formulación mantiene la definición clásica de viscosidad turbulenta dada por la Ec. (2.24), pero reescribe las ecuaciones de transporte de las variables turbulentas en forma conservativa, lo que permite incorporar de forma explícita las variaciones de densidad:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i k) = \rho P_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \rho \epsilon \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i \epsilon) = \frac{\rho P_k \epsilon}{k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} + \nu \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] - \rho \left(\frac{2}{3} C_1 - C_3 \right) \epsilon \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - C_2 \rho \frac{\epsilon^2}{k} - R \quad (2.49)$$

Tal como se explicó para la versión incompresible, el término R actúa como corrección no lineal de la disipación, modulando la respuesta del modelo en regímenes con altos gradientes de velocidad. Su inclusión, junto con los términos de dilatación ($\partial U_i / \partial x_i$), dota al modelo k - ϵ RNG (ρ -var) de una mayor sensibilidad a los gradientes de masa y a la anisotropía inducida por la interfaz, evitando la sobre-predicción típica de la formulación estándar. Las constantes del modelo utilizadas en estas simulaciones fueron las siguientes:

$$\begin{aligned} C_\mu &= 0.0845 & C_1 &= 1.42 & C_2 &= 1.68 & C_3 &= -0.33 \\ \sigma_k &= 0.71942 & \sigma_\epsilon &= 0.71942 & \eta_0 &= 4.38 & \beta &= 0.012 \end{aligned}$$

2.4.2 Modelo $k - \omega$ SST

Para reflejar la influencia de los gradientes de densidad en la dinámica turbulenta, se adoptó también la versión compresible (ρ -var) del modelo híbrido k - ω SST. En esta formulación, las ecuaciones de transporte se escriben en forma conservativa de masa, incorporando explícitamente los términos de dilatación ($\partial U_i / \partial x_i$) característicos de los flujos con densidad variable. Las ecuaciones de transporte para k y la frecuencia turbulenta ω , escritas en la formulación ρ -var, se expresan como:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i k)}{\partial x_i} = \rho P_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho(\alpha_k \nu_t + \nu) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \rho \beta^* \omega k + \rho S_k \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \omega)}{\partial x_i} = \rho \gamma P_k + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho(\alpha_\omega \nu_t + \nu) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \rho \gamma \omega \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \rho \beta \omega^2 - \rho(F_1 - 1) C D_{k\omega} + \rho S_\omega \quad (2.51)$$

donde la viscosidad turbulenta se calcula, como en la versión incompresible (Sección 2.3.4) empleando la Ec. (2.41). Los términos fuente S_k y S_ω representan correcciones de bajo Reynolds y atenuación viscosa; las funciones de mezcla F_1 y F_{23} garantizan la conmutación suave entre el comportamiento tipo $k-\omega$ cerca de la pared y tipo $k-\epsilon$ en la región central del flujo. Finalmente, las constantes utilizadas en estas simulaciones se presentan a continuación:

$$\begin{array}{llll} \alpha_{k1} = 0.85 & \alpha_{k2} = 1 & \alpha_{\omega1} = 0.5 & \alpha_{\omega2} = 0.856 \\ \beta_1 = 0.075 & \beta_2 = 0.0828 & \gamma_1 = 5/9 & \gamma_2 = 0.44 \\ a_1 = 0.31 & b_1 = 1 & c_1 = 10 & \beta^* = 0.09 \end{array}$$

La inclusión de los términos de dilatación y la conservación de masa en las Ecs. (2.50–2.51) confieren al modelo $k-\omega$ SST (ρ -var) una mayor precisión en la predicción de la producción y disipación turbulenta en presencia de variaciones de densidad, garantizando una respuesta adecuada tanto en la capa límite como en el núcleo del flujo multifásico.

2.4.3 Modelo de Transporte de Esfuerzos de Reynolds (RST)

El modelo de Transporte de Esfuerzos de Reynolds (RST) en su formulación con densidad variable permite resolver directamente las componentes simétricas independientes del tensor de esfuerzos turbulentos $\langle u_i u_j \rangle$, sin necesidad de recurrir a la hipótesis de Boussinesq. Esta formulación resulta particularmente adecuada para flujos multifásicos con gradientes de densidad pronunciados, como aquellos que se desarrollan en la vecindad de interfases líquido–gas. La versión ρ -var propuesta por Launder, Reece y Rodi [94, 95], implementada en OpenFOAM bajo el nombre LRR, reformula las ecuaciones de transporte en forma conservativa, incorporando de manera explícita los efectos de compresibilidad. Las ecuaciones de transporte para el tensor de esfuerzos turbulentos se expresan como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \langle u_i u_j \rangle)}{\partial t} + U_k \frac{\partial(\rho \langle u_i u_j \rangle)}{\partial x_k} - (C_s \frac{k}{\epsilon} \langle u_i u_j \rangle + \nu \delta_{ij}) \frac{\partial(\rho \langle u_i u_j \rangle)}{\partial x_k} + C_1 \rho \frac{\epsilon}{k} \langle u_i u_j \rangle = \rho P_{ij} \\ - C_2 \rho P_{ij}^{\text{dev}} - \frac{2}{3} (1 - C_1) \rho \delta_{ij} \epsilon \end{aligned} \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \epsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[C_\epsilon \frac{k}{\epsilon} \langle u_i u_j \rangle \frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon1} \frac{\rho P_k \epsilon}{k} - C_{\epsilon2} \frac{\rho \epsilon^2}{k} \quad (2.53)$$

La energía cinética turbulenta se calcula a partir de la traza del tensor de esfuerzos, como se mencionó en la Ec. (2.46) y no se resuelve mediante una ecuación de transporte adicional. Las constantes del modelo utilizadas en estas simulaciones fueron las siguientes:

$$\begin{array}{lll} C_s = 0.25 & C_1 = 1.8 & C_2 = 0.6 \\ C_\epsilon = 0.15 & C_{\epsilon1} = 1.44 & C_{\epsilon2} = 1.92 \end{array}$$

Este modelo incorpora además términos opcionales de reflexión de pared, que mejoran la representación del rebote de fluctuaciones turbulentas en cercanías de superficies sólidas. Asimismo, incluye

mecanismos para garantizar la conservación del esfuerzo cortante en contornos y preservar la positividad del tensor de esfuerzos. Todo esto lo convierte en una herramienta robusta para el estudio de flujos turbulentos altamente anisotrópicos en condiciones de densidad variable.

2.5 Formulación matemática de los modelos RELAP5

Tal como se mencionó en el capítulo 1, RELAP5Mod3 emplea el modelo de dos fluidos (TF) formulado en forma unidimensional. En esta sección se presentan las ecuaciones unidimensionales de dos fluidos utilizadas en RELAP5, junto con un resumen del modelo de CCFL. Los subíndices g y f representan las fases gaseosa y líquida, respectivamente, siguiendo la notación utilizada en [92]. La ecuación de continuidad para las fases gas (g) y líquido (f) se escriben como:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g \rho_g v_g A) &= \Gamma_g \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f \rho_f v_f A) &= \Gamma_f\end{aligned}\quad (2.54)$$

donde v representa la velocidad, A es el área de la sección transversal de la tubería, y Γ denota el término de cambio de fase. Es importante destacar que A aparece explícitamente dentro de la derivada espacial porque, en situaciones con expansiones o contracciones geométricas, el área de la sección transversal no es constante y debe considerarse como una variable dependiente de la posición x . El balance de cantidad de movimiento resulta:

$$\begin{aligned}\alpha_g \rho_g A \frac{\partial v_g}{\partial t} + \frac{1}{2} \alpha_g \rho_g A \frac{\partial v_g^2}{\partial x} &= -\alpha_g A \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha_g \rho_g B_x A - (\alpha_g \rho_g A) \text{FWG}(v_g) + \Gamma_g A (v_{gI} - v_g) \\ &\quad - (\alpha_g \rho_g A) \text{FIG}(v_g - v_f) - C \alpha_g \alpha_f \rho_m A \left[\frac{\partial (v_g - v_f)}{\partial t} + v_f \frac{\partial v_g}{\partial x} - v_g \frac{\partial v_f}{\partial x} \right]\end{aligned}\quad (2.55)$$

$$\begin{aligned}\alpha_f \rho_f A \frac{\partial v_f}{\partial t} + \frac{1}{2} \alpha_f \rho_f A \frac{\partial v_f^2}{\partial x} &= -\alpha_f A \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha_f \rho_f B_x A - (\alpha_f \rho_f A) \text{FWF}(v_f) - \Gamma_g A (v_{fI} - v_f) \\ &\quad - (\alpha_f \rho_f A) \text{FIF}(v_f - v_g) - C \alpha_f \alpha_g \rho_m A \left[\frac{\partial (v_f - v_g)}{\partial t} + v_g \frac{\partial v_f}{\partial x} - v_f \frac{\partial v_g}{\partial x} \right]\end{aligned}\quad (2.56)$$

donde FWG y FWF representan la fricción con la pared, la cual se calcula mediante coeficientes específicos. El término B_x incluye las fuerzas externas, tales como la gravedad. En el caso de equipos de turbomaquinaria (por ejemplo, bombas), su efecto no se introduce en la ecuación diferencial de cantidad de movimiento como un “momento generado por la máquina”, sino que se representa a través de la interacción pared–fluido en las superficies sólidas del volumen de control. Cuando se trabaja con la ecuación integral de energía (Bernoulli generalizada), estas interacciones se traducen en un término de trabajo de máquina; sin embargo, en la formulación diferencial utilizada por RELAP5, al considerarse volúmenes de control infinitesimales, dicho término no aparece explícitamente y la contribución de la bomba se incorpora mediante las condiciones de contorno del sistema. Los términos FIG y FIF describen las fuerzas de fricción interfacial. En esta simulación, se emplea el modelo de fricción interfacial denominado *Rod Bundle Interphase Friction Model*, desarrollado por [114]. Este modelo mejora la precisión en la estimación de la correlación de la fracción de vacío y permite una mayor aplicabilidad en geometrías complejas y flujos asociados al fenómeno CCFL. Finalmente, el último término del lado derecho de las Ecs. (2.55) y (2.56) representa las fuerzas debidas a masas agregadas. Por otra parte, las ecuaciones de balance de energía interna correspondientes a las fases gaseosa y líquida, denotadas como U_g y U_f , respectivamente, se expresan de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g U_g) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_g \rho_g U_g v_g A) = & -P \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_g v_g A) \\ & + Q_{wg} + Q_{ig} + \Gamma_{ig} h_g^* + \Gamma_w h_g' + \text{DISS}_g \end{aligned} \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f U_f) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_f \rho_f U_f v_f A) = & -P \frac{\partial \alpha_f}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_f v_f A) \\ & + Q_{wf} + Q_{if} + \Gamma_{if} h_f^* + \Gamma_w h_f' + \text{DISS}_f \end{aligned} \quad (2.58)$$

En estas ecuaciones, Q_{wg} y Q_{wf} representan las tasas de transferencia de calor en la pared, mientras que Q_{ig} y Q_{if} corresponden a las tasas de transferencia de calor en la interfase. Los términos h_g^* y h_f^* denotan las entalpías globales de cada fase, las cuales se definen de manera que se satisfagan las condiciones de salto de energía en la interfase líquido-vapor. Por otro lado, h_g' y h_f' representan las entalpías asociadas a la capa límite térmica. Por lo tanto, los términos $\Gamma_{ig} h_g^*$ y $\Gamma_{if} h_f^*$ describen la transferencia de calor debida al cambio de fase en la interfase. De manera similar, los términos $\Gamma_w h_g'$ y $\Gamma_w h_f'$ contabilizan la transferencia de calor asociada al cambio de fase en la pared. Finalmente, los términos DISS_g y DISS_f representan la energía disipada, incluyendo las contribuciones por fricción con la pared y efectos de bombeo.

En el caso de RELAP, el aire es un componente no condensable presente en la fase gaseosa y por ello se asume con la misma velocidad que el vapor. Sus propiedades se modelan como una mezcla, descrita a través de la calidad X , la cual se define como la fracción másica de la fase no condensable en la fase gaseosa total. La ecuación de transporte se expresa como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g X_n) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_g \rho_g X_n v_g A) = 0 \quad (2.59)$$

El sistema de ecuaciones presentado en las Ecs. (2.54-2.59) constituye la base fundamental del modelo resuelto por RELAP5. Las ecuaciones resultantes de la discretización directa exceden el alcance de este trabajo. Para un análisis más detallado, se recomienda consultar [92]. El modelo CCFL en RELAP5 sigue las formulaciones originales propuestas en [6, 78, 80]. Además, se incluye a continuación una descripción del esquema de discretización semi-implícito, el cual es fundamental para la solución de las ecuaciones asociadas al CCFL. Este enfoque permite una comprensión más profunda del fenómeno, contribuyendo al análisis y discusión de los resultados obtenidos en este trabajo.

2.5.1 Avance Temporal en el Esquema Semi-Implícito

La discretización espacial unidimensional en RELAP5 se basa en el concepto de volumen de control, con una malla escalonada. Como se ilustra en la Figura 2.3, extraída de [92], las propiedades escalares (presión, energías y fracción de vacío) se definen en los centros de celda K y L , y se integran entre los límites j y $j + 1$. Mientras tanto, las cantidades vectoriales (velocidades) se definen en los bordes de celda j y $j + 1$ e igualmente se integran entre los límites K y L . Por otro lado, la integración temporal se realiza mediante una linealización entre el paso de tiempo conocido n y el paso de tiempo a calcular $n + 1$, utilizando un estado intermedio para las propiedades X , U , α , etc., indicado con el símbolo $\sim$ (por ejemplo, $\tilde{X}^{n+1}$, $\tilde{U}^{n+1}$ y $\tilde{\alpha}^{n+1}$).

Tras sustituir los distintos modelos, suposiciones y aproximaciones, y realizar la integración, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones lineales (2.60):

$$Ax = b + g^1 v_{g,j+1}^{n+1} + g^2 v_{g,j}^{n+1} + f^1 v_{f,j+1}^{n+1} + f^2 v_{f,j}^{n+1} \quad (2.60)$$

donde los coeficientes de la matriz A y los vectores b , g^1 , g^2 , f^1 y f^2 dependen de las propiedades en el tiempo n y la posición L . Por otro lado, los coeficientes del vector solución x se expresan como:

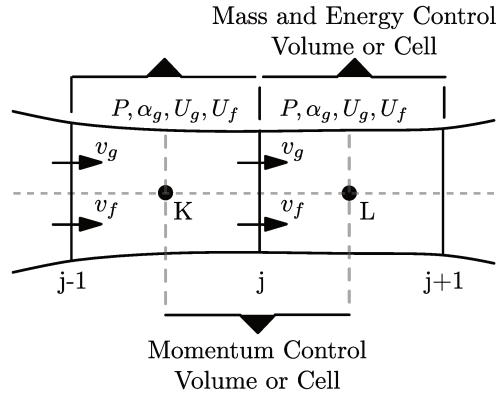


Figura 2.3: Esquema de discretización escalonada en RELAP5.

$$\begin{bmatrix} \tilde{X}^{n+1} - X^n \\ \tilde{U}_g^{n+1} - U_g^n \\ \tilde{U}_f^{n+1} - U_f^n \\ \tilde{\alpha}_g^{n+1} - \alpha_g^n \\ P^{n+1} - P^n \end{bmatrix} \quad (2.61)$$

El sistema planteado en la Ec. (2.60) no puede resolverse directamente, ya que los coeficientes en el lado derecho son desconocidos. Para proceder, primero se reescriben las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento, tanto en su forma dada por la suma como en su forma dada por la resta, tal como se presentan en [92], evaluadas en el instante $n + 1$ y expresadas en términos de la presión P^{n+1} . Luego, estas ecuaciones se sustituyen en la Ec. (2.60), permitiendo reformular el sistema.

Posteriormente, se calcula la matriz inversa A^{-1} y se multiplica por la Ec. (2.60), obteniendo una ecuación únicamente en términos de la presión P^{n+1} , definida por la última fila del sistema resultante tras la multiplicación por A^{-1} . Si se toman las últimas filas para cada volumen de control, se obtiene un sistema de ecuaciones de dimensión $N \times N$, donde N representa el número de celdas en el dominio. Una vez determinada la presión P^{n+1} , se calculan las velocidades en el mismo tiempo $n + 1$ y las propiedades en estado intermedio representadas como $\tilde{X}^{n+1}$, $\tilde{U}^{n+1}$ y $\tilde{\alpha}^{n+1}$. Finalmente, las propiedades en el tiempo $n + 1$ se obtienen mediante las ecuaciones básicas no extendidas. Los pasos para resolver el sistema de ecuaciones (2.60) se resumen en el Algoritmo 1 donde se detalla el procedimiento utilizado en la solución del sistema de ecuaciones en RELAP5. Este enfoque garantiza que todas las propiedades en el tiempo $n + 1$ sean consistentes con las ecuaciones gobernantes y las condiciones de contorno.

2.5.2 Modelo CCFL

Debido a las simplificaciones geométricas inherentes a modelos unidimensionales como RELAP5 y al uso del modelo de dos fluidos, los fenómenos interfaciales e incluso el CCFL deben ser incorporados mediante modelos. Ello requiere restricciones basadas en correlaciones empíricas. De no ser así, el CCFL en RELAP no logra ser capturado solo a partir del modelado de fuerzas de *drag* interfaciales. Por esta razón, RELAP5 incorpora este fenómeno a través de la llamada curva de inundación (*deflooding line*) propuesta por Wallis y mencionada en el Capítulo 1. Es decir que, el CCFL se define mediante una línea recta de pendiente negativa representando la relación $J_f^{*0.5} = f(J_g^{*0.5})$, como propuso Wallis [6]:

$$J_g^{*0.5} + mJ_f^{*0.5} = c \quad (2.62)$$

1. **Reformulación de las ecuaciones de cantidad de movimiento:** Las ecuaciones de cantidad de movimiento, tanto en su forma dada por la suma como en su forma dada por la resta, se expresan en términos de la presión P^{n+1} y se sustituyen en la Ec. (2.60).
2. **Transformación mediante la matriz inversa:** Se calcula la matriz inversa A^{-1} y se multiplica por la Ec. (2.60), obteniendo una ecuación para P^{n+1} a partir de la última fila del sistema.
3. **Formulación del sistema de presión:** Al tomar las últimas filas correspondientes a cada volumen de control, se construye un sistema de ecuaciones lineales de tamaño $N \times N$ para la presión P^{n+1} .
4. **Resolución de la presión:** Se resuelve el sistema de ecuaciones para calcular la presión P^{n+1} en todas las celdas del dominio.
5. **Cálculo de velocidades:** Con la presión P^{n+1} determinada, se calculan las velocidades en el paso de tiempo $n + 1$ utilizando las ecuaciones de cantidad de movimiento.
6. **Evaluación de propiedades intermedias:** A partir de las velocidades y la presión, se evalúan las propiedades intermedias $\tilde{X}^{n+1}$, $\tilde{U}^{n+1}$ y $\tilde{\alpha}^{n+1}$.
7. **Cálculo final de propiedades:** Finalmente, se determinan las propiedades en el paso de tiempo $n + 1$ utilizando las ecuaciones no extendidas.

Algoritmo 1: Algoritmo RELAP5 sin implementación de CCFL

donde m representa la pendiente y c corresponde a la intersección con el eje de la velocidad adimensional del gas. Este último parámetro define el valor límite de $J_g^{*0.5}$ en condiciones de flujo nulo de líquido ($J_f^{*0.5} = 0$), es decir, el umbral máximo de aporte de gas a contracorriente que puede sostener el sistema antes de que se produzca la limitación de flujo (CCFL). En consecuencia, c permite interpretar directamente el punto de bloqueo para el gas y, por lo tanto, constituye un parámetro clave en la predicción del inicio del fenómeno en el marco de las correlaciones empíricas propuestas por Wallis [6] a través de la Ec. (2.63):

$$J_{g,f}^{*0.5} = \sqrt{v_{g,f}} \sqrt{\frac{\rho_{g,f}}{gD(\rho_f - \rho_g)}} \quad (2.63)$$

Posteriormente, estos parámetros fueron extendidos a otras geometrías en [115] y combinados en [116] mediante una longitud característica w , definida como:

$$w = D^{1-\beta} L^\beta \quad (2.64)$$

donde D es el diámetro hidráulico y L la constante capilar de Laplace, dada por:

$$L = \left[\frac{\sigma}{g(\rho_f - \rho_g)} \right]^{1/2} \quad (2.65)$$

donde σ representa la tensión superficial. En la Ec. (2.65), el parámetro β varía entre 0 y 1. Para $\beta = 0$ se obtiene la definición de Wallis, mientras que para $\beta = 1$ se obtiene la de Kutateladze [115]. Si $0 < \beta < 1$, se obtiene una combinación de ambas definiciones. Así, las velocidades adimensionales generalizadas se expresan como:

$$J_{g,f}^{*0.5} = \sqrt{v_{g,f} \sqrt{\frac{\rho_{g,f}}{gw(\rho_f - \rho_g)}}} \quad (2.66)$$

Debido a la simplicidad geométrica del ensayo de Collier, se utilizó el enfoque de Wallis con $\beta = 0$. La Ec. (2.66) debe ser expresada en términos de las velocidades del gas y del líquido antes de ser implementada en el código RELAP5. Para ello, ambos lados de la ecuación se elevan al cuadrado, y los términos que multiplican las velocidades pueden reescribirse como c_g y c_f :

$$c_{g,f} = \sqrt{\frac{\rho_{g,f}}{gw(\rho_f - \rho_g)}} \quad (2.67)$$

Por consiguiente, las velocidades correspondientes a las fases gaseosa y líquida pueden escribirse de la siguiente forma:

$$J_g^* = v_g c_g \quad \& \quad J_f^* = v_f c_f \quad (2.68)$$

Al sustituir las Ecs. (2.68) en la Ec. (2.62), se obtiene:

$$m^2 c_{f,j}^n v_{f,j}^{n+1} = c^2 - 2c(c_{g,j})^{1/2} (v_{g,j}^{n+1})^{1/2} + c_{g,j}^n v_{g,j}^{n+1} \quad (2.69)$$

Además, el término $(v_{g,j}^{n+1})^{1/2}$ se linealiza como:

$$(v_{g,j}^{n+1})^{1/2} = (v_{g,j}^n)^{1/2} + \frac{1}{2}(v_{g,j}^n)^{-1/2}(v_{g,j}^{n+1} - v_{g,j}^n) \quad (2.70)$$

Sustituyendo la Ec. (2.70) en la Ec. (2.69), se obtiene:

$$\begin{aligned} m^2 c_{f,j}^n v_{f,j}^{n+1} + \left[c(c_{g,j})^{1/2} (v_{g,j}^n)^{-1/2} - c_{g,j}^n \right] v_{g,j}^{n+1} \\ = c^2 - c(c_{g,j})^{1/2} (v_{g,j}^n)^{1/2} \end{aligned} \quad (2.71)$$

Para incorporar la Ec. (2.71) en el Algoritmo 1, primero se debe agregar una verificación para determinar si existe flujo a contracorriente y si este supera el límite especificado en la Ec. (2.62), definido por el usuario. Si se supera dicho límite, la ecuación de conservación de cantidad de movimiento representada por la resta es reemplazada por la Ec. (2.71). La implementación del fenómeno CCFL se ilustra en el Algoritmo 2.

2.6 Estudio de casos

Con el objetivo de analizar la capacidad predictiva de las diferentes metodologías numéricas abordadas en esta tesis, a continuación se presentan una serie de casos de estudio que permiten evaluar la evolución de la interfaz y los efectos de la turbulencia en flujos multifásicos gas-líquido. Estos casos comprenden tanto experimentos propios como configuraciones ampliamente referenciadas en la literatura, y abarcan desde flujos predominantemente segregados hasta regímenes más complejos con geometrías representativas de aplicaciones reales. En cada caso, se comparan los resultados obtenidos mediante distintas formulaciones del método VOF, así como modelos de turbulencia en versiones incompresibles y de densidad variable (ρ -var), evaluando su impacto sobre la dinámica interfacial, la estructura del flujo y las variables macroscópicas. La selección de los casos busca no sólo validar los modelos propuestos, sino también explorar sus limitaciones y alcances en contextos experimentales representativos. A continuación, se detallan las condiciones de cada caso y los resultados obtenidos.

1. Verificación del límite CCFL:

if Las velocidades adimensionales $J_g^{*0.5}$ y $J_f^{*0.5}$ superan el límite especificado en la Ec. (2.62)
then

Se reemplaza la ecuación de conservación de cantidad de movimiento dada por la diferencia con la Ec. (2.71);

Se resuelven las velocidades a partir de la Ec. (2.71) y de la ecuación de cantidad de movimiento expresada en términos de la presión P^{n+1} ;

Se sustituyen estas ecuaciones en la Ec. (2.60);

end

else

Se expresan las ecuaciones de cantidad de movimiento (dada por la suma y diferencia) en el paso de tiempo $n + 1$ en términos de la presión P^{n+1} ;

Se sustituyen estas ecuaciones en la Ec. (2.60);

end

2. Transformación mediante la matriz inversa: Se calcula la matriz inversa A^{-1} y se multiplica por la Ec. (2.60), obteniendo una ecuación en términos de P^{n+1} a partir de la última fila del sistema.

3. Formulación del sistema de presión: Se toman las últimas filas correspondientes a cada volumen de control para construir un sistema lineal de tamaño $N \times N$ para la presión P^{n+1} .

4. Cálculo de velocidades: Con P^{n+1} determinada, se calculan las velocidades en el paso de tiempo $n + 1$ utilizando las ecuaciones de cantidad de movimiento.

5. Determinación de propiedades intermedias: Se evalúan $\tilde{X}^{n+1}$, $\tilde{U}^{n+1}$ y $\tilde{\alpha}^{n+1}$.

6. Cálculo de propiedades finales: Se obtienen las propiedades en $n + 1$ mediante las ecuaciones no extendidas.

Algoritmo 2: Algoritmo RELAP5 con implementación de CCFL

2.7 CASO 1: Columna agua–aire

El Caso 1 corresponde a un ensayo multifásico concebido con el objetivo de validar el desempeño del modelo de dos fluidos y del enfoque VOF en la simulación de flujos altamente transitorios en regímenes *bubbly* y segregados [15]. En particular, se busca evaluar la capacidad de ambos métodos para representar la evolución de la interfase líquido–gas bajo condiciones dinámicas. Se pone especial énfasis en el método de reconstrucción de interfaz isoAdvector, dada su reconocida capacidad para capturar con mayor precisión superficies libres en flujos multifásicos.

La instalación experimental, ilustrada en la Figura 2.4, consiste en un canal vertical plano de 17 mm de profundidad, construido con plexiglás transparente y aluminio. El canal está dividido en dos compartimentos mediante una partición vertical.

Los ensayos se realizaron con aire y agua, añadiendo tinta azul al agua para facilitar la visualización de la interfase. Las propiedades físicas de ambos fluidos se presentan en la Tabla 2.1. Para registrar la evolución de la interfase, se utilizó una cámara de video de alta velocidad (120 cuadros por segundo) y se aplicó procesamiento digital de imágenes para determinar con precisión la posición del frente líquido.

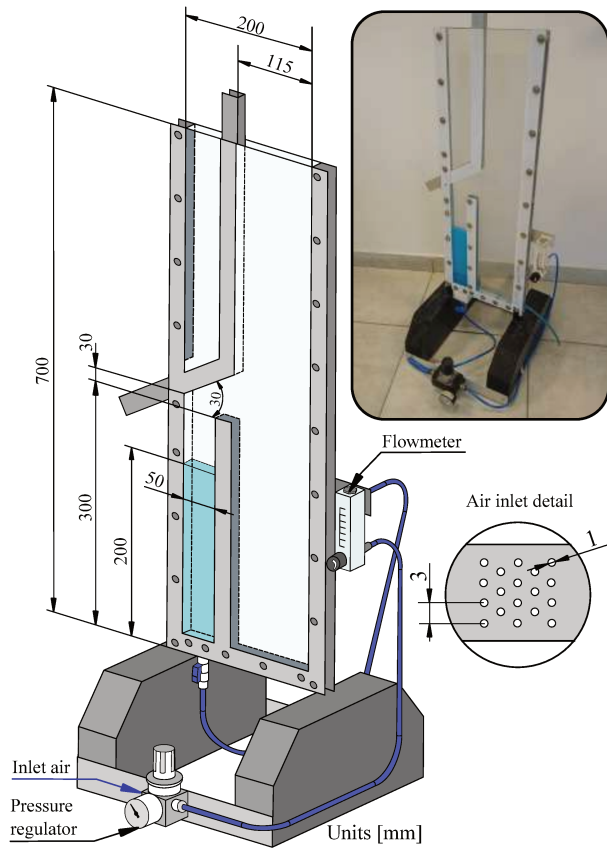


Figura 2.4: Banco de pruebas experimental.

Propiedades	Agua	Aire
ν (m ² /s)	1×10^{-6}	1.48×10^{-5}
ρ (kg/m ³)	998	1.2
σ (N/m)	0.074	-

Tabla 2.1: Propiedades de los fluidos.

Al inicio de cada experimento, el compartimento izquierdo se encuentra parcialmente lleno con una columna de agua de 200 mm. El aire se inyecta súbitamente desde la base a través de 18 orificios de 1 mm de diámetro, dispuestos en una matriz triangular con espaciamiento de 3 mm, cubriendo un área de 17 mm × 10 mm. El suministro de aire es controlado mediante un regulador de presión con válvula de control, y el caudal se monitorea con un rotámetro.

Los ensayos se llevaron a cabo para un amplio rango de caudales de aire, entre 3 l/min y 30 l/min, lo que corresponde a velocidades medias de entrada en el rango de 0.5 a 5 m/s sobre el área activa de inyección. Según el caudal aplicado, el flujo de aire induce la expansión de la columna de agua, provocando el arrastre y eventual derrame de líquido hacia el compartimento derecho. Como consecuencia de la inyección abrupta de aire, el flujo ingresa al canal izquierdo con elevada turbulencia; sin embargo, dicha turbulencia es amortiguada por la columna de líquido, alcanzándose valores de número de Reynolds globales en el canal izquierdo comprendidos entre 200 y 2000.

Una vez interrumpido el flujo de aire, la cantidad de agua restante en el compartimento izquierdo se mide mediante visualización directa. Este procedimiento se repite 20 veces por cada valor de caudal para obtener la media y la dispersión estadística de los resultados.

Este experimento constituye un caso de referencia para la validación inicial de los modelos numéricos utilizados en esta tesis. Las simulaciones CFD que se presentan a continuación reproducen este escenario utilizando distintas formulaciones físicas y modelos de turbulencia, permitiendo comparar el desempeño de cada enfoque frente a datos experimentales reproducibles y bien controlados.

2.7.1 Condiciones de Contorno e Iniciales

Los pequeños orificios de la entrada, mostrados en la Figura 2.4, se modelaron como una superficie homogénea rectangular de 10x17 mm con el mismo caudal de ingreso. La intensidad de turbulencia en la

entrada se estableció en 10 %. La Tabla 2.2 resume las condiciones de contorno utilizadas en las mallas 3D, empleando la terminología nativa de OpenFOAM. Para las mallas 2D, los planos delantero y trasero se definieron como de simetría (empty). Se consideraron 3 mallas 2D y 3 mallas 3D, empleando grillas cartesianas hechas en blockmesh.

La elección de una intensidad de turbulencia del 10 % responde al carácter altamente perturbado de la condición de entrada. En este caso, el flujo se generó por una inyección brusca de aire a través de varios orificios de reducido diámetro, lo cual induce elevados niveles de mezcla y fluctuaciones significativas en la zona de entrada. En la práctica de simulación *CFD*, valores comprendidos entre 5 y 10 % constituyen un rango de referencia ampliamente aceptado para condiciones sin mediciones experimentales específicas, particularmente en flujos internos donde predominan discontinuidades geométricas o inyecciones súbitas de fase gaseosa.

Variable	Entrada	Salida	Pared
α	fixedValue	inletOutlet	zeroGradient
ϵ	fixedValue	inletOutlet	epsilonWallFunction
κ	fixedValue	inletOutlet	kqRWallFunction
ν_t	calculated	calculated	nutkWallFunction
ν'_t	zeroGradient	inletOutlet	zeroGradient
p_{rgh}	fixedFluxPressure	fixedValue	fixedFluxPressure
U	fixedValue	pressureInletOutletVelocity	noSlip

Tabla 2.2: Condiciones de contorno para los modelos 3D.

2.7.2 Modelo Computacional CASO 1

Con el objetivo de evaluar la influencia del tamaño de celda en las soluciones, se generaron diversas mallas cuadradas 2D y hexaédricas 3D utilizando la herramienta blockMesh. La Tabla 2.3 presenta los principales parámetros de las mallas utilizadas.

Las simulaciones con los modelos SVOF, VOF-IsoAdvector y AMR se realizaron empleando el solver interFoam, mientras que los modelos TF se resolvieron con el solver twoPhaseEulerFoam. Todos los cálculos se llevaron a cabo en cómputo paralelo distribuido, utilizando 4 nodos con 4 procesadores cada uno (Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1620 v2 @ 3.70GHz - 1 CPU x 4 procesadores), con Infiniband (QDR 40 Gbps) para la comunicación entre nodos. Para garantizar una correcta precisión numérica, los términos advectivos se discretizaron utilizando el esquema de alta resolución Van Leer para las ecuaciones de cantidad de movimiento, α y turbulencia. La única excepción fue la adopción del método limitedLinearV1 para el término advectivo en la ecuación de cantidad de movimiento en VOF-IsoAdvector, tal como fue recomendado por Roenby et al. [1], con el fin de preservar la alta resolución de la interfase proporcionada por el método isoAdvector.

Los términos temporales en las ecuaciones de cantidad de movimiento y turbulencia se discretizaron mediante el método Backward Euler, con pasos de tiempo adaptativos manteniendo un número de Courant menor a 0.2. Para la ecuación de α , el término temporal se discretizó con el método Forward Euler en todos los casos. En las simulaciones con SVOF y AMR, se empleó la técnica de sub-ciclado (sub-cycling). El acoplamiento presión-velocidad se resolvió mediante el algoritmo PIMPLE, utilizando tres correctores externos y un corrector interno. Los criterios de convergencia absoluta se establecieron en 1×10^{-8} para α y en 1×10^{-7} para el resto de las variables. Dado que se utilizaron mallas cartesianas, no fue necesario aplicar correcciones por no ortogonalidad.

Malla	Tipo de malla	Tamaño de celda (mm)	Número de celdas	Sesgado máx.	Relación de aspecto máx.	No ortogonalidad promedio	No ortogonalidad máx.
M2D-1	2D	2	26,290	1.14	2.22	3.92	29.59
M2D-2	2D	1	105,160	1.15	2.22	3.94	29.80
M2D-3	2D	0.5	420,640	1.15	2.22	3.95	29.90
M3D-1	3D	2	210,320	1.14	2.41	3.26	29.59
M3D-2	3D	1	1,682,560	1.50	2.41	3.25	29.80
M3D-3	3D	0.75	5,030,640	1.50	2.41	3.25	29.86

Tabla 2.3: Parámetros de las mallas utilizadas en la simulación.

Tal como se detallará en el capítulo 3, el Caso 1 resultó fundamental para establecer la capacidad del modelo VOF —y en particular del esquema VOF-IsoAdvector— en la captura precisa de la interfase agua-aire en flujos multifásicos complejos, altamente transitorios y con transiciones entre distintos regímenes de flujo, tales como *bubbly*, segregado y disperso por gotas (*droplet*).

2.8 CASO 2: Flujo a co-corriente y contra-corriente

Este caso de estudio se basa en un ensayo tomado de la literatura, ampliamente utilizado como *benchmark* para la validación de modelos multifásicos TF. En particular, ha sido empleado para evaluar esquemas de amortiguamiento turbulento (*damping*) en la vecindad de la interfase, con el fin de mejorar las estimaciones de transferencia entre fases [43, 45, 64, 65].

A diferencia de los estudios previos, en esta tesis se resolvió el problema utilizando el método VOF, tanto en su versión estándar (SVOF) como con reconstrucción de interfase mediante IsoAdvector. El objetivo de esta simulación es analizar si la metodología definida en el Caso 1 resulta adecuada para un régimen ahora altamente segregado, en el que la turbulencia de la fase gaseosa juega un rol dominante, mientras que las fuerzas de cuerpo, como la gravedad y la masa agregada, presentan una influencia secundaria. En consecuencia, el foco del análisis se centra en los modelos de turbulencia, con especial énfasis en la interacción turbulenta entre fases. Para este estudio se seleccionaron dos experimentos de referencia reportados en la literatura:

- El experimento de Fabre et al. [117], correspondiente a flujo en co-corriente.
- El experimento de Stäbler [62], correspondiente a flujo en contra-corriente.

Ambos experimentos permiten evaluar la evolución de la energía cinética turbulenta y los perfiles de velocidad en configuraciones segregadas.

Como se mencionó, estos ensayos han sido tradicionalmente abordados con el modelo TF, incorporando modelos de amortiguamiento turbulento basados en el enfoque de Egorov [60]. Dicho enfoque se basa en la premisa de que la fase menos densa percibe la interfaz como una pared. Ha sido aplicado, por ejemplo, al modelo $k-\omega$ por Porombka et al. [61], y extendido posteriormente al modelo $k-\epsilon$ por Frederix et al. [63], logrando mejoras significativas en la predicción de flujos segregados.

Considerando que el enfoque TF ha sido extensamente evaluado por diversos autores, en esta tesis se optó por centrar el análisis en el método VOF. Los primeros resultados obtenidos con formulaciones turbulentas estándar mostraron limitaciones importantes, lo que permitió concluir rápidamente que en este tipo de configuraciones resulta esencial la utilización de modelos turbulentos formulados en términos de densidad variable (ρ -var). A continuación, se describen en detalle los ensayos numéricos realizados.

2.8.1 Flujo en co-corriente

El ensayo aire-agua de Fabre et al. [117], correspondiente a flujo en co-corriente, constituye uno de los experimentos más citados en la literatura para la validación de modelos multifásicos. El montaje experimental consiste en un conducto horizontal de 12 m de longitud, a través del cual el agua y el aire circulan de izquierda a derecha, como se ilustra en la Figura 2.5a.

Con el fin de optimizar los tiempos de cómputo, en esta tesis se replicó el experimento en un dominio acortado de 4 m de longitud. En todos los casos simulados se mantuvo un caudal de agua constante de 3 l/s, mientras que se consideraron distintos caudales de aire, reproduciendo tres de los cuatro casos experimentales originales reportados por Fabre:

- **Caso 250:** caudal de aire de 45.4 l/s
- **Caso 400:** caudal de aire de 75.4 l/s
- **Caso 600:** caudal de aire de 118.7 l/s

En el experimento de Fabre et al. el flujo se asume *completamente confinado* en un conducto horizontal, y así se modela en las simulaciones numéricas. Para el rango de Reynolds considerado en este caso ($Re \in [1.5 \times 10^4, 4.0 \times 10^4]$), el régimen es plenamente turbulento y la longitud de entrada requerida para alcanzar condiciones cuasi-desarrolladas puede estimarse del orden $L_e/D_h \sim 10-60$. Al acortar el dominio de 12 m a 4 m, se adoptó una estrategia que mitiga la influencia del desarrollo pared-fluido: (i) imposición en la entrada de un perfil *desarrollado* (con función de pared y $y^+ \approx 30-100$) consistente con el caudal impuesto, (ii) inclusión de un tramo inicial de desarrollo $\gtrsim L_e$ dentro del dominio efectivo de comparación, y (iii) verificación a posteriori de criterios de estacionariedad axial (variación de $\bar{U}$ y de $-dp/dx < 1-2\%$ en la ventana de muestreo) para el D_h empleado. Adicionalmente, se realizaron pruebas de sensibilidad (extensión del dominio y refinamiento axial homogéneo) que mostraron cambios inferiores al 2% en holdup, pérdida de carga media y cizalla interfacial. Con base en lo anterior, se considera que el acortamiento del dominio no introduce sesgos relevantes en la *calibración* de los modelos interfaciales de interés, manteniéndose la física de interacción gas-líquido como el factor dominante en la comparación con los datos de Fabre.

Como paso inicial, se llevó a cabo un estudio de convergencia de malla para el Caso 250, considerando cinco mallas bidimensionales (2D) y cuatro mallas tridimensionales (3D). En todas ellas se aplicó un refinamiento localizado en las regiones cercanas a las paredes, en las zonas de entrada y salida, así como en la vecindad esperada de la interfase aire-agua.

Los parámetros principales de las primeras cuatro mallas 2D y las cuatro mallas 3D se resumen en la Tabla 2.4, mientras que la Figura 2.6 muestra la malla más refinada (M5-2D). Un esquema de refinamiento similar fue adoptado para los Casos 400 y 600.

Las propiedades físicas de los fluidos utilizados en las simulaciones se presentan en la Tabla 2.1, y las condiciones de contorno implementadas en OpenFOAM se detallan en la Tabla 2.5.

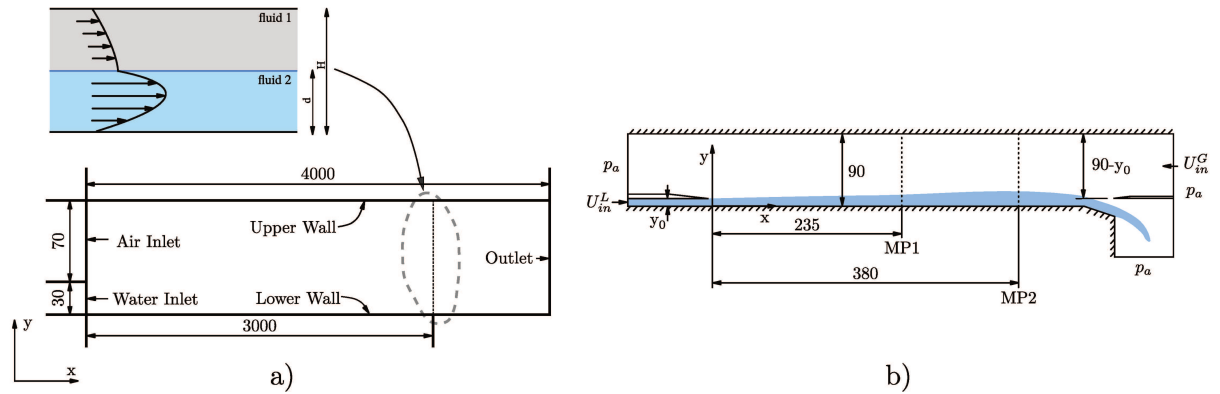


Figura 2.5: Esquema de la geometría utilizada para a) flujo en co-corriente y b) pruebas de flujo en contra-corriente.

Malla	Tipo de malla	Número de celdas	Tamaño mín. en pared (mm)	Tamaño mín. en interfaz (mm)	Relación de aspecto máx.
M1	2D	22,704	0.370	0.388	553
M2	2D	46,060	0.270	0.270	758
M3	2D	93,800	0.187	0.192	1087
M4	2D	191,000	0.133	0.133	1539
M1	3D	454,080	0.370	0.388	81
M2	3D	1,057,500	0.270	0.350	86
M3	3D	2,412,000	0.190	0.190	92
M4	3D	11,460,000	0.134	0.130	196

Tabla 2.4: Parámetros de la malla para la prueba de flujo en co-corriente.

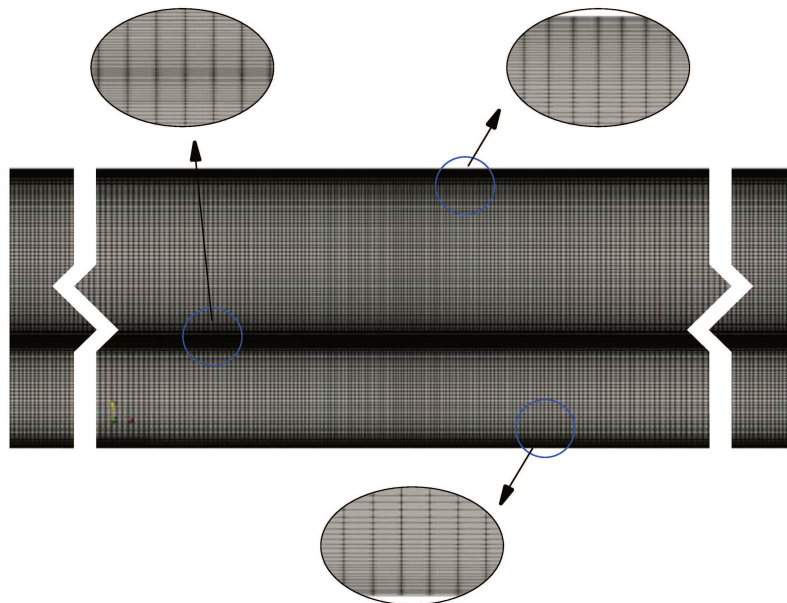


Figura 2.6: Malla M5-2D para co-corriente Caso 250.

Variable	Entrada de aire	Entrada de agua	Salida de aire/agua	Pared
α	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
ϵ	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	epsilonWallFunction
κ	turbulentIntensityKineticEnergyInlet	turbulentIntensityKineticEnergyInlet	zeroGradient	kqRWallFunction
ω	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	omegaWallFunction
ν_t	calculated	calculated	calculated	nutUSpaldingWallFunction
p_{rgh}	fixedFluxPressure	fixedFluxPressure	totalPressure/ fixedValue	fixedFluxPressure
U	volumetricFlowRate timeVaryingMappedFixedValue	volumetricFlowRate timeVaryingMappedFixedValue	inletOutlet	noSlip
R	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	fixedValue

Tabla 2.5: Condiciones de contorno para las pruebas de flujo en co-corriente y contra-corriente.

2.8.2 Flujo en contra-corriente

El experimento de flujo en contra-corriente fue realizado por Stäbler et al. [62]. Las propiedades de los fluidos utilizados en la simulación se detallan en la Tabla 2.1, mientras que una representación esquemática de la geometría experimental se muestra en la Figura 2.5b. Para replicar este ensayo, se generaron tres mallas numéricas, cuyas principales características se presentan en la Tabla 2.6. La Figura 2.7 ilustra la malla más refinada empleada en esta simulación.

En el experimento original, Stäbler reportó la altura del líquido y los perfiles de velocidad y turbulencia en dos ubicaciones horizontales, denominadas MP1 y MP2 (véase Figura 2.5b), considerando distintos caudales de aire y agua. En esta tesis se simuló exclusivamente el Caso 3-23, correspondiente a un caudal de agua de 41.7 l/s y un caudal de aire de 39.6 l/s. El número de Reynolds estimado para estas condiciones es del orden de $Re \approx 25\,000$, lo que confirma el carácter turbulento del régimen. Cabe señalar que el ducto de flujo a contracorriente es relativamente corto, por lo que el desarrollo completo del flujo no llega a establecerse; sin embargo, las mediciones experimentales también fueron realizadas en estas condiciones, lo cual asegura que se trate de una comparación justa. Asimismo, tanto el flujo de entrada del aire como el del agua se impusieron con un perfil desarrollado en las simulaciones.

Las condiciones de contorno utilizadas en OpenFOAM se enumeran en la Tabla 2.5. En particular, los perfiles de velocidad del aire y del agua en las entradas fueron definidos mediante leyes de potencia, según la siguiente expresión:

$$u_x = U_{\max} \left| 1 - \frac{|h - 2y|}{h} \right|^n \quad (2.72)$$

donde h representa la altura de entrada, y la coordenada vertical, y $U_{\max}$ la velocidad máxima, ajustada para alcanzar el caudal especificado. Los valores numéricos de estos parámetros se listan en la Tabla 2.7.

Malla	Tipo de malla	Número de celdas	Máxima distorsión	Máxima razón de aspecto	No ortogonalidad promedio (°)	No ortogonalidad máxima (°)	Tamaño mínimo cerca de pared (mm)	Tamaño mínimo cerca de interfaz (mm)
M1	2D	25,060	0.40	5.96	1.13	18.74	0.425	0.425
M2	2D	37,890	0.42	13.44	1.47	20.88	0.235	0.235
M3	2D	53,100	0.42	41.21	1.5	45.97	0.105	0.105

Tabla 2.6: Parámetros de la malla para la prueba de flujo en contra-corriente.

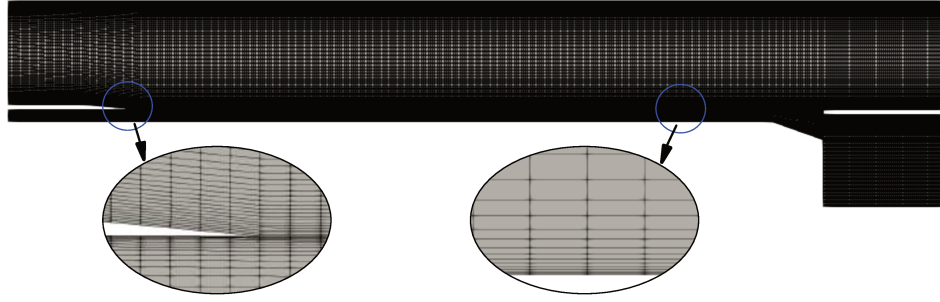


Figura 2.7: Malla 2D-M3 para el test de flujo en contra-corriente.

	Agua	Aire
h (m)	0.009	0.081
n	1/7	1/7
$U_{\max}$ (m/s)	0.68	5.37
Q_{2D} (m ³ /s)	0.0051	0.377

Tabla 2.7: Parámetros de los perfiles de velocidad de entrada para la prueba de flujo en contra-corriente.

2.8.3 Modelo computacional CASO 2

Las simulaciones se llevaron a cabo en un clúster equipado con procesadores Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1620 v2 @ 3.70GHz - 1 CPU x 4 núcleos, con conectividad Infiniband (QDR 40 Gbps), utilizando cómputo distribuido en paralelo. Los solvers utilizados fueron InterFoam e InterIsoFoam de OpenFOAM-v2206 para la obtención de las soluciones numéricas. Para garantizar la precisión, los términos advectivos en las ecuaciones de cantidad de movimiento, turbulencia y fracción volumétrica α fueron discretizados utilizando el esquema de alta resolución Van Leer en el caso de VOF algebraico. Sin embargo, para los casos isoAdvector, se empleó el método limitedLinearV1.

Los resultados reportados en este estudio, tanto para flujos en co-corriente como en contra-corriente, fueron obtenidos mediante el método de avance temporal [118], el cual resuelve los problemas transitorios hasta que la solución se estabiliza y las principales variables de flujo permanecen prácticamente constantes. Para el acoplamiento presión-velocidad, se utilizó el algoritmo PIMPLE con 4 correctores externos y 3 correctores internos en cada paso de tiempo. Con el fin de garantizar la estabilidad y precisión en las ecuaciones de advección, los términos temporales en las ecuaciones de cantidad de movimiento y turbulencia fueron discretizados mediante el método de Euler hacia atrás (Backward Euler), utilizando pasos de tiempo adaptativos para mantener un número de Courant menor a 0.2. Dentro de cada iteración temporal Δt , las ecuaciones de la interfase fueron resueltas explícitamente utilizando un número de sub-ciclos $n_{sc} = 3$, con un intervalo de sub-ciclo dado por:

$$\Delta t_{sc} = \frac{\Delta t}{n_{sc}} \quad (2.73)$$

La solución se obtuvo mediante MULES. El criterio de convergencia absoluta para todas las variables fue fijado en 1×10^{-7} . Se emplearon mallas cartesianas para el test de flujo en co-corriente, mientras que para el test de flujo en contra-corriente se utilizaron mallas híbridas, lo que requirió dos correcciones de no-ortogonalidad.

2.9 CASO 3: CCFL en una geometría tipo *hot-leg*

En esta sección se analiza el fenómeno de CCFL en una configuración experimental representativa de una cañería típica de rama caliente (*hot-leg*) de un reactor nuclear tipo PWR. Esta configuración experimental es conocida como ensayo COLLIDER, y fue desarrollada y parcialmente simulada por Al Issa y Macian-Juan [12], Al Issa [13], Al Issa y Macian-Juan [79].

En el marco de esta tesis, se seleccionaron y simularon algunos de los casos experimentales propuestos por Issa, utilizando dos enfoques numéricos: el código RELAP5Mod3 y una aproximación tridimensional basada en el método VOF implementado en OpenFOAM. Esta última incorpora el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ RNG con formulación de densidad variable (ρ -var), lo cual permite una mejor representación de los efectos asociados a la interfase aire-agua.

Se realizaron ensayos con agua y aire en condiciones ambientales para un rango de $0.1 < J_f^{*0.5} < 0.4$ y $0.36 < J_g^{*0.5} < 0.7$, con el objetivo de abarcar todos los regímenes de flujo. El número de Reynolds asociado a dichas condiciones se encuentra en el intervalo $Re \approx [64\,000; 180\,000]$, lo cual confirma el carácter plenamente turbulento del régimen. Cabe destacar que en esta simulación no se pretende reproducir en detalle el desarrollo de la capa límite en la tubería, sino capturar de manera adecuada la interacción aire-agua asociada al fenómeno de CCFL. En consecuencia, la malla se construye de manera casi homogénea a lo largo de la *hot-leg*, con refinamientos localizados en las proximidades de la interfase y de las paredes donde el fenómeno resulta más relevante. De esta forma, se evita destinar celdas a la resolución del desarrollo de la capa límite en la entrada, priorizando en cambio la adecuada representación de las transferencias interfaciales y de los mecanismos de bloqueo característicos del CCFL.

El objetivo principal de este estudio es evaluar la capacidad predictiva de ambos modelos para reproducir el fenómeno de CCFL bajo condiciones transitorias, comparando los resultados numéricos con datos experimentales disponibles. Para ello, se lleva a cabo un análisis cualitativo y cuantitativo del comportamiento del flujo en distintas regiones del dominio, considerando tanto la evolución temporal del fenómeno como las distribuciones de velocidad y fracción de volumen. Además, se discute la aplicabilidad y precisión de la formulación tridimensional CFD–VOF frente al enfoque clásico unidimensional de RELAP5.

2.9.1 Modelo geométrico 3D

La representación geométrica del modelo se ilustra en la Figura 2.8. La configuración está compuesta por dos volúmenes conectados mediante un conducto que representa la rama caliente (*hot-leg*) de un reactor. El volumen izquierdo modela el recipiente a presión del reactor (RPV), mientras que el volumen derecho simula la entrada al GV.

Dada la complejidad del flujo tridimensional que se desarrolla en el sistema, se optó por modelar la geometría completa de la instalación experimental, sin aplicar simplificaciones por simetría. La entrada de aire se ubica en la misma posición que en el experimento original, aunque se omite la expansión en la salida del ventilador; en su lugar, el flujo de aire se impone directamente sobre una pared del RPV, con un área de 0.1257 m^2 .

En el GV se incorpora un tabique vertical que lo divide en dos compartimentos, siguiendo la disposición experimental. El compartimento A corresponde a la entrada de agua, mientras que el compartimento B acumula el agua arrastrada por el aire durante la ocurrencia del CCFL. La inyección de aire se realiza desde el RPV, tal como en la instalación real. Para el análisis cuantitativo, tanto la velocidad como el caudal másico de cada fase se registran en tres planos transversales ubicados a lo largo del conducto, denominados *Display 1*, *Display 2* y *Display 3*.

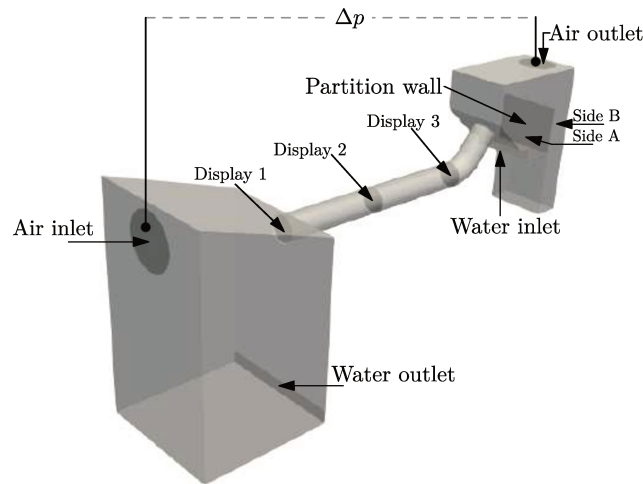


Figura 2.8: Modelo geométrico 3D-CFD para el caso CCFL tipo hot leg.

Malla	Número de celdas	Skewness máximo	Relación de aspecto	No ortogonalidad promedio (°)	No ortogonalidad máxima (°)	Tamaño medio de celda (mm)
M0	197549	0.784	11.276	16.311	62.475	15
M1	507888	0.937	14.841	11.411	64.155	10
M2	1897477	0.927	12.912	8.868	61.691	5
M3	6570426	1.003	15.177	6.142	75.6783	2.5

Tabla 2.8: Parámetros principales de las mallas utilizadas en la simulación del fenómeno CCFL.

2.9.2 Descripción de la malla 3D

Se desarrollaron cuatro mallas computacionales con el propósito de evaluar la sensibilidad de las predicciones del fenómeno de CCFL frente al tamaño de celda en la región de la *hot-leg*. Las principales características de estas mallas se resumen en la Tabla 2.8. La Figura 2.9 presenta una vista tridimensional y frontal de la malla M1, que fue la más utilizada en las simulaciones, junto con una sección transversal de la tubería que ilustra los espesores promedio de celda en las zonas críticas del CCFL para las mallas M1, M2 y M3. Esta comparación permite observar las configuraciones de malla con tamaños promedio de celda de 10 mm (M1), 5 mm (M2) y 2.5 mm (M3). La malla M0, que no se muestra en la figura, posee un tamaño promedio de celda de 15 mm y fue incluida con el fin de ampliar el análisis de convergencia de malla. Adicionalmente, se aplicó un refinamiento local en las proximidades de las paredes, así como en las zonas de entrada y salida de la tubería, con el objetivo de representar con mayor precisión los efectos de la capa límite y las estructuras de flujo que se desarrollan en dichas regiones.

2.9.3 Nodalización en RELAP5Mod3

Para representar el experimento descrito en [12, 13, 79], se empleó en *RELAP5Mod3* la nodalización esquemática ilustrada en la Figura 2.10. La geometría del sistema fue modelada mediante una combinación de conductos (*pipes*) y ramificaciones (*branches*), interconectados a través de uniones simples (*single junctions*).

En esta configuración, el *Pipe 6* representa la región superior del recipiente a presión del reactor (RPV), el *Pipe 2* modela la parte inferior donde se acumula el agua, y el *Pipe 1* corresponde al tramo de la rama caliente (*hot leg*). El GV se discretizó utilizando tanto ramificaciones como conductos: las

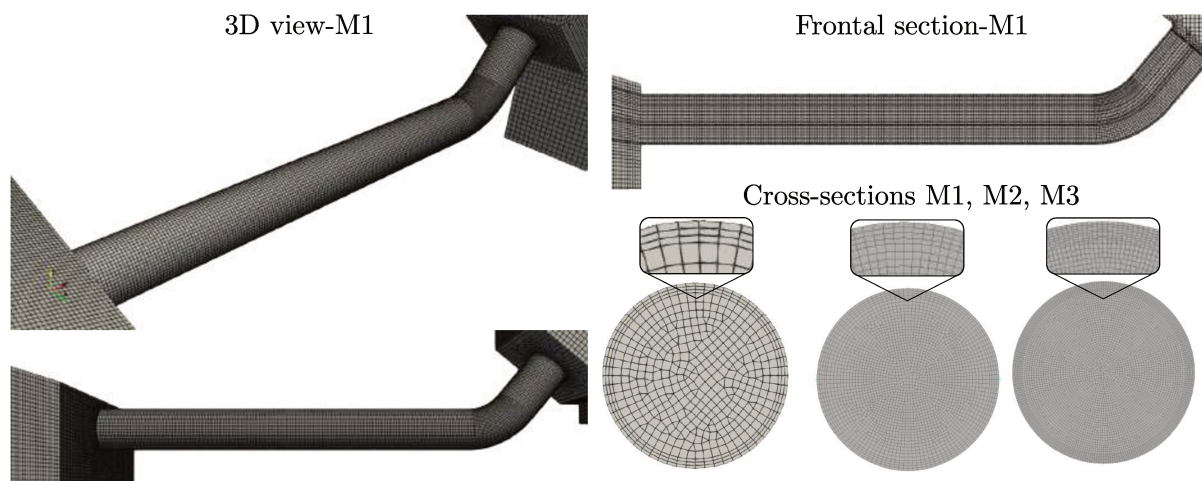


Figura 2.9: Vista tridimensional, frontal y transversal de la malla M1. La sección transversal del conducto permite visualizar la variación en el tamaño promedio de celda en las zonas críticas del flujo.

Elemento	Número	Pérdida directa	Pérdida inversa
SNGLJUN	8	0.5	1
PIPE	1	0.25	0.25
BRANCH	14	1	1
SNGLJUN	17	0.5	0.5
SNGLJUN	22	1	1

Tabla 2.9: Coeficientes de pérdidas k .

Branches 14 y *24* representan su sector superior, mientras que la *Branch 20* y el *Pipe 19*, separados por una placa, modelan la zona de acumulación de agua remanente.

Las condiciones de contorno para los caudales de entrada de aire y agua fueron impuestas mediante uniones dependientes del tiempo (*Time-Dependent Junctions*). Para evitar el llenado del RPV, se incorporó una unión dependiente del tiempo adicional (*Time-Dependent Junction 3*), la cual extrae el agua acumulada en el *Pipe 2* utilizando un lazo de control que monitorea el nivel del líquido. La salida del aire se representó mediante una condición de contorno de presión, implementada con el *Time-Dependent Volume 15*.

La discretización adoptada mantuvo una relación característica —definida como el cociente entre el tamaño de celda o nodo y el diámetro hidráulico— superior a 0.5, cumpliendo así con las recomendaciones disponibles en la literatura [119]. Además, se evaluaron modificaciones en la discretización, como la sustitución de las *Branches 14* y *24* por *Pipes*, sin observar diferencias significativas en los resultados numéricos.

Los coeficientes de pérdida de carga (k) correspondientes al codo del *Pipe 1*, así como a sus conexiones de entrada y salida, y a otros componentes del sistema, se resumen en la Tabla 2.9. Dichos coeficientes fueron obtenidos a partir de correlaciones empíricas estándar disponibles en la literatura técnica para elementos singulares en sistemas de tuberías, particularmente del manual de Crane [120]. Cabe señalar que el modelo de CCFL fue activado exclusivamente en el *Pipe 1*, tal como se describió anteriormente en la Sección 2.5.2. Por último, las propiedades termofísicas de los fluidos empleados en ambas simulaciones se detallan en la Tabla 2.1.

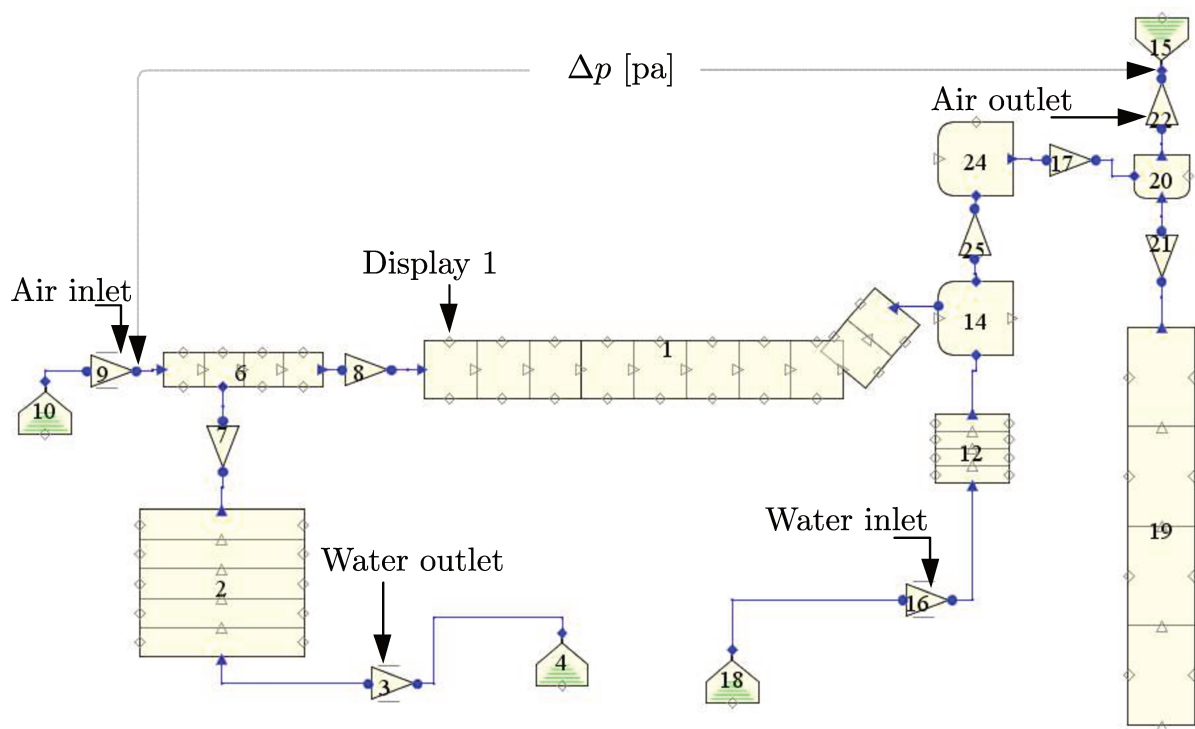


Figura 2.10: Nodalización para el experimento de la hot-leg.

2.9.4 Casos de estudio

El procedimiento experimental llevado a cabo por [12, 13] constó de tres etapas. En primer lugar, se hizo circular un caudal de agua fijo mientras se inyectaba un caudal de aire reducido, hasta que se alcanzaron condiciones de estado estacionario. En segundo lugar, el caudal de aire se incrementó gradualmente en intervalos de 30 segundos hasta alcanzar la condición de CCFL. Finalmente, el caudal de aire se redujo de forma progresiva hasta recuperar las condiciones estacionarias iniciales.

Las regiones 1 a 4 consideradas en este estudio fueron definidas de acuerdo con la clasificación propuesta por [13] para el experimento COLLIDER, el cual se reproduce en el presente trabajo. Dicha clasificación se basa en el valor del parámetro adimensional de velocidad superficial del líquido ($J_f^{*0.5}$), que influye significativamente en el mecanismo que desencadena el inicio del CCFL. Cada región corresponde a un comportamiento bifásico específico observado experimentalmente en función de $J_f^{*0.5}$, tal como se resume a continuación:

- **Región 1** ($0.085 < J_f^{*0.5} < 0.125$): Inicio gradual del CCFL, con acumulación de líquido cerca de la curvatura.
- **Región 2** ($0.135 < J_f^{*0.5} < 0.175$): Inicio repentino del CCFL en la zona de la curvatura.
- **Región 3** ($0.185 < J_f^{*0.5} < 0.265$): Modo dual. Se observa un inicio moderado del CCFL en la entrada debido a un activo arrastre de gotas, seguido de un bloqueo más intenso en la curvatura.
- **Región 4** ($0.275 < J_f^{*0.5} < 0.305$): El CCFL comienza con un comportamiento oscilatorio en la entrada y evoluciona hacia un bloqueo súbito y severo en la curvatura.

Esta división regional permite analizar el CCFL bajo diferentes condiciones de caudal líquido, facilitando la comparación entre los resultados numéricos y experimentales.

Casos simulados: Se realizaron cinco simulaciones utilizando tanto el modelo CFD-3D como RELAP5: dos correspondientes a la Región 1 y una para cada una de las Regiones 2, 3 y 4. En la Región 1, el parámetro adimensional de líquido se fijó en $J_f^{*0.5} = 0.105$, evaluando dos estrategias diferentes para la inyección de aire. Para las Regiones 2, 3 y 4 se utilizaron valores de $J_f^{*0.5}$ de 0.155, 0.225 y 0.285, respectivamente.

En la Región 1 se definieron dos escenarios de inyección de aire, denominados *Test 1* y *Test 2*. El *Test 1* reprodujo la rampa de inyección utilizada en los experimentos reportados en [12, 13, 79], aplicándola tanto en las simulaciones CFD como en RELAP5. Esta rampa consistió en incrementos escalonados de la velocidad del aire en la entrada cada 30 s, hasta alcanzar la condición de CCFL, seguidos de una rampa descendente con los mismos intervalos hasta recuperar el régimen de contraflujo. No obstante, debido al alto costo computacional de las simulaciones tridimensionales, en CFD se redujo el intervalo de avance temporal a 10 s y se simuló únicamente la fase ascendente de la rampa.

El *Test 2* consistió en incrementos de 10 s hasta alcanzar la obstrucción completa del flujo líquido. En este caso, tanto CFD-3D como RELAP5 utilizaron incrementos idénticos, lo que permitió una comparación directa entre ambos enfoques. Las simulaciones correspondientes a las Regiones 2, 3 y 4 adoptaron también la metodología del *Test 2*, es decir, incrementos de 10 s hasta el bloqueo total del flujo líquido.

En todos los caso las paredes del dominio fueron configuradas con una condición *no-slip*. La Tabla 2.10 se presenta un resumen de las condiciones de contorno utilizadas en OpenFOAM. Inicialmente el dominio se llenó de líquido hasta una altura correspondiente al momento en que el agua del GV comienza a ingresar a la *hot-leg*. El resto del dominio se llenó con aire, tal como se ilustra en la Figura 2.11.

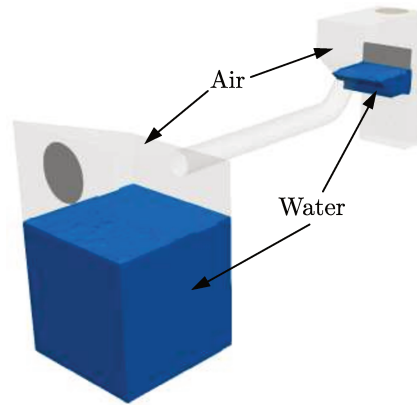


Figura 2.11: Condición inicial: Distribución de líquido y aire.

Variable	Entrada	Salida	Pared
α	fixedValue	inletOutlet	zeroGradient
ϵ	fixedValue	inletOutlet	epsilonWallFunction
κ	fixedValue	inletOutlet	kqRWallFunction
ν_t	calculated	calculated	nutkWallFunction
ν'_t	zeroGradient	inletOutlet	zeroGradient
p_{rgh}	fixedFluxPressure	fixedValue	fixedFluxPressure
U	flowRateInletVelocity (table)	pressureInletOutletVelocity	noSlip

Tabla 2.10: Condiciones de contorno en el modelo de OpenFOAM.

2.9.5 Modelo Computacional CASO 3

Las simulaciones 3D-VOF se llevaron a cabo en un clúster equipado con 2 procesadores AMD EPYC 7401, basado en la arquitectura Zen1 (Naples), con 8 canales de memoria por procesador y conectividad Infiniband FDR-56. El sistema fue configurado con 64 GiB o 128 GiB de memoria DDR4-2666 MT/s y se utilizó computación paralela distribuida. Para la obtención de las soluciones numéricas, se empleó el solver InterFoam de OpenFOAM-v2206. A fin de garantizar precisión, el esquema VOF algebraico utilizó el esquema de alta resolución Van Leer para la discretización de los términos advectivos en las ecuaciones de cantidad de movimiento, turbulencia y fracción de volumen α . El acoplamiento presión-velocidad se resolvió mediante el algoritmo PIMPLE, configurado con 4 correctores externos y 3 correctores internos por paso de tiempo. Para asegurar estabilidad y precisión en las ecuaciones de advección, los términos temporales en las ecuaciones de cantidad de movimiento y turbulencia se discretizaron mediante el método Euler Backward, utilizando pasos de tiempo adaptativos y manteniendo un número de Courant menor a 0.2. Durante cada iteración temporal Δt , las ecuaciones de la interfase fueron resueltas explícitamente mediante 3 subciclos ($n_{sc} = 3$), con un intervalo de subciclo definido como $\Delta t_{sc} = \frac{\Delta t}{n_{sc}}$, empleando MULES para InterFoam. El criterio absoluto de convergencia para todas las variables se estableció en 1×10^{-7} .

2.10 CASO 4: Pérdida de refrigerante en un reactor CANDU-6

La nodalización detallada del reactor CANDU-6 fue desarrollada de forma conjunta entre el CIMEC y la Autoridad Regulatoria Nuclear Argentina en trabajos previos a esta tesis. En esta sección se presenta únicamente una descripción general del modelo implementado en RELAP5, el cual es empleado aquí con el propósito de analizar la relevancia del modelo CCFL en eventos accidentales de planta.

La presente sección expone la metodología adoptada para el análisis de un evento del tipo *Loss-of-Coolant Accident* (LOCA) correspondiente a una rotura del 40 % del área transversal de la tubería de succión de la bomba 3312-PM4 en una central nuclear CANDU-6. Para tal fin se empleó el código termo-hidráulico Relap5-Mod3, ampliamente validado para el estudio de transitorios en sistemas de potencia nuclear.

El principal objetivo del estudio fue evaluar la influencia del modelo del CCFL, implementado en RELAP5 según la formulación de Riemke [80] y Kim y No [78], sobre la evolución dinámica de variables críticas de planta, tales como el caudal de refrigerante, masa de refrigerante en el núcleo y la efectividad del Sistema de Refrigeración de Emergencia (ECCS). Al tratarse del último estudio abordado en esta tesis, el análisis del LOCA 40 % no solo permite consolidar la metodología desarrollada a lo largo del trabajo, sino también cerrar el ciclo de evaluaciones con un caso representativo, de gran severidad, en el cual se pone en evidencia la relevancia —o no— del modelado de fenómenos complejos como el CCFL en la simulación integral de escenarios accidentales en reactores de tipo CANDU.

El reactor CANDU-6 es un reactor de agua pesada presurizada (PHWR) que opera a una presión nominal del circuito primario de 10 MPa (aproximadamente 100 bar) y alcanza una potencia térmica bruta del orden de 2000 MWt. Su núcleo está compuesto por 380 canales de combustible dispuestos horizontalmente dentro de una vasija denominada *Calandria*. Esta configuración permite el uso de uranio natural como combustible y el reabastecimiento en línea durante operación normal.

El *Primary Heat Transport System* (PHTS) está conformado por dos circuitos cerrados de refrigeración que operan en paralelo, configurados en forma de doble lazo con geometría en “8”. Si bien estos circuitos funcionan de manera independiente, se encuentran interconectados en diversos puntos mediante sistemas auxiliares. Esta configuración es clave, dado que solo uno de los lazos cuenta con presurizador. El PHTS incluye la red de tuberías de transporte del refrigerante, cuatro generadores de vapor (GV) verticales, cuatro bombas principales, así como cuatro colectores de entrada y cuatro de salida. Adicionalmente, existen dos líneas de interconexión entre las *hot legs* de cada circuito, cuya función principal

es mejorar la estabilidad operativa ante perturbaciones. La Figura 2.12 muestra un diagrama esquemático del sistema.

La temperatura del refrigerante a la entrada del núcleo oscila entre 260°C y 267°C , dependiendo del tipo y antigüedad de la planta, mientras que la temperatura de salida alcanza valores cercanos a los 309°C , en régimen bifásico con baja fracción de vapor. El caudal de circulación por lazo es del orden de 2100 kg/s . Cada canal de combustible es alimentado por tubos de entrada y salida conectados a los colectores a través de ramas (*feeder tubes*). Además, el PHTS está acoplado a diversos sistemas auxiliares, tales como el sistema de control de presión, el sistema de purificación, el sistema de *feed and bleed*, y el Sistema ECCS.

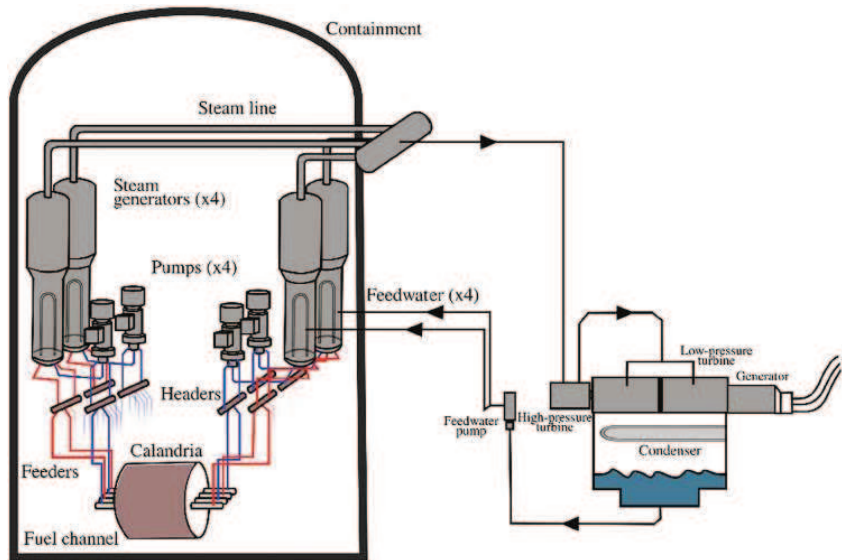


Figura 2.12: Diagrama de CANDU6 PHTS.

2.10.1 Modelo en RELAP5

La Figura 2.13 presenta un esquema del modelo del PHTS implementado en RELAP5. En este se incluyen los cuatro lazos, cada uno con su bomba y generador de vapor, además de las líneas de bypass y el sistema de alimentación y purga (*Feed and Bleed*, F-B). El sistema de control de presión comprende un presurizador con resistencias eléctricas y un tanque degasificador equipado con válvulas de alivio de vapor. En la figura también se indica la inyección del ECCS, que se simuló de forma segregada, ya que utiliza agua liviana en lugar de agua pesada. Esta metodología resuelve el acoplamiento entre ambos sistemas mediante un balance de presión y caudal másico. El sistema F-B fue implementado de manera similar. El modelo incluye además los colectores de entrada y salida, así como los tubos alimentadores, tal como se observa en la Figura 2.13. Los dos lazos están interconectados por medio del presurizador y del sistema F-B. Para detalles completos sobre la nodalización, se remite al lector a [121].

Los 380 canales de combustible del reactor CANDU-6 fueron representados en el modelo por 20 canales equivalentes, diez en cada lazo. De esta forma, el núcleo se discretizó en cinco zonas hidráulicas. Cada conjunto de combustible, compuesto por 12 elementos, fue modelado mediante 12 nodos axiales. La potencia térmica se introdujo a través de un modelo de cinética puntual para la dinámica del núcleo, con los coeficientes de realimentación de reactividad correspondientes. Detalles adicionales del modelo pueden encontrarse en [122].

El sistema secundario de la planta CANDU-6 está conformado por cuatro GV alimentados por los sistemas de agua de alimentación y cuatro líneas principales de vapor vivo, que confluyen en un colector

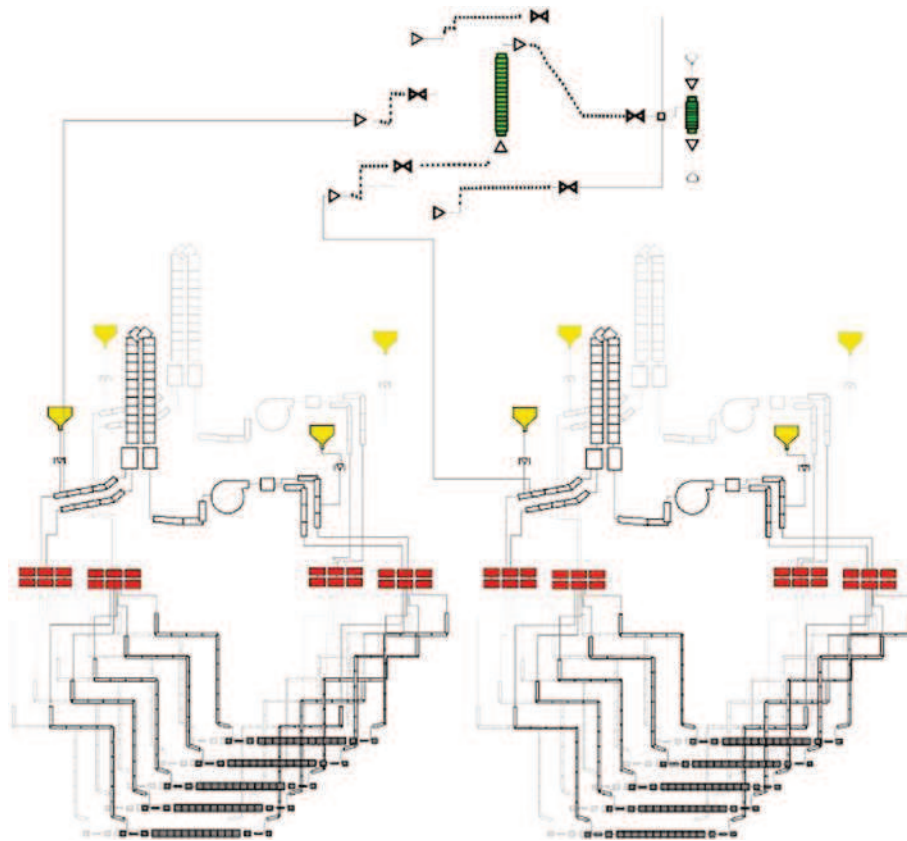


Figura 2.13: CANDU-6 PHTS nodalización en RELAP5.

conectado a la turbina de vapor. El modelo desarrollado incorpora una porción significativa del sistema secundario de la planta, aunque ciertos componentes fueron simplificados. En particular, se incluyeron las líneas de agua de alimentación (con bombas principales y auxiliares), los GV, las líneas de vapor, las válvulas de control de nivel de los GV, las válvulas de descarga de vapor al condensador (*Condenser Steam Discharge Valves*, CSDV) y las válvulas de control de la turbina (*Turbine Governor Valves*, TGV). Asimismo, se implementaron las válvulas principales de seguridad de vapor (*Main Steam Safety Valves*, MSSV) y las válvulas de descarga atmosférica (*Atmospheric Steam Discharge Valves*, ASDV). La turbina y el condensador se representaron como condiciones de contorno (véase la Figura 2.14), de forma análoga a la entrada de agua de alimentación al sistema de bombeo.

La línea de agua de alimentación está compuesta por las bombas principales y auxiliares, junto con las válvulas de control de nivel, aunque en el modelo fueron simplificadas en una sola válvula equivalente. Un esquema representativo de una de las cuatro líneas del sistema de alimentación y de vapor incluidas en el modelo de la planta nuclear se muestra en la Figura 2.14.

El programa completo de lógica de control del nivel y de la presión fue implementado en el modelo. De este modo, el control de nivel de los GV, así como la lógica de actuación de las válvulas MSSV, ASDV, TGV y CSDV, fueron reproducidos siguiendo los pasos secuenciales que ejecuta el computador de planta para determinar la posición requerida de las válvulas de control de vapor.

Tal como se mencionó previamente, el presente trabajo tiene por objetivo evaluar la sensibilidad del fenómeno de CCFL en la planta nuclear CANDU-6. Para ello, el fenómeno fue implementado en el modelo de caso base mediante la correlación de Wallis [80] para tuberías horizontales, aplicada en las cuatro ramas horizontales (*hot legs*), específicamente en la segunda celda de cada rama. Este modelo se denominó **CCFL1**. Adicionalmente, se implementó un segundo modelo que considera el CCFL en las

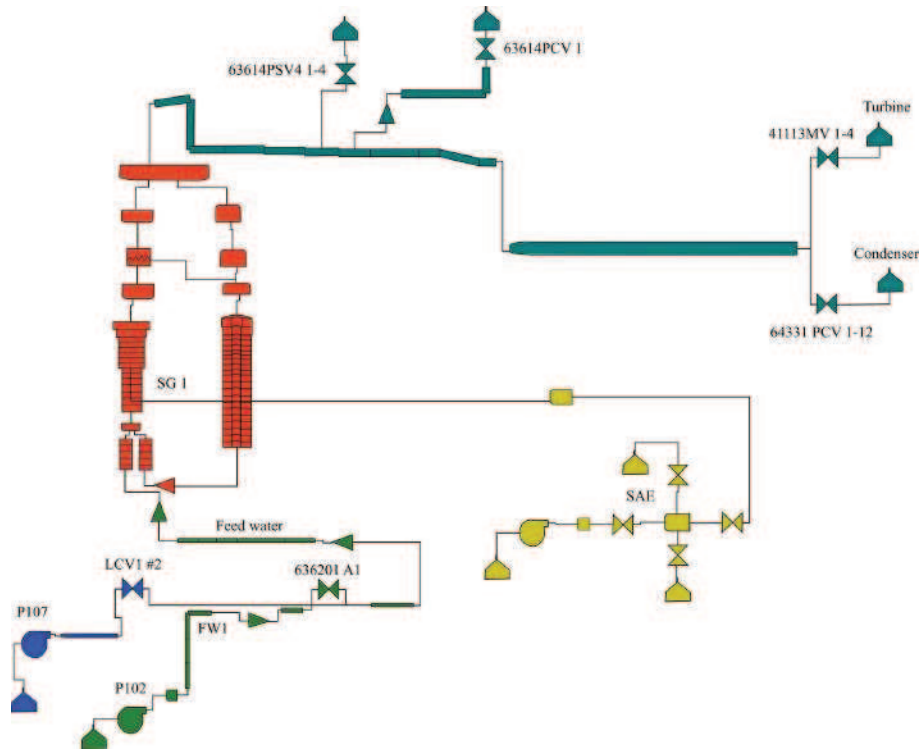


Figura 2.14: Circuito secundario de uno de los cuatro GV.

cuatro ramas horizontales, al igual que en el caso anterior, pero además impone esta limitación en todos los tubos alimentadores del núcleo en sus tramos verticales (segunda celda vertical). Para este segundo caso, el CCFL se representó mediante la correlación de Wallis [80] para tuberías verticales. Este modelo se denominó **CCFL2**.

2.10.2 Sistemas de seguridad considerados

Todos los sistemas de seguridad fueron incluidos en el modelo de la planta, a saber: los sistemas de parada del reactor (SDS), el sistema de refrigeración de emergencia del núcleo (ECCS) y el sistema de enfriamiento rápido (*Crash-Cooldown System*, CCDS):

- **Sistema de Refrigeración de Emergencia del Núcleo (ECCS).** Se consideraron las etapas de inyección a alta, media y baja presión.
- **Sistemas de Parada del Reactor.** El modelo incorpora los dos sistemas de parada con la lógica real de disparo: *SP1*, que consiste en la caída por gravedad de las barras de seguridad, y *SP2*, que corresponde a la inyección de gadolinio en la vasija Calandria.
- **Sistema de Contención y Rociado.** Se desarrolló un modelo simplificado para simular la presión dentro del edificio de contención y su control mediante el rociado de agua líquida, destinado a reducir la temperatura. El modelo adopta un enfoque cero-dimensional para el volumen total de la contención. Se supone que el aire es seco y que la evaporación del líquido se modela a partir de un factor de eficiencia específico. El sistema de enfriamiento de aire y el recombinador de hidrógeno no fueron considerados en el modelo.
- **Enfriamiento Rápido (Crash-Cooldown).** Se contempla la rápida descarga de vapor desde el

circuito secundario hacia la atmósfera, con el fin de incrementar la transferencia de calor y reducir la temperatura del PHTS, disponible únicamente en escenarios de LOCA.

Además, se incorporaron al modelo los siguientes sistemas y componentes de la planta: la vasija Calandria con su sistema de enfriamiento externo, el sistema de alimentación y purga (F-B), el suministro de agua de emergencia, el sistema de enfriamiento en parada y el bloque de control de los sistemas de reducción de potencia (*Step-Back* y *Set-Back*). Asimismo, se incluyó la inercia térmica de los componentes sólidos a través de la incorporación de sus volúmenes reales y de las propiedades de material en las diferentes estructuras de calor.

2.10.3 Modelo de rotura

Se asume una rotura del 40 % en la línea de succión de la bomba 3312-PM4, ubicada a la salida del GV. Para representar el caudal crítico de descarga, se aplica el modelo de flujo crítico de Henry-Fauske [123], considerando un tiempo de rotura de 10 ms (instantánea).

El modelo implementa dos válvulas para imponer la descarga hacia la contención, tanto desde el colector como desde la bomba. Adicionalmente, se incorpora otra bomba para establecer una conexión parcial entre el generador de vapor y la bomba (40 %), representando así una rotura parcial de las tuberías.

El modelo de contención considera el caudal másico y la entalpía del flujo de fuga con el fin de resolver el balance térmico y estimar la presión dentro del recinto de contención.

Supuestos del accidente

- Pérdida de suministro eléctrico de Clase IV inmediatamente después de la parada del reactor.
- Núcleo en condición envejecida (4015 EFPD).
- Sin acción al Sistema de Regulación del Reactor (RRS).
- Activación del ECCS al generarse la señal LOCA.

Condiciones iniciales y de contorno

Las condiciones iniciales del modelo y las hipótesis específicas adoptadas para este escenario se resumen a continuación:

- La potencia transitoria inicial se fija en el 103 % de la potencia nominal (FP).
- La parada del reactor ocurre ante la segunda señal de disparo (SP2); sin embargo, se aplica la curva de inserción de reactividad correspondiente a SP1, dado que presenta una respuesta más lenta que SP2.
- No se consideró la apertura de las válvulas de descarga de vapor a la atmósfera (ASDVs) ni a las válvulas de descarga hacia el condensador (CSDVs).
- En caso de apertura de las válvulas de seguridad del vapor principal (MSSVs), se asume la falla de 8 de las 16 válvulas disponibles.
- La señal de LOCA se dispara por baja presión (5.9 MPa) en 3 de los 3 colectores instrumentados, conjuntamente con una presión elevada en la contención.
- La señal del sistema de aislamiento del circuito se genera cuando la presión desciende por debajo de 5.62 MPa en 2 de los 3 colectores, considerando un tiempo de cierre de válvulas de 20 s.

- El sistema de ECCS de media presión se activa 90 s después de la señal de LOCA.
- El sistema de ECCS de baja presión se inicia cuando se alcanza el nivel mínimo en el tanque de *dousing*.
- La temperatura de inyección del ECCS se asume conservadoramente en 49°C para todos los subsistemas.
- El sistema de *Crash-Cooldown* se activa 30 s después de la señal de LOCA. El tiempo de apertura de las válvulas MSSV se fija en 2 s.
- No se consideraron los mecanismos de *Stepback* ni *Setback*.
- Se consideran operativas únicamente 4 de las 6 válvulas de rociado del sistema de *dousing*.
- El modelo de contención asume equilibrio térmico entre los gases no condensables y el vapor.
- El valor de referencia de la presión de contención se determina a partir de las condiciones de estado estacionario (106 kPa).

Antes de la iniciación del accidente, se verifica que el modelo alcanza condiciones de estado estacionario y que la planta opera en régimen normal.

Capítulo 3

Resultados y aportes

En este capítulo se presentan los principales resultados obtenidos en los Casos 1, 2, 3 y 4, previamente descritos en la sección de Metodología. Cada conjunto de resultados se vincula con los objetivos específicos planteados en esta tesis, manteniendo el mismo orden de exposición adoptado en el Capítulo 2. Esta organización permite un análisis sistemático y coherente de los distintos escenarios evaluados.

En primer lugar, se abordan los resultados correspondientes al **Caso 1**, en el que se analiza el comportamiento de la interfase agua-aire en condiciones de flujo segregado. El estudio combina observaciones experimentales con simulaciones numéricas empleando distintos métodos de seguimiento de interfase, tanto en el marco de los modelos de dos fluidos (TF) como del método Volumen de Fluido (VOF). A continuación, el **Caso 2** examina la interacción turbulenta entre fases en flujos a co-corriente y contracorriente. Se evalúan distintos modelos de cierre para la turbulencia, haciendo énfasis en su influencia sobre la dinámica interfacial en regímenes altamente segregados. El **Caso 3** presenta los resultados de simulaciones tridimensionales en una configuración experimental representativa de una rama caliente (*hot leg*) de un reactor tipo PWR. Se emplean herramientas CFD-VOF y el código RELAP5Mod3 para comparar de manera directa la capacidad predictiva de ambos enfoques en la caracterización del fenómeno de CCFL. Finalmente, el **Caso 4** analiza el impacto de incorporar un modelo de CCFL en RELAP5Mod3 dentro del contexto de un evento de pérdida de refrigerante en un reactor tipo CANDU-6, evaluando su efecto sobre las predicciones del sistema de enfriamiento de emergencia. Cada uno de estos casos permite contrastar enfoques numéricos con datos experimentales o referencias bibliográficas, aportando elementos clave para mejorar la comprensión y modelado del fenómeno CCFL en situaciones de relevancia para la seguridad nuclear.

3.1 CASO 1. Columna agua-aire

En la Sección 2.7 se presenta el Caso 1. Los resultados expuestos constituyen una síntesis de los reportados previamente por Sarache et al. [15]. La Figura 3.1 presenta los resultados experimentales de la cantidad de agua remanente en el compartimento izquierdo al final de la prueba para los distintos caudales de aire analizados. Las barras de error fueron calculadas a partir de la varianza de 20 repeticiones realizadas para cada caudal de aire. Como es de esperar, al aumentar el caudal de aire, se evacua una mayor cantidad de agua y la varianza se incrementa. La Figura 3.2 muestra las imágenes filtradas para el caudal de aire de 30 l/min. El filtrado aplicado consistió en un procesamiento promedio de conjunto (*ensemble filtering*) de las secuencias experimentales obtenidas para cada caudal, con el propósito de reducir el ruido óptico y resaltar las estructuras coherentes del flujo. Los ensayos se realizaron durante aproximadamente 5 segundos, aunque la mayor parte del líquido es arrastrado durante el primer segundo.

Por esta razón, la secuencia de imágenes se presenta para este período. Inicialmente se forma una burbuja de gran tamaño alrededor de la entrada de aire, lo que provoca la elevación y oscilación del frente agua-aire. A medida que la burbuja crece y asciende desplaza el líquido hacia arriba.

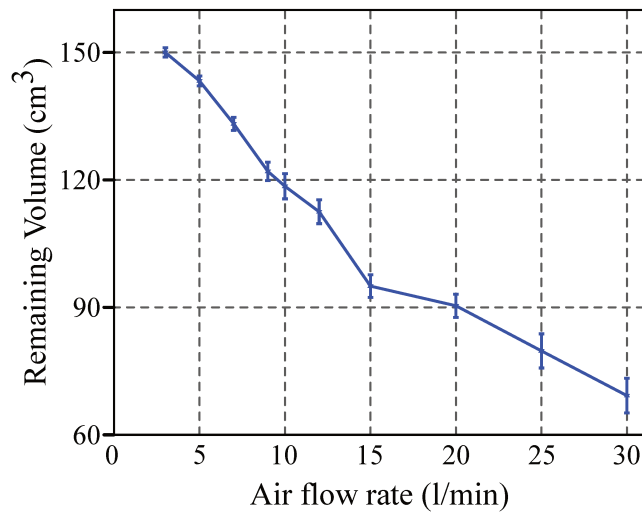


Figura 3.1: Cantidad de líquido remanente en el lado izquierdo al final de los ensayos para diferentes caudales de aire

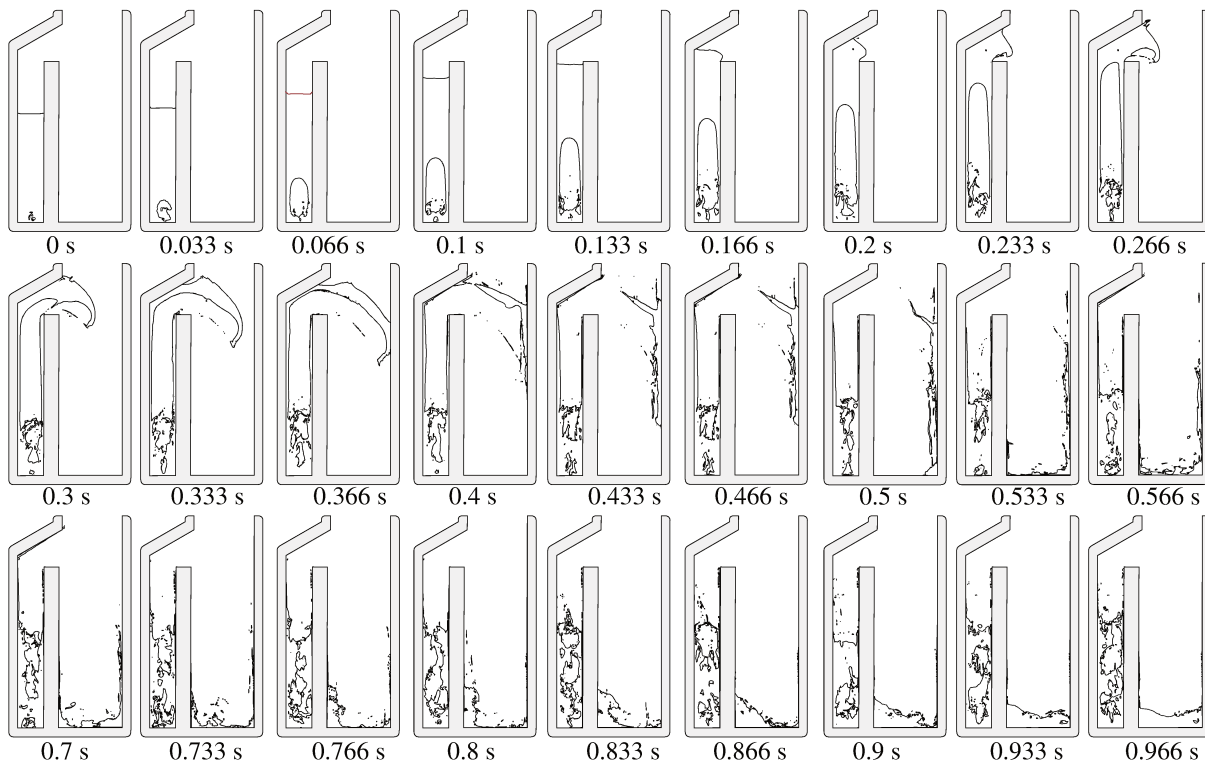


Figura 3.2: Resultados experimentales: Secuencia de imágenes filtradas para un caudal de aire de 30 l/min

En los ensayos con un caudal de 30 l/min, se observa la formación de una única burbuja, la cual continua creciendo hasta alcanzar la parte superior del compartimento. El aire, en forma de bolsón (*slug*) asciende con mayor rapidez en comparación con los ensayos realizados a caudales de aire inferiores, desplazando un volumen significativo de agua hacia el compartimento derecho. En este caso, la energía de la ola es suficiente para impactar contra la pared derecha, lo que provoca la evacuación de aproximadamente el 60 % del agua. Posteriormente, tras la elevación inicial, se establece un flujo burbujeante altamente turbulento, caracterizado por burbujas de tamaño inferior a 10 mm.

3.1.1 Resultados con los distintos modelos

La Figura 3.3 muestra una comparación cualitativa de los perfiles de fracción volumétrica α obtenidos mediante simulaciones 3D para un caudal de aire de 30 l/min. Se consideran: (i) modelos VOF —en sus variantes estándar (SVOF), con refinamiento adaptativo (VOF-AMR) y con reconstrucción geométrica de la interfase mediante *IsoAdvector*¹—, y (ii) el modelo de dos fluidos con enfoque *blending* (TFBE).

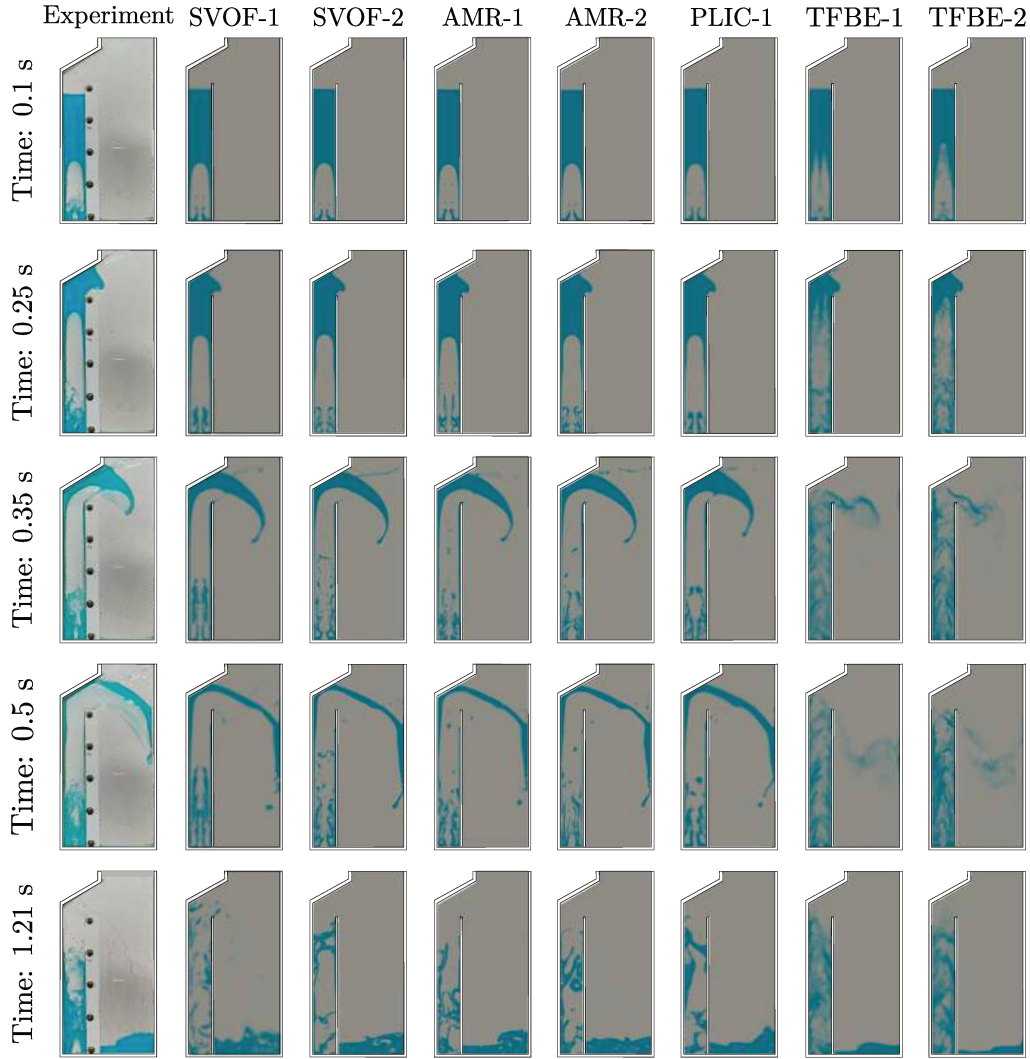


Figura 3.3: Comparación de métodos numéricos con mallas 3D para un caudal de aire de 30 l/min.

Los tres enfoques del método VOF reproducen adecuadamente el instante en que el líquido alcanza la pared inclinada, así como la forma global del *slug*, independientemente de la malla empleada. SVOF-2, utiliza un tamaño de celda uniforme de 1 mm, y los modelos AMR, con refinamientos locales de 1 mm y 0.5 mm, muestran una menor difusión numérica que SVOF-1. A pesar de utilizar una malla más gruesa (2 mm), el modelo ISO logra una interfaz más definida gracias a su tratamiento geométrico. Las principales diferencias se observan en la región inferior del dominio, donde la alta turbulencia exige una resolución más fina para capturar burbujas y gotas.

El enfoque TFBE reproduce la tendencia general del flujo, pero presenta limitaciones notables en la representación de grandes interfaces. La simulación con la malla intermedia (TFBE-2) exhibe oscilacio-

¹En el Anexo A este método se denominó *PLIC*; en adelante se utilizará la denominación *IsoAdvector* (abreviado ISO), correspondiente a su implementación en OPENFOAM.

nes espurias sobre la cresta del *slug* a $t = 0.1$ s; la interfase se difumina a $t = 0.35$ s y desaparece por completo a $t = 0.5$ s. La malla más gruesa (TFBE-1) proporciona una solución algo más estable, aunque tampoco logra capturar con precisión la evolución del frente líquido.

En conjunto, los modelos VOF muestran una mayor capacidad para resolver la dinámica interfacial, particularmente cuando se incorporan técnicas de refinamiento adaptativo o reconstrucción geométrica. En contraste, el modelo TFBE presenta restricciones importantes para describir con fidelidad estructuras interfaciales complejas, como frentes definidos o zonas de alta fragmentación de fase.

Las Figuras 3.4 y 3.5 presentan los volúmenes de líquido remanente en el compartimento izquierdo al finalizar los ensayos para caudales de aire de 10 l/min y 30 l/min, respectivamente, obtenidos mediante simulaciones tridimensionales con los modelos SVOF y TFBE. En cada barra se incluye el error relativo respecto de los datos experimentales, evaluando la sensibilidad al refinamiento de malla y al modelo de turbulencia empleado.

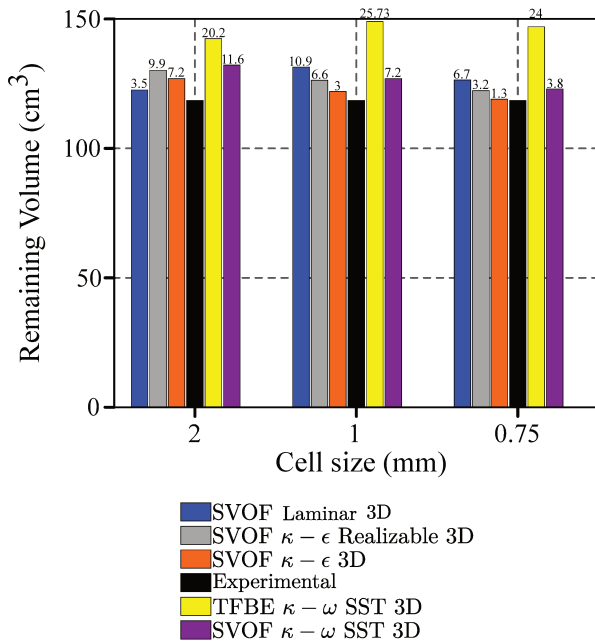


Figura 3.4: Estudio de convergencia con mallas 3D para un caudal de aire de 10 l/min.

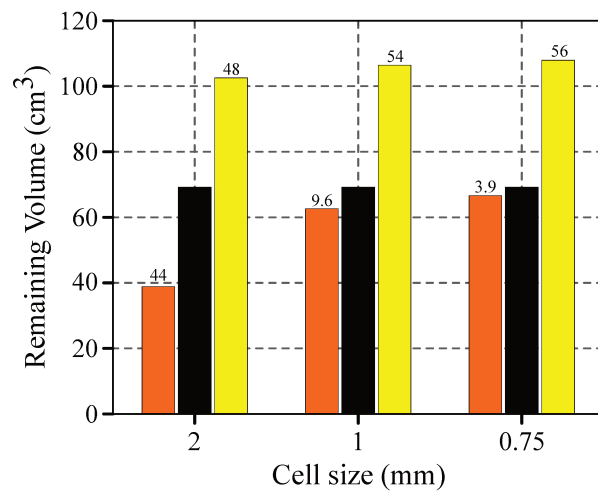


Figura 3.5: Estudio de convergencia con mallas 3D para un caudal de aire de 30 l/min.

En ambos caudales, el enfoque VOF combinado con el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ mostró un comportamiento consistente de convergencia con el tamaño de celda. Para el caso de 10 l/min, el error relativo disminuyó hasta valores inferiores al 1.3 % con la malla más fina, mientras que para 30 l/min se redujo desde un 36 % (malla gruesa) hasta menos del 3 % con las mallas intermedia y fina. Estos resultados reflejan una adecuada sensibilidad numérica del método SVOF y una mayor capacidad para capturar el comportamiento interfacial bajo condiciones transientes y velocidades crecientes de aire.

En contraste, el modelo TFBE no evidenció una convergencia clara con el refinamiento de malla en ninguno de los dos caudales analizados. Para 10 l/min, los errores relativos se mantuvieron por encima del 20 %, sin mejoras significativas al reducir el tamaño de celda. Para 30 l/min, aunque la malla gruesa arrojó un error relativamente bajo, los resultados empeoraron con mallas más finas, alcanzando un error del 75 % con la malla más refinada. Este comportamiento, ya reportado en la literatura por autores como Guerrero et al. [50], Pham et al. [30] y Fan y Anglart [66], pone de manifiesto una débil dependencia espacial del modelo TFBE, atribuida a su formulación media y a la dificultad para capturar estructuras interfaciales complejas en flujos segregados.

En conjunto, los resultados consolidan al modelo SVOF- $k-\epsilon$ como una herramienta más robusta y precisa en la predicción del volumen de líquido remanente bajo condiciones altamente transientes y en

geometrías tridimensionales, mientras que el modelo TFBE presenta limitaciones relevantes, especialmente a caudales elevados donde se incrementa la interacción gas-líquido y la complejidad del frente interfacial.

A pesar de los resultados poco satisfactorios obtenidos con el modelo TFBE, es importante señalar que el uso de modelos clásicos de dos fluidos (*Two-Fluid*, TF) sin *blending* condujo a predicciones aún menos realistas. La Figura 3.6 muestra los resultados numéricos para las tres variantes del enfoque TF: los marcadores en forma de rombo rojo corresponden al modelo de (*Two-Fluid Blending*, TFBE), los cuadrados naranjas representan el modelo tipo burbujeante (*Two-Fluid Bubbly*, TFBU), que asume burbujas dispersas en una fase líquida continua, y los cuadrados verdes corresponden al modelo tipo gota (*Two-Fluid Drop*, TFDO), que considera gotas líquidas dispersas en una fase gaseosa continua. También se incluyen los datos experimentales y los resultados del modelo VOF estándar (*Standard Volume of Fluid*, SVOF-1), representados mediante cuadrados azules y negros, respectivamente.

Aunque el modelo SVOF-1 presenta un error apreciable, su desempeño es aceptable para todos los caudales de aire analizados, mostrando una buena concordancia con los datos experimentales para caudales inferiores a 20 l/min. Por su parte, el modelo TFBE logra una predicción razonable para caudales de aire menores a 10 l/min, con errores relativos máximos en torno al 20 % en el rango medio de caudales.

No obstante, lo más destacable es la mejora sustancial que ofrece el modelo TFBE respecto a los modelos clásicos TFBU y TFDO. En otras palabras, asumir un régimen de gotas (TFDO) conlleva una subestimación significativa de la fuerza de arrastre interfacial, lo cual minimiza artificialmente la expansión y el derrame de líquido. Por el contrario, suponer un régimen burbujeante (TFBU) conduce a una sobreestimación del arrastre, resultando en un vaciado completo del compartimento izquierdo para caudales de aire superiores a 10 l/min. Estas observaciones confirman que la caracterización dinámica del flujo que propone el enfoque TFBE permite representar con mayor realismo las transiciones de régimen en flujos altamente transientes, aunque persistan limitaciones en su capacidad predictiva absoluta.

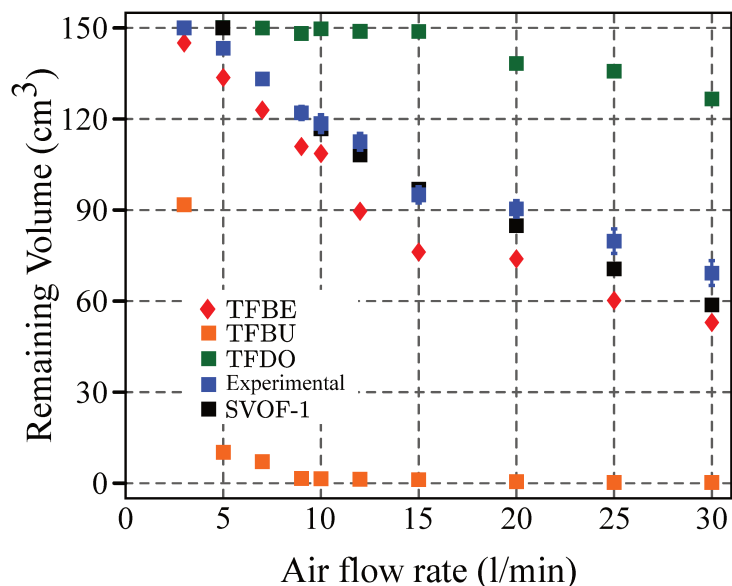


Figura 3.6: Volumen de líquido remanente en el compartimento izquierdo al finalizar el ensayo.

3.2 CASO 2. Flujo a Co-corriente y contra-corriente

En la Sección 2.8 se presenta el Caso 2. Los resultados expuestos constituyen una síntesis de los reportados previamente por Sarache et al. [16]

3.2.1 Experimento co-corriente

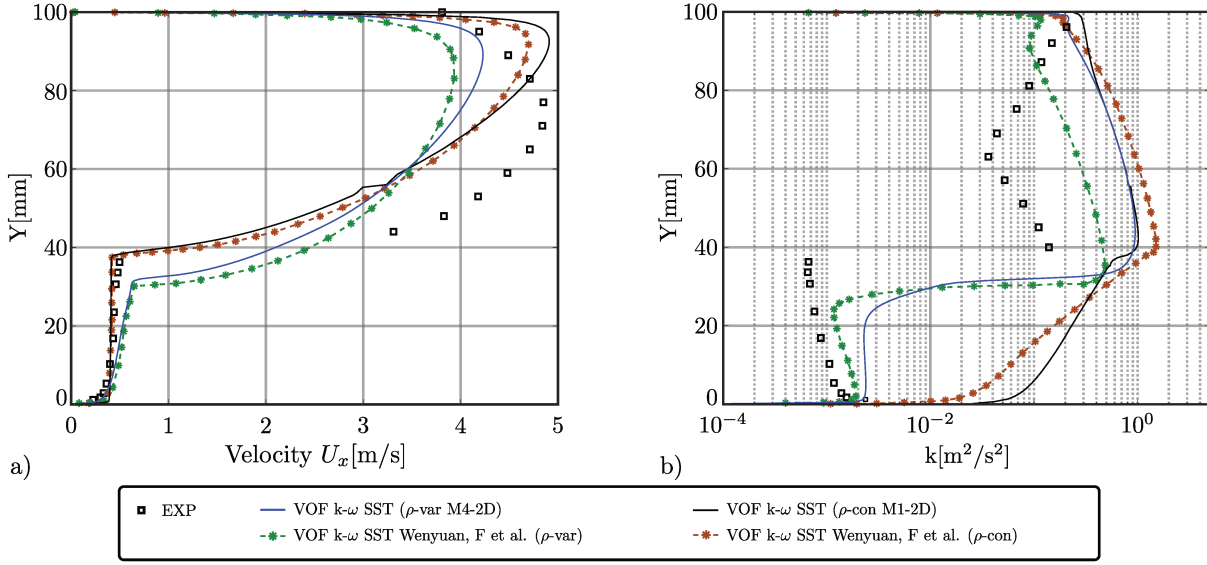


Figura 3.7: Ensayo de flujo co-corriente. Comparación entre las formulaciones ρ -var y ρ -con con el modelo $k-\omega$ SST: (a) perfil de velocidad U_x y (b) energía cinética turbulenta k .

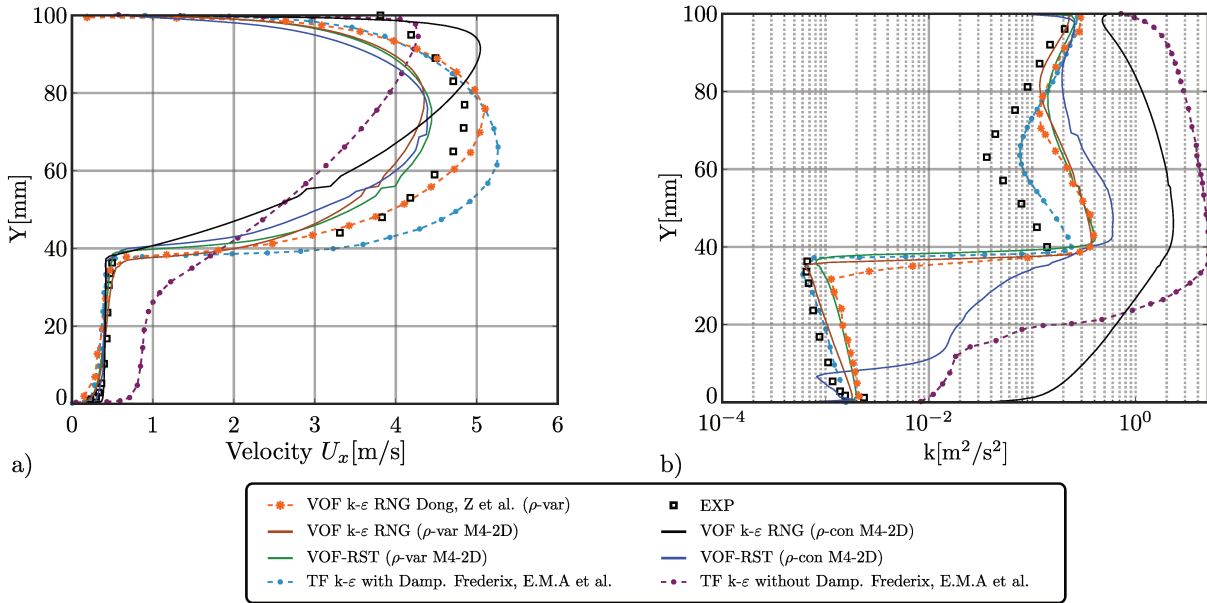


Figura 3.8: Modelos $k-\epsilon$ RNG y RST con formulaciones ρ -con y ρ -var.

Antes de presentar el análisis de malla y turbulencia, se comparan los resultados obtenidos para el Caso 250 utilizando el modelo $k-\omega$ SST con datos experimentales y con simulaciones reportadas por otros autores [66]. Las Figuras 3.7a y b presentan los perfiles de velocidad y de energía cinética turbulenta en la región de flujo desarrollado, correspondientes a la malla más refinada (M4-2D), para la cual el valor de y^+ se mantuvo por debajo de la unidad. Se consideraron tanto la formulación de turbulencia con densidad constante (ρ -con) como la de densidad variable (ρ -var).

En cuanto al perfil de velocidades, se identifican discrepancias importantes en la zona próxima a la interfase, donde el nivel del agua es subestimado. No obstante, las mayores divergencias se manifiestan

en la región ocupada por la fase gaseosa, en la cual la velocidad máxima, su posición y la forma general del perfil difieren significativamente de los datos experimentales. A pesar del refinamiento aplicado en la malla, la distribución de velocidades cerca del límite superior del dominio muestra una desviación considerable.

La predicción de la energía cinética turbulenta tampoco resulta satisfactoria, como se observa en la Figura 3.7b. Aunque se detecta un salto en el valor de k , este se ubica claramente por debajo de la interfase, y los valores máximos difieren sustancialmente respecto a las mediciones experimentales.

En conjunto, se concluye que el modelo $k-\omega$ SST, tanto en su versión ρ -con como ρ -var, conduce a una sobreestimación generalizada de la turbulencia en el dominio, lo que incrementa la viscosidad turbulenta efectiva. Este exceso de viscosidad podría inducir una resistencia interfacial exagerada, desplazando hacia arriba el pico de velocidad del aire. Los resultados indican que dicho modelo no es adecuado para representar correctamente el flujo del Caso 250.

Las Figuras 3.8a y b muestran los perfiles de velocidad y de energía cinética turbulenta obtenidos para el Caso 250. Los resultados corresponden a simulaciones realizadas con los modelos $k-\epsilon$ RNG y RST, utilizando tanto la formulación con densidad constante (ρ -con) como con densidad variable (ρ -var), sobre la malla bidimensional M2-2D. Para fines comparativos, también se incluyen los resultados numéricos reportados por Dong et al. [67], quienes emplearon una formulación $k-\epsilon$ con ρ -var en una malla tridimensional, así como los obtenidos por Frederix et al. [63], quienes utilizaron el enfoque de dos fluidos (TF) complementado con funciones de amortiguamiento (*damping*).

Los resultados con la formulación ρ -var permiten una muy buena aproximación del perfil de velocidad, presentando únicamente una leve subestimación en la región gaseosa. Además, la posición de la interfase se reproduce de manera satisfactoria. Por su parte, los perfiles de velocidad reportados por Dong et al. [67] presentan un ajuste más preciso respecto de los datos experimentales, aunque esto se atribuye principalmente al carácter tridimensional de su modelo numérico.

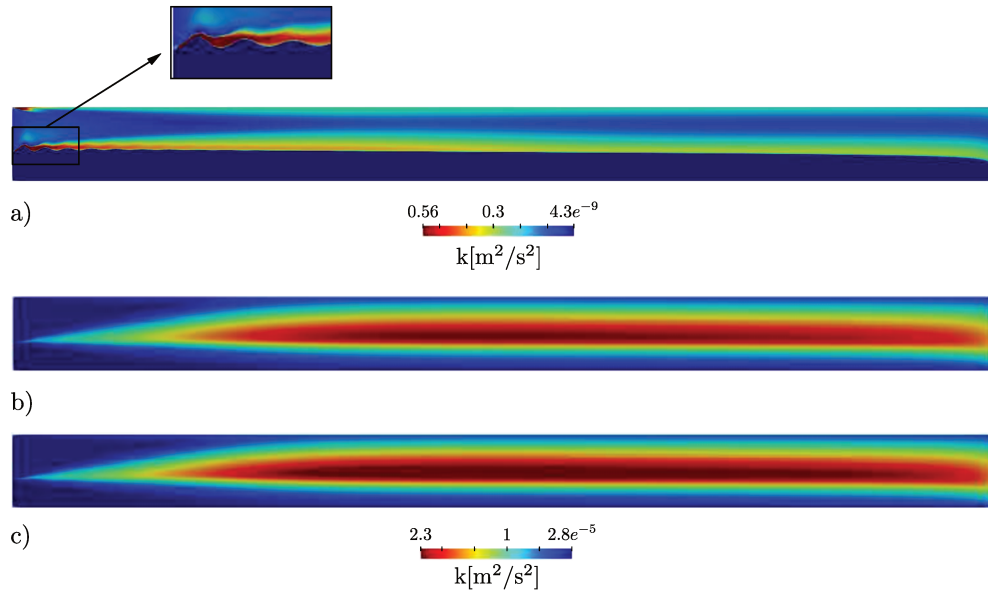


Figura 3.9: Distribución de energía cinética turbulenta k con el modelo $k-\epsilon$ RNG: (a) formulación ρ -var (M4-2D), (b) formulación ρ -con (M4-2D) y (c) formulación ρ -con (M1-2D).

En relación con la energía cinética turbulenta, los resultados obtenidos con la formulación ρ -con presentan discrepancias significativas en todo el dominio, evidenciando una pobre representación del campo turbulento. En contraste, el modelo ρ -var logra capturar adecuadamente la distribución de k en la región líquida, aunque tiende a sobreestimar la turbulencia en la vecindad de la interfase y en la zona superior ocupada por el aire, lo que afecta la precisión de la solución en todo el compartimento gaseoso.

La Figura 3.9 presenta los contornos de energía cinética turbulenta obtenidos para el Caso 250 utilizando la malla refinada M4-2D. Se comparan los resultados del modelo $k-\epsilon$ RNG con formulaciones de densidad variable (ρ -var) (a) y de densidad constante (ρ -con) (b y c). En el caso de la formulación ρ -var, los máximos valores de k se localizan en la zona de primer contacto entre las fases aire y agua. Posteriormente, se observa una oscilación a lo largo de la interfase, seguida de un decaimiento progresivo hasta alcanzar una solución suave lejos de la entrada.

Por el contrario, la formulación ρ -con muestra una distribución de turbulencia que no se atenúa a lo largo de la tubería de sección rectangular, sino que se propaga hacia ambas fases, afectando en mayor medida a la región gaseosa. El valor máximo de energía cinética turbulenta es aproximadamente cuatro veces superior al obtenido con la formulación ρ -var, evidenciando una sobreestimación significativa de la producción turbulenta en la interfase o a subpredicción en la tasa de disipación. Esta tendencia se mantiene tanto en mallas finas como gruesas, como puede observarse al comparar las Figuras 3.9b (M4-2D) y 3.9c (M1-2D).

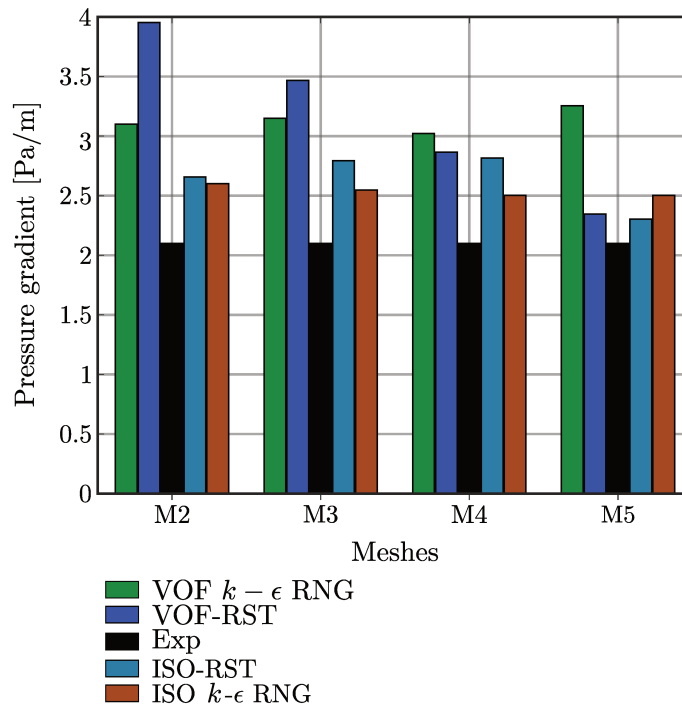


Figura 3.10: Ensayo de flujo co-corriente. Análisis de convergencia de malla con formulación ρ -var utilizando los modelos de turbulencia $k-\epsilon$ RNG y RST, con reconstrucción de interfaz algebraica e *IsoAdvector* (ISO).

La Figura 3.10 muestra el gradiente de presión a lo largo de la tubería de sección rectangular para los diferentes modelos y mallas considerados. La barra negra representa el valor experimental. Como puede observarse, el gradiente de presión es muy pequeño y tiende a ser sobreestimado por todos los modelos que emplean mallas bidimensionales.

El mejor acuerdo con los datos experimentales se obtiene al utilizar el modelo RST junto con la malla más refinada. Los errores relativos con el modelo RST alcanzan valores de 11.91 % y 9.52 % para las formulaciones estándar de VOF y VOF-ISO, respectivamente. Esta mejor performance puede atribuirse a la inclusión del tensor de deformación asociado a la presión (*pressure-rate-of-strain*), que capta adecuadamente las fluctuaciones de presión que influyen de forma decisiva en la predicción del gradiente [94].

La malla más refinada (M3-3D) fue ajustada con el objetivo de alcanzar valores de y^+ cercanos a la unidad. Las Figuras 3.11a y b presentan los perfiles de velocidad y energía cinética turbulenta obtenidos con mallas tridimensionales. Como puede observarse, se logra una mejora significativa en todos los casos,

especialmente al emplear la malla más fina. Las mayores discrepancias se localizan en las proximidades de la interfase y en la región del pico de velocidad. No obstante, la mejora en la predicción de la energía cinética turbulenta resulta menos marcada.

La caída de presión asociada a las mallas tridimensionales se muestra en la Figura 3.12. Al igual que con los perfiles de velocidad, los resultados presentan una convergencia progresiva hacia los datos experimentales, aunque el avance se vuelve notorio con la malla más refinada, la cual arroja un error menor al 1 %.

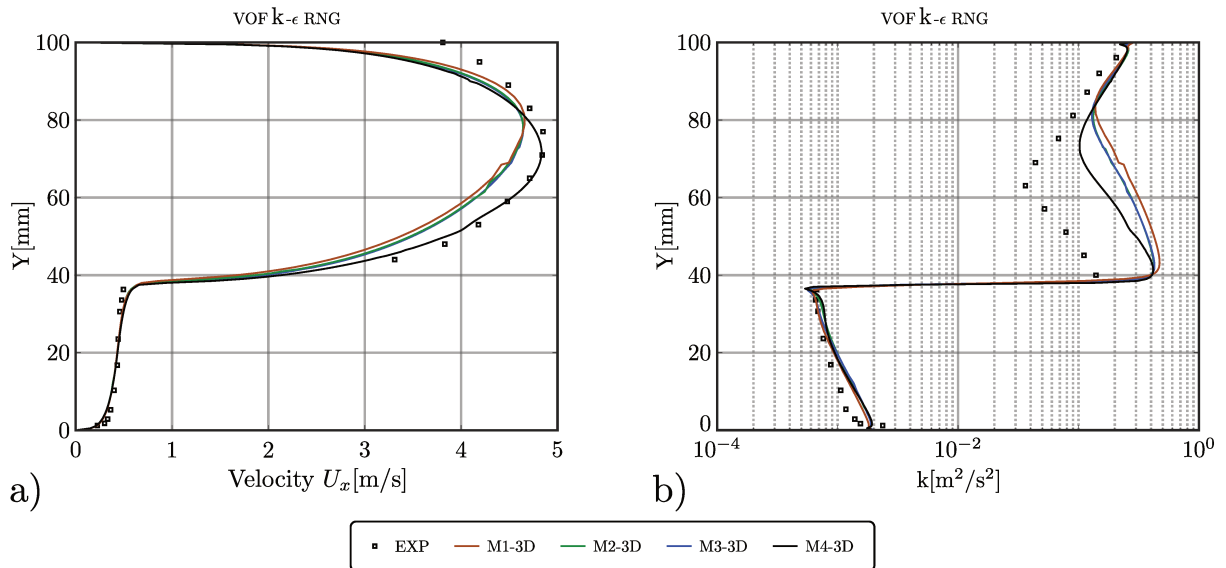


Figura 3.11: Ensayo de flujo co-corriente. Resultados con malla 3D utilizando el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ RNG y formulación ρ -var: (a) perfil de velocidad U_x y (b) energía cinética turbulenta k .

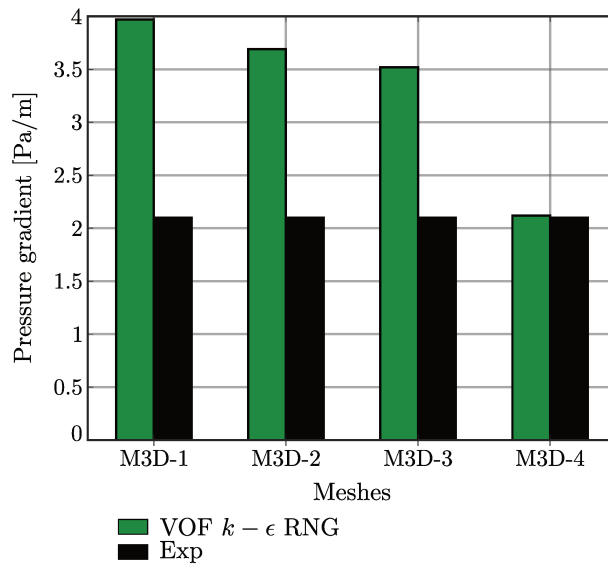


Figura 3.12: Ensayo de flujo co-corriente. Gradiente de presión obtenido con malla 3D utilizando el modelo $k-\epsilon$ RNG y formulación ρ -var.

3.2.2 Experimento contra-corriente

Las Figuras 3.13a y b muestran los perfiles de velocidad obtenidos a lo largo de dos líneas verticales denominadas MP1 y MP2 (ver Figura 2.5), utilizando la malla más refinada. También se incluyen las soluciones obtenidas con el modelo TF por Yan et al. [65], tanto con como sin funciones de amortiguamiento (*damping*).

Estos resultados son particularmente útiles para evidenciar la importancia de emplear una formulación con densidad variable (ρ -var). Como puede observarse, los resultados obtenidos con formulaciones de densidad constante (ρ -con) son completamente inadecuados: la forma del perfil de velocidad se encuentra distorsionada, el pico de velocidad está ampliamente sobreestimado y desplazado hacia arriba, y la altura de la interfase predicha es más del doble del valor experimental.

En contraste, las formulaciones ρ -var muestran una mejora sustancial, brindando perfiles de velocidad muy similares entre todos los modelos de turbulencia considerados y un excelente acuerdo con los datos experimentales.

En cuanto a las soluciones con el modelo TF, la Figura 3.13a ilustra las marcadas diferencias entre los resultados obtenidos con y sin funciones de amortiguamiento. Se observa que la inclusión de *damping* permite obtener una predicción comparable a la de los modelos ρ -var, mientras que la omisión del mismo conlleva a una sobreestimación de la altura de la interfase y a una forma del perfil de velocidad incorrecta.

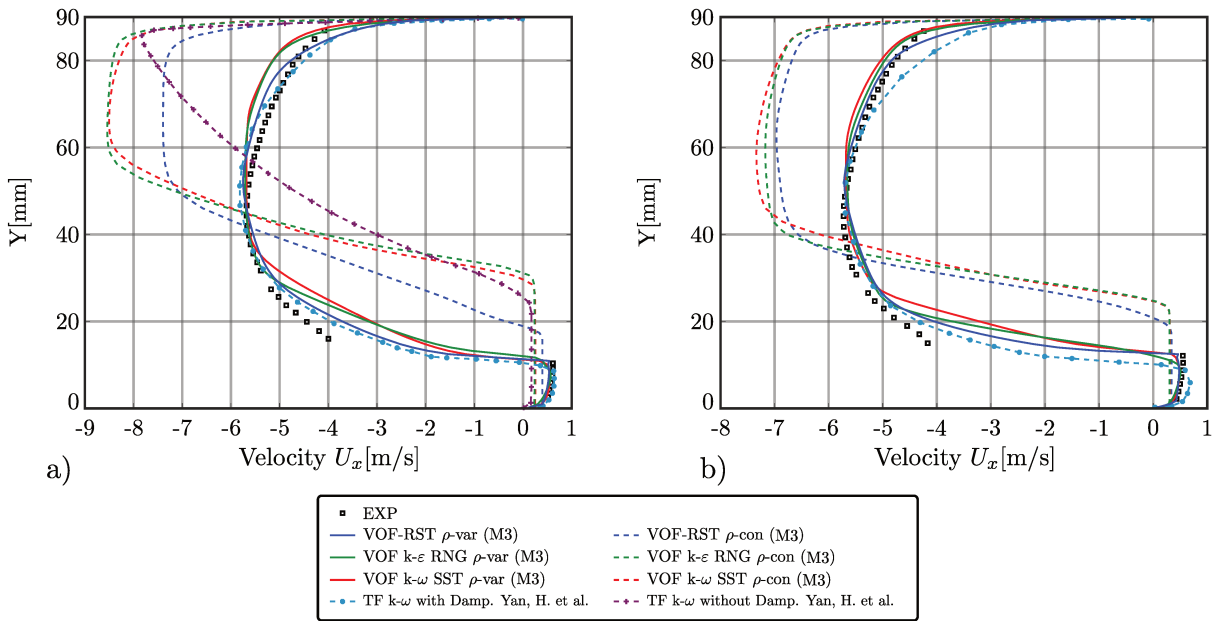


Figura 3.13: Ensayo en contracorriente. Comparación entre diferentes modelos de turbulencia: (a) perfil de velocidad U_x en MP1 y (b) perfil de velocidad U_x en MP2.

El análisis de los perfiles de energía cinética turbulenta a lo largo de la línea MP1 (ver Figura 3.14) conduce a conclusiones similares a las obtenidas previamente. Al igual que en el ensayo anterior, los modelos con densidad constante (ρ -con) no logran capturar ni la forma general del perfil de k ni el salto de turbulencia medido en la interfase. En estos casos, la generación de turbulencia se encuentra sobreestimada en la pared inferior y crece de manera monótona en la región líquida hasta alcanzar la interfase (nótese que para los modelos ρ -con la posición de la interfase se encuentra muy por encima del valor experimental). Sólo cerca de la pared superior las predicciones de k se aproximan a los valores medidos.

En contraste, los modelos con densidad variable (ρ -var) estiman adecuadamente la forma del perfil de k , tanto en el agua como en el aire. El modelo k - ω SST presenta el mejor ajuste en la región líquida,

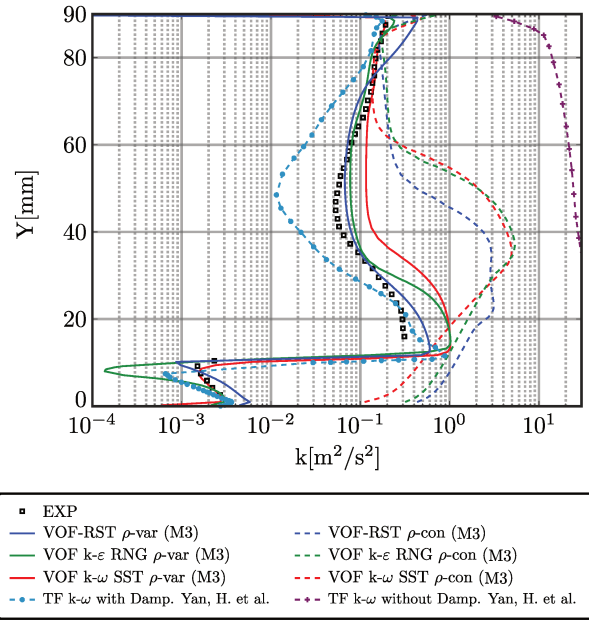


Figura 3.14: Ensayo en contracorriente. Comparación de la energía cinética turbulenta k utilizando formulaciones de turbulencia con ρ constante (ρ -con) y variable (ρ -var) en MP1.

Mesh	Model	Δp^G (Pa)
M3	VOF k - ω SST	0.920
M3	VOF k - ϵ RNG	1.425
M3	VOF-RST	1.180
-	Experiment	0.8
-	AIAD	1.25

Tabla 3.1: Ensayo de flujo a contracorriente. Comparación de la diferencia de presión estática en la región gaseosa.

mientras que el modelo VOF-RST se ajusta mejor en la región gaseosa. Aunque los tres modelos sobreestiman el salto de k en la interfase agua-aire, el modelo VOF-RST presenta el menor error relativo.

El gradiente de presión en la región gaseosa también se compara para los tres modelos considerados en la Tabla 3.1. En dicha tabla se incluyen, además, el valor experimental y la estimación numérica reportada por Porombka y Höhne [61] utilizando el modelo de dos fluidos (TF). Como puede observarse, todos los modelos numéricos sobreestiman el gradiente de presión con respecto al dato experimental. No obstante, el modelo k - ω presenta el mejor ajuste, reproduciendo el valor experimental con alta precisión.

3.3 CASO 3. CCFL en una geometría tipo hot-leg

En la Sección 2.9 se presenta el Caso 3. Los resultados expuestos constituyen una síntesis de los reportados previamente por Sarache et al. [17].

3.3.1 Test 1 – Incremento y reducción del flujo de aire en la Región 1 (bajo caudal de agua)

La Figura 3.15 presenta la caída de presión predicha por ambos enfoques numéricos —RELAP5 y CFD 3D— junto con los datos experimentales. También se incluye la rampa de velocidad del aire. Los resultados se muestran en función de $J_g^{*0.5}$ (Figura 3.15a) y del tiempo (Figura 3.15b).

Tal como se ilustra en la Figura 3.15a, la caída de presión aumenta gradualmente desde 0 hasta 200 Pa, a pesar de que la velocidad del aire se incrementa de 4 a 11 m/s. Esta tendencia es bien capturada por las simulaciones con CFD 3D en régimen laminar, así como por los modelos ρ -con, ρ -var y RELAP5. En particular, el modelo laminar más simple ofrece predicciones razonables mientras el sistema se encuentra alejado del régimen CCFL, con resultados similares al modelo ρ -con para $J_g^{*0.5} < 0.52$. Sin embargo, una vez superado ese umbral, el modelo laminar subestima significativamente la caída de presión, alcanzando un valor máximo de aproximadamente 400 Pa, es decir, cerca del 40 % del valor experimental. El modelo ρ -con también subestima la caída de presión, con un valor máximo del orden de 700 Pa. Como se discute en [16], este comportamiento se debe a que la energía cinética turbulenta no se amortigua adecuadamente en las zonas de baja velocidad del líquido, lo que permite la propagación excesiva de la turbulencia del aire hacia la fase líquida. Esta difusión indebida afecta el cálculo de la viscosidad turbulenta y, por ende, incrementa artificialmente las fuerzas interfaciales.

Por el contrario, el modelo ρ -var reproduce el valor máximo de presión con buena precisión, con una subestimación menor a 100 Pa, mientras que RELAP5 lo sobrestima en aproximadamente 200 Pa. Tanto en el modelo ρ -var como en RELAP5, las curvas de caída de presión se superponen levemente para $J_g^{*0.5} > 0.5$, lo que sugiere una predicción anticipada del inicio del CCFL. En el modelo CFD, este comportamiento puede atribuirse a una ligera sobreestimación de la viscosidad turbulenta en la interfase, generando fuerzas interfaciales más intensas. En el caso de RELAP5, la discrepancia comienza para $J_g^{*0.5} > 0.45$, aún alejado del límite de CCFL, probablemente debido a una sobreestimación de las fuerzas interfaciales bajo condiciones de contraflujo [114]. Desde una perspectiva de seguridad, estos resultados son conservadores en ambos modelos: RELAP5 sobrestima la presión máxima en torno a un 15 %, mientras que el modelo CFD 3D la subestima en aproximadamente un 5 %. El aumento abrupto en la caída de presión coincide con un cambio de régimen hacia flujo segregado, que produce un mayor arrastre y acumulación de líquido cerca del codo, generando un bloqueo parcial del flujo. Como consecuencia, se reduce la sección efectiva para el paso del aire, lo que incrementa su velocidad y las fuerzas interfaciales. En las simulaciones CFD, el aire atrapado puede liberarse repentinamente, produciendo fluctuaciones notables de presión.

En RELAP5, el cambio de régimen activa la restricción al flujo establecida en la Ec. (2.62), que induce acumulación de líquido cerca del codo, obstruyendo el paso del aire y provocando un aumento de presión. Este comportamiento coincide con los fenómenos físicos típicos del CCFL, demostrando la capacidad de RELAP5 para reproducir las interacciones dinámicas en flujo a contracorriente. Además, RELAP5 predice adecuadamente la tendencia de la caída de presión durante la fase de descenso de la rampa de aire.

La Figura 3.15b muestra la evolución temporal de la presión junto con la rampa de velocidad del aire durante las fases ascendente y descendente. Como se observa, el modelo CFD 3D no consideró la fase descendente, mientras que RELAP5 la incluyó con buena concordancia entre los resultados numéricos y los datos experimentales.

La Figura 3.16 compara imágenes experimentales y capturas de simulaciones 3D-CFD obtenidas en distintos valores del parámetro $J_g^{*0.5}$ durante el Test 1. Para velocidades de aire más bajas ($0.42 < J_g^{*0.5} < 0.47$), la película líquida permanece relativamente delgada y la superficie libre se mantiene casi uniforme, salvo en la región del codo. Esta configuración se asocia a una caída de presión inferior a 200 Pa.

A medida que $J_g^{*0.5}$ aumenta hasta aproximadamente 0.5, se observan cambios notorios en la profundidad del líquido dentro del tramo horizontal, debido al desprendimiento de gotas que genera un salto

hidráulico en el extremo izquierdo de la tubería. Este salto se propaga hacia el codo, donde comienza a acumularse el líquido. En el intervalo $0.52 < J_g^{*0.5} < 0.57$, la profundidad del líquido alrededor del codo alcanza aproximadamente un tercio de la altura del conducto. Si bien el flujo líquido continúa, se registra la mayor caída de presión.

Tanto las imágenes experimentales como los resultados numéricos sugieren que el aumento repentino de presión se debe más a la reducción local del área efectiva de paso cerca del codo que a la acción del arrastre interfacial en sí.

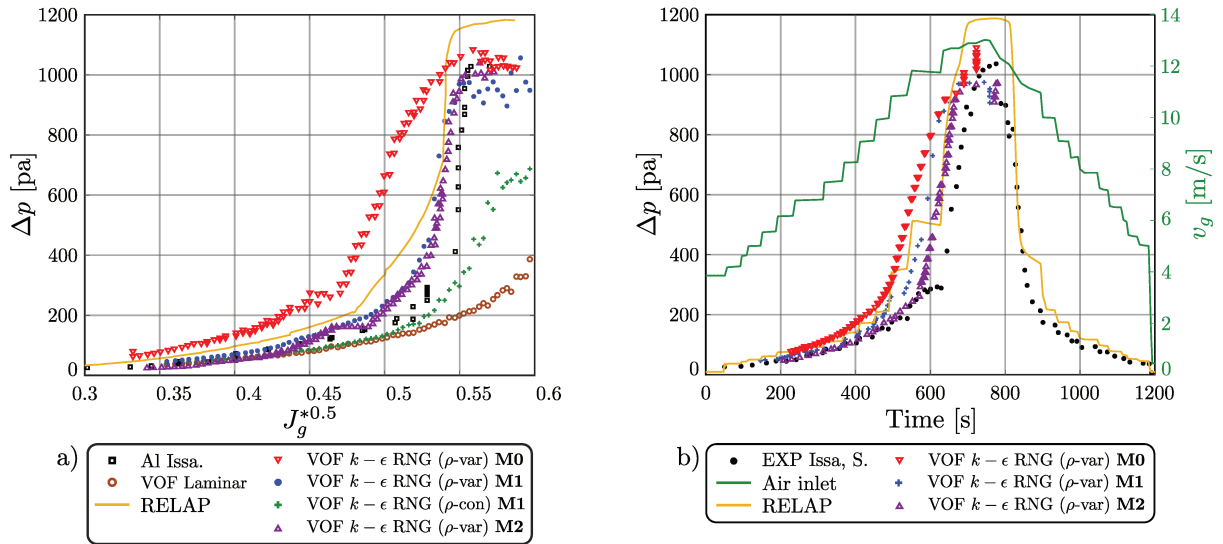


Figura 3.15: Test 1. Caída de presión entre la entrada y la salida del flujo de aire.

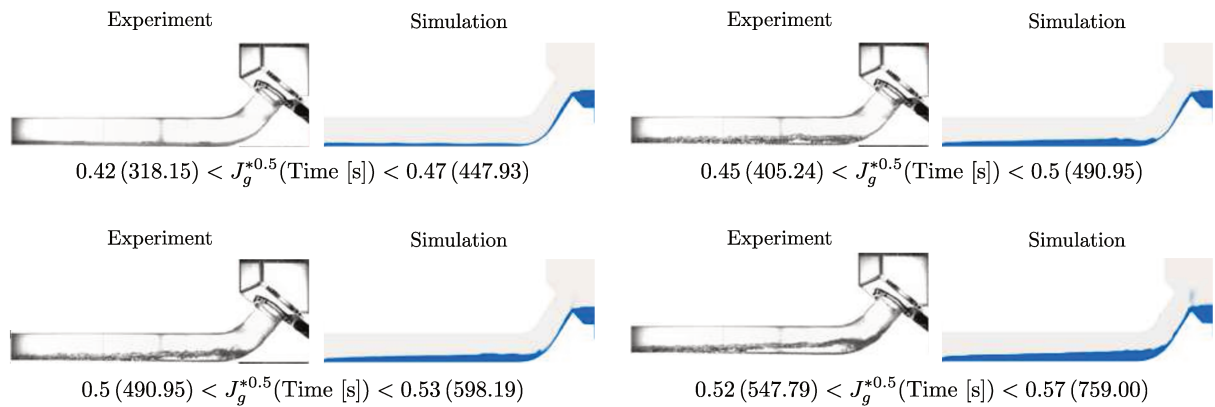


Figura 3.16: Test 1. Comparación entre datos experimentales y simulación 3D-VOF para distintos valores de $J_g^{*0.5}$ en la Región 1.

3.3.2 Test 2 – Incremento del caudal de aire en torno al CCFL para distintos caudales de agua

Las Figuras 3.17 y 3.18 presentan, respectivamente, el caudal de líquido medido en el extremo izquierdo de la tubería y la caída de presión entre la entrada y la salida de la *hot-leg*. En ambas figuras se grafican los resultados obtenidos con el modelo 3D-VOF (en azul) y las predicciones de RELAP5 (línea punteada naranja) en función del tiempo, junto con la rampa de velocidad adimensional del aire $J_g^{*0.5}$

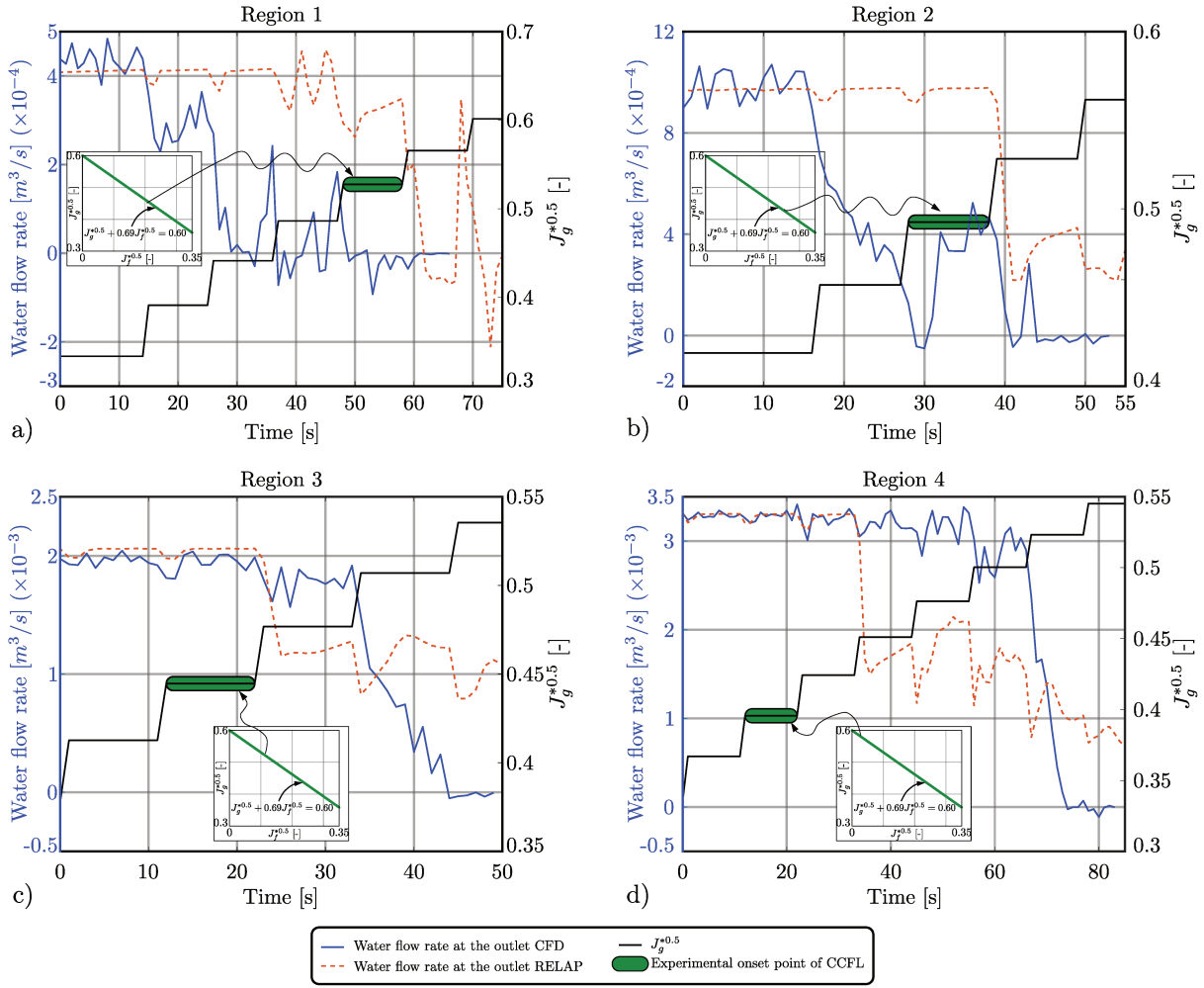


Figura 3.17: Test 2. Caudal de agua en función del tiempo en la salida de la rama caliente: resultados numéricos con 3D-VOF y RELAP5.

(línea negra), para las Regiones 1, 2, 3 y 4. Estas corresponden a velocidades adimensionales del líquido de $J_f^{*0.5} = 0,105, 0,155, 0,225$ y $0,285$, respectivamente. La banda verde sobre la curva negra indica el momento en que $J_g^{*0.5}$ alcanza el límite de bloqueo CCFL definido por la Ec. (2.62).

A partir de los resultados no puede establecerse una conclusión definitiva sobre la superioridad de uno u otro enfoque numérico. En la Región 1 (Figura 3.17), el modelo CFD predice la interrupción del flujo líquido antes de alcanzar el umbral de bloqueo CCFL, mientras que RELAP5 presenta una caída abrupta del flujo justo en el límite establecido por la correlación. Un comportamiento similar se observa en la Región 2, donde la simulación CFD 3D predice la detención del flujo con anticipación, mientras que RELAP5 la predice exactamente en el valor límite. Por el contrario, en las Regiones 3 y 4 se aprecia un desfase significativo entre el valor teórico de CCFL y la detención completa del flujo líquido. Este comportamiento concuerda con lo reportado en la literatura, donde se indica que, para velocidades líquidas superficiales más altas (como en las Regiones 3 y 4), las curvas de inicio de CCFL y de bloqueo completo divergen, lo cual implica que se requieren velocidades de aire más elevadas para lograr el corte total del flujo líquido.

La Figura 3.18 muestra la evolución de la caída de presión. En las Regiones 1 y 2, la presión comienza a incrementarse antes en los resultados obtenidos con el modelo 3D-VOF en comparación con RELAP5, aunque ambos métodos alcanzan valores máximos de presión similares. Cabe destacar que el modelo 3D-

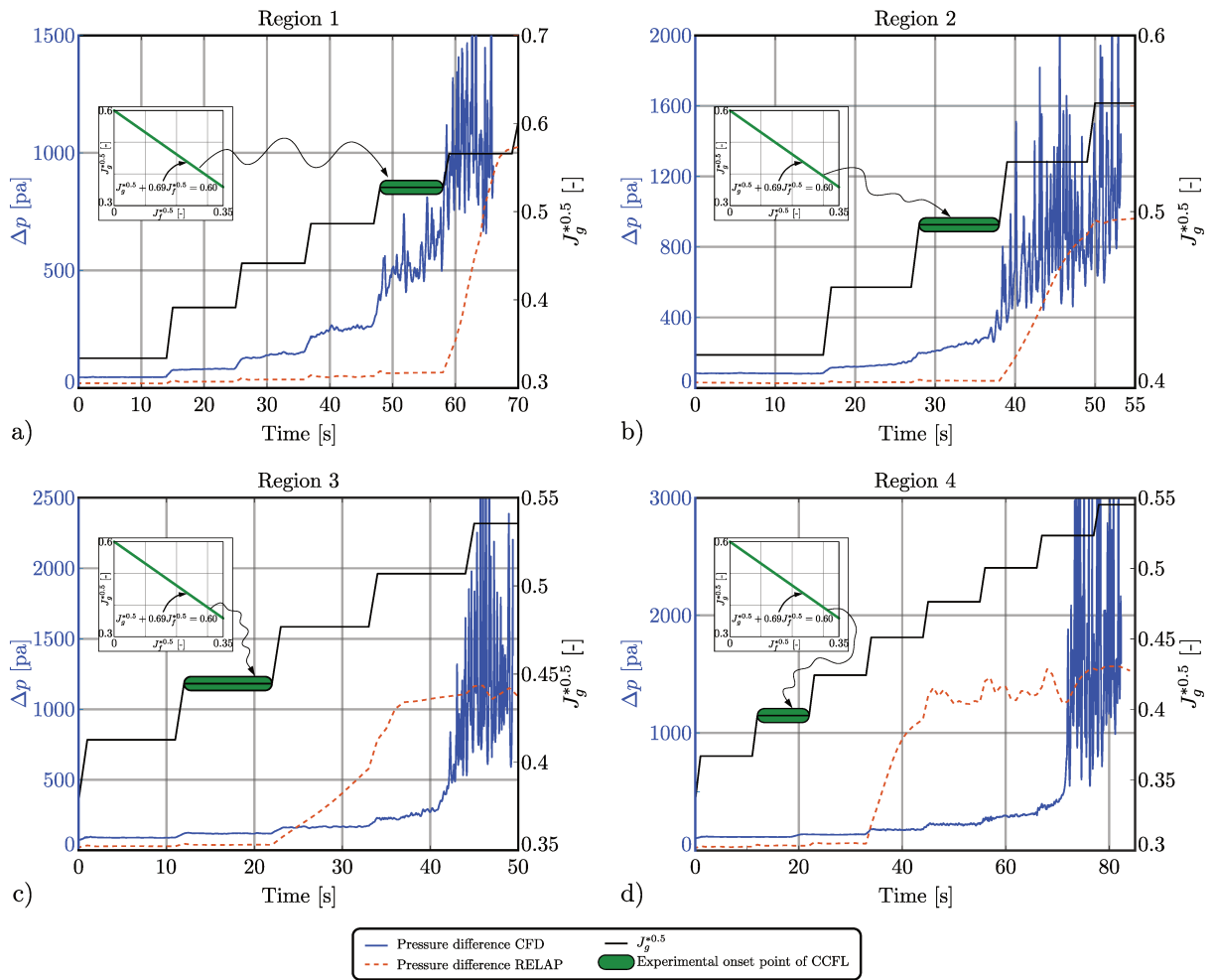


Figura 3.18: Test 2. Caída de presión en función del tiempo entre la entrada y la salida de la rama caliente: resultados numéricos con 3D-VOF y RELAP5.

VOF presenta fluctuaciones considerables, ausentes en RELAP5, las cuales aparecen inmediatamente después de superarse el umbral de CCFL. De acuerdo con los datos experimentales, dichas fluctuaciones son causadas por la acumulación de líquido en las proximidades del codo, que bloquea parcialmente el flujo de aire. Como consecuencia, el incremento de presión se vuelve más pronunciado una vez que este bloqueo parcial se desarrolla. Para valores más elevados de $J_g^{*0.5}$ (Regiones 3 y 4), la amplitud de estas fluctuaciones aumenta de forma notable en el modelo 3D-VOF.

El código RELAP5 también permite analizar el perfil del líquido a lo largo de la *hot-leg* mediante la fracción volumétrica α , incluso dentro de su marco unidimensional. Las Figuras 3.19a y b ilustran la evolución de α durante el incremento de la velocidad del aire para las Regiones 1 y 3, respectivamente.

En la Región 1 (Figura 3.19a), la curva 1 muestra un leve aumento en el espesor de la película líquida en la entrada de la *hot-leg*. En la curva 2 se observa la formación de un salto hidráulico que comienza a propagarse hacia la zona del codo. Para la curva 3, dicho salto se rompe cerca del codo, generando ondas que se desplazan hacia la salida de la *hot-leg*. Finalmente, en la curva 4 estas ondas crecen lo suficiente como para bloquear parcialmente el flujo en la región del codo. Esta secuencia concuerda razonablemente bien con las observaciones experimentales.

La Región 3 (Figura 3.19b) presenta un comportamiento análogo. La curva 1 revela un aumento más notable del espesor de la película en la entrada de la *hot-leg*, mientras que la curva 2 evidencia

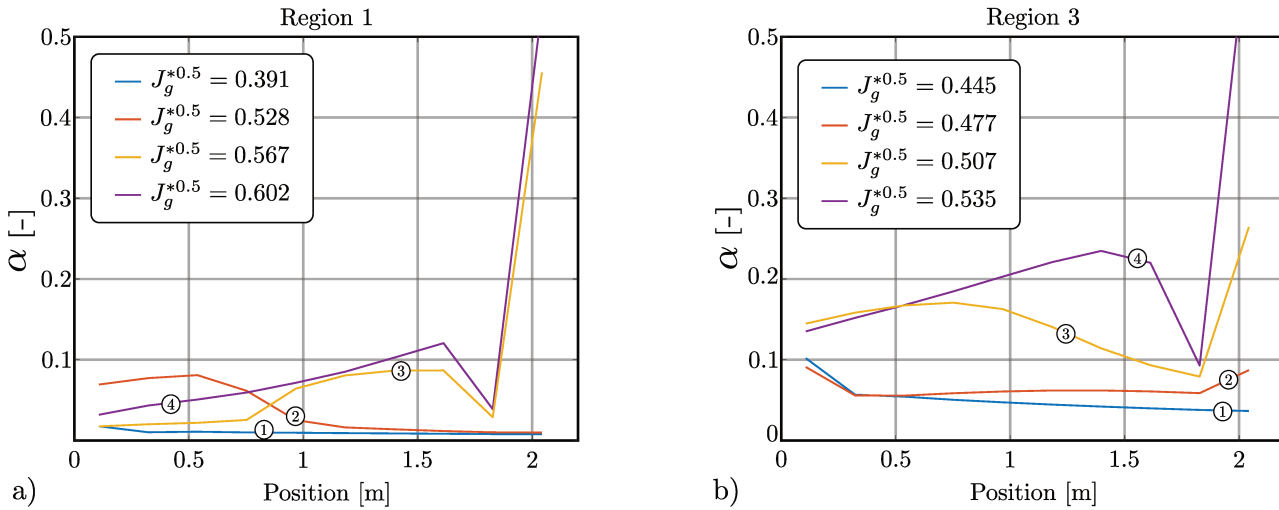


Figura 3.19: Resultados numéricos de RELAP5: distribución de fracción volumétrica líquida (α) en la rama caliente para: a) Región 1, b) Región 3.

acumulación de líquido tanto en la entrada como en la salida. En la curva 3 se forma un salto hidráulico que avanza hacia el codo, concluyendo en la curva 4 con el bloqueo por CCFL. La capacidad de RELAP5 para reproducir el desarrollo de saltos hidráulicos, la acumulación de líquido y el bloqueo en la zona del codo muestra una buena correspondencia con los datos experimentales.

Finalmente, se monitorearon las velocidades adimensionales del líquido $J_f^{*0.5}$ obtenidas con el modelo 3D-CFD para determinar el punto en el que $J_f^{*0.5}$ comienza a disminuir en la salida de la *hot-leg*. Estos valores se representan gráficamente en la Figura 3.20 y se comparan con los datos experimentales. Se observa que, en el modelo 3D-VOF, el fenómeno de CCFL ocurre siempre en un instante anterior al registrado en los resultados experimentales.

La Figura 3.20 resume los principales hallazgos obtenidos mediante ambos enfoques numéricos, comparándolos con los datos experimentales reportados por Issa. En cada uno de los cuatro gráficos —correspondientes a las Regiones 1 a 4— se representa la relación entre $J_f^{*0.5}$ y $J_g^{*0.5}$, incluyendo tanto el modelo lineal de CCFL implementado en RELAP5 como las curvas experimentales de Issa. Para esta geometría, la línea recta tipo Wallis ajusta adecuadamente las observaciones en las Regiones 1 y 2, mientras que en las Regiones 3 y 4 se evidencia un desplazamiento hacia valores superiores de $J_g^{*0.5}$, asociado a mayores velocidades líquidas.

En las simulaciones numéricas, el caudal líquido se mantuvo constante, mientras que el flujo de aire se incrementó escalonadamente hasta superar el umbral de CCFL. Los puntos azules representan las soluciones obtenidas con RELAP5, mientras que las cruces marrones corresponden a los resultados del modelo CFD-3D.

Ambos enfoques muestran que cada incremento en $J_g^{*0.5}$ provoca una caída transitoria en el caudal de líquido, seguida de una recuperación parcial a un nivel inferior. En RELAP5, este comportamiento está gobernado por la restricción lineal de inundación definida por la Ec. (2.62); si $J_g^{*0.5}$ supera dicha línea, el caudal de líquido disminuye abruptamente. Este proceso se repite hasta alcanzar el límite de CCFL, momento en el cual el flujo líquido cae a cero. Como resultado, en las Regiones 1 y 2 las predicciones de RELAP5 coinciden razonablemente con la mayoría de los datos experimentales correspondientes a conductos de pequeño diámetro, aunque se apartan de las curvas no lineales observadas en las Regiones 3 y 4.

En el caso del modelo CFD tridimensional, también se observa una disminución escalonada del flujo líquido tras cada incremento en el caudal de aire, pero sin la imposición de una condición de corte

lineal. En las Regiones 1 y 2, el caudal de agua se reduce proporcionalmente al aumento de la velocidad del aire, acercándose a cero en las cercanías de la frontera lineal. Sin embargo, en las Regiones 3 y 4 el modelo CFD predice que el flujo de aire puede superar el límite lineal sin provocar un bloqueo inmediato del líquido, siendo necesario alcanzar valores más altos de $J_g^{*0.5}$ para interrumpir completamente el flujo. El comportamiento observado en la Región 4, en particular, reproduce fielmente las observaciones experimentales de Issa, diferenciándose claramente del modelo lineal.

En conjunto, los resultados obtenidos con CFD muestran una mejor concordancia con los datos experimentales en condiciones de altas velocidades líquidas, mientras que RELAP5, al emplear una línea de inundación basada en la correlación de Wallis, tiende a sobrestimar el arrastre interfacial, anticipando de manera conservadora el inicio del bloqueo.

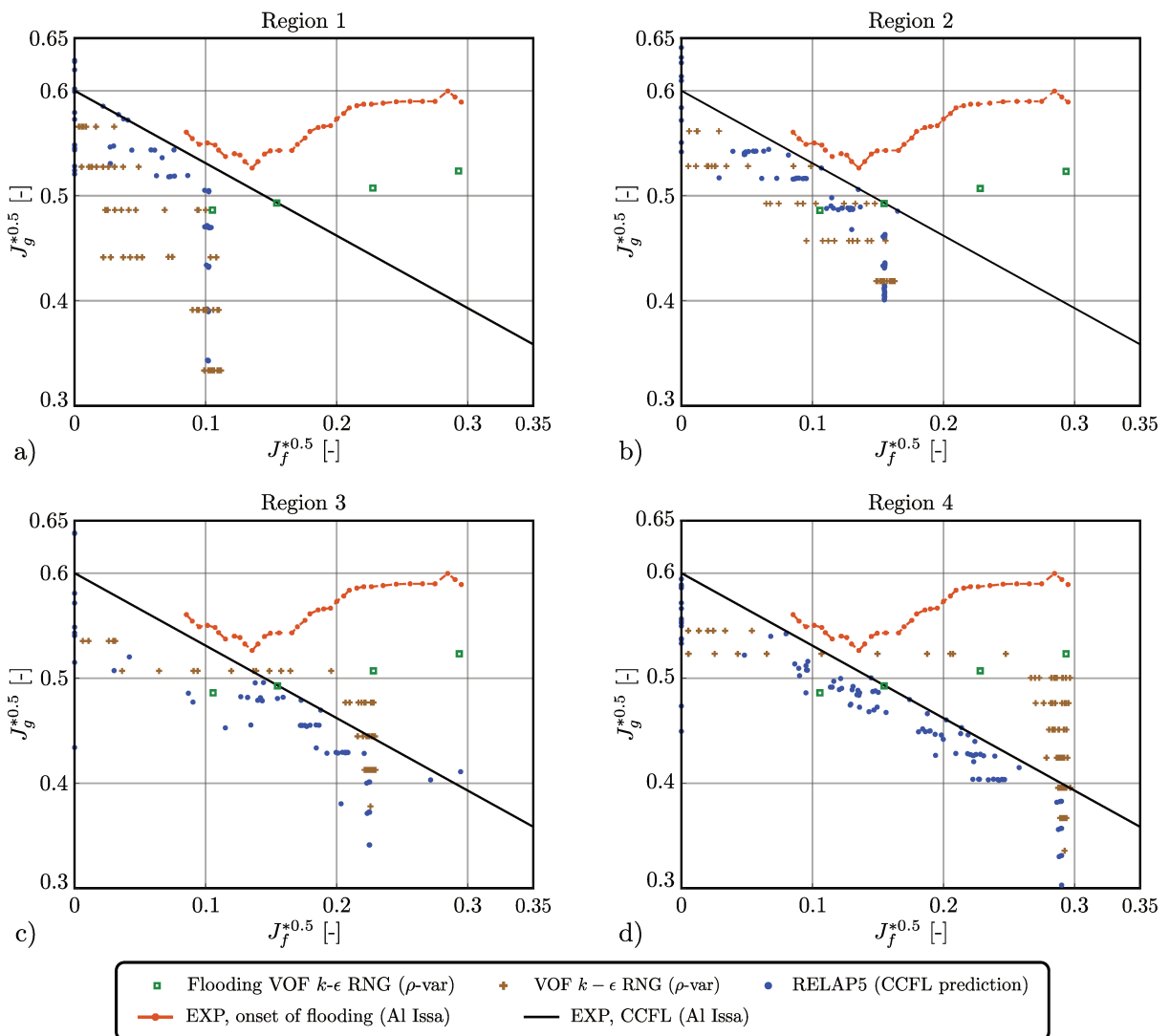


Figura 3.20: Límite de inundación obtenido con los modelos 3D-VOF y RELAP5. Relación entre $J_f^{*0.5}$ y $J_g^{*0.5}$ para las diferentes regiones.

3.4 CASO 4. Pérdida de refrigerante en un reactor CANDU-6

Este capítulo presenta los resultados del último estudio de la tesis y, por ende, sella las conclusiones globales del trabajo. Se comparan dos simulaciones —con y sin modelo CCFL— para el escenario de LOCA 40 % en la succión de la bomba 3312-PM4, a fin de dilucidar la importancia de dicho modelo en la evolución transitoria de la planta.

Durante la fase inicial del transitorio —correspondiente al fenómeno de *blow-down* o depresión súbita del sistema de transporte de calor primario (PHTS)— la fracción de vacío en el circuito se incrementa rápidamente, lo que provoca el disparo del reactor como consecuencia de la realimentación positiva de reactividad. Este pulso inicial de potencia genera un aumento transitorio en la temperatura del combustible, que luego disminuye gradualmente tras la inserción de barras de seguridad y el inicio de la inyección de veneno líquido.

La secuencia del accidente y la cronología de los eventos individuales se muestran en detalle en la Figura 3.21. Como puede observarse, la parada del reactor y el caudal máximo de fuga ocurren dentro del primer segundo. La señal de LOCA se retrasa aproximadamente 10 s debido al tiempo requerido para que aumente la presión de contención y se habilite la activación del sistema de inyección de emergencia (ECCS).

Posteriormente a la señal de LOCA, la baja presión en los cabezales activa el sistema de aislamiento del circuito, provocando el cierre de las válvulas del presurizador (3332MV1/2) y de las válvulas de interconexión a través de los sistemas *Feed & Bleed* y de purificación (3331MV13/22, 3335MV3/4). Cuando se alcanza una diferencia de presión de 0.48 MPa entre el ECCS y el PHTS, se produce la rotura de los discos de ruptura, iniciando la inyección de emergencia de alta presión, la cual introduce agua liviana proveniente de los acumuladores (sistema de alta presión) hacia el PHTS.

La liberación de vapor desde el circuito secundario de los generadores de vapor (*crash-cooldown*) ocurre aproximadamente 40 s después del inicio del evento. La activación de este sistema incrementa la evaporación dentro de los generadores de vapor debido a la caída de presión, mejorando así la refrigeración del PHTS. El sistema de media presión del ECCS comienza a descargar líquido alrededor de los 100 s y continúa hasta aproximadamente los 800 s, mientras que el sistema de baja presión del ECCS no se activa durante el período simulado.

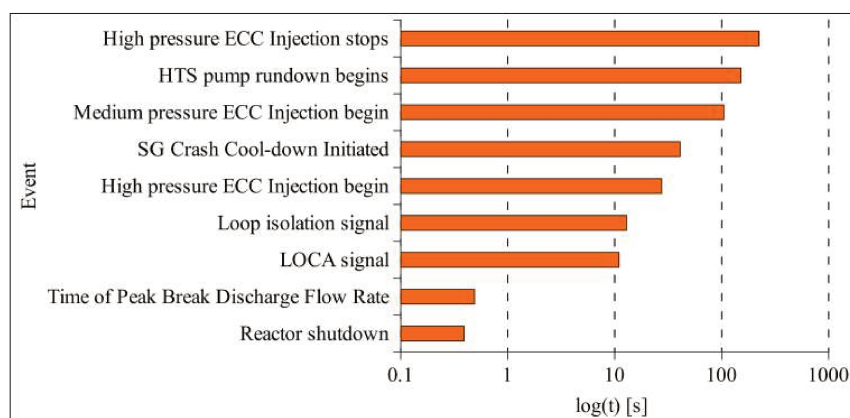


Figura 3.21: Secuencia del evento.

El caudal a través de la rotura se muestra en la Figura 3.22a durante los primeros 100 s. El pico de descarga, de aproximadamente 6300 kg/s, se alcanza rápidamente y luego desciende hasta un valor mínimo cercano a los 50 s. Otros autores que han estudiado accidentes de pérdida de refrigerante de gran magnitud (LLOCA) en reactores PWR reportan un comportamiento similar en la descarga de la rotura [124], caracterizado por un pico máximo inicial seguido de una reducción progresiva del caudal,

independientemente del tipo de planta o del tamaño de la rotura.

A partir del valor mínimo, el caudal de descarga vuelve a incrementarse debido a la inyección proveniente del sistema de alta presión. Después de aproximadamente 80 s, el caudal alcanza un valor casi constante cercano a 1000 kg/s, que se mantiene durante el resto de la simulación.

Como muestran los resultados, el caudal másico descargado desde los generadores de vapor y las bombas presenta una evolución similar a lo largo del transitorio. Esto se debe a que la pérdida de refrigerante está dominada por la diferencia de presión entre el PHTS y la contención, y no se ve significativamente afectada por la circulación forzada del sistema.

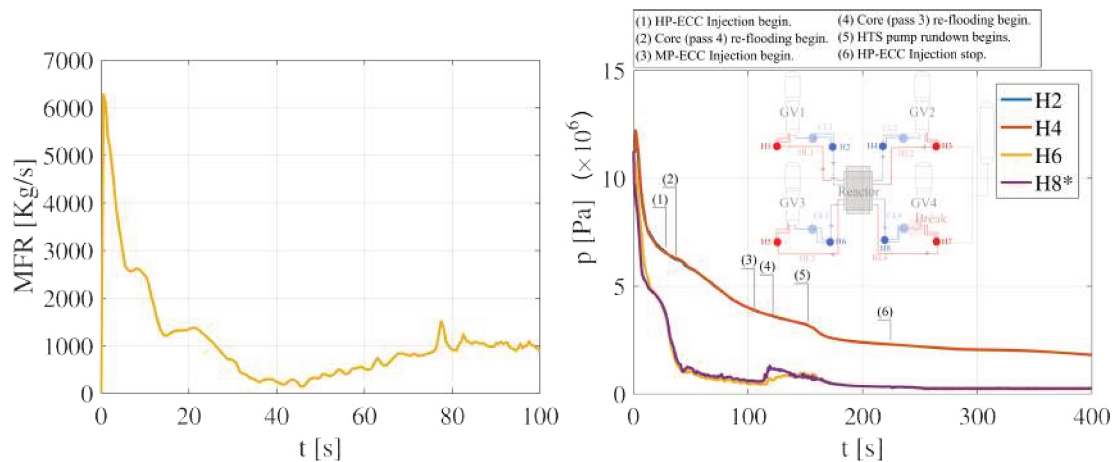


Figura 3.22: (a) Caudal total descargado a través de la rotura, el lado del generador de vapor y el lado de la bomba; (b) Presión en los cuatro colectores de salida.

La Figura 3.22b presenta la evolución de la presión en los colectores de salida del núcleo. La presión en los colectores del circuito dañado (HDR5-6 y HDR6-8) alcanza valores significativamente menores en comparación con el circuito intacto. Durante los primeros segundos (entre 1 y 3 s), se observa una ligera sobrepresión en el circuito intacto, asociada al aumento de potencia generado por la reactividad positiva debida a la formación de vapor. El nivel de presión alcanzado resulta suficiente para provocar la apertura de las válvulas de alivio de líquido (LRVs) durante los primeros instantes del transitorio. Como era de esperar, la presión en el lazo no dañado disminuye lentamente debido a la parada del reactor y a la remoción de calor a través de los generadores de vapor 1 y 2.

El efecto de los sistemas de seguridad se evidencia claramente en la distribución de presión en los colectores (véase Figura 3.22b). Tras el aislamiento del circuito, la presión en el lazo intacto se estabiliza durante algunos segundos antes de continuar descendiendo a una tasa menor. El sistema de aislamiento del circuito evita la pérdida de flujo del lazo intacto a través de la rotura. La depresión alcanzada provoca la activación del sistema de protección de bombas (*Auto-Pump Trip*) alrededor de los 120 s. Si bien esta acción no se clasifica como una función de seguridad, evita la cavitación innecesaria de las bombas principales y la generación de vibraciones que podrían inducir fallas adicionales.

Por su parte, la presión en el lazo dañado desciende rápidamente durante los primeros segundos y muestra un leve incremento en la tasa de descarga alrededor de los 10 s. Este comportamiento, caracterizado por un cambio temporal en la tasa de despresurización, ha sido reportado por otros autores tanto para reactores CANDU [125, 126] como para otros tipos de reactores [124]. Posteriormente, la presión vuelve a descender hasta un nivel que se mantiene prácticamente constante durante el resto del evento.

La Figura 3.23a presenta el caudal a través de las cuatro bombas del circuito primario. Como era de esperar, las ramas más afectadas corresponden al lazo dañado (bombas PMP3 y PMP4). Estas ramas experimentan una rápida disminución del caudal. Tal como se anticipaba, el caudal másico en la bomba 4 (lazo roto) se invierte inmediatamente después de la rotura, mientras que el caudal en la bomba 3 dismi-

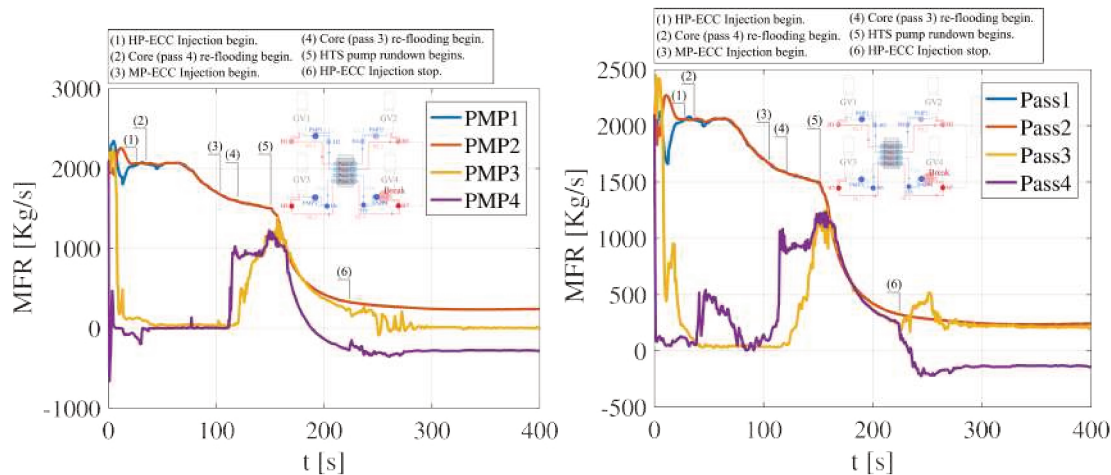


Figura 3.23: Caudal en el circuito primario durante el evento de rotura en el lazo 4: (a) Bombas del circuito primario; (b) Pasos del núcleo.

nuye de manera más gradual, hasta alcanzar valores cercanos a cero debido a la completa evaporación del refrigerante.

Cuando se inicia el reflujo del núcleo a través de los canales del Paso 4, el caudal en las bombas 3 y 4 aumenta rápidamente por efecto de la inyección líquida del sistema de refrigeración de emergencia (ECCS, Etapa 4). Finalmente, cuando las bombas se detienen, el caudal descende a cero en la bomba 3, alcanza el valor correspondiente a la circulación natural (termonamiento) en las bombas del lazo intacto, y se invierte en la bomba 4 (asociada al lazo roto). Estos valores se mantienen durante el resto de la simulación.

El caudal en el lazo intacto permanece aproximadamente constante hasta que se inicia el enfriamiento rápido (*Crash-Cooldown*) alrededor de 30 s después de la señal de LOCA. A partir de ese momento, el caudal másico comienza a disminuir debido al sobreenfriamiento del refrigerante, hasta alcanzar la desaceleración de las bombas (Etapa 5 en la Figura 3.23).

La Figura 3.23b muestra el caudal en los cuatro pasos del núcleo. Cabe destacar que los canales agrupados en el Paso 3 corresponden a aquellos ubicados aguas abajo de la rotura (entre los colectores 8 y 5), mientras que el Paso 4 incluye los canales ubicados aguas arriba de la misma (entre los colectores 6 y 7). Como era esperable, el caudal en el lazo intacto presenta una magnitud similar a la de las bombas 1 y 2.

Los caudales totales en los pasos 3 y 4 reflejan claramente la influencia del sistema de inyección y de la desaceleración de las bombas. Tras el reflujo del núcleo y la detención de las bombas del circuito primario, los caudales en los cuatro pasos se igualan temporalmente y luego disminuyen de manera gradual.

Como se observa en el detalle (Evento 2) de la Figura 3.23b, el reflujo en los canales del Paso 4 ocurre primero (aproximadamente a los 40 s). En ese instante, el caudal aumenta bruscamente, luego vuelve a disminuir y aumenta nuevamente después de los 100 s, mientras los canales permanecen inundados. En cambio, los canales del Paso 3 presentan un tiempo de llenado más prolongado (el inicio de su llenado ocurre en el Hito 4 de la Figura 3.23b). Esto también se refleja en el caudal total del núcleo: a partir de ese momento, el caudal aumenta rápidamente hasta alcanzar su valor máximo cuando se completa el llenado.

Una vez que el sistema de inyección de alta presión cesa su operación y se incrementa el flujo proveniente del sistema de media presión, el caudal a través del núcleo se mantiene por los pasos 1 a 3, mientras que en el Paso 4 se observa una inversión del flujo, sostenida por la contribución continua del

sistema de inyección.

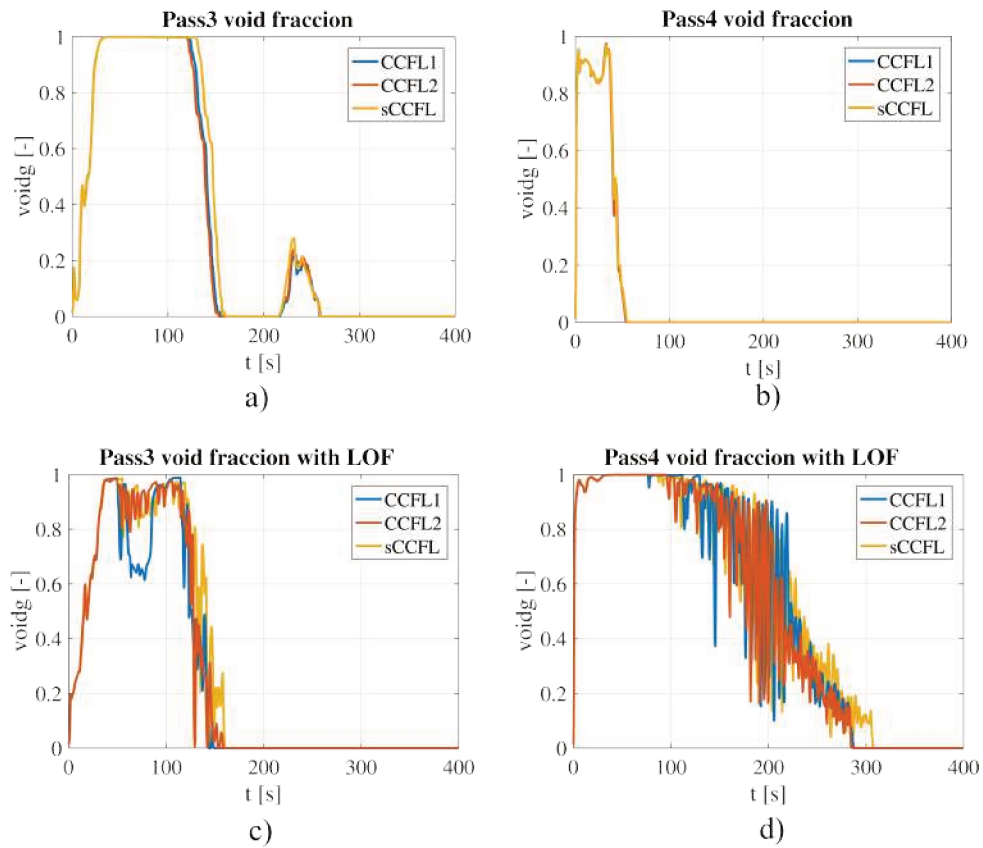


Figura 3.24: Average void fraction for the sensitive evaluation cases: a) Pass 3 without LOF, b) Pass 4 without LOF, c) Pass 3 with LOF, d) Pass 4 with LOF.

Capítulo 4

Conclusiones

En esta sección se desarrollan las conclusiones que se han obtenido a través del desarrollo de cada uno de los cuatro grupos de actividades asociadas a cada objetivo específico mencionado en el Capítulo 1.

1. Seleccionar la estrategia de simulación más adecuada para un flujo segregado entre los métodos basados en Volumen de Fluido (*Volume of Fluid*, VOF) y los métodos de dos fluidos (Eulerianos).

- Las diferentes variantes de VOF (SVOF, VOF-PLIC y VOF-AMR) mostraron una buena capacidad para capturar la posición del frente líquido y las estructuras principales de la interfaz (burbujas, *slug flow*, superficie libre y la onda de derrame). Destaca especialmente el método VOF-PLIC por su equilibrio entre exactitud y coste computacional.
- El método *standard VOF* (SVOF) arrojó resultados aceptables incluso con mallas relativamente gruesas, presentando además un bajo coste computacional. Sin embargo, al refinar la malla, se logró mejorar de manera significativa la precisión, a costa de incrementar el tiempo de cómputo de forma más que proporcional.
- La utilización de refinamiento adaptativo de malla (AMR) no resultó eficiente para el caso transitorio altamente turbulento, ya que el coste computacional se incrementó notablemente sin aportar una ganancia clara frente a mallas estáticas con celdas de tamaño homogéneo.
- El enfoque de dos fluidos (*two-fluid method*, TF) mostró limitaciones en la convergencia, especialmente en configuraciones tridimensionales. Pese a ello, la incorporación del modelo *blending* (TFBE) permitió capturar, en términos generales, el hinchamiento y el flujo *plug* responsable del derrame de agua, aunque no reprodujo con fidelidad la posición exacta del frente líquido ni la complejidad de las estructuras de flujo.
- Los modelos de turbulencia evaluados para SVOF (basados en RANS: κ - ϵ , κ - ϵ realizable y κ - ω SST) no mostraron diferencias concluyentes en la calidad de la solución, presentando un comportamiento similar al estimar tanto la posición de la interfaz como la magnitud de las variables de flujo.

2. Validar las herramientas de *Computational Fluid Dynamics* (CFD) frente a ensayos de flujo multifásico disponibles en la literatura, así como ante pruebas diseñadas *ad hoc* para evaluar la capacidad de la CFD de resolver flujos con cambio de topología (variaciones en el régimen de flujo).

- En el ensayo experimental con inyección rápida de aire en una columna de agua, los métodos VOF (SVOF, VOF-PLIC y VOF-AMR) reprodujeron de forma satisfactoria la posición del frente líquido asociada a burbujas, *slugs*, superficie libre y la onda de derrame. El método estándar VOF mostró

convergencia de malla monótona en 2D y 3D, mientras que el método de dos fluidos (TF) convergió únicamente en 2D. Asimismo, en ensayos de co-corriente y contracorriente, la formulación VOF, unida a un tratamiento adecuado de la turbulencia (ρ -var), demostró capacidad para capturar con precisión y robustez interfases separadas bajo distintos regímenes de flujo.

- En los ensayos de co-corriente y contra-corriente aire-agua, la formulación ρ -con subestimó el salto de turbulencia en la interfaz, afectando la precisión de la simulación. En contraste, la estrategia ρ -var mejoró notablemente la predicción del fuerte gradiente de energía cinética turbulenta, logrando resultados más confiables en velocidad, presión y configuración de la interfaz.
- En la inyección rápida de aire en columna de agua, los modelos κ - ϵ , κ - ϵ realizable y κ - ω SST mostraron comportamientos similares bajo la formulación estándar VOF, sin diferencias concluyentes en la predicción de los parámetros principales del flujo multifásico. Por otro lado, en co-corriente y contra-corriente aire-agua, la combinación de κ - ϵ RNG y el modelo de tensiones de Reynolds (RST) con la formulación ρ -var permitió obtener perfiles de velocidad y turbulencia adecuados incluso en mallas relativamente gruesas. El modelo κ - ω SST presentaba limitaciones con caudales bajos en co-corriente, aunque mejoró su comportamiento para flujos de mayor velocidad.
- El método SVOF ofreció resultados cualitativos y cuantitativos satisfactorios aun con mallas de resolución moderada, mostrando eficiencia en términos de tiempo de cómputo. Tanto VOF-PLIC como VOF-AMR mejoraron la captura de la interfaz, si bien AMR no resultó eficiente en el caso altamente turbulento de la inyección rápida de aire en columna de agua, debido a su alto coste computacional. En los ensayos de co-corriente y contra-corriente aire-agua, la formulación VOF en 3D proporcionó una aproximación más cercana a los datos experimentales que su contraparte en 2D.
- En el ensayo de inyección rápida de aire en una columna de agua, la incorporación del modelo *blending* (TFBE) en el enfoque de dos fluidos (TF) permitió capturar la fase de crecimiento de la bolsa de aire inicial, así como la formación del flujo tipo *slug*, principal responsable del derrame de agua. Además, el tiempo de cómputo requerido fue comparable al de los métodos tradicionales. Sin embargo, la predicción de la posición del frente líquido y la reproducción de estructuras de flujo más complejas no fueron satisfactorias, especialmente en configuraciones tridimensionales.

3. Validar las herramientas CFD en casos específicos donde se observe el fenómeno CCFL.

- Los resultados obtenidos con el modelo 3D-VOF en OpenFOAM han permitido evaluar su capacidad para reproducir los fenómenos observados en los ensayos de Issa. El estudio de sensibilidad de malla mostró que una resolución moderada basta para capturar los efectos interfaciales sin incrementar en exceso el coste computacional, gracias a la formulación ρ -var del modelo VOF-RANS.
- En el Test 1 (Región 1), ambos modelos, 3D-VOF y RELAP5Mod3, registraron la caída de presión inicial, aunque en ambos casos se observó una ligera sobrestimación. No obstante, ambos modelos reprodujeron con precisión el aumento abrupto de presión asociado a la acumulación de líquido en el codo y la restricción definida por la Ec. (2.62). Además, las formulaciones de turbulencia que no consideran variaciones de densidad (ρ -con y laminar) subestimaron la caída de presión, lo que resalta la importancia de modelar correctamente las propiedades del fluido en la región cercana a la interfaz.
- En el Test 2, el modelo 3D-VOF representó de manera más precisa la dinámica interfacial y la reducción progresiva del caudal en la salida de la *hot-leg*. En las Regiones 1 y 2, el caudal disminuyó antes de alcanzar la curva dada por la Ec. (2.62), mientras que en las Regiones 3 y 4 dicha reducción ocurrió más tarde, de acuerdo con los datos experimentales.

- El modelo 3D-VOF también predijo mayores oscilaciones en la velocidad adimensional del líquido, las cuales se intensifican con $J_f^{*0.5}$ debido a la naturaleza aleatoria del CCFL y a la asunción de flujo incompresible. Además, identificó el fenómeno *Active Droplets Entrainment* (ADE-CCFL) en las Regiones 3 y 4, caracterizado por estructuras turbulentas convergentes-divergentes y desprendimiento de gotas, demostrando su capacidad para representar regímenes de flujo complejos.
- En conjunto, estos resultados confirman que el modelo 3D-VOF ofrece una representación más detallada de la interacción aire-líquido y la acumulación de fluido en el codo. Esto pone de manifiesto la importancia de seleccionar el modelo adecuado en función del nivel de detalle requerido para el análisis de flujos a contracorriente en *hot-leg*.

4. Reproducir los casos de prueba de CCFL mediante RELAPMod3 y determinar la capacidad de este código para representar el fenómeno.

- RELAPMod3 capturó de forma satisfactoria la caída de presión inicial asociada a la inyección de aire y el aumento abrupto cuando el líquido se acumula en el codo (Ec. 2.62), lo cual indica una capacidad adecuada para reflejar los eventos principales de CCFL.
- En el Test 2, RELAPMod3 mostró un descenso de caudal inmediatamente tras superarse la curva de referencia, lo que sugiere una predicción algo temprana del bloqueo de líquido en la tubería y el codo. Sin embargo, bajo condiciones donde la relación entre $J_f^{*0.5}$ y $J_g^{*0.5}$ se mantiene lineal (Regiones 1 y 2), la concordancia con los resultados experimentales resultó muy satisfactoria.
- Aunque el modelo 3D-VOF mostró mayor detalle al capturar la dinámica interfacial y las oscilaciones en la velocidad adimensional del líquido, RELAPMod3 se demostró como una herramienta computacionalmente eficiente y con buena capacidad predictiva para identificar el bloqueo del líquido y la caída de presión en escenarios de CCFL.
- Los resultados resaltan la capacidad de RELAPMod3 para representar el CCFL en pruebas experimentales, especialmente en flujos donde la relación $J_f^{*0.5}-J_g^{*0.5}$ sigue un comportamiento lineal. Sin embargo, en casos con alta variabilidad interfacial y turbulencia más pronunciada, el modelo 3D-VOF ofrece una aproximación más detallada de los fenómenos locales.

5. Aplicar las herramientas desarrolladas al estudio de un reactor de potencia real ante un evento de pérdida de refrigerante (*Loss of Coolant Accident*, LOCA) y comparar los resultados con las predicciones numéricas obtenidas con RELAPMod3.

- Las herramientas computacionales desarrolladas se aplicaron al análisis de un accidente LOCA de gran magnitud ocurrido en la tubería de succión de la bomba 3312-PM4, bajo la condición adicional de pérdida del suministro eléctrico principal. El modelo fue implementado en RELAP5 Patch 4. Los resultados evidenciaron una alta concordancia tanto en las tendencias simuladas como en la secuencia temporal de activación de los sistemas de seguridad y de las acciones operativas registradas durante el evento.
- Los resultados numéricos se ajustan al comportamiento esperado para un accidente de estas características, confirmando que los sistemas de seguridad mantienen eficazmente la refrigeración del núcleo durante la transitoria. El sistema de apagado del reactor (SP1 y SP2) logra mitigar el pulso inicial de potencia, evitando una deposición excesiva de energía en el combustible.
- El sistema de inyección de emergencia asegura que, después de 500 segundos, el núcleo se encuentre completamente sumergido en líquido, garantizando una adecuada refrigeración del combustible. En el circuito intacto, la aislación del circuito da lugar a un proceso de refrigeración mediante termosifón, evidenciándose un aumento en el caudal de circulación. Este mecanismo de circulación natural contribuye a la refrigeración a largo plazo del núcleo.

- Si bien el modelo de contención es relativamente simplificado, permite representar adecuadamente el incremento de presión debido a la acumulación de vapor y gases no condensables en el recinto de contención. Los resultados indican que la presión puede ser controlada eficazmente utilizando 4 de las 6 válvulas de rociado del sistema Dousing.
- El modelo implementado en RELAP5 destaca la solidez de las herramientas computacionales desarrolladas para predecir la respuesta termohidráulica de un reactor de potencia real bajo condiciones de LOCA. La metodología propuesta ofrece un marco confiable para evaluaciones de seguridad, demostrando su potencial para futuras simulaciones y estudios de validación en reactores.

Appendix A

Air injection in vertical water column: Experimental test and numerical simulation using volume of fluid and two-fluid methods

J. Sarache, D. Godino, S. Corzo and D. Ramajo. (2022). “Air injection in vertical water column: Experimental test and numerical simulation using volume of fluid and two-fluid methods”. *Chemical Engineering Science*, 255, 117665.

Air injection in vertical water column: Experimental test and numerical simulation using volume of fluid and two-fluid methods

J. Sarache^{a,1}, D. Godino^{a,c}, S. Corzo^{a,b}, D. Ramajo^{a,b}

^aCIMEC Centro de Investigación de Métodos Computacionales (UNL, CONICET), Santa Fe, Argentina

^bUNL Universidad Nacional del Litoral, Argentina

^cUNR Universidad Nacional de Rosario, Argentina

Keywords: Air-water column, CFD, VOF, Two-fluid, PLIC, Adaptive Mesh Refinement, Experimental test.

Abstract. A novel test consisting on fast air injection into a vertical water column was experimentally and numerically studied. Measurements were focused on capturing the air-water interface as well as the volume of water evicted by the air, for a wide range of air flow rates. The numerical simulations, were performed with the Eulerian Two-Fluid (TF) and the Volume of Fluid (VOF) methods. For the TF method three topologies were considered: bubbly flow, drop flow, and blending. The last is a more smart methodology to automatically handle with the different flow regimes. For the VOF method, the standard VOF (SVOF), the Adaptive Mesh Refinement (AMR), and the high order Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC) methods were assessed. SVOF and TF blending methods were choice to study the mesh convergence and turbulence modeling. Two-dimensional (2D) meshes of 2, 1 and 0.5 mm, and three-dimensional (3D) meshes of 2, 1 and 0.75 mm were considered. In all cases the standard VOF (SVOF) formulation showed mesh convergence and good agreement with experiments. The error for the finest 3D mesh was around 1%, but increased up to 20% for the finest 2D mesh. On the other hand, for the TF method mesh convergence was only evidenced for the 2D meshes. Regarding the TF method, the bubbly and drop topology cases led to unacceptable solutions both in terms of interface capturing as well as liquid evicted. On the other hand, the blending methodology clearly improved the estimations, although the interface was only partially captured because of the numerical diffusion. On the other hand, all the VOF methods were in relative good agreement both in terms of the liquid evicted as well as interface capturing. Errors were reduced by refining the mesh. The initial swelling, with small bubbles and large slugs around the air injector was well captured, and the ligaments and drops spilled for high air flow rates were quite well estimated. The SVOF method showed low computational cost for coarse grids, but the computing time increased more than linearly with the mesh size. The AMR method showed accurate solutions, but the computing cost was largely increased with the refining level. Finally, the use of PLIC method for the coarser mesh reduced the error from 15% (SVOF) to 3.5% keeping low the computing cost.

¹Corresponding author. E-mail address: johansarache@gmail.com (J. Sarache).

Nomenclature

List of symbols

α	Volume fraction.
ρ	Density.
t	Time.
p	Pressure.
d_d	Dispersed droplet-bubbly diameter.
μ	Dynamic viscosity.
ν	Kinematic viscosity.
κ	Turbulent kinetic energy.
ϵ	Turbulent dissipation rate.
ω	Specific dissipation rate.
σ	Surface tension coefficient.
τ	Laminar stress tensor.
δ	Interfacial width.
λ	Dimensionless friction coefficient.
f	Weighting functions.
$\mathbf{U}$	Velocity.
$\mathbf{g}$	Gravitational acceleration.
$\mathbf{n}$	Surface normal vector.
$\mathbf{R}$	Reynolds stress tensor.
M	Interfacial force per unit volume.
C	Constant coefficient.
S	Mean strain rate tensor.
A	Interfacial area density.
L	Characteristic length.
I	Identity matrix.
K	Interfacial coefficient.
$E_o = \frac{d_d^2 g \Delta \rho}{\sigma}$	(Eötvös number).
$M_o = \frac{\mu_d^2 g \Delta \rho}{\rho_d^2 \sigma^3}$	(Morton number).
$Re = \frac{U L}{\mu}$	(Reynolds number).
$Pr = \frac{C_p \mu}{\kappa}$	(Prandtl number).

Superscripts:

D	Drag force.
L	Shear lift force.
WL	Wall lubrication force.
VM	Virtual mass force.
TD	Turbulent dispersion force.

Subscripts:

1	Liquid phase.
2	Gas phase.
eff	Effective.
r	Relative.
f	Index for air or water.
$1d$	Bubbles in continuous liquid.
$2d$	Drops in continuous gas.
fs	Sharp interface.
t	Turbulent.
c	Continuous.
d	Dispersed.
c, d	Continuous-disperse flow.
c, c	Continuous-continuous flow.
$term$	Terminal.
I	Interface.

List of acronyms

AMR	: Adaptive Mesh Refinement.
CFD	: Computational Fluid Dynamics.
DNS	: Direct Numerical Simulation.
FCT	: Flux Corrected Transport.
MULES	: Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution.
LES	: Large Eddy Simulation.
OpenFOAM	: Open Field Operation and Manipulation.
PLIC	: Piecewise-Linear Interface Calculation.
RANS	: Reynolds-averaged Navier–Stokes.
SVOF	: Standard Volume of Fluid method.
STF	: Standard Eulerian Two-Fluid model.
TF	: Eulerian Two-Fluid model.
VOF	: Volume of Fluid model.

A.1 Introduction

The formulation, implementation and validation of numerical methods for the solution of liquid-gas fluid dynamics problems is a matter of great interest in engineering sciences, which has attracted the attention of researchers for decades. Water-gas flows are widely found in industry in bubble columns, processing tanks, separation pools, boilers, steam generators, and nuclear reactors, among others. Many processes involve the injection of gas (dispersed bubbles) into stationary or moving continuous liquids. In other devices, such as condensers and sprayers, liquid drops are injected into continuous gas media. In many others cases, the phases are separated or stratified, flowing co-currently or counter-currently in vertical or horizontal ducts, such as in the main coolant lines of nuclear reactors, chemical plants, and oil/gas pipelines. Depending on the properties of phases and the relative velocity between them, different flow regime can be achieved; Figure A.1 depicted the liquid-gas flow in a horizontal channel. In this, small and large interfacial scales are present and several models have been proposed in order to simulate them. Among the most widely used cell methods we can mention the Eulerian Two-Fluid (TF) Method [20, 21], the Mixture model [19], and the Volume of Fluid (VOF) method [22]. For high-dispersed flows with small interface scales such as drop flow (zone A) or bubbly flow (zone B), the mixture model is a suitable and low cost option because it solves the balance equations of mass, momentum and energy for a single phase with mixture properties along with an additional equation for the dispersed phase concentration [19], for which the drift velocity have to be imposed. But, this method is completely unappropriated for large scale flows. On the other hand, the TF model solves the mass, momentum and energy balances for each phase. The method is well suited for high dispersed flows and can be also be applied to large interface scales (zone D), although the correct calculation of interface tracking is only achieved by using dedicated drag models for segregated flow [14]. In this method the balance equations for each phase are coupled through interfacial terms Γ_k , M_k y E_k for mass, moment and energy, respectively. The modeling of these interfacial terms depends on the flow regime (bubbly, drop, segregated, etc).

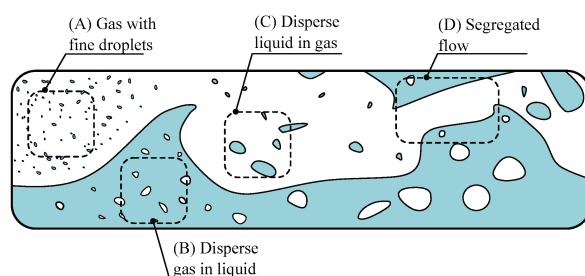


Figure A.1: Sketch of flow topology found in horizontal two-phase flows.

Contrary to the other two methods, the VOF method allows capturing the interface position. Far from the interface the method solves the balance equations of mass, momentum and energy for single phase (liquid or gas), while over the interface the mixture properties are calculated. To track the interface VOF solves a transport equation for an indicator function, (usually the volume fraction α of one of the phases). The VOF method has great precision with fine meshes, although this becomes intractable in highly dispersed flows. Consequently, the method is mostly adopted for segregated flow, free surface problems, and small size problems. The VOF method is usually associated with higher computational cost, but this is really caused by the mesh size need for solving the interface. In the limit, the use of very fine mesh allow capturing the smaller turbulence scales for each phase as well as giving a very good description of the interface. This is known as Direct Numerical Simulation (DNS) [23]. Unfortunately, the computational cost of DNS increases with the Reynolds number by a power of three (Re^3), getting DNS intractable for industrial applications, and currently limited to simple laboratory scale problems.

A.1.1 Volume of Fluid methods

The VOF method was proposed by Hirt and Nichols [22], [24] and known as SOLA method. They proposed a pure advection transport equation for the indicator function α combined with explicit geometric reconstruction. In this method the value of α in the cell is rearranged parallel to the coordinate axes, and the fluxes across the cell faces are calculated through fluid polygons $\alpha_f \mathbf{U}_f$ with $\alpha = 1$. Another way to solve the transport of α was proposed by Suraj et al. [25] by introducing a compression term into the pure advection equation to reduce the thickness of the interface. The methods proposed by Hirt-Nichols and Suraj are first order in the interface $O(h)$. Henceforth, these are referred as standard VOF (SVOF). The SVOF methods combined with Reynolds-averaged Navier–Stokes (RANS) models for turbulence have been largely applied to solve hydraulic problems with satisfactory result. Hargreaves et al. [26] simulated a set of free surface flow over a broad-crested weir tests with a 2D grids and the $\kappa - \epsilon$ RNG model, obtaining very good agreement with experimental data in terms of pressure and velocity profiles. They also assessed the standard $\kappa - \epsilon$ and the Reynolds Stress Model founding very similar results in all cases. They also compared 2D and 3D grids finding slight improvement for 3D cases. Cagatay and Kocaman [27] studied experimentally and numerically the well known dam-break with obstacle test. They compared the free-surface positions obtained with 3D grids using SVOF with $\kappa - \epsilon$, and shallow water models. Both the numerical estimations were in good agreement with experiments, although some discrepancies were found for the reflected negative wave formed after the wave impacts the obstacle. In this sense, the SVOF showed to be more accurate than the shallow water method. More recently, Issakhov et al. [28] carried out experimental and numerical tests of dam-break with various forms of obstacles using SVOF with standard $\kappa - \epsilon$, $\kappa - \epsilon$ RNG, $\kappa - \epsilon$ realizable, $\kappa - \omega$ SST, and Detached Eddy Simulation (DES). All turbulence models showed to be similar in terms of accuracy (free surface location and pressure over the obstacle) and computing time. Other well known two-phase benchmark is the bubble rising. Adelsberger et al [29] carried out tests for liquid-gas density ratios of 10 and 1000, and compared the predictions obtained with the SVOF model implemented in OpenFOAM and two level set models, finding very good agreement in terms of bubble shape and sphericity, and rising velocity for the low density ratio. On the other hand, the numerical solutions for the high density ratio get worse due to the faster ascending velocity of the bubble. Pham et al. [30] also simulated this test using SVOF with the Large Eddy Simulation (LES) model showing similar results.

In SVOF the improvement on the interface representation can only be achieved by refining the mesh, and the use of Adaptive Mesh Refinement (AMR) seems to be a good choice. This method applies dynamic refining where an user-defined criteria is fulfilled. This can be associated to a local error criteria, or to a range of possible values for a flow variable. For instance, the refining criteria associated with the α value is used to refine around the interface. A complete description of the AMR was given by Joshi [31]. AMR was applied to the Finite Volume Method (FVM) and implemented in OpenFOAM by Jasak et al. [32–34]. It is currently limited to hexahedral grids by splitting/merging the cells in all directions. The number of refining levels is also a user-defined parameter. VOF with ARM has been used to solve many engineering problems comparing the efficiency of AMR against fine static meshes. For instance, Cooke et al. [35] solved the liquid-film hydrodynamics on an inclined plane with OpenFOAM. They Compared the computing times of simulations using static meshes and the AMR method, refining close the interface (partial film), and over all the film volume (full film). The computational cost for partial film and full film refining were around 4 and 15 times more than for static mesh. Rek [36] also compared static meshes vs AMR in OpenFOAM for the bubble rising test, finding a slightly improvement on the bubble trajectory for ARM, but with a computing cost 23 times more.

Accurate Interface Reconstruction (IR) techniques, such as the Piecewise-Linear Interface Calculation (PLIC) methods have been proposed [37, 38]. Here the pure advection equation is solved similar than the SOLA algorithm (Hirt and Nichols), but the rearranged of α is not aligned parallel to the axes but to normal planes following the α gradient ($\mathbf{n} = \nabla\alpha/|\nabla\alpha|$). This method leads to second order approximation $O(h^2)$ at the interface depending on the precision used in the solution of the equation system. PLIC

has been used to reproduce all the gas/vapor–liquid two-phase co-current horizontal flow regimes taken from the Baker chart. Qualitatively the method has demonstrated to be suitable for capturing the very different flow regimes [39]. Another geometric IR method called Isoadvector was proposed by Roenby et al. [40, 41], and implemented in the InterFlow solver of OpenFOAM. The authors reported excellent results compared with classical α -equation solvers such as MULES, HRIC and CICSAM. Therefore, in this work the Isoadvector method is referred as PLIC method.

A.1.2 Two-fluid method vs Volume of Fluid method

In complex multiphase flows the topology of the phases can change in time and space. This should not be a problem for VOF methods if the mesh is enough fine to capture the interface. In practice, VOF is applied to large-scale interface of segregated flow problems. On the contrary, the TF method has been largely assessed for dispersed flows. However, the modeling of the interfacial exchange terms is associated to the flow regime. In standard TF (STF) models it is user-depending; That means, the topology of phases is defined from the beginning for the whole domain. To overcome this problem switching between the different regimes (bubbly, segregated or drop), Höhne and Vallée proposed a dynamic blending strategy, where the definition of the topology of phases is based on flow parameters, such as the volume fraction, or the relative velocity, among them [42]. This strategy was successfully used by Höhne and co-workers to solve laboratory scale problems [43–46]. The blending method was implemented by Marschall in OpenFOAM to solve segregated flow tests [47, 48]. Then, Corzo et al. [49] applied it to solve the water-steam flow inside a real-scale nuclear steam generator. More recently, Godino et al. [14] assessed the method by solving five experimental and numerical benchmarks using the same set of interfacial sub-models. The tests covered drop, bubbly and segregated regimes showing the usefulness of blending. But, despite of the clear improvement get with the blending method, the limitations of the TF method to capture the interface in unsteady problems were evidenced.

The selection of the best model for solving complex flows could depend on the regime and the available computational resources. Guerrero et al. [50] simulated bubbly rising flow and annular flow in a vertical cylindrical column, comparing the numerical estimations with the experimental tests. For bubbly flow (α_{avr} below 0.25) they compared the average α and found that the STF method led to lower error than SVOF model. In fact, the solutions of STF were almost independent of the mesh. On the other hand, the SVOF predictions were progressively improved with the mesh size. For the finest mesh both numerical methods led to similar results in terms of α , but the topology of the air phase was completely different. The authors concluded that coarse meshes only lead to acceptable macroscopic solutions with the STF method, although the topology of phases is completely missed and this is not improved by refining the mesh. On the other hand, the SVOF method lead to poor macroscopic estimations with coarse meshes, but macroscopic and topology results improves significantly by refining the mesh.

The use of Lagrangian methods to track the position of bubbles has been also proposed to improve SVOF estimations. Asad et al. [51] performed bubbly flow simulations using VOF with the Discrete Bubble Model (DBM) in OpenFOAM. The numerical prediction showed an overall good agreement compared to the experimental data. In this sense, the choice of the drag closure played a significant role for predicting the bubble dynamics, and the bubble swarm effect included in the Roghair drag model enhanced the flow velocity predictions. They also concluded that the bubble injection rate and bubble size distribution strongly influenced the bubbles ascending in the column. Pham et al. [30] also applied the VOF model with DBM in OpenFOAM as well as the STF model. They solved three tests: the single bubble rising, the dam-break, and the bubbly vertical rectangular column. In the three tests the computing time with VOF was less than with TF for the same grids. In the single bubble rising test the STF model predictions were poor in terms of kinematic and dynamic parameters. However, in the bubbly flow test, the STF model predicted the gas and liquid velocities well. The liquid front position for the dam break test was also correctly predicted. On the other hand, the VOF model was quite accurate in describing

the shape and velocity of the single bubble rising, but less accurate in describing bubbly flow, despite the inclusion of the DBM. The authors concluded that the STF model is recommended for the simultaneous simulation of separated and dispersed flows, while the VOF model is more effective for separated flows.

Despite of the numerical studies reported in literature, the capacity of TF and VOF methods for solving complex dispersed/segregated flows still remains unclear because most of tests addressed fully dispersed or fully segregated flow. In this paper a novel benchmark consisting on the unsteady fast air injection in a water column is experimentally and numerically carried out. Different flow patterns from bubbly to slug and drop flows were achieved by increasing the air flow rate.

The numerical study included the TF and VOF methods. For the TF method three models were considered: the bubbly approach assuming dispersed bubbles in continuous water (referred as TFBU), the drop approach assuming dispersed drops in continuous air (referred as TFDO), and the blending approach using the dynamic flow characterization (referred as TFBE). As for the VOF method, also three models were assessed: the standard VOF with interface compression (referred as SVOF), the VOF with IR through the isoAdvector method (referred as VOF-PLIC), and the SVOF with AMR method (referred as VOF-AMR).

A.2 Benchmark: water column with air injection.

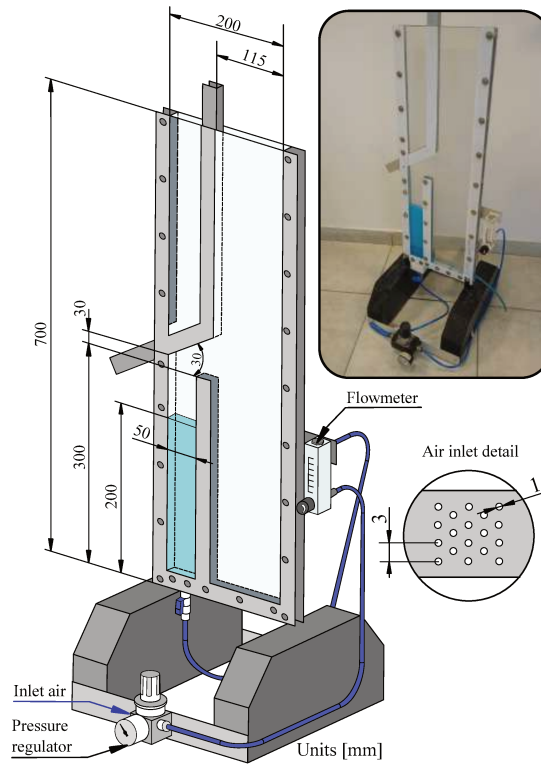


Figure A.2: Experimental test facility.

The test facility is depicted in Figure A.2. This consists on a flat vertical channel of 17 mm in depth made of transparent-plexiglass and aluminium. The channel has a partition dividing the channel in two compartments. The left compartment is initially fill of water up to a height of 200 mm. At the beginning of the test the air suddenly enters through 18 holes of 1 mm drilled on the bottom side of the left compartment. The holes are arranged in a triangular lattice array with a pitch of 3 mm, and distributed over an area of 17 mm $\times$ 10 mm, as shown in the Figure. The air flow rate was controlled by

Properties	Water	Air
ν (m ² /s)	1×10^{-6}	1.48×10^{-5}
ρ (kg/m ³)	998	1.2
σ (N/m)	0.074	-

Table A.1: Fluid properties.

a pressure regulator with a control valve and monitored with a rotameter. The tests were performed for a wide range of air flow rates from 3 l/min to 30 l/min, corresponding to average inlet velocities from 0.5 to 5 m/s.

Depending on the air flow rate, the incoming air swells the water column, dragging and spilling liquid towards the right compartment. Once the air flow was shut down the water remaining in the left compartment was measured by direct visualization on a rule. The process was repeated 20 times for each air flow rate to get the average and dispersion of results. The tests were performed with air and water, and water was colored with blue ink for better visualization. The fluid properties are summarized in Table A.1. High-speed video (120 frames per second) was used to capture the interface evolution and image processing was applied to the frames to get the liquid front position.

A.3 MATHEMATICAL MODEL

In this section the mathematical background of the VOF and TF methods is introduced. First, the SVOF method is introduced and the equations of continuity, momentum, and indicator function are described. From this, the treatment of the indicator function in VOF-PLIC is explained. Then, a brief description of the AMR method is done. Following, the governing equations of the TF method are introduced along with the description of the interfacial force terms. In all cases the governing equations and models are described in the form they are implemented in the OpenFOAM-8 suite. Only the Grace's model for the drag force and the isoAdvector method for the IR (VOF-PLIC) are unavailable in OpenFOAM-8. Therefore, the Grace's model was implemented by the authors [14], and the isoAdvector method was compiled from the open source solver interFlow implemented by Roenby et al. [40, 41].

A.3.1 Governing equations of the Volume of Fluid method

The balance equations of continuity and momentum in VOF are the same of single phase flow, but mixture properties are calculated in the cells where the interface is. In this cells a correction to take into account the surface tension force is added in the momentum equation. The indicator function to track the interface is the volume fraction α , which ranges from 0 to 1 ($0 \leq \alpha \leq 1$), with the limit values associated to the regions where pure phases are present, and intermediate values associated to the cells where the interface is. The governing equations are written as:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) - \nabla \cdot (\mu_{eff} \nabla \mathbf{U}) = -\nabla p_d - \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \nabla \rho + \nabla \cdot (\mu_{eff} (\nabla \mathbf{U})^T) + \sigma \kappa \nabla \alpha \quad (\text{A.2})$$

where $\mathbf{U}$ is the velocity, ρ is the density, $\mathbf{g}$ is the gravitational acceleration, and p_d is a modified pressure ($p_d = p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$). The last term in the right-hand side of Eq. (A.2) represents the surface tension force,

and is null outside of the interface. This is calculated from the surface tension coefficient σ and the local curvature of the free surface κ :

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \quad (\text{A.3})$$

Inside the interface the velocity $\mathbf{U}$ is a mixture of the velocities of both phases:

$$\mathbf{U} = \alpha \mathbf{U}_l + \mathbf{U}_g(1 - \alpha) \quad (\text{A.4})$$

As above mentioned, ρ and μ in the interface are calculated as a weighted average of α ($\rho = \alpha \rho_l + \rho_g(1 - \alpha)$ and $\mu = \alpha \mu_l + \mu_g(1 - \alpha)$). The effective viscosity μ_{eff} is the sum of the molecular viscosity and the turbulent viscosity μ_t ($\mu_{eff} = \mu + \mu_t$), which is achieved from the closure turbulent model [127, 128].

A.3.2 Transport equation of α in SVOF

The transport equation of α in the SVOF method can be written as:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}_r (1 - \alpha)) = 0 \quad (\text{A.5})$$

As noted, in Eq. (A.5) an additional compression term based on the relative velocity $\mathbf{U}_r = \mathbf{U}_l - \mathbf{U}_g$ is added to the pure advection equation in order to reduce the interface thickness. This equation is solved in a sub-cycling way, which means that each time step Δt is divided into adaptive sub-steps Δt_{sts} . For each Δt_{sts} the equation is solved by means of the Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution (MULES) solver, which is based on the Flux Corrected Transport (FCT) technique [98]. Within each sub-cycle the equation (A.5) is discretized as follows:

$$\frac{\alpha^{n+\nu+1} - \alpha^n}{\Delta t} + \sum_f (\alpha)_f F^{L,n+\nu} + \sum_f [\alpha(1 - \alpha)]_f F^{NL,n+\nu} = 0 \quad (\text{A.6})$$

where ν is the current fixed-point iteration in order to circumvent the non-linearity of the fluxes. $F^{L,n} = \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f$ is the flux due to the center-of-cell velocity, and $F^{NL,n} = (\mathbf{u}_r)_f \cdot \mathbf{S}_f$ is the flux due to the artificial compressive velocity added at the interface.

A.3.3 Transport equation of α in VOF-PLIC

The transport equation of α in the VOF-PLIC method can be written as:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{U}) = 0 \quad (\text{A.7})$$

As noted, the compression term added in Eq. (A.5) in the SVOF method is missing in VOF-PLIC, and Eq. (A.7) is a pure advection equation. Following the isoAdvector method proposed by Roenby et al. [1, 40, 41] this equation is explicitly solved without using MULES. The Eq. (A.7) can be discretized over the cell v_i , and the faces f_j as shown in equation (A.8):

$$\alpha_i^{n+1} = \alpha_i^n - \frac{1}{V_i} \sum_{j \in B_i} \Delta V_{ij}^n \quad (\text{A.8})$$

where α_i^n and α_i^{n+1} are the void fractions at the beginning and end of the iteration, V_i is the volume of the cell v_i and B_i is the list of boundary faces f_j . Therefore ΔV_{ij} is the total volume of fluid A transported across the face f_j during the time from t to $t + \Delta t$. The reconstruction of ΔV_{ij} in PLIC is

performed by geometric methods in place of the traditional algebraic ones. If the velocity of the fluid is approximated as a constant, then the volumetric flux ϕ_{ij}^n across f_j from t to $t + \Delta t$ is $\tilde{\phi}_{ij}^n$, and ΔV_{ij} can be approximated as shown in the equation (A.9):

$$\Delta V_{ij}^n \approx \frac{\tilde{\phi}_{ij}^n}{|\mathbf{S}_f|} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{f_j} \alpha(\tau) dA d\tau \quad (\text{A.9})$$

The term $\int_{f_j} \alpha(\tau) dA$ in equation (A.9) is just the time integral of the submerged area of face f_j , as shown in equation (A.10):

$$A_j \equiv \int_{f_j} \alpha(\tau) dA \quad (\text{A.10})$$

Before to describe how A_j varies with time, the method to determine the plane that divides the cell v_i in two is briefly explained. At the beginning of the time step, the volume fraction α_i^n in the cell v_i is known. First α_i^n is interpolated to each vertex of the cell. Then, an isovalue α_0 is calculated to define an isosurface- α_0 . After that, an algorithm covers all the edges of the cell to determine whether or not there is an intersection between the edge and the isosurface- α_0 . Connecting these intersection points across the cell faces it is possible to define the isosurface plane as shown in Figure A.3. Once the isosurface is defined, the centroid $\mathbf{x}_s$ and the normal vector $\hat{\mathbf{n}}_s$ can be calculated. In each time step the isosurface moves following the direction of $\hat{\mathbf{n}}_s$. The intersection of the isosurface with the cell faces f_j in each time step defines an area $A(\tau_{1,2,3...M})$ (see the right side in Figure A.3), through which the fluid is crossing the face f_j . In Figure A.3 the top face of the cell and the interception area A_j are represented for different times ($\tau_{1,2,3...M}$). In order to integrate the area in time, a piecewise quadratic polynomial $A_j(\tau)$ is calculated and ΔV_{ij}^n is estimated as shown in Eq. (A.8).

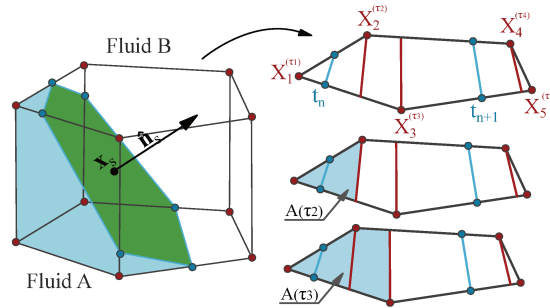


Figure A.3: Construction of the isosurface by interception with the cell face. Courtesy of Roenby et al. [1]

A.3.4 Adaptive mesh refinement

As it is well known, the SVOF method is largely depending on mesh refinement. In this sense the Adaptive Mesh Refinement seems to be an interesting strategy to dynamically obtain high accuracy and high resolution in the interface. This tool is available in OpenFOAM for hexahedral grids. The refining criteria is based on the calculation in cells of a refining variable ϕ . In cells where ϕ fall within the user-defined limits the cell is split into 8 child cells. On the other hand, if ϕ fall out of the limits the cell is coarsened up to its cell master size. The amount of refining-coarsening steps is also defined by the user. In this study the volume fraction α was choice as the refining variable with limits between 0.01 and 0.99 in order to refine only around the interface. For the three cell sizes considered in this work no significant differences were found by reduce the range of ϕ .

A.3.5 Governing equations for Eulerian two-fluid model

The TF model implemented in OpenFOAM is explained in depth by Weller [100] and Jasak [101]. It solves a set of balance equations of mass, momentum and energy for each phase, while fulfill some global constraints such as the global mass conservation. The model's key is in the interfacial exchange represented by transfer terms given by constitutive laws or empirical models. For binary gas-liquid systems the balance of mass for each phase in differential form reads:

$$\frac{\partial(\alpha_f \rho_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{U}_f) = 0 \quad (\text{A.11})$$

where the sub-index f refers to water or air. Due to the phase change is not significant for the performed test, the mass transfer term is not included on the right hand side of Equation (A.11). A global mass conservation equation is obtained after adding the liquid and gas mass balance equations:

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_2 \rho_2)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{U}_1 + \alpha_2 \rho_2 \mathbf{U}_2) = 0 \quad (\text{A.12})$$

where the sub-indexes 1 and 2 refer to liquid and gas phases, respectively. This global balance becomes a restriction to be satisfied by the pressure-velocity coupling algorithm [100]. The momentum balance is accomplished separately for each phase, but the equations are coupled through interfacial terms. Using the Reynolds average [102], the RANS momentum equations are formulated as

$$\frac{\partial(\alpha_f \rho_f \mathbf{U}_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \mathbf{U}_f \mathbf{U}_f) = \nabla \cdot (\alpha_f \mu_{eff} \nabla \mathbf{U}_f) - \alpha_f \nabla p_d + \alpha_f \rho_f \mathbf{g} + \mathbf{M}_{eff} \quad (\text{A.13})$$

where $\mathbf{M}_{eff}$ is an effective interfacial force. Then, the velocity of each phase is rewritten in terms of the mean velocity $\mathbf{U}$ and the relative velocity $\mathbf{U}_r$:

$$\mathbf{U} = \alpha_1 \mathbf{U}_1 + \alpha_2 \mathbf{U}_2 \quad (\text{A.14})$$

$$\mathbf{U}_r = \mathbf{U}_1 - \mathbf{U}_2 \quad (\text{A.15})$$

and the velocity of phase 1 is written as:

$$\mathbf{U}_1 = \mathbf{U} + \alpha_2 \mathbf{U}_r \quad (\text{A.16})$$

Despite of $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$, in general only the continuity equation of the dispersed phase is solved. Following the method proposed by Weller et al. [103], the Eq. (A.11) is rewritten to avoid boundlessness problems. Substituting Eq. (A.16) into the continuity equation of phase 1 (A.11) leads to:

$$\frac{\partial(\alpha_1 \rho_1)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\alpha_1 \alpha_2 \rho_1 \mathbf{U}_r) = 0 \quad (\text{A.17})$$

The energy equation is not included in this work because the fluids are assumed isothermal. Regarding the compressible effects, the air density variation is calculated through the ideal gas law considering the pressure changes.

Interfacial momentum exchange

The coupling among the phases in the momentum equation (A.13) is given by $\mathbf{M}_{eff}$. It includes the drag and non-drag efforts as reads:

$$\mathbf{M}_{eff} = \mathbf{M}_{eff}^D + \mathbf{M}_{eff}^L + \mathbf{M}_{eff}^{WL} + \mathbf{M}_{eff}^{TD} + \mathbf{M}_{eff}^{VM} \quad (\text{A.18})$$

where M_{eff}^D is the drag force, M_{eff}^L is the lift force, M_{eff}^{WL} is the wall lubrication force, M_{eff}^{TD} is the turbulent dispersion force, and M_{eff}^{VM} is the virtual mass force. A detailed description of these terms and the selection of the suitable models to calculate each one of them were provided in previous work [14]. Regarding the drag force, the models proposed by Grace [93] and Tomiyama were choice for bubbly and drop flow, respectively. Regarding the segregated flow, the model proposed by Marschall [47] was selected. The lift and wall lubrication forces were modeled with Tomiyama [104] and Frank [105] models, respectively. The model proposed by Burns et al. [106] was applied for the turbulent dispersion force, and the virtual mass coefficient was 0.5 for all cases [107].

Blending method

For an air-water system the bubbly, segregated/stratified, and drop flows are possible. These regimes are quite well characterized separately, and the interfacial forces are largely different depending on which is the disperse/continuous phase. Moreover, the transition between bubbly and drop flow is usually rather diffuse. The blending method handles with these topologies by combining the models through a set of weighting functions f defined in terms of local flow variables. These weighting functions affect each of the interfacial terms M_{eff}^x as:

$$M_{eff}^x = M_{1d}^x f_{1d} + M_{2d}^x f_{2d} + M_{fs}^x f_{fs} \quad (A.19)$$

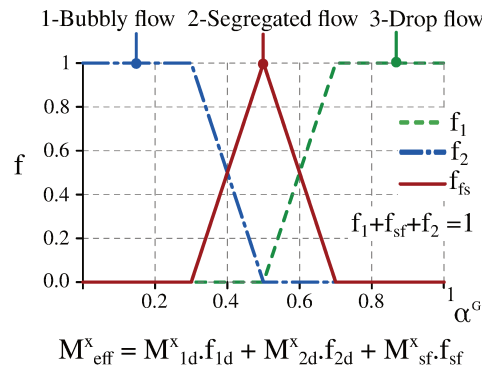


Figure A.4: Linear weighting functions of the blending method.

Variable	Inlet	Open	Wall
α	fixedValue	inletOutlet	zeroGradient
ϵ	fixedValue	fixedValue	epsilonWallFunction
κ	fixedValue	inletOutlet	kqRWallFunction
ν_t	calculated	calculated	nutkWallFuntion
ν_t'	zeroGradient	inletOutlet	zeroGradient
p_{rgh}	fixedFluxPressure	fixedValue	fixedFluxPressure
U	fixedValue	pressureInletOutletVelocity	noSlip

Table A.2: Boundary Conditions for 3D models.

For a gas-liquid system the coefficients M_{1d}^x , M_{2d}^x and M_{fs}^x represent well-defined regimes of bubbles in continuous liquid, drops in continuous gas, and separated flow, respectively. The transition between them is done through the weighting functions f_{1d} , f_{2d} and f_{fs} , which can be described by simple

Mesh	Type of mesh	Cell size (mm)	Number of cells	Skewness maximum	Max Aspect ratio	Non-ortogonality average	Non-ortogonality maximum
M2D-1	2D	2	26,290	1.14	2.22	3.92	29.59
M2D-2	2D	1	105,160	1.15	2.22	3.94	29.80
M2D-3	2D	0.5	420,640	1.15	2.22	3.95	29.90
M3D-1	3D	2	210,320	1.14	2.41	3.26	29.59
M3D-2	3D	1	1,682,560	1.50	2.41	3.25	29.80
M3D-3	3D	0.75	5,030,640	1.50	2.41	3.25	29.86

Table A.3: Mesh parameters.

linear functions or by more complex functions (e.g. hyperbolic tangents). A simple way to select the type of flow is through the void fraction α , but more complex functions can also include the α gradient, and the phase velocities, among others. In this work, linear functions depending on α were adopted. As shown in Figure A.4, each function is limited between 0 and 1, and the sum of them is also bounded between these limits.

As shown in Figure A.4, the transition between fully dispersed and segregated flow is defined by two user-defined thresholds of 0.3 and 0.7.

A.3.6 Boundary and initial conditions

The small holes of the inlet shown in Figure A.2 are modeled as a rectangular patch with the same flow rate. The intake turbulence intensity was 10%. Table A.2 resumes the boundary conditions for the 3D meshes using the native terminology in OpenFOAM. For 2D meshes the front and back planes were set as empty.

A.3.7 Turbulence modeling

To closure the RANS equations, the turbulent viscosity μ_t must be estimated. Most of models assume that turbulent variables can be transported through an advection-diffusion equation containing production/destruction terms. This adds a set of turbulent equations to be solved for each phase. Based on previous tests [14] the κ - ω SST (*shear stress transport model*) was choice for the TF model simulations. This model is appropriated for large scale problems, because it switches between the κ - ω turbulence model near the wall and the standard κ - ϵ model in the bulk. This model also has been proved to be suitable for free-surface flows [14]. The influence of the dispersed phase on the turbulence was investigated by many authors such as Sato [108], who proposed a κ - ω -SATO model introducing a correction term on the turbulent viscosity to take into account the diameter and velocity of the bubbles. This model was previously assessed against the standard κ - ω SST resolving a vertical air-water column. However, no significant differences were found in the void fraction distribution and phase velocities [14].

The κ - ω -SATO model is not implemented in OpenFOAM for the VOF model. Therefore, the turbulence induced by the dispersed phase around the interface is not particularly taken into account. Another problem of RANS methods for turbulence modeling in VOF is related to the effect of density variation near the interface. Recently, Fan and Anglart [66] implemented different VOF-based solvers in OpenFOAM to include the effect of compressibility on the turbulent transport equations. They solved different tests, showing the impact of the implementations over the turbulent kinetic energy near the interface. However, the engineering parameters such as the liquid front position, the shape and size of drops, and the velocity of phases did not change noticeable with respect to SVOF with classical RANS models.

At the same time, there are many reports showing the capability of SVOF with classical RANS models to solve complex multiphase flows [109, 110]. For instance, Bricker et al. [109] solved the dam break with and without obstacles with VOF and TF models. In VOF simulations the liquid front interface was quite well captured, and the small interfaces, due to the entrance of bubbles into the liquid bulk, after the wave impact behind the wall, were more or less captured depending on the mesh refining. On the other hand, the TF model was able to track the liquid front, but the bubbles were not observed at all. In the present study three turbulence models were assessed: the κ - ω SST, κ - ϵ standard and κ - ϵ realizable. All them were in good agreement with experimental data. In 2D meshes the κ - ϵ realizable showed to be better while in 3D meshes the κ - ϵ standard led to a slightly improvement.

The two equation $\kappa - \epsilon$ model solves two transport equations, one for κ , and the other for ϵ . From these two quantities the turbulent length scale L can be calculated as:

$$L = \frac{\kappa^{3/2}}{\epsilon} \quad (\text{A.20})$$

For 2D cases, the numerical length scale L calculated from Eq. (A.20) was around 50 mm for all the meshes. This length is the same as the width of the liquid column. Similarly, for the 3D cases, the length scale was around 17 mm, which is the depth of the liquid column. These length scales are many times larger than the grid cell sizes. A good practice would be to verify experimentally these scale lengths, but it is beyond the scope of this study.

To capture the turbulent effects near the wall, the logarithmic wall law proposed by Prandtl within the turbulent sublayer was used:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(By^+) + 1 \quad (\text{A.21})$$

where B is a constant value depending on the roughness of the wall, and κ is a constant obtained from experiments. the dimensionless variables u^+ , y^+ and u_τ are defined as:

$$y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu} \quad ; \quad u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad ; \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (\text{A.22})$$

In Eq. (A.22) y is the orthogonal distance to the wall, u_τ is the friction velocity, τ_w is the wall shear stress that is considered constant in the boundary layer, and ν is the kinematic viscosity. If the dimensional distance y^+ in the first cell from the wall is less than 11 ($y^+ < 11$) the turbulent viscosity ν_t is zero. Otherwise, ν_t is:

$$\nu_t = \frac{y^+ \nu}{k[\ln(By^+) + 1]} \quad (\text{A.23})$$

It can be noted that this condition only applies to the first cell near the wall. In the rest of the cells ν_t is calculated through the turbulence model.

A.4 COMPUTATIONAL MODEL

In order to evaluate the importance of the cell size on the solutions several 2D square and 3D hexahedral meshes were built with *blockMesh*. The Table A.3 reports the main mesh parameters. The SVOF, VOF-PLIC, and AMR simulations were performed with the *interFoam* solver, and the TF models with the *twoPhaseEulerFoam* solver. All runs were performed with parallel distributed computing using 4 nodes of 4 processors (Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1620 v2 @ 3.70GHz - 1 CPU x 4 processors) with Infiniband (QDR 40 Gbps). To ensure correct precision, the advective terms were discretized using the high resolution Van Leer scheme for the momentum, α , and turbulence equations. The only exception was the adoption of the limitedLinearV1 method for the advective term in the VOF-PLIC momentum

equation, which is recommended by Roenby et al. to keep the high resolution at the interface given by the isoAdvector method.

The temporal terms in the momentum and turbulence equations were discretized using Backward Euler with adaptive time steps maintaining a Courant number less than 0.2. The temporal term on the α equation was discretized using Forward Euler for all cases. The sub-cycling technique was employed in SVOF and AMR runs. The pressure-velocity coupling was solved through the PIMPLE algorithm with three outer correctors and one inner corrector. The absolute convergence criteria for α was 1×10^{-8} , and for the rest of variables was 1×10^{-7} . Non-orthogonality corrections were not necessary because Cartesian meshes were employed.

A.5 RESULTS AND DISCUSSION

The results are presented in two sections: the first one reports the experimental data, and the second one the numerical results and the comparison with experiments.

A.5.1 Experimental results

In Figure A.5 the remaining water in the left compartment at the end of the test is drawn for all air flow rates. The error bars were calculated as the variance of 20 repetitions performed for each air flow rate. As expected, while the air flow increases more water is evacuated and the variance grow.

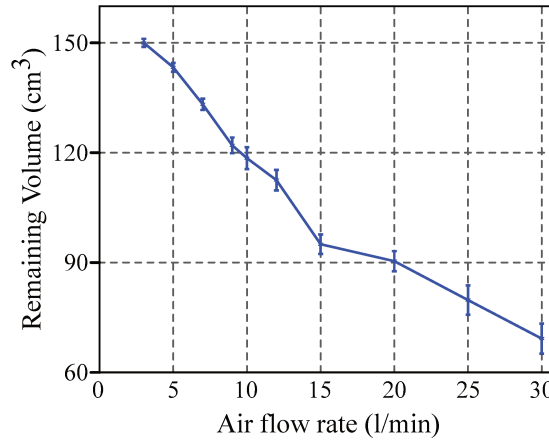


Figure A.5: Liquid remained at the left compartment at the end of the tests for all air flow rates

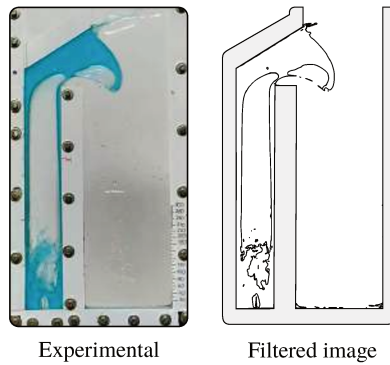


Figure A.6: Experimental results: Left: Image of the test. Right: liquid front position after filter the image.

In order to have a clear definition of the liquid front position the test images were filtered as shown in Figure A.6. The Figures A.7 and A.8 correspond to the filtered images for air flow rates of 10 and 30 l/min, respectively. The tests were carried out for about 5 s, but the most of the liquid leakage was during the first second. Hence, the image sequence are for this period. The phenomenology for both air flow rates was similar. First a large bubble grew around the air inlet causing the swell of the liquid column with the consequent elevation and sloshing of the liquid front. The large bubble grows and rises pushing the liquid. However, for the 10 l/min tests at 0.06 s the initial bubble divides in two small bubbles, and then they collapse into a large slug at 0.3 s. This behavior is observed in most of the repetitions at 10 l/min, but rarely observed at 30 l/min. The pushed liquid impacts on the inclined wall, and a large wave is projected towards the right compartment causing the most of the liquid leakage. After that, a bubbly flow is established. After the first leakage the large bubbles or slugs are not evidenced and bubbles less than 20 mm are observed. At the end of the 10 l/min tests around 20 % of the water is evacuated.

As for the 30 l/min test only one bubble is formed and continues growing up to reach the top side. The slug ascends more quickly pushing a large amount of water towards the next compartment. For this case, the energy of the wave is enough to impact on the right wall and around 60 % of the water is evacuated. After the initial swelling a highly turbulent bubbly flow with bubbles less than 10 mm is established.

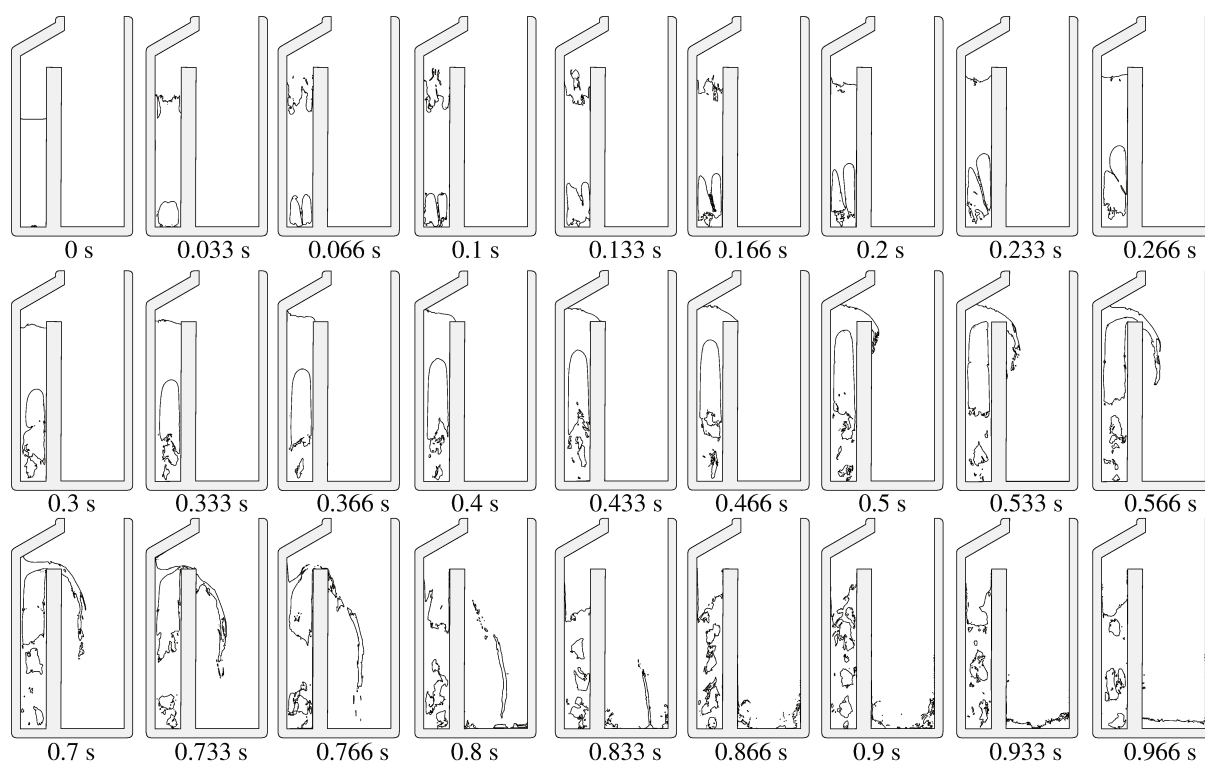


Figure A.7: Experimental Results: Filtered image sequence with air flow rate of 10 l/min

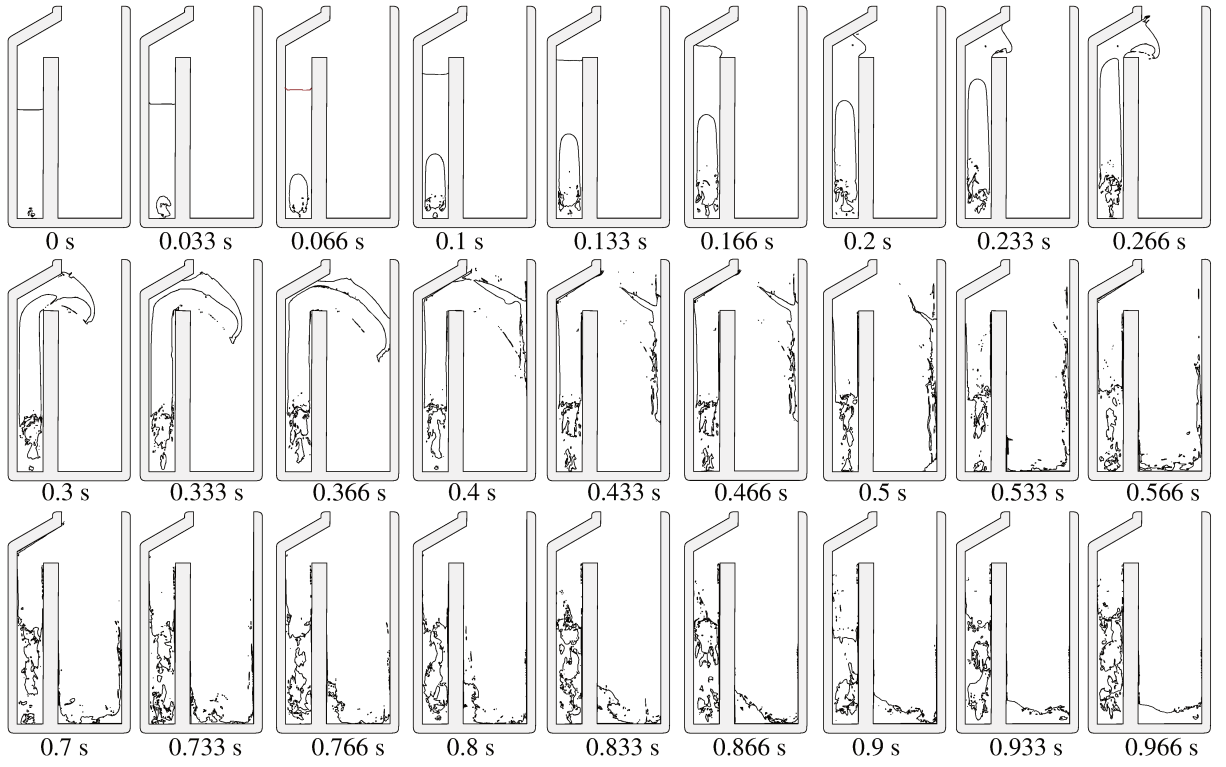


Figure A.8: Experimental Results: Filtered image sequence with air flow rate of 30 l/min

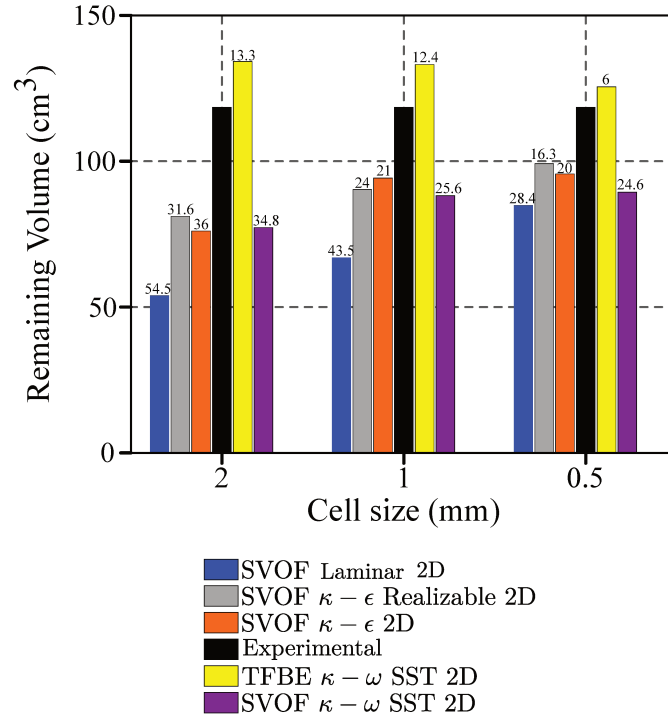


Figure A.9: Convergence with 2D meshes for 10 l/min.

A.5.2 Numerical results

Mesh convergence and turbulence modeling

A mesh convergence study was carried out considering cell sizes of 2 mm, 1 mm, and 0.5 mm for 2D cases and 2 mm, 1 mm and 0.75 mm for 3D cases. This study was performed for the SVOF and TFBE models. The effect of the turbulence models was also studied considering laminar, κ - ϵ , κ - ϵ realizable, and κ - ω SST models for air flow rates of 10 l/min and 30 l/min. The experimental data were also included for comparison. The Figures A.9 and A.10 display the volume of liquid remaining on the left column at the end of the experiment. Results are for the airflow rate of 10 l/min with 2D and 3D meshes. The relative errors for each case are also included at the top of the bars.

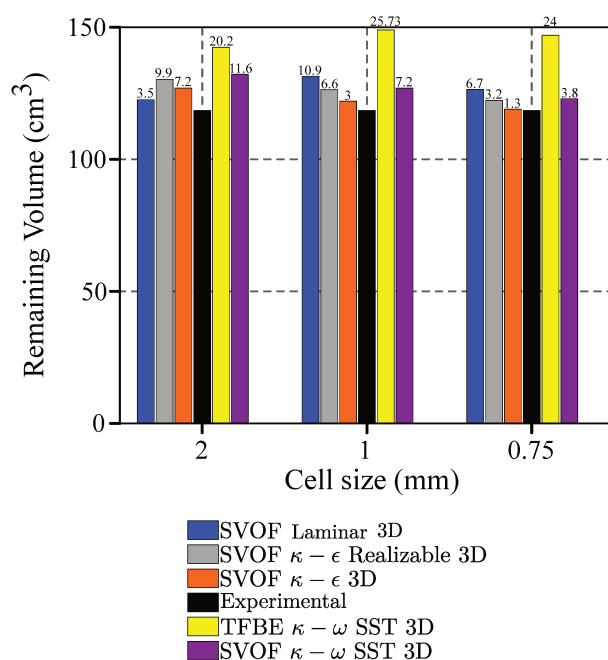


Figure A.10: Convergence with 3D meshes for 10 l/min.

For the 10 l/min 2D cases (Figure A.9) the convergence was observed for all the turbulence models, and also for the laminar case. Results were in relative agreement for the coarse mesh, but they were progressively improved with refining. The TFBE model showed best results than SVOF cases for the three meshes. Mesh refining was effective to reduce the relative error from 13.3 to 6 %.

On the contrary, only relative agreement was obtained for 3D meshes (Figure A.10) with laminar and TFBE models, and mesh convergence was not verified. For the TFBE model the relative errors were above 20 % in all cases. This almost independent behavior of the TF model with the mesh has been also reported by Gerrero et al. [50] for bubbly column tests, by Pham et al. [30] for single bubble rising, dam break, and bubbly column tests, and by Fan and Anglart [66] for co-current air-water horizontal flow. On the other hand, the relative error of the SVOF κ - ω SST case remained below 3.8 %, and reduced below 1.3 % with κ - ϵ .

The Figures A.11 and A.12 correspond to 30 l/min tests with 2D and 3D meshes, respectively. Similar than the observed for 10 l/min, the best agreement in 2D meshes was obtained for the TFBE model, but the method led to poor results in 3D meshes with relative errors as higher as 75 % for the finest mesh. On the other hand, the SVOF κ - ϵ case allow to reduce the relative error from 36 % to below 3 % by refining.

All SVOF 2D cases for 10 l/min and 30 l/min underestimated the remaining volume of liquid, but displayed slow convergence to the experimental value. In this sense, the κ - ϵ model showed a bit better fitting with experiments. On the other hand, the TFBE model overestimated the remaining liquid for all

meshes. The 3D coarse mesh largely overestimated the liquid overtopping, although the results significantly improved with refining. On the contrary, the 3D coarse case showed a significantly lower error, but the results get worse by refining.

Mesh convergence was also evaluated for the highest air flow rate of 30 l/min. The results are shown in Figures A.11 y A.12. In this case only the SVOF κ - ϵ model and the TFBE κ - ω SST model were assessed considering 2D and 3D grids. Similar than the observed for 10 l/min, the liquid overtopping was significantly overestimated with 2D SVOF models. The results improved significantly with mesh refinement, although the errors remained high even for the finest mesh. On the other hand, the error of SVOF with 3D coarse mesh remained higher, but a very good agreement for the medium and finest meshes was found.

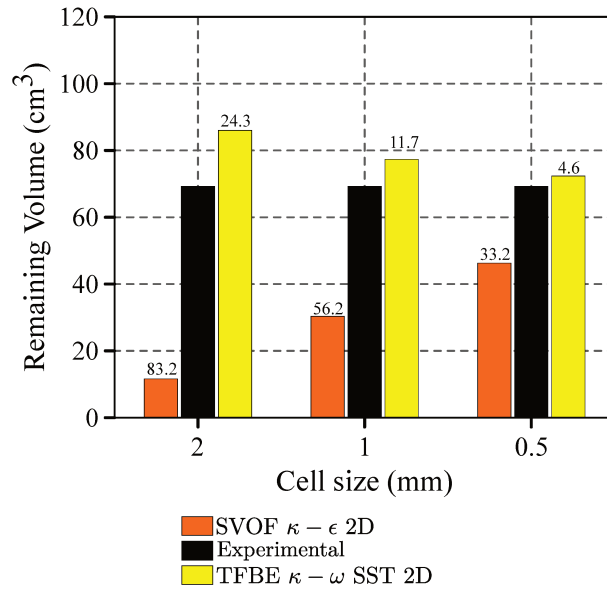


Figure A.11: Convergence with 2D meshes for 30 l/min.

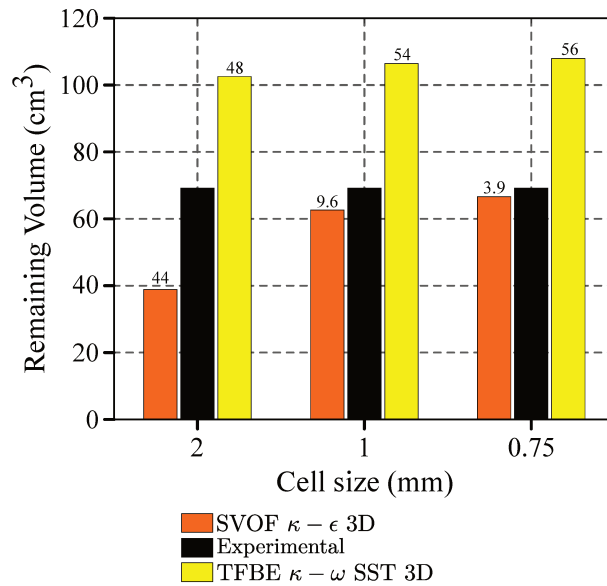


Figure A.12: Convergence with 3D meshes for 30 l/min.

Summarizing, the mesh convergence with SVOF and κ - ϵ models was observed both with 2D and 3D

meshes for 10 and 30 l/min, and similar results were found for 10 l/min with κ - ϵ realizable model. For the TFBE model, a monotonic convergence was only found with 2D meshes. All the 3D meshes led to acceptable results for 10 l/min, although for the TFBE κ - ω SST case the convergence was not achieved.

Differences between 2D and 3D grids could not be expected with this thin column test. However, it should be noted that 2D models neglect the zero velocity constrain on the front and back walls. Figure A.13 helps to visualize the 3D nature of the flow for the 30 l/min case by tracing the liquid front position, and the α field over the central plane and the front wall. These results correspond to the M3D-2 mesh with SVOF at four times. For clarity the domain depth was scaled. As noted, α is almost the same in the mean and front planes during the first two times. Hence, the flow is mostly 2D. However, once the large slug of air reaches the free surface the flow becomes complex, turbulent and highly 3D.

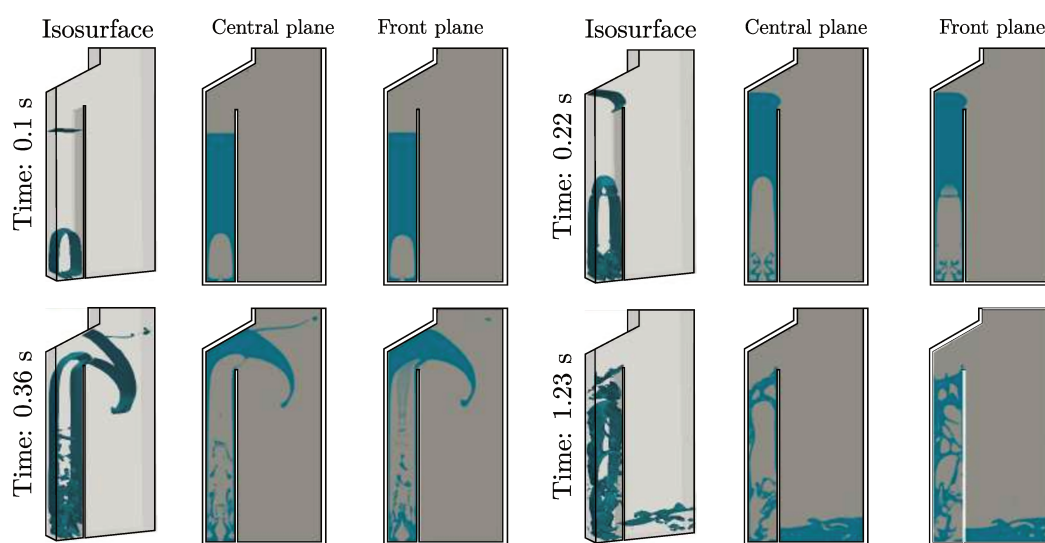


Figure A.13: Iso-surface and α profiles with SVOF with the M3D-2 mesh for 30 l/min.

As expected the bubbly flow is mainly 3D and bubbles are smaller for the 30 l/min case than for the 10 l/min case. Due to the narrow of the channel, the large bubbles and slugs are mostly bounded by the front and back walls. Therefore, the friction force with these walls is included in 3D simulations, but is not considered in 2D simulations. Consequently, in 2D cases it is expected that bubbles rise faster than in 3D cases. That causes a more displacement of water increasing overtopping. On the contrary, in 3D meshes the bubbles ascend slowly, and the remaining volume is higher.

The Figure A.14 compares the liquid volume fraction α for 2D and 3D grids. The experimental data are also included for comparison. Results correspond to air flow of 30 l/min in two instants of time (0.25 s and 0.35 s). 2D and 3D cases seem to be similar, and satisfactory qualitative agreement between the experimental data and the SVOF models is achieved. As expected the interface is better defined by refining, although this has not significant impact over the position of the interface. On the other hand, the changes are more evident in the bottom side, where the small liquid structures are better captured by the finest grid. By comparing the numerical and experimental images some differences are evidenced in the liquid front position of the wave, which is a bit advanced with respect to the experiment, and around the air inlet, where the numerical models predict less liquid.

Liquid volume fraction profiles with VOF and TF models

The α profiles obtained with VOF and TF models at five times for air flow rate of 30 l/min with 3D meshes are shown in Figure A.15. The cases SVOF-1 and SVOF-2 correspond to M3D-1 and M3D-2, respectively. The AMR-1 and AMR-2 correspond to one and two refining levels, PLIC-1 corresponds to

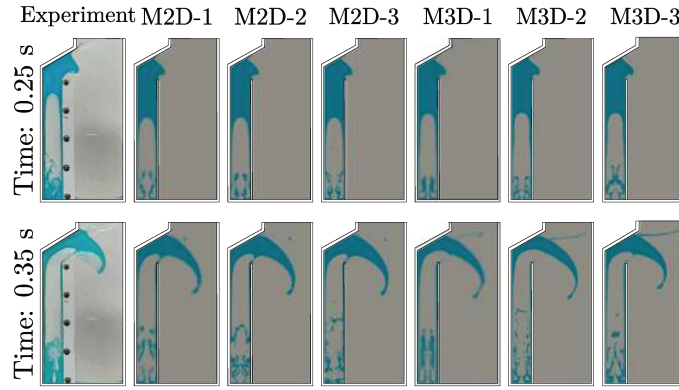


Figure A.14: Comparison of flow patterns between the SVOF and the experiment for 30 l/min with 2D and 3D meshes.

the VOF-PLIC with M3D-1, and TFBE-1 and TFBE-2 correspond to M3D-1 and M3D-2, respectively. All VOF cases are very similar from the qualitative point of view, and predict quite well the time the liquid reaches the inclined wall. As expected, more diffusion is observed around the interface for SVOF-1, but the general shape of the slug and the wave is captured. More differences are evidenced at the bottom side, where the size of the small bubbles and ligaments demands a considerable refining.

At the first image (*Time* : 0.1 s) the plug flow from all VOF methods is similar than the experiment, with a better resolution in the interface for the SVOF-2, AMR and PLIC models. This is easy explained by the fact that SVOF-2 has a homogeneous cell size of 1 mm, and AMR-1 and AMR-2 have cell sizes around the interfaces of 1 mm and 0.5 mm, respectively. On the other hand, VOF-PLIC has a cell size of 2 mm, but a better interface reconstruction of α . On the bottom side the comparison is rather difficult because the flow is largely turbulent. Nevertheless, the size of bubbles, drops and ligaments is similar. Regards the TFBE model, an accurate fitting of small interfaces is not expected. However, TFBE shown to be also inadequate for capturing the large slug and the liquid front of the wave. In fact, results are worse for the middle mesh (TFBE-2) than for the coarse one (TFBE-1). The limitation to well represent the curvature of large interfaces is clear by observing the noise solution on the top of the slug at 0.1 s. The liquid front of the wave at 0.25 s is relatively captured, but 0.1 s later the sharp interface becomes diffuse and at 0.5 s completely disappears.

The Figure A.16 compares the results obtained with SVOF and TFBE models with 2D and 3D meshes. For 2D meshes there is only a relative agreement between the SVOF and experiments. At 0.2 s neither of the models is able to capture the two bubbles observed close to the air inlet. Once the two bubbles collapse into a unique large slug, the shape and location of the front of the slug is correctly captured by the SVOF model. On the contrary, the TF model predicts a high mixed complex flow with many small bubbles.

The figure A.17 shows the vertical velocity of the liquid for the 30 l/min case at 0.25 s. Results correspond to SVOF and TFBE models with the 3D meshes (M3D-1, M3D-2 and M3D-3). The pictures on the left side shows the liquid velocity field over the mean vertical plane. Note that the velocity is colored only where the liquid is. The agreement between the three meshes is clear both in terms of liquid distribution as well as liquid velocity. The more discrepancies are evidenced for the coarse mesh around the air entrance. The graphs on the right side display the velocity profiles along cross lines at $H1 = 5$ cm and $H2 = 28$ cm from the bottom. The blue, red and black lines correspond to M3D-1, M3D-2 and M3D-3, respectively. For the SVOF model quite good agreement between the results is observed, especially at the high line ($H2$) where the flow is still single phase. On the other hand, at the bottom line ($H1$) the flow is quite complex and unsteady to expect similar results for a given time. In this high turbulent zone the secondary bubbles are too small to be well represented by the mesh. On the other hand, the TFBE solutions are different for the three meshes, and neither of them is similar than the experimentally

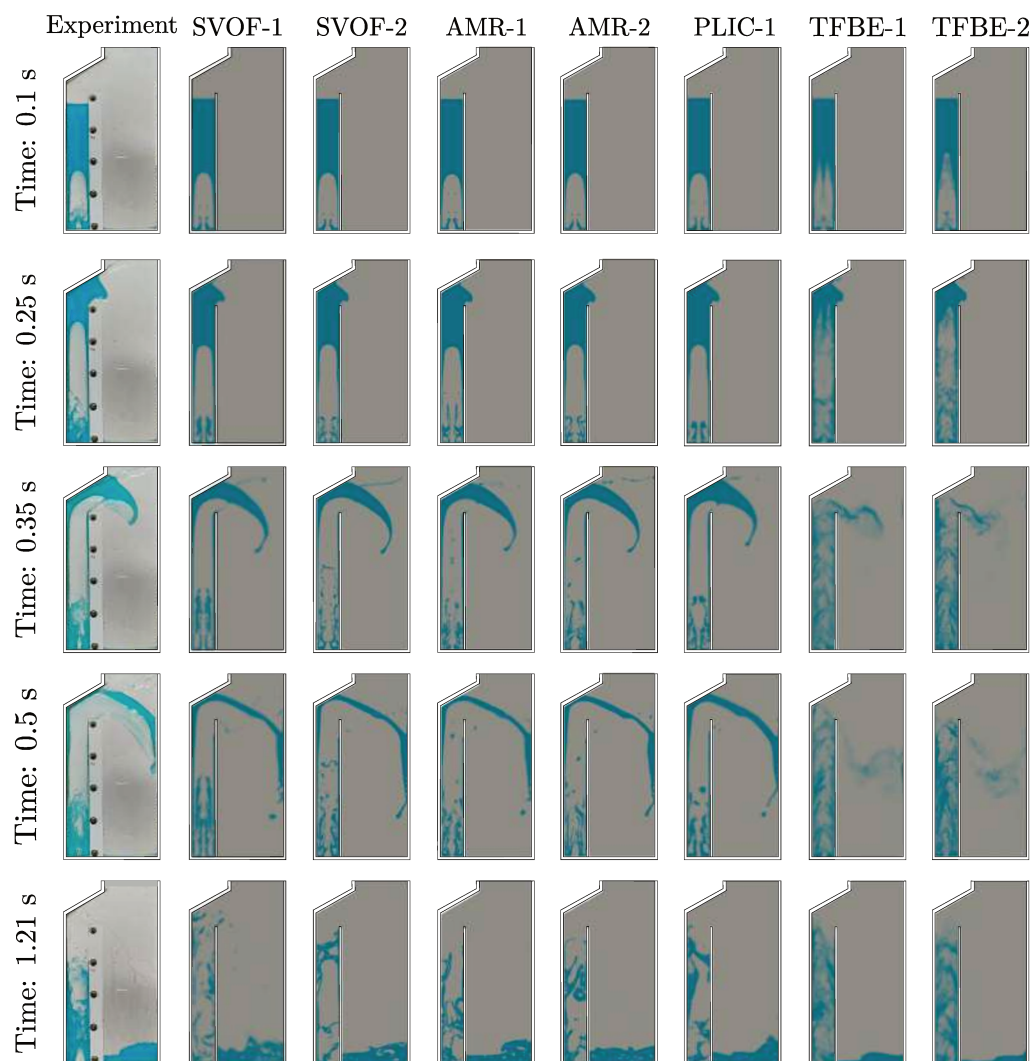


Figure A.15: Comparison between different numerical methods with 3D meshes for air flow of 30 l/min.

observed. Hence, the agreement in the liquid velocity profiles is not possible.

Although the TF method has been widely assessed with success under certain conditions, the test proposed clearly depicts the model inability to resolve at the same time the small scale structures (bubbles and drops) and the large interfaces, even with the blending model. The main disadvantage of TF method used for simulations of free surface flows is numerical diffusion of the interface, which leads to the no conservation of the area of the liquid [129]. The reasons could be lies in the theoretical basis of the method, which is based on the presence of both phases in each cell. Such approach actually introduces intermediate volume fractions with no physical meaning, and the calculation of the relative velocity among phases and the consequent interfacial force terms. Although these terms are affected by the alpha fraction, the effect of the heavy phase over the other could be of significance even for small void fractions. The interfacial forces are well characterized for disperse flow, but not for the segregated flow that predominate at the beginning of the experiment. Despite no experimental data is available for comparison, the similar solutions observed with SVOF allow conclude that the method is enough accurate to solve complex unsteady two-phase systems.

Considering that all VOF methods lead to acceptable qualitative results, quantitative data is need for selecting the best method taking into account precision as well as computational cost. The Table A.4 reports the macroscopic results for VOF and TF models with 3D meshes for 30 l/min. The columns

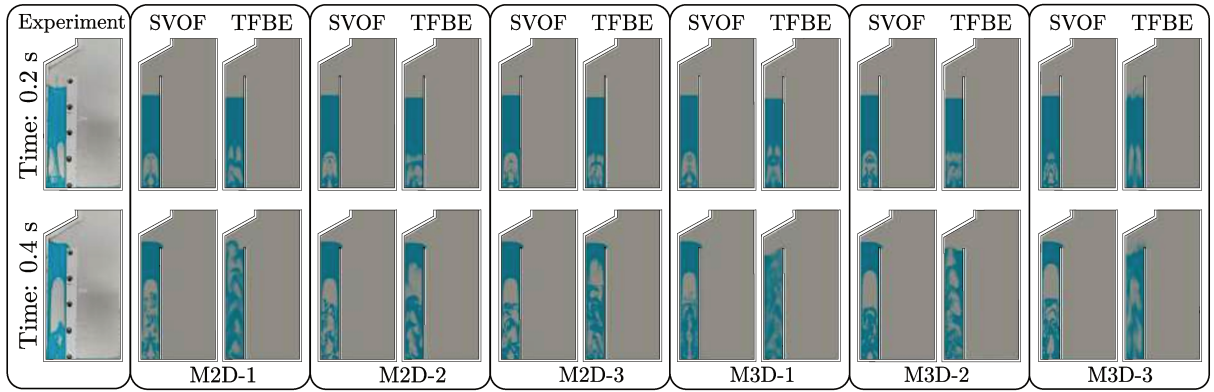


Figure A.16: Comparison of flow patterns with SVOF and TFBE models with air flow of 10 l/min for 2D and 3D meshes.

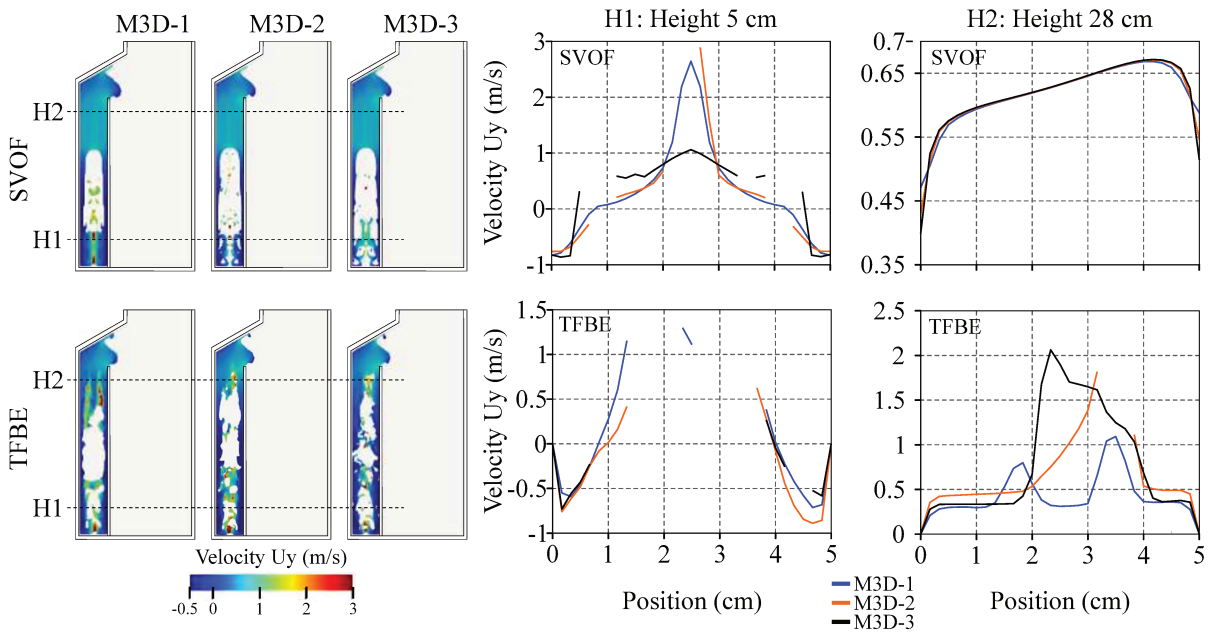


Figure A.17: Case 30l/min, the patterns of the y component of liquid velocity at 0.25 s obtained with (SVOF) and (TFBE) model with 3D meshes

displays the case name, the initial mesh, the initial and final cell sizes, the run time in hours and days, the remain liquid, and the error respect to the experimental data. The SVOF-1 model shows to be the less time demanding (around 9 hours), although the error was more than 15 %. On the other hand, the larger CPU time was for AMR models, taking 11.9 and 19.66 days for AMR-1 and AMR-2, respectively. In both AMR cases the initial mesh size was the M3D-1 (210,320 cells with a homogeneous size of 2 mm), and the refining levels were 1 and 2, respectively. As noted the computing time for the AMR-2 case was 39% higher than for AMR-1, and the error was considerably reduced. It should be remarked that the cell size around the interface for AMR-1 was the same as for SVOF-2. However, the error and the computing time was lower by using the static mesh than the dynamic one. This could not be obvious taking into account that the amount of cells of AMR-1 is less than of SVOF-2, but the need of refining the interface for this very transient problem leads to a high computing cost. Then, the use of AMR models is not advisable if the position of interface is changing every time step. This is not in contradiction with the study carried out by Samir et al. [130], who solved single-phase estationary problems and concluded that the computing time of VOF-AMR models should be lower than for SVOF with static mesh. The test here addressed is fully unsteady and turbulent and the refining criteria is based on the interface location,

Method	Initial Mesh	Initial cell size (mm)	Final cell size (mm)	Time (h)	Time (d)	Remaining (cm ³)	Error (%)
EXPERIMENT	—	-	-	—	—	69.23	-
SVOF-1	M3D-1	2	2	9.24	0.39	58.77	15.11
SVOF-2	M3D-2	1	1	170.45	7.10	62.55	9.65
AMR-1	M3D-1	2	1	285.70	11.90	61.38	11.34
AMR-2	M3D-1	2	0.5	471.78	19.66	66.80	3.51
PLIC	M3D-1	2	2	48.39	2.2	72.79	5.14
TPBE	M3D-1	2	2	14.27	0.72	52.95	23.52

Table A.4: Computing time and liquid remaining with air flow rate of 30 l/min.

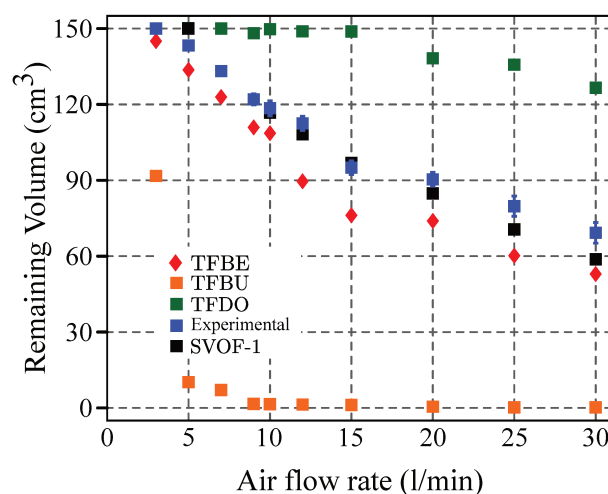


Figure A.18: Liquid remained at the left compartment at the end of test

which has a very complex dynamics.

Based on the results reported in Table A.4, the accuracy of SVOF-1 can be improved by using the mesh M3D-2 (SVOF-2) reducing the error from 15.11 % to 9.65 %, but increasing the computing time more than 17 times. In this context PLIC is the best choice, not only due to the lower error (5.14 %) but also due to the lower computing time (2.2 days). This is the best method in terms of accuracy/efficiency. Finally, the TFBE model was more expensive than SVOF-1 (the same mesh). This is in agreement with the results by Pham et al. [30], and the worse in terms of accuracy with an error more than 23 %.

Despite the bad results obtained with the TFBE model, it should be mentioned that the use of classical TF without blending led to worse results. Figure A.18 displays the numerical results for the three TF models: the red diamond marks correspond to the blending case (TFBE), the orange square marks are for bubbly flow (TFBU), and the green square marks are for drop flow (TFDO). Experimental data and SVOF-1 results are also included with blue square marks and black square marks, respectively. Despite of the large error obtained with the SVOF-1 model, the agreement is acceptable for all the air flow rates. As a matter of fact the solution is in good agreement for air flow rates less than 20 l/min. On the other hand, the TFBE method displays a relative good agreement for air flow rates less than 10 l/min, with maximum errors around 20 % at the mean air flow range. But, the focus should be put in the improvement obtained by using the blending method regarding the classical TF models that assume bubbly and drop flow, which lead to completely unrealistic solutions. In other words, to assume drop flow leads to high drag underestimation, thus minimizing swelling and spilling. On the other hand, to assume bubbly flow leads to drag overestimation and complete spilling of water for air flow rates over

than 10 l/min.

A.6 Conclusions

An experimental fast air injection in a vertical water column test was performed and set of Volume of Fluid (VOF) and two-fluid (TF) simulations were carried out to reproduce this.

The RANS turbulence models were evaluated for the standard VOF (SVOF) method. The κ - ϵ , κ - ϵ realizable, and κ - ω SST models were addressed. Results were not conclusive because the three models displayed very similar behavior.

Regarding mesh convergence, the SVOF model shown monotonic convergence for 2-dimensional (2D) and 3-dimensional (3D) meshes and all turbulence models. On the contrary, TF model only shown convergence for 2D cases.

The VOF models allow to achieve quite good qualitative and quantitative results. The liquid front position of large interface structures, such as bubbles, slugs, the free surface, and the spilling wave were well captured without present spurious values. The standard VOF (SVOF) leads to relative good results for coarse grids, with a very low computational cost. The mesh refining noticeable improved the results, although the computing time increased more than linearly with the mesh size.

More complex methods such as Piecewise-Linear Interface Calculation (PLIC) and Adaptive Mesh Refinement (AMR) improved the estimations of the liquid front position. However, AMR showed not be efficient for this high turbulent transient test. In fact, the AMR method showed to be much more expensive than using static mesh with homogeneous cell size. On the contrary, the PLIC method led to the best solutions in terms of accuracy and computational cost.

Regarding the TF models, the use of blending (TFBE) yields satisfactory results by comparing with classical TF models. The computing time was similar for TFBE and the classical approaches. The blending model allow capturing the swelling and plug flow that mostly causes the water spilling, although the liquid front position and the complex flow structures were missing.

Acknowledgements

The authors would like to thank ANPCyT (grant PICT 2016-2908 and PICT 2019 - 0375), CONICET and Universidad Nacional del Litoral.

Appendix B

Volume of Fluid simulation of air-water co-current and counter-current flow with variable density turbulence formulation

J. Sarache, S. Corzo, D. Godino and D. Ramajo. (2024). “Volume of Fluid simulation of air-water co-current and Counter-current flow with variable density turbulence formulation”. *Nuclear Engineering and Design*, 424, 113217.

Volume of Fluid simulation of air-water co-current and counter-current flow with variable density turbulence formulation

J. Sarache^{a,1}, S. Corzo^{a,b}, D. Godin^{a,c}, D. Ramajo^{a,b}

^aCIMEC Centro de Investigación de Métodos Computacionales (UNL, CONICET), Santa Fe, Argentina

^bUNL Universidad Nacional del Litoral, Argentina

^cUTN Universidad Tecnológica Nacional, Argentina

Keywords: VOF, Two-fluid, variable density formulation, Turbulence Modeling, Co-current/Counter-current flow.

Abstract. Co-current and counter-current air-water flows are studied by Volume of Fluid (VOF) simulation, with emphasis on turbulence modelling near the interface. The relevance of constant density (ρ -con) and variable density (ρ -var) formulations of the turbulence transport equations in two classical two-equation turbulence models, $k - \epsilon$ RNG and $k - \omega$ SST models, is discussed. The Reynolds Stress Tensor (RST) model approach is also investigated and literature results with the two-fluid model are included for comparison. Our results with VOF show that the widely used constant density formulation underestimates the turbulence dissipation without capturing the turbulence jump across the interface, which also affects the interface liquid height, the velocity profiles of both phases and the pressure drop along the domain. In contrast, the variable density formulation significantly improves the results by increasing the turbulence dissipation at the interface. Although the best solutions have been obtained using the RST model, the ρ -var and $k - \epsilon$ RNG gave quite good agreement with experimental data. Despite the narrowness of the domains, three-dimensional simulations have been in better agreement than the two-dimensional ones. Both the VOF results obtained with either the RST and the ρ -var turbulence formulations were found to be superior to those reported with the TF model using damping corrections specifically calibrated for the tests. This study demonstrates that VOF simulation combined with ρ -var two equations turbulence models is a suitable method for modelling large-scale interface segregated flows.

¹Corresponding author. E-mail address: johansarache@gmail.com (J. Sarache).

Nomenclature

List of symbols

α : Volume fraction.
 ρ : Density.
 t : Time.
 p : Pressure.
 μ : Dynamic viscosity.
 ν : Kinematic viscosity.
 μ_t : Turbulent dynamic viscosity.
 ν_t : Turbulent kinematic viscosity.
 k : Turbulent kinetic energy.
 u_i : Pulsation velocity.
 ϵ : Turbulent dissipation rate.
 ω : Specific dissipation rate.
 σ : Surface tension coefficient.
 U_i : Velocity.
 g_i : Gravitational acceleration.
 $\mathbf{n}$: Surface normal vector.
 $Re = \frac{UL}{\mu}$: Reynolds number.
 κ : Curvature of the free surface.
 $\langle u_i u_j \rangle$: Reynolds

List of acronyms

CFD: Computational Fluid Dynamics.
 DNS: Direct Numerical Simulation.
 LES: Large Eddy Simulation.
 RANS: Reynolds-Averaged Navier-Stokes.
 CCFL: Counter Current Flow Limitation.
 VOF: Volume of Fluid.
 TF: Two-fluid model.
 ISO: Isoadvector.
 DEM: Discrete Element Method.
 SGS: Subgrid-Scale.
 RST: Reynolds Stress Tensor.
 MULES: Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution.
 FCT: Flux Corrected Transport.
 OpenFOAM: Open Field Operation and Manipulation.
 ρ -var: Variable density formulation for turbulence.
 ρ -con: Constant density formulation for turbulence.

B.1 Introduction

One of the major challenges in Computational Fluid Dynamics (CFD) has been the study of turbulence due to its physical complexity characterised by chaotic and random fluctuations in physical and kinematic properties. Richardson [131] and Pope [132] have described that turbulent energy is generated from geometry and boundary conditions, resulting in the formation of large vortex that are unstable and break up into smaller vortex until viscous frictions cause them to lose energy. Since then, considerable theoretical, experimental and numerical efforts have been made to describe and model turbulence.

The size of the smaller turbulent structures (Kolmogorov scale) decreases as the Reynolds number increases. This dependence also occurs on time scales, which is a challenge for CFD, as it requires increasingly finer meshes and small time steps to adequately capture turbulent dissipation.

Advances in computing power have allowed researchers to apply CFD to the study of three-dimensional (3D) multiphase problems with dispersed and segregated flows. However, turbulence modelling has been based on single-phase developments, incorporating mechanistic sub-models to improve them.

Turbulence modelling could be avoided by using Direct Numerical Simulation (DNS). However, due to computational requirements, this is currently limited to moderate Reynolds numbers and small computational domains. A less expensive alternative is the Large Eddy Simulation (LES) method. LES is a compromise between the accuracy of DNS and the computational efficiency of Reynolds Average Navier Stokes (RANS) models. In LES, the Navier-Stokes equations are filtered to separate the small-scale effects from the large ones, solving the equations for the large scales and using sub-scale models to represent the turbulence dissipation caused by the small-scale structures.

As for RANS methods, these consist of estimating turbulence from the time-averaged fluctuations of variables such as velocity. The advantage of RANS models is that they do not require high spatial and temporal refinement [127, 128]. The disadvantage lies in the complexity of the physical representation of turbulence, in particular the Reynolds tensor. For the latter, several models based on the Boussinesq hypothesis have been proposed, but in some cases at the cost of loss of accuracy [133]. Another approach has been the modelling of the Reynolds tensor by means of transport equations [94, 95], but this have shown difficulties in adequately describing the pressure-rate-of-strain tensor.

Multiphase flow presents significant challenges due to the interaction between phases at the interface, and the need to correctly estimate the position of the interface. A solution has been proposed by [52] by incorporating an additional term into the momentum equation to balance the forces at the interface. This takes into account both surface tension and pressure, while the interface location is solved by an indicator function representing the two phases and their transition. This methodology is the basis of the volume of fluid method (VOF), and has been successful in simulating immiscible two-phase flows. More recently, this approach has been extended to DNS simulations, allowing the simulation of turbulent and incompressible two-phase flows with phase change [53, 54].

To overcome the computational limitations of DNS, multiscale techniques have been proposed, consisting of using coarse meshes to solve the domain with LES or RANS and complementing them with DNS simulation to study small-scale physics. For example, [55] simulated three-phase flow using a coarse mesh with VOF for the gas phase and Discrete Element Method (DEM) simulation for the large particles, and a fine mesh with DNS to solve the behaviour of small particles. [56] studied bubble dynamics through a multiscale technique using a pseudospectral model proposed by [57, 58] to resolve the large-scale flow and VOF-DNS on a fine mesh for the dynamics of small bubbles. However, despite the promising results of multiscale methods, working with more than one domain or mesh remain been a challenge. For this reason, several researchers have opted to continue using traditional single-mesh models based on LES and RANS methods even when filtering introduces terms affecting the surface tension, the turbulence and diffusion at the interface. [59] has proposed closure models for these additional terms, with good results in academic cases and simple experiments, even using coarse grids.

For industrial multiphase problems the multi-scale methods are not suitable due to the high compu-

tational cost and more inaccurate methods like the two-fluid model (TF) are often the only election. TF has been largely studied in order to improve the turbulence estimations around interfaces in order to provide good representation of the large-scale flow with low computational cost. The TF model is the most commonly used technique for this purpose and is widely used for the simulation of thermal-hydraulic problems in nuclear installations. A good example of it is the simulation of Co-current and Counter Current flow with the aim to estimate the Counter-Current Flow Limit (CCFL) in core reflood accidents. The first relevant studies came from [60] who simulated counter-current flow [53] comparing TF model with $k - \omega$ against DNS simulations and concluded that TF overestimates the viscosity without damp the turbulent fluctuations, which results in an overestimation of the viscous dissipation near the interface. They proposed adding a source term S_k to the ω equation, which allows damping of turbulent fluctuations and thus viscous dissipation, improving the estimation of turbulent kinetic energy change and velocity profiles at the interface. Then [45] improved the mechanisms for detecting the multiphase flow morphology and implemented an interfacial drag model, improving the results of the counter-current flow test of [62]. Subsequently, [63] extended the damping function to the $k - \epsilon$ model, incorporating source terms both in k and ϵ . Finally, [64, 65] included terms to represent subgrid waves induced by Kelvin-Helmholtz instabilities.

Unlike previous works applied the TF method, in this study we decided to evaluate the performance of the VOF method. For co and counter current flow the use of VOF does not necessarily means a higher computational cost because the interface is limited to a thin region of the domain, and far from the interface the two-phase system becomes into a single-phase problem. The VOF method is combined with two different closure models; on the one hand the Reynolds Stress Tensor (RST) model and on the other hand models based on the Boussinesq hypothesis. In the latter, we evaluated $k - \epsilon$ and $k - \omega$ SST methods using two different formulations: the classical constant density formulation (ρ -con) and a more recent formulation named variable density (ρ -var) [66, 67]. The results are compelling, showing that the RST model leads to the best results while the use of $k - \epsilon$ ρ -var model also produces quite good solutions. On the contrary, ρ -con conducts to poor results both with $k - \epsilon$ and $k - \omega$.

B.2 Mathematical model

In this section, the VOF method is introduced and two surface reconstruction approaches are considered: the classical algebraic method proposed by [25] and the Isoadvector (ISO) method introduced by [1, 40, 41, 99]. Turbulence is modelled by $k - \epsilon$ RNG, $k - \omega$ SST and RST using the same turbulence model for both phases. As a notable feature, $k - \epsilon$ RNG and $k - \omega$ SST are formulated with two different approaches: The first one involves a constant density formulation (ρ -con) and the second one involves a variable density formulation (ρ -var) introduced by [66].

B.2.1 Continuity and Momentum Equations

The continuity and momentum equations resulting from the classical VOF formulation can be written as

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial \rho U_j}{\partial t} + U_i \frac{\partial \rho U_j}{\partial x_i} = - \frac{\partial p_d}{\partial x_j} - g_i x_i \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \langle u_i u_j \rangle \right] + \underbrace{\sigma \kappa \frac{\partial \alpha}{\partial x_j}}_{f_{si}} \quad (\text{B.2})$$

where U_i is the velocity, x_i is the position, μ is the dynamic viscosity, ρ is the density, g_i is the gravita-

tional acceleration, α is an indicator function and p_d is a modified pressure ($p_d = p - \rho g_i x_i$). The last term on the right hand side of the Eq. (B.2) represents the surface tension force and is zero far from the interface. It is calculated from the surface tension coefficient σ and the local curvature of the free surface κ :

$$\kappa = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_i} / \left| \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right| \right) \quad (\text{B.3})$$

In addition, the fluid properties near the interface are also calculated as a weighted average of α , e.g. $\rho = \alpha \rho_l + \rho_g(1 - \alpha)$ and $\nu = \alpha \nu_l + \nu_g(1 - \alpha)$. In Eq. (B.2), u_i represents the pulsation velocity, and the term $\langle u_i u_j \rangle$ represents the Reynolds stress tensor, resulting from the temporal averaging of the advective term. To solve for this term, a closure model must be adopted. In this work, both the Boussinesq eddy viscosity hypothesis and a transport equation for the Reynolds stress tensor are considered.

B.2.2 Void fraction transport equation

Two possibilities have been studied for the α transport equation: the classical algebraic reconstruction and the ISO method. For the former, the equation is:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha U_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial (\alpha U_{ri}(1 - \alpha))}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{B.4})$$

As noted above, this equation includes an additional compression term based on the relative velocity among phases $U_{ri} = U_{li} - U_{gi}$, which is added to the pure advection equation to reduce the interface thickness. Conversely, for the ISO formulation, the compression term is not included and the pure form of the transport equation is retained:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha U_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{B.5})$$

In this case, the fluxes are not calculated using the face values from the Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution (MULES), but are determined as the amount of fluid passing through a surface in a given time [1, 40, 41, 99]. To achieve this, an isosurface α_0 with a normal $\hat{\mathbf{n}}_s$ is created at the beginning of each iteration. As shown in Figure B.1, this surface represents the interface separating fluids A and B. The volume fraction in the cell v_i is then expressed in terms of the fluxes crossing the surfaces f_i , as shown in Eq. (B.6):

$$\alpha_i^{n+1} = \alpha_i^n - \frac{1}{V_i} \sum_{j \in B_i} \Delta V_{ij}^n \quad (\text{B.6})$$

where α_i^n and α_i^{n+1} are the volume fractions at the beginning and end of the iteration, V_i is the volume of the cell, and B_i is the list of boundary faces f_j . Then, ΔV_{ij} is the volume of fluid A that crosses the face f_j during the Δt . If the fluid velocity is assumed to be constant, then the volumetric flux ϕ_{ij}^n across f_j is $\tilde{\phi}_{ij}^n$, and ΔV_{ij} can be approximated as shown in Eq. (B.7):

$$\Delta V_{ij}^n \approx \frac{\tilde{\phi}_{ij}^n}{|\mathbf{S}_f|} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{f_j} \alpha(\tau) dA d\tau \quad (\text{B.7})$$

The term $\int_{f_j} \alpha(\tau) dA$ in Eq. (B.7) is the time integral of the submerged area of face f_j , as shown in Eq. (B.8):

$$A_j \equiv \int_{f_j} \alpha(\tau) dA \quad (\text{B.8})$$

The intersection of the iso-surface with the cell faces f_j at each time defines an area $A(\tau_1)$, $A(\tau_2)$,... $A(\tau_M)$ as shown on the right side in Figure B.1, through which the fluid flows across the face f_j . Figure B.1 shows the top face of the cell and the intersected area A_j at different times. To integrate the area over time, a piecewise quadratic polynomial $A_j(\tau)$ is calculated.

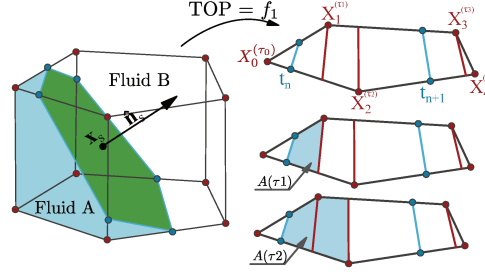


Figure B.1: Construction of the isosurface by interception with the cell face. Courtesy of Roenby et al. [1]

B.2.3 Boussinesq hypothesis

As mentioned earlier, closure equations are required to write the Reynolds stress tensors in Eq. (B.2) in terms of the mean velocity. Perhaps the most widely used approach is the Boussinesq hypothesis given in Eq. (B.9):

$$\langle u_i u_j \rangle - \frac{2}{3} k \delta_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{B.9})$$

where μ_t is the turbulent viscosity.

B.2.4 $k - \epsilon$ RNG Model

The $k - \epsilon$ RNG model calculates ν_t from the turbulent kinetic energy k and the eddy dissipation rate ϵ :

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (\text{B.10})$$

where k and ϵ are derived from transport equations, in general expressed in a incompressible form by removing the density from the final equations. However, as will be showed in this work, to consider the density variation in these transport equations plays a crucial role to capture the large variations on the turbulent kinetic energy around the interface. The transport equations in the density variation formulation (ρ -var) are written as:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i k) = \rho P + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \rho \epsilon \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i \epsilon) = \frac{\rho P \epsilon}{k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} + \nu \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] - \rho \left(\frac{2}{3} C_1 - C_3 \right) \epsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - C_2 \rho \frac{\epsilon^2}{k} - R \quad (\text{B.12})$$

where P is the turbulent kinetic energy production and is defined as:

$$P = 2\nu_t S_{ij} S_{ji} \quad \text{and} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{B.13})$$

As noted, in the $k - \epsilon$ RNG model incorporates an additional term R is added in Eq. (B.12) to the standard $k - \epsilon$ formulation. This term depends on the renormalisation parameter η , and can be expressed as:

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta \eta^3} \frac{\epsilon^2}{k}, \quad \eta = \frac{Sk}{\epsilon}, \quad S = (2S_{ij}S_{ji})^{1/2} \quad (\text{B.14})$$

where S is the effective strain rate. The model constants used in this study are presented below:

$$\begin{array}{llll} C_\mu = 0.0845 & C1 = 1.42 & C2 = 1.68 & C3 = -0.33 \\ \sigma_k = 0.71942 & \sigma_\epsilon = 0.71942 & \eta_0 = 4.38 & \beta = 0.012 \end{array}$$

B.2.5 $k - \omega$ SST Model

$k - \omega$ is recognised as a good method for capturing separated flows near walls, while $k - \epsilon$ is suitable for isotropic turbulence in the bulk [111–113]. Therefore, $k - \omega$ SST model applies the standard $k - \epsilon$ in the bulk and $k - \omega$ near the walls. The transport equations for k and the turbulent frequency ω written in ρ -var form are:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i k)}{\partial x_i} = \rho P + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho(\alpha_k \nu_t + \nu) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \rho \beta^* \omega k + \rho S_k \quad (\text{B.15})$$

$$\frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \omega)}{\partial x_i} = \rho \gamma P + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho(\alpha_\omega \nu_t + \nu) \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \rho \gamma \omega \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \rho \beta \omega^2 - \rho(F_1 - 1)CD_{k\omega} + \rho S_\omega \quad (\text{B.16})$$

where a_1 and b_1 are model constants and F_{23} is a blending function representing the local flow state. This blending function allows Eq. (B.16) to switch between the standard ϵ equation in the bulk and the ω equation near the walls. The turbulent production P in Eq. (B.15) also depends on the blending function F_{23} . Furthermore, the model constants α_k , α_ω , γ , and β are calculated as a linear combination of the constants of each phase. For example, β is calculated using the blending factor F_1 as follows:

$$\beta = F_1 \beta_1 + (1 - F_1) \beta_2$$

The source terms S_k and S_ω account for the viscous dissipation and the decay of turbulence. The turbulent viscosity is calculated using the following equation:

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, b_1 F_{23} S)} \quad (\text{B.17})$$

Finally, the constants used in this work are:

$$\begin{array}{llll} \alpha_{k1} = 0.85 & \alpha_{k2} = 1 & \alpha_{\omega1} = 0.5 & \alpha_{\omega2} = 0.856 \\ \beta_1 = 0.075 & \beta_2 = 0.0828 & \gamma_1 = 5/9 & \gamma_2 = 0.44 \\ a_1 = 0.31 & b_1 = 1 & c_1 = 10 & \beta^* = 0.09 \end{array}$$

B.2.6 Reynolds Stress Transport Model

The Reynolds stress tensor $\langle u_i u_j \rangle$ can be solved without using the Boussinesq hypothesis (Eq. B.9). This allows a better representation of complex turbulent phenomena such as anisotropic turbulence and energy decay through different flow directions. Launder [94, 95] proposed a model for the transport of $\langle u_i u_j \rangle$ and ϵ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\langle u_i u_j \rangle)}{\partial t} + U_k \frac{\partial(\rho\langle u_i u_j \rangle)}{\partial x_k} - (C_s \frac{k}{\epsilon} \langle u_i u_j \rangle + \nu \delta_{ij}) \frac{\partial(\rho\langle u_i u_j \rangle)}{\partial x_k} + C_1 \rho \frac{\epsilon}{k} \langle u_i u_j \rangle = \\ \rho P_{ij} - C_2 \rho P_{ij}^{\text{dev}} - \frac{2}{3} (1 - C_1) \rho \delta_{ij} \epsilon \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

$$\frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i \epsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[C_\epsilon \frac{k}{\epsilon} \langle u_i u_j \rangle \frac{\partial(\rho\epsilon)}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon_1} \frac{\rho P \epsilon}{k} - C_{\epsilon_2} \frac{\rho \epsilon^2}{k} \quad (\text{B.19})$$

As noted, Eqs. (B.18) and (B.19) allow considering the density variation. The model constants proposed by Launder are:

$$C_s = 0.25 \quad C_1 = 1.8 \quad C_2 = 0.6$$

$$C_\epsilon = 0.15 \quad C_{\epsilon_1} = 1.44 \quad C_{\epsilon_2} = 1.92$$

The turbulent kinetic energy also appears in the set of Eqs. (B.18) and (B.19), but it is not obtained from the solution of a transport equation. Instead, it is obtained as the trace of the Reynolds stress tensor.

Relevance of the density variation in the turbulent transport equations

In order to understand the importance of ρ -var formulation on the turbulent transport equations we will analyse the k equation, but the same procedure can be applied to ϵ , ω and $\langle u_i u_j \rangle$ equations. Following the procedure from [66] we start from the derivation of the left side of Eq. (B.11):

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i k)}{\partial x_i} = \rho \frac{\partial k}{\partial t} + k \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho U_i \frac{\partial k}{\partial x_i} + U_i k \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \underbrace{\rho k \frac{\partial U_i}{\partial x_i}}_0 \quad (\text{B.20})$$

In Eq. (B.20) the last term is null for incompressible flow. Reordering the right side:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho U_i k)}{\partial x_i} = \rho \left[\frac{\partial k}{\partial t} + U_i \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + k \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + U_i \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \right] \quad (\text{B.21})$$

The last term in Eq. (B.21) is the material derivative of ρ . For incompressible flow this term should be null because the density is constant in each point or because it remain almost constant along the flow. The last means that the Mach number remains less to 0.3 in the interface [134]. Now we can derive the second term of the right side in Eq. (B.11):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] = \rho \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] \quad (\text{B.22})$$

Finally, replacing Eqs. (B.21) and (B.22) in Eq. (B.11) and dividing by ρ we lead to:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = P + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \epsilon + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] \quad (\text{B.23})$$

Due to density is constant for each phase, it only changes inside the interface and $\frac{\partial \rho}{\partial x_i}$ in Eq. (B.23) is not null only in the interface. This last term in Eq. (B.23) is missing in classical ρ constant formulations. For example the air-water segregated problems here solved, the density increases towards the bottom. Hence, $\frac{\partial \rho}{\partial x_i} < 0$, adding more turbulent dissipation rate near the interface, as described [66]. This additional dissipation can be assumed as a damping term, that only lives in the interface without introducing any effect in the bulk and walls. This ρ -var formulation is independent of the cell size or any other user parameter and, as will be demonstrated, reduces the turbulence around the interface and the consequent overestimation of the turbulent viscosity, making the interface works as a phase density-dependent

stiffness wall [53].

VOF ρ -var vs TF damping model

Damping strategies have been largely discussed in two-fluid models. In this case, the use of turbulence transport equations formulated in conservative forms is not enough to represent the turbulence jump across the interface. Most authors have implemented simple damping models based on the ‘Egorov interface damping approach’, which stems from the idea that either phase at each side of a large-scale interface perceives the interface as a wall [60]. [61, 63] applied this approach in $k - \omega$ and [63] extended the idea to $k - \epsilon$, both improving the solutions for segregated flow. In both cases damping is introduced as a source term in the transport equations. e.g., for ω it forces the specific turbulence dissipation in the interface to a wall-like value with terms such like that:

$$\omega^{int} = B \frac{6\mu^k}{\beta \Delta n^2} \quad (\text{B.24})$$

where Δn is a representative size of the interface cells and B is a non-dimensional coefficient, which can take values from 100 to 2500 in order to fit experimental data [63, 135]. Clearly, the problem with Eq. (B.24) is on the dependence with the mesh [136] and the necessity of previous calibration data. Summarizing, damping in VOF comes from the conservative form of the turbulent transport equations. On the other hand, in the TF model to write the equations in a conservative form is not enough and an additional source term have to be included. This term depends strongly with the mesh at the interface and also with a model parameter, which takes values in a very wide range. The fact that the interfacial cell size is in the denominator of Eq. (B.24) makes this damping term to grow strongly if the mesh is over refined. This lack of convergence of the TF method with refinement is a serious limitation of the method, which usually leads to stability problems when trying to obtain fine mesh solutions.

B.3 Computational Model

The simulations were conducted on a cluster equipped with Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1620 v2 @ 3.70GHz - 1 CPU x 4 cores and Infiniband connectivity (QDR 40 Gbps), utilizing parallel distributed computing. The InterFoam and InterIsoFoam solvers from openFOAM-v2206 were employed to obtain the numerical solutions. To ensure precision, the high-resolution Van Leer scheme was utilized to discretize the advective terms in the momentum, turbulence, and α equations for the algebraic VOF case. However, for the ISO cases, the limitedLinearV1 method was chosen. The reported results in this study for both co-current and counter-current flows were obtained using the temporal marching method [118], which solves the transient problems until the solution stabilizes and the main flow variables remain almost unchanged. The PIMPLE algorithm was used for pressure-velocity coupling with 4 external and 3 internal correctors at each time step. To ensure stability and precision in the advection equations, the temporal terms in the momentum and turbulence equations were discretized using the Backward Euler method with adaptive time steps, ensuring a Courant number less than 0.2. Within each temporal iteration Δt , the interface equations were explicitly solved using a number of sub-cycles $n_{sc} = 3$ and a sub-cycle interval $\Delta t_{sc} = \frac{\Delta t}{n_{sc}}$ with MULES for InterFoam and ISO for InterIsoFoam. The absolute convergence criterion for all variables was 1×10^{-7} . Cartesian meshes were used for the co-current flow test, while hybrid meshes were employed for the counter-current flow test, necessitating 2 orthogonality corrections.

B.4 Tests description

A brief description of the tests is given below.

B.4.1 Co-current Flow

The well-known co-current air/water flow test conducted by [117] is depicted in Figure B.2a. The test involves a 12 m horizontal duct through which water and air flow from left to right. To reduce computational time, simulations were performed for a shortened duct of 4 m. In all cases the water flow was 3 l/s and different air flow rates were considered. Three of the four tests carried out by [117] were simulated, namely, cases 250 (air flow = 45.4 l/s), 400 (airflow = 75.4 l/s) and 500 (airflow = 118.7 l/s).

As a first step, a mesh convergence study was carried out for Case 250 considering five 2D meshes and four 3D meshes. Local refinement was applied near the walls, inlet, outlet, and the air-water interface in all meshes. The mesh details are given in Table B.3, and Figure B.3 shows the finest mesh. A similar refinement was also used for Cases 400 and 600. Fluid properties are listed in Table B.1, and the boundary conditions used in OpenFOAM are enumerated in Table B.2. Below a brief description of the boundary conditions implemented in OpenFOAM is given:

- **p_{rgh}** is the pressure after remove the hydrostatic pressure ($p_{rgh} = p - \rho gh$).
- **fixedValue** refers to a classical Dirichlet condition.
- **noSlip** is the zero velocity condition at walls.
- **zeroGradient** is a classical Neumann condition.
- **calculated** is used when the variable is imposed based on others variables. e.g. ν_t is calculated from other turbulent variables.
- **inletOutlet** is used to indicate a boundary where the flow can enter or left the domain depending on the indoor and outdoor conditions. If the flow is entering to the domain then a **fixedValue** condition is imposed, but if the flow is outgoing the domain then a **zeroGradient** condition is applied.
- **fixedFluxPressure** imposes **zeroGradient** for pressure and also guarantee a user-defined flow rate.
- **totalPressure** imposes a constant total pressure by considering both the static and dynamic pressures.
- **turbulentIntensityKineticEnergyInlet** applies a Dirichlet condition for k , which is calculated based on the turbulent intensity I , defined as a fraction of the mean inlet velocity in the boundary ($k = 1.5 (I |U_i|)^2$).
- **epsilonWallFunction** and **omegaWallFunction** impose Dirichlet conditions with a different value at the viscous layer and at the bulk region.
- **kqRWallFunction** is a **zeroGradient** condition for k .
- **nutUSpaldingWallFunction** calculates the turbulent viscosity based on the Spalding method. This allow include the wall roughness.
- **volumetricFlowRate** allows to impose a constant volumetric flow rate.
- **timeVaryingMappedFixedValue** allows to introduce a time depending profile, which is useful to improve robustness during the beginning of the simulations.

Property	Water	Air
ν (m ² /s)	1×10^{-6}	1.48×10^{-5}
ρ (kg/m ³)	998	1.2
σ (N/m)	0.074	-

Table B.1: Fluid properties.

Variable	Inlet Air	Inlet Water	Outlet Air/Outlet Water	Wall
α	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
ϵ	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	epsilonWallFunction
κ	turbulentIntensityKineticEnergyInlet	turbulentIntensityKineticEnergyInlet	zeroGradient	kqRWallFunction
ω	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	omegaWallFunction
ν_t	calculated	calculated	calculated	nutUSpaldingWallFunction
p_{rgh}	fixedFluxPressure	fixedFluxPressure	totalPressure/ fixedValue	fixedFluxPressure
U	volumetricFlowRate timeVaryingMappedFixedValue	volumetricFlowRate timeVaryingMappedFixedValue	inletOutlet	noSlip
R	fixedValue	fixedValue	zeroGradient	fixedValue

Table B.2: Boundary Conditions for co-current/counter-current tests.

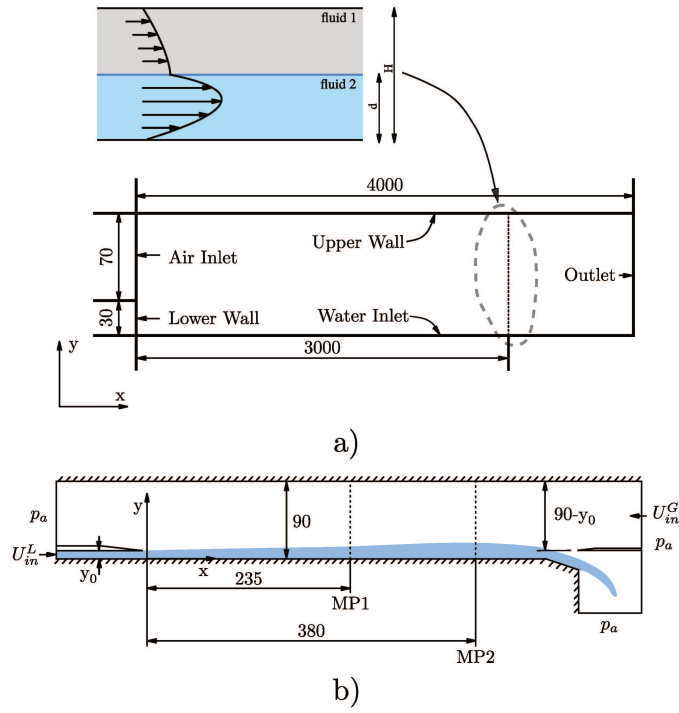
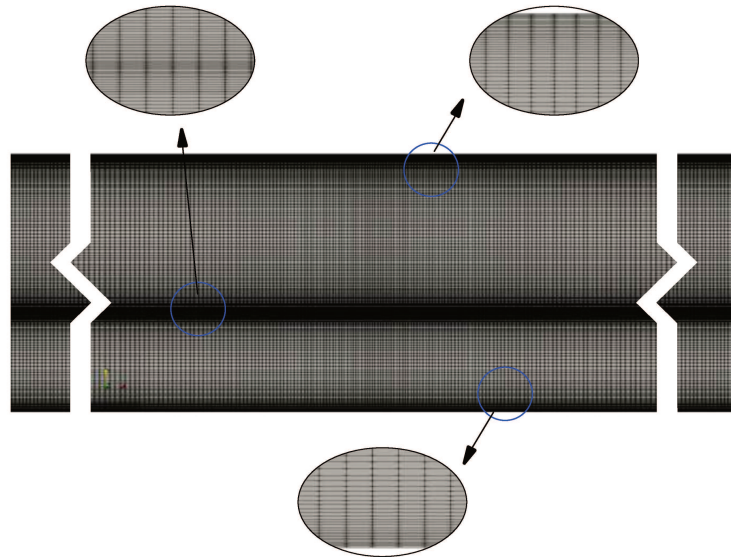
Mesh	Type	Number of	Min wall	Min interface	Max Aspect
	of mesh	cells	size (mm)	size (mm)	ratio
M1	2D	22,704	0.370	0.388	553
M2	2D	46,060	0.270	0.270	758
M3	2D	93,800	0.187	0.192	1087
M4	2D	191,000	0.133	0.133	1539
M1	3D	454,080	0.370	0.388	81
M2	3D	1,057,500	0.270	0.350	86
M3	3D	2,412,000	0.190	0.190	92
M4	3D	11,460,000	0.134	0.130	196

Table B.3: Mesh parameters for co-current test.

Mesh	Type	Number of	Skewness	Max Aspect	Non-orthogonality	Non-orthogonality	Min near wall	Min near interface
	of mesh	cells	maximum	ratio	average(°)	maximum (°)	size (mm)	size (mm)
M1	2D	25,060	0.40	5.96	1.13	18.74	0.425	0.425
M2	2D	37,890	0.42	13.44	1.47	20.88	0.235	0.235
M3	2D	53,100	0.42	41.21	1.5	45.97	0.105	0.105

Table B.4: Mesh parameters counter-current test.

	Water	Air
h (m)	0.009	0.081
n	1/7	1/7
$U_{\max}$ (m/s)	0.68	5.37
Q_{2D} (m ³ /s)	0.0051	0.377

Table B.5: Parameters for inlet velocity profiles of counter-current test.**Figure B.2:** Sketch of the geometry used for a) co-current flow and b) counter-current tests.**Figure B.3:** Mesh M5-2D for co-current Case 250.

B.4.2 Counter-current flow

The counter-current air/water test simulated was carried out by [62]. The fluid properties are given in Table B.1 and a schematic representation of the geometry is shown in Figure B.2b. Three meshes were made for this test. The mesh features are given in Table B.4 and a view of the finest mesh is shown in Figure B.4. Stähler reported the liquid level, the velocity and turbulence variables along two vertical lines, MP1 and MP2 (see Figure B.2b) with different water and air flow rates. We have only simulated the Case 3-23, which has water flow of 41.7 l/s and air flow of 39.6 l/s.

The boundary conditions are detailed in Table B.2. For the inlets, the velocity profiles for air and water were imposed through power law equations defined as follows:

$$u_x = U_{\max} \left| 1 - \frac{|h - 2y|}{h} \right|^n \quad (\text{B.25})$$

where h denotes the inlet height, y the vertical coordinate and $U_{\max}$ the maximum velocity, which was adjusted to achieve the target flow rate. These parameters are presented in Table B.5.

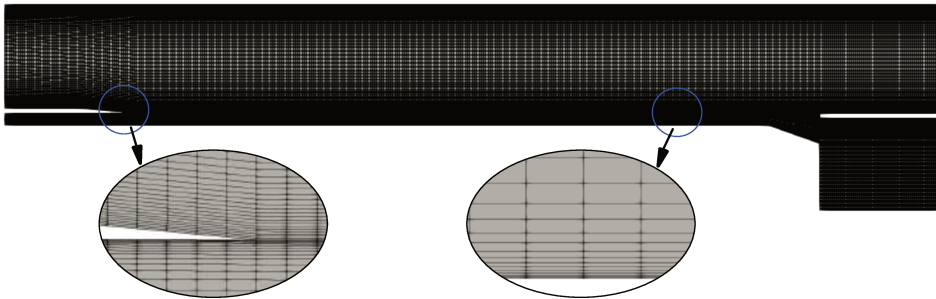


Figure B.4: Mesh 2D-M3 for counter-current test.

B.5 Results and discussions

The co and counter current flow tests were chosen with the aim of evaluating the response of the numerical methods under challenging conditions in terms of interfacial shear stress, such as those found in CCFL cases.

B.5.1 Co-current Flow

The results were obtained as the time average of the solutions in a 30 s time window once stationary conditions were reached. That is to say that the results do not correspond to a particular instant but to the temporal average taking the transient solution at each time step. This averaging is automatically done with OpenFOAM. Before presenting the mesh and turbulence analysis, the results obtained for the Case 250 with the $k - \omega$ SST model are compared with experimental data and results from other authors [66]. Figures B.5a and b show the velocity and kinetic energy profiles in the developed flow region for the finest mesh (M5-2D), for which the y^+ value remained below unity, using ρ -con and ρ -var turbulence formulations. In terms of velocity, significant discrepancies can be observed near the interface, where the water level is underestimated. However, the most significant discrepancies are found in the airflow region, where the maximum velocity, the height of this maximum, and the general shape of the velocity profile differ significantly from the experimental data. Despite the local refinement, the velocity distribution near the upper boundary deviates significantly. The incorrect prediction of the turbulent kinetic energy is illustrated in Figure B.5b. Although a jump in k is found, it occurs well below the interface. In addition, the maximum values are significantly different from the measurements. It is

concluded that the ρ -con $k-\omega$ SST model leads to poor results. Turbulence is overestimated everywhere, increasing the turbulent viscosity. This could lead to excessive drag at the interface, causing the peak air velocity to move upwards. The results indicate that $k-\omega$ SST model is not suitable for solving the Case 250. Similar conclusions have also been obtained by [66]. Next, the performance of the $k-\epsilon$ RNG and RST models is evaluated.

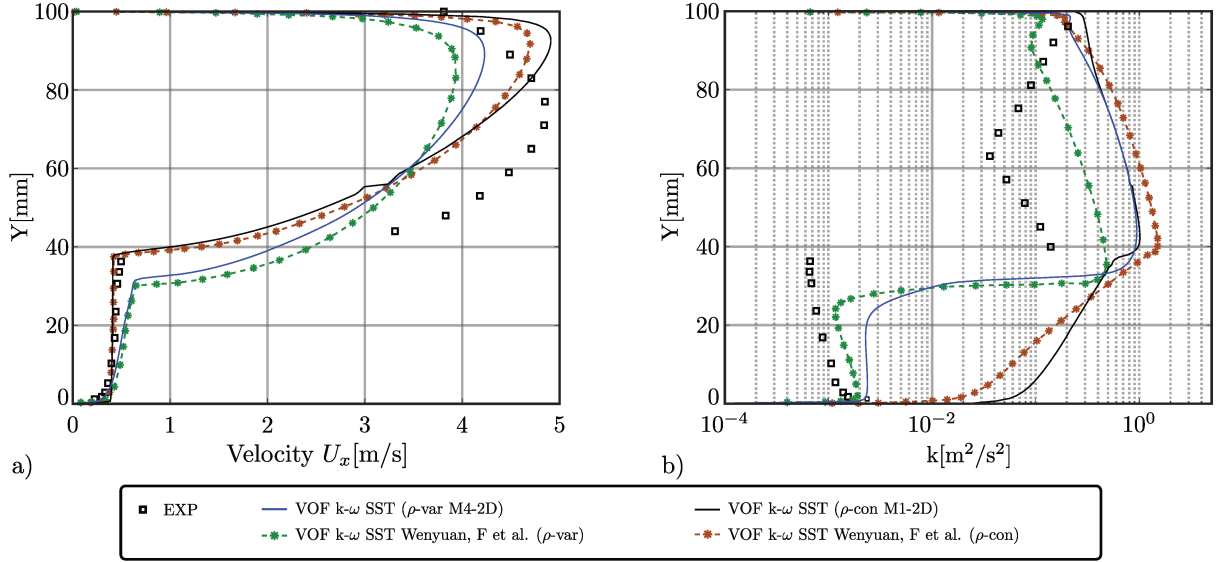


Figure B.5: Co-current flow test. Comparison ρ -var and ρ -con with $k-\omega$ SST: a) velocity profile U_x and b) turbulent kinetic energy k .

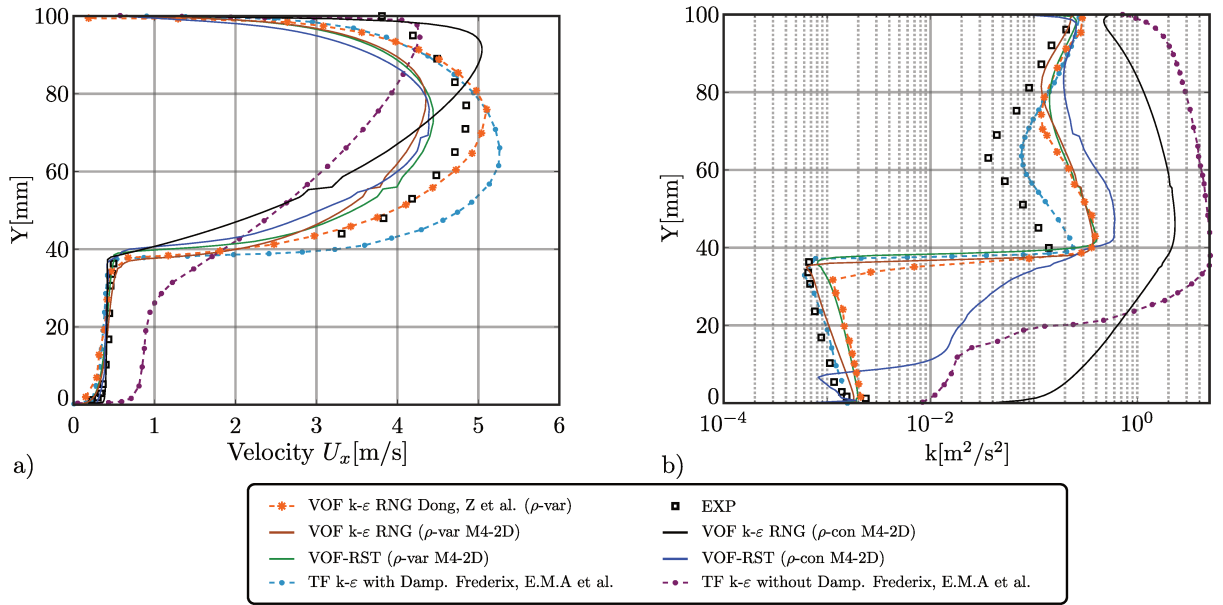


Figure B.6: $k-\epsilon$ RNG and RST with ρ -con and ρ -var formulation.

Figures B.6a and b show the velocity and turbulent kinetic energy profiles for Case 250. The results correspond to the $k-\epsilon$ RNG and RST models both with ρ -con and ρ -var formulations and the M2-2D mesh. These results are compared with those reported by [67] with ρ -var $k-\epsilon$ formulation in a 3D mesh. As can be seen, the numerical results with ρ -var approximate the velocity profile with good accuracy, with a small underestimation in the air region. In addition, the interface height is satisfactorily captured.

The numerical results for the velocity obtained by [67] fit better the experimental data, but as will be shown later, this is due to the 3D nature of the simulation. In terms of turbulent kinetic energy, the ρ -con model gives poor results over the whole domain, while the ρ -var model gives a very good agreement in the liquid region, although overestimating the turbulence in the air region just above the interface affecting the entire air region.

A mesh sensitivity analysis was carried out for Case 250 with $k - \epsilon$ RNG and RST models, using standard algebraic and ISO surface reconstruction. Figure B.7 shows the velocity profiles obtained with the five meshes. Firstly, it should be noted that the peak air velocity is significantly lower than that observed in experiments. This discrepancy is due to the assumption that the velocity profile is 2D, neglecting the effect of the front and back walls. The channel has a depth of 20 cm and a velocity profile in the z-direction is also expected. This effect is neglected in the 2D simulations. As can be seen, the results are almost independent of the mesh for ISO, while only a small mesh dependence is found for the standard VOF. The improvement over the $k - \omega$ SST model by using ISO is clearly observed. However, the peak air velocity remains underestimated as a consequence of the 2D simulations. The liquid level and the water velocity profile are quite well represented by the four models. The RST models seem to be slightly better at estimating the maximum air velocity height, while the $k - \epsilon$ RNG models slightly overestimate it.

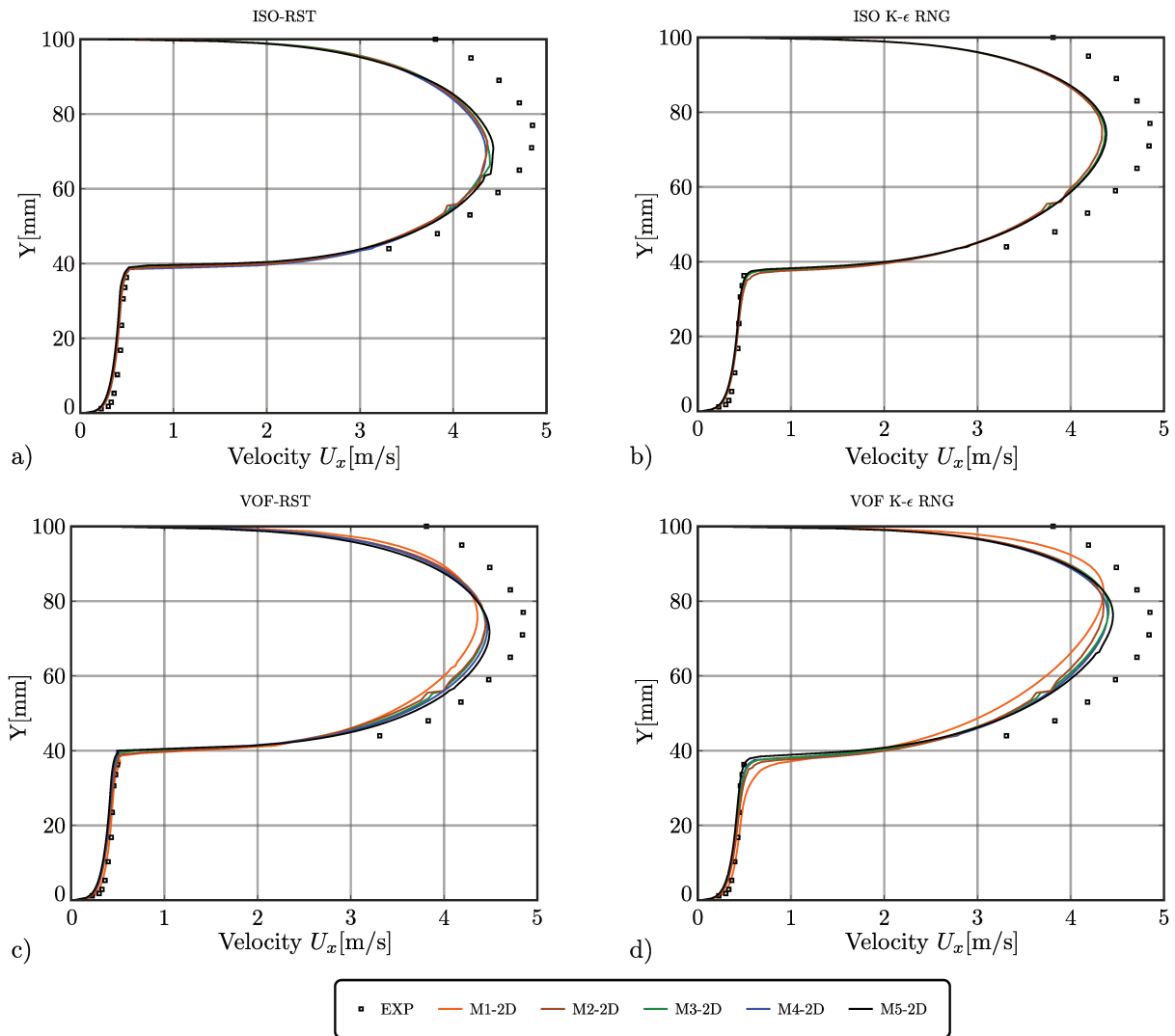


Figure B.7: Co-current flow test. Comparison of velocity profiles for 5 different meshes and ρ -var.

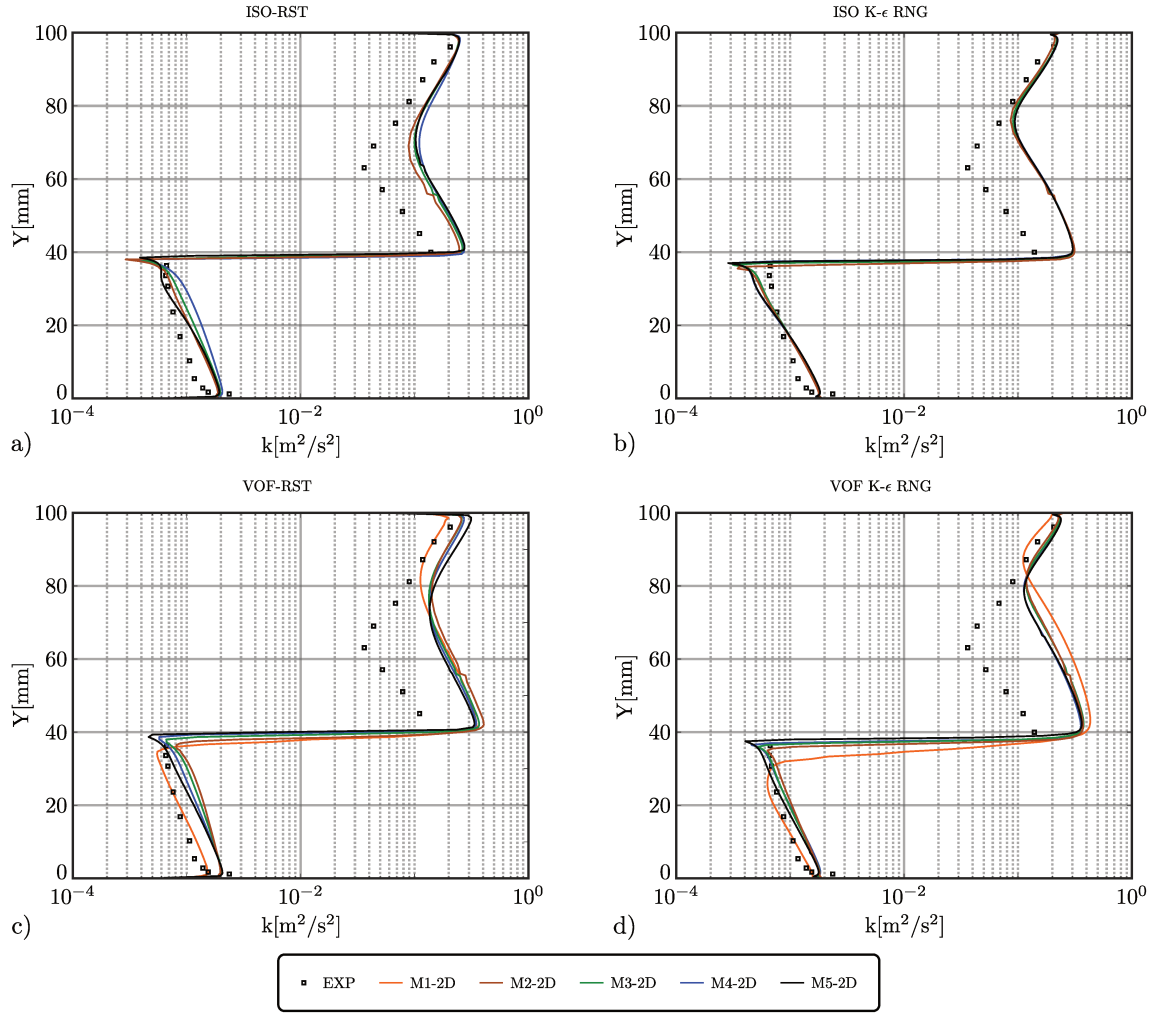


Figure B.8: Co-current flow test. Turbulent kinetic energy profiles for 5 different meshes.

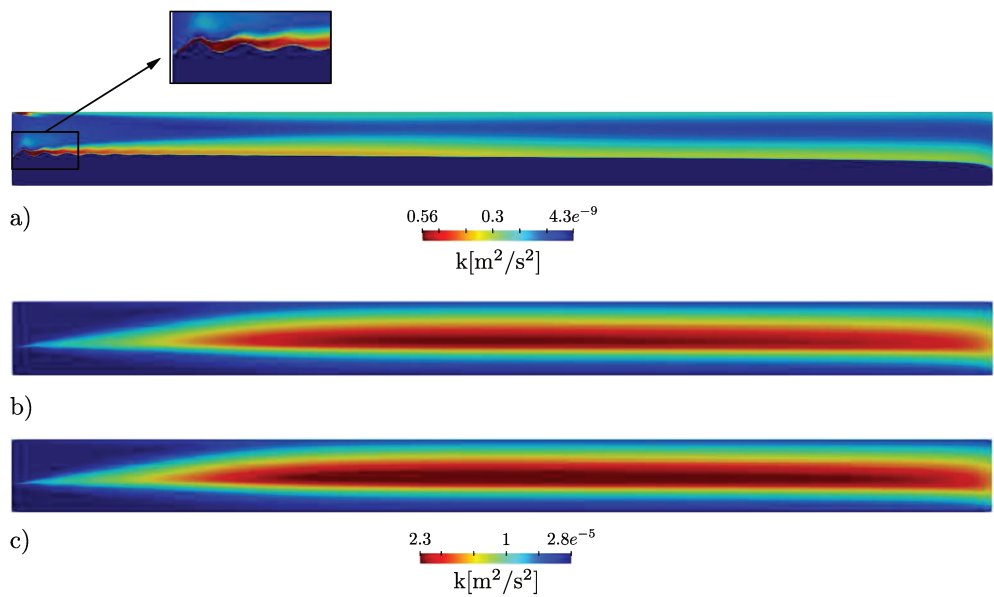


Figure B.9: Kinetic energy k with $k - \epsilon$ RNG: a) ρ -var formulation (M5-2D) b) ρ -con formulation (M5-2D) c) ρ -con formulation (M1-2D).

The turbulent kinetic energy k is shown in Figure B.8. It is clear that the $k - \epsilon$ RNG and RST solutions are in better agreement with the experimental data than the $k - \omega$ SST case. The interface height is well captured and the profile is acceptable. Although the $k - \epsilon$ RNG model appears to be more sensitive to mesh refinement, the four models capture the high turbulence jump at the interface and the “M” shape of k in the air region thanks to the use of the ρ -var formulation. However, all models show discrepancies in the k profile in the water region. In general, the RST model accurately estimates the turbulent kinetic energy, but overestimates the turbulence jump near the interface, which affects the air region.

The turbulent kinetic energy for the Case 250 with M5-2D is shown in Figure B.9 for the $k - \epsilon$ RNG model with ρ -var (a) and ρ -con (b-c) formulations. For the former the higher turbulence is found at the point of first contact between air and water, and is followed by an oscillation at the interface and later decay to reach a smooth interface solution far from the inlet. On the other hand, for the ρ -con formulation the turbulence is not damped along the channel and propagates towards the air and water regions, largely affecting the air. The maximum turbulent kinetic energy is four times higher than that for the ρ -var formulation. This overestimation of the turbulence production at the interface is similar for coarse and fine meshes, as can be seen by comparing the figures b (M5-2D) and c (M1-2D).

The pressure gradient along the channel is reported in Figure B.10. The black bar corresponds to the experimental data. As can be seen, the pressure gradient is very small and is overestimated for all models with 2D meshes. The best agreement is obtained with the RST model and the finest mesh. As reported in Table B.6, the errors with RST are of 11.91% and 9.52% with the standard VOF and ISO formulations, respectively. The best results obtained with the RST models can be attributed to the pressure-rate-of-strain tensor, which is mainly influenced by pressure fluctuations [94]. On the other hand, the errors with the $k - \epsilon$ RNG model are similar for all meshes and reach 54% for the finest mesh.

As mentioned earlier, 2D simulations do not take into account the influence of the front and back walls in the depth direction of the channel, leading to noticeable discrepancies, especially in the peak velocity. Obviously, this also affects the pressure drop. Therefore, 3D simulations were conducted using the ρ -var $k - \epsilon$ RNG model with four meshes, as detailed in Table B.3 (see Figure B. 19).

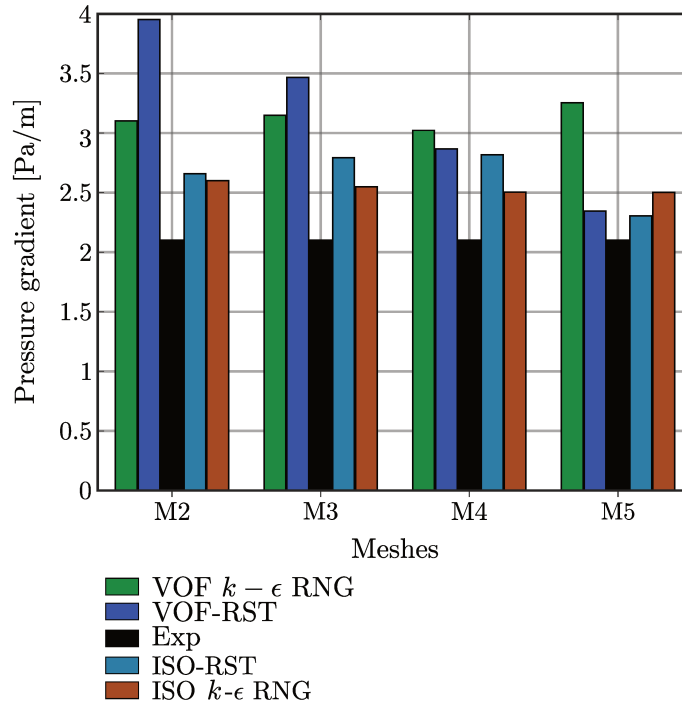


Figure B.10: Co-current flow test. Mesh convergence analysis for ρ -var: $k - \epsilon$ RNG and RST turbulence models with algebraic and ISO interface reconstruction.

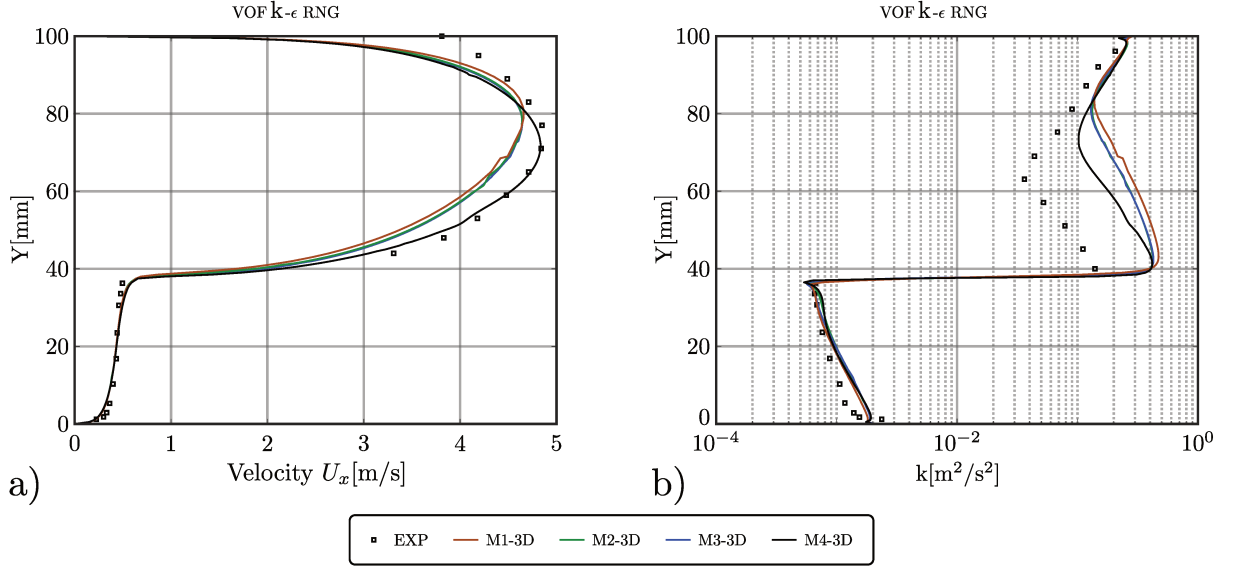


Figure B.11: Co-current test. 3D mesh results with $k-\epsilon$ RNG and ρ -var: a) velocity profile U_x and b) turbulent kinetic energy k .

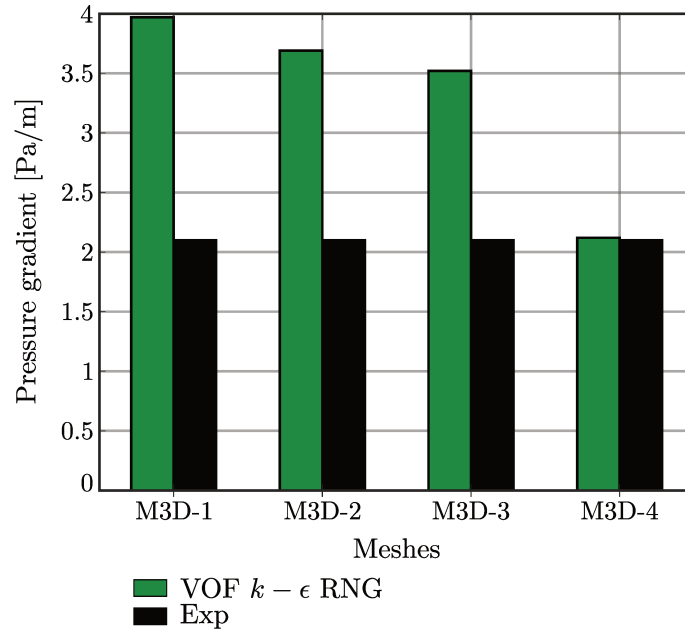


Figure B.12: Co-current flow test. Pressure gradient for 3D mesh with ρ -var $K-\epsilon$ RNG.

Similar to the 2D cases, local refinement was applied near the inlet, outlet, interface, and front and back walls. The finest mesh (M3-3D) was refined to achieve a y^+ value close to unity. Figures B.11a and b show the velocity and turbulent kinetic energy profiles obtained with 3D meshes. As can be seen, a significant improvement is obtained with all meshes and especially with the finest one. The largest differences are near the interface and the velocity peak. However, the improvement is less significant for the turbulent kinetic energy. The pressure drop for the 3D meshes is shown in Figure B.12. Similar to the velocity profiles, here the results slowly converge to the experimental data, but the improvement becomes significant for the finest mesh, with an error of less than 1%, as reported in Table B.6.

In view of the present results, four key ideas should be highlighted: First, the $k-\omega$ SST turbulence model is not suitable for solving this kind of separated flows. Second, the $k-\epsilon$ RNG and RST turbulence

Method	Mesh	N of Processes	Time (h)	Time (d)	Pressure gradient (Pa/m)	Error (%)
EXPERIMENT	—	-	-	—	2.1	—
VOF-RST	M2-2D	24	3.71	0.16	3.95	88.10
VOF-RST	M3-2D	24	13.9	0.58	3.47	65.24
VOF-RST	M4-2D	24	35.07	1.46	2.87	36.67
VOF-RST	M5-2D	24	144	6	2.35	11.91
VOF $k - \epsilon$ RNG	M2-2D	24	2.94	0.12	3.10	47.62
VOF $k - \epsilon$ RNG	M3-2D	24	8.68	0.36	3.15	50.00
VOF $k - \epsilon$ RNG	M4-2D	24	30.96	1.29	3.02	43.81
VOF $k - \epsilon$ RNG	M5-2D	24	131.39	5.48	3.25	54.76
ISO-RST	M2-2D	24	3.44	0.14	2.66	26.67
ISO-RST	M3-2D	24	8.10	0.34	2.79	32.86
ISO-RST	M4-2D	24	25.11	1.05	2.82	34.29
ISO-RST	M5-2D	24	110.22	4.59	2.30	9.52
ISO $k - \epsilon$ RNG	M2-2D	24	2.44	0.10	2.60	23.81
ISO $k - \epsilon$ RNG	M3-2D	24	7.18	0.30	2.55	21.43
ISO $k - \epsilon$ RNG	M4-2D	24	23.94	0.99	2.50	19.05
ISO $k - \epsilon$ RNG	M5-2D	24	104.17	4.34	2.50	19.05
VOF $k - \epsilon$ RNG	M1-3D	24	30.58	1.27	3.97	89.05
VOF $k - \epsilon$ RNG	M2-3D	24	110.68	4.61	3.69	75.71
VOF $k - \epsilon$ RNG	M3-3D	24	547.31	22.80	3.52	67.62
VOF $k - \epsilon$ RNG	M4-3D	44	673.68	28.07	2.12	0.95

Table B.6: Co-current flow test. Computing time and pressure gradient error.

models give to acceptable solutions in terms of velocity, pressure drop and turbulent kinetic energy. Thirdly, the RST model appears to give slightly better solutions for fine meshes. Fourthly, 2D simulations cannot represent the nature of the flow.

Although the steady-state solution is the result of main interest, since the idea is to apply this methodology to the study of industrial nuclear engineering problems (reactor core reflooding), it is crucial to evaluate the efficiency of the different computational models in terms of computational time and accuracy of the solution. Table B.6 shows this for the different meshes and turbulence models. It can be seen that the RST simulations take more time than the $k - \epsilon$ SST ones. This is not surprising as the former solves more equations. Regarding the interface reconstruction method, the ISO simulations are slightly faster than standard RST ones. Similar results were found by [41], who concluded that in the ISO method converges to steady state solutions in a few iterations, although for unsteady flows, such as turbulent bubbly, the ISO method is more expensive than standard VOF. However, for the same mesh the ISO method is always more accurate and then it is less time consuming to obtain similar solutions [15]. Concluding, the mesh size doubles from M2-2D to M3-2D, and so on, while the running time increases by more than three times. It can be concluded that in most cases the high computational cost of refinement is not justified, since the results are quite similar, with the exception of the VOF-RST model, where a significant improvement is observed after refinement.

Table B.7 includes the L_2 norm based choice to compute the errors on the velocity U_x and the turbulent kinetic energy k . As shown, there are no significant differences for the velocity. On the contrary, the errors are higher for the turbulent kinetic energy. For the finest 2D mesh (M5-2D), the best agreement is for the VOF-RST model and the worst for the VOF $k - \epsilon$ RNG one. On the other hand, for 3D meshes, the velocity errors are significantly reduced with M3-3D, but the discrepancies in k become higher than for 2D meshes.

To evaluate the response of the different models by increasing the airflow, the Cases 400 and 600, corresponding to 75.4 l/s and 118.7 l/s, were simulated. The models used were VOF-RST, VOF $k - \epsilon$ RNG and $k - \omega$ SST in their ρ -var formulations and the finest 2D mesh (M5-2D). In addition, the Case 600 was simulated using the finer 3D mesh and the VOF $k - \epsilon$ RNG model.

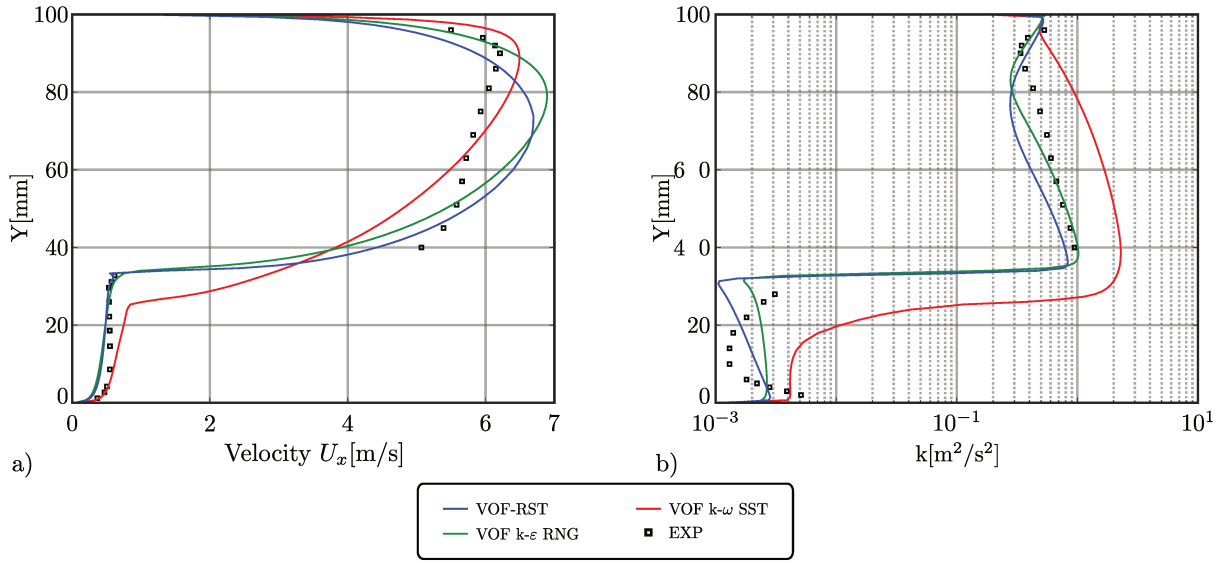


Figure B.13: Co-current flow test. Mesh M2-2D results with ρ -var, $k - \epsilon$ RNG, RST and $k - \omega$ SST: a) velocity profile U_x and b) turbulent kinetic energy k for case 400.

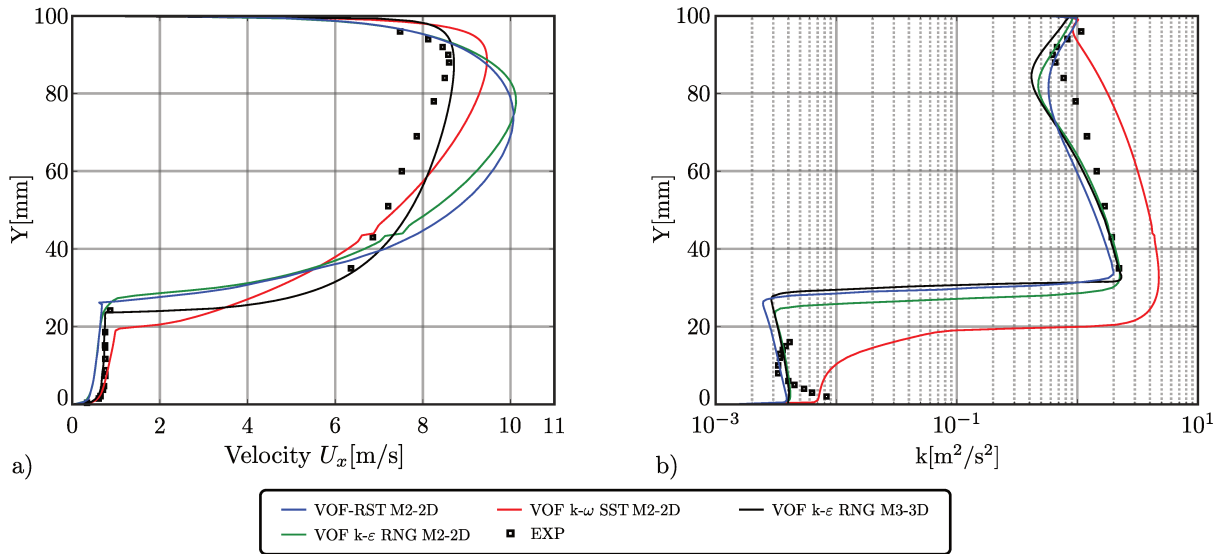


Figure B.14: Co-current flow test. Mesh M2-2D and M3-3D results with ρ -var, $k - \epsilon$ RNG, RST and $k - \omega$ SST: a) velocity profile U_x and b) turbulent kinetic energy k for case 600.

Mesh	Model	U_x	k
M5	VOF-RST	0.135	0.443
M5	ISO-RST	0.127	0.735
M5	VOF $k-\epsilon$ RNG	0.124	1.278
M5	ISO $k-\epsilon$ RNG	0.130	0.929
M3D-4	VOF $k-\epsilon$ RNG	0.061	1.317

Table B.7: Co-current flow test. Error (L_2) for U_x and k .

Mesh	Model	U_x at. MP1	U_x at. MP2	k at. MP1
M3	VOF $k-\omega$ SST	0.121	0.138	1.779
M3	VOF $k-\epsilon$ RNG	0.114	0.129	1.452
M3	VOF-RST	0.072	0.086	0.555

Table B.8: Counter current flow test. Error (L_2) for U_x and k .

Figures B.13 and B.14 show the results for Cases 400 and 600. Similar to Case 250, in these tests the $k-\omega$ SST model shows the largest deviations from the experiments, especially for k , which was largely overestimated both in the air and in water regions. In fact, the k profile in the water was exactly the opposite. For these high air flows the peak air velocity moves upwards. This effect is captured by the $k-\omega$ SST model, but on the other hand, the water level is largely underestimated. In contrast, the results from VOF-RST and VOF $k-\epsilon$ RNG models are similar to those obtained for Case 250.

The liquid height and velocity profile in water are satisfactorily estimated, but in the air region the profiles have a similar shape to those obtained in for Case 250, with the velocity peaks located in the middle of the air region. As for the turbulent kinetic energy, none of the three models captures the k profile in the water, although VOF-RST and VOF $k-\epsilon$ RNG correctly estimate the turbulence in the air region. Figure B.14 also shows a 3D VOF $k-\epsilon$ RNG simulation. It is clear to see the improvement observed in the air velocity profile by introducing the third dimension. This not only does the velocity peak move upwards, but the overall shape is also well captured. A similar improvement is observed for the water velocity profile, although the turbulence in the liquid remains poorly estimated.

Mesh	Model	Δp^G (Pa)
M3	VOF $k-\omega$ SST	0.920
M3	VOF $k-\epsilon$ RNG	1.425
M3	VOF-RST	1.180
-	Experiment	0.8
-	AIAD	1.25

Table B.9: Counter-current flow test. Comparison of static pressure difference in the air region.

B.5.2 Counter-current flow

This test was simulated with three 2D meshes described in Table B.4. The cell sizes ranged from 0.42 to 0.1 mm, similar to those used in the previous test. Local refinement near the walls and the interface was also applied to ensure a good boundary layer resolution, obtaining y^+ close to unity for the finest mesh. The ρ -con and ρ -var turbulence formulations for $k - \epsilon$ RNG, $k - \omega$ SST and RST were again evaluated.

As for the co-current case, a mesh sensitivity analysis was first performed with the 2D meshes M1, M2 and M3 described in Table B.4. Figures B.15, B.16 and B.17 show the results of the velocity in the x -direction and the turbulent kinetic energy along the vertical direction at the position MP1 for VOF-RST, $k - \epsilon$ RNG and $k - \omega$ SST models. It was observed that the best solution for each model was obtained with the finest mesh (M3). However, the results obtained with the coarser mesh (M1) did not show significant deviations. This suggests that it is possible to use VOF RANS with 0.425 mm elements without too much loss of accuracy and to obtain reasonable results. The experimental results for velocity show a typical turbulent plug flow with the peak velocity closest to the interface, while all numerical models place the peak closest to the top wall. The VOF-RST model shows the best agreement between simulations and experimental results, while $k - \epsilon$ RNG and $k - \omega$ SST models fit the velocity profile for water and the peak air velocity value very well, but the profiles diverge significantly at the interface and at the top wall. The $k - \omega$ SST model gives the worst results.

Looking on the air region, when the velocity and turbulent kinetic energy profiles are analysed together, it can be seen that in the interface region the air velocity is much lower than the measured velocity while k is much higher. This higher turbulence implies a higher effective viscosity and ultimately a laminar flow at the interface. This overestimation of k is smaller in the RST model and justifies a better fit of the velocity profile both at the interface and at the top wall. Clearly, the largest deviations of k correspond to the $k - \omega$ SST model and are reflected in the velocity profile obtained. This overestimation of the k observed in the counter-current test also occurs in the co-current tests, but is much smaller.

In the liquid region, all three models capture the velocity profile very well. However, the turbulence is best resolved by the $k - \omega$ SST model, followed by the RST model and to a lesser extent the $k - \epsilon$ RNG model, which shows a strong overestimation of the turbulence jump. However, this error affects the air phase but has little effect on the liquid velocity profile. In other words, the water velocity profile is not very sensitive to turbulence.

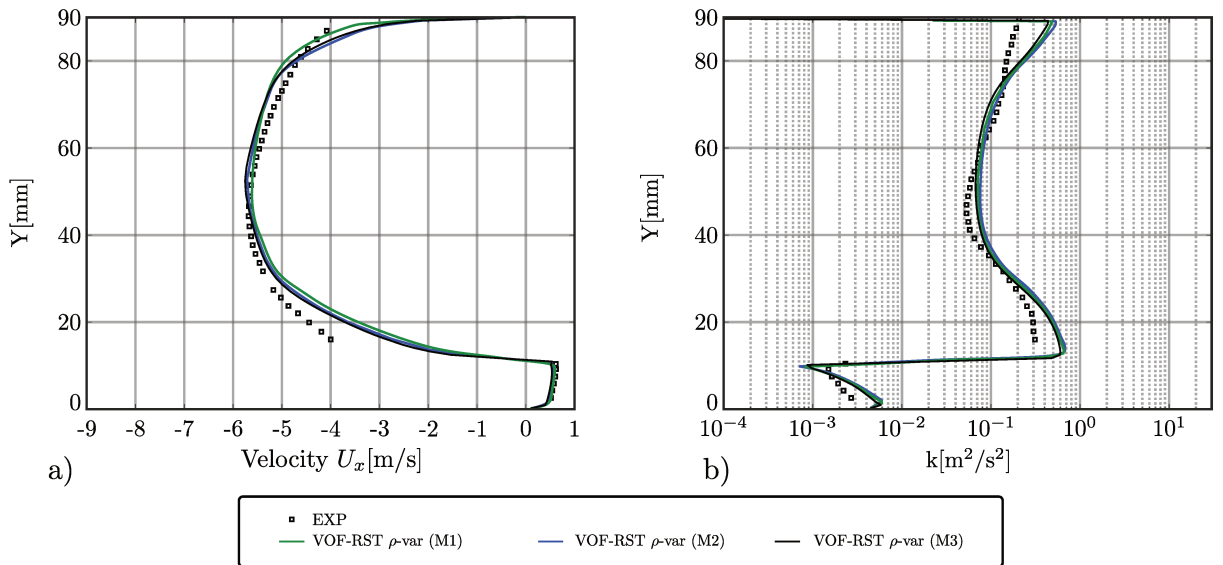


Figure B.15: Counter-current test. Comparison of M1, M2 and M3 with the RST model: a) velocity profile U_x at MP1 and b) velocity profile U_x at MP1.

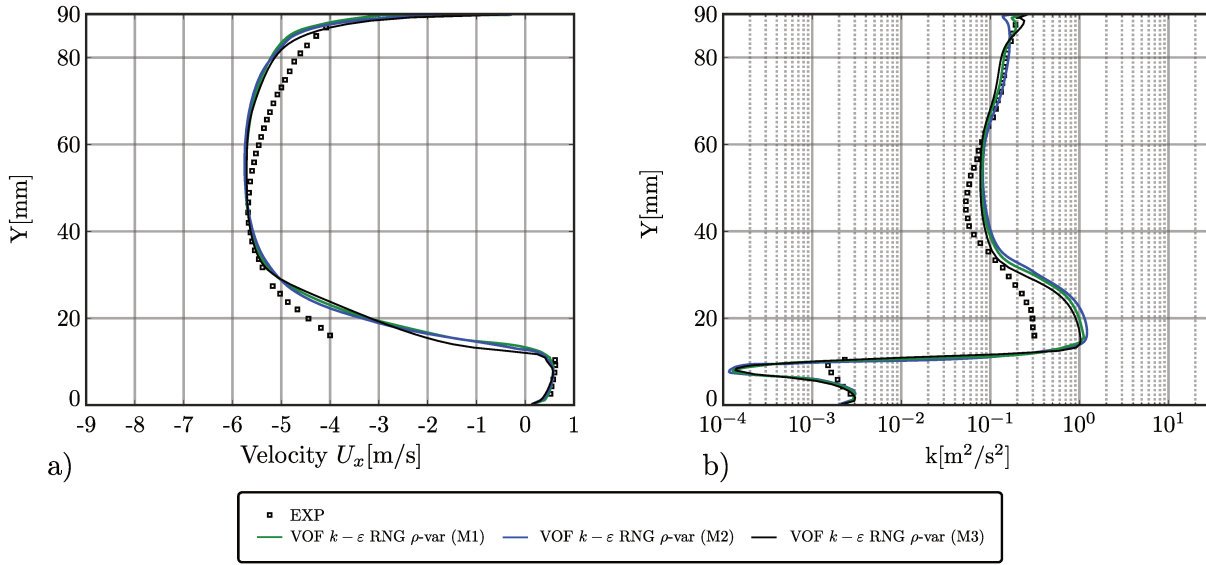


Figure B.16: Counter-current test. Comparison of M1, M2 and M3 with the $k-\epsilon$ RNG model: a) velocity profile U_x at MP1 and b) velocity profile U_x at MP1.

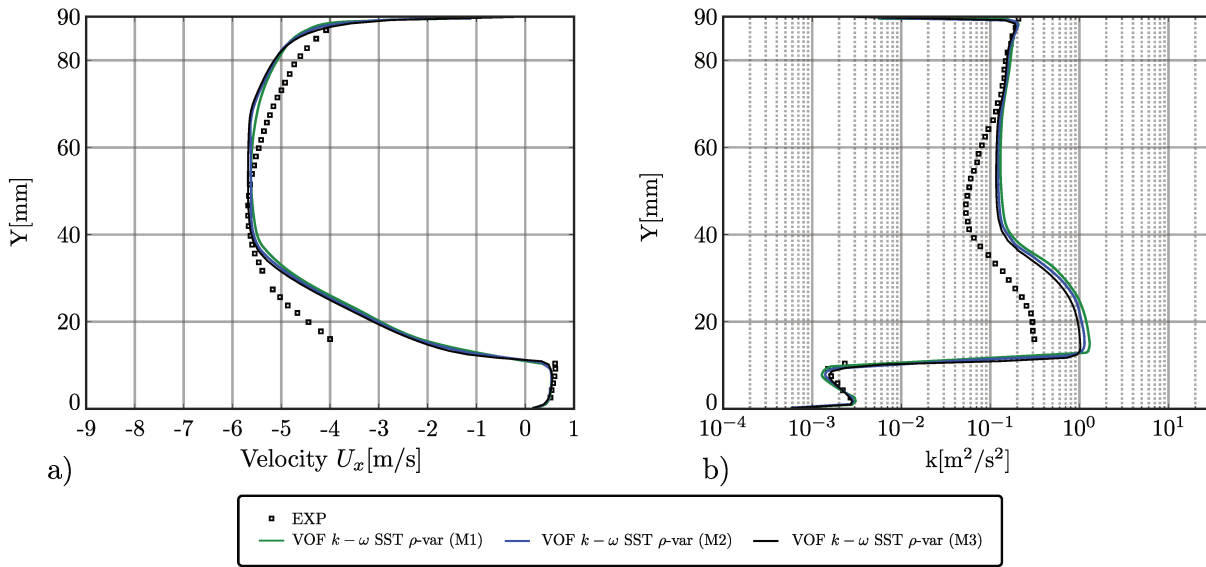


Figure B.17: Counter-current test. Comparison of M1, M2 and M3 with the $k-\omega$ SST model: a) velocity profile U_x at MP1 and b) velocity profile U_x at MP1.

Figures B.18a and b show the velocity profiles obtained along two vertical lines named MP1 and MP2 (see Figure B.2). The results correspond to the finer mesh. The TF model solutions obtained by [65] with and without damping have also been included. These results are particularly useful to demonstrate the importance of using a ρ -var formulation. As can be seen, the results of the ρ -con model are completely incorrect both in the shape of the velocity profile with the velocity peak largely overestimated and displaced upwards. In addition, the interface height estimated with the ρ -con models are more than twice than the reported experimentally. On the other hand, the results improve significantly with the ρ -var formulations, giving very similar results for the all turbulence models and very good agreement with the experimental data. Regarding the TF solutions, the large differences observed with and without damping are depicted in Figure B.18a. As noted, the damped solution is quite similar to the obtained with ρ -var models. On the other hand, the solution without damping overestimates the interface

height and the shape of the velocity profile.

The analysis of the turbulent kinetic energy profiles along the MP1 line (see Figure B.20) leads to the same conclusions; similarly to the previous test, the ρ -con models are also unable to capture the general shape of k and the jump in turbulence measured at the interface. The turbulence generation is overestimated at the bottom wall and grows monotonically in the liquid region until it reaches the interface (note that for the ρ -con models the interface is well above the real value).

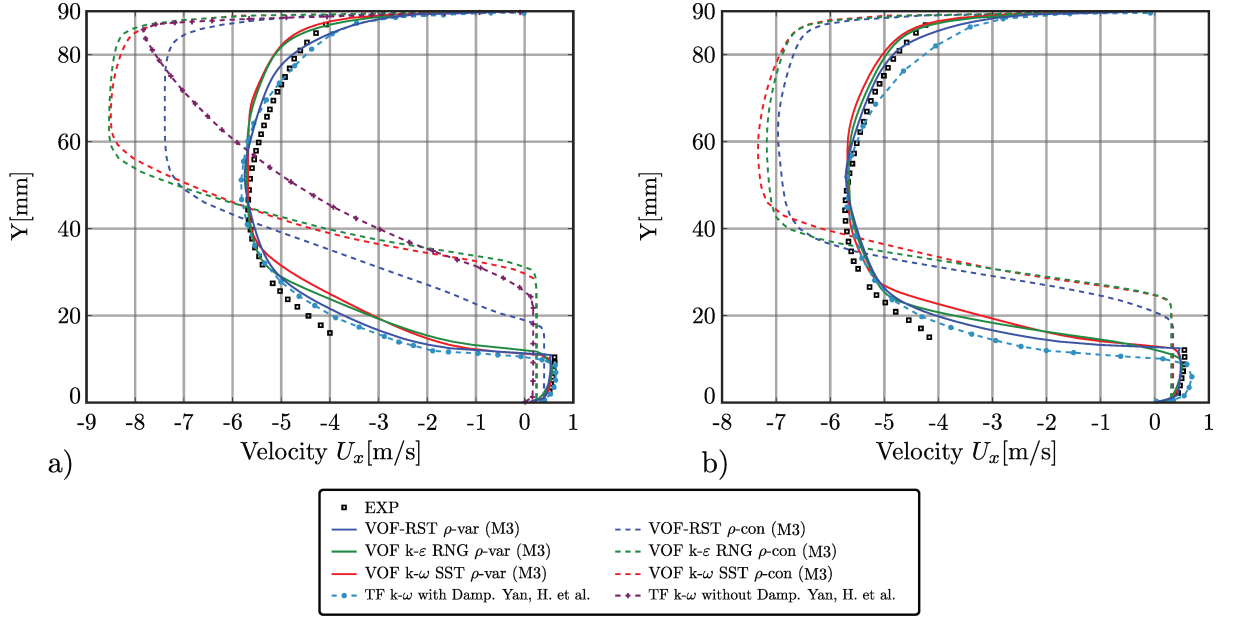


Figure B.18: Counter-current test. Comparison with different turbulence models: a) velocity profile U_x at MP1 and b) velocity profile U_x at MP2.

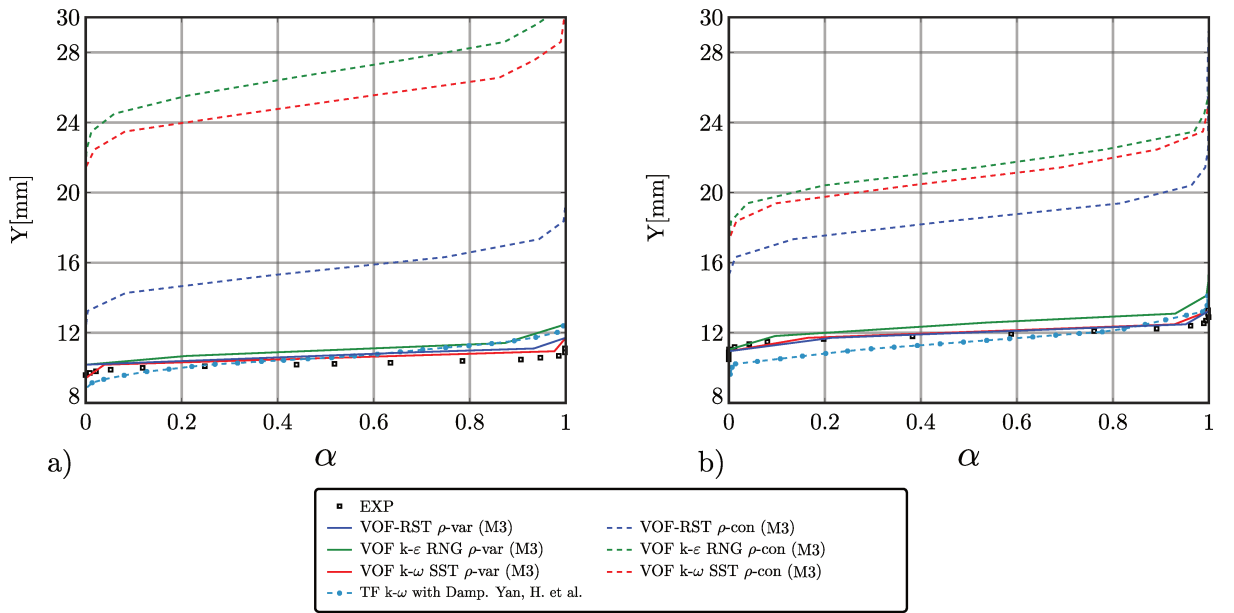


Figure B.19: Counter-current test. Comparison with different turbulence models: a) α at MP1 and b) α at MP2.

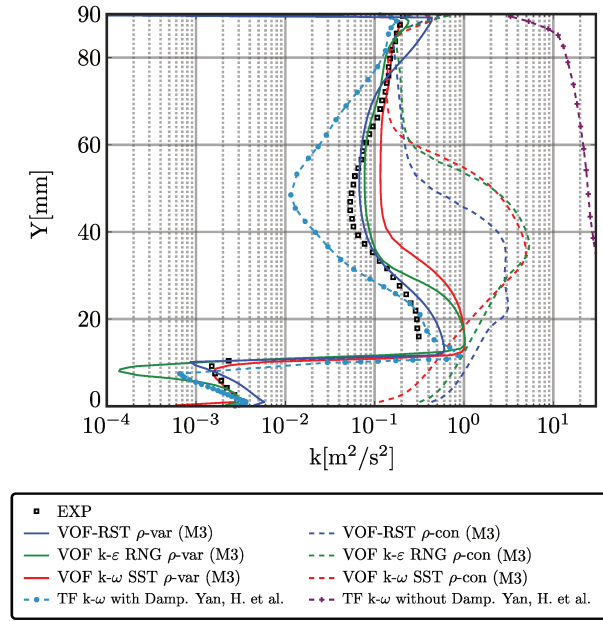


Figure B.20: Counter-current test. Comparison of turbulent kinetic energy k for ρ -con and ρ -var turbulence formulations at MP1.

Only near the top wall does the estimate of k reach values similar to those measured experimentally. On the other hand, the ρ -var models correctly estimate the shape of the k profile both in the water and in the air. The $k - \omega$ SST model fits best in the water region, while the VOF-RST model fits best in the air region. Although all three models overestimate the turbulent jump at the water/air interface, the VOF-RST model makes the smallest error.

It is clear that all VOF models based on the non-conservative formulation of the turbulence equations (ρ -con) are unable to capture the damping effect at the interface. In fact, there is no break in the curves due to the presence of the interface. On the other hand, the ρ -var models capture the jump in turbulent kinetic energy that occurs when the fluid changes from air to water. The $k - \epsilon$ RNG model overestimates this jump at the interface, causing the turbulent energy to drop one order more than it actually does in the liquid region. The VOF-RST model captures this phenomenon best, overestimating the k values by 20% in both air and water. Finally, the $k - \omega$ SST model gives a very good estimate in the liquid region and overestimates the turbulence in the upper (air) part of interface by almost an order of magnitude. For comparison, the results of [65] using the TF method with and without damping are also included in graphics. As can be seen, the results without damping give completely wrong solutions, with turbulence values several orders higher than the real ones. On the other hand, the use of damping significantly improves the results, which are similar to those obtained with VOF-RST. Since the transport equations for k in the $k - \epsilon$ and $k - \omega$ models are identical, the cause of the discrepancy between the results of these models should lie in the equations for ϵ and ω . Performing an analysis similar to the one presented by [132], it can be concluded that the equation for ω contains an additional term $\frac{2\nu_t}{\sigma_{\omega k}} \nabla \omega \cdot \nabla k$ that, in non-homogeneous flow, could increase the local dissipation at the interface. It is worth noting that the counter-current test with high airflow (Cases 400 and 600) appears to be more demanding than the co-current test in terms of relative velocity at the interface. Nevertheless, the $k - \omega$ model gives better solutions for the mean and high airflow cases than for low airflow case. It can then be concluded that the relative velocity at the interface is not the cause of the erratic efficiency of the $k - \omega$ model. A possible explanation may then lie in the ratio between the liquid height and the channel height; As the air flow rate increases, the interface decreases and the results improve.

The L_2 norm-based error is also used for a quantitative comparison of the models across the domain. Table B.8 shows the results for the axial velocity U_x and the turbulent kinetic energy k . The VOF-RST

model has the smallest error in both U_x and k with average differences of less than 0.1% and 1% for U_x and k , respectively.

The pressure gradient in the air region is also compared for the three models in Table B.9. The experimental measurement and the numerical estimation obtained by [61] with the TF model are also included. As can be seen, the results of all numerical models overestimate the pressure gradient, although the $k - \omega$ model approximates the experimental result very well.

B.6 Conclusions

This study focused on the role of turbulence modeling in VOF simulations of co-current and counter-current air-water flows. Two well-known segregated flow test cases were numerically simulated to compare ρ -con and ρ -var formulations of the turbulence transport equations using the $k - \epsilon$ RNG, $k - \omega$ SST, and Reynolds Stress Transport models. The results overwhelmingly demonstrate the deficiencies of the ρ -con formulation, which leads to underestimation of the turbulence jump at the interface. In contrast, the ρ -var formulation significantly improves results by correctly capturing the strong drop of turbulent kinetic energy across the air-liquid interface. Of the turbulence models assessed, the $k - \epsilon$ RNG and Reynolds Stress Transport models provide accurate velocity and turbulence profiles even on relatively coarse grids when combined with the ρ -var formulation. The $k - \omega$ SST model struggles for low velocity co-current cases but improves for high velocity flows. Additional 3D simulations show improved matching of experimental data over 2D simulations. In summary, appropriate ρ -var turbulence modelling is critical for robust VOF simulation of segregated flows. The $k - \epsilon$ RNG and Reynolds stress transport models provide reliability in terms of air and water velocity profiles and pressure drop even at coarse discretisations. In contrast to the damping two-fluid models, which require model calibration parameters, the combination of VOF and ρ -var turbulence modelling allows the simulation of segregated flow with large interfaces at relatively low computational cost without the need for prior test data. This study provides guidance on selecting suitable turbulence treatments for predictive modeling of complex multiphase phenomena with separation between phases.

Acknowledgements

The authors would like to thank ANPCyT (grant PICT 2016-2908 and PICT 2019 - 0375), CONICET (PIP 11220210100709CO) and Universidad Nacional del Litoral.

Appendix C

Numerical Analysis of Counter-Current Flow Limitation in a Horizontal Hot-Leg with Elbow Using RELAP5 and VOF-RANS Models

J. Sarache, S. Corzo, D. Godino, and D. Ramajo. (2025). “Numerical Analysis of Counter Current Flow Limitation (CCFL) using RELAP5 and VOF-RANS Models”. *Nuclear Engineering and Design*, 444, 114416.

Numerical Analysis of Counter-Current Flow Limitation in a Horizontal Hot-Leg with Elbow Using RELAP5 and VOF–RANS Models

J. Sarache^{a,b,1}, S. Corzo^{a,b}, D. Godin^{a,c}, D. Ramajo^{a,b}

^aCIMEC Centro de Investigación de Métodos Computacionales (UNL, CONICET), Santa Fe, Argentina

^bUNL Universidad Nacional del Litoral, Argentina

^cUTN Universidad Tecnológica Nacional, Argentina

Keywords: CCFL, CFD, VOF, RELAP5.

Abstract. During the *reflux-cooling* phase that follows certain small-break loss-of-coolant accidents (SBLOCAs) in pressurised water reactors (PWRs), the condensate formed in the steam generators must descend through the *hot-leg* to re-flood the core. This downward liquid stream can be throttled by the counter-current steam rising from the vessel, a phenomenon known as **counter-current flow limitation** (CCFL). A reliable CCFL prediction is therefore pivotal for estimating the passive cooling capability of the primary circuit and, in turn, for judging the safety margin in SBLOCA scenarios. CCFL is quantified here for the *COLLIDER* facility (190 mm ID) using two complementary strategies: (i) a three-dimensional VOF–RANS model with variable-density (ρ -var) turbulence formulation in OPEN-FOAM v2206, and (ii) the one-dimensional system code RELAP5-Mod3 with a linear Wallis-type flooding correlation. Four operating regimes are examined in the range $J_f^{*0.5} = 0.10\text{--}0.30$. Results show that the VOF–RANS model reproduces the so-called *elevated CCFL*—i.e. a controlled overshoot of the Wallis line before full blockage—with errors below 10 % in both pressure drop and blockage onset. In contrast, RELAP5 anticipates blockage by up to 25 %, confirming its conservative bias. Parametric studies reveal that the ρ -var formulation lowers the excess interfacial drag by roughly 40 % relative to the incompressible variant, and that mesh refinements finer than 10 mm produce marginal changes in global outcomes. Two practical guidelines emerge: (a) the 1-D approach is adequate for $J_f^{*0.5} < 0.15$; (b) for $J_f^{*0.5} > 0.20$ or for geometries with pronounced bends, an interface-capturing CFD model is essential to avoid overly conservative blockage estimates. These findings provide a clear basis for selecting and calibrating numerical tools in full-scale nuclear-plant safety assessments.

¹Corresponding author. E-mail address: johansarache@gmail.com (J. Sarache).

Nomenclature

Table A.1. List of symbols

A	Cross-sectional area of the pipe
C_μ, C_1, C_2, C_3	Constants of the $k - \epsilon$ RNG model
D	Pipe diameter
g_i	Gravitational acceleration in the i -direction
h_g^*, h_f^*	Enthalpy of gas and liquid at the interface
$J_g^{*0.5}, J_f^{*0.5}$	Dimensionless superficial velocities
k	Turbulent kinetic energy
L	Laplace capillarity characteristic length
P	Pressure
P	Turbulent kinetic energy production
Q_{wg}, Q_{wf}	Wall heat transfer for gas and liquid
Q_{ig}, Q_{if}	Interfacial heat transfer between gas and liquid
S_{ij}	Strain rate tensor
U_i	Velocity component in the i -direction
U_{ri}	Relative velocity between phases ($U_{li} - U_{gi}$)
u_i	Velocity fluctuation in the i -direction
v_g, v_f	Velocities of gas and liquid phases
w	Characteristic length of the two-phase flow
x_i	Spatial coordinate in the i -direction
X_n	Mass fraction of the non-condensable gas
α	Phase indicator function in the VOF model
α_g, α_f	Volume fraction of gas and liquid phases
β	Scaling parameter for the characteristic length w
ϵ	Turbulent kinetic energy dissipation rate
η	Renormalization parameter in the $k - \epsilon$ RNG model
Γ	Phase change term
κ	Local curvature of the interface
μ	Dynamic viscosity
μ_t	Turbulent viscosity
ν_t	Turbulent kinematic viscosity
ρ	Fluid density
σ	Surface tension coefficient
σ_k	Diffusion coefficient for k
σ_ϵ	Diffusion coefficient for ϵ
p_d	Modified pressure ($p_d = p - \rho g_i x_i$)
f_{si}	Surface tension force
$\langle u_i u_j \rangle$	Reynolds stress tensor

Table A.2. List of acronyms used in this work.

Acronym	Description
CCFL	Countercurrent Flow Limitation
CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direct Numerical Simulation
ECCS	Emergency Core Cooling System
LOCA	Loss-of-Coolant Accident
NPP	Nuclear Power Plant
OpenFOAM	Open Field Operation and Manipulation
PWR	Pressurized Water Reactor
RANS	Reynolds-Averaged Navier–Stokes
RELAP5	Reactor Excursion and Leak Analysis Program 5
TF	Eulerian Two-Fluid Model
VOF	Volume of Fluid Model

C.1 Introduction

Nuclear power plants (NPPs) face a variety of potential accident scenarios, among which a loss-of-coolant accident (LOCA) is of particular concern. During a severe LOCA, rapid depressurization may drive high-velocity steam toward the break while emergency cooling water flows in the opposite direction. If the steam velocity becomes excessive, liquid is swept away from the core, leading to countercurrent flow limitation (CCFL) [71, 74, 75, 84, 89, 137, 138]. CCFL was a key contributor to the 1979 Three Mile Island accident, underscoring its relevance to NPP safety.

One of the earliest significant advances in understanding CCFL was made by [6, 7], who studied small-diameter vertical pipes and introduced the dimensionless superficial velocity parameter $J_{g,f}^{*0.5}$, defined in Eq. (C.1).

$$J_{g,f}^{*0.5} = \sqrt{v_{g,f} \sqrt{\frac{\rho_{g,f}}{gD(\rho_f - \rho_g)}}} \quad (\text{C.1})$$

In this expression, v represents the superficial velocity; subscripts g and f refer to the gas and liquid phases, respectively; g is the gravitational acceleration; D is the inner diameter of the pipe; and ρ denotes the fluid density. Wallis observed a linear relationship between $J_g^{*0.5}$ and $J_f^{*0.5}$, expressed as $J_g^{*0.5} + m J_f^{*0.5} = c$, which was validated using earlier experimental data [8, 9]. However, these tests were conducted on pipes with diameters ranging from 13 mm to 18 mm, and thus extrapolating the results to substantially different geometries should be approached with caution.

Subsequent studies expanded the diameter range (6.4–152 mm), demonstrating that the gas–liquid critical flow rate strongly depends on D^* for $D^* < 15$, and becomes asymptotic for $D^* > 55$ [139], where $D^* = D / \sqrt{\frac{\sigma}{(\rho_f - \rho_g)g}}$. These results indicate that $J_{g,f}^{*0.5}$ captures diameter effects only partially and within a restricted range. For complex geometries such as elbows, inclined sections, or vertical–horizontal transitions, recent studies suggest using correlations that incorporate D and pipe length L explicitly.

Beyond geometrical scaling, CCFL is now described as a progressive process comprising: (i) the onset of flooding (instability at the liquid–vapor interface), (ii) the partial-delivery (PD) regime in which some liquid still penetrates downward, and (iii) the zero-liquid-penetration (ZP) limit where downward liquid flow becomes negligible [10, 11]. As expected, if gas flow is subsequently reduced, deflooding restores liquid penetration.

CCFL has been extensively studied due to the influence of interfacial drag and geometry, including pipe diameter, horizontal and inclined lengths, inclination angles, and bends. These effects have been examined with scaled hot-leg models under isothermal air–water conditions [11] and in realistic circuits with vertical–horizontal transitions, elbow radius, length, and inlet geometry [68, 69]. In PWR hot-legs (air–water and steam–water), Wallis-type correlations have been validated and geometry-dependent empirical functions for c developed, including cases with and without a hutze—a small internal nozzle designed to direct injection water toward the reactor core—[70, 71]. Flow regimes have been characterized using liquid volume fraction [72] and the Wallis parameter [73, 74], and a correlation for CCFL onset in terms of $J_g^{*0.5}$ and $J_f^{*0.5}$ has been proposed [75], confirming interfacial wave growth as the main flooding mechanism [76]. Scalability studies identified three CCFL locations in a 1/10-scale PWR surge line, with elbows increasing restrictions [77]. However, predictive curves remain inconsistent: some show linearity with L/D and dependence on L [10], while others report low sensitivity to θ and no confirmed nonlinearity at high L/D [78].

Al Issa y Macian [5], Zhu et al. [11] compiled an extensive database of CCFL experiments, analyzing the effects of pipe diameter, channel length, and the L/D ratio, and summarized Wallis-type empirical correlations for various configurations. A key contribution was the classification of the data into four groups according to L/D : 0–5 (Group 1), 5–10 (Group 2), 10–25 (Group 3), and > 40 (Group 4),

identifying L/D as the most consistently influential parameter. For low L/D values, much of the data corresponds to regimes following the CCFL onset (e.g., *partial delivery/deflooding*) and is well described by Wallis-type linear correlations. In contrast, for high L/D values, it has been reported in the literature that some data labeled as “CCFL” actually correspond to post-onset stages [5, 11]. Therefore, Wallis-type correlations should be understood in the context of CCFL characteristics, while the analysis of flooding onset requires a separate discussion.

Figure C.1 illustrates the characteristic behaviors for each group in the $J_f^{*0.5}-J_g^{*0.5}$ diagram (without aiming to isolate the L/D effect): **Group 1** (horizontal pipe, $L/D = 5$) is associated with *partial delivery/deflooding*, whereas **Groups 2–4** correspond to the *flooding onset* in inclined geometries ($L/D = 9.55, 11.6$, and 42.4) [2–5]. To cover a broader range of superficial velocities, Al Issa y Macian-Juan [12], Al Issa [13] reported CCFL *onset* over extended $J_f^{*0.5}$ intervals and proposed a new Wallis-type correlation for *deflooding* applicable to various L/D values, achieving relative errors below 20% for most datasets. Nevertheless, accurately predicting CCFL *onset* and *deflooding* remains challenging at intermediate-to-high liquid velocities.

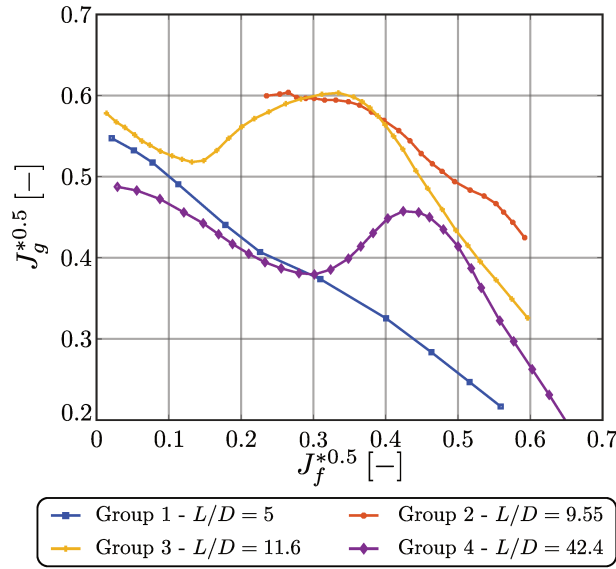


Figure C.1: Illustrative diagram of $J_f^{*0.5}$ vs. $J_g^{*0.5}$. Group 1 corresponds to partial delivery or deflooding conditions in a horizontal pipe ($L/D = 5$), while Groups 2 to 4 represent flooding onset in inclined geometries with $L/D = 9.55, 11.6$, and 42.4 , respectively [2–5].

The CCFL phenomenon was first incorporated into RELAP5 by Riemke [80], calibrated using experimental data from a vertical tube [81]. This initial model was applicable to vertical and inclined pipes up to 45 degrees and was later extended to horizontal pipes by Kim y No [78], who compiled 356 experiments and obtained comparable results. Since then, CCFL models have been successfully applied to various facilities: Cho et al. [82] modeled the Korea Atomic Energy Research Institute facility (vertical tubes and rod-bundle assemblies), while Li et al. [83, 84] reproduced a horizontal hot-leg and analyzed the downcomer of an upper plenum test facility. However, in system codes, the CCFL onset curve is user-defined through a linear relationship between $J_f^{*0.5}$ and $J_g^{*0.5}$. Due to their one-dimensional nature, most interfacial processes are imposed as constraints: for CCFL, one of the momentum equations describing phase interaction is replaced by the linear $J_f^{*0.5}-J_g^{*0.5}$ relationship, and if the flow exceeds this limit at any point, the code recalculates the flow state using this condition.

Detailed 3D simulations have been employed to reproduce experiments and predict the onset of CCFL, primarily using the two-fluid (TF) method [21, 43]. For example, Höhne y Vallée [43] validated the TF model against channel-flow data and applied it to a scaled hot-leg facility [44]; Kinoshita

et al. [85] examined the relationship between CCFL and the Wallis parameters; and Al Issa [13] compared TF-based simulations with experimental measurements. The TF approach enables tuning of interfacial forces (e.g., drag dominant in segregated flow) via the interfacial-area submodel, but it faces challenges with turbulence transition near the interface—often mitigated through damping functions in the turbulence closures [45, 86]—and therefore requires careful calibration. The review by Zhu et al. [11] synthesizes experimental and numerical work in hot-leg geometries (horizontal pipe, elbow, and inclined section), updates empirical correlations for system and CFD codes, and highlights limitations of standard VOF approaches, recommending two-phase models with regime-dependent interfacial friction. The VOF method [22], applied to CCFL prediction in prototypical hot-leg configurations and to LOCA transients using VOF- k - ω coupling [87, 88], explicitly tracks the gas-liquid interface but typically requires fine meshes. Recent advances in variable-density RANS formulations (ρ -var) have improved interfacial-friction modeling in segregated flows using RNG k - ϵ and k - ω models [66]; at comparable mesh resolution, VOF-RANS has shown a better accuracy-cost balance than TF [16]. Overall, VOF offers advantages over interpenetrating models: explicit interface capturing without volumetric averaging, better identification of local phenomena (e.g., bubble entrainment or liquid accumulation), higher fidelity in stratified-intermittent transitions, and reduced reliance on empirical assumptions [16, 22, 66, 87, 88].

Despite the extensive experimental and numerical efforts devoted to the study of CCFL, three key technical challenges remain that hinder its reliable modeling in *hot-leg* configurations of pressurized water reactors (PWRs): (i) the presence of *significant discrepancies* between Wallis-type correlations and the actual onset of complete liquid blockage under high $J_f^{*0.5}$ conditions; (ii) the *lack of direct comparative studies* simultaneously validating one-dimensional system codes and three-dimensional CFD models against the same experimental dataset; and (iii) the *strong sensitivity* of CFD results to mesh resolution and turbulence modeling near the gas-liquid interface, which limits their adoption in engineering practice.

In this context, the main objective of the present study is to **assess the predictive capabilities** of two complementary numerical approaches for simulating the CCFL phenomenon in a reduced-scale experimental *hot-leg* configuration: (i) a three-dimensional VOF-RANS model with variable-density (ρ -var) formulation implemented in OPENFOAM-v2206, and (ii) the system code RELAP5Mod3 using a Wallis-type deflooding correlation.

The main contributions of this work are summarized as follows:

- **First systematic comparison** between VOF-RANS ρ -var and RELAP5 using the *Collider* experimental database, which covers four representative CCFL regimes defined by the dimensionless parameter $J_f^{*0.5}$.
- **Quantitative analysis** of the influence of the ρ -var formulation and mesh resolution on pressure drop, interfacial dynamics, and prediction of complete liquid blockage.
- **Cross-validation and practical recommendations** on the applicability of both approaches in nuclear safety simulations, highlighting the accuracy of the CFD model and the computational efficiency of the system code.

Taken together, these results provide practical guidelines for selecting, calibrating, and applying robust numerical models to predict CCFL behavior in full-scale nuclear power plant scenarios.

The paper is organized as follows: Section C.2 introduces the VOF formulation, covering the mass and momentum conservation equations, interface tracking, and the turbulence model—emphasizing the ρ -var formulation. The TF methodology as implemented in RELAP5 is then described, along with a brief overview of the CCFL submodel embedded in the momentum equations. Section C.3 details the simulation setup, including the geometrical model, domain discretization, and fluid properties. The test cases are introduced in Section C.3.4, and Section C.3.5 outlines the computational models. Finally, Section C.4 presents and discusses the findings, and Section C.5 provides concluding remarks.

C.2 Mathematical models

This section presents the mathematical models and equations used to model the segregated flow that characterises CCFL phenomena. Two approaches are considered: 3D-VOF simulation with OpenFOAM-v2206 and 0/1-dimensional two-fluid simulation with RELAP5Mod3. For the 3D-VOF case, the variable density formulation (ρ -var) is described. On the other hand, for the 1D case, the mathematical background implemented in RELAP5 is presented, highlighting the coupling of the continuity and momentum equations as well as the CCFL submodel available in RELAP.

The (ρ -var) is an extension of the RANS framework in which the local density is computed as a mixture property based on the volume fraction of each phase. This spatial density variation is explicitly incorporated into the turbulent transport equations, including those for turbulent kinetic energy k , dissipation ϵ , and specific dissipation rate ω , thereby improving the prediction of interfacial friction and pressure gradients in segregated two-phase flows, where density discontinuities play a critical role [16, 66]. As discussed in later sections, this formulation introduces additional terms in the transport equations that are directly proportional to the density gradient. In segregated flows, such terms become significant only in the vicinity of the gas–liquid interface, allowing for a more accurate representation of localized effects essential for simulating characteristic CCFL regimes.

C.2.1 3D VOF model in OpenFOAM

The VOF method is based on the continuity, momentum, and interface-tracking equations for segregated flows. The continuity and momentum equations can be written as:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{\partial \rho U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial \rho U_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p_d}{\partial x_i} - g_j x_j \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \langle u_i u_j \rangle \right] + \underbrace{\sigma \kappa \frac{\partial \alpha}{\partial x_i}}_{f_{si}} \quad (\text{C.3})$$

where U_i is the velocity component, x_i is the spatial coordinate, μ is the dynamic viscosity, ρ is the density, g_i is the gravitational acceleration, α is an indicator function, and p_d is a modified pressure ($p_d = p - \rho g_i x_i$). Fluid properties are defined for each single-phase region, except at the interface, where density and viscosity are computed as weighted averages of α , for example, $\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g$, and likewise for ν . In Eq. (C.3), u_i represents the velocity fluctuations, and $\langle u_i u_j \rangle$ is the Reynolds stress tensor arising from time-averaging of the advective term. In this work, the eddy–turbulence Boussinesq hypothesis is used to close this term, with the turbulent viscosity obtained from the turbulent kinetic energy k and its dissipation rate ϵ . The last term on the right side of Eq. (C.3) describes the surface tension force, which vanishes far from the interface and is calculated only at the interface from the surface tension coefficient σ and the local curvature κ :

$$\kappa = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_i} / \left| \frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right| \right) \quad (\text{C.4})$$

The classical algebraical method for tracking the interface is expressed by Eq. (C.5):

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha U_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial (\alpha U_{ri} (1 - \alpha))}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{C.5})$$

where $U_{ri} = U_{li} - U_{gi}$ is the relative velocity between the phases. This additional compression term, $\alpha U_{ri} (1 - \alpha)$, is included to reduce interface smearing.

C.2.2 ρ -var $k - \epsilon$ RNG turbulence modeling

A closure model is required to relate the Reynolds stress $\langle u_i u_j \rangle$ in Eq. (C.3) to the mean velocity. Here, the Boussinesq hypothesis is employed:

$$\langle u_i u_j \rangle - \frac{2}{3} k \delta_{ij} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{C.6})$$

where μ_t is the turbulent viscosity. In this work the turbulent viscosity is calculated from the turbulent kinetic energy k and the eddy dissipation rate ϵ through the $k - \epsilon$ RNG model:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (\text{C.7})$$

The quantities k and ϵ are determined from two transport equations that are generally expressed in their incompressible form and in terms of the turbulent kinematic viscosity ν_t , which can be defined as $\nu_t = \mu_t / \rho$. Under this approach, the density is removed from the final form of the equations. However, as demonstrated in previous studies [16, 66], the inclusion of the density in the differential operators through a variable-density formulation (ρ -var) plays a fundamental role in accurately predicting the turbulent kinetic energy near the interface. The transport equations under this variable-density formulation are written as follows:

$$\frac{\partial (\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i k) = \rho P + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} + \nu \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \rho k \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \rho \epsilon \quad (\text{C.8})$$

$$\frac{\partial (\rho \epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i \epsilon) = \frac{\rho P \epsilon}{k} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} + \nu \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] - \rho \left(\frac{2}{3} C_1 - C_3 \right) \epsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - C_2 \rho \frac{\epsilon^2}{k} - R \quad (\text{C.9})$$

As noted in Eq. (C.8) and Eq. (C.9) the density is included in the temporal, advective and diffusive terms. P is the turbulent kinetic energy production and is defined as:

$$P = 2\nu_t S_{ij} S_{ji} \quad \text{and} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{C.10})$$

As noted, the $k - \epsilon$ RNG model incorporates an additional term R in Eq. (C.9), which is not present in the standard $k - \epsilon$ formulation. This term depends on the renormalization parameter η , and can be expressed as:

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta / \eta_0)}{1 + \beta \eta^3} \frac{\epsilon^2}{k}, \quad \eta = \frac{S k}{\epsilon}, \quad S = (2S_{ij} S_{ji})^{1/2} \quad (\text{C.11})$$

where S is the effective strain rate. The model constants used in this study are presented below:

$$\begin{array}{llll} C_\mu = 0.0845 & C_1 = 1.42 & C_2 = 1.68 & C_3 = -0.33 \\ \sigma_k = 0.71942 & \sigma_\epsilon = 0.71942 & \eta_0 = 4.38 & \beta = 0.012 \end{array}$$

In this work, the values of the model constants were not specifically calibrated against the *COLLIDER* experimental database, thus preserving the predictive and generalizable nature of the approach. Nevertheless, the mean error in the predicted *deflooding* flow rate across different simulations remained below 12 % without any parameter adjustment, supporting the portability of the numerical model across varying L/D ratios and transitions from stratified to wavy flow regimes.

The ρ -var model introduces changes in the turbulent viscosity only near the interface, helping to mitigate the over-diffusion of turbulent kinetic energy in this region, similar to the damping models introduced in the TF models. The in-depth analysis of the effect of ρ -var on the turbulence near the interface, and in particular for countercurrent flow, has been largely discussed in previous works [16, 66].

C.2.3 1D two-fluid model in RELAP5Mod3

This section presents the one-dimensional (1D) two-fluid model equations used along with a summary of the CCFL model in RELAP5 [92]. The continuity equations for gas and liquid read as:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g \rho_g v_g A) &= \Gamma_g \\ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f \rho_f v_f A) &= \Gamma_f\end{aligned}\quad (\text{C.12})$$

where the subscripts g and f denote the gas and liquid phases, respectively. v is the velocity, A is the cross-sectional area of the pipe, and Γ represents the phase change term. The momentum balance equations are written as:

$$\begin{aligned}\alpha_g \rho_g A \frac{\partial v_g}{\partial t} + \frac{1}{2} \alpha_g \rho_g A \frac{\partial v_g^2}{\partial x} &= -\alpha_g A \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha_g \rho_g B_x A - (\alpha_g \rho_g A) \text{FWG}(v_g) + \Gamma_g A (v_{gI} - v_g) \\ &\quad - (\alpha_g \rho_g A) \text{FIG}(v_g - v_f) - C \alpha_g \alpha_f \rho_m A \left[\frac{\partial (v_g - v_f)}{\partial t} + v_f \frac{\partial v_g}{\partial x} - v_g \frac{\partial v_f}{\partial x} \right]\end{aligned}\quad (\text{C.13})$$

$$\begin{aligned}\alpha_f \rho_f A \frac{\partial v_f}{\partial t} + \frac{1}{2} \alpha_f \rho_f A \frac{\partial v_f^2}{\partial x} &= -\alpha_f A \frac{\partial P}{\partial x} + \alpha_f \rho_f B_x A - (\alpha_f \rho_f A) \text{FWF}(v_f) - \Gamma_g A (v_{fI} - v_f) \\ &\quad - (\alpha_f \rho_f A) \text{FIF}(v_f - v_g) - C \alpha_f \alpha_g \rho_m A \left[\frac{\partial (v_f - v_g)}{\partial t} + v_g \frac{\partial v_f}{\partial x} - v_f \frac{\partial v_g}{\partial x} \right]\end{aligned}\quad (\text{C.14})$$

In equations (C.13) and (C.14), FWG and FWF represent the wall frictions and B_x includes external forces such as gravity or pumps. The last term on the right hand side of the equations (C.13) and (C.14) represent forces due to virtual masses. Finally, the terms including FIG and FIF represent the interfacial forces estimated from the Rod Bundle Interphase Friction Model [114], which improves the estimation of void fraction in complex geometries and flows associated with CCFL.

The energy balance equations read as:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g U_g) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g \rho_g U_g v_g A) &= -P \frac{\partial \alpha_g}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g v_g A) \\ &\quad + Q_{wg} + Q_{ig} + \Gamma_{ig} h_g^* + \Gamma_w h'_g + \text{DISS}_g\end{aligned}\quad (\text{C.15})$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f U_f) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f \rho_f U_f v_f A) &= -P \frac{\partial \alpha_f}{\partial t} - \frac{P}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_f v_f A) \\ &\quad + Q_{wf} + Q_{if} + \Gamma_{if} h_f^* + \Gamma_w h'_f + \text{DISS}_f\end{aligned}\quad (\text{C.16})$$

In these equations, U represents the internal energy. The terms Q_{wg} and Q_{wf} denote the wall heat transfer for each phase, while Q_{ig} and Q_{if} correspond to the interfacial heat transfer. The quantities h_g^* and h_f^* are the bulk (or reference) enthalpies of each phase, defined to satisfy the energy transition conditions at the liquid-vapor interface. In contrast, h'_g and h'_f represent the enthalpies associated with the thermal boundary layer. Therefore, the terms $\Gamma_{ig} h_g^*$ and $\Gamma_{if} h_f^*$ represent the heat transfer due to phase change at the interface. Similarly, the terms $\Gamma_w h'_g$ and $\Gamma_w h'_f$ account for the heat transfer due to phase change occurring at the wall. Finally, the terms DISS_g and DISS_f refer to the dissipated energy, including the effects of wall friction and pumping.

In RELAP the air must be modelled as a non-condensable component in a vapour mixture. The non-condensable gases are then assumed to move at the same velocity as the vapour. The properties are modelled as a mixture and described by the quality X , which is defined as the mass fraction of the non-condensable phase in the total gas phase. The transport equation is written as:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g X_n) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (\alpha_g \rho_g X_n v_g A) = 0 \quad (\text{C.17})$$

As noted above, for an air-water system such as the one modelled in this work, the Eq. (C.17) becomes equal to Eq. (C.12).

Due to the geometric simplifications inherent in one-dimensional models, physical phenomena such as drag, viscous stresses, and CCFL are incorporated through empirical correlations. In RELAP5, CCFL is represented using a flooding constraint, typically formulated as a linear boundary in the dimensionless superficial velocity space, as illustrated in Figure C.1. The onset of flooding is defined by the linear expression originally proposed by [6]:

$$J_g^{*0.5} + mJ_f^{*0.5} = c \quad (\text{C.18})$$

where m is the slope and c is the intercept on the gas velocity axis. For the simulations conducted in this work, the values $m = 0.69$ and $c = 0.60$ were employed, following the deflooding correlation reported by [12], which is based on the same experimental facility investigated in this study. The dimensionless velocities $J_g^{*0.5}$ and $J_f^{*0.5}$ are defined according to Eq. (C.1).

C.3 METHODOLOGY

This section provides a brief description of the procedures adopted to represent the geometry, domain discretisation and fluid properties considered in OpenFOAM and RELAP5 for the simulation of the COLLIDER (Countercurrent fLow LImitation in a large DiametER) [12, 13]. Tests were performed with water and air at room conditions for a range of $(0.1 < J_f^{*0.5} < 0.4)$ and $(0.36 < J_g^{*0.5} < 0.7)$ to capture all flow regimes. The density, viscosity and surface tension of fluids are given in the Table C.3.

C.3.1 Geometric 3D model

The geometric model is shown in Figure C.2. The system consists of two large plenums connected by a pipe, representing a 1/3.9 scale model of a full-scale nuclear reactor. The left plenum represents the reactor pressure vessel (RPV), the pipe corresponds to the reactor's hot leg (HL) channel, and the right plenum represents a steam generator (SG). The horizontal section of the hot leg has a diameter of 190 mm and a length of 1799.76 mm, while the inclined section also has a diameter of 190 mm, an inclination angle of 50 degrees, and a length of 356 mm. Due to the complexity of the flow, the full domain was considered without any symmetry simplifications. In addition, a vertical partition similar to that used in the experiment was included in the SG to separate the water inlet (Side A) from the reservoir (Side B), where the water returning to the SG accumulates during the CCFL event. Figure C.2 also indicates the locations where the pressure drop Δp was measured in both the experiment and the 3D-CFD and RELAP5 simulations, as well as the position of *Display 1*, where the liquid inlet flow rate to the RPV was recorded in both numerical models.

C.3.2 3D mesh description

Four computational meshes were developed to evaluate the sensitivity of CCFL predictions to the cell size in the *hot-leg* region.

The main characteristics of these meshes are summarized in Table C.4. Figure C.3 shows a three-dimensional and a front view of mesh M1, which was the most frequently used in the simulations, along with a cross-sectional view of the pipe that illustrates the average cell thicknesses in the critical CCFL zones for meshes M1, M2, and M3. This comparison highlights the mesh configurations with average cell sizes of 10 mm (M1), 5 mm (M2), and 2.5 mm (M3). Mesh M0, which is not shown in the figure, has an average cell size of 15 mm and was included to extend the mesh convergence analysis.

Additionally, local refinement was applied near the walls, as well as at the pipe inlet and outlet, in order to accurately capture boundary layer effects and the flow structures that develop in these regions.

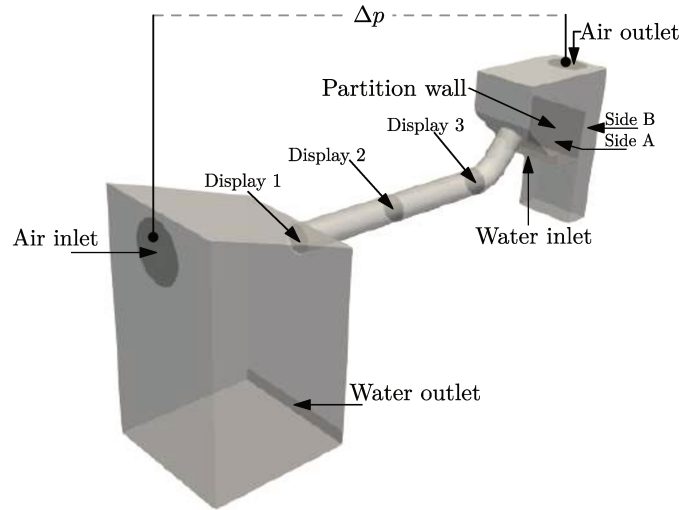


Figure C.2: Geometric model 3D-CFD.

Properties	Water	Air
ν (m ² /s)	1×10^{-6}	1.48×10^{-5}
ρ (kg/m ³)	998	1.2
σ (N/m)	0.074	-

Table C.3: Fluid properties.

C.3.3 RELAP5Mod3 model nodalization

The nodalisation used in RELAP5Mod3 is shown in Figure C.4. The RPV was represented by pipes 2 and 6, while pipe 1 represented the hot leg. The SG was nodalised using a combination of branches and pipes. Branches 14 and 24 represented side A of the SG and branch 20 and pipe 19 represented side B.

The discretization of the geometry was defined based on a preliminary analysis involving a detailed sensitivity study with respect to both the mesh resolution and the configuration of Pipe and Branch components. In addition, it draws upon previous CCFL studies conducted with RELAP5, such as those reported by [78, 140].

The air and water inlet mass flows were imposed via time-dependent junctions 9 and 16. An additional junction (number 3) was included to remove the accumulated water in the RPV to avoid flooding of the pipe during long term simulations. Finally, the model was completed with a pressure boundary condition at the air outlet using time-dependent volume number 15.

The implemented RELAP model proved to be robust, even under conditions of complete fluid occlusion. The nodalisation followed the recommended criteria, with a length-to-diameter ratio of the control volumes below 0.5 [119]. The pressure loss coefficients (k) associated with the bend, as well as the inlet and outlet of Pipe 1 and other system components, are summarised in Table C.5. The CCFL model was activated exclusively in Pipe 1, and its detailed description is provided in a subsequent section.

Mesh	Number of cells	Skewness maximum	Max Aspect ratio	Non-orthogonality average	Non-orthogonality maximum	Average Cell Size (mm)
M0	197549	0.784	11.276	16.311	62.475	15
M1	507888	0.937	14.841	11.411	64.155	10
M2	1897477	0.927	12.912	8.868	61.691	5
M3	6570426	1.003	15.177	6.142	75.6783	2.5

Table C.4: Mesh parameters counter-current test.

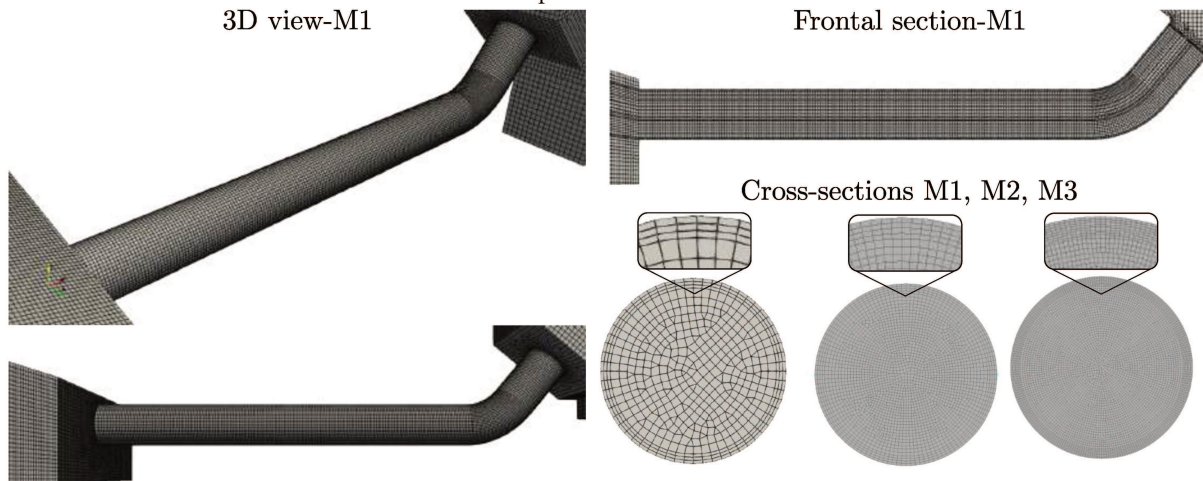


Figure C.3: Three-dimensional and front views of mesh M1 (most used in the simulations), along with a cross-sectional view of the pipe showing the variation in mesh refinement in the critical CCFL region for meshes M1 (10 mm), M2 (5 mm), and M3 (2.5 mm).

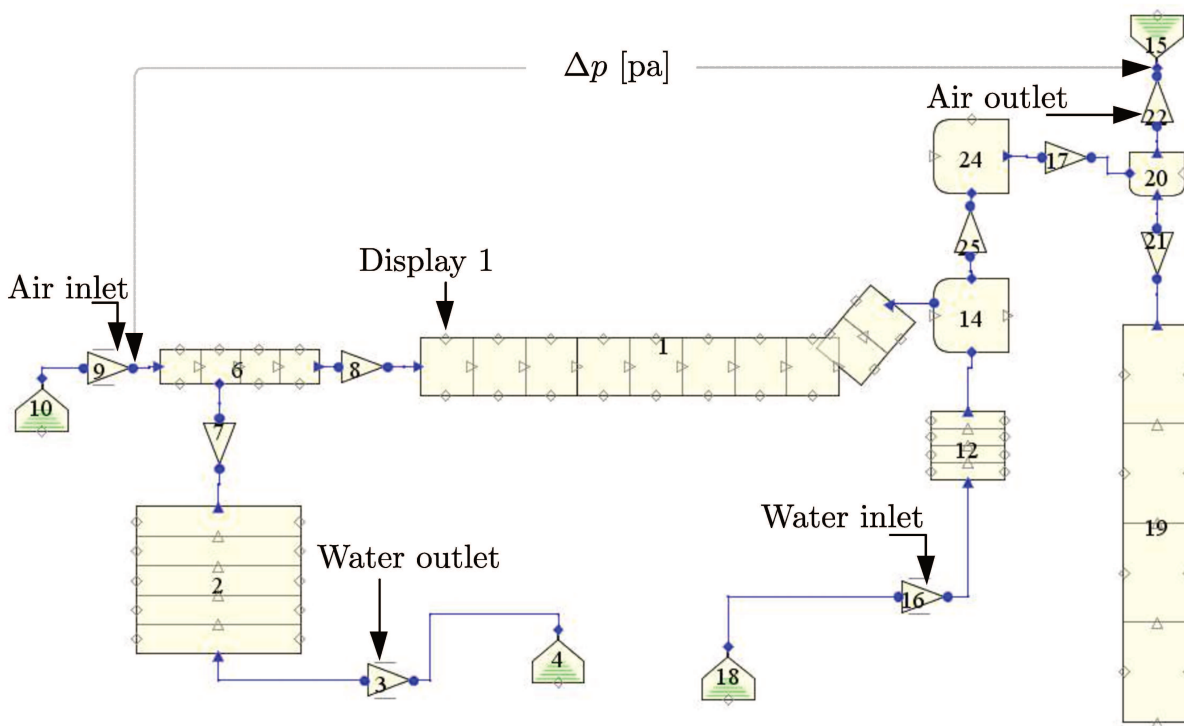


Figure C.4: Nodalization in RELAP5Mod3.

Element	Number	Forward Loss	Reverse Loss
BRANCH	14	1	1
PIPE	1	0.25	0.25
SNGLJUN	8	0.5	1
SNGLJUN	17	0.5	0.5
SNGLJUN	22	1	1

Table C.5: Pressure loss coefficients k .

C.3.4 Case Studies

The experimental procedure carried out by [12, 13] consisted of three steps: first, circulate a fixed water flow rate as long as a low air flow rate until steady state conditions are observed. Second, the air flow rate is gradually increased in steps of 30 seconds until the CCFL is reached. Thirdly, the air flow is gradually reduced until the initial steady-state conditions are reached.

Regions 1 to 4 considered in this study were defined according to the classification proposed by [13] for the COLLIDER experiment, which is reproduced in the present work. This classification is based on the value of the dimensionless superficial liquid velocity parameter ($J_f^{*0.5}$), which strongly influences the mechanism that triggers the onset of CCFL. Each region corresponds to a specific two-phase flow behavior observed experimentally as a function of $J_f^{*0.5}$, as summarized below:

- **Region 1** ($0.085 < J_f^{*0.5} < 0.125$): Gradual onset of CCFL, with liquid accumulation near the bend.
- **Region 2** ($0.135 < J_f^{*0.5} < 0.175$): Sudden onset of CCFL at the bend region.
- **Region 3** ($0.185 < J_f^{*0.5} < 0.265$): Dual mode. A mild CCFL onset occurs at the inlet due to active droplet entrainment, followed by a stronger blockage at the bend.
- **Region 4** ($0.275 < J_f^{*0.5} < 0.305$): CCFL begins with oscillatory behavior at the inlet and evolves into a sudden and severe blockage at the bend.

This regional division enables the analysis of CCFL under different liquid flow conditions, facilitating comparison between numerical simulations and experimental results.

Simulated Cases: Five cases were conducted using 3D-CFD and RELAP5: two corresponding to Region 1 and one for each of Regions 2, 3, and 4. In Region 1, the water parameter was set to $J_f^{*0.5} = 0.105$, with two different increments applied to the air injection. For Regions 2, 3, and 4, $J_f^{*0.5}$ values of 0.155, 0.225, and 0.285 were used, respectively. The overall configuration of these cases is summarized in Table C.6.

In Region 1, two air injection scenarios were defined, referred to as *Test 1* and *Test 2*. *Test 1* followed the ramp employed in the experiments described in [12, 13], implemented in both CFD and RELAP5, with 30 s increments up to the onset of CCFL, followed by a descending ramp with the same time steps to reestablish a stable countercurrent flow. However, due to the high computational cost of 3D simulations, the 30 s step size was reduced to 10 s in the CFD analysis, and only the ascending part of the ramp was simulated.

Test 2 consisted of 10 s increments until the liquid flow was completely blocked; in this case, both 3D-CFD and RELAP5 used identical increments to allow a direct comparison. Finally, the simulations for Regions 2, 3, and 4 followed the *Test 2* methodology, i.e., 10 s increments until total liquid flow blockage was achieved.

Case	Region	$J_f^{*0.5}$	$\Delta t_{\text{air ramp}}$ [s]	Codes	Ramp description
Test 1-R1	1	0.105	30 (CFD: 10) ¹	CFD, RELAP5	Full experimental ramp ²
Test 2-R1	1	0.105	10	CFD, RELAP5	Ascending ramp until liquid blockage
Test 2-R2	2	0.155	10	CFD, RELAP5	Ascending ramp until liquid blockage
Test 2-R3	3	0.225	10	CFD, RELAP5	Ascending ramp until liquid blockage
Test 2-R4	4	0.285	10	CFD, RELAP5	Ascending ramp until liquid blockage

Table C.6: Computation conditions for the five simulated cases.

¹ Only the ascending branch was simulated in CFD due to computational cost; RELAP5 includes both the ascending and descending branches.

² The ramp follows the procedure in Al Issa's experiment [12, 13]: air flow is stepped every 30 s (10 s in CFD) up to CCFL onset, then—only in RELAP5—stepped back down.

A summary of the boundary conditions used in OpenFOAM is provided in Table C.7.

Variable	Inlet	Open	Wall
α	fixedValue	inletOutlet	zeroGradient
ϵ	fixedValue	fixedValue	epsilonWallFunction
κ	fixedValue	inletOutlet	kqRWallFunction
ν_t	calculated	calculated	nutkWallFunction
ν'_t	zeroGradient	inletOutlet	zeroGradient
p_{rgh}	fixedFluxPressure	fixedValue	fixedFluxPressure
U	flowRateInletVelocity (table)	pressureInletOutletVelocity	noSlip

Table C.7: Boundary Conditions in OpenFOAM model.

C.3.5 Computational Model

The 3D-VOF simulations were run on a cluster equipped with 2 x AMD EPYC 7401 processors based on the Zen1 (Naples) architecture with 8 memory channels per processor and Infiniband FDR-56 connectivity. The system was configured with either 64 GiB or 128 GiB of DDR4-2666 MT/s memory and utilised distributed parallel computing. The `interFoam` solver from OpenFOAM-v2206 was used to obtain the numerical solutions. To ensure accuracy, the algebraic VOF scheme used the high-resolution Van Leer scheme to discretise the advective terms in the momentum, turbulence and α equations.

Pressure–velocity coupling was resolved with the hybrid *PISO–SIMPLE* algorithm, commonly referred to as *PIMPLE* [141]. *PIMPLE* combines the transient accuracy of PISO with the robustness of SIMPLE, making it particularly suitable for strongly unsteady free-surface flows. In this work four outer correctors and three inner correctors were employed at every time step. The temporal terms in the momentum and turbulence equations were integrated with the implicit backward-Euler scheme under adaptive time stepping, maintaining the global Courant number below 0.2. During each global time increment Δt , the interface-capturing equation was advanced explicitly in $n_{\text{sc}} = 3$ sub-cycles of size $\Delta t_{\text{sc}} = \Delta t/n_{\text{sc}}$ using the MULES flux limiter. A strict residual tolerance of 10^{-7} was imposed on all solved variables.

C.4 RESULTS AND DISCUSSION

A mesh sensitivity analysis was initially performed with the aim of qualitatively comparing the fluid distribution and, quantitatively, selecting the mesh that best represented the phenomenon with the lowest computational cost. Figure C.5 presents the qualitative results of the mesh analysis, while Figure C.6 shows the quantitative results obtained with and without turbulence models, as well as with and without the ρ -var correction; these aspects will be discussed in detail later. In general, all meshes yielded similar global results, although the computational cost increased significantly when using meshes M2 and M3. This behavior is consistent with the characteristics of the adopted three-dimensional VOF approach, in which the ρ -var turbulence model accurately captures the gas–liquid interaction by adjusting the turbulent viscosity near the interface, thereby reducing turbulence overprediction and, consequently, the sensitivity to mesh resolution [16]. Therefore, mesh M1 was selected as it offers a suitable balance between accuracy and computational efficiency.

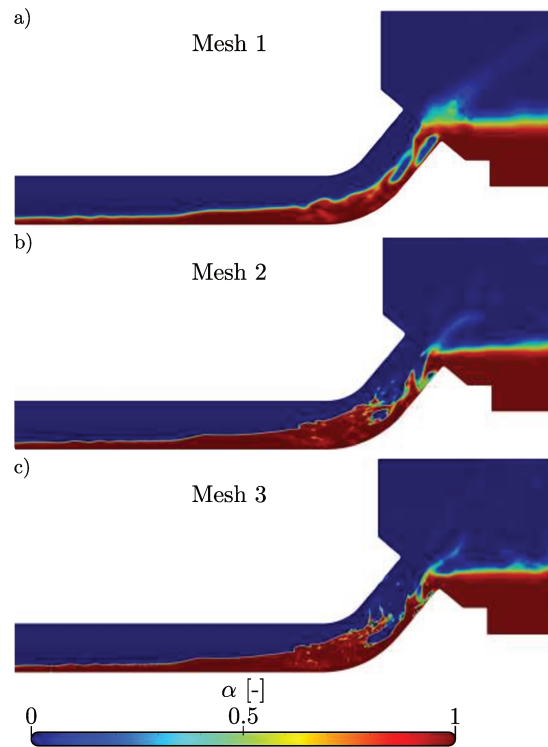


Figure C.5: Liquid distribution obtained with the three meshes for Test 1-R1.

C.4.1 Test 1. Air flow increase and reduction in region 1 (low water flow)

According to Al Issa's classification for this facility, Region 1 lies between $0.085 < J_f^{*0.5} < 0.125$. Two simulations were carried out for this region, incrementing the air parameter $J_g^{*0.5}$ from 0.3 to 0.6. The first simulation reproduced the complete Al Issa experiment at $J_f^{*0.5} = 0.105$, employing both RELAP5 and the 3D-CFD models. Figure C.6 shows the pressure drop predicted by these two numerical approaches (RELAP5 and 3D-CFD), along with the experimental data. The air velocity ramp is also plotted in the figures. Results are presented as functions of $J_g^{*0.5}$ (Figure C.6a) and time (Figure C.6b).

Figure C.6a and C.6b present the numerical mesh convergence study for the VOF-RANS model with ρ -var, considering meshes M0, M1, and M2. The results show good agreement as the mesh is refined, particularly between M1 and M2. Although mesh M2 provides a slight improvement in accuracy, the

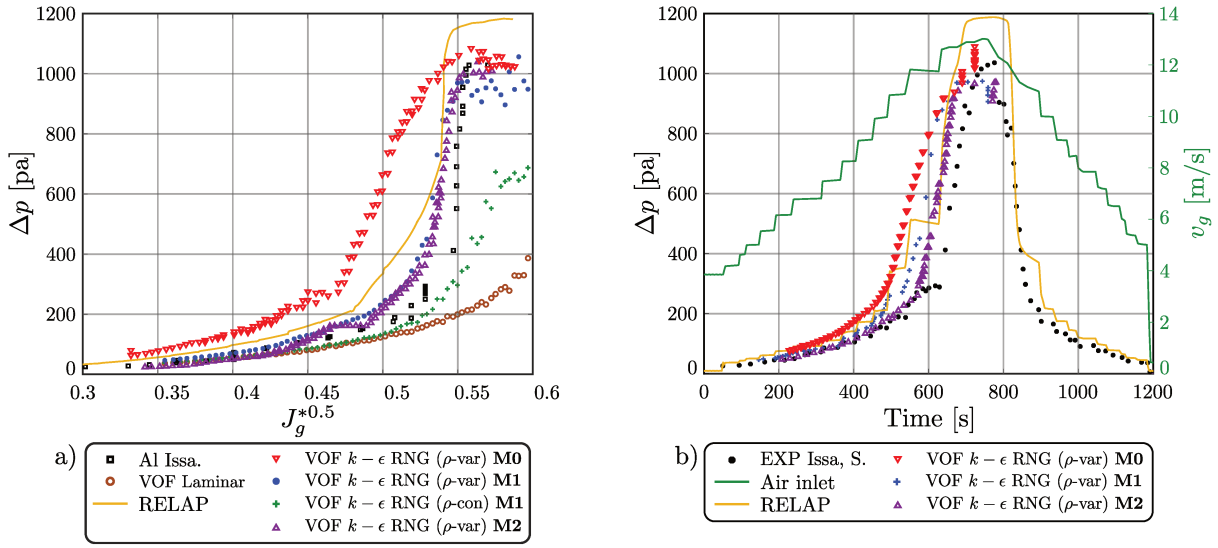


Figure C.6: Test 1. Pressure drop results for $J_g^{*0.5} = 0.105$

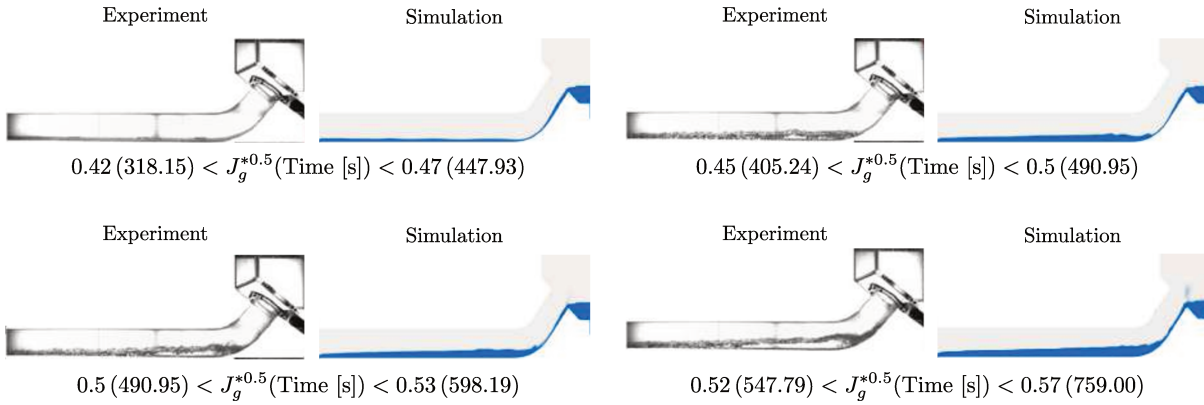


Figure C.7: Test 1. Comparison between experiments and 3D-VOF (ρ -var k - ϵ RNG) simulation at different $J_g^{*0.5}$ in region 1 for $J_f^{*0.5} = 0.105$

increase in computational cost compared to M1 is significant. Therefore, mesh M1 was selected for subsequent simulations in Test 2, as it offers an appropriate balance between accuracy and computational efficiency.

In contrast, a considerable difference is observed between the results obtained with the coarser mesh M0 and those from the finer meshes M1 and M2. For mesh M0, an early prediction of the CCFL onset is observed, along with an overestimation of the pressure drop. This indicates that the use of coarse meshes leads to a significant overprediction of turbulent kinetic energy.

An important observation concerns the different behavior of the ρ -var and ρ -con models with respect to mesh resolution. When using ρ -var with a coarse mesh, the turbulent kinetic energy tends to be overestimated, resulting in excessive pressure predictions. In contrast, the ρ -con model also leads to overpredicted turbulence but underestimates the pressure drop. This difference arises because the ρ -con model diffuses the turbulent kinetic energy throughout the domain, whereas the ρ -var model maintains the effect localized near the interface.

Therefore, it can be concluded that the ρ -con model tends to underestimate pressure, while coarse meshes combined with ρ -var lead to pressure overestimation. Consequently, performing a mesh sensi-

tivity analysis is essential before addressing segregated flow simulations, as is the consideration of using the ρ -var model to obtain more reliable predictions.

As illustrated in Figure C.6a, the pressure drop increases gradually from 0 to 200 Pa despite the air velocity rising from 4 to 11 m/s. This trend is well captured by the laminar 3D-VOF, ρ -var, ρ -con, and RELAP5 simulations. In particular, the simplest laminar model yields reasonable predictions when the system is far from the CCFL regime, with results very close to those of the ρ -con model for $J_g^{*0.5} < 0.52$. Past that point, however, the laminar model significantly underestimates the pressure drop, peaking at about 400 Pa—approximately 40% of the experimental measurement. The ρ -con model also underpredicts the pressure drop, reaching around 700 Pa. As discussed in [16], the turbulent kinetic energy is not sufficiently damped in low-velocity liquid zones, causing excessive diffusion of air turbulence into the liquid rather than confining it near the interface. This overly diffuse turbulence affects the calculation of turbulent viscosity and, consequently, the interfacial drag.

By contrast, the ρ -var model replicates the maximum pressure quite accurately, with an underestimation smaller than 100 Pa, while RELAP5 overshoots it by roughly 200 Pa. For both ρ -var and RELAP5, the pressure drop curves overlap slightly for $J_g^{*0.5} > 0.5$, suggesting an earlier numerical prediction of CCFL onset. In the 3D-VOF model, this might arise from residual overestimation of turbulent viscosity at the interface, creating stronger interfacial forces. In RELAP5, the discrepancy appears at $J_g^{*0.5} > 0.45$, which is still removed from the CCFL limit but is presumably caused by an overestimation of interfacial forces under countercurrent conditions [114]. From a safety perspective, these results can be considered conservative for both models: RELAP5 overestimates the maximum pressure by about 15%, whereas the 3D-VOF model underestimates it by roughly 5%. The abrupt pressure increase corresponds to a change in the segregation regime, which leads to greater drag and liquid accumulation near the elbow, partially blocking the flow (slugging). Consequently, the effective cross section for the air flow shrinks, raising air velocity and interfacial forces. In CFD simulations, trapped air can be suddenly released, generating noticeable pressure fluctuations.

Within RELAP5, the transition in flow regime triggers the flow restriction specified by Eq. (C.18). This restriction promotes liquid accumulation near the elbow, obstructing the airflow and causing a subsequent pressure build-up. The observed behavior aligns with the physical phenomena typical of CCFL, illustrating RELAP5's capability to reproduce the dynamic interactions in countercurrent flow. Additionally, RELAP5 predicts the correct pressure drop trend when the air injection rate decreases.

Figure C.6b shows the time evolution of the pressure, along with the actual air velocity ramp during both the increment and decrement phases. As noted, the 3D-CFD model did not simulate the descending steps, whereas RELAP5 included them with good agreement between the predicted and experimental pressure drops.

Figure C.7 compares experimental images and 3D-CFD snapshots at different values of $J_g^{*0.5}$ in Test 1. At lower air velocities ($0.42 < J_g^{*0.5} < 0.47$), the liquid film remains relatively thin, and the free surface is nearly uniform except in the elbow region. This corresponds to a pressure drop below 200 Pa. As $J_g^{*0.5}$ increases to about 0.5, noticeable changes occur in the liquid depth within the horizontal pipe due to droplet detachment, initiating a hydraulic jump on the left side of the pipe. This jump propagates toward the elbow, where liquid accumulates. In the range $0.52 < J_g^{*0.5} < 0.57$, the liquid depth around the elbow covers about one-third of the pipe height. Although the liquid continues to flow, the highest pressure drop is reached. The images and numerical snapshots imply that the sudden pressure surge is driven more by the local reduction in cross-sectional area near the elbow than by the interfacial drag alone.

C.4.2 Test 2 - Increase of the air flow around the CCFL for different water flow rates

Test 2 is similar but covers all four CCFL regions identified by Al Issa. Although the experimental methodology was mirrored, the air injection ramp was shorter in the simulations due to high computa-

tional cost, and the decay phase after liquid blockage was omitted.

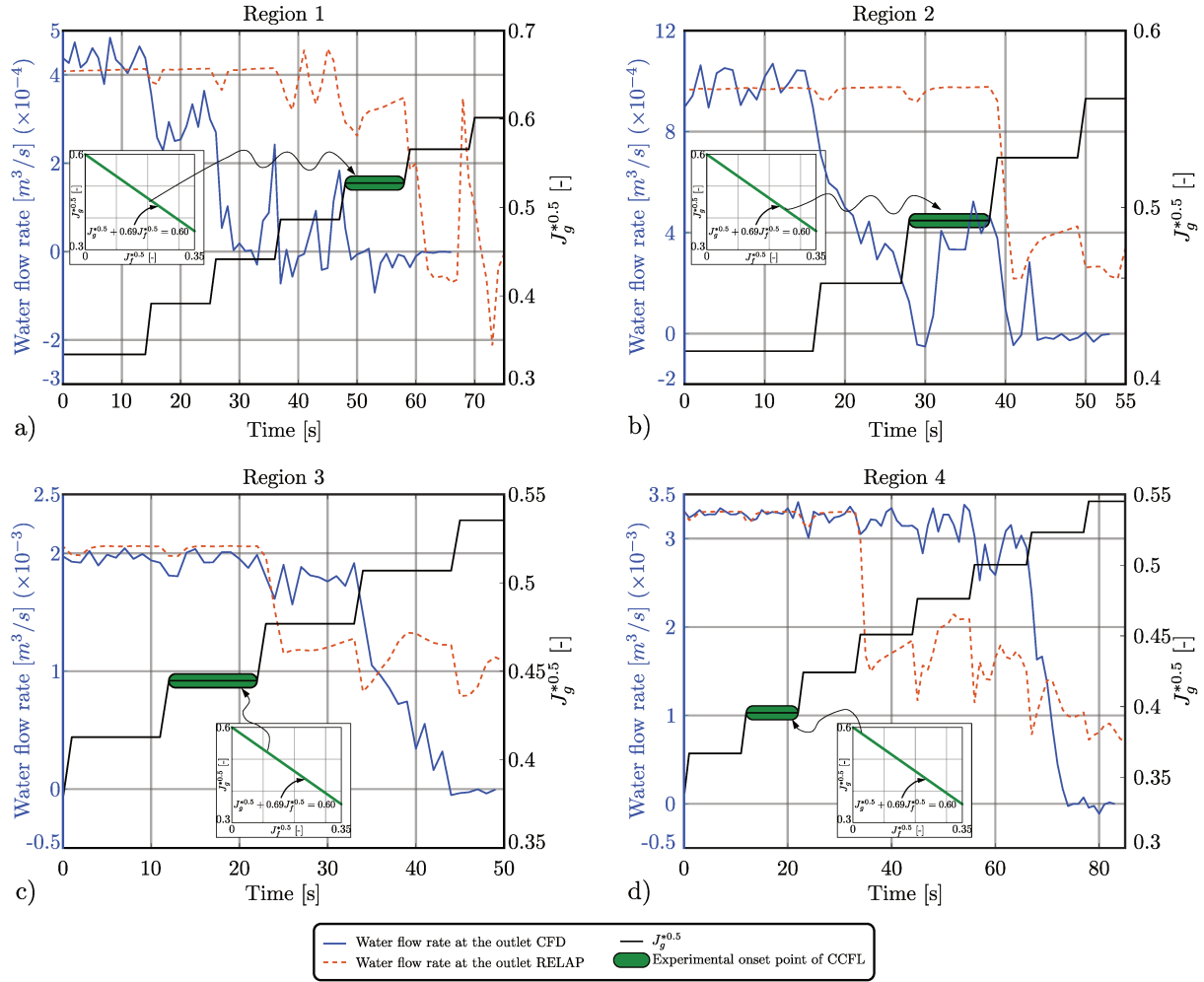


Figure C.8: Test 2. Liquid flow rate at the hot-leg outlet: numerical predictions from 3D-VOF and RELAP5. (a) Region 1: $J_f^{*0.5} = 0.105$, (b) Region 2: $J_f^{*0.5} = 0.155$, (c) Region 3: $J_f^{*0.5} = 0.225$, (d) Region 4: $J_f^{*0.5} = 0.285$.

Figures C.8 and C.9 present, respectively, the time evolution of the liquid outflow at the left end of the pipe and the pressure drop along the hot leg. In both figures, results obtained with the 3D-VOF model (solid blue line) are compared with predictions from RELAP5 (dashed orange line), plotted against the stepwise ramp of the superficial gas velocity $J_g^{*0.5}$ (black line). The four analyzed regions correspond to $J_f^{*0.5}$ values of 0.105, 0.155, 0.225, and 0.285, as defined in the experimental classification proposed by [13].

Each subfigure includes an auxiliary inset displaying the deflooding curve in the $J_g^{*0.5}$ – $J_f^{*0.5}$ plane, fitted from the experimental data reported in [12]. This straight line, corresponding to the Wallis criterion (Eq. (C.18)) with $c = 0.60$ and $m = 0.69$, delineates two distinct regimes: (i) below the line, countercurrent flow persists without limitations; and (ii) above the line, flow limitation is triggered (onset of CCFL). When the pair $(J_g^{*0.5}, J_f^{*0.5})$ lies below this boundary, countercurrent flow remains stable. Conversely, if it lies above, RELAP5 activates the CCFL onset condition: the linear correlation replaces one of the momentum equations, modeling flooding (CCFL onset). In the absence of hysteresis, the *flooding* and *deflooding* thresholds coincide.

In the present study, for a constant liquid flow rate, the green rectangle marks the value of $J_g^{*0.5}$ at the point where the simulated ramp intersects the Wallis line; that is, the instant when the threshold defined

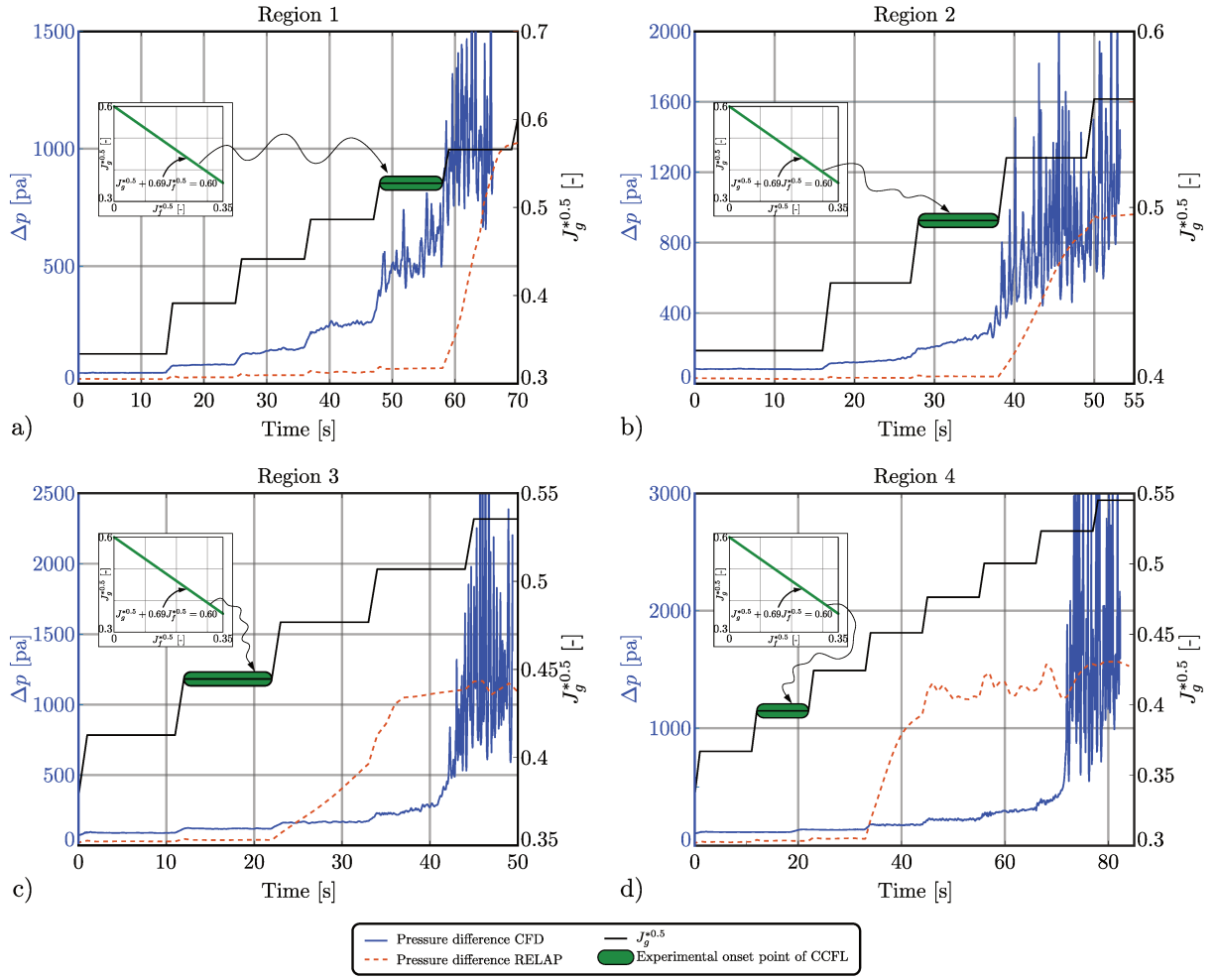


Figure C.9: Test 2. Pressure drop along the hot-leg: numerical predictions from 3D-VOF and RELAP5. (a) Region 1: $J_f^{*0.5} = 0.105$, (b) Region 2: $J_f^{*0.5} = 0.155$, (c) Region 3: $J_f^{*0.5} = 0.225$, (d) Region 4: $J_f^{*0.5} = 0.285$.

by the correlation is reached. Thus:

- if $J_g^{*0.5}$ is below the rectangle, the point lies below the Wallis line;
- if it coincides with the rectangle, it lies exactly on the line;
- if it exceeds the rectangle, it lies above the line in the $J_g^{*0.5}-J_f^{*0.5}$ plane, activating in RELAP5 the constraint associated with the CCFL onset.

It is important to note that, physically, this line was obtained experimentally as the deflooding curve, whereas in RELAP5 it is used as the threshold for the onset of flooding. Therefore, their equivalence holds only under the assumption of no hysteresis. This visual resource enables accurate identification of the flooding onset in each region analyzed with RELAP5.

Based on these results, it is not possible to draw a definitive conclusion regarding the comparative accuracy of the two numerical methods, since in RELAP5 the limitation is imposed by the deflooding curve, which generally provides a good approximation for low liquid superficial velocities, as in Regions 1 and 2. In Region 1 (Figure C.8), the CFD model predicts liquid flow interruption before reaching the deflooding curve (green rectangle), defined by the linear correlation experimentally fitted by [12]; whereas RELAP5 exhibits an abrupt drop in liquid flow rate exactly at this threshold. A similar behavior

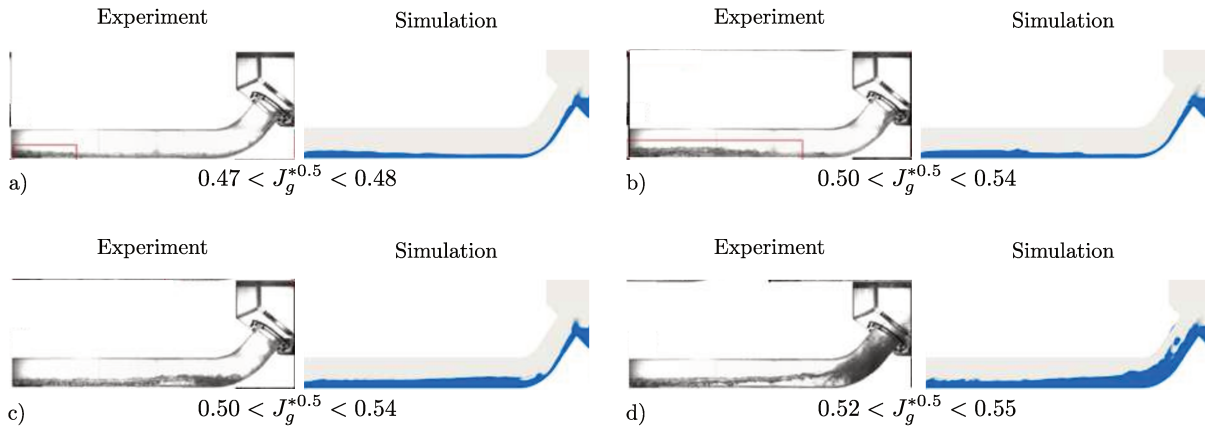


Figure C.10: Test 2. Comparison between experiments and 3D VOF simulation at different $J_G^{*0.5}$ in region 2.

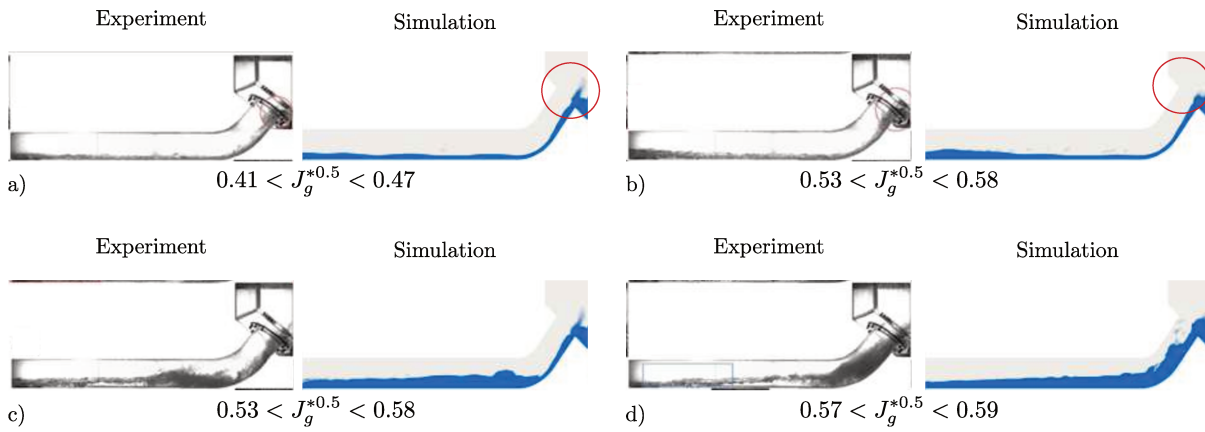


Figure C.11: Test 2. Comparison between experiments and 3D VOF simulation at different $J_G^{*0.5}$ in region 3.

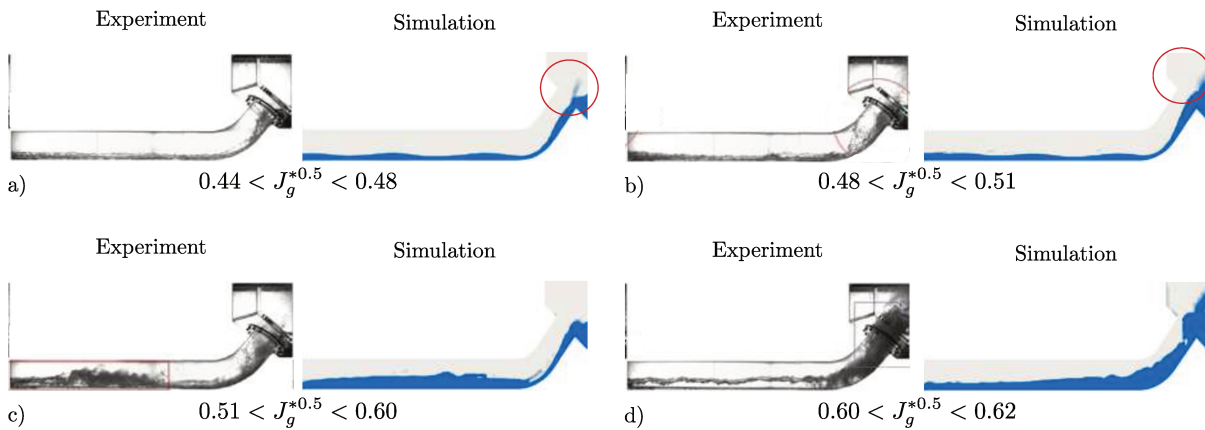


Figure C.12: Test 2. Comparison between experiments and 3D VOF simulation at different $J_G^{*0.5}$ in region 4.

is observed in Region 2, where the 3D-CFD simulation predicts flow cessation before the limit, while RELAP5 stops the flow precisely on the deflooding line.

In contrast, Regions 3 and 4 show a significant delay between the deflooding threshold (green rectangle) and the complete interruption of the liquid flow. This behavior is consistent with findings in the

literature, which indicate that higher liquid superficial velocities—as in Regions 3 and 4—lead to a notable divergence between the complete blockage curve and the deflooding curve, requiring higher air velocities to completely stop the liquid flow. This difference manifests as an increase in the hysteresis between the flooding and deflooding processes, a phenomenon experimentally observed in [12]. Furthermore, in RELAP5 the limitation given by the deflooding curve implicitly assumes zero hysteresis, while the CFD results are more realistic as they do not explicitly impose such a constraint. A fairer comparison in CFD could be achieved by simulating deflooding—that is, the reverse case where the air injection is reduced—; however, these results would not be directly comparable to those of RELAP5, which is one of the central objectives of this work. A comparison and discussion of flooding against experimental results will be presented later in Figure C.14. For this reason, closer agreement between both methods is observed in Regions 1 and 2, where hysteresis tends to be less significant.

Figure C.9 shows the pressure drop evolution for Test 2. In Regions 1 and 2, the pressure begins to rise earlier in the results obtained with the 3D-VOF model compared to RELAP5, although both methods reach similar peak pressure values. It is worth noting that the 3D-VOF model exhibits considerable fluctuations, absent in RELAP5, which appear immediately after the CCFL threshold is exceeded. According to the experimental data, these fluctuations are caused by liquid accumulation near the elbow, partially blocking the air flow. As a result, the pressure increase becomes more pronounced once this partial blockage develops. For higher $J_f^{*0.5}$ values (Regions 3 and 4), the amplitude of these fluctuations increases markedly in the 3D-VOF model.

Figures C.10, C.11, and C.12 offer a qualitative comparison between experimental visualizations and 3D-VOF solutions for Regions 2, 3, and 4, respectively (the Region 1 results were discussed earlier). Overall, there is good qualitative agreement. Figure C.10 presents snapshots for the range $0.47 < J_g^{*0.5} < 0.55$. In Figure C.10a, a slight thickening of the liquid film is observed on the left side of the hot leg, originating from droplet detachment induced by the airflow. The droplet detachment observed experimentally is not explicitly resolved by the 3D-CFD simulation; the solution captures the thickening of the liquid film but not the individual formation and transport of droplets. This limitation arises from the use of meshes consistent with a RANS framework and a VOF–RANS model with turbulent viscosity via ρ -var, which damps subgrid-scale interfacial instabilities and restricts the resolution of dispersed-phase structures. As a result, droplets are neither physically nor mathematically represented, and this simplification may introduce small deviations in local pressure drop and velocity profiles. As a potential avenue for future work, an additional momentum-exchange term (drag) associated with the dispersed phase could be incorporated into the momentum equation—similar to two-fluid approaches, e.g., [45]—to model droplet transport and its turbulent contribution. In the present work, this effect is omitted, and only interfacial turbulence in the segregated flow is analyzed; however, it is recognized that droplet-induced forces may not be negligible, as their motion often aligns with the main flow directions and may generate additional momentum exchange. The film thickening observed here acts as an indicator of the regime experienced by the CCFL and the onset of droplet entrainment. Subsequently, a turbulent recirculation region develops when $0.47 < J_g^{*0.5} < 0.48$. As this disturbed zone grows, it migrates toward the elbow (Figure C.10b). Eventually, the accumulation of rolling waves near the elbow leads to complete blockage (Figure C.10d), marking the onset of CCFL.

Figures C.11 and C.12 display more complex flow structures for Regions 3 and 4, associated with an early manifestation of CCFL known as *Active Droplet Entrainment* (ADE-CCFL) [12, 142]. In this regime, droplets detach at the elbow outlet and are carried toward the SG, thereby reducing liquid ingress into the hot leg. The mechanism is analogous to that previously discussed, but in these regions the active droplet entrainment becomes the dominant process governing momentum exchange and turbulence generation. The 3D-VOF model, operating under a VOF–RANS framework, does not explicitly resolve the dispersed phase; instead, it exhibits increased interfacial diffusion and “noise”, particularly near the elbow, which serves as a consistent indicator of ADE-CCFL. This enhanced interfacial roughness translates into pressure fluctuations and increased pressure drop, while also altering the local flow passage

geometry. Although the droplet–flow interaction is not explicitly represented, its onset can be inferred from the intensification of interfacial diffusion and its temporal coincidence with the experimental ADE-CCFL observations.

Liquid carryover from the elbow to the SG is particularly evident in Region 4; at higher $J_g^{*0.5}$ values, the air mixes vigorously with the water before discharging into the SG. Overall, Regions 3 and 4 display similar flow regimes, differing mainly in the amplitude and persistence of pressure oscillations and in the degree of mixing prior to discharge.

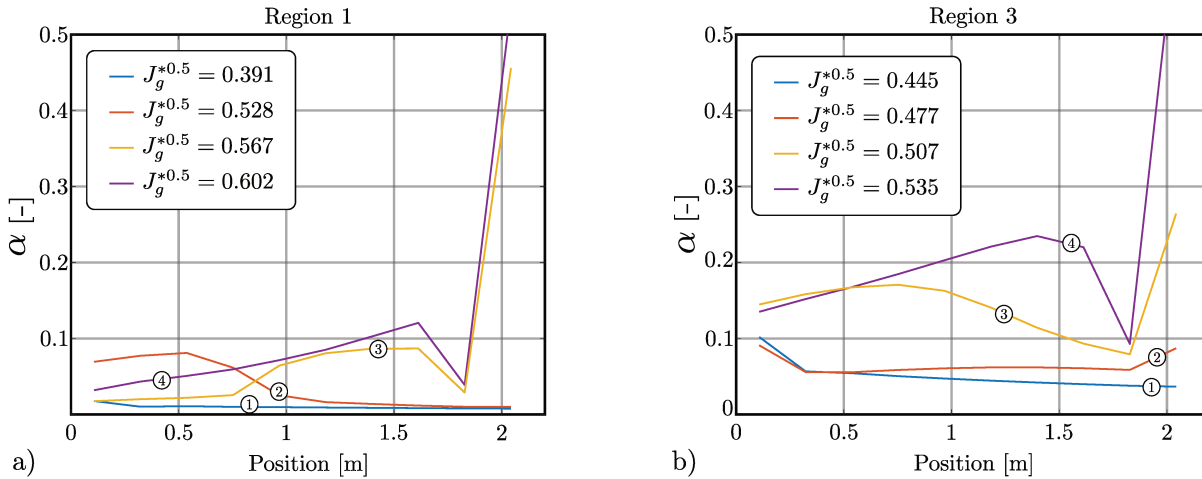


Figure C.13: Numerical Results from RELAP5: Liquid Fraction (α) distribution in the Hot-Leg for (a) Region 1 and (b) Region 3.

C.4.3 RELAP5Mod3 Results

Although representing a highly three-dimensional phenomenon in a 1D framework, RELAP5 provides information on the liquid profile along the hot-leg through the volumetric fraction α . Figures C.13a and b illustrate α during the air velocity increment for Region 1 and Region 3, respectively. In Region 1 (Figure C.13a), curve 1 shows a slight increase in film thickness at the hot-leg inlet. Curve 2 depicts the formation of a hydraulic jump propagating toward the elbow. By curve 3, that jump breaks near the elbow, creating waves moving toward the hot-leg outlet. Finally, these waves grow sufficiently to block the elbow (curve 4). This sequence matches well with experimental observations.

Region 3 (Figure C.13b) behaves similarly. Curve 1 indicates a thicker liquid film at the hot-leg inlet, and curve 2 shows accumulation on both the inlet and outlet sides. In curve 3, a hydraulic jump forms and advances to the elbow, culminating in CCFL in curve 4. The ability of RELAP5 to predict blockage near the elbow, along with hydraulic jumps and liquid entrapment, demonstrates good correspondence with the experimental data.

Figure C.14 summarizes the main findings from both numerical methods, comparing them with Al Issa's experimental data. In each of the four plots—corresponding to Regions 1 through 4— $J_f^{*0.5}$ is plotted against $J_g^{*0.5}$, showing both the linear CCFL model in RELAP5 and the experimental curves from Al Issa. For this geometry, the Wallis-type straight line fits the observations only for Regions 1 and 2, whereas Regions 3 and 4 exhibit a shifted or “lifted CCFL” boundary at higher liquid velocities. In the numerical tests, the liquid flow rate was held constant, and the air flow was incremented stepwise until exceeding CCFL. The blue dots represent the RELAP5 solutions, the brown crosses correspond to the 3D-VOF results, and the green dots indicate the flooding points obtained with the 3D-VOF model.

Both models reveal that each step increase in $J_g^{*0.5}$ causes a transient drop in liquid flow rate, followed by partial recovery at a lower level. In RELAP5, this behavior is dominated by the linear de-

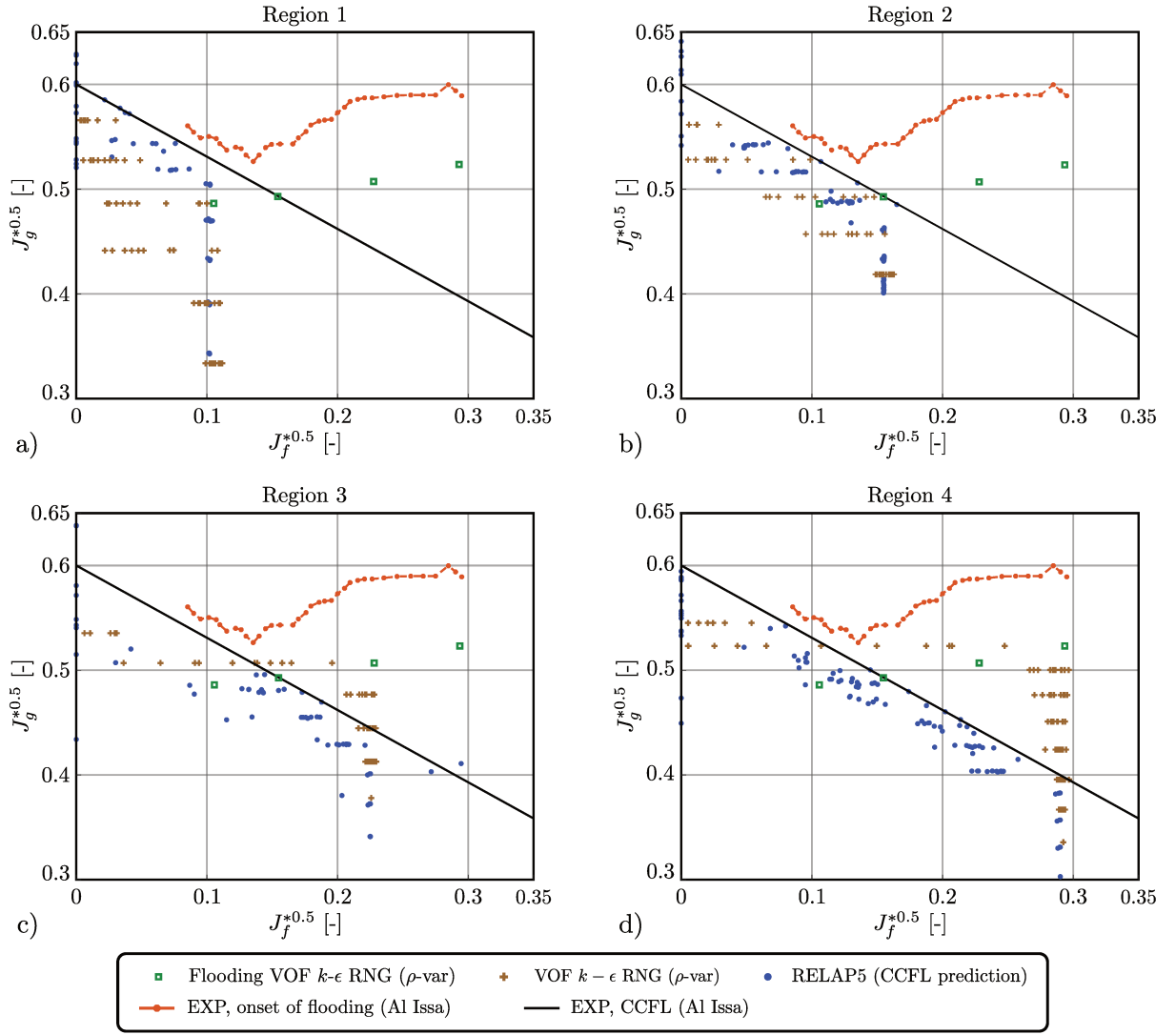


Figure C.14: Flooding limit with the 3D-VOF and RELAP5 model. $J_g^{*0.5}$ vs $J_f^{*0.5}$ for the different regions.

flooding constraint given by Eq. (C.18): if $J_g^{*0.5}$ goes beyond the specified line, the liquid flow rate immediately drops. This procedure continues until $J_g^{*0.5}$ reaches the CCFL limit, at which point the liquid flow falls to zero. Consequently, in Regions 1 and 2, the RELAP5 solutions align well with most of the small-diameter experimental datasets in the literature, although they deviate from more complex curves in Regions 3 and 4.

In the 3D-CFD model, a similar “stepwise” reduction in liquid flow appears after each air flow increment, but there is no enforced linear CCFL limit. In Regions 1 and 2, the water flow diminishes proportionally to the air velocity increase, converging to zero near the linear boundary. In Regions 3 and 4, however, the CFD-predicted airflow surpasses the straight-line limit without fully stopping the liquid right away, ultimately requiring a higher $J_g^{*0.5}$ to reach blockage. The behavior for Region 4, in particular, closely matches Al Issa’s observations, departing clearly from the linear approach. Thus, the CFD results align better with the experimental data for higher water velocities, while RELAP5—using the simple Wallis-based flooding line—overestimates the drag effect, providing a conservative blockage onset earlier than observed experimentally.

The main differences between the RELAP5 model and the 3D-CFD model arise from the fact that

RELAP5 explicitly incorporates a deflooding constraint, which represents a physical situation different from flooding and reproduces the phenomenon accurately only when hysteresis is relatively small, as in Regions 1 and 2. Under these conditions, the Wallis-type straight line employed in RELAP5 provides a good approximation to the experimental behavior.

In contrast, in Regions 3 and 4, where the liquid superficial velocities are higher, the hysteresis between the flooding and deflooding processes increases significantly, leading to a substantial divergence between the complete blockage curve and the deflooding curve. This explains why the CFD model, which does not explicitly impose the linear CCFL restriction, predicts $J_g^{*0.5}$ values exceeding the Wallis-type straight-line limit before reaching complete blockage of the liquid flow.

An inverse numerical procedure in 3D-CFD —gradually decreasing J_g instead of increasing it— could potentially yield a linear relationship similar to that used in RELAP5. However, the focus of the present work is to directly reproduce and compare the flooding procedure implemented in RELAP5, which involves increasing J_g until the CCFL threshold is reached. For this reason, a deflooding cycle was not implemented in the CFD simulations.

C.5 Conclusions

This study evaluated the Countercurrent Flow Limitation (CCFL) phenomenon in a hot-leg geometry by comparing three-dimensional VOF–RANS (ρ -var) and one-dimensional RELAP5Mod3 simulations against experimental results from Al Issa’s facility. The main conclusions can be summarized as follows:

- A preliminary mesh-sensitivity analysis showed that highly refined grids are not strictly necessary to capture the key interfacial effects and flow structures, thanks in part to the ρ -var formulation in the VOF–RANS model. This formulation effectively damps excessive turbulence near the interface, thereby reducing the dependence on fine spatial discretization.
- For low liquid velocities (Region 1), both the 3D-VOF and RELAP5 models accurately predicted the initial pressure-drop behavior, although the 3D-VOF approach slightly underestimated the peak pressure while RELAP5 slightly overestimated it. In both cases, the models correctly captured the sudden pressure surge resulting from liquid accumulation at the elbow, eventually restricting the flow area and increasing the air velocity.
- Simulations using either an incompressible turbulence formulation (ρ -con) or a purely laminar approximation substantially underestimated the pressure drop (by 40–60%). This result emphasizes the importance of accounting for variable-density turbulence in segregated two-phase flow to reproduce interfacial drag accurately.
- At higher liquid flow rates (Regions 3 and 4), the 3D-VOF model predicted that the air flow could exceed the linear Wallis-type CCFL limit before completely halting the liquid phase, in agreement with the experimental observations reported by Al Issa and consistent with the results obtained by [143] using TF model. In contrast, RELAP5, which by default employs the linear CCFL correlation, tended to predict earlier liquid blockage, leading to a more conservative yet less physically representative solution under these conditions.
- The 3D-VOF model enabled a detailed characterization of the interfacial dynamics. Although, under the VOF–RANS approach, it does not explicitly resolve the dispersed phase, it consistently reproduces the characteristic signatures of ADE-CCFL—interfacial diffusion or “noise”, liquid carryover toward the SG, and the spatial sequence of the phenomenon—with particular clarity in Region 4. Consequently, the approach captures the essential qualitative physics of ADE-CCFL and its location, although the subgrid-scale modeling imposes limitations on the precise quantification of droplet effects.

- The 3D-VOF model offers high fidelity in reproducing local flow phenomena; however, its application entails a significant computational cost, not only due to mesh resolution requirements but also because of the need for small time steps to maintain numerical stability. This type of three-dimensional modeling is primarily intended for detailed investigations and for achieving an in-depth understanding of the local flow physics under severe countercurrent flow conditions.
- RELAP5 is a one-dimensional model whose primary objective is the analysis of systems at a global scale, prioritizing computational speed and efficiency over spatial detail. Its low computational cost allows for multiple simulations to be performed in short time frames; however, its predictive capability for complex geometries under intense countercurrent flow conditions is limited, as it relies on a user-defined linear CCFL curve and empirical submodels.

Acknowledgements

The authors would like to thank CONICET (grant PIP 11220210100709CO) and Universidad Nacional del Litoral.

Appendix D

Large loss of coolant accident in the pump suction line in a CANDU-6 nuclear power plant: Assessment of the LOCA 40% break size and CCFL models

S. Corzo, J. Sarache, R. Ugarte and D. Ramajo. “Large loss of coolant accident in the pump suction line in a CANDU-6 nuclear power plant: Assessment of the LOCA 40% break size and CCFL models”. *Nuclear Engineering and Design*, enviado (2025).

Large loss of coolant accident in the pump suction line in a CANDU-6 nuclear power plant: Assessment of the LOCA 40% break size and CCFL models

S. Corzo^{a,b,1}, J. Sarache^{a,b}, R. Ugarte^c and D. Ramajo^{a,b}

^aCIMEC Centro de Investigación de Métodos Computacionales (UNL, CONICET), Santa Fe, Argentina

^bUNL Universidad Nacional del Litoral, Argentina

^cAutoridad Regulatoria Nuclear (ARN), Argentina

Keywords: LOCA, CANDU 6, CCFL, RELAP5.

Abstract.

This work presents an analysis of Loss of Coolant Accidents (LOCA) in a CANDU-6 reactor. LOCAs are the most challenging events for the assessment of safety systems. Although large breaks are very unlikely, LOCA accidents remain the most serious safety scenarios in nuclear power plants and the Emergency Core Coolant System (ECCS) has to ensure the liquid inventory in the core to avoid severe core damage by rapid injection of cold water from the accumulators and subsequent liquid injection from the containment building. In this work, the RELAP5Mod3 code has been used to evaluate the ECCS under a 40% break in one of the main primary pump suction. The study focuses on the effect of the CCFL (Counter-Current Flow Limit) modelling on the evolution of the main plant variables such as the coolant flow rate in the loop, the coolant inventory in the core and the effectiveness of the ECCS. The results for the postulated accident showed that the influence of the CCFL modelling on the global plant evolution is little significant, but the same analysis has to be extended to small accidents.

¹Corresponding author. E-mail address: Santiago Corzo santiagofcorzo@gmail.com (S. Corzo).

D.1 Introduction

The present paper address the simulation of a Large Loss of coolant accident (LLOCA) in a CANDU-6 nuclear power plant. The CANDU-6 reactor is a pressurised heavy water reactor (PHWR) characterised by a horizontal pressure tube configuration, which allows on-line refuelling and the use of natural uranium as fuel. The reactor core is cooled and moderated by heavy water (D_2O), with high-pressure coolant circulating through pressure tubes housed in a low-pressure vessel called the Calandria. This particular design has the advantage of avoiding the need for a large high-pressure vessel as in pressurised water reactors (PWRs). This particular reactor has two independent primary loops with four main coolant pumps; although the loops are connected by auxiliary circuits, they can be isolated from each other in the event of an interruption to avoid a total loss of coolant [144], thus allowing the cooling of half of the core pressure tubes. The CANDU-6 reactor offers key advantages under LOCA, such as the ability to operate with two independent loops, which allows for complete isolation of both circuits during such events.

Accident scenarios in nuclear power plants have been extensively studied by designers, plant operators, and regulatory bodies using experiments and system codes such as RELAP, CATHENA, and ATHLET, among others. These analyses have demonstrated the ability of nuclear power plants to large break scenarios in the primary circuit among others. The literature contains several of these studies, addressing both LLOCA and other accident situations. In the specific case of CANDU-6 plants, there are studies such as Dupleac et al. [125] where LOCA and SBO are analyzed using RELAP-SCDAP and more specific codes for severe accidents. Like this, there are many authors where severe consequences of accidents are analyzed. Yu y Manwoong [145] have presented results of a SBO transient with multiple-failure sequences as seal failure of PHTS pumps modeled with Luxat [146] who study the consequence of this types of scenarios combined with failures in safety systems.

A LLOCA is a hypothetical scenario in which a large break in the Primary Heat Transport system (PHTS) results in a coolant loss rate that exceeds the capacity of the reactor pressurizer system. LOCAs are among the most critical scenarios considered between the Design Basis Accidents [147] due to the integrity of the safety systems and the contention can not present damage. The severity of a LOCA depends on many factors, including the location and size of the break and its potential interaction with other accident scenarios. LLOCAs are expected to result in severe primary circuit depressurisation (Blow-down stage) followed by coolant flash evaporation (Dry-out stage). In this situation, vapor will flow rapidly from the core to the break. Once the pressure drops below a target threshold, the Emergency Core Cooling System (ECCS) should act by injecting fresh cold water at many points along the breaker loop to compensate for the leakage and reflood the core (Re-flooding stage). The blowdown in the LOCA will lead to significant hydrodynamic force with the possibility of blocking the feed water flowing into RPV from the emergency core cooling system or the steam generators. In this context, the phenomenon whereby countercurrent flow is interrupted under specific liquid–steam conditions is termed *Countercurrent Flow Limitation* (CCFL). Although CCFL has been experimentally investigated in simplified *hot leg* models under air–water and steam–water conditions at both atmospheric and pressurized environments—culminating in a database that analyzes pipe diameter, channel length and the L/D ratio along with Wallis-type empirical correlations [5, 11]—and extended to more realistic cooling circuit configurations (e.g., vertical–horizontal transitions evaluated by Siddiqui et al. [68], Ardrón y Banerjee [69] and PWR hot-leg models with horizontal pipes and inclined risers, validating correlations and proposing geometry-dependent empirical functions [70, 71]), its impact on full-plant modeling, including temperature effects, has yet to be addressed in the literature.

System codes are broadly used to simulate LOCA scenarios and evaluate the effectiveness of the ECCS in mitigating the effects of various postulated breaks along the line. The analysis of LOCA in CANDU-6 reactors represent a challenges due to the horizontal configuration of the core. RELAP5 is one of the most widely used thermal-hydraulic analysis tool for nuclear systems. It provides capabilities

for modelling complex transient phenomena. In this work, a large break (%40) is simulated in one of the four pump suction (PS) lines of a CANDU-6 nuclear power plant in order to address a comprehensive evaluation of the different stages of the LOCA scenario (The Blow-down, the dryout and the refilling of the core). The study focused on evaluating the thermal-hydraulic response of the reactor, including key parameters such as pressure, coolant void fraction, and mass flow rates in the breaker loop.

The model developed in RELAP5 was used. RELAP5 has demonstrated strong capabilities in simulating vertical-vessel PWRs and light water reactors [148–151]. Likewise, some studies have also employed this tool to model CANDU-type reactors, showing good agreement and accuracy. Trivedi y Novog [152] conducted a detailed analysis of RELAP5's performance for CANDU plants under LOCA scenarios using the RD-14M experimental facility (a CANDU reactor simulator), comparing the results with both experimental data and other codes. In the same sense, Ingham et al. [126] have presented LOCA results in the RD14 test facility. Corzo et al. [122] carried out a study of a Station Blackout (SBO) event in a CANDU-6 plant during the initial phase of the accident, comparing the results with other models available in the literature [153]. The results of this study provide valuable insights into the thermohydraulic behaviour of CANDU-6 reactors under this large LOCA event and demonstrate the role of computational tools in improving the understanding and safety of nuclear systems.

Finally, in addition to the thermal–hydraulic analysis of a LLOCA scenario in a CANDU-6 reactor, the study also examines the influence of CCFL in this reactor design. The analysis focuses on quantifying the CCFL effects through various Wallis-type correlations [6, 7, 10, 11, 78, 139] for both horizontal and vertical piping, applied to the horizontal legs (HLs) and feeder regions. Moreover, the possible interaction between LOCA and loss-of-flow accident (LOFA) scenarios is evaluated across the different CCFL models, with the aim of exploring a wide spectrum of flow conditions within the PHTS.. The paper is outlined in the following stages: In section D.2 a complete description of the plant model and hypothetical assumptions in RELAP5-3.3mod is addressed, in section D.3 results are presented in three parts, firstly a base case is analyzed in detail and secondly the sensitivity study of CCFL and LOFA is presented in terms of core dryout.

D.2 Computational model

D.2.1 Nuclear power plant Model

The many CANDU-6 reactors installed around the world produce electric power from 680 to 720 MWe, and operate at a primary pressure of 10 MPa approximately. Its core consists of 380 fuel channels arranged horizontally inside a Calandria vessel. The Primary Heat Transport System (PHTS) comprises two closed-loop cooling circuits configured in a figure-eight pattern. Although these circuits work independently, they are connected at several points through auxiliary systems. This is particularly important because only one pressurizer is available in one of the loops. A detailed description of the operation and main components of the CANDU-6 reactor can be found in [154].

The PHTS includes the coolant transport piping, four vertical steam generators (SGs), four main pumps, as well as four inlet headers and four outlet headers. Additionally, two interconnection or bypass lines are present between the hot legs of each circuit, primarily serving to enhance system stability. A schematic representation of the PHTS is shown in Figure D.1.

The coolant inlet temperature to the core ranges between 260°C and 267°C, depending on the plant type and its aging level, while the outlet temperature reaches approximately 309°C, exiting as a two-phase mixture with a low steam fraction. The circulation flow rate per loop slightly exceeds 2100 kg/s. Within each fuel channel, the coolant enters and exits through feeder tubes that supply or collect the coolant from or to a manifold. Additionally, the PHTS is connected to multiple auxiliary systems, including the pressure control system, the purification system, the feed and bleed system, and the ECCS, among others.

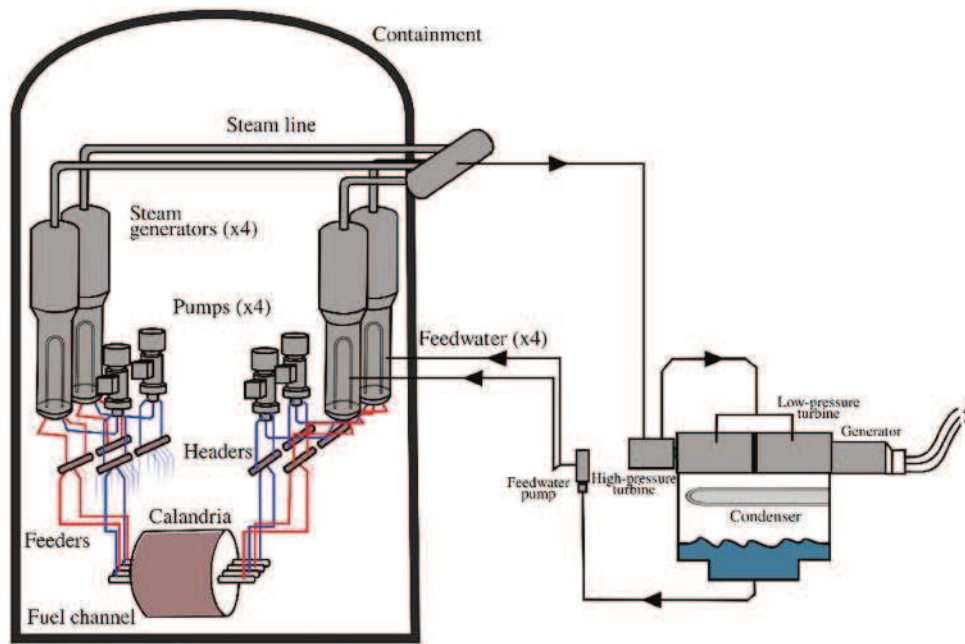


Figure D.1: Description of the of CANDU-6 PHTS.

Figure D.2 presents a schematic representation of the PHTS in RELAP5. The four loops with one pump and one steam generator (SG) were included as well as the by-pass and Feed-Bleed systems. The pressure control system includes a pressurizer tank equipped with heaters and a degasser tank with steam relief valves. In Figure D.2, the ECCS injection is shown. This system was simulated in a segregated form due to it uses light water instead of heavy water. This methodology solves the connection between both systems with a single pressure-mass flow rate coupling. The F-B was implemented in similar form. The model also includes the inlet and outlet headers and feeders as shown in Figure D.2. The two loops are connected by the pressurizer and the F-B system.

The 380 fuel channels of CANDU 6 reactor were represented by 20 equivalent channels, 10 in each loop. Thus, the core was discretized with 5 hydraulic zones. The 12 fuel bundles of the fuel assembly were modeled with 12 axial nodes. The thermal power was introduced through a point kinetics model for reactor core dynamics with appropriate reactivity feedback coefficients. More details of the model are in [122].

The secondary system of the CANDU-6 plant comprises four steam generators supplied by the feed water systems and four live steam lines that merge into one manifold connected to the steam turbine. The model incorporates a significant portion of the plant's secondary system, through certain components have been simplified. This consisted of: feed water lines (including main and auxiliary feed pumps), SGs, steam lines, SGs control level valves, Condenser Steam Discharge Valves (CSDV) and Turbine Governor valves (TGV). Main Steam Safety valves (MSSV) and Atmospheric Steam Discharge Valves (ASDV) were also included in the model. The turbine and the condenser were assumed as boundary conditions (see Figure D.3). In the same way, the feed water from the condenser enters the pump as a boundary condition. The feed water line is composed of the main and auxiliary pumps and the level control valves, which were simplified as a single valve. A scheme of one of the four lines of the feed and steam water system included in the NPP model is shown in Figure D.3. The complete control logic program of the level and pressure control systems was implemented in the model. The liquid level control, MSSV, ASDV, TGV and CSDV logic of control were implemented by replicating the sequential steps executed by the plant computer to determine the required position of the control valve steam.

As previously mentioned, the present paper aims to evaluate the sensitivity of CCFL in the CANDU

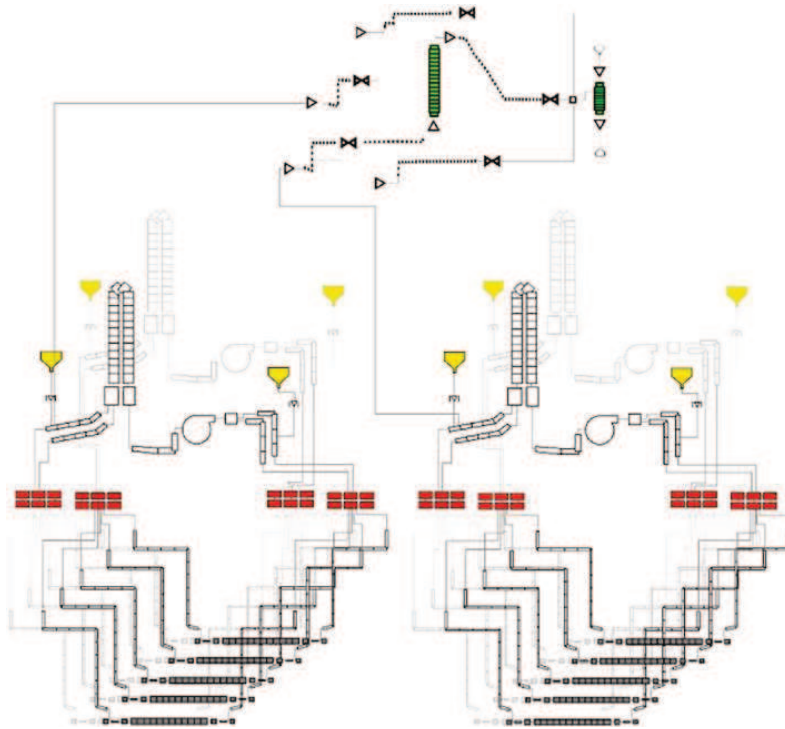


Figure D.2: CANDU-6 PHTS nodalization in RELAP5.

nuclear power plant. To this end, the CCFL phenomenon was implemented in the base case model by applying the Wallis correlation [80] for horizontal pipes in the four horizontal legs (HL), specifically in the second cell of each leg. This model is referred to as CCFL1. Additionally, a second model was implemented, which assumes CCFL in the four horizontal legs as in the previous case, but also imposes this limitation on all core feeder pipes in their vertical sections (second vertical cell). For this latter case, CCFL was implemented using the Wallis correlation [80] for vertical pipes. This model was named as CCFL2.

All safety systems were included in the plant model as the Shutdown reactors systems (SDS), ECCS and Crash-cooldown system (CCDS):

- **Emergency Core Cooling System (ECCS).** The high, medium and low pressure injection stages are considered.
- **Reactor Shutdown Systems.** The model incorporates the two shutdown systems with the real trip logic: *SP1* (safety rods) falling for gravity. *SP2* liquid poison injection (gadolinium) into the Calandria vessel.
- **Containment and Dousing System.** A simplified model was developed to simulate the pressure inside the containment and the pressure control through the liquid spray to reduce the temperature. The model assumes a zero-dimensional approach for the total volume of the containment. The air is assumed to be dry, and the liquid evaporation is modeled with a specific efficiency factor. The air cooling system and hydrogen recombined is not included in the model.
- **Crash-Cooldown.** The fast release of steam from the secondary circuit to the atmosphere to increase the heat transfer and reduce the PHTS temperature is available only for LOCA events

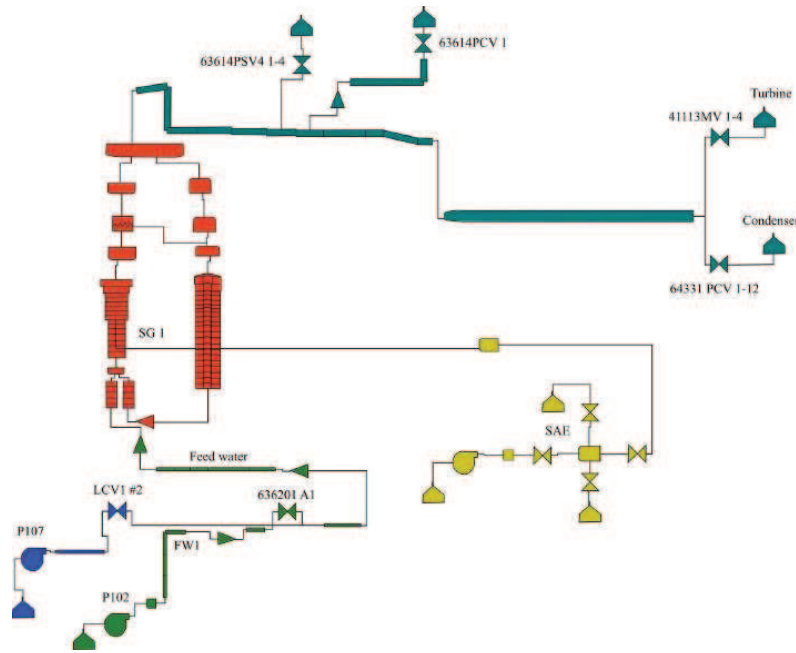


Figure D.3: Secondary circuit for one of the four SGs.

Moreover, the following systems and plant components were taken into account in the model: Ca-landria vessel with its external cooling system, F-B system, Emergency water supply, Shutdown cooling system, and the control block for the Step-Back and Set-Back systems. The model also incorporated the thermal inertia of the solid components by incorporating the real volume and material properties of them inside the different heat structures.

D.2.2 Break model

A 40% break at the suction line of pump 3312-PM4 at the SG outlet is assumed. The Henry-Fauske [123] critical flow discharge model is applied assuming a breaking time of 10 ms (instantaneous). Two valves are used to impose the flow discharge to the containment both from the header and from the pump. Other pump was implemented to partially connect the SG and the pump (40%), thus modeling a partial break of the pipes. The containment model accounts for the flow rate and enthalpy of the leakage to solve the thermal balance and estimate the containment pressure.

The postulated accident assumptions are:

- The reactor core is an aged state (4015 EFPD)
- No credit is assigned to the Reactor Regulating System (RRS). This assumption is based on the fact that the RRS is not classified as a safety system, and its operation would not mitigate the reactivity increase in the event of a large break with primary coolant loss.
- The ECCS is activated by LOCA signal.

Below are the initial plant state and the assumptions in the model for this scenario:

- The initial transient power is set to 103% full power (FP).
- Reactor shutdown occurs upon the second trip signal of *SP2*. However, the reactivity insertion curve of *SP1* is applied, as it is slower than that of *SP2*.

- No credit is given for the opening of Atmospheric Steam Discharge Valves (ASDVs) or Condenser Steam Discharge Valves (CSDVs).
- If the Main Steam Safety Valves (MSSVs) open, 8 of 16 are assumed to fail.
- The LOCA signal is triggered by low pressure (5.9 MPa) in 3 of 3 instrumented headers and high pressure in the containment.
- The circuit isolation system signal is triggered by low pressure (5.62 MPa) in 2 of 3 headers, with a valve closure time of 20 seconds.
- The medium-pressure ECCS is activated 90 seconds after the LOCA signal.
- The low-pressure ECCS is initiated when the low-level signal in the dousing tank is reached.
- The ECCS injection temperature is conservatively assumed to be 49°C for all systems.
- The Crash-Cooldown System is activated 30 seconds after the LOCA signal. The MSSV opening time for is set to 2 seconds.
- No credit is given to Stepback or Setback mechanisms.
- Only 4 of 6 dousing spray valves are operative.
- The containment model assumes thermal equilibrium between non-condensable gases and steam.
- The containment pressure set-point is determined from steady-state conditions (106 kPa).

Steady-state conditions are reached before initiate the accident and operational normal conditions are verified.

D.3 Results and discussion

In this section the results are presented focusing on the general response of the plant and then analyzing the effect of the LOFA and CCFL model on the broken loop.

D.3.1 Analysis of LOCA 40% in 3312-PM4 pump suction line.

This section describes the evolution of the LOCA event with a 40% break in the pump suction head, focusing on the most relevant phenomena. The key aspects of this study include the analysis of depressurization (blowdown) and the core refilling process following the activation of the ECCS. Following a large-break LOCA, the loss of coolant inventory is significant, leading to the depressurization of the PHTS and the evaporation of the remaining coolant. The Table D.1 summarizes the main features of the event for each system or component in the plant.

During the blowdown (rapid depressurisation of the PHTS), the void fraction in the PHTS increases, causing a power trip due to the positive reactivity feedback. As a result of the initial power pulse, the temperature of the fuel elements increases and then decreases after the reactor shutdown. The accident sequence and the timing of the individual events are shown in detail in Figure D.4. As can be seen, the reactor shutdown occurs up to the first second, as well as the maximum leakage flow. The LOCA signal is delayed by about 10s due to the time taken for the containment pressure to rise and enabling the activation of the ECCS. After the LOCA signal, the low pressure in the headers also activates the circuit isolation system, closing the pressurizer valves (3332MV1/2) and the interconnection valves through the Feed & Bleed and purification system (3331MV13/22, 3335MV3/4). When a pressure differential of

System	Description
PHTS	Fast pressure drop and formation of large amount of steam.
Containment (Short-Term)	Rapid increase in pressure.
Secondary System	Rapid depressurization due to the activation of the “Crash-Cooldown” system after the LOCA signal.
Fuel (Short-Term)	Overheating and potential uncovering of fuel cladding, flow stratification, and channel drainage.
ECCS	Operates to refill the core and ensure cooling (LOCA signal activation).
Fuel (Short to Long-Term)	After ECCS activation, the core is reflooding and the temperature is controlled.
Pressure Tube (Long-Term)	Potential deformation.

Table D.1: Description of the main features in each system.

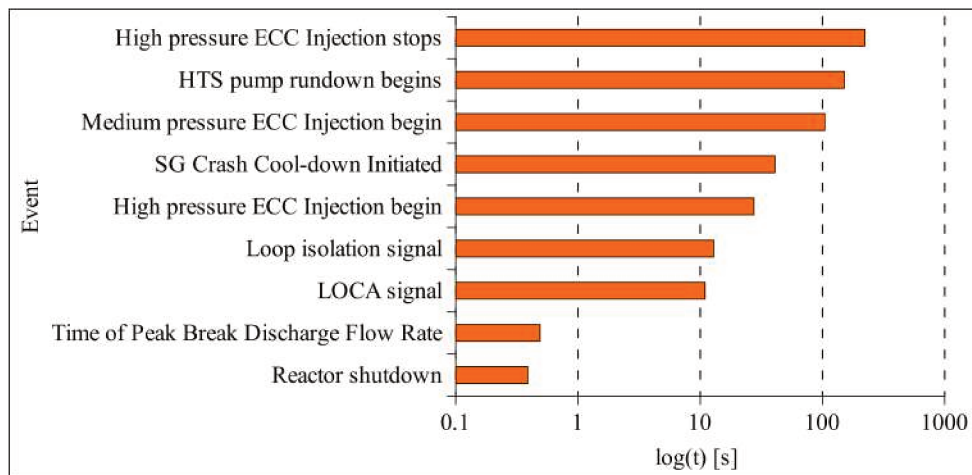


Figure D.4: Event sequence during the accident.

0.48 MPa between the ECCS and the PHTS is reached, the rupture disks break, initiating high-pressure emergency injection, which introduces light water from the accumulators (High pressures system) into the PHTS. The release of steam from the SG secondary circuit (crash-cooldown) occurs approx. 40 s after the start of the event. The activation of this system increases evaporation within the SGs due to the pressure drop, enhancing PHTS cooling. The ECCS medium pressure system starts to discharge liquid at about 100 s and continues until 800 s. The ECCS low pressure does not initiate during the simulated period. The trip SDS coverage is analyzed to identify which process variables trigger the shutdown systems and at what time. It was determined that the second signal from the second shutdown system was the high neutron power, which was selected as the primary shutdown signal. Therefore, when only this trip is credited, reactor shutdown occurs at 0.4 s. Following shutdown, neutron poison injection begins, while power continues to rise until reaching a peak before decreasing.

The flow rate through the break is shown in Figure D.5a during the first 100s. The discharge peak of 6300 kg/s is rapidly increasing and the reach a minimum value close to 50s. Other authors that study LLOCA in PWR reactor shows a similar behavior in the break discharge [124] with a maximum peak and then a progressive reduction in the flow rate instead of the type of power plant and break size.

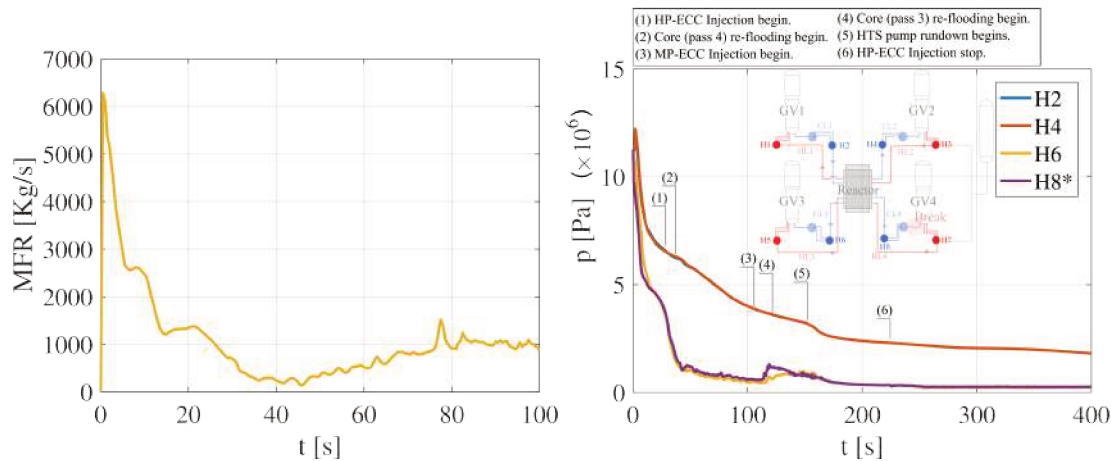


Figure D.5: (a) Total flow discharged through the break, the SG side and the pump side, (b) Pressure in the four outlet headers.

Beyond the minimum value, the discharge flow increase after this time due to the injection of the high pressure system. After 80 s, the flow rate reaches an almost constant value of about 1000kg/s and remains during the rest of the simulation. As shows the results, the discharged mass flow rate from the SG and the pump seems to be similar along the transient. This is because the loss of coolant is dominated by the pressure difference between the PHTS and contention build and is not significantly affected by the forced circulation of the system.

Figure D.5-b presents the pressure in the outlet headers of the core. The pressure in the headers of the damaged circuit (HDR5-6 and HDR6-8) reaches significantly lower values compared to the intact circuit. During the first few seconds (1 to 3 seconds), a slight overpressure is observed in the intact circuit due to the power increase due to positive reactivity of the void formation. The pressure level reached is sufficient to trigger the opening of the Liquid Relief Valves (LRVs) during the first seconds. As expected, the pressure in the undamaged loop fall slowly due to the reactor shutdown and the remotion of heat from the SG1 and SG2.

The effect of the safety systems is clearly observed in the pressure distribution in the headers (see Figure D.5b). After circuit isolation, the pressure in the intact circuit stabilizes for a few seconds before continuing to decrease at a lower rate. The circuit isolation system prevents inventory loss from the intact circuit through the break. The achieved depressurization have triggered the pump protection system (Auto-Pump Trip) after 2 minutes. Although this is not classified as a safety action, it would prevent unnecessary cavitation of the main pumps and the generation of vibrations that could induce consequential failures. The pressure in the broken loop falls rapidly during the first seconds and increase slightly the blowdown rate about (10s aproximately). This behavior where change the depressurization rate during few seconds was repoted by other authors both for CANDU reactors [125, 126] and other types [124]. After this stage, the pressure drops again to a level at which it remains throughout the rest of the event.

Figure D.6-a presents the flow rate in the four pumps of the primary circuit. As expected, the most affected legs correspond to the damaged circuit (PMPs 3 and 4). Theses Legs experience a rapid decrease in flow rate. As expected, the mass flow rate in pump 4 (broken leg) reverses immediately after the break, while the flow rate in pump 3 decreases more gradually until both reach nearly zero values due to the complete evaporation of the coolant. When core reflooding begins in the core passes 4, the flow rate in pumps 3 and 4 increases rapidly due to liquid injection from the ECCS (Stage 4). Finally, when the pumps are shut down, the flow rate drops to zero in pump 3, reaches the natural circulation value (thermosyphoning) in the pumps of the intact loop, and reverses in pump 4 (corresponding to the broken leg). This values remains during the rest of the simulation. The flow rate in the intact loop remains approximately constant until the Crash-Cooldown is initiated (30 seconds after the LOCA signal). Then

the mass flow rate begins to decrease due to coolant over-cooling, and finally reaching the pump rundown (Stage 5 in the Figure D.6).

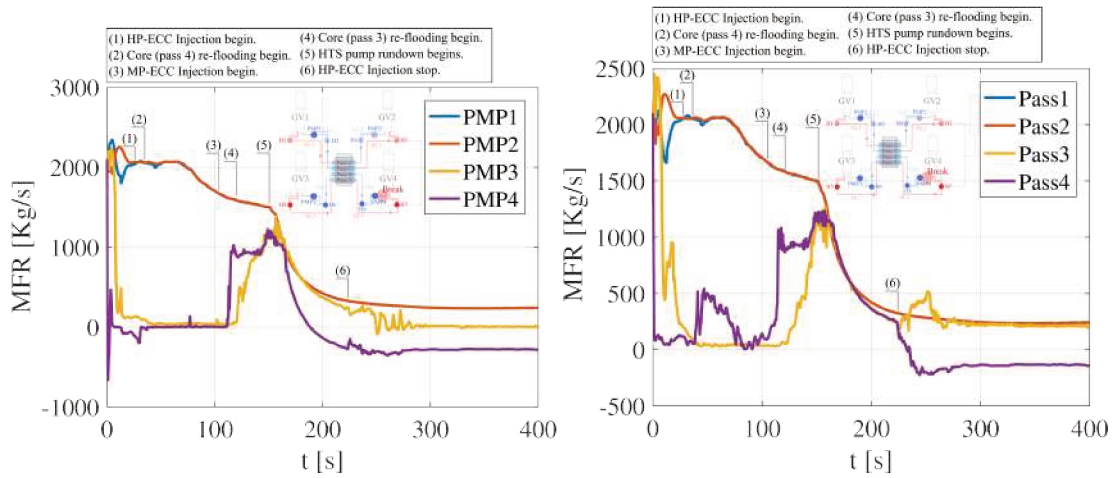


Figure D.6: Flow rate through the four pumps

The flow rate in the four core passes is shown in Figure D.6-b. Note that the channels grouped in Pass 3 are those located downstream of the break (between collectors 8 and 5), while Pass 4 includes the channels located upstream of the break (between collectors 6 and 7). As expected, the flow rate in the intact loop shows a mass flow similar that through pumps 1 and 2. The total flow rates in paths 3 and 4 clearly reflect the influence of the injection system and the pumps rundown. After core reflooding occurs and the primary circuit pumps are shut down, the flow rates in all four paths temporarily equalize and gradually decrease. As shown in the detail (Event 2) of Figure D.6-b, the reflooding of the Pass 4 channels occurs first (at approximately 40s). At this point, the flow rate increases rapidly. It then decreases again before increasing once more after 100 seconds, while the channels remain flooded. On the other hand, the Step 3 channels have a longer filling time (the beginning of their filling occurs at Milestone 4 in Figure D.6-b). This is also reflected in the core flow rate: from this moment on, the flow rate increases rapidly, reaching its maximum value at the same time full filling is achieved.

Once the high-pressure injection system ceases operation and the flow from the medium-pressure system increases, the core flow is maintained through paths 1 to 3, while in path 4 a flow reversal is observed, sustained by the continued contribution of the injection system.

Figure D.7-a illustrates the flow rate injected by the ECCS into the PHTS by the HP-ECCS and MP-ECCS meanwhile Figure D.7-b shows the ECCS mass flow rate injected in each header. During the first 200 seconds, the pressure distribution in the PHTS favors injection into headers HDR7 and HDR8. These headers are closest to the break, resulting in a portion of the injected flow being lost through it. Beyond 200s, injection begins into headers HDR5 and HDR6 of the damaged circuit. The intact circuit does not receive injection water throughout the transient because, following circuit isolation, it does not experience inventory loss. As mentioned earlier, the pulsating nature of the flow is associated with the core reflooding process by the ECCS. As expected, the LP-ECCS does not begins during the simulated time.

Figure D.8 presents the average steam fraction in the channels of the damaged circuit. As observed, during the initial phase, the channels located downstream of the break completely lose their liquid inventory. Note that Pass 3 are the channels As previously mentioned, during the first 200 s, the low-pressure ECCS injects coolant into the headers closest to the break. However, this flow is lost through the break. After 200 s, the reduced pressure in the SPTC facilitates coolant entry into the channels of the damaged circuit through all four headers. As a result, the channels in pass 4 condense nearly all the steam during

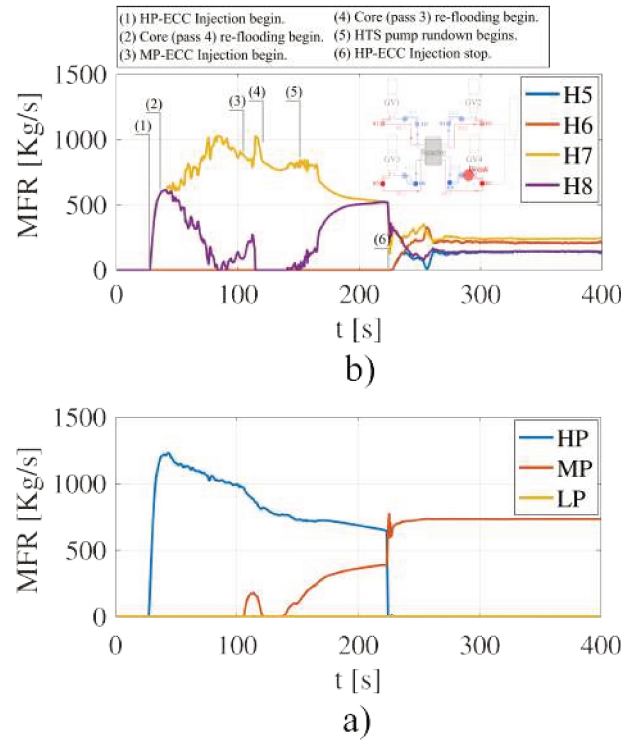


Figure D.7: Mass flow rate injected through the High, medium, and low-pressure ECCS systems.

the period between 200 and 300 s. In contrast, steam remains in the channels downstream of the break for a longer duration. Between 150 and 500 s, coolant intermittently enters these channels. During this stage, two competing effects are observed: ECCS injection and steam discharge from within the channels. After 500 s, the void fraction in the channels is nearly zero, indicating that the fuel is expected to be almost entirely submerged in coolant. Another notable aspect of the blown-down and reflooding stages is that the channels in pass 4 never reaches a complete dryout, retaining a small percentage of liquid throughout this stage.

As will be discussed in the sensitivity analysis below, the primary circuit pumps have a significant effect on core refilling. This is particularly evident in the pass 4 channels, where the pressure jump introduced by Pump 4 promotes refilling while the pumps are operating.

Figure D.9 illustrates the pressure drop in the SGs due to the Crash-Cooldown system. During the first 10 s, a slight pressure increase occurs due to the turbine trip. After 40 s, the Crash-Cooldown system fully opens the MSSVs, causing a rapid pressure drop until reaching values close to atmospheric pressure at the end of the transient. The depressurization of the SGs promotes fluid evaporation in the secondary system, significantly reducing the inventory. Due to the lower heat transfer in the damaged circuit, SGs 3 and 4 do not experience excessive inventory depletion. Conversely, the SGs in the intact circuit exhibit a greater reduction in inventory. The activation of the auxiliary feedwater pump allows water recovery in SGs 3 and 4. In SGs 1 and 2, the inventory decreases but stabilizes at approximately 12300 kg after 800 s. Meanwhile, SGs 3 and 4 maintain an inventory exceeding 25000 kg at the end of the transient.

D.3.2 Sensitivity analysis of CCFL Models and PHTS pump operation.

As mentioned previously, the base case analysed in the previous section considered the CCFL model with the correlation for horizontal pipes defined in all hot legs pipes previously to the elbow (CCFL1). To address the sensibility of a LLOCA in CANDU-6 nuclear power plants, two other models was consid-

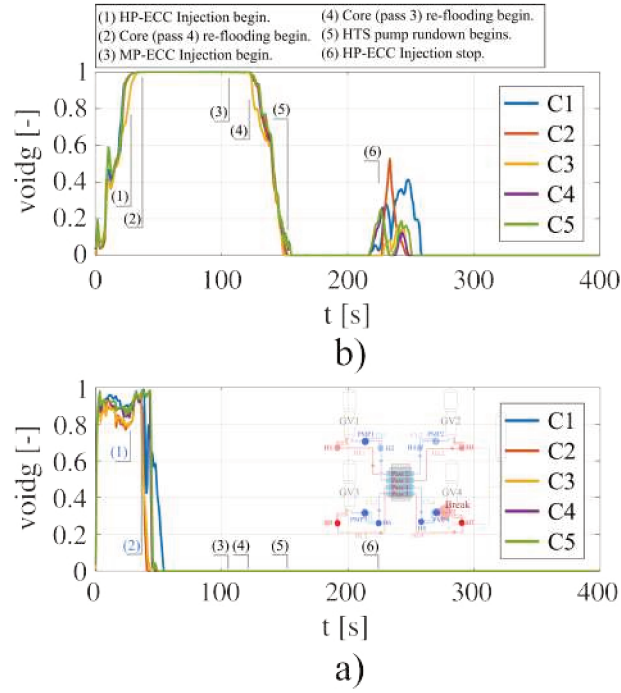


Figure D.8: Void fraction in channels of : a) Pass 4 and b) Pass 3.

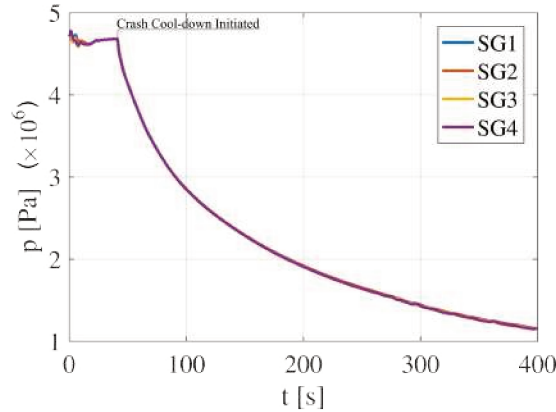


Figure D.9: Pressure in secondary circuit of SGs.

ered, a case without the definition of a CCFL model and other with CCFL in the feeders (CCFL2). For this case, the model was set with the same parameters as the HL CCFL, but with correlation for vertical pipes. Additionally, the possibility of a LOF accident at the same moment was analyzed.

Figures D.10-a and D.10-b shows the effect of considering CCFL1 and CCFL2 in the re-flooding stage for passes 3 and 4 respectively. For the break hypothesis (both in terms of size and location), CCFL does not show significant differences compared to the plant model without this restriction. The previously analyzed base model (CCFL1), the CCFL2 model and the case without the restriction exhibit the same behavior during the blowdown, dryout, and reflooding stages in both reactor loops. After the automatic pump trip, the system behavior remains unchanged across the three models.

Although the velocities of both phases (liquid and vapor) show some differences during the transient when comparing the CCFL and non-CCFL cases, no significant discrepancies are observed in macroscopic terms, such as in the reflooding analysis. This may be attributed to the effect of the pumps, which,

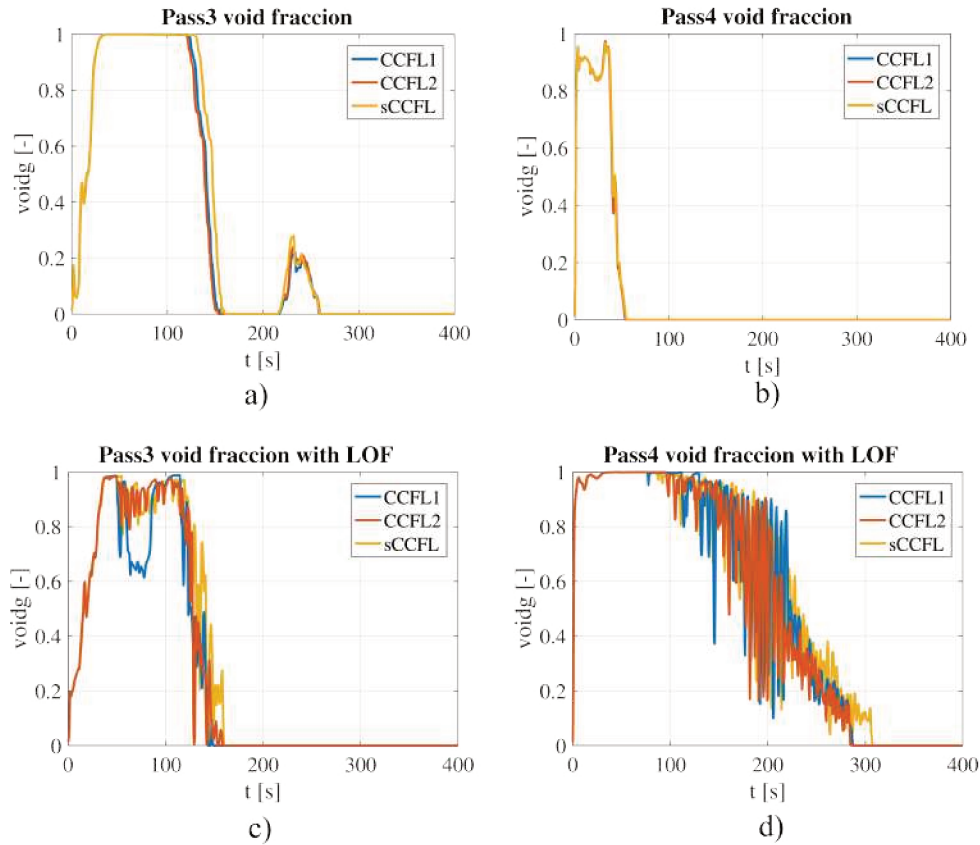


Figure D.10: Average void fraction for the sensitive evaluation cases: a) Pass 3 without LOF, b) Pass 4 without LOF, c) Pass 3 with LOF, d) Pass 4 with LOF.

despite the break, delay the onset of dryout and prevent CCFL from occurring.

The influence of LOF during the LOCA40% event is analyzed in Figures D.10-c and D.10-d in terms of the average vapor fraction in the core. The first observable difference concerns the dryout condition. In the case with LOF, pass 3 no longer reaches complete dryout as observed in the case without LOF. Conversely, pass 4, which did not reach dryout in the case without LOF, does reach dryout in the LOF scenario, and this condition persists for a much longer period (300 s) (see Figs. D.10-b and D.10-c).

For the LOF case, the CCFL assumption now introduces a certain degree of difference compared to the case without CCFL, but only in terms of the dryout and reflooding phases. During the earlier blowdown stage, no differences are observed among the CCFL1, CCFL2, and non-CCFL models. In general terms, the onset of dryout and the end of reflooding occur at similar times across all three models, with only minor differences in pass 4 between the CCFL models. Contrary to what might be expected from this type of restriction, where the outgoing vapor flow from the core would block incoming liquid, the CCFL models yield more favorable results in terms of core reflooding for this type of break in CANDU-6 reactors.

D.4 Conclusions

The results of a LLOCA in the suction of PHT pump (3312-PM4) were presented. The plant model used was developed in RELAP5. The main features of the event were revealed and the effect of considering the Counter Current Flow Limit (CCFL) was also analysed for this particular accident. The main stages of the LOCA event (blowdown, dryout, and reflooding) were analyzed for the base case,

and subsequently for the combined LOCA+LOFA scenario, also considering different CCFL models. Although limiting temperature values were reached in the cladding and fuel elements during the dryout phase, the objective of this study was to analyze in detail the fluid dynamics and the intervention of safety systems, without performing a structural integrity assessment. In this sense, only 400s of simulation was addressed as maximum time where the dry-out occur.

Due to this particular characteristic of CANDU reactors, where under LOCA scenarios the intact loop is isolated, the analysis is primarily focused on the damaged loop where the break occurs. Although the intact loop experiences depressurization during the initial stage and vapor formation is observed, the void fraction does not exceed 15% throughout the transient. On the other hand, the damaged loop undergoes complete dryout in both reactor passes, triggering the activation of the injection system to ensure core reflooding. As expected for LOCA scenarios, pass 3 (upstream of the break) experiences a longer dryout period than pass 2 (downstream of the break) while the pumps remain operational. In contrast, under LOFA conditions, pass 4 shows a significant increase in the duration of the dryout phase.

The intervention of safety systems—including both the reactor shutdown system and the systems activated by the LOCA signal (ECCS and crash cooldown)—proved highly effective in ensuring heat removal from the fuel elements, showing strong agreement with findings reported in the literature.

Finally, the paper presents a comprehensive study on the influence of classical CCFL models on the plant model. Although numerous papers analyzing CCFL can be found in the literature, there are currently no investigations that address the impact of this phenomenon within full plant models. This work performs a sensitivity analysis of CCFL models applied to both the feeders and the HLs, without observing significant differences for this break size in a CANDU6 reactor. Although the combined LOCA+LOFA scenario showed some differences during the dryout phase, these differences were not significant in macroscopic terms.

Acknowledgements

The authors would like to thank CONICET (grant PIP 11220210100709CO) and Autoridad Regulatoria Nuclear of Argentina for the technical support.

Bibliografía

- [1] Johan Roenby, Henrik Bredmose, y Hrvoje Jasak. Isoadvector: Geometric vof on general meshes. En *OpenFOAM®: Selected Papers of the 11th Workshop*, páginas 281–296. Springer, 2019.
- [2] Noritoshi Minami, Daisuke Nishiwaki, Toshifumi Nariai, Akio Tomiyama, y Michio Murase. Countercurrent gas-liquid flow in a pwr hot leg under reflux cooling (i) air-water tests for 1/15-scale model of a pwr hot leg. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 47(2):142–148, 2010.
- [3] Ikuo Kinoshita, Michio Murase, Yoichi Utanohara, Noritoshi Minami, y Akio Tomiyama. Numerical simulation of countercurrent gas-liquid flow in a pwr hot leg under reflux cooling. *Journal of nuclear science and technology*, 47(10):963–972, 2010.
- [4] S Al Issa, M Murase, A Tomiyama, K Hayashi, y R Macián-Juan. On ccfl at a pwr hot-leg pipe geometry and comparison between results in collider 1/4th-and kobe 1/15th-scaled facilities. *Nuclear Science and Engineering*, 193(1-2):147–159, 2019.
- [5] S Al Issa y R Macian. A review of ccfl phenomenon. *Annals of Nuclear Energy*, 38(9):1795–1819, 2011.
- [6] Graham B Wallis. *One-dimensional two-phase flow*. Courier Dover Publications, 1969.
- [7] Graham B Wallis. Flooding velocities for air and water in vertical tubes. Reporte técnico, United Kingdom Atomic Energy Authority. Reactor Group. Atomic Energy . . . , 1961.
- [8] WEetal Lobo, Leo Friend, F Hashmall, y F Zenz. Limiting capacity of dumped tower packings. *Transactions of the American Institute of Chemical Engineers*, 41(6):693–710, 1945.
- [9] TK Sherwood, GH Shipley, y FAL Holloway. Flooding velocities in packed columns. *Industrial & Engineering Chemistry*, 30(7):765–769, 1938.
- [10] Seong-Kwon Kang, In-Cheol Chu, Hee-Cheon No, Moon-Hyun Chun, y Chang-Kyung Sung. Air-water countercurrent flow limitation in a horizontal pipe connected to an inclined riser. *Nuclear Engineering and Technology*, 31(6):548–560, 1999.
- [11] Xixi Zhu, Zhengguang Wang, Chende Xu, y Naihua Wang. Experimental investigations and numerical studies of two-phase countercurrent flow limitation in a pressurized water reactor: A review. *Energies*, 16(3):1487, 2023.
- [12] S Al Issa y R Macian-Juan. Experimental investigation of countercurrent flow limitation (ccfl) in a large-diameter hot-leg geometry: A detailed description of ccfl mechanisms, flow patterns and high-quality hsc imaging of the interfacial structure in a 1/3.9 scale of pwr geometry. *Nuclear Engineering and Design*, 280:550–563, 2014.
- [13] Suleiman Al Issa. *Experimental investigation and CFD validation of two-phase phenomena related to nuclear safety research during LOCA accidents*. PhD thesis, Technische Universität München, 2015.
- [14] Dario M Godino, Santiago F Corzo, y Damian E Ramajo. Two-phase modeling of water-air flow of dispersed and segregated flows. *Annals of Nuclear Energy*, 149:107766, 2020.
- [15] Johan Sarache Piña, Dario Godino, Santiago Corzo, y Damian Ramajo. Air injection in vertical water column: Experimental test and numerical simulation using volume of fluid and two-fluid methods. *Chemical Engineering Science*, 255:117665, June 2022. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/j.ces.2022.117665.
- [16] Johan Sarache Piña, Santiago Corzo, Dario Godino, y Damian Ramajo. Volume of fluid simulation of air–water co-current and counter-current flow with variable density turbulence formulation. *Nuclear Engineering and Design*, 424:113217, 2024.
- [17] Johan Sarache Piña, Santiago Corzo, Dario Godino, y Damian Ramajo. Numerical analysis of counter-current flow limitation in a horizontal hot-leg with elbow using relap5 and vof–rans models. *Nuclear Engineering and Design*, 444:114416, 2025.
- [18] Santiago Corzo, Johan Sarache, Ricardo Ugarte, y Damián Ramajo. Large loss of coolant accident in the pump suction line in a candu-6 nuclear power plant: Assessment of the loca 40 % break size and ccfl models. Manuscrito enviado para publicación en *Nuclear Engineering and Design*, 2025, 2025.

- [19] Mikko Manninen, Veikko Taivassalo, y Sirpa Kallio. On the mixture model for multiphase flow. 1996.
- [20] Mamoru Ishii y Takashi Hibiki. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [21] D Drew. Mathematical modeling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 15(1):261–291, 1983.
- [22] Cyril W Hirt y Billy D Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1):201–225, 1981.
- [23] Grétar Tryggvason, Ruben Scardovelli, y Stéphane Zaleski. *Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows*. Cambridge university press, 2011.
- [24] BD Nichols, CW Hirt, y RS Hotchkiss. Sola-vof: A solution algorithm for transient fluid flow with multiple free boundaries. Reporte técnico, Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), 1980.
- [25] Suraj S Deshpande, Lakshman Anumolu, y Mario F Trujillo. Evaluating the performance of the two-phase flow solver interfoam. *Computational science & discovery*, 5(1):014016, 2012.
- [26] DM Hargreaves, HP Morvan, y NG Wright. Validation of the volume of fluid method for free surface calculation: the broad-crested weir. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 1(2): 136–146, 2007.
- [27] Hatice Ozmen-Cagatay y Selahattin Kocaman. Dam-break flow in the presence of obstacle: experiment and cfd simulation. *Engineering applications of computational fluid mechanics*, 5(4):541–552, 2011.
- [28] Alibek Issakhov, Yeldos Zhandaulet, y Aida Nogaeva. Numerical simulation of dam break flow for various forms of the obstacle by vof method. *International Journal of Multiphase Flow*, 109:191–206, 2018.
- [29] Jutta Adelsberger, Patrick Esser, Michael Griebel, Sven Groß, Margrit Klitz, y Alexander Rüttgers. 3d incompressible two-phase flow benchmark computations for rising droplets. 2014.
- [30] Thinh Quy Duc Pham, Jichan Jeon, y Sanghun Choi. Quantitative comparison between volume-of-fluid and two-fluid models for two-phase flow simulation using openfoam. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 34:1157–1166, 2020.
- [31] Saumitra Vinay Joshi. Adaptive mesh refinement in openfoam with quantified error bounds and support for arbitrary cell-types. 2016.
- [32] Hrvoje Jasak y AD Gosman. Automatic resolution control for the finite-volume method, part 1: a-posteriori error estimates. *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, 38(3):237–256, 2000.
- [33] H Jasak y AD Gosman. Automatic resolution control for the finite-volume method, part 2: Adaptive mesh refinement and coarsening. *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, 38(3):257–271, 2000.
- [34] H Jasak y AD Gosman. Automatic resolution control for the finite-volume method, part 3: Turbulent flow applications. *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, 38(3):273–290, 2000.
- [35] JJ Cooke, LM Armstrong, KH Luo, y Sai Gu. Adaptive mesh refinement of gas–liquid flow on an inclined plane. *Computers & chemical engineering*, 60:297–306, 2014.
- [36] Zlatko Rek. Using a dynamic and constant mesh in numerical simulation of the free-rising bubble. *Fluids*, 4(1):38, 2019.
- [37] Nasser Ashgriz y JY Poo. Flair: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of computational physics*, 93(2):449–468, 1991.
- [38] Ruben Scardovelli y Stéphane Zaleski. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics*, 31(1):567–603, 1999.
- [39] Sandra CK De Schepper, Geraldine J Heynderickx, y Guy B Marin. Cfd modeling of all gas–liquid and vapor–liquid flow regimes predicted by the baker chart. *Chemical Engineering Journal*, 138(1-3):349–357, 2008.
- [40] Johan Roenby, Henrik Bredmose, y Hrvoje Jasak. A computational method for sharp interface advection. *Royal Society open science*, 3(11):160405, 2016.
- [41] Johan Roenby, Bjarke Eltard Larsen, Henrik Bredmose, y Hrvoje Jasak. A new volume-of-fluid method in openfoam. En *Marine vi: Proceedings of the vi international conference on computational methods in marine engineering*, páginas 266–277. CIMNE, 2017.
- [42] T Höhne y C Vallée. Modelling of stratified two phase flows using an interfacial area density model. *WIT transactions on engineering sciences*, 63:123–133, 2009.
- [43] Thomas Höhne y Christophe Vallée. Experiments and numerical simulations of horizontal two-phase flow regimes using an interfacial area density model. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 2(3): 131–143, 2010.
- [44] Thomas Höhne, Dirk Lucas, et al. Numerical simulations of counter-current two-phase flow experiments in

- a pwr hot leg model using an interfacial area density model. *International journal of heat and fluid flow*, 32 (5):1047–1056, 2011.
- [45] P Porombka y T Höhne. Drag and turbulence modelling for free surface flows within the two-fluid euler–euler framework. *Chemical Engineering Science*, 134:348–359, 2015.
- [46] T Höhne, E Krepper, G Montoya, y D Lucas. Cfd-simulation of boiling in a heated pipe including flow pattern transitions using the gentop concept. *Nuclear Engineering and Design*, 322:165–176, 2017.
- [47] Holger Marschall. *Towards the numerical simulation of multi-scale two-phase flows*. PhD thesis, Technische Universität München, 2011.
- [48] Holger Marschall, Korbinian Hinterberger, Christian Schüller, Florian Habla, y Olaf Hinrichsen. Numerical simulation of species transfer across fluid interfaces in free-surface flows using openfoam. *Chemical engineering science*, 78:111–127, 2012.
- [49] Santiago F Corzo, Dario M Godino, Norberto M Nigro, y Damian E Ramajo. Thermal hydraulics simulation of the rd-14m steam generator facility. *Annals of Nuclear Energy*, 105:282–301, 2017.
- [50] Esteban Guerrero, Felipe Muñoz, y Nicolás Ratkovich. Comparison between eulerian and vof models for two-phase flow assessment in vertical pipes. *CT&F-Ciencia, Tecnología y Futuro*, 7(1):73–84, 2017.
- [51] Amjad Asad, Christoph Kratzsch, y Rüdiger Schwarze. Influence of drag closures and inlet conditions on bubble dynamics and flow behavior inside a bubble column. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 11(1):127–141, 2017.
- [52] J.U Brackbill, D.B Kothe, y C Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, June 1992. ISSN 0021-9991. doi: 10.1016/0021-9991(92)90240-y.
- [53] M. FULGOSI, D. LAKEHAL, S. BANERJEE, y V. DE ANGELIS. Direct numerical simulation of turbulence in a sheared airwater flow with a deformable interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 482:319–345, May 2003. ISSN 1469-7645. doi: 10.1017/s0022112003004154.
- [54] Kathrin Eisenschmidt, Moritz Ertl, Hassan Gomaa, Corine Kieffer-Roth, Christian Meister, Philipp Rauschenberger, Martin Reitzle, Karin Schlottke, y Bernhard Weigand. Direct numerical simulations for multiphase flows: An overview of the multiphase code fs3d. *Applied Mathematics and Computation*, 272: 508–517, January 2016. ISSN 0096-3003. doi: 10.1016/j.amc.2015.05.095.
- [55] Gabriele Pozzetti y Bernhard Peters. A multiscale dem-vof method for the simulation of three-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 99:186–204, February 2018. ISSN 0301-9322. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2017.10.008.
- [56] Niklas Hidman, Henrik Ström, Srdjan Sasic, y Gaetano Sardina. A multiscale methodology for small-scale bubble dynamics in turbulence. *International Journal of Multiphase Flow*, 150:103976, May 2022. ISSN 0301-9322. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2022.103976.
- [57] Gaetano Sardina, Francesco Picano, Luca Brandt, y Rodrigo Caballero. Continuous growth of droplet size variance due to condensation in turbulent clouds. *Physical Review Letters*, 115(18), October 2015. ISSN 1079-7114. doi: 10.1103/physrevlett.115.184501.
- [58] Gaetano Sardina, Klas Jareteg, Henrik Ström, y Srdjan Sasic. Assessing the ability of the eulerian-eulerian and the eulerian-lagrangian frameworks to capture meso-scale dynamics in bubbly flows. *Chemical Engineering Science*, 201:58–73, June 2019. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/j.ces.2019.02.022.
- [59] Mahdi Saeedipour y Simon Schneiderbauer. Favre-filtered les-vof of two-phase flows with eddy viscosity-based subgrid closure models: An a-posteriori analysis. *International Journal of Multiphase Flow*, 144: 103780, November 2021. ISSN 0301-9322. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2021.103780.
- [60] Yury Egorov, Marc Boucker, A Martin, S Pigny, M Scheuerer, y S Willemsen. Validation of cfd codes with pts-relevant test cases. *5th Euratom Framework Programme ECORA project*, 2004:91–116, 2004.
- [61] P. Porombka y T. Höhne. Drag and turbulence modelling for free surface flows within the two-fluid euler–euler framework. *Chemical Engineering Science*, 134:348–359, September 2015. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/j.ces.2015.05.029.
- [62] Thomas Daniel Stäbler. Experimentelle untersuchung und physikalische beschreibung der schichtenströmung in horizontalen kanälen, 2007.
- [63] E.M.A. Frederix, A. Mathur, D. Dovizio, B.J. Geurts, y E.M.J. Komen. Reynolds-averaged modeling of turbulence damping near a large-scale interface in two-phase flow. *Nuclear Engineering and Design*, 333: 122–130, July 2018. ISSN 0029-5493. doi: 10.1016/j.nucengdes.2018.04.010.
- [64] Thomas Höhne y Paul Porombka. Modelling horizontal two-phase flows using generalized models. *Annals of Nuclear Energy*, 111:311–316, January 2018. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/j.anucene.2017.09.018.
- [65] Hongjie Yan, Huimin Zhang, Thomas Höhne, Yixiang Liao, Dirk Lucas, y Liu Liu. Numerical modeling

- of horizontal stratified two-phase flows using the aiad model. *Frontiers in Energy Research*, 10, July 2022. ISSN 2296-598X. doi: 10.3389/fenrg.2022.939499.
- [66] Wenyuan Fan y Henryk Anglart. varrho turbvof: A new set of volume of fluid solvers for turbulent isothermal multiphase flows in openfoam. *Computer Physics Communications*, 247:106876, February 2020. ISSN 0010-4655. doi: 10.1016/j.cpc.2019.106876.
- [67] Z. Dong, M. Bürgler, B. Hohermuth, y D.F. Vetsch. Density-based turbulence damping at large-scale interface for reynolds-averaged two-fluid models. *Chemical Engineering Science*, 247:116975, January 2022. ISSN 0009-2509. doi: 10.1016/j.ces.2021.116975.
- [68] H Siddiqui, S Banerjee, y KH Ardrón. Flooding in an elbow between a vertical and a horizontal or near-horizontal pipe: Part i: Experiments. *International journal of multiphase flow*, 12(4):531–541, 1986.
- [69] KH Ardrón y S Banerjee. Flooding in an elbow between a vertical and a horizontal or near-horizontal pipe: Part ii: Theory. *International journal of multiphase flow*, 12(4):543–558, 1986.
- [70] Akira Ohnuki. Experimental study of counter-current two-phase flow in horizontal tube connected to inclined riser. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 23(3):219–232, 1986.
- [71] Akira Ohnuki, Hiromichi Adachi, y Yoshio Murao. Scale effects on countercurrent gas-liquid flow in a horizontal tube connected to an inclined riser. *Nuclear Engineering and Design*, 107(3):283–294, 1988.
- [72] H Wang y S Kondo. a study on the stratified horizontal counter-current two-phase flow. *Nuclear Engineering and Design*, 121:45–52, 1990.
- [73] M Kawaji, A Thompson, L, y S Krishnan, V. Countercurrent flooding in vertical to inclined pipes. *Exp. Heat Transfer*, 4:95–110, 1991.
- [74] S Wongwises. Two-phase countercurrent flow in a model of a pressurized water reactor hot leg. *Nuclear Engineering and Design*, 166:121–133, 1996.
- [75] Moisés Alberto Navarro. Study of countercurrent flow limitation in a horizontal pipe connected to an inclined one. *Nuclear Engineering and Design*, 235(10-12):1139–1148, 2005.
- [76] M Ghiaasiaan, S, E Turk, R, y I Abdel-Khalik, S. Countercurrent flow limitation in inclined channels with bends. *Nuclear Engineering and Design*, 152:379–388, 1994.
- [77] Takashi Futatsugi, Chihiro Yanagi, Michio Murase, Shigeo Hosokawa, y Akio Tomiyama. Countercurrent air-water flow in a scale-down model of a pressurizer surge line. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2012(1):174838, 2012.
- [78] Hyoung Tae Kim y Hee Cheon No. Assessment of relap5/mod3. 2.2 γ against flooding database in horizontal-to-inclined pipes. *Annals of Nuclear Energy*, 29(7):835–850, 2002.
- [79] S Al Issa y R Macian-Juan. Experimental investigation of countercurrent flow limitation (ccfl) in a large-diameter hot-leg geometry: A detailed description of ccfl mechanisms, flow patterns and high-quality hsc imaging of the interfacial structure in a 1/3.9 scale of pwr geometry. *Nuclear Engineering and Design*, 280:550–563, 2014.
- [80] Richard A Riemke. Countercurrent flow limitation model for relap5/mod3. *Nuclear technology*, 93(2):166–173, 1991.
- [81] AE Dukler y Leroy Smith. Two phase interactions in counter-current flow: studies of the flooding mechanism. annual report, november 1975–october 1977.[pwr]. Reporte técnico, Houston Univ., TX (USA). Dept. of Chemical Engineering, 1977.
- [82] S Cho, N Arne, BD Chung, y HJ Kim. Assessment of ccfl model of relap5/mod3 against simple vertical tubes and rod bundle tests. international agreement report. Reporte técnico, US Nuclear Regulatory Commission (NRC), Washington, DC (United States . . . , 1993.
- [83] X Li, L Gao, C Xu, T Wang, W Sun, W Zhu, L Zhang, Z Ma, L Zhu, y L Pan. Research on countercurrent flow limitation in reactor hot leg at the loss of coolant accident-thermohydraulic calculation with system code relap5. *Frontiers in Energy Research*, 10, 2022.
- [84] Xiang Li, Wan Sun, Shuhua Ding, Tao Huang, Zaiyong Ma, Luteng Zhang, Longxiang Zhu, y Liang-ming Pan. Analysis of relap5 prediction of countercurrent flow limitation in downcomer at upper plenum test facility. *Progress in Nuclear Energy*, 158:104608, 2023.
- [85] I Kinoshita, M Murase, y A Tomiyama. Numerical simulation of size effects on countercurrent flow limitation in pwr hot leg models. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2012, 2012.
- [86] Yury Egorov, Marc Boucker, Alain Martin, Sylvain Pigny, M Scheuerer, y S Willemsen. Validation of cfd codes with pts-relevant test cases. *5th Euratom Framework Programme ECORA project*, páginas 91–116, 2004.
- [87] Michio Murase, Akio Tomiyama, Dirk Lucas, Ikuo Kinoshita, Yoichi Utanohara, y Chihiro Yanagi. Correlation for countercurrent flow limitation in a pwr hot leg. *Journal of nuclear science and technology*, 49(4):

- 398–407, 2012.
- [88] Kumar Samal y Suman Ghosh. Characterization and prediction of flow-conditions in the hot-leg of pwr during loss of coolant accident. *Nuclear Engineering and Design*, 359:110446, 2020.
 - [89] Christophe Vallée, Deendarlianto, Matthias Beyer, Dirk Lucas, y Helmar Carl. Air/water counter-current flow experiments in a model of the hot leg of a pressurized water reactor. 2009.
 - [90] OpenFOAM Foundation. *OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox*. OpenFOAM Foundation, 2024. <https://www.openfoam.com/documentation/>.
 - [91] Richard A. Riemke, W.H. McMaster, J.A. Trapp, J.H. McFadden, R.J. Wagner, y J.L. Tills. RELAP5/MOD3 Code Manual Volume 1: Code Structure, System Models, and Solution Methods. Reporte Técnico NUREG/CR-5535, Vol. 1, Nuclear Regulatory Commission (NRC), 1995. <https://www.nrc.gov/reading-rm/doc-collections/nuregs/contract/cr5535/>.
 - [92] Bub Dong Chung, Kyung Doo Kim, Sung Won Bae, Jae Jun Jeong, Seung Wook Lee, Moon Kyu Hwang, y Churl Yoon. Mars code manual volume i: code structure, system models, and solution methods. Reporte técnico, Korea Atomic Energy Research Institute, 2010.
 - [93] John R Grace. Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 54:167–173, 1976.
 - [94] B. E. Launder, G. J. Reece, y W. Rodi. Progress in the development of a reynolds-stress turbulence closure. *Journal of Fluid Mechanics*, 68(3):537–566, April 1975. ISSN 1469-7645. doi: 10.1017/s0022112075001814.
 - [95] M. M. Gibson y B. E. Launder. Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 86(3):491–511, June 1978. ISSN 1469-7645. doi: 10.1017/s0022112078001251.
 - [96] Archibong Archibong-Eso, Jing Shi, Yahaya D Baba, Aliyu M Aliyu, Yusuf O Raji, y Hoi Yeung. High viscous oil–water two–phase flow: experiments & numerical simulations. *Heat and Mass Transfer*, 55(3): 755–767, 2019.
 - [97] Jing Shi, Mustapha Gourma, y Hoi Yeung. A cfd study on horizontal oil-water flow with high viscosity ratio. *Chemical Engineering Science*, 229:116097, 2021.
 - [98] Murray Rudman. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *International journal for numerical methods in fluids*, 24(7):671–691, 1997.
 - [99] Johan Roenby. isoadvector. En www.github.com/isoadvector, páginas 266–277. CIMNE, 2017.
 - [100] Henry G Weller, Gavin Tabor, Hrvoje Jasak, y Christer Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in physics*, 12(6):620–631, 1998.
 - [101] Hrvoje Jasak, Aleksandar Jemcov, Zeljko Tukovic, et al. Openfoam: A c++ library for complex physics simulations. En *International workshop on coupled methods in numerical dynamics*, volumen 1000, páginas 1–20. Dubrovnik, Croatia), 2007.
 - [102] Osborne Reynolds. Iv. on the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Philosophical transactions of the royal society of london.(a.)*, (186):123–164, 1895.
 - [103] Henry G Weller. Derivation, modelling and solution of the conditionally averaged two-phase flow equations. nabla ltd. *Derivation, Modelling and Solution of the Conditionally Averaged Two-Phase Flow Equations*. Nabla Ltd, 2, 2002.
 - [104] Akio Tomiyama, Hidesada Tamai, Iztok Zun, y Shigeo Hosokawa. Transverse migration of single bubbles in simple shear flows. *Chemical Engineering Science*, 57(11):1849–1858, 2002.
 - [105] Thomas Frank. Advances in computational fluid dynamics (cfd) of 3-dimensional gas-liquid multiphase flows. En *NAFEMS Seminar: Simulation of Complex Flows (CFD)–Applications and Trends, Wiesbaden, Germany, Citepeer*, páginas 1–18, 2005.
 - [106] Alan D Burns, Thomas Frank, Ian Hamill, Jun-Mei Shi, et al. The favre averaged drag model for turbulent dispersion in eulerian multi-phase flows. En *5th international conference on multiphase flow, ICMF*, volumen 4, páginas 1–17. ICMF, 2004.
 - [107] Salih Sarı, Şule Ergün, Muhammet Barık, Cemil Kocar, y Cemal Niyazi Sökmen. Modeling of isothermal bubbly flow with interfacial area transport equation and bubble number density approach. *Annals of Nuclear Energy*, 36(2):222–232, 2009.
 - [108] Y Sato, M Sadatomi, y K Sekoguchi. Momentum and heat transfer in two-phase bubble flow—i. theory. *International Journal of Multiphase Flow*, 7(2):167–177, 1981.
 - [109] Jeremy D Bricker, Hiroshi Takagi, y Jun Mitsui. Turbulence model effects on vof analysis of breakwater overtopping during the 2011 great east japan tsunami. En *Proceedings of the 2013 IAHR World Congress*, volumen 10153, 2013.

- [110] Adrian M Shuard, Hisham B Mahmud, y Andrew J King. Comparison of two-phase pipe flow in openfoam with a mechanistic model. En *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, volumen 121, página 012018. IOP Publishing, 2016.
- [111] F. R. Menter. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA Journal*, 32(8):1598–1605, August 1994. ISSN 1533-385X. doi: 10.2514/3.12149.
- [112] R Menter, F, M Kuntz, y R Langtry. Ten years of industrial experience with the sst turbulence model. *Turbulence, Heat and Mass Transfer* 4, 2003.
- [113] Antti Hellsten. Some improvements in menter's k-omega sst turbulence model. En *29th AIAA, Fluid Dynamics Conference*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, June 1998. doi: 10.2514/6.1998-2554.
- [114] JM Putney. Development of a new bubbly-slug interfacial friction model for relap5. *Nuclear engineering and design*, 131(2):223–240, 1991.
- [115] SS Kutateladze. Elements of the hydrodynamics of gas-liquid system. *Fluid Mech. Siviety-Res.*, 1:29, 1962.
- [116] SG Bankoff, RS Tankin, MC Yuen, y CL Hsieh. Countercurrent flow of air/water and steam/water through a horizontal perforated plate. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24(8):1381–1395, 1981.
- [117] J. Fabre, C. Suzanne, y Lucien Masbernat. Experimental data set no. 7: Stratified flow, part i: Local structure. *Multiphase Science and Technology*, 3(1–4):285–301, 1987. ISSN 0276-1459. doi: 10.1615/multscientechn.v3.i1-4.120.
- [118] H. Lomax, Thomas H. Pulliam, y David W. Zingg. *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, 2001. ISBN 9783662046548. doi: 10.1007/978-3-662-04654-8.
- [119] R. Krishnamurthy A. S.-L. Shieh y V. H. Ransom. Stability, accuracy, and convergence of the numerical methods in relap5/mod3. *Nuclear Science and Engineering*, 116(4):227–244, 1994. doi: 10.13182/NSE94-A18984.
- [120] *Flow of Fluids Through Valves, Fittings, and Pipe*. Crane Co., New York, N.Y., USA, 1982. Technical Paper No. 410M.
- [121] Autoridad Regulatoria Nuclear ARN y Alberto Cassano. Modelo de la central nuclear embalse con relap5: Aplicación para un disparo de turbina.
- [122] Santiago F Corzo, Alejandro I Lazarte, y Damian E Ramajo. High-temperature creep deformation evaluation in candu pressure tubes under a station black-out. *Nuclear Engineering and Design*, 382:111370, 2021.
- [123] Lukasz Sokolowski y Tomasz Kozlowski. Assessment of two-phase critical models performance in relap5 and trace against marviken critical flow test. *Transactions of the American Nuclear Society*, 102:655–657, 2010.
- [124] Michal Kaminski y Aya Diab. Time-series forecasting of a typical pwr undergoing large break loca. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2024(1):6162232, 2024.
- [125] Daniel Dupleac, Mirea Mladin, y Ilie Prisecaru. Generic candu 6 plant severe accident analysis employing scapsim/relap5 code. *Nuclear Engineering and Design*, 239(10):2093–2103, 2009.
- [126] PJ Ingham, GR McGee, y VS Krishnan. Loca assessment experiments in a full-elevation, candu-typical test facility. *Nuclear Engineering and Design*, 122(1-3):401–412, 1990.
- [127] David C Wilcox. Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models. *AIAA journal*, 26(11):1299–1310, 1988.
- [128] DC Wilcox. Turbulence modeling for cfd. *DCW industries, La Canada*, 1998.
- [129] Luka Štrubelj, Borut Mavko, y Iztok Tiselj. *Numerical simulations of stratified two-phase flows with two-fluid model and interface sharpening: doctoral thesis: doktorska disertacija*. L. Štrubelj, 2009.
- [130] Samir Muzaferija y David Gosman. Finite-volume cfd procedure and adaptive error control strategy for grids of arbitrary topology. *Journal of computational physics*, 138(2):766–787, 1997.
- [131] Lewis Fry Richardson y Peter Lynch. *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, August 2007. ISBN 9780511618291. doi: 10.1017/cbo9780511618291.
- [132] Stephen B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, August 2000. ISBN 9780511840531. doi: 10.1017/cbo9780511840531.
- [133] William C. Reynolds y Moon J. Lee. *The Structure of Homogeneous Turbulence*, páginas 231–261. Springer New York, 1985. ISBN 9781461210924. doi: 10.1007/978-1-4612-1092-4_10.
- [134] M.C. Potter, D.C. Wiggert, y B.H. Ramadan. *Mechanics of Fluids*. Cengage Learning, 2016. ISBN 9781305887695. URL <https://books.google.com.ar/books?id=U3gcCgAAQBAJ>.
- [135] Vinesh Gada, Pranav Punde, Mohit P Tandon, y Roman Vikulov. Role of turbulence damping at the gas-liquid interface. En *Proceedings of the 9th International Conference on Multiphase Flow, Firenze, Italy*, páginas 22–27, 2016.

- [136] Vinesh H. Gada, Mohit P. Tandon, Jebin Elias, Roman Vikulov, y Simon Lo. A large scale interface multi-fluid model for simulating multiphase flows. *Applied Mathematical Modelling*, 44:189–204, April 2017. ISSN 0307-904X. doi: 10.1016/j.apm.2017.02.030.
- [137] M Gargallo, T Schulenberg, L Meyer, y E Laurien. Counter-current flow limitations during hot leg injection in pressurized water reactors. *Nuclear Engineering and Design*, 235(7):785–804, 2005.
- [138] Christophe Vallée, Dirk Lucas, Matthias Beyer, Heiko Pietruske, Helmar Carl, et al. Experimental study on the air/water counter-current flow limitation in a model of the hot leg of a pressurized water reactor. *Nuclear Engineering and Design*, 238(12):3389–3402, 2008.
- [139] D Bharathan y GB Wallis. Air-water countercurrent annular flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 9(4):349–366, 1983.
- [140] Seong-Su Jeon, Ji-Han Chun, y Goon-Cherl Park. Mars code assessment for the ccfl in the nearly horizontal pipe. En *Transactions of the Korean Nuclear Society Autumn Meeting*, páginas 579–, Gyeongju, Korea, October 2009. Korean Nuclear Society.
- [141] H Jasak. Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows. En *Imperial College, London, PhD thesis*, 1996.
- [142] Suleiman Al Issa y Rafael Macian-Juan. Droplets entrainment ratio in a pwr hot-leg pipe geometry. *Nuclear Engineering and Design*, 330:1–13, 2018.
- [143] Noritoshi Minami, Michio Murase, y Akio Tomiyama. Countercurrent gas-liquid flow in a pwr hot leg under reflux cooling (ii) numerical simulation of 1/15-scale air-water tests. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 47(2):149–155, 2010.
- [144] Jun-young Kang, Dong Gun Son, Yong Mann Song, Jong Yeob Jung, y Jun Ho Bae. Influence of the loca break size at failure time of candu fuel channel. 2021.
- [145] Seon Oh Yu y KIM Manwoong. Effect of multiple-failure events on accident management strategy for candu-6 reactors. *Nuclear Engineering and Technology*, 53(10):3236–3246, 2021.
- [146] John C Luxat. Thermal-hydraulic aspects of progression to severe accidents in candu reactors. *Nuclear technology*, 167(1):187–210, 2009.
- [147] *Accident Analysis for Nuclear Power Plants*. Número 23 en Safety Reports Series. INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, Vienna, 2002. ISBN 92-0-115602-2.
- [148] RP Martin. Relap5 thermal-hydraulic analysis of the wnp1 pressurized water reactor. Reporte técnico, Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC (USA). Div. of Systems . . . , 1991.
- [149] C. M. Kullberg. RELAP5 thermal-hydraulic analysis of the SNUPPS pressurized water reactor. Nureg/cr-5557; egg-2599, Idaho National Engineering Laboratory, EG&G Idaho, Inc., Idaho Falls, ID, 1990. Prepared for the U.S. Nuclear Regulatory Commission.
- [150] Andrej Prošek. Relap5 simulation of total loss of feedwater in two-loop pwr. Nureg/ia-0536, U.S. Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC, February 2023. Prepared by Andrej Prošek (Jožef Stefan Institute) under the Agreement on Research Participation and Technical Exchange (CAMP).
- [151] Lin Sun, Xuesong Wang, Jun Wang, Meiru Liu, y Genglei Xia. Relap5 foresight thermal-hydraulic analysis of hypothesis passive safety injection system under loca for an existing npp in china. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2020(1):8844910, 2020.
- [152] AK Trivedi y DR Novog. Bepu analysis of a candu lbloca rd-14m experiment using relap/scdapsim. *Nuclear Engineering and Technology*, 55(4):1448–1459, 2023.
- [153] IAEA Tecdoc. 1727-benchmarking severe accident computer codes for heavy water reactor applications. *International Atomic Energy Agency (IAEA)*, 2013.
- [154] CANTEACH. Canteach - candu teaching and training, 2024. URL <https://canteach.candu.org>. Accessed: March 1, 2025.

Doctorado en Ingeniería
Mención mecánica computacional

Título de la obra:

**Simulación Computacional del flujo
multifásico agua-vapor ante la inundación
de emergencia del núcleo de reactores
nucleares**

Autor: Alirio Johan Sarache Piña

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

Mecánica computacional, flujo multifásico,
modelo de dos fluidos, volumen de fluido,
flujo segregado, código de sistemas,
flujo a co-corriente, flujo a contra-corriente,
formulación de densidad variable, rama caliente,
modelos de turbulencia en dos fluidos, CFD.