



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física

**Dinámica de partículas en turbulencia anisótropa y no estacionaria:
del análisis fundamental a las aplicaciones geofísicas**

Tesis presentada para optar al título de Doctora
de la Universidad de Buenos Aires en el área Ciencias Físicas

Lic. Florencia Natalia Zapata

Director: Dr. Pablo Mininni

Consejera de Estudios: Dra. Silvina Ponce Dawson

Lugar de trabajo: Instituto de Física Interdisciplinaria y Aplicada (INFINA), UBA - CONICET

Buenos Aires, Argentina - 3 de Noviembre de 2025

*La dignidad y el carácter no se venden en los supermercados
y no se aprenden en la universidad. Son de nacimiento.
Y a mi me sobran y no renuncio a ellos.
Son mi patrimonio.*

Lula Da Silva

Dinámica de partículas en turbulencia anisótropa y no estacionaria: del análisis fundamental a las aplicaciones geofísicas

Resumen

La turbulencia multifase está presente en numerosos sistemas naturales y tecnológicos. Procesos como la formación de nubes, la dispersión de contaminantes, la actividad eléctrica en columnas volcánicas y el transporte de material en la atmósfera son manifestaciones de una misma problemática: la dinámica de partículas inmersas en flujos turbulentos. En estos sistemas, el acoplamiento entre las partículas y el flujo regula procesos como la iniciación de la lluvia, el transporte de aerosoles y la electrificación. Si bien la comunidad ha desarrollado un entendimiento profundo de la turbulencia isotrópica y homogénea (HIT), los sistemas reales suelen presentar anisotropías e inhomogeneidades; además, la turbulencia se acopla con otros procesos físicos, como la estratificación o las transiciones de fase, y los forzados varían en el tiempo y generan estructuras coherentes, introduciendo no estacionariedad, cuyos efectos a menudo se pasan por alto.

Cuando las partículas poseen inercia, su tiempo de respuesta filtra las fluctuaciones más rápidas del flujo y condiciona su organización espacial. De esta interacción emerge un fenómeno fundamental: la acumulación preferencial. Lejos de distribuirse homogéneamente, las partículas se concentran en regiones específicas del flujo, lo que altera las tasas de colisión y afecta procesos como la sedimentación y las transiciones de fase. Este fenómeno ha sido caracterizado en turbulencia isotrópica y homogénea (HIT) pero en condiciones más realistas, con anisotropía, inhomogeneidad o no estacionariedad, su comprensión sigue siendo más limitada.

Esta tesis estudia cómo las desviaciones de HIT que se observan en la naturaleza afectan la distribución espacial y temporal de partículas inerciales. Mediante simulaciones numéricas directas, contrastadas con datos experimentales y mediciones *in situ*, se realizaron estudios en HIT y en flujos progresivamente más realistas, introduciendo y aislando rupturas de simetría espaciales y temporales. Se analizaron simulaciones del flujo de Taylor-Green (TG) y datos de su análogo experimental, el flujo de von Kármán (VK), ambos con anisotropía e inhomogeneidad espaciales. También se estudiaron flujos no estacionarios: uno con forzado estacionario pero con intensidad turbulenta que oscila de manera espontánea (CRC), y otro en el que se modula temporalmente la energía del sistema a través de la amplitud del forzado (mHIT). La dinámica de millones de partículas se modela en estos flujos mediante un modelo efectivo mínimo, y su organización espacial se cuantifica principalmente con teselados de Voronoi tridimensionales, comparados contra una referencia aleatoria, junto con otras herramientas adaptadas a la geometría del dominio. Los datos experimentales, además de validar el modelo, permitieron analizar sesgos como el número de partículas, las condiciones de contorno y el muestreo preferencial a gran escala

mediante comparaciones entre TG y VK. En los flujos no estacionarios se observan episodios de acumulación extrema, lo que evidencia que los promedios temporales pueden subestimar las tasas de encuentro y de colisión de partículas. Finalmente, se emplea este marco en un caso geofísico: se presenta un modelo de pluma volcánica húmeda en un flujo con estratificación estable que permite tratar de manera independiente la humedad de la atmósfera subyacente y la de la fuente. Con el aumento de la humedad se observa un aumento de la altura de la nube, así como una reorganización de las estructuras turbulentas que correlacionan espacialmente con zonas de alta densidad de partículas, con implicancias directas en las tasas de colisión y en posibles mecanismos de electrificación.

En esta tesis se presentan herramientas robustas para cuantificar la organización espacial de partículas en flujos multifase reales, se incorpora una evaluación sistemática de sesgos experimentales, se demuestra que la no estacionariedad es una fuente de acumulación extrema con impacto directo en las estimaciones de tasas de colisión y se caracteriza cómo la anisotropía y la inhomogeneidad modulan la topología del flujo y del agrupamiento de partículas. Los resultados constituyen un aporte original al entendimiento del papel que desempeñan la estructura y la evolución de la turbulencia en el comportamiento de partículas inerciales, y ofrecen un marco para interpretar observaciones in situ de flujos turbulentos reales y orientar modelos más detallados.

***Palabras clave:** turbulencia; flujos multifase; partículas; simulaciones numéricas directas; clustering; acumulación preferencial; electrificación.*

Particle dynamics in anisotropic and unsteady turbulence: from fundamental analysis to geophysical applications

Abstract

Multiphase turbulence is present in numerous natural and industrial systems. Processes such as cloud formation, pollutant dispersion, electrical activity in volcanic plumes, and the transport of mass and particles in the atmosphere are manifestations of the same overarching problem: the dynamics of particles immersed in turbulent flows. In these systems, coupling between particles and the flow regulates processes such as the initiation of rainfall, the transport of aerosols, and electrification. Although the community has developed a deep understanding of homogeneous and isotropic turbulence (HIT), real systems typically exhibit anisotropy and inhomogeneity; moreover, turbulence couples with other physical processes, such as stratification or phase transitions, and the forcing varies in time and generates coherent structures, introducing nonstationarity whose effects are often overlooked.

When particles have inertia, their response time filters out the fastest flow fluctuations and conditions their spatial organization. A fundamental phenomenon emerges from this interaction: preferential concentration. Rather than being uniformly distributed, particles concentrate in specific regions of the flow, altering collision rates and affecting processes such as sedimentation and phase transitions. This phenomenon has been characterized in HIT, but under more realistic conditions featuring anisotropy, inhomogeneity, or nonstationarity, its understanding remains more limited.

This thesis investigates how deviations from HIT observed in nature affect the spatial and temporal distribution of inertial particles. Using direct numerical simulations, contrasted with experimental data and in situ measurements, we conducted studies in HIT and in progressively more realistic flows, introducing and isolating spatial and temporal symmetry breakings. We analyzed simulations of the Taylor-Green (TG) flow and data from its experimental analogue, the von Kármán (VK) flow, both exhibiting spatial anisotropy and inhomogeneity. We also examined nonstationary flows: one with stationary forcing but with turbulent intensity that oscillates spontaneously (CRC), and another in which the systems energy is modulated in time through the forcing amplitude (mHIT). The dynamics of millions of particles in these flows are modeled with a minimal effective model, and their spatial organization is quantified primarily with three-dimensional Voronoi tessellations, compared against a random reference, together with other tools adapted to the domain geometry. Beyond validating the model, the experimental data enabled an analysis of biases related to the particle number, boundary conditions, and large-scale preferential sampling through comparisons between TG and VK. In the nonstationary flows we observe episodes of extreme accumulation, showing that time averages can underestimate encounter and collision rates of particles. Finally, this framework is applied to a geophysical case: we present

a model of a moist volcanic plume in a stably stratified flow that treats the humidity of the background atmosphere and that of the source independently. We observe an increase in plume height with increasing water content, as well as a reorganization of turbulent structures that are spatially correlated with regions of high particle number density, with direct implications for collision rates and possible electrification mechanisms.

This thesis presents robust tools to quantify the spatial organization of particles in real multiphase flows, incorporates a systematic assessment of experimental biases, demonstrates that nonstationarity is a source of extreme accumulation with a direct impact on collision-rate estimates, and characterizes how anisotropy and inhomogeneity modulate the topology of both the flow and particle clustering. The results constitute an original contribution to understanding the role played by the structure and temporal evolution of turbulence in the behavior of inertial particles, and offer a framework for interpreting in situ observations of real turbulent flows and for guiding more detailed models.

***Key words:** particle-laden flows; multiphase flows; particle clustering; direct numerical simulations; preferential concentration; electrification.*

Agradecimientos

Este camino ha sido, para quien escribe esta tesis, toda una novedad. Inesperado, fortuito, atravesado por las condiciones externas e internas y, por sobre todo y en completa concordancia con el tema de estudio de esta tesis, altamente no lineal. Llegar al otro lado requirió mucho esfuerzo y quiero tomarme este espacio para reconocer a las personas que lo hicieron posible.

A mis padres, Daniel y Silvia, por el espacio en el sentido más amplio de la palabra. El espacio para la curiosidad, para dejarme ser y para aceptarme así, aunque esto que soy nos lleve a pasar más tiempo separados. A mi familia toda, por su amor incondicional.

A mis hermanas, Lucía, Yamila, Bianca y Constanza, por ser mi remanso. A la pequeña Valentina por devolverme la risa.

A mis compañeros de trabajo, que se convirtieron en mis amigos a fuerza de cafés y charlas infinitas. A todo el FLIP, por ser tan increíble y haberse transformado en mi Familia académica. A Martín Obligado y a Sofía Angriman, a quienes cuento dentro de esta familia.

A Muri y a Lucas, por su apoyo ineludible, su infinita capacidad de escucha y su empatía. A Muri, en particular, por ser mi refugio. A Nati, por estar desde que empezó todo y a través de todo. A Tomi y a Mati, por ser los mejores vecinos que me podían tocar. A Nico y a Tom, por su humor y su música, que me recordaron que la vida era divertida cuando más lo necesitaba.

A Christian, por su confianza en mí y su compañerismo, también por su calma y firmeza. Tu presencia hizo de este trayecto algo indescriptible. Ojalá te tenga siempre a un brazo de distancia.

A mi director, por enseñarme mucho más que solo a investigar. O quizás por enseñarme verdaderamente lo que significa hacer ciencia. Gracias, Pablo, por la libertad, por el humor, por la accesibilidad, por tu honestidad y por el lugar para mi propia honestidad. Más aún, por ser la persona, además de mis padres, que más esfuerzo puso en animarme a olvidar mis inseguridades, transformar mis debilidades en fortalezas y elegir mi propio camino. Cuando empezamos a trabajar juntos, el contexto era muy, muy difícil; las cosas mejoraron, empeoraron, volvieron a mejorar y empeoraron de nuevo. Gracias por enseñarme a seguir adelante y a usar mis sueños de motor. Pero, por sobre todas las cosas, por haberme llevado a conocer *todo* Tokio en un día.

A la Universidad de Buenos Aires, a la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y al Departamento de Física. En realidad, a las personas que aman estas instituciones y dan su vida para mantenerlas en lo más alto. Estos 10 años han sido un enorme privilegio para mí.

Índice general

Resumen	v
Abstract	vii
1. Introducción	1
2. Contexto y métodos	5
2.1. Fenomenología de la turbulencia	5
2.1.1. Ecuaciones de fluidos	5
2.1.2. Características generales del fenómeno	6
2.1.3. Cascada de energía y escalas en un flujo turbulento	7
2.1.4. Intermitencia y eventos extremos	10
2.2. Partículas en flujos turbulentos	10
2.2.1. La ecuación de Maxey-Riley-Gatignol	11
2.2.2. Características generales de las partículas de tamaño finito	12
2.3. Mecanismos de acumulación preferencial en HIT	13
2.3.1. Mecanismos dependientes de la escala	15
2.3.2. Intensidad de <i>clustering</i>	15
2.4. Simulaciones numéricas y algo más	16
2.4.1. El desafío	16
2.4.2. Resolverlo todo: cómo y cuánto cuesta	17
2.4.3. Geophysical High-Order Suit for Turbulence (GHOST)	19
3. Flujos anisótropos e inhomogéneos	21
3.1. Simulaciones y experimentos	22
3.1.1. Turbulencia isotropa y homogénea y el flujo de Taylor Green	22
3.1.2. El experimento de Von-Karman	25
3.1.3. El tamaño de las partículas	26
3.2. Topología de los flujos anisótropos y acumulación	28
3.3. Limitaciones experimentales	28
3.4. Efecto de la inhomogeneidad a gran escala	31
3.5. Estudio de los cúmulos	32
3.6. Otros modelos de partículas	34
3.7. Discusión	35
4. Flujos no estacionarios	37
4.1. Turbulencia no estacionaria	38
4.2. Receta para la no-estacionariedad espontánea: flujo CRC	38
4.3. Acumulación preferencial en CRC	40
4.4. Acumulación preferencial en turbulencia isotropa, homogénea, y no estacionaria (mHIT)	44
4.5. Modelo de Stokes relativo	46
4.6. Discusión	47

5. Turbulencia multifase en nubes volcánicas	49
5.1. Erupciones y nubes volcánicas	50
5.1.1. La erupcion de Hunga Tonga - Hunga Haápai de 2022	50
5.1.2. Mecanismos de generación de tormentas eléctricas volcánicas	51
5.1.3. La dinámica de la pluma volcánica	52
5.1.4. Un estudio numérico en atmósfera seca	52
5.1.5. Humedad ambiente como resultado de las erupciones de HTHH	53
5.2. Modelo de humedad y fuentes	55
5.2.1. Modelo atmosférico de convección con humedad	55
5.2.2. Modelo de partículas	57
5.3. Parámetros dimensionales	57
5.3.1. Valores atmosféricos	57
5.3.2. Viscosidad cinemática y difusividad	59
5.3.3. Parámetros de las partículas	59
5.3.4. Fuentes de humedad y de energía	60
5.4. Simulaciones numéricas	60
5.5. Acumulacion preferencial y colisiones	61
5.6. Discusión	68
6. Conclusiones	71
Bibliografía	75

Capítulo 1

Introducción

Cuando un volcán erupciona, una gran cantidad de fluido caliente cargado con millones de partículas de distintos materiales entra a toda velocidad en la atmósfera. Si la erupción es lo suficientemente intensa, por encima del volcán se forma una nube en forma de hongo que se extiende por varios kilómetros en altura y en la dirección radial. Esta nube no es simplemente humo: es una mezcla de gases, como vapor de agua, cenizas y otros piroclastos, con un amplio rango de tamaños y densidades, que da lugar a un flujo multifase turbulento con impactos significativos en el ambiente. La fase portadora (gaseosa) reorganiza y transporta la fase dispersa (partículas) a través de remolinos en múltiples escalas, que modifican dónde se concentran, cuánto ascienden o se depositan y con qué frecuencia colisionan. Algo similar ocurre cuando se tose: se emite una bocanada turbulenta cálida que envuelve microgotas respiratorias con una distribución de tamaños de partículas. La mezcla, la flotabilidad y la evaporación dentro de esa bocanada prolongan su alcance y afectan la dispersión y el riesgo de transmisión de enfermedades. En ambos ejemplos, la clave es la misma: la interacción entre las partículas y el fluido portador está mediada por la turbulencia (Bourouiba 2020; Ichihara y col. 2023).

La turbulencia gobierna procesos de transporte en una variedad de contextos geofísicos e industriales. En la atmósfera, el acoplamiento entre partículas y flujos turbulentos determina procesos clave como la iniciación de la precipitación, el transporte de aerosoles y contaminantes, y la electrificación en tormentas. En medios oceánicos, la turbulencia regula la suspensión y sedimentación de partículas minerales y biológicas, influyendo en la dinámica del fitoplancton y los ciclos de nutrientes. Estas interacciones también son críticas en procesos industriales como la combustión, el secado por spray y en los reactores multifase, así como en fenómenos astrofísicos como la formación de planetas en discos protoplanetarios. Comprender cómo la turbulencia modula el transporte y la organización espacial de partículas sigue siendo uno de los desafíos más importantes de la física contemporánea (Toschi y Bodenschatz 2009).

Por su naturaleza caótica, la turbulencia se ha abordado tradicionalmente mediante modelos simplificados. Entre ellos, la turbulencia isótropa y homogénea (HIT) constituye la piedra angular del estudio teórico. En este marco se postulan dos simetrías espaciales: **homogeneidad**, que refiere a la invarianza estadística ante traslaciones, e **isotropía**, que implica la invarianza ante rotaciones. Cuando el flujo es forzado de manera estacionaria, también se asume **estacionariedad estadística**. Fuera de este escenario, la dependencia temporal clásica estudiada es la del decaimiento libre del flujo turbulento. Estas idealizaciones facilitan el análisis y han conducido a resultados fundamentales, como la ley de los 4/5 de Kolmogórov (Davidson 2015). A partir de HIT se han desarrollado modelos y herramientas ampliamente utilizados. Constituye un escenario de referencia para simulaciones numéricas, un punto de comparación para experimentos de laboratorio y una base conceptual para el desarrollo de teorías fenomenológicas (Pope 2000; Ishihara y col. 2009). No obstante, este grado de idealización es también su principal limitación: en la naturaleza, los flujos rara vez son isótropos, homogéneos o estacionarios. Además, muchos sistemas presentan acoplamientos fuertes con otros procesos físicos, como gradientes de humedad, forzados direccionales o transiciones de fase, que alteran de manera significativa las escalas relevantes y la dinámica

local. En tales escenarios, las hipótesis subyacentes dejan de cumplirse y los modelos derivados de HIT resultan insuficientes para predecir con precisión observables clave. Por ello, es fundamental desentrañar cómo interactúan estas complejidades para desarrollar modelos efectivos capaces de describir sistemas realistas con consecuencias directas para la sociedad.

Un fenómeno central en los flujos multifase es la acumulación preferencial (*clustering*). Lejos de distribuirse homogéneamente, las partículas inerciales forman cúmulos y vacíos en múltiples escalas. Este comportamiento se ha observado ampliamente tanto en simulaciones numéricas (Obligado y col. 2014) como en experimentos en túneles de viento (Aliseda y col. 2002), y su comprensión es crucial no solo desde el punto de vista fundamental, sino también por su impacto en aplicaciones como las mencionadas anteriormente. Este fenómeno se debe a la diferencia entre la inercia de las partículas y la de las parcelas de fluido, de modo que las partículas solo pueden seguir parcialmente al flujo y tienden a acumularse en ciertas regiones del fluido.

En HIT, la formación de cúmulos se ha explicado mediante distintos mecanismos. El más comúnmente invocado se basa en la expulsión centrífuga de partículas pesadas fuera de los remolinos turbulentos, lo que las concentra en regiones de baja vorticidad del flujo (Coleman y Vassilicos 2009). Modelos alternativos, como el mecanismo de *sweep-stick* propuesto en Goto y Vassilicos 2008, ofrecen una interpretación complementaria: en este escenario, las partículas tienden a adherirse a regiones del flujo con aceleración nula, siendo luego transportadas conjuntamente con dichas estructuras. Esta dinámica puede describirse adecuadamente mediante modelos de partículas puntuales en los que se conserva únicamente el término de arrastre en la ecuación de Maxey-Riley-Gatignol (Brandt y Coletti 2022; Maxey y Riley 1983; Gatignol 1983).

En términos generales, la acumulación preferencial desempeña un papel crucial en la cuantificación precisa de colisiones, coalescencia de partículas, eventos de fragmentación y transiciones de fase en flujos con partículas (Mordant y col. 2001; Saito y Gotoh 2018; Reartes y Mininni 2021), ya que la distribución inhomogénea de las partículas altera su camino libre medio efectivo y, en consecuencia, su tasa de colisión. Se ha propuesto que esta acumulación localizada podría intensificar colectivamente la velocidad de sedimentación de las partículas en presencia de gravedad, debido al reforzamiento estadístico de la caída en regiones de alta concentración (Aliseda y col. 2002). También tiene un impacto significativo en problemas biológicos, como la cuantificación de la tasa de contacto mutuo entre diferentes especies de microorganismos marinos en el océano (Pietro y col. 2014; Del Grosso y col. 2019). Aunque estos mecanismos han sido extensamente estudiados en configuraciones ideales, su comprensión en contextos realistas, donde prevalecen la anisotropía, la no estacionariedad y el acoplamiento con otros procesos físicos, permanece incompleta.

En sistemas reales, como la atmósfera o las columnas volcánicas, la turbulencia es típicamente anisótropa, forzada de manera transitoria e intermitente en el espacio, lo que introduce nuevas complejidades en la dinámica de partículas. Existe evidencia creciente de que, en presencia de no estacionariedad, cantidades relevantes como la tasa de colisiones pueden variar significativamente respecto de los valores predichos en condiciones ideales (Zapata y col. 2024), y estos escenarios dominan en sistemas naturales. En nubes convectivas, donde el flujo presenta anisotropía vertical, estratificación y evolución temporal rápida, se ha propuesto que el *clustering* de gotas inducido por aceleraciones turbulentas microscópicas puede contribuir a resolver el problema de la iniciación de la lluvia, ya que incrementa localmente la tasa de colisiones más allá de lo que predicen los modelos cinéticos clásicos (Shaw 2003). En el contexto de columnas volcánicas, donde coexisten partículas sólidas de múltiples tamaños y un entorno estratificado, se ha mostrado que el *clustering* favorece colisiones diferenciales que resultan en triboelectrificación intensa. Estudios recientes indican que este proceso puede generar regiones de carga espacialmente segregada, dando lugar a descargas eléctricas y a estructuras observables como anillos de rayos alrededor de la fuente volcánica (Méndez Harper y col. 2021; Ichihara y col. 2023). Entre la alta tropósfera y la baja estratósfera, donde la turbulencia de aire claro se manifiesta en forma de ráfagas localizadas en el espacio y en el tiempo, se ha observado que la estructura intermitente del flujo, debida a ondas de montaña o a inestabilidades en zonas de fuerte cizalla, produce regiones finamente estratificadas donde el transporte vertical de partículas se ve intensamente modulado (Marino y col. 2022; Rodríguez Imazio y col. 2023). En todos estos casos, la interacción entre partículas y turbulencia está gobernada por escalas espaciales y temporales que no son capturadas por los modelos estándar,

lo que hace indispensable desarrollar enfoques que incorporen explícitamente la anisotropía, la intermitencia y la evolución temporal del flujo. Comprender cómo estas condiciones afectan la acumulación de partículas es clave para mejorar nuestras estimaciones de tasas de colisión, crecimiento, carga o dispersión en una amplia gama de fenómenos atmosféricos, volcánicos e industriales.

Esta tesis parte de la hipótesis de que fenómenos como la no estacionariedad, la inhomogeneidad y la anisotropía en los flujos observados en la naturaleza afectan fuertemente la dinámica y el transporte de material particulado, en formas diferentes a las predichas por la teoría de turbulencia isotropa y homogénea. Como resultado, el objetivo general de esta tesis es entender cómo afectan las desviaciones de la turbulencia isotropa y homogénea a la dinámica de partículas en flujos multifase. En particular, buscamos comprender cómo los mecanismos de acumulación de partículas se ven alterados por la ruptura de las hipótesis clásicas de isotropía, homogeneidad y estacionariedad en configuraciones realistas y relevantes para flujos geofísicos. Con este objetivo, la tesis se organiza siguiendo una progresión desde configuraciones idealizadas hacia escenarios más realistas. En el Capítulo 2 se presenta un repaso bibliográfico del estado del arte en el estudio de la turbulencia y de flujos con material particulado, junto con las herramientas y metodologías que se usarán en el resto de la tesis. En el Capítulo 3 comenzamos estudiando la acumulación de partículas en HIT, lo que permite caracterizar en detalle los mecanismos fundamentales del fenómeno en un sistema bien comprendido y controlado, para luego introducir anisotropía mediante el estudio del flujo de Taylor-Green en simulaciones numéricas, y resultados experimentales del flujo de von Kármán, casos aproximadamente estacionarios pero con estructuras coherentes y flujo medio que rompen la simetría espacial. En el Capítulo 4 estudiamos cómo varía la acumulación de partículas en el tiempo en flujos turbulentos no estacionarios, como el flujo CRC (por “*counter-rotating columns*”), generado mediante un forzado independiente del tiempo pero cuyo nivel de turbulencia oscila de manera espontánea y es anisótropo espacialmente, y el flujo mHIT, en el que la turbulencia se modula temporalmente mediante la modulación de la amplitud del forzado. En el Capítulo 5 aplicamos lo aprendido al desarrollo de un modelo de pluma volcánica húmeda en una atmósfera establemente estratificada, en el que se puede controlar de manera independiente la humedad ambiental y la proveniente de la fuente. Esta distinción resulta esencial, ya que las condiciones atmosféricas pueden variar ampliamente entre erupciones, y muchos volcanes activos, como el Hunga Tonga-Hunga Ha’apai, caso de estudio de referencia en esta tesis, se encuentran en entornos marinos o sumergidos. Esta herramienta permite investigar cómo distintos niveles de humedad afectan la dinámica del flujo y el comportamiento de las partículas. Finalmente, en el Capítulo 6 se resumen las conclusiones de esta tesis.

Capítulo 2

Contexto y métodos

En este capítulo se presenta el fenómeno de la turbulencia con una sola fase y multifase desde un punto de vista fenomenológico. Se presentan las ecuaciones que rigen el movimiento de fluidos turbulentos y de partículas arrastradas por ellos, con énfasis en el fenómeno de acumulación preferencial. Luego, se introducen las herramientas principales que se utilizarán en los capítulos siguientes y se revisan los resultados importantes obtenidos por la comunidad científica, tanto en experimentos como en simulaciones numéricas. El objetivo es tomar estos resultados como punto de partida para construir una descripción del fenómeno de la turbulencia con material particulado en situaciones que se alejen de las hipótesis idealizadas usadas comúnmente, en lo que a lo largo de esta tesis llamaremos turbulencia “real” en contraposición al caso idealizado.

2.1. Fenomenología de la turbulencia

2.1.1. Ecuaciones de fluidos

La dinámica de fluidos neutros e incompresibles está gobernada por la ecuación de Navier-Stokes (NS),

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{u}$ es el campo de velocidades del fluido con divergencia nula, P es la presión, $\mathbf{f}$ es la fuerza externa volumétrica, ρ es la densidad y ν es la viscosidad cinemática. Salvo indicación contraria, tanto ρ como ν se consideran constantes y uniformes.

Al escribir la Ec. (2.1) en forma adimensional, dadas una longitud característica L y una velocidad característica U , se obtiene que el único parámetro que controla la dinámica es el número de Reynolds:

$$\text{Re} = \frac{UL}{\nu}, \quad (2.2)$$

que cuantifica la importancia relativa entre el término advectivo no lineal y la disipación viscosa. Este número determina el régimen del flujo: los elementos de fluido tienden a ganar energía cinética siguiendo inercialmente el campo de velocidades, pero el movimiento relativo entre ellos genera fricción interna que disipa energía. En este sentido, el número de Reynolds mide la intensidad de las fuerzas inerciales respecto de la viscosa.

Cuando $\text{Re} \ll 1$, los efectos viscosos dominan y amortiguan rápidamente cualquier perturbación: el flujo es suave, ordenado y laminar. En cambio, cuando $\text{Re} \gg 1$, frente a cualquier inestabilidad, las perturbaciones crecen y se desarrollan no linealmente, dando lugar eventualmente a un régimen turbulento, desordenado y fuera de equilibrio, en el que las estructuras interactúan

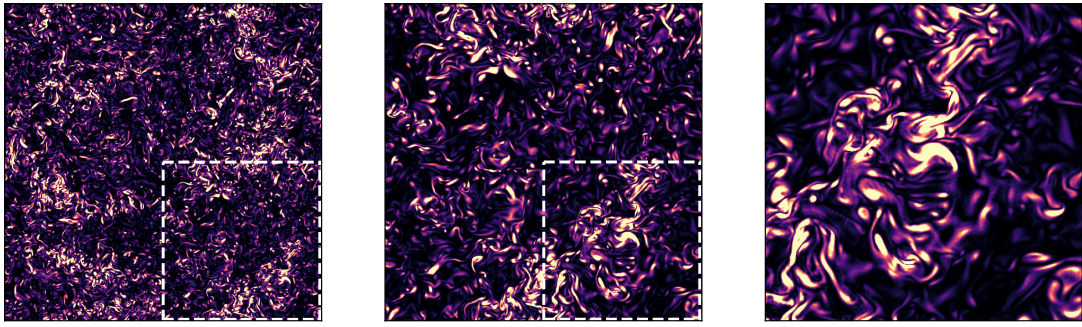


Figura 2.1: Cortes bidimensionales del campo de vorticidad cuadrática, $\omega^2 = (\nabla \times \mathbf{u})^2$, en una simulación numérica directa de un flujo turbulento isótropo y homogéneo. Colores más claros indican mayor intensidad de vorticidad. Cada panel corresponde a la porción delimitada en línea punteada blanca en el panel anterior.

a través del término no lineal. Aunque la viscosidad actúa siempre disipando energía, en muchos sistemas físicos esta puede resultar demasiado pequeña como para estabilizar el flujo, lo que explica por qué la turbulencia es ubicua en sistemas naturales.

La turbulencia es, entonces, un estado de movimiento caótico e intermitente, con un amplio rango de escalas temporales y espaciales activas. A continuación, se describe este fenómeno desde un enfoque cualitativo y empírico.

2.1.2. Características generales del fenómeno

A pesar de más de un siglo de estudio intenso, la turbulencia sigue siendo uno de los problemas abiertos más desafiantes de la física. Si bien se han logrado formular leyes casi universales, principalmente en el marco de la turbulencia isótropa y homogénea, estas leyes se aplican en situaciones altamente idealizadas, sin flujo medio, o en fluctuaciones a escalas muy pequeñas inmersas en un flujo turbulento de gran escala y alto número de Reynolds. Su utilidad práctica es limitada en flujos reales, como los geofísicos o astrofísicos, donde la anisotropía, la estratificación y la no-estacionariedad son la norma. La formulación exacta de la turbulencia enfrenta además lo que se conoce como el problema de clausura: cuando no se pueden resolver las ecuaciones en todas las escalas relevantes hay más incógnitas que ecuaciones, lo cual impide cerrar el sistema sin recurrir a hipótesis adicionales. Por esta razón, el desarrollo de teorías fenomenológicas se basa en intuición física, análisis dimensional y validación empírica.

La dificultad principal radica en el *carácter esencialmente aleatorio* de la turbulencia: un campo de velocidades espacialmente complejo, que se advecta a sí mismo de manera caótica. En ese contexto, lo máximo a lo que podemos aspirar es a predicciones estadísticas. Por ejemplo, al observar la pluma de humo de un cigarrillo, quizás podamos estimar su velocidad media de ascenso o la dirección de propagación impuesta por el viento, pero no la forma precisa de cada remolino. En la Fig. 2.1 se muestra una realización numérica de un flujo turbulento isótropo y homogéneo a alto número de Reynolds que ilustra el desorden de los remolinos. A continuación, se describen más características representativas de los flujos turbulentos en un sentido general.

Un flujo con apariencia desordenada no necesariamente es turbulento: debe presentar grandes fluctuaciones en el campo de velocidades. Las estelas de condensación de un avión a reacción constituyen un caso ilustrativo: excluyendo la región turbulenta inmediatamente posterior a la aeronave, dichas estelas mantienen longitudes características casi constantes durante varios kilómetros. Este comportamiento no es turbulento, aunque el flujo que le dio origen sí lo era.

En la naturaleza, la turbulencia es *tridimensional* y *rotacional*: las fluctuaciones del campo de vorticidad son intensas, y su descripción es esencial para entender la dinámica del flujo. Esto se puede notar también en la Fig. 2.1 donde se muestran mapas de vorticidad en escala de colores en unidades arbitrarias en un plano en el centro de una simulación numérica directa de turbulencia isótropa y homogénea en tres dimensiones. Un mecanismo central para sostener estas

fluctuaciones es el estiramiento de vórtices ("*vortex stretching*"), un proceso que no está presente en flujos bidimensionales. Por este motivo, flujos como los ciclones atmosféricos, que pueden parecer turbulentos, no lo son estrictamente: su dinámica está fuertemente influida por la interacción con la turbulencia de pequeña escala, pero su estructura es esencialmente bidimensional.

Todos los flujos turbulentos ocurren a *números de Reynolds elevados*. La turbulencia surge a partir de inestabilidades en flujos laminares cuando la fuerza inercial supera la viscosa. Como se mencionó, estas inestabilidades están gobernadas por la interacción entre los términos no lineales correspondientes en la ecuación (2.1). Esta interacción es altamente compleja: aún no se cuenta con un formalismo matemático que permita obtener soluciones generales a ecuaciones no lineales en derivadas parciales. La combinación de aleatoriedad y no linealidad vuelve a este problema muy difícil.

Otro de los rasgos fundamentales de la turbulencia es su *naturaleza altamente difusiva*: los flujos turbulentos exhiben un mezclado muy eficiente y tasas elevadas de transferencia de momento, calor y masa. Esta propiedad tiene implicancias prácticas en una gran variedad de sistemas. Por ejemplo, la turbulencia evita la separación de la capa límite en perfiles alares con ángulos de ataque moderados, aumenta la disipación de calor en sistemas de refrigeración, es responsable de la resistencia al flujo en tuberías, y facilita el intercambio de momento entre capas atmosféricas u oceánicas. En turbulencia isotrópica y homogénea, esto se manifiesta como la aparente homogeneidad de las variaciones que se observan en la Fig. 2.1.

La *disipación de energía* es otro rasgo definitorio. La turbulencia convierte energía cinética en calor por acción de los esfuerzos viscosos. Para sostener un régimen turbulento, es necesario un mecanismo externo de inyección de energía; de lo contrario, el flujo decae rápidamente. Este proceso da lugar a lo que se conoce como turbulencia en decaimiento. En contraste, en movimientos oscilatorios como ondas de gravedad o ruido acústico, la disipación por viscosidad es despreciable y por eso no se consideran turbulentos. La diferencia fundamental entre ondas y turbulencia radica en que las primeras son no disipativas (aunque sí dispersivas), mientras que la turbulencia es inherentemente disipativa. En la Fig. 2.1 la disipación puede reconocerse porque al mirar escalas más pequeñas, los remolinos más chicos están atenuados. Aunque el flujo es aproximadamente auto-semejante, existe una escala mínima posible para las fluctuaciones.

Es muy importante notar que todas estas características hablan de cómo se mueve el fluido, más que del fluido en sí mismo. La turbulencia es una propiedad del flujo, no del fluido, y ocurre en el continuo, con escalas características muy por encima de las dimensiones moleculares. Aunque todos los flujos turbulentos son distintos, comparten ciertas propiedades generales que permiten describirlos mediante teorías estadísticas y fenomenológicas. A continuación se describen algunas escalas características esenciales para su estudio, y los elementos centrales de estas teorías.

2.1.3. Cascada de energía y escalas en un flujo turbulento

Al estudiar flujos turbulentos, se observa sistemáticamente que los movimientos turbulentos existen desde la escala del dominio que contiene el fluido hasta escalas mucho más pequeñas. Esta escala más pequeña disminuye a medida que aumenta el número de Reynolds. Por esta razón, para comprender cómo se distribuye la energía en un flujo turbulento es fundamental analizar el proceso de transferencia energética entre escalas. Una manera de pensar esta transferencia es mediante el concepto de cascada de energía. Esta idea, articulada por Richardson en su célebre verso: "*big whorls have little whorls which feed on their velocity, and little whorls have lesser whorls, and so on to viscosity*", nos provee una imagen mental poderosa para pensar la turbulencia de manera intuitiva. Mediante este mecanismo, los remolinos grandes transfieren su energía a estructuras cada vez más pequeñas, hasta alcanzar las escalas dominadas por la disipación viscosa (ver la Fig. 2.1).

La idea de cascada de energía no solo fue una intuición poética de Richardson, sino que también se convirtió en un concepto fundamental para comprender y modelar la turbulencia atmosférica y, en consecuencia, para la predicción numérica del tiempo. La predicción del tiempo, tal como la soñó Richardson (Richardson 1922), requiere dividir la atmósfera en celdas y resolver sus ecuaciones dinámicas, anticipando así el enfoque básico de la predicción numérica moderna.

Richardson imaginó un edificio lleno de investigadores, cada uno resolviendo las ecuaciones en su celda, en paralelo. Este proceso no solo requiere una resolución espacial adecuada, sino también entender el rol de la turbulencia. En la atmósfera, y en la mayoría de los flujos geofísicos, la energía se inyecta en las escalas más grandes (por ejemplo, por el gradiente térmico ecuatorial-polar o por la orografía) y se transfiere hacia escalas más pequeñas mediante interacciones no lineales. Esta transferencia jerárquica de energía impone una estructura espectral que condiciona qué escalas deben resolverse explícitamente en un modelo numérico y cuáles pueden representarse mediante parametrizaciones (Sagaut 2006). De esta manera, la cascada de energía no solo permite construir una teoría fenomenológica de la turbulencia, sino que establece los fundamentos físicos que hicieron posible el sueño de Richardson, sin necesidad de su fábrica humana de pronóstico del tiempo, en la era de la supercomputación (Lynch 2006).

Debemos definir para esto la noción de remolino usada previamente. La palabra *remolino* evade, en este contexto, una definición excesivamente estricta; se concibe como un movimiento turbulento localizado en una región de tamaño l . Dicha región puede contener remolinos más pequeños, de modo que coexiste una jerarquía de estructuras anidadas, como ilustra la Fig. 2.1. Consideremos un flujo turbulento completamente desarrollado, de viscosidad ν , con una escala característica $\mathcal{L}$ y una velocidad típica $\mathcal{U}$. El número de Reynolds global es $Re = \mathcal{U}\mathcal{L}/\nu$. Cuanto mayor sea este valor, mayor será la separación entre la escala de inyección de energía, $L \sim \mathcal{L}$, y la escala de disipación microscópica, η .

En el límite ideal, $Re \rightarrow \infty$, la viscosidad resulta irrelevante en las escalas grandes y se abre un rango de longitudes, conocido como *rango inercial*, en el que la transferencia energética se rige únicamente por interacciones no lineales, con una tasa de transferencia constante ε independiente de la escala de interés l (Pope 2000). Sea $l_0 \sim L$ la escala de los remolinos más grandes, que llamaremos la **escala integral**, con velocidad característica $u_0 \equiv u(l_0)$ del orden de $u' = (2E/3)^{1/2}$, donde u' es la velocidad característica de las fluctuaciones y E la energía cinética turbulenta media. Su número de Reynolds local, $Re_0 = \frac{u_0 l_0}{\nu} \sim Re$ es tan grande que los efectos viscosos directos pueden despreciarse.

La escala integral puede calcularse en términos del espectro de energía como

$$L = 2\pi \frac{\int_0^\infty k^{-1} E(k) dk}{\int_0^\infty E(k) dk}, \quad (2.3)$$

lo que hace explícita su interpretación como longitud de correlación dominante de la turbulencia.

Mediante análisis dimensional podemos ver que la tasa de transferencia de energía entre escalas en la escala más grande queda fijada por la energía y el tiempo característico de esos remolinos grandes,

$$\varepsilon \simeq \frac{u_0^2}{\tau_0} = \frac{u_0^3}{l_0}, \quad (2.4)$$

donde $\tau_0 = l_0/u_0$ es el tiempo de giro de los remolinos más grandes. Asumiendo que la tasa de disipación es la misma que la tasa con la que se transfiere energía entre escalas, ε , y que esta se mantiene constante en todas las escalas inerciales, se obtiene

$$u(l) \sim (\varepsilon l)^{1/3}, \quad \tau(l) = \frac{l}{u(l)} \sim \frac{l^{2/3}}{\varepsilon^{1/3}}.$$

Estas expresiones dan, respectivamente, la velocidad en la escala l y el tiempo de giro de los remolinos en esa escala.

El tiempo total requerido para que la energía se transfiera desde L hasta las escalas disipativas se aproxima por la suma logarítmica de los tiempos de cada remolino. Esta serie converge y el resultado es

$$T_{\text{cascada}} \approx \tau_0 = \frac{l_0^{2/3}}{\varepsilon^{1/3}}, \quad (2.5)$$

lo que subraya que, en el régimen $Re \rightarrow \infty$, la duración de la cascada depende únicamente de las escalas de inyección, no de la viscosidad (Pope 2000; Davidson 2015).

Cuando Re es grande pero finito, la separación entre L y η es finita. La viscosidad se vuelve importante para disipar energía en la escala que cumple $Re(\eta) = 1$. Usando $u(\eta) \sim (\varepsilon \eta)^{1/3}$ se obtiene la **escala de Kolmogorov**

$$\eta \sim \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad (2.6)$$

que es la escala de disipación y de los remolinos más chicos y, por tanto, la relación entre escalas extremas (las escalas de los remolinos más grandes y más chicos) es $L/\eta \sim Re^{3/4}$.

Además de η , resulta útil introducir la **escala de Taylor**, λ , que caracteriza la curvatura de la función de correlación a separaciones pequeñas y conecta los gradientes de velocidad con las fluctuaciones. En términos de magnitudes globales,

$$\lambda = \sqrt{\frac{15\nu u'^2}{\varepsilon}}, \quad R_\lambda = \frac{u'\lambda}{\nu}, \quad (2.7)$$

donde R_λ es el número de Reynolds basado en λ , un parámetro estándar para comparar regímenes turbulentos con distinta separación de escalas. La escala de Taylor es una escala intermedia, por encima de λ dominan las fuerzas inerciales y por debajo es la viscosidad quien controla fuertemente las fluctuaciones (Buaría y col. 2020). Escribiendo la tasa de disipación como $\varepsilon = \nu \langle \omega^2 \rangle$, se puede ver que $\lambda^2 = 15u'^2 / \langle \omega^2 \rangle$, lo que manifiesta que λ disminuye cuando aumenta la vorticidad. En consecuencia, R_λ es el parámetro más usado para cuantificar la intensidad turbulenta a pequeñas escalas, y, por lo tanto, la extensión del rango inercial observable. Resultados previos muestran que rangos inerciales amplios requieren R_λ elevados (Ishihara y col. 2009).

Entendamos ahora cómo se distribuye la energía cinética entre los remolinos de diferentes tamaños. Las fluctuaciones con escala espacial l , en el espacio de momentos, serán representadas como fluctuaciones con número de onda $k = 2\pi/l$. En el rango inercial ($\eta \ll l \ll L$) la dinámica está gobernada únicamente por dos magnitudes: la tasa de transferencia de energía por unidad de masa, que tiene unidades de

$$[\varepsilon] = L^2 T^{-3},$$

donde T es un tiempo característico, y el número de onda, con unidades de

$$[k] = L^{-1}.$$

Si $E(k)$ es el espectro de energía cinética (es decir, la densidad de energía en una escala $1/k$) de modo que

$$\frac{1}{2} u'^2 = \int_0^\infty E(k) dk,$$

las dimensiones de $E(k)$ son, por construcción,

$$[E(k)] = L^3 T^{-2}.$$

Como en el rango inercial asumimos que $E(k)$ depende sólo de ε y k , en el caso de un flujo espacialmente homogéneo podemos proponer que

$$E(k) = C_K \varepsilon^\alpha k^\beta,$$

donde C_K es una constante adimensional (la *constante de Kolmogorov*) y los exponentes α y β satisfacen que

$$L^3 T^{-2} = (L^2 T^{-3})^\alpha (L^{-1})^\beta.$$

Comparando potencias se obtiene el sistema

$$\begin{cases} 2\alpha - \beta = 3, \\ -3\alpha = -2. \end{cases} \implies \alpha = \frac{2}{3}, \quad \beta = -\frac{5}{3}.$$

En consecuencia,

$$E(k) = C_K \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}, \quad (2.8)$$

un resultado conocido como la *ley de los cinco tercios* de Kolmogorov (Pope 2000).

Este espectro, que nos dice la amplitud de las fluctuaciones en cada escala, es verificado en experimentos de laboratorio y medido en la atmósfera en muchísimas condiciones. En el laboratorio, se observa un subrango inercial consistente con $k^{-5/3}$ a Reynolds muy elevados en túneles de viento con grilla activa (Mora y col. 2019), también en flujos de Von Kàrmàn mediante mediciones espaciales directas que muestran más de una década de decaimiento de Kolmogorov y permiten identificar la transición hacia el rango disipativo (Debue y col. 2018; Angriman y col. 2020); y en turbulencia generada por una grilla fija en el túnel de viento de Modane, donde no solo confirman el comportamiento inercial esperado, si no que caracterizan con detalle el rango disipativo (Gorbunova y col. 2020). En la atmósfera, las mediciones clásicas en la capa límite sobre terreno casi horizontal muestran la pendiente $-5/3$ en el rango inercial de los espectros de la velocidad (Kaimal y col. 1972). Kelberlau y Mann 2019 lograron reproducir fielmente los espectros de turbulencia en campo, capturando el rango inercial y corrigiendo sesgos experimentales. Mediciones *in situ* de vuelos sobre el Pasaje de Drake, a través de un pliegue de tropopausa, reportadas por Rodríguez Imazio y col. 2023, documentan espectros con rango inercial cercano a $-5/3$ y variaciones asociadas a ráfagas de turbulencia de aire claro.

2.1.4. Intermitencia y eventos extremos

La derivación dimensional del espectro, que resulta en la Ec. (2.8), asume las hipótesis de homogeneidad, isotropía y *autosimilaridad estadística*. Sin embargo, datos experimentales y numéricos de alta resolución han mostrado que la transferencia de energía no es uniforme en el espacio ni en el tiempo: aparecen ráfagas muy localizadas de disipación intensa, acompañadas por gradientes de velocidad extremos. Este fenómeno, conocido como *intermitencia*, tiene una firma estadística clara: la aparición de colas pesadas en las distribuciones de incrementos de velocidad y de disipación.

En flujos geofísicos estratificados se han reportado corrientes verticales extremas asociadas a picos de disipación que superan en varios órdenes de magnitud el promedio, desencadenando transiciones locales y producción de turbulencia secundaria (Marino y col. 2022). Experimentos de laboratorio reportados en Balamurugan y col. 2025 también revelan la ocurrencia de eventos extremos con amplitudes hasta el doble del valor medio incluso en configuraciones sencillas de capa límite.

Este fenómeno de intermitencia reduce aún más las escalas efectivas de los remolinos, pues el flujo de energía se concentra en filamentos y láminas finas dentro del rango que, en forma global, parecía obedecer la ley $k^{-5/3}$. Para resolver o modelar correctamente estos picos locales se requieren mallas más finas o esquemas de sub-grilla sensibles a la densidad local de disipación; de lo contrario, los modelos subestimarán la probabilidad de eventos extremos, con implicancias en la estimación de ráfagas convectivas intensas, descargas eléctricas en erupciones volcánicas o microrajaduras en ingeniería aerodinámica.

Para capturar la variabilidad en la tasa de disipación, se puede usar la teoría multifractal que describe el campo de velocidades turbulento como una superposición de regiones con distintos exponentes de singularidad. Este enfoque predice correcciones a la ley de los $-5/3$ (Pope 2000). En la práctica, los modelos multifractales sirven hoy como guía para parametrizaciones estocásticas capaces de inyectar la variabilidad intermitente apropiada en simulaciones atmosféricas globales.

2.2. Partículas en flujos turbulentos

Para entender cómo funcionan sistemas complejos como las nubes o una erupción volcánica debemos preguntarnos cómo interactúan las partículas con los fluidos en movimiento en la naturaleza. El problema más grande se presenta cuando estos flujos son turbulentos, como ocurre en una amplia variedad de fenómenos geofísicos. La descripción Lagrangiana de flujos turbulentos es relevante en contextos industriales y ambientales, tanto en la atmósfera como en los océanos, al

estudiar procesos que van desde la dispersión y difusión de contaminantes o cenizas volcánicas hasta el mezclado de agentes químicos o biológicos. Además, representa una pregunta desafiante por tratarse de un sistema con una inmensa cantidad de grados de libertad y acoplamientos entre distintos fenómenos, como criticalidad o transiciones de fase.

No se conoce aún una ecuación de movimiento que describa la dinámica de partículas en flujos turbulentos en el caso más general posible. Si contamos con modelos aproximados que se aplican en rangos específicos del espacio de parámetros. Estos modelos se construyen con un enfoque fenomenológico y en constante comparación con experimentos de laboratorio y observaciones de campo. En este contexto, las simulaciones numéricas constituyen una herramienta clave: con suficiente poder de cómputo podemos encarar el problema desde un enfoque estadístico, integrando numéricamente el campo de velocidades junto con el modelo de partículas elegido. Para que los resultados teóricos puedan predecir el comportamiento real en contextos naturales, es necesario continuar refinando estos modelos.

Los modelos más sencillos de flujos multifase consideran a las partículas como trazadores pasivos; es decir, su tamaño y su inercia se consideran despreciables. Incorporar que las partículas tienen tamaño finito y su propia inercia introduce un nuevo aspecto: las partículas ya no siguen exactamente a los elementos de fluido y adquieren una dinámica propia, más compleja. Las partículas de tamaño finito no pueden ajustar su velocidad a la del fluido de manera instantánea y, además, su densidad puede no coincidir con la del fluido. Esto no solo tiene importancia desde el punto de vista teórico: en el aspecto práctico, permite describir sistemas como partículas de contaminantes o fitoplancton en el océano (Sujovolsky y P. Mininni 2019; Reartes y P. D. Mininni 2023), en los cuales no es correcto despreciar los efectos de inercia.

2.2.1. La ecuación de Maxey-Riley-Gatignol

Para estudiar la dinámica de partículas de tamaño finito en flujos turbulentos, es conveniente contar con una formulación en términos de ecuaciones de movimiento para las partículas advec-tadas. El problema es que las partículas de tamaño finito son objetos extensos con sus propios vínculos. Una descripción rigurosa involucraría resolver la ecuación de Navier-Stokes con vínculos dinámicos, lo que tiene un alto costo computacional. Las ecuaciones en derivadas parciales resul-tantes de este procedimiento son muy complicadas de resolver y de analizar. Para partículas en contextos geofísicos, es más útil buscar una descripción en términos de ecuaciones diferenciales ordinarias. Se puede escribir una ecuación diferencial aproximada para el movimiento de pequeñas partículas esféricas inmersas en un flujo. Si la partícula tiene radio a y masa m_p , la ecuación de Maxey-Riley-Gatignol da una buena aproximación a su dinámica (Maxey y Riley 1983; Gatignol 1983):

$$m_p \dot{\mathbf{v}} = m_f \frac{D}{Dt} \mathbf{u}(\mathbf{r}(t), t) - \frac{1}{2} m_f \left[\dot{\mathbf{v}} - \frac{D}{Dt} \left(\mathbf{u}(\mathbf{r}(t), t) + \frac{1}{10} a^2 \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{r}(t), t) \right) \right] - 6\pi a \rho_f \nu \mathbf{q}(t) + (m_p - m_f) \mathbf{g} - 6\pi a^2 \rho_f \nu \int_0^t d\tau \frac{d\mathbf{q}(\tau)/d\tau}{\sqrt{\pi \nu (t - \tau)}}, \quad (2.9)$$

donde

$$\mathbf{q}(t) \equiv \mathbf{v}(t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}(t), t) - \frac{1}{6} a^2 \nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{r}(t), t). \quad (2.10)$$

Aquí $\mathbf{r}(t)$ y $\mathbf{v}(t) \equiv d\mathbf{r}(t)/dt$ son la posición y la velocidad de la partícula, respectivamente, y $\mathbf{u}(\mathbf{r}(t), t)$ es el campo de velocidades del flujo sin perturbar en la posición de la partícula; m_f es la masa de fluido desplazada por la partícula, ν es la viscosidad cinemática del fluido de densidad ρ_f , $\mathbf{g}$ es la gravedad, y la derivada

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}, \quad (2.11)$$

es la derivada hidrodinámica total tomada en el camino de un elemento de fluido, mientras que

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u}, \quad (2.12)$$

se toma a lo largo de la trayectoria de la partícula.

El primer término del lado derecho de la Ec. (2.9) es la aceleración del elemento de fluido en la posición $\mathbf{r}(t)$ y representa la fuerza ejercida sobre la partícula por el fluido sin perturbar. El segundo término representa el *efecto de masa agregada*, que da cuenta de que, cuando la partícula se mueve relativa al flujo, desplaza cierta cantidad de fluido; el resultado es que la partícula se comporta como si tuviera masa adicional. El tercer término es el *arrastre de Stokes* causado por la viscosidad del fluido; el cuarto término es la *fuerza de empuje*. La última integral se conoce como el *término de historia de Basset-Boussinesq* y aparece al considerar que la vorticidad se desprende y difunde desde la partícula por efecto de la viscosidad (Van Hinsberg y col. 2017; Aartrijk y Clercx 2010). Finalmente, los términos que involucran el factor $a^2 \nabla^2$ son las *correcciones de Faxén* (Mordant y Pinton 2000), que contabilizan la variación espacial del campo de velocidad en distintos puntos del borde de la partícula (a orden a^2 en una expansión en el radio de la partícula).

La ecuación (2.9) es válida para partículas pequeñas a bajo número de Reynolds de la partícula, Re_p . Este número se calcula usando el tamaño de la partícula como escala espacial y la velocidad relativa entre la partícula y el flujo a su alrededor:

$$Re_p = \frac{a |\mathbf{v} - \mathbf{u}|}{\nu}.$$

Esto implica que, para que la Ec. (2.9) sea una buena aproximación a la dinámica de la partícula, la diferencia de velocidades entre la partícula y el fluido debe ser pequeña o a debe ser lo suficientemente chico. Otra condición es que el número de Reynolds de corte debe ser pequeño: $Re_\Gamma = a^2 \Gamma / \nu \ll 1$, donde Γ es el gradiente característico de velocidad.

2.2.2. Características generales de las partículas de tamaño finito

Como se mencionó en la sección anterior, la dinámica de las partículas de tamaño finito difiere de la de los trazadores pasivos. Si el tamaño de la partícula es lo suficientemente pequeño, en la Ec. (2.9) pueden despreciarse los términos de orden a^2 (correcciones de Faxén). Esto equivale a suponer que las partículas son mucho más pequeñas que la longitud típica de variación del flujo (en turbulencia, la escala de Kolmogorov η). Aun en ese caso, la Ec. (2.9) permanece como una ecuación de segundo orden, lo que conduce a una dinámica distinta de la de los trazadores (para los cuales $\dot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{u}(\mathbf{r}(t), t)$ es una ecuación de primer orden). Una consecuencia inmediata es que la dinámica de partículas pequeñas con inercia tiene un espacio de fases de $2n$ dimensiones, donde n es la dimensión del espacio de configuraciones. Por lo tanto, si se considera un flujo plano, una partícula inercial de tamaño finito se describe con cuatro grados de libertad, mientras que una partícula trazadora tiene solo dos.

En muchos contextos geofísicos y de laboratorio resulta conveniente emplear un modelo efectivo mínimo, obtenido de la Ec. (2.9) en el límite de partícula puntual pesada con mucha inercia. Al considerar partículas esféricas, pequeñas y mucho más densas que el fluido, podemos quedarnos solo con el arrastre de Stokes. En ese caso, la dinámica se aproxima por

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\tau_p} [\mathbf{u}(\mathbf{x}_p, t) - \mathbf{v}], \quad (2.13)$$

válida para partículas que cumplan $Re_p < 1$ y sean mucho más densas que el fluido. En esta aproximación, el tiempo de relajación de la partícula se relaciona con el diámetro mediante

$$\tau_p = \frac{2a^2}{9\nu} \frac{\rho_p}{\rho_f}.$$

En la práctica, τ_p actúa como un parámetro efectivo que depende del tamaño de la partícula y de la intensidad de la turbulencia (Angriman y col. 2022).

Otra diferencia importante es que la dinámica de estas partículas es disipativa, aun en flujos incompresibles: el volumen del espacio de fases se contrae a una tasa n/St , donde St es el número

de Stokes definido como la razón entre el tiempo de relajación de la partícula, en general dado por $\tau_p = (m_p + m_f/2)/(6\pi a \rho_f \nu)$, y el tiempo de Kolmogorov, $\tau_\eta = (\nu/\varepsilon)^{1/2}$, que caracteriza el giro de los remolinos más pequeños del flujo. En el carácter disipativo de la dinámica yace la posibilidad de existencia de atractores en el espacio de fases, situación que no es posible para trazadores pasivos salvo que el flujo lagrangiano subyacente tenga puntos de atracción. Esto tiene consecuencias cruciales para la dinámica de partículas inerciales en flujos turbulentos.

La densidad de la partícula advectada por el fluido también juega un rol importante en su dinámica. Haciendo un análisis perturbativo en el caso de partículas pequeñas, se demostró que, si las partículas tienen densidad mayor que la del fluido, tienden a alejarse de las regiones del flujo con vorticidad alta, como los centros de remolinos (Brandt y Coletti 2022). Este efecto puede entenderse intuitivamente como resultado de la fuerza centrífuga que aparta a la partícula de zonas con rotación intensa. De manera análoga, las partículas con densidad menor que la del fluido tienden a moverse hacia las regiones de alta vorticidad. Estos efectos están completamente ausentes en el caso de partículas trazadoras. En casos más generales, en los últimos años se mostró, tanto numérica como experimentalmente, que las partículas más pesadas que el fluido tienden a acumularse preferencialmente en ciertas regiones del flujo, formando cúmulos (o *clusters*) (Monchaux y col. 2012; Obligado y col. 2014; Falkinoff y col. 2020). Para partículas con $St > 1$, esta acumulación preferencial se observa en puntos del flujo con aceleración Lagrangiana nula (Coleman y Vassilicos 2009).

2.3. Mecanismos de acumulación preferencial en HIT

En numerosos sistemas naturales, como ya se ha mencionado, cuando las partículas poseen inercia la turbulencia no las mezcla homogéneamente sino que, por el contrario, induce su segregación espacial. Este fenómeno de acumulación preferencial se reconoce en contextos geofísicos como nubes cálidas, con aerosoles y sprays, y también en plumas volcánicas y en el océano, donde aparecen regiones con concentraciones locales de partículas muy superiores al promedio. En la Fig. 2.2 (adaptada de Karpinska y col. 2019) se muestra una visualización de un plano iluminado con un láser en el interior de una nube, capturado en la Environmental Research Station Schneesfernerhaus (UFS), estación de investigación ambiental de alta montaña situada en la ladera del Zugspitze (Alpes bávaros, Alemania) a 2650 m sobre el nivel del mar (s.n.m). En este corte de alrededor de 2 m del flujo se observan vacíos, volúmenes casi sin gotas, y zonas con muchas partículas, que ponen de manifiesto la distribución espacial no homogénea de partículas. También se nota otro fenómeno que será de interés en los próximos capítulos: la población de gotas es multidispersa; en la imagen los puntos y trazos más brillantes corresponden a partículas de mayor tamaño, poniendo de manifiesto que las partículas con distintos tamaños se distribuyen de forma irregular en el corte iluminado.

Este fenómeno de acumulación preferencial de partículas es causado por la turbulencia. Aun en configuraciones idealizadas de turbulencia isotropa y homogénea, tanto en simulaciones numéricas como en experimentos, se observan cúmulos de partículas inerciales en escalas comparables con la de Kolmogorov, y la acumulación alcanza su máxima intensidad para números de Stokes de orden unidad (Bec y col. 2007; Monchaux y col. 2012; Obligado y col. 2014). De hecho, la evidencia acumulada muestra que la distribución de partículas es multifractal, con tendencia de las partículas a evitar regiones de alta vorticidad y a poblar zonas dominadas por deformación del fluido, en acuerdo con observaciones de túneles de viento. La Fig. 2.3, adaptada de Obligado y col. 2014, muestra la imagen cruda del campo de visión con las posiciones instantáneas de gotas en turbulencia homogénea e isotropa generada por una grilla activa en un tunel de viento. A simple vista se observan regiones densas y regiones casi vacías de partículas, evidenciando una distribución espacial no homogénea.

Al hablar de acumulación preferencial en términos Eulerianos, nos referimos entonces a la desviación estadística respecto de una distribución espacial uniforme de partículas en un flujo turbulento. La manifestación de este efecto es la ya descrita: coexisten zonas de alta densidad de partículas con zonas vacías. Como veremos más adelante, este efecto puede cambiar el tiempo entre colisiones entre partículas, y por esta razón se vuelve muy importante en contextos atmosféricos.

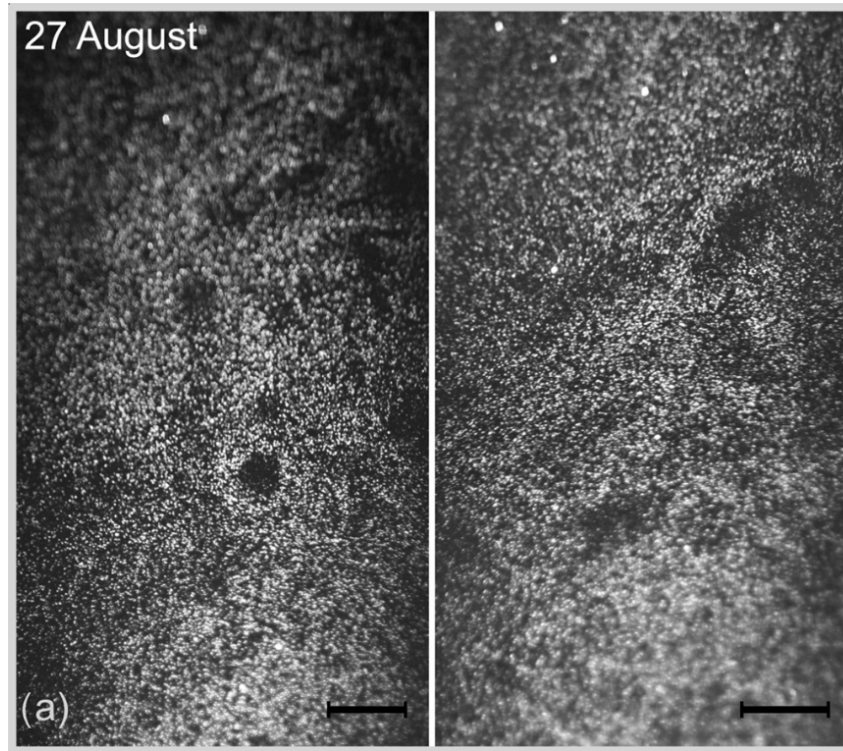


Figura 2.2: Visualización del interior de una nube con una lámina láser en la estación UFS (Zugspitze, 2650 m s.n.m.): el corte del flujo revela vacíos, es decir, regiones casi sin gotas, y zonas con acumulación de partículas. Los puntos más brillantes están asociados a gotas de mayor tamaño, evidenciando la distribución no homogénea de partículas (referencia de 10 cm, adaptado de Karpinska y col. 2019).

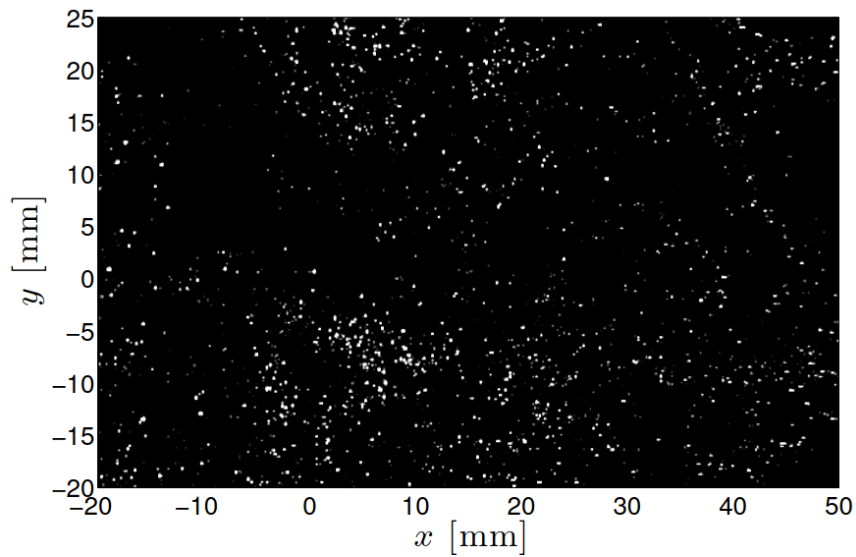


Figura 2.3: Turbulencia multifase isotrópica y homogénea con gotas de agua generada por una grilla activa en un túnel de viento: imagen cruda del plano iluminado por un láser con las posiciones instantáneas de las gotas, donde se observan regiones densas y vacías (adaptado de Obligado y col. 2014).

2.3.1. Mecanismos dependientes de la escala

Uno de los principales mecanismos de acumulación preferencial es el de turbuforésis. Este término refiere a una deriva sistemática de las partículas hacia regiones de menor intensidad turbulenta, por lo que requiere de la presencia de alguna inhomogeneidad. La turbulencia, si está localizada en el espacio, también puede atrapar partículas, concentrándolas en una región. Sin embargo, en turbulencia isótropa y homogénea, donde la intensidad turbulenta se mantiene constante tanto espacial como temporalmente, también se ha encontrado evidencia de acumulación preferencial de partículas inerciales (Bec y col. 2007). En este contexto, se utiliza el mismo concepto de turbuforésis pero localmente para describir la expulsión centrífuga desde el núcleo de los remolinos hacia regiones con mayor deformación. Podemos entender este mecanismo partiendo del límite de baja inercia de las partículas, en el que la velocidad de la partícula se aproxima por $\mathbf{v} \approx \mathbf{u} - \tau_p D\mathbf{u}/Dt$. La divergencia de esta ecuación puede escribirse como una resta entre los cuadrados de las trazas de los tensores de deformación y de vorticidad en el fluido. En consecuencia, las partículas son expulsadas de los remolinos, donde domina la rotación, y exploran con mayor frecuencia las regiones del flujo con baja aceleración y mayor cizalla (Bec y col. 2007).

A escalas mayores, ya fuera del régimen puramente local, la dinámica de las partículas está determinada preponderantemente por el mecanismo *sweep-stick*: las partículas tienden a adherirse a estructuras del flujo es zonas de aceleración nula y son barridas coherentemente por los remolinos grandes, lo que prolonga la vida de los cúmulos. Este concepto permite unificar en buena medida los resultados de acumulación en HIT: los puntos de aceleración nula del fluido son *barridos* por la turbulencia, moviéndose a la velocidad local, y las partículas se *pegan* a esos puntos al converger a lo largo de la dirección de máxima compresión del tensor gradiente de velocidad. La *adhesividad* es óptima para partículas con $St \sim 1$. Resultados en DNS (Monchaux y col. 2010, 2012) muestran que estos puntos no están distribuidos uniformemente, si no que también forman cúmulos, y las partículas correlacionan espacialmente con ellos sobre un amplio rango de escalas.

Esta discusión también nos indica, como confirmaremos en el Capítulo 3, que para comprender la acumulación de partículas debemos estudiar la acumulación espacial de los ceros del campo de velocidad del fluido.

2.3.2. Intensidad de *clustering*

Estudiar la intensidad del *clustering* de partículas es clave para entender una amplia variedad de procesos, muchos ya mencionados. Por ejemplo, en problemas de crecimiento por colisiones como en gotas o aerosoles el exceso de inhomogeneidad entra multiplicativamente en la tasa de colisiones, de modo que una mayor concentración relativa de partículas amplifica los encuentros aun cuando la cinemática local sea similar (Toschi y Bodenschatz 2009; Monchaux y col. 2012). Las partículas pueden acumularse por varias razones: por direcciones preferenciales generadas por gradientes a gran escala (de velocidad o de intensidad turbulenta); por gravedad, que las hace seguir corrientes descendentes y acelera su caída; por estratificación u ondas, que las confinan en determinadas zonas; o por su propia inercia, que aun en flujos uniformes y sin gradientes marcados puede expulsarlas de ciertos remolinos y concentrarlas en regiones de mayor deformación. La dificultad principal reside en distinguir qué mecanismo domina en cada caso, porque ello condiciona cómo interpretamos los datos y cómo estimamos los observables relevantes. En esta tesis buscamos desarrollar herramientas que permitan discriminar entre los distintos mecanismos y, cuando corresponda, cuantificar el *clustering* inercial de las partículas.

Para cuantificar esta organización, en nuestro estudio adoptamos como herramienta principal el teselado de Voronoï tridimensional aplicado a las posiciones instantáneas de las partículas (haremos lo mismo con las posiciones de ceros de los campos vectoriales). A cada partícula se le asocia una celda de volumen V , que corresponde a la porción del espacio más cercana a esa partícula que a cualquier otra. El cociente adimensional $\mathcal{V} \equiv V/\langle V \rangle$ actúa como medida inversa de una concentración local. Conociendo esta concentración, queremos saber si corresponde a una desviación significativa de la media, para decir, si es muy grande (o muy chica) si corresponde a partículas muy aisladas o acumuladas en forma anómala. ¿Pero contra qué comparamos? El punto de referencia es el caso de las partículas distribuidas aleatoriamente a través de un proceso

de Poisson, para el cual la distribución de volúmenes de Voronoi está bien descripta por una distribución gamma generalizada. En particular, en Uhlmann 2020 se propone una forma analítica para esta distribución para partículas puntuales en 3D repartidas al azar, con parámetros $a \approx 4,806$, $b \approx 4,045$ y $c \approx 1,168$. Esta forma analítica reproduce con alta fidelidad la función de densidad de probabilidad (en adelante, PDF) de ν y fija un valor de dispersión típico $\sigma_{RPP} \approx 0,42$. Esta referencia permite definir cuantitativamente el *clustering* como una desviación respecto de la distribución aleatoria: colas más pesadas representarán un exceso de cúmulos y vacíos. La varianza de la distribución, σ_ν , representa el nivel o la intensidad de *clustering* por comparación con σ_{RPP} . Además de establecer una referencia, en Uhlmann 2020 se cuantifican sesgos prácticos relevantes en experimentos. Por un lado, se muestra también cómo el tamaño finito de las partículas, inevitable en datos experimentales, reduce ligeramente σ_ν al crecer la fracción sólida. Por otro, se cuantifica la influencia del tamaño de dominio y los efectos de borde, que pueden sesgar las colas de la PDF, y se proporcionan recomendaciones prácticas para generar datos consistentes distribuidos aleatoriamente y evitar efectos de borde.

La intensidad de *clustering* es un parámetro de orden que conecta la geometría Euleriana de la distribución de partículas con los mecanismos físicos subyacentes. El teselado de Voronoi ofrece simultáneamente una medida local de concentración, la inversa de ν , y un escalar global robusto, σ_ν , que permite cuantificar la intensidad de *clustering* y definir criterios para detectar cúmulos y vacíos sin introducir tamaños de corte *ad hoc*. En simulaciones numéricas con condiciones de contorno periódicas resulta natural trabajar con volúmenes 3D y dominios periódicos. En condiciones experimentales es común que las mediciones sean bidimensionales (2D), por lo que la comparación cruzada exige utilizar la referencia RPP correspondiente (2D vs 3D) y considerar σ_ν/σ_{RPP} para neutralizar diferencias geométricas (Monchaux y col. 2010, 2012; Uhlmann 2020). En términos de robustez, en Monchaux y col. 2010 muestran que la métrica global de Voronoi en 2D es estable frente a pérdidas aleatorias de detecciones, ya sea por oclusiones o por mediciones ruidosas. La desviación estándar cambia marginalmente incluso al remover una fracción importante de partículas, lo que refuerza su uso como métrica primaria en condiciones experimentales imperfectas. Por su parte, en Uhlmann 2020 documentan que el uso de ventanas periódicas artificiales y el control explícito del número de partículas por instantánea reduce los sesgos de borde y asegura una buena convergencia estadística.

2.4. Simulaciones numéricas y algo más

En el estudio de la turbulencia, como en muchos otros campos de interés de la física, el objetivo último es obtener una teoría cuantitativa o un modelo que sea fácil de manejar, a partir del cual se puedan calcular cantidades de interés y relevancia práctica. Más de un siglo de experiencia nos muestra que *el problema de la turbulencia* es notoriamente complejo en su naturaleza, y hay poca esperanza de poder llegar a una teoría analítica simple partiendo de primeros principios. Por el contrario, la esperanza está más centrada en aprovechar del poder de cómputo disponible, que crece sistemáticamente, y en nuevos experimentos, para alcanzar el objetivo de calcular propiedades relevantes de flujos turbulentos y en base a estos poder desarrollar nuevas teorías. En esta sección discutiremos las simulaciones numéricas directas como principal herramienta para el estudio teórico de la turbulencia en esta tesis.

2.4.1. El desafío

Vale la pena comenzar por entender cuáles son las propiedades de los flujos turbulentos que vuelven tan difícil la tarea de concebir un modelo o teoría cuantitativa manejable y precisa. El campo de velocidades de un flujo turbulento $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ es dependiente del tiempo y del espacio en sus tres dimensiones y presenta fluctuaciones aleatorias. Los movimientos turbulentos en escalas más grandes, o de *mayor escala*, serán casi tan grandes como el tamaño típico del flujo y, en consecuencia, estarán directamente afectados por la geometría del recinto y las *condiciones de contorno*, lo que le quita universalidad a la dinámica resultante del flujo. Esto se combina con el hecho de que la turbulencia es un proceso que sucede en un amplio rango de escalas, tanto espaciales como temporales. Relativo a las escalas grandes, en flujos isótropos y homogéneos, la escala temporal

de Kolmogorov, τ_η , decrece como $Re^{-1/2}$, y la escala espacial de Kolmogorov, η , como $Re^{-3/4}$ (ver la Sección 2.1). Las dificultades que genera esta gran separación de escalas podemos entenderlas mediante el término convectivo no lineal en la ecuación de Navier-Stokes (2.1), responsable de distribuir la energía entre estas escalas, como ya fue discutido en la sección 2.1. Cuanto más grande es el número de Reynolds, más grados de libertad tiene el flujo, y más escalas están disponibles a las que puede entregarles energía. Nuevas dificultades surgen también del término del gradiente de presión que, al expresarlo en términos de la velocidad (Pope 2000), se pone de manifiesto que es un término tanto no lineal como no local, pero ese tipo de dificultades no serán discutidas en este trabajo dado que nos concentraremos en flujos incompresibles en los que la presión puede expresarse en términos de variables conocidas.

Podemos entender lo que significa esta separación de escalas con un ejemplo concreto: las nubes estratocúmulos. En estas nubes, mediciones *in situ* muestran escalas integrales del orden de $L \approx 10^2$ m. Con una velocidad turbulenta característica $U \approx 0,7 - 1$ m/s y una viscosidad cinemática $\nu \approx 1,5 \times 10^{-5}$ m²/s, el número de Reynolds resultante es $Re \approx (5-7) \times 10^6$. La predicción $\eta/L \approx Re^{-3/4}$ resulta en $\eta \approx 0,7 - 1$ mm, en gran acuerdo con las mediciones *in situ* que reportan $\eta \approx 1 - 2$ mm (Siebert y col. 2006, 2010; Nowak y col. 2021). Más allá de las pequeñas diferencias, probablemente debidas a la anisotropía del contexto atmosférico, esto implica una separación de $\sim 10^5$ en longitudes entre las escalas energéticas y las disipativas. En el mismo escenario, tasas de disipación medidas típicamente, $\varepsilon \approx 10^{-4} - 10^{-3}$ m²s⁻³, implican tiempos de Kolmogorov $\tau_\eta = (\nu/\varepsilon)^{1/2} \approx 0,1 - 0,3$ s, mientras que el tiempo integral $T_L \sim L/U \approx 10^2$ s; es decir, otra separación de $\approx 10^3$ en las escalas temporales. Este contraste medido entre longitudes milimétricas y tiempos por debajo del segundo en el extremo disipativo, frente a cientos de metros y decenas de segundos en el extremo energético, ilustra cómo los flujos turbulentos presentan un amplio rango de escalas activas y por qué resulta difícil capturarlos con un único modelo (Wood 2012).

En una simulación de flujo turbulento se resuelven las ecuaciones para un campo de velocidades dependiente del tiempo que, hasta cierto punto, representa el campo $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ correspondiente a una realización del flujo turbulento. Usualmente, en un modelo de turbulencia se resuelven ecuaciones para ciertas cantidades promediadas, por ejemplo $\langle \mathbf{u} \rangle$, $\langle u_i u_j \rangle$ y ε . Existen, sin embargo, distintas familias de simulaciones numéricas de flujos turbulentos. En las simulaciones numéricas directas (DNS, por sus siglas en inglés), se integran las ecuaciones de Navier-Stokes para obtener $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ de una realización del flujo resolviendo *todas* las escalas espaciales y temporales, desde la escala integral hasta la escala de disipación, y sin ningún modelo de sub-grilla o parametrización. Esto implica resolver explícitamente como mínimo números de Reynolds del orden de 10^6 , lo que las vuelve muy costosas computacionalmente. Llegar a estos números de Reynolds elevados tiene sus dificultades y por eso, muchas veces se elige complementar las simulaciones con modelos. En las simulaciones de grandes remolinos (LES), se resuelven ecuaciones para un campo de velocidad *filtrado*, $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$, representativo de los movimientos turbulentos a gran escala, incorporando además un modelo de sub-grilla para la física de las escalas pequeñas no resuelta. Las aproximaciones de tipo RANS (Navier-Stokes promediadas en el Reynolds) resuelven las ecuaciones de Reynolds para determinar el campo medio $\langle \mathbf{u} \rangle$ en un ensamble: en los modelos de viscosidad turbulenta, los esfuerzos de Reynolds se clausuran mediante una ν_t efectiva obtenida de relaciones algebraicas o de ecuaciones de transporte modeladas para cantidades como la energía cinética y la tasa de transferencia ε ; en los modelos de esfuerzos de Reynolds se resuelven directamente ecuaciones de transporte para $\langle u_i u_j \rangle$, evitando la introducción explícita de ν_t . Por último, en los métodos PDF se modela la ecuación de transporte de una función de distribución de probabilidad $f(\mathbf{u}; \mathbf{x}, t)$, cuyas medias dan $\langle \mathbf{u} \rangle$ (primer momento estadístico) y $\langle u_i u_j \rangle$ (segundo momento estadístico). En este trabajo nos centraremos en el estudio teórico de flujos turbulentos mediante la implementación de simulaciones numéricas directas, resolviendo en forma explícita las ecuaciones del fluido y de las partículas.

2.4.2. Resolverlo todo: cómo y cuánto cuesta

Como fue mencionado en la sección anterior, las simulaciones numéricas directas se caracterizan por resolver explícitamente todas las escalas relevantes en el flujo turbulento de estudio. Se integran numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes y, en nuestro caso, las de las partículas,

con condiciones iniciales y de contorno apropiadas según el flujo que se desee estudiar. Cada simulación produce una única realización del flujo. Este enfoque, relativamente reciente, se volvió popular en la década de 1970, cuando creció abruptamente la disponibilidad de alto poder de cómputo. Es conceptualmente simple y, cuando es posible, es el método ganador en precisión y en el nivel de descripción que provee. Sin embargo, el costo computacional es extremadamente alto y los requerimientos computacionales se incrementan rápidamente con el número de Reynolds, por lo que realizar DNS a Re alto es un desafío particular.

Para el estudio fundamental de la turbulencia, los métodos pseudo-espectrales son el enfoque preferido por su precisión superior. En este tipo de métodos, el dominio de la solución es una caja cúbica de lado $\mathcal{L}$ y el campo de velocidad $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ se representa como una serie de Fourier finita. En total, se representarán N^3 números de onda, donde N determina el tamaño de la simulación y, en consecuencia, el número de Reynolds que se puede alcanzar. Esta representación espectral es equivalente a representar $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ en el espacio de coordenadas en una grilla de N^3 puntos uniformemente espaciados en $\Delta x = \mathcal{L}/N$. Un método espectral involucra evolucionar los modos de Fourier en pequeños pasos temporales Δt de acuerdo con la ecuación de Navier-Stokes en el espacio espectral. Calcular todas las interacciones entre los distintos modos requiere del orden de N^6 operaciones. Para evitar este altísimo costo computacional, en los métodos *pseudo*-espectrales se procede de manera diferente: el campo de velocidades se transforma al espacio real, se computan los productos del término no lineal y luego se vuelve a transformar el campo resultante al espacio espectral, donde se calcula el resto de los términos. Esto reduce el número de operaciones al orden $N^3 \log N$. Como contrapartida, este proceso introduce efectos de *aliasing*, que deben ser controlados o removidos. Otros desafíos de estos métodos tienen que ver con la estrategia de mado temporal y la distribución de la memoria en esquemas computacionales paralelizados, que serán discutidos en la Sección 2.4.3 y en las referencias allí citadas, donde se describe específicamente el código utilizado en esta tesis.

Una vez decidido el esquema de integración, el costo computacional de una simulación queda determinado principalmente por la resolución que se desee alcanzar. Si queremos resolver hasta una determinada longitud mínima, esto se traducirá en el espacio de números de onda como un número de onda máximo representado. En este tipo de estudios nos interesará que el rango disipativo quede enteramente contenido en el dominio espectral resoluble, para que el proceso de disipación no quede cortado por el truncamiento numérico. Esto significa resolver hasta la escala de disipación de Kolmogorov, por lo que debemos tener representado al menos movimientos con número de onda $1/\eta$. Si el mayor número de onda representado es κ , lo anterior implica $\kappa\eta > 1$, lo cual resulta en un buen criterio práctico para determinar si una simulación está bien resuelta o no. Si $\kappa\eta < 1$, la cola del espectro de energía queda submuestreada: se acumula energía cerca del corte asociado a la resolución espacial, se distorsiona la cascada y el cálculo de magnitudes clave, como ε , estará sesgado por este error numérico.

Este criterio tiene consecuencias directas sobre cuántos grados de libertad puede resolver la simulación. A medida que se incrementa el número de Reynolds, aumenta la separación entre escalas y, por lo tanto, η se vuelve relativamente más pequeña. Mantener $\kappa\eta > 1$ requiere una malla cada vez más fina, lo que hace que el número total de puntos de malla (y, en consecuencia, de modos) crezca muy rápidamente. Si tomamos $\Delta x \sim \eta$, entonces el número de puntos de lineales en la malla es

$$N \sim \frac{\mathcal{L}}{\Delta x} \sim \frac{\mathcal{L}}{\eta} \sim Re^{3/4},$$

y, en consecuencia, el número total de grados de libertad resueltos, DoF, es

$$\text{DoF} \sim N^3 \sim \left(Re^{3/4}\right)^3 = Re^{9/4}.$$

En flujos con contornos sólidos o anisotropías fuertes, η localmente puede ser menor y los prefactores pueden crecer, pero la ley de potencias $Re^{9/4}$ sigue siendo una guía útil para DNS con $\kappa\eta > 1$. Esto implica, por ejemplo, que si queremos duplicar el número de Reynolds, el costo en memoria de la simulación aumentará en un factor $2^{9/4}$.

En resumen, una vez fijada la escala mínima que debe resolverse queda determinada la resolución espacial y la memoria necesaria. El tiempo de cómputo crece aún más rápido que la memoria

porque, al refinar la malla, el paso temporal estable se reduce. La condición de estabilidad de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) indica que la información del flujo no debe avanzar más de una celda por paso temporal. Al disminuir Δx , también debe disminuir Δt . Para cubrir un mismo tiempo total, el número de pasos aumenta aproximadamente proporcional a N . En consecuencia, el costo total en operaciones crece, en orden de magnitud, de forma cercana a una ley cúbica con Re . Cuando la difusión viscosa es relevante, surge además un límite temporal más severo con $\Delta t \propto \Delta x^2/\nu$. En la práctica, los prefactores dependen fuertemente del método y de la arquitectura: los métodos pseudo-espectrales ofrecen alta precisión por grado de libertad pero añaden desafíos como el cálculo de las transformadas de Fourier, la necesidad de eliminación o tratamiento de efectos de *aliasing* y de buenos protocolos de comunicación. Además, en configuraciones no homogéneas η puede ser aún menor en regiones específicas, lo que obliga a usar mallas no uniformes o a aumentos globales de resolución.

2.4.3. Geophysical High-Order Suit for Turbulence (GHOST)

GHOST (Mininni y col. 2011; Rosenberg y col. 2020) es el código con el que se realizaron las simulaciones de esta tesis. Se trata de un *solver* pseudo-espectral con condiciones de contorno periódicas, pensado para resolver, con alta fidelidad, la dinámica de flujos turbulentos incompresibles en una amplia variedad de configuraciones y regímenes. Su idea de base es sencilla: representar los campos en el espacio de Fourier, evaluar los términos no lineales en el espacio físico mediante transformadas rápidas de Fourier y proyectar sobre el subespacio solenoidal para imponer incompresibilidad. Lo que lo vuelve particularmente útil para el propósito de esta tesis no es solo esa precisión espectral, sino la forma en que separa la física de la maquinaria numérica. Gracias a su estructura, pasar de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes a alguna aproximación como la de Boussinesq, añadir efectos de rotación o estratificación, acoplar escalares pasivos, o seguir partículas trazadoras o inerciales se reduce a incorporar o modificar términos bien localizados, sin tocar el andamiaje de transformadas y comunicaciones. A esto se suma la posibilidad de implementar distintos esquemas de forzado a gran escala (inyección de energía a bajo número de onda con tasa controlada, forzados con helicidad o patrones deterministas como ABC o Taylor-Green, así como forzados aleatorios solenoidales), que permiten generar flujos con propiedades estadísticas y topologías diferentes según el objetivo físico de estudio.

En términos prácticos, esta organización permite explorar preguntas físicas diversas con un único instrumento: comparar cómo cambian los balances energéticos al introducir distintos procesos físicos o al variar el forzado; estudiar transporte y mezclado de partículas o escalares; o cuantificar el *clustering* de partículas bajo distintas condiciones, siempre respetando el criterio de resolución discutido en la sección anterior. Al mismo tiempo, el diseño del código está orientado a aprovechar recursos de cómputo muy distintos: GHOST puede ejecutarse tanto en una computadora personal como en un clúster de supercómputo, admitiendo desde simulaciones moderadas en pocos núcleos hasta proyectos a gran escala con descomposición del dominio y concurrencia híbrida. Esa gran escalabilidad, sumada a un manejo cuidadoso de la lectura y escritura de datos y a la posibilidad de pausar y relanzar las simulaciones sin costo apreciable, facilita integrar al sistema por tiempos largos y acumular estadísticas confiables sin sacrificar la fidelidad espectral.

En lo numérico se adoptan además tres prácticas clave. Primero, el *dealiasing* con la regla de los dos tercios. En términos simples, los productos no lineales generan componentes de número de onda más altos que los que la malla puede representar. Si no se remueven, estas componentes se retroalimentan y reaparecen dentro del rango resuelto como señales espurias. Para evitarlo, se recorta de antemano el tercio superior del espectro en cada dirección (es decir, se filtra) y se trabaja con la franja restante, dejando margen para que las interacciones no desborden la banda espectral útil. Este filtrado evita contaminación numérica y preserva la cascada y los balances de energía sin introducir disipación artificial.

Segundo, la integración temporal se realiza con esquemas explícitos de Runge-Kutta de bajo almacenamiento y orden variable, de segundo a cuarto orden según la física y la resolución. El tamaño del paso se ajusta para respetar los límites de estabilidad. Esta combinación prioriza la precisión por grado de libertad y mantiene un costo por paso competitivo, lo que hace de GHOST una herramienta adecuada para los objetivos de esta tesis: estudiar fenómenos turbulentos con el

mayor detalle posible, variando la física de interés sin cambiar de instrumento ni comprometer la calidad numérica.

Tercero, debemos dedicar unas palabras a los métodos usados para integrar las partículas. Las partículas pueden estar en cualquier punto del espacio, que puede no corresponder a los puntos de la malla Euleriana. Para calcular la fuerza sobre las partículas en esos puntos de orden alto, GHOST usa *splines* globales de orden 3 para estimar la velocidad del fluido en puntos que no son los de la malla. Las ecuaciones ordinarias de las partículas luego se integran en el tiempo usando los mismos métodos de Runge-Kutta que para el fluido. Esta metodología sigue el método introducido por Yeung y Pope 1988.

Capítulo 3

Flujos anisótropos e inhomogéneos

En turbulencia isotropa y homogénea (HIT), los experimentos en túneles de viento (Shen y Warhaft 2002) y las simulaciones numéricas en cajas periódicas (Kaneda y col. 2003; Buaria y col. 2019) han sido fundamentales: permiten contrastar con la teoría y poner a prueba nuevas ideas. Esto también es cierto en flujos con material particulado. Los túneles de viento permiten comparar teoría y experimentos en condiciones idealizadas cuando el flujo turbulento transporta partículas (Obligado y col. 2014). Sin embargo, en flujos no homogéneos multifase carecemos de referencias igualmente consolidadas que posibiliten una comparación sistemática entre teoría, experimentos y simulaciones.

En los últimos años, el flujo de von Kármán en el laboratorio (Mordant y col. 2002, 2004; Volk y col. 2008; Poncet y col. 2008; Huck y col. 2017; Angriman y col. 2020) y el flujo análogo de Taylor-Green en simulaciones numéricas (A. E. Green y Taylor 1937; Mininni y col. 2011; Kreuzahler y col. 2014) han permitido alcanzar grandes números de Reynolds en regímenes de flujo anisótropos, inhomogéneos y, en muchos casos, multifase. Las comparaciones entre experimentos y simulaciones mostraron que estos flujos, aunque difieren en el mecanismo de forzado y en las condiciones de contorno, comparten propiedades geométricas (Huck y col. 2017; Mininni y col. 2011; Angriman y col. 2020), topológicas (Huck y col. 2017; Angriman y col. 2021), y estadísticas (Angriman y col. 2020), tanto desde una perspectiva Euleriana como Lagrangiana.

Como vimos en el Capítulo 2, el fenómeno de acumulación de partículas depende de las propiedades y la geometría del flujo. Y es esperable que en flujos anisótropos (más realistas para el estudio de configuraciones geofísicas que HIT), estas propiedades cambien. Un avance en estas comparaciones, que permitiría una mejor comprensión del efecto de la anisotropía e inhomogeneidad, es estudiar las propiedades geométricas de los ceros de los campos vectoriales y de los puntos de acumulación de partículas (Goto y J. C. Vassilicos 2006; Goto y Vassilicos 2008; Monchaux y col. 2010; Fiabane y col. 2013; Obligado y col. 2014; Mora y col. 2021). En un estudio reciente (Mora y col. 2021) se presentó un análisis combinado de las propiedades espaciales de los ceros y del *clustering* de partículas inerciales mediante teselados de Voronoi. Los puntos de estancamiento, muestreados por partículas inerciales, también se han utilizado para caracterizar propiedades geométricas tridimensionales de HIT mediante el teorema de Rice (Ferran y col. 2022). Se sabe que incluso en HIT, los puntos nulos de la velocidad, de la vorticidad y de la aceleración Lagrangiana no se distribuyen homogéneamente en el espacio, sino que se agrupan en cúmulos (Goto y J. C. Vassilicos 2006; Mora y col. 2021). En flujos multifase, ciertas partículas tienden a acumularse de manera preferencial en las proximidades de algunos de estos ceros, afectando su camino libre medio y, en última instancia, alterando procesos físicos relevantes como la formación de gotas en nubes, el mezclado de sustancias químicas y las transiciones de fase. El efecto del flujo medio, así como de la anisotropía e inhomogeneidad del flujo, sobre la acumulación preferencial de ceros de los campos y de partículas será el objetivo de estudio de este capítulo de la tesis.

Como también fue mencionado en el Capítulo 2, no todas las partículas *clusterizan*, y todavía no está claro qué parámetros gobiernan este fenómeno. Las partículas pesadas muy pequeñas

(del tamaño de la escala de Kolmogorov) se acumulan (Obligado y col. 2019). Las partículas neutralmente flotantes pequeñas (menores que la microescala de Taylor, pero mayores que la de Kolmogorov) en HIT no *clusterizan*, pero sí lo hacen en experimentos de von Kármán (Machicoane y col. 2014, 2016) si su tamaño es comparable a la escala integral, probablemente debido al muestreo preferencial global de las inhomogeneidades del flujo. En el rango intermedio, cuando su tamaño es comparable a la microescala de Taylor, aun no sabemos. No ha sido estudiado y no está claro por qué ocurriría, si por efectos de muestreo a gran escala o por diferencias topológicas del flujo turbulento que resultarían en mecanismos de *clustering* inercial. Las partículas no son ni tan chicas como para no sentir las inhomogeneidades a gran escala, ni tan grandes como para no ser afectadas por las fluctuaciones turbulentas del flujo.

En este capítulo se presentan los resultados de un estudio numérico y experimental sobre las propiedades de acumulación (o *clustering*) en distintos flujos turbulentos multifase. Con este objetivo, analizamos y comparamos la topología de diferentes flujos a números de Reynolds similares (HIT, un flujo de Taylor-Green, y un experimento de von Kármán) mediante teselados de Voronoï tridimensionales de los puntos de estancamiento de la velocidad (STPS), los ceros de la vorticidad (WZEROS) y de la aceleración Lagrangiana (ZAPS). De la misma manera estudiamos la acumulación preferencial de partículas neutralmente flotantes, de tamaño cercano a la escala de Taylor (PART) en el experimento de von Kármán. Los resultados experimentales de partículas se contrastan contra simulaciones numéricas que emplean un modelo sencillo de partículas puntuales, descrito en el Capítulo 2 por la ecuación (2.13). El objetivo es entender el mecanismo subyacente de acumulación preferencial de partículas en flujos no idealizados, mediante el estudio y la comparación de sus propiedades estadísticas con casos ya conocidos de *clustering* inercial. Los resultados de este capítulo fueron publicados en Angriman y col. 2022.

3.1. Simulaciones y experimentos

3.1.1. Turbulencia isotrópica y homogénea y el flujo de Taylor Green

Como primer caso de estudio y para fijar un punto de apoyo contra el cual evaluar desviaciones en el comportamiento, generamos numéricamente HIT, y un flujo turbulento de Taylor-Green (TG), que emula la geometría a gran escala del experimento de von Kármán. Nuestro estudio estará centrado en las simulaciones numéricas, mientras que el experimento se servirá como punto de comparación para validar los modelos.

La estrategia para HIT consiste en sostener la turbulencia inyectando energía sólo en las escalas más grandes en forma aleatoria: excitamos todos los modos en una cáscara de Fourier alrededor de un número de onda $k_F = 2\pi/L_F$. En nuestras simulaciones forzamos en la mayor escala disponible, de modo que $k_F = 1$ (esto significa que la longitud característica del forzado es $L_F^{\text{HIT}} = 2\pi$). El forzado es solenoidal, de amplitud constante, y con fases aleatorias que evolucionan suavemente en el tiempo (con tiempo de correlación $\approx 0,5\tau_L$, donde τ_L es el tiempo de giro de los remolinos en la escala integral), evitando así imponer geometrías o direcciones preferentes. De forma explícita, el forzado es

$$\mathbf{F}_{\text{HIT}} = F_0 \sum_{|\mathbf{k}| \in (0,2)} \text{Re} \left\{ i \frac{\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}}{|\mathbf{k}|} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + \phi_{\mathbf{k}})} \right\},$$

donde $\text{Re}\{\cdot\}$ denota la parte real, $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}}$ es un versor en la dirección del vector de onda $\mathbf{k}$, y $\phi_{\mathbf{k}}$ una fase aleatoria. Con esta receta el sistema alcanza un régimen estacionario en el que, en promedio, la energía que entra por las escalas grandes se transfiere no linealmente hacia escalas más pequeñas, hasta disiparse en esas escalas a una tasa casi constante: la **cascada** emerge de manera natural, sin estar gobernada por el forzado más que en la escala más grande.

El flujo resultante muestra grandes remolinos de tamaño L_F que se fragmentan en estructuras sucesivamente menores; en cortes bidimensionales (por ejemplo, en los planos xy y xz , como los que se ven en la Fig. 3.1) aparece un tramado sin direcciones privilegiadas: vetas y filamentos estadísticamente equivalentes al rotar u observar el flujo desde otra orientación. Al cambiar de escala dentro del rango inercial, esas texturas conservan su aspecto medio como una manifestación

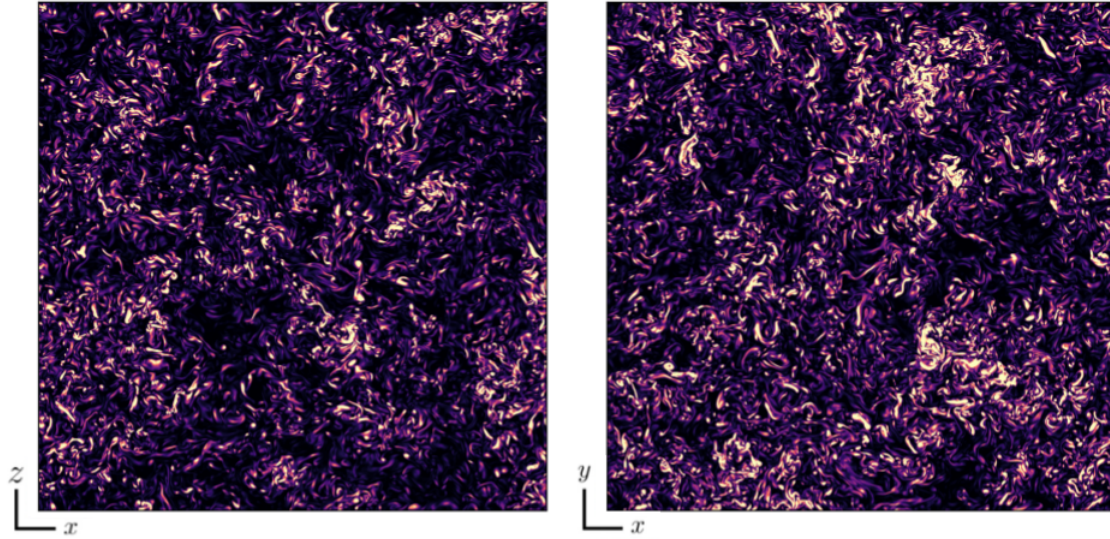


Figura 3.1: Cortes bidimensionales en los planos xy y xz del campo de vorticidad cuadrática, $\omega^2 = (\nabla \times \mathbf{u})^2$, en una simulación numérica directa de HIT. Colores más claros indican mayor intensidad de vorticidad.

visual de la autosimilaridad propia de la turbulencia desarrollada. Este caso, estadísticamente homogéneo e isotrópico, servirá como referencia para distinguir, más adelante, cambios asociados a la inhomogeneidad o a la anisotropía del flujo.

Para las simulaciones TG, el forzado externo $\mathbf{F}$ se define con el campo vectorial de Taylor-Green,

$$\mathbf{F}_{\text{TG}} = F_0 [\sin x \cos y \cos z \hat{\mathbf{x}} - \cos x \sin y \cos z \hat{\mathbf{y}}],$$

que genera un arreglo periódico de grandes vórtices contra-rotantes. En el subdominio $[0, \pi) \times [0, \pi) \times [0, \pi)$ este patrón se reduce a dos vórtices separados verticalmente por una capa de cizalla. En adelante, nos referiremos a este subdominio como “celda VK” por analogía con el flujo experimental que se describe en la Sección 3.1.2 (ver la Fig. 3.2). En TG, la magnitud del número de onda del forzado cumple $|\mathbf{k}_F^{\text{TG}}| = \sqrt{3}$, por lo que la escala forzada es

$$L_F^{\text{TG}} = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}_F^{\text{TG}}|} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}}.$$

Aun cuando ambas simulaciones comparten el mismo número de Reynolds y criterios de resolución, HIT y TG difieren de manera sustancial en su geometría a gran escala. En HIT no hay direcciones privilegiadas ni flujo medio: por construcción $\langle \mathbf{u} \rangle_t = \mathbf{0}$ y las propiedades estadísticas del flujo son isotrópicas y homogéneas. En cambio, TG introduce una dirección preferencial asociada a la capa de cizalla que separa los dos vórtices contra-rotantes (tomamos $\hat{\mathbf{z}}$ como normal a dicha capa). Esta geometría impone anisotropía e inhomogeneidad a gran escala, como se puede observar en la distribución espacial de trayectorias de trazadores en la Fig. 3.3. La energía y la enstrofia se concentran cerca de la capa de cizalla, y la organización espacial de vórtices y trayectorias quedan parcialmente estiradas a lo largo de $\hat{\mathbf{z}}$.

Las simulaciones se realizaron con el mismo método numérico y criterios de resolución descritos en el Capítulo 2, usando una resolución espacial de 768^3 puntos de grilla. En la Figura 3.4 se muestra el espectro de energía de HIT y TG, junto con una ley de potencia con exponente $-5/3$, como referencia del rango inercial, que en ambos casos alcanza poco más de una década. Además, ambos flujos son sembrados con 10^6 partículas inerciales distribuidas aleatoriamente, integradas a la dinámica mediante el modelo efectivo dado por la Ec. (2.13). Consideramos una única especie de partículas con $\text{St} \approx 10$.

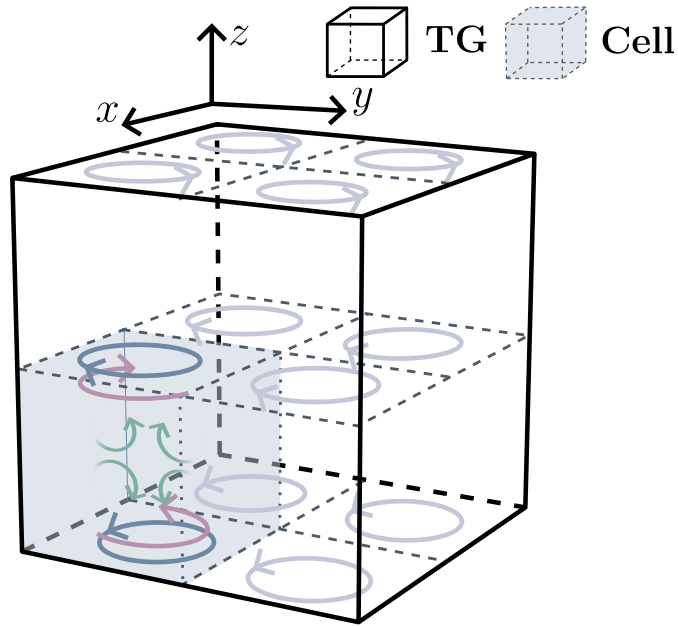


Figura 3.2: Diagrama de las simulaciones de Taylor-Green. El dominio periódico $(2\pi L_0)^3$ está delineado con líneas negras continuas, y las celdas $(\pi L_0)^3$ con estructuras de gran escala que se asemejan al flujo de von Karman (ver la Sección 3.1.2) están indicadas con líneas de puntos. Adaptado de Espanol y col. 2025.

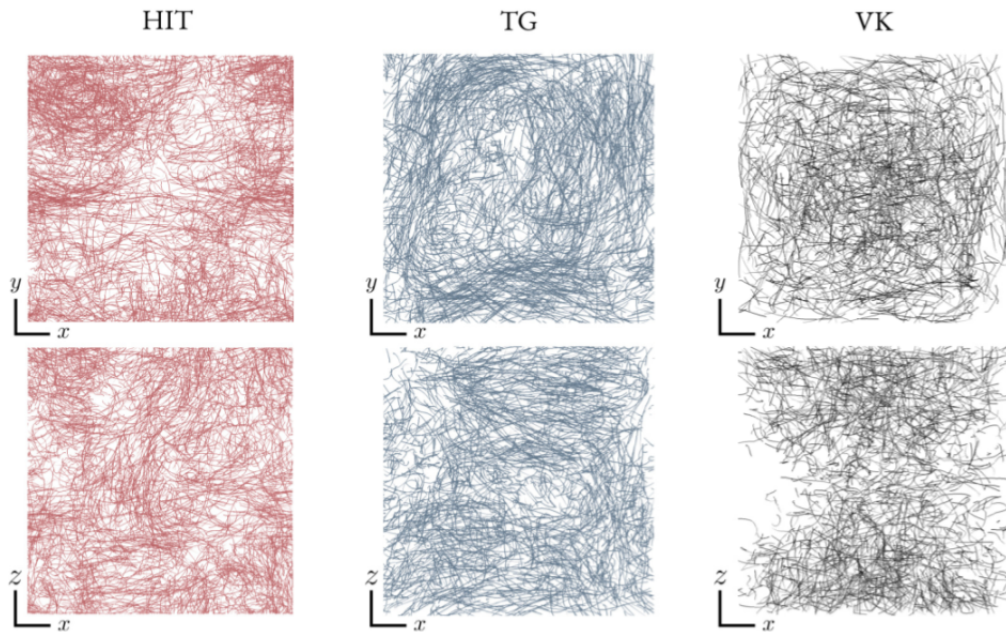


Figura 3.3: Trayectorias de partículas trazadoras (con la misma velocidad que el elemento de fluido) proyectadas en los planos xy y xz , en las simulaciones HIT y TG, y en el experimento VK. Se nota la distribución más homogénea e isotrópica de trayectorias en HIT respecto a los otros dos casos, y la similitud de la distribución espacial entre TG y VK. Adaptado de Espanol y col. 2025.

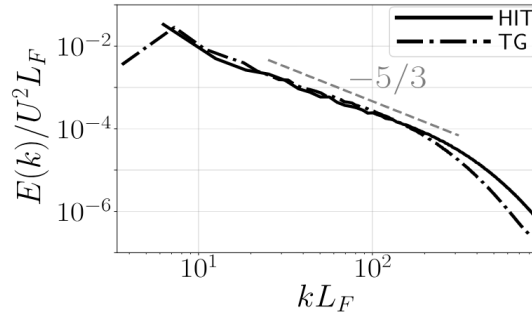


Figura 3.4: Espectro de energía $E(k)$ para simulaciones de HIT y con forzado TG. Se muestra una ley de potencias con exponente $-5/3$ como referencia.

Tabla 3.1: Parámetros para el experimento (EXP) y para las simulaciones numéricas directas (DNS) de Taylor-Green (TG) y HIT. $\lambda = (15\nu U^2/\varepsilon)^{1/2}$ es la microescala de Taylor, donde ν es la viscosidad cinemática, ε la tasa de inyección de energía, U la velocidad r.m.s., y $\eta = (\nu^3/\varepsilon)^{1/4}$ es la escala de Kolmogorov; ambas están normalizadas por la escala de forzado L_F . Los números de Reynolds de microescala de Taylor e integral son $Re_\lambda = U\lambda/\nu$ y $Re = UL_F/\nu$, respectivamente. St y $Re_p = 2R|\mathbf{u} - \mathbf{v}|/\nu$ son, respectivamente, el número de Stokes y el número de Reynolds de las partículas. σ_V/σ_{RPP} es el cociente entre las desviaciones estándar de los volúmenes de Voronoï normalizados y la de un proceso de Poisson aleatorio (RPP). Finalmente, $\langle V_c \rangle^{1/3}$ es el tamaño medio lineal de los clústers, para STPS (S), ZAPS (Z), WZERO (W) y PART (P).

ϵ	λ/L_F	η/L_F	Re_λ	Re	St	Re_p	σ_V/σ_{RPP}				$\langle V_c \rangle^{1/3}/\eta$			
	$\times 10^{-2}$	$\times 10^{-4}$		$\times 10^3$			S	Z	W	P	S	Z	W	P
EXP	2.0	5.0	430	21	9.95	398	—	—	—	2.33	—	—	—	930
TG	3.6	12	227	6.4	9.41	371	4.09	2.69	2.81	2.84	152	39	22	47
HIT	3.3	8.7	377	14	9.88	317	5.41	3.24	3.17	4.15	215	49	25	46

3.1.2. El experimento de Von-Karman

El experimento de von Kármán (denotado aquí como EXP, y el flujo generado como VK) consta de dos discos enfrentados de diámetro $D = 19$ cm (igual a la escala del forzado, L_F^{EXP}), cada uno con 8 paletas rectas, separados por una distancia vertical $H = 20$ cm. Las paletas se ubican en una celda de sección cuadrada de tamaño $(20 \times 20 \times 50)$ cm³, donde se deja espacio detrás de los impulsores para los ejes que los conectan a los motores y para la refrigeración. La celda se llena con agua destilada proveniente de un sistema de ósmosis inversa de doble paso. El volumen experimental accesible, situado entre los dos discos, es entonces de $(20 \times 20 \times 20)$ cm³. Cada paleta es accionada por un servomotor rotativo sin escobillas Yaskawa SMGV-20D3A61, con controladores Yaskawa SGD7-8R4D01A. Los dos discos rotan en direcciones opuestas con velocidad angular $\pm 2\pi f_0$, con $f_0 = 50$ rpm. Esto genera dos grandes celdas de circulación contrarotantes que producen, en promedio, una capa de cizalla intensa en el plano medio entre los discos. Una circulación secundaria en la dirección axial también es generada por las paletas, dando lugar a un flujo turbulento tridimensional con un flujo medio anisótropo a gran escala, representado esquemáticamente en la Fig. 3.5. Una visualización de la dinámica flujo se muestra en la Fig. 3.3 mediante las trayectorias de partículas trazadoras en el experimento.

Sembramos este flujo con partículas inerciales de radio $R = 3$ mm, que son esferas plásticas con densidad 1.02 veces la densidad del fluido, impresas en 3D utilizando acrilonitrilo butadieno estireno (ABS). El radio de las partículas satisface $R/\lambda = 0.77$ y $R/\eta = 31$, donde λ es la escala de Taylor y η la escala de Kolmogorov, como fueron definidas en la Sección 2.1.3. Las mediciones de la dinámica de las partículas se realizaron en un volumen de observación V_{obs}^{EXP} de tamaño $(16 \times 16 \times 16)$ cm³, centrado en el punto medio geométrico de la celda, empleando la técnica de velocimetría por seguimiento de partículas (PTV, por sus siglas en inglés) con dos cámaras de alta velocidad Photron FASTCAM SA3, a una frecuencia de muestreo de 125 fps. En total se registraron del orden de 10^5 fotogramas. En cada fotograma, el número medio de partículas registradas simultáneamente es 11, mientras que el máximo registrado es 29. Es importante notar que las

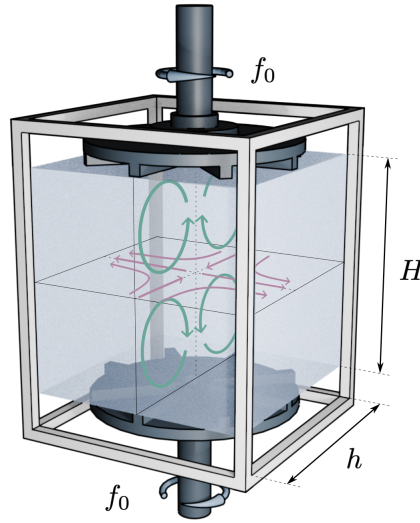


Figura 3.5: Esquematización del experimento de von Karman. H es la separación entre los dos impulsores, D es el diámetro de los impulsores, h es la longitud horizontal de la celda y f_0 denota la frecuencia de rotación de las paletas. Las flechas dentro de la celda ilustran las características principales del flujo medio a gran escala. El volumen marcado en gris es aproximadamente equivalente a la “celda VK”, marcada en el mismo color en la Fig. 3.2. Adaptado de Espanol y col. 2025.

partículas pueden salir y reingresar al volumen de observación, explorando también las regiones ubicadas detrás de los impulsores.

3.1.3. El tamaño de las partículas

Dado que el radio de las partículas en el experimento es tal que la aproximación de Maxey-Riley-Gatignol (MRG) no es válida (ver, por ejemplo, Qureshi y col. 2007; Calzavarini y col. 2008; Volk y col. 2008; Homann y Bec 2010 para estudios detallados de las limitaciones de esta aproximación), y puesto que las ecuaciones de movimiento de nuestras partículas no se conocen, el modelo descrito por la Ec. (2.13) debe considerarse como un modelo con parámetros efectivos, o como un modelo de referencia con el cual comparar, a fin de determinar si el *clustering* de las partículas en el experimento se asemeja al esperado a partir de los mecanismos de *clustering* en el caso de partículas inerciales.

Es importante notar además que, aunque podrían considerarse términos de orden superior en el radio de las partículas en las ecuaciones completas de MRG (por ejemplo, incluyendo fuerzas de masa añadida, como en Calzavarini y col. 2008, o manteniendo las correcciones de Faxén (Calzavarini y col. 2009) y las fuerzas de Basset-Boussinesq (Brennen 2005)), las partículas del experimento cumplen $R \gg \eta$ y, por tanto, la expansión perturbativa en el radio de las partículas en la aproximación de MRG no es válida. De hecho, partículas neutralmente flotantes ligeramente mayores que η en dicha aproximación no presentan *clustering* (Calzavarini y col. 2008; Reartes y Mininni 2021). En consecuencia, consideramos a la ecuación (2.13) simplemente como una ecuación efectiva para partículas con un único parámetro ajustable. Más adelante compararemos contra otros modelos posibles para partículas grandes.

El parámetro ajustable en la Ec. (2.13) depende del número de Stokes de las partículas en el experimento. Para partículas de tamaño finito se sabe que su dinámica puede depender de muchos parámetros (Fiabane y col. 2012), y que la definición convencional del número de Stokes no caracteriza adecuadamente la dinámica de las partículas (Xu y E. Bodenschatz 2008; Fiabane y col. 2012). Recordemos que el número de Stokes es $St = \tau_p / \tau_f$, donde τ_p es el tiempo de respuesta de la partícula, y τ_f un tiempo característico del flujo. Usando la definición estándar del tiempo de relajación viscoso de la partícula (Cartwright y col. 2010),

$$\tau_p^v = \frac{2}{9} \left(\frac{\rho_p}{\rho_f} + \frac{1}{2} \right) \frac{R^2}{\nu}, \quad (3.1)$$

donde ρ_p/ρ_f es la razón de densidades entre la partículas y el fluido, y tomando τ_f como la escala de Kolmogorov τ_η , para las partículas en el experimento se obtiene $St_v^{EXP} = \tau_p^v/\tau_\eta = 312$. Esta elección daría partículas casi desacopladas del fluido, es decir, con demasiada inercia, si se usara en la ecuación (2.13).

Para calcular un τ_p efectivo en el experimento, útil para las simulaciones, fijamos $St = \tau_p/\tau_\eta$ y estimamos

$$\tau_p^{EXP} = \left(\frac{R^2}{\varepsilon} \right)^{1/3}, \quad (3.2)$$

como el tiempo de giro turbulento en la escala de la partícula, R . Para una partícula esférica de radio R y masa m_p que se mueve con velocidad $\mathbf{v}$ en un campo de velocidad uniforme $\mathbf{u}$, la fuerza de arrastre por unidad de masa se estima (Batchelor 2000) como

$$\frac{F_D}{m_p} = \frac{1}{2} \frac{\rho_p}{m_p} S C_D(Re_p) |\mathbf{u} - \mathbf{v}| (\mathbf{u} - \mathbf{v}), \quad (3.3)$$

donde $\rho_p = 3m_p/(4\pi R^3)$ y $S = 4\pi R^2$ es la superficie de la partícula esférica. El coeficiente de arrastre C_D depende de $Re_p = 2R|\mathbf{u} - \mathbf{v}|/\nu$. Entonces,

$$\frac{F_D}{m_p} = \frac{3}{2} C_D(Re_p) \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{v}|}{R} (\mathbf{u} - \mathbf{v}), \quad (3.4)$$

que se aproxima como $F_D/m_p \approx (\mathbf{u} - \mathbf{v})/\tau_p$ para tener un τ_p efectivo en MRG, resulta en

$$\tau_p \sim \frac{2}{3} \frac{1}{C_D(Re_p)} \frac{R}{\langle |\mathbf{u} - \mathbf{v}| \rangle}. \quad (3.5)$$

Esta expresión depende de la velocidad de deslizamiento de las partículas, $\mathbf{u} - \mathbf{v}$, que no conocemos. Sin embargo, usando simulaciones para partículas de tamaño finito y flotabilidad neutra, Cisse y col. 2013 estimaron $\langle |\mathbf{u} - \mathbf{v}| \rangle \sim (\varepsilon R)^{1/3}$. Sustituyendo en la Ec. (3.5) se obtiene

$$\tau_p \sim \frac{2}{3} \frac{1}{C_D(Re_p)} \left(\frac{R^2}{\varepsilon} \right)^{1/3}. \quad (3.6)$$

En el experimento también estimamos la velocidad relativa entre la partícula y el fluido (la velocidad de deslizamiento) como (Bellani y Variano 2012)

$$|\mathbf{u} - \mathbf{v}| \approx \left(|\langle u \rangle^2 - \langle v \rangle^2| \right)^{1/2},$$

a partir de las velocidades medidas r.m.s. 3D del flujo y de las partículas, lo que resulta en $Re_p \approx 400$. Para este valor, $C_D \approx 0,6$ (Batchelor 2000; Morrison 2013), y el prefactor adimensional $2/(3C_D) \approx 1,1$; por lo tanto, $\tau_p^{EXP} = (R^2/\varepsilon)^{1/3}$ incorpora efectivamente correcciones de arrastre no lineales, y resulta $St^{EXP} = 9,95$. Esto nos dice que, efectivamente, salvo por un prefactor de orden unitario, podemos usar la Ec. (3.2) para estimar el τ_p efectivo de las partículas y usar ese valor en el modelo numérico.

En las DNS se fija τ_p igual a τ_p^{EXP} en unidades de τ_η , es decir, se adopta el mismo número de Stokes dentro de las fluctuaciones estadísticas. En otras palabras, dados los valores de τ_p^{DNS} en las simulaciones y de St^{EXP} en el experimento, se fija $\tau_p^{DNS} = St^{EXP} \tau_\eta^{DNS}$ en la ecuación (2.13). El radio efectivo de las partículas en las DNS puede estimarse de forma consistente con la ecuación (3.6) como

$$R = \left[\varepsilon (\tau_p^{DNS})^3 \right]^{1/2}.$$

Los valores de St y Re_p para EXP, TG y HIT figuran en la Tabla 3.1. Para un análisis breve de cómo otras fuerzas afectan la acumulación de partículas, ver la Sección 3.6.

3.2. Topología de los flujos anisótropos y acumulación

Se ha hipotetizado que la acumulación de partículas ocurre en ciertos puntos de un flujo turbulento, en los que la geometría del flujo, o las fuerzas que actúan sobre las partículas, hacen que estas transiten por tiempos largos en esas regiones. Los candidatos a estudiar, es decir, los ceros del flujo que podrían causar acumulación, son los puntos de estancamiento de la velocidad con $\mathbf{u} = 0$ (STPS), los puntos con vorticidad cero (WZERO) o los puntos con aceleración Lagrangiana nula en donde las fuerzas se anulan (ZAPS). Claramente estos puntos son solo accesibles en simulaciones. Por otro lado, la posición de las partículas (PART) está disponible tanto en las mediciones de laboratorio como en las simulaciones. En esta sección comparamos la estadística de estas cantidades contra HIT, y para ver a qué cantidad se parece la acumulación de las partículas. Para esto cuantificaremos la acumulación de cada conjunto de ceros o de las partículas midiendo el volumen medio ocupado por en el fluido usando los volúmenes de celdas de Voronoï. Volúmenes chicos corresponden a ceros o partículas muy cercanas, y a acumulación.

Los ceros de todos los campos vectoriales se calcularon en las DNS empleando los métodos descritos en Haynes y Parnell 2007 y Mora y col. 2021. Con las posiciones de los ceros y con las posiciones de las partículas en el experimento y en las DNS, se computaron los teselados de Voronoï 3D para todos los conjuntos de datos. Mientras que las DNS utilizan 10^6 partículas, en el experimento tenemos un máximo de ≈ 29 partículas en cada fotograma, lo que da como resultado un número significativamente menor de celdas de Voronoï cerradas: hay en promedio 3 celdas cerradas por fotograma. Al considerar todos los fotogramas, esto da un total de $1,9 \times 10^5$ celdas cerradas. Además, en las DNS los teselados se realizaron con condiciones de contorno periódicas. Estas dos observaciones serán relevantes para interpretar algunos de los resultados.

La Figura 3.6 muestra las densidades de probabilidad (PDFs) de los volúmenes normalizados de las celdas de Voronoï, $\mathcal{V} = V/\langle V \rangle$ para STPS, ZAPS y ZWEROs en TG y HIT, y las PDFs de los volúmenes de las celdas de Voronoï para las partículas en las DNS y en el experimento. Para los datos experimentales, dado que el número total de partículas fluctúa en el tiempo (ya que las partículas pueden entrar o salir del volumen de observación $V_{\text{obs}}^{\text{EXP}}$ y, como ya se mencionó, pueden explorar regiones detrás de los discos) $\langle V \rangle_{\text{EXP}}$ se define como el volumen ocupado por el fluido entre las paletas dividido por el número medio de partículas por imagen, calculado a partir de todas las imágenes disponibles. Esta elección es robusta frente a variaciones en el número de partículas (Fiabane y col. 2013) y frente a la presencia de volúmenes espúreos cerca de los bordes de las imágenes, como se discutirá más adelante.

Se ha discutido que el mecanismo de forzado o el flujo a gran escala pueden introducir cambios en el *clustering* de los ceros de los campos vectoriales del fluido (Goto y J. C. Vassilicos 2006). Esta figura confirma que, efectivamente, es así: HIT exhibe un *clustering* más intenso de todos los ceros de los campos que TG, es decir, mayores probabilidades de encontrar volúmenes pequeños. En las figuras, la PDF resultante de un proceso de Poisson aleatorio (en adelante RPP, correspondiente a una distribución homogénea de ceros o partículas) se muestra como referencia en línea punteada gris. La mayor desviación estándar de las PDFs (comparada con la de la RPP, cuya desviación estándar es $\sigma_{\text{RPP}} \approx 0,42$) y las colas más marcadas (de clústeres hacia la izquierda y de vacíos hacia la derecha) indican *clustering* más intenso. Sin embargo, los volúmenes de las celdas de Voronoï de las partículas son similares para los tres flujos y, notablemente, el nivel de *clustering* cuantificado por $\sigma_{\mathcal{V}}$ es similar para TG y EXP (véase la tabla 3.1). Como se discutirá a continuación, las diferencias entre EXP y TG pueden asociarse con muestreo finito y con efectos de borde.

3.3. Limitaciones experimentales

La medición del *clustering* 3D en experimentos presenta múltiples desafíos. La siembra de partículas debe ser lo suficientemente baja como para permanecer en el régimen de suspensión diluida (Elghobashi 1994), lo que se traduce en pocas partículas por medición. Al calcular los teselados de Voronoï tridimensionales, esto se traduce en un número reducido de celdas cerradas, aproximadamente proporcional a la raíz cúbica del número total de partículas detectadas, es decir, $\propto \sqrt[3]{N}$. En consecuencia, el número de celdas de Voronoï cerradas crece lentamente con

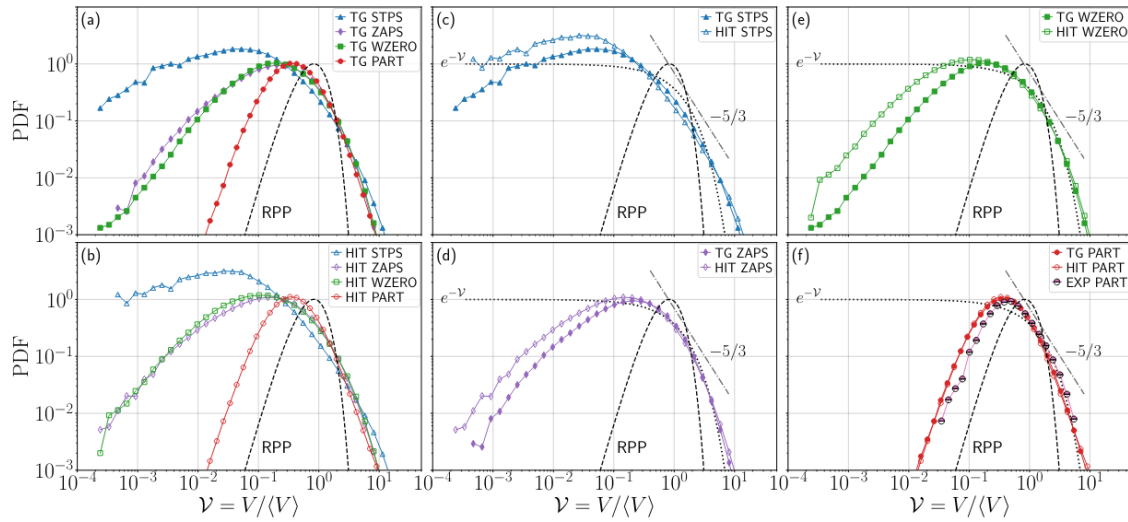


Figura 3.6: Funciones de densidad de probabilidad (PDFs) de volúmenes de Voronoï normalizados por el volumen medio, $V = V/\langle V \rangle$, para STPS, ZAPS, WZERO y para las posiciones de partículas inerciales (PART). Los paneles (a) y (b) muestran una comparación de todas las cantidades en TG y HIT. PDFs de (c) STPS, (d) ZAPS y (e) WZERO para TG y HIT. (f) PDFs de PART para TG, HIT y EXP. Se muestran como referencias un proceso de Poisson aleatorio (RPP), una exponencial, y una ley de potencias de $-5/3$.

el número de partículas (ver, por ejemplo, Tagawa y col. 2012 para otro estudio de *clustering* 3D en experimentos). Por último, las condiciones de contorno tienen un efecto drástico en la estadística. En esta sección comparamos DNS y datos experimentales para cuantificar el efecto de estas limitaciones. Evaluamos posibles fuentes de sesgo en el teselado calculado a partir de las posiciones instantáneas de las partículas inerciales, procesando datos de DNS de manera de emular las condiciones experimentales.

Primero nos enfocamos en el efecto de los bordes. Las partículas cercanas a los límites de la región de observación en el experimento ocupan celdas abiertas (que siempre se descartan en los análisis) o celdas artificialmente grandes, ya que las partículas que cerrarían esas celdas (o las paredes del dominio) no son visibles en el campo de visión de las cámaras. El resultado se muestra en la Figura 3.7 (recuadro), que presenta la distribución de volúmenes de Voronoï sobre los datos EXP sin imponer ninguna restricción en las celdas cercanas a los bordes (etiquetado como “no BC” en la figura). Es importante notar la cola de ley de potencias para V muy grandes. Reprodujimos esta situación en la DNS de TG computando el teselado imponiendo condiciones de contorno periódicas (“PBC”, consideradas como referencia), sin imponer ninguna condición en los bordes (“no BC”, lo que resulta en una dependencia de ley de potencias), eliminando todas las celdas próximas a los bordes (etiquetadas “FC” en la figura), y descartando las celdas más grandes que dan un volumen total superior al volumen de observación (esto es, quedándonos sólo con volúmenes “físicos”, “PV”). Los resultados se muestran en la Figura 3.7(a). Este último método, aplicado a los datos EXP, da la PDF mostrada en el recuadro de la Figura 3.7(a). Esta estrategia es usada también en la Figura 3.6(f). En todos los casos, $\langle V \rangle$ es el volumen total ocupado por el fluido dividido por el número medio de partículas, para eliminar sesgos, en especial cuando se conservan los volúmenes espurios grandes.

Los contornos sólidos afectan principalmente la estadística de las celdas grandes, pero las colas a la izquierda de las PDFs permanecen iguales independientemente de la estrategia usada para tratar los bordes. Esto sugiere que los bordes no afectan significativamente la determinación de cúmulos, dado que los cúmulos se forman por volúmenes pequeños por debajo de cierto umbral, como se discutirá en la sección siguiente. Además, verificamos que, al analizar datos de DNS del mismo modo que los datos EXP (es decir, considerando las celdas VK no periódicas en TG y conservando sólo las celdas de Voronoï físicas), la distribución de volúmenes de cúmulos reportada en la sección siguiente permanece inalterada.

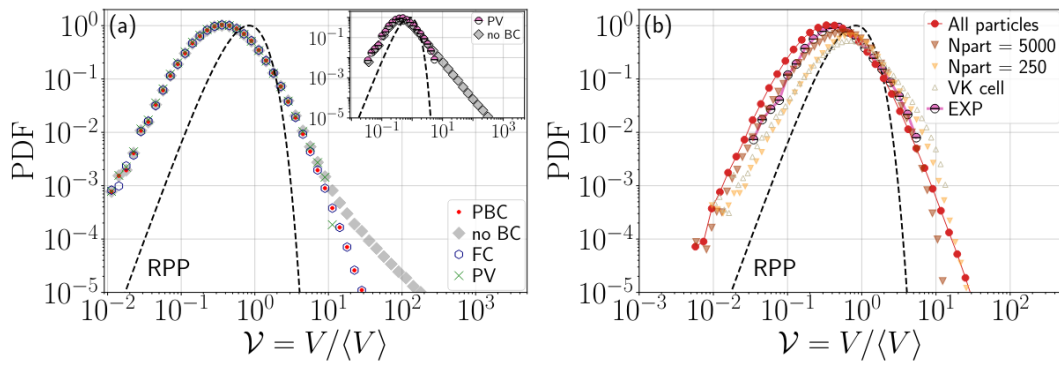


Figura 3.7: (a) Datos de partículas en el flujo TG teselados sin condiciones de contorno (no BC), con condiciones de contorno periódicas (PBC), eliminando celdas fronterizas (FC) o conservando sólo volúmenes físicos (PV). El recuadro muestra datos experimentales. Se notan las colas espurias para ν grandes. (b) Datos TG submuestreados a 250 y 5000 partículas, y submuestreados en una sola celda VK con un promedio de 13 partículas, se comparan con la teselación conservando todas las partículas y con los datos experimentales. Se destaca una menor probabilidad de volúmenes pequeños al submuestrear.

El número relativamente bajo de partículas en los experimentos también afecta a las PDFs. La Figura 3.7(b) muestra los datos experimentales junto con los datos originales numéricos TG (teselados usando condiciones de contorno periódicas) y los datos TG submuestreados a un máximo de 250 y 5000 partículas. Estos conjuntos submuestreados se construyeron de modo tal de seguir la misma distribución del número de partículas por fotograma que en los experimentos. Esto se hizo del siguiente modo. El número máximo de partículas considerado, $N_{\text{máx}}$ (ya sea 250 o 5000), representa el equivalente en las simulaciones del número total de partículas dentro del recipiente experimental (pero no necesariamente dentro del volumen de observación al mismo tiempo). Por ejemplo, $N_{\text{máx}} = 250$ corresponde aproximadamente a 31 partículas disponibles en cada una de las 8 celdas VK individuales que comprende la DNS. La variabilidad experimental en el número real de partículas que ocupan simultáneamente el volumen de observación en cualquier instante se imitó en estos conjuntos numéricos basándose en la distribución de probabilidades de ocupación. Esto es, en la probabilidad de observar un cierto número de partículas en cada instante, calculada empíricamente a partir de los datos experimentales. Como resultado, para $N_{\text{máx}} = 250$, el número medio de partículas por fotograma en el dominio completo de volumen $(2\pi)^3$ es ≈ 111 , lo que conduce a aproximadamente 13 partículas por celda VK del flujo TG, comparable con lo que se obtiene en los experimentos. Estos conjuntos submuestreados se procesaron de manera idéntica a los datos experimentales; es decir, empleando un esquema de teselación sin considerar condiciones de contorno periódicas y conservando sólo los volúmenes físicos en todo el dominio $(2\pi)^3$. Para imitar aún más las condiciones experimentales, el submuestreo de los datos TG también se realizó en una sola celda VK, es decir, únicamente en el octante comprendido por el subdominio $[0, \pi) \times [0, \pi) \times [0, \pi)$, manteniendo así un promedio de sólo 13 partículas por imagen instantánea. Luego, la teselación se llevó a cabo como en los casos $N_{\text{máx}} = 250$ y $N_{\text{máx}} = 5000$ partículas, pero en el subdominio más pequeño; la PDF resultante también se muestra en la Figura 3.7(b).

Disminuir el número de partículas en las DNS de estas maneras, tanto en el dominio $(2\pi)^3$ como en la celda VK, como se muestra en la Figura 3.7(b), da lugar a PDFs cuyas colas izquierdas se desplazan lentamente hacia la RPP, explicando parcialmente el leve déficit de volúmenes pequeños observado en los datos experimentales. La reducción en el número de partículas, junto con el tratamiento de los bordes discutido más arriba, también tiene un efecto pequeño en la concavidad de la cola derecha de la PDF observada. Estas observaciones, junto con estudios detallados de otros sesgos experimentales en teselaciones de Voronoi bidimensionales, incluidos los efectos de submuestreo (Monchaux y col. 2012), y estudios de los efectos de tamaño finito en el análisis de Voronoi de esferas distribuidas aleatoriamente (Uhlmann 2020), indican que dentro de los errores experimentales el nivel de acumulación en las simulaciones y los experimentos es compatible entre sí.

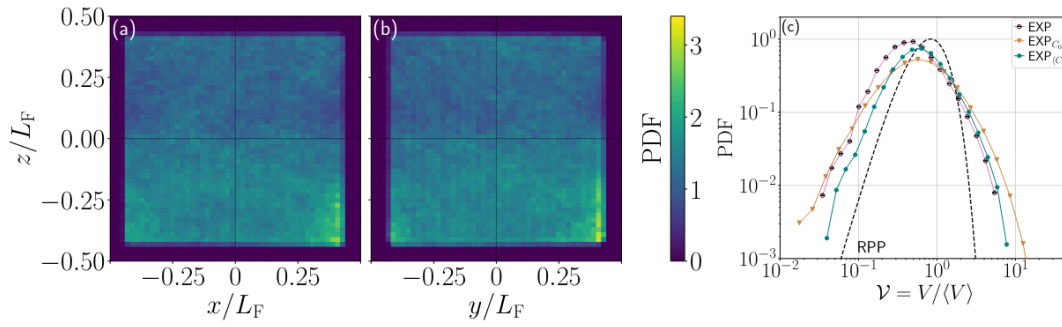


Figura 3.8: PDFs bidimensionales de las posiciones de partículas inerciales en el experimento: (a) plano xz y (b) plano yz , donde $\hat{z}$ es paralelo al eje de rotación de las paletas. (c) PDF de los volúmenes de Voronoi normalizados para los datos experimentales originales, la misma PDF compensando cada volumen por la concentración en la posición correspondiente de la partícula $C_0 = C(\mathbf{x}_0)$ (es decir, PDF de νC_0 , y compensando por la concentración media promediada en cada volumen $\langle C \rangle = \langle C(\mathbf{x}) \rangle_\nu$.

3.4. Efecto de la inhomogeneidad a gran escala

Si bien las partículas pequeñas (mayores que la escala de Kolmogorov) no forman clústeres (Fiabane y col. 2012), se ha reportado en experimentos de von Kármán que partículas neutralmente flotantes con tamaños del orden de la escala integral del flujo se agrupan (Machicoane y col. 2014). En ese caso, los clústeres se asociaron con inhomogeneidades del flujo a gran escala, es decir, con el muestreo preferencial de determinadas zonas del flujo por parte de las partículas, y con efectos de confinamiento (Machicoane y col. 2016), más que con efectos inerciales. Conviene entonces analizar si el comportamiento de acumulación observado en nuestras partículas de tamaño finito es resultado de, o al menos está afectado por, un muestreo preferencial global como el reportado por Machicoane y col. 2014. Con este fin, calculamos el mapa de concentración espacial 3D, $C(\mathbf{x})$, de las partículas en el experimento, utilizando todas las imágenes instantáneas disponibles y normalizado de modo que el promedio en todo el volumen de observación cumpla $\langle C(\mathbf{x}) \rangle_{V_{\text{obs}}}^{\text{EXP}} = 1$.

Las Figuras 3.8(a) y 3.8(b) muestran mapas bidimensionales de la densidad de probabilidad de las posiciones de las partículas (proporcionales a los mapas de concentración 2D) en los planos xz e yz , respectivamente, donde $\hat{z}$ se elige paralelo al eje de rotación de las paletas y a la dirección de la gravedad. Nuestras partículas presentan una distribución más uniforme que las partículas más grandes consideradas en Machicoane y col. 2014, 2016. Esto es consistente con observaciones previas: en Machicoane y col. 2014 las partículas de mayor tamaño son las que evidencian el muestreo preferencial inhomogéneo más marcado, mientras que sus partículas más pequeñas (con $R/\lambda \approx 2,6$) muestrean el flujo de manera más uniforme que las más grandes. No obstante, en la Figura 3.8 aún puede observarse una ligera tendencia de nuestras partículas a ubicarse en la mitad inferior de la celda ($z < 0$), especialmente cerca de las esquinas. Esto puede deberse en parte a asimetrías en la posición de la capa de cizalla en el flujo de von Kármán (Ravelet y col. 2004; Huck y col. 2017), a un pequeño efecto de la gravedad, y a que las partículas entran y salen especialmente de la región ubicada detrás de las paletas. Este último efecto es particularmente visible en las esquinas inferiores de los mapas de concentración.

Esto es el resultado de la inhomogeneidad del flujo, y no ocurre en un flujo homogéneo. Para cuantificar el efecto que tiene el muestreo preferencial del flujo por parte de las partículas sobre el *clustering* observado, calculamos las celdas de Voronoi compensando cada volumen de celda V por su concentración local media de partículas. El objetivo de esto es corregir cualquier subestimación (o sobreestimación) de los volúmenes, resultante de que las celdas estén ubicadas en regiones del espacio con mayor (o menor) concentración media de partículas. Notar que de esta forma queremos separar el efecto de acumulación causado por el flujo medio, del efecto causado por las fluctuaciones turbulentas en el rango inercial (los “efectos inerciales”). Esto puede hacerse de dos maneras. Para una partícula dada ubicada en $\mathbf{x}_0$, el volumen de su celda de Voronoi puede multiplicarse por la concentración media en la posición de la partícula $C(\mathbf{x}_0)$, es decir, $\nu C(\mathbf{x}_0)$, o por la concentración media promediada en toda la celda que contiene esa partícula $\langle C(\mathbf{x}) \rangle_\nu$,

es decir, $\mathcal{V}\langle C \rangle_V$. Por lo tanto, calculamos las PDFs usando estas dos formas de compensar los volúmenes, que se muestran en la Figura 3.8(c) junto con la PDF de $\mathcal{V}$ sin compensación. La forma global de las PDFs permanece similar, conservándose las colas pesadas que se desvían de la RPP. La segunda compensación, usando la concentración promediada en cada celda, no cambia significativamente la distribución de volúmenes grandes, pero disminuye levemente la probabilidad de encontrar volúmenes pequeños. Aun así, las PDFs compensadas indican que los efectos de muestreo a gran escala como los reportados en Machicoane y col. 2014 juegan un papel menor en nuestro caso (es decir, cuando las partículas no son tan grandes), y confirman que el *clustering* observado en el experimento está al menos parcialmente asociado a efectos inerciales. Como referencia, la desviación estándar de los volúmenes de Voronoï compensados por $\langle C \rangle_V$ es $\sigma_{\mathcal{V}\langle C \rangle} / \sigma_{RPP} \approx 2,73$, que es levemente mayor que $\sigma_V / \sigma_{RPP} \approx 2,33$ para los volúmenes de Voronoï no compensados en el experimento (ver Tabla 3.1), y más cercano al valor de referencia observado para el modelo efectivo de partículas inerciales en las simulaciones del flujo TG.

3.5. Estudio de los cúmulos

Hasta aquí estudiamos celdas individuales. Si una partícula (o un cero) está rodeada de partículas (o ceros) lejanas, ocupará un volumen grande. Si tiene vecinos cerca, ocupará un volumen pequeño. De esta forma asociamos celdas de Voronoï chicas a partículas en cúmulos (o clústeres). Pero no estudiamos las propiedades globales de estos clústeres, que pueden ser grandes (formados por muchas partículas) o chicos (formados por muy pocas partículas cercanas). En esta sección estudiaremos el volumen total de cada clúster, sumando todo el volumen de partículas contiguas tal que cada una ocupe una celda pequeña.

La Figura 3.9 muestra las PDFs de los volúmenes de los cúmulos V_c (formados por al menos dos celdas adyacentes con $\mathcal{V} < \mathcal{V}_c$, donde $\mathcal{V}_c$ es el primer cruce entre la PDF de $\mathcal{V}$ y la RPP (Monchaux y col. 2010), para los ceros de todos los campos vectoriales y para las partículas, tanto en las simulaciones como en el experimento. A partir de Mora y col. 2021 esperamos una ley de escalas $V_c^{-5/3}$ para STPS, y V_c^{-2} para ZAPS y WZEROS, resultado de la naturaleza fractal de la distribución espacial de estos ceros. Por lo tanto, la presencia o ausencia de estas leyes de potencia brinda información sobre la geometría de los cúmulos y su fractalidad (ver Obligado y col. 2014 y Mora y col. 2021) para modelos simples y una revisión del origen de estas leyes de potencia). Para todos los ceros, HIT muestra un leve exceso de cúmulos con volumen pequeño en comparación con TG, pero en conjunto las PDFs y las leyes de escala son similares.

La Figura 3.9(f) también muestra las PDFs de V_c para las partículas en las DNS y en EXP (en este último caso, con y sin correcciones por la concentración media por volumen), que se espera que sigan una ley de potencia con exponente -2, con un rango más corto como resultado del número de Stokes grande considerado. Los cúmulos de partículas en el experimento presentan PDFs diferentes a las de TG o HIT. Las colas derechas de las PDFs en el experimento, asociadas con volúmenes $V_c > \langle V \rangle$, muestran una caída abrupta ya que el tamaño del cúmulo no puede superar el volumen de observación ($V_{obs}^{EXP} / \langle V \rangle$, indicado por la flecha en la figura). Por otro lado, en la PDF de volúmenes no compensados de EXP, la probabilidad de cúmulos pequeños (con $V_c < \langle V \rangle$) es mayor que en las DNS. Verificamos que esto no es un efecto de submuestreo ni de bordes, por lo que esta diferencia subraya limitaciones en el alcance del modelo efectivo considerado en la Ec. (2.13) y, en última instancia, en cómo el flujo medio a gran escala queda capturado por el modelo, ya sea por física ausente en el modelo o por diferencias en el muestreo preferencial del flujo a gran escala.

Las interacciones entre partículas (despreciadas en el modelo) no son la causa probable, dado que la fracción volumétrica es $\lesssim 2 \times 10^{-4}$. Sin embargo, en las DNS las partículas, aunque sometidas al arrastre de Stokes, son puntuales y sólo pueden sentir los gradientes de presión de forma indirecta a través del campo de velocidad portador. En cambio, las partículas de tamaño finito deberían sentir directamente el gradiente de presión como una fuerza actuando sobre su superficie, así como los gradientes de velocidad (y, por lo tanto, esfuerzos de corte) que las partículas puntuales en las DNS no pueden sentir. Ya se ha señalado que los gradientes de presión son importantes para entender la formación de cúmulos de partículas de tamaño finito (Fiabane y col. 2012). Finalmente, al compensar cada volumen de partícula de EXP por la concentración media, la probabilidad de

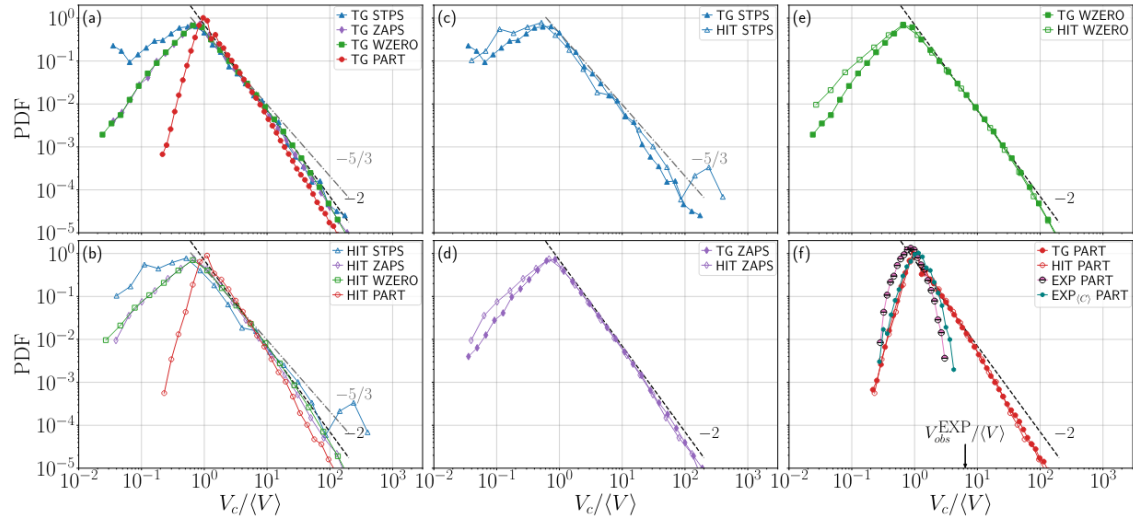


Figura 3.9: PDFs de los volúmenes totales de los cúmulos normalizados por el volumen medio de Voronoï, $V_c/\langle V \rangle$, para STPS, ZAPS, WZERO y PART, en DNS y en el experimento (EXP). Las etiquetas de los paneles son como en la Figura 3.6. El panel (f) también muestra los datos experimentales cuando se corrigen por la concentración media por volumen, $\langle C \rangle$. El volumen de observación normalizado en EXP se indica con una flecha en ese mismo panel. Como referencia, se muestran leyes de potencia con exponentes $-5/3$ y -2 .

obtener cúmulos más pequeños disminuye y se acerca más a la del modelo, lo que sugiere que la leve concentración preferencial inducida por la geometría del flujo a gran escala juega aquí un papel más importante. Esto se confirma por el hecho de que los cúmulos pequeños y grandes en TG y EXP ocurren en ubicaciones ligeramente diferentes, lo cual también podría explicar por qué sus PDFs difieren.

En la Tabla 3.1 se presenta una comparación del tamaño medio lineal de los cúmulos $\langle V_c \rangle^{1/3}$ para todas los casos, normalizado por η . Los tamaños medios lineales de WZERO y ZAPS son similares para TG y HIT, pero los cúmulos de STPS son ligeramente más grandes en HIT, diferencia que puede relacionarse con que la escala de forzado en HIT es mayor que en TG y, por lo tanto, podrían aparecer cúmulos de mayor tamaño. El tamaño medio lineal de los cúmulos de partículas en EXP es mucho mayor que en TG o HIT. Incluso condicionando los datos como se discute en la Sección 3.3 (esto es, submuestreando el número de partículas en las DNS y considerando efectos de borde), o como en la Sección 3.4 (corrigiendo por la concentración de partículas), observamos que los clústeres en el experimento siguen siendo, en promedio, tres veces más grandes que en TG. Esta diferencia se debe, probablemente, al volumen finito de las partículas en el experimento. Es importante notar que las partículas de tamaño finito sólo pueden formar cúmulos con un tamaño lineal mínimo del orden de $4R$, que para los datos EXP es mayor que 120η . En otras palabras, algunos cúmulos que ocurren en las simulaciones TG con partículas puntuales no pueden ocurrir en el experimento sin que las partículas se superpongan físicamente.

Las PDFs del número de cúmulos M_c con N_{PC} puntos o partículas dentro de cada cúmulo para las DNS se muestran en la Figura 3.10. Estas PDFs siguen un comportamiento tipo ley de potencia con un exponente cercano a $-16/9$ para STPS, y -2 para ZAPS y WZERO, como se espera según Mora y col. 2021. Los exponentes se deben a la distribución espacial fractal de cada cúmulo, como se discutió antes. La Figura 3.10(c) indica que la probabilidad de tener cúmulos de STPS con un número mayor de puntos nulos es más grande para HIT que para TG, en concordancia con el mayor tamaño medio lineal de los cúmulos de STPS en HIT. Las partículas inerciales también siguen una ley de potencia con un exponente cercano a -2 para cúmulos con $N_{PC} \lesssim 10$, un comportamiento consistente con el reportado por Yoshimoto y Goto 2007. En términos generales, las leyes de potencia observadas son similares para ZAPS, WZERO y partículas inerciales, lo cual es compatible con el mecanismo *sweep-stick* por el cual las partículas inerciales con mucha masa tienden a alejarse de regiones con mucha vorticidad y acumularse en puntos del fluido con cero aceleración Lagrangiana, donde las fuerzas sobre las partículas en el sistema de referencias

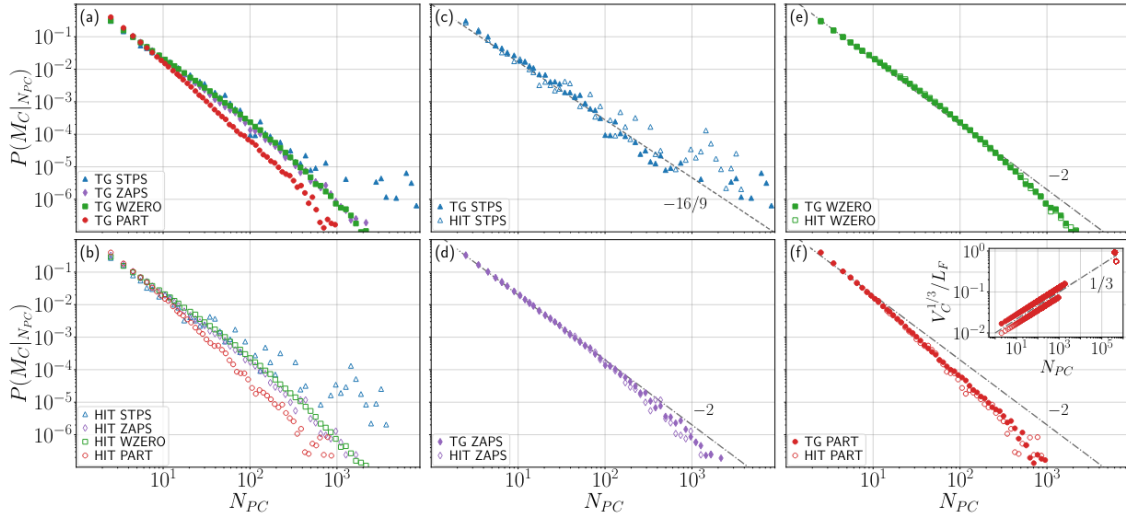


Figura 3.10: Probabilidad condicionada a tener cúmulos con N_{PC} puntos para STPS, ZAPS, WZERO y PART en DNS. Las etiquetas de todos los paneles son como en la Figura 3.6. El tamaño lineal del cúmulo, normalizado por L_F y en función de N_{PC} , se muestra en el recuadro del panel (f). Se incluyen varias leyes de potencia como referencias.

del fluido se anulan (Goto y Vassilicos 2008; Coleman y Vassilicos 2009; Oka y Goto 2021). La desviación respecto de la ley de potencia observada para las partículas en el experimento en la Fig. 3.10(f) podría estar relacionada con el hecho de que partículas con número de Stokes grande filtran las escalas más pequeñas y rápidas del flujo. En efecto, se espera que este tipo de partículas respondan menos a los movimientos a pequeña escala en el fluido, por lo que es menos probable que se formen cúmulos con mayor número de partículas alrededor de zonas de alta densidad de ceros en el flujo portador. Finalmente, el recuadro en la Figura 3.10(f) muestra el tamaño lineal de los cúmulos normalizado por L_F , como función del número de partículas por cúmulo, para las partículas inerciales. Se puede observar que el tamaño del cúmulo crece con el número de partículas como una ley de potencias con exponente $1/3$.

3.6. Otros modelos de partículas

Si bien el modelo de partícula simple con un parámetro efectivo funciona razonablemente, podemos preguntarnos si otros modelos de partículas (que incluyan, por ejemplo, arrastre no lineal o el efecto de la masa del fluido arrastrada por la partícula) mejorarían la comparación con el experimento. En esta sección nos hacemos esta pregunta y presentamos brevemente resultados numéricos para otros modelos de partículas. Por un lado, analizamos partículas sometidas a una fuerza de arrastre no lineal como en Wang y Maxey 1993, cuyas ecuaciones de movimiento son

$$\dot{\mathbf{x}}_p = \mathbf{v}(t), \quad \dot{\mathbf{v}} = \frac{1 + 0,15 \text{Re}_p^{0,687}}{\tau_p} (\mathbf{u} - \mathbf{v}), \quad (3.7)$$

donde $\text{Re}_p = \sqrt{\frac{18\tau_p}{\nu}} |\mathbf{u} - \mathbf{v}|$.

Por otro lado, consideramos la ecuación de Maxey-Riley-Gatignol (2.9) hasta términos lineales en el radio de la partícula; es decir, incluimos el arrastre de Stokes, la gravedad y los efectos de aceleración de la partícula y de masa añadida (descartando, por lo tanto, las correcciones de Faxén y el término de historia de Basset-Boussinesq). Así, las partículas evolucionan según

$$\dot{\mathbf{x}}_p = \mathbf{v}(t), \quad \dot{\mathbf{v}} = \frac{1}{\tau_p} (\mathbf{u} - \mathbf{v}) - g \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma/2} \hat{\mathbf{z}} + \frac{3}{2} \frac{\gamma}{1 + \gamma/2} \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \quad (3.8)$$

donde g es la aceleración de la gravedad, y $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla$.

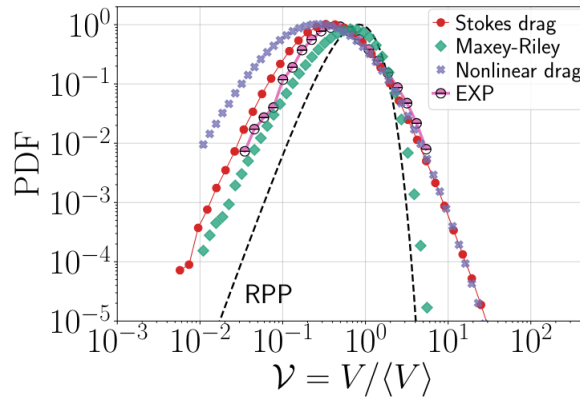


Figura 3.11: Probabilidad condicionada a tener cúmulos con N_{PC} puntos para STPS, ZAPS, WZERO y PART en DNS. Las etiquetas de todos los paneles son como en la Figura 3.6. El tamaño lineal del cúmulo, normalizado por L_F y en función de N_{PC} , se muestra en el inset del panel (f). Se incluyen varias leyes de potencia como referencias.

Las partículas cuya dinámica está gobernada por la Ec. (3.7) o por la Ec. (3.8) se integraron en el flujo turbulento con forzado mecánico de Taylor-Green, con una resolución espacial de 768^3 puntos en la malla y siguiendo los mismos procedimientos descriptos previamente para las DNS de TG. Se integraron en total 10^6 partículas. Para facilitar la comparación, y dado que en ambas ecuaciones faltan otras fuerzas (ver Calzavarini y col. 2008, 2009), usamos en todos los casos el tiempo de respuesta efectivo de la partícula τ_p . Además, en la Ec. (3.8) empleamos $\gamma = 1/1.02 \approx 0.98$ y el valor de g que reproduce el experimento.

Realizamos un teselado de Voronoï de las posiciones de las partículas, y las PDF de los volúmenes de celda resultantes se muestran en la figura 3.11, junto con las PDF correspondientes a partículas que evolucionan solo bajo arrastre de Stokes como en la ecuación (2.13), y con los datos experimentales. Como era de esperar, considerar aceleración de la partícula y masa añadida en la ecuación de Maxey-Riley-Gatignol reduce el *clustering*: la ecuación (3.8) es adecuada para partículas más pequeñas y con bajo número de Reynolds de partícula, que tienden a agruparse menos (Fiabane y col. 2012, 2013). Es importante observar en particular cómo las estadísticas de vacíos (esto es, celdas de Voronoï grandes) se aproximan a las del RPP; la desviación estándar de esta PDF es $\sigma_V = 1.31\sigma_{RPP}$. Considerar arrastre no lineal como en la ecuación (3.7) puede ser más relevante para partículas del tamaño que estudiamos y con mayor número de Reynolds de partícula. Este modelo produce, en cambio, más *clustering*, con una PDF cuya desviación estándar es $\sigma_V = 2.92\sigma_{RPP}$. El mayor *clustering* podría estar relacionado con nuestra elección de usar un τ_p efectivo. En el futuro, puede resultar de interés comparar el arrastre no lineal usando el tiempo de respuesta real de las partículas (u otras opciones para el tiempo de respuesta efectivo) frente al modelo simplificado de partícula puntual con el parámetro efectivo de la Ec. (2.13). Nótese, en particular, que los resultados de la figura 3.11 no implican necesariamente que la Ec. (2.13) sea un mejor modelo para partículas con flotabilidad casi neutra en la escala de Taylor; para ello sería necesaria una comparación más detallada.

3.7. Discusión

La comparación de la estadística de formación de cúmulos o clústeres en distintos escenarios, en simulaciones numéricas de turbulencia isotrópica y homogénea y del flujo de Taylor-Green, y en experimentos de von Kármán, proporciona una herramienta poderosa para caracterizar las propiedades geométricas y topológicas de la turbulencia en general, y de los flujos multifase. Además, las similitudes entre el flujo de Taylor-Green y el flujo de von Kármán, en el laboratorio, nos permitieron validar un modelo teórico de partículas sencillo con parámetros efectivos que captura la acumulación de partículas en flujos turbulentos. En los próximos capítulos este modelo jugará un rol central para permitirnos extender el estudio desde flujos anisótropos e inhomogéneos a flujos no estacionarios y luego aplicar todo esto en un problema volcánico.

Nuestros resultados también confirman que el teselado de Voronoï constituye una herramienta poderosa para estudiar la topología de puntos críticos y clústeres de partículas, arrojando luz sobre los efectos dominantes en la dinámica del flujo. Para el caso de los flujos de Taylor-Green y de von Kármán, estos son: (1) Una menor probabilidad de encontrar ceros muy densamente empaquetados del campo de velocidad, de la vorticidad y de la aceleración Lagrangiana en TG en comparación con HIT; (2) una desviación en las leyes de escala del número de volúmenes de Voronoï de los STPS en el flujo TG, probablemente asociada al efecto del flujo medio sobre la función de autocorrelación de la velocidad; y (3) propiedades de *clustering* similares en un modelo efectivo minimal de partículas inerciales en TG y de partículas reales en flujos de von Kármán.

En otras palabras, en el experimento encontramos que las partículas con un tamaño comparable a la microescala de Taylor forman cúmulos, cuya intensidad y distribución de tamaños son muy similares a los de las partículas puntuales en las simulaciones. Esto contrasta con resultados previos: partículas cuyo tamaño es una fracción de λ no presentan *clustering* (Qureshi y col. 2007; Fiabane y col. 2012, 2013), mientras que partículas prácticamente puntuales en experimentos sí forman cúmulos (Obligado y col. 2019), y también partículas mucho más grandes (Machicoane y col. 2014, 2016). Esto apunta a la posibilidad de que partículas neutralmente flotantes de tamaño intermedio se acumulen como resultado de efectos inerciales. Los resultados son prometedores ya que confirman que los flujos de Taylor-Green y de von Kármán comparten muchas propiedades geométricas y estadísticas, incluso al considerar la concentración preferencial de partículas en turbulencia multifásica. Además, indican que muchas propiedades de *clustering* en HIT pueden extenderse a flujos multiescala con un flujo anisótropo e inhomogéneo de gran escala, al menos en casos en los que las fluctuaciones turbulentas son grandes. Esto, de a poco, nos acerca al objetivo de estudiar la dinámica de partículas en “turbulencia real”.

Capítulo 4

Flujos no estacionarios

La turbulencia es un fenómeno fuera del equilibrio que a menudo se estudia en el estado estadísticamente estacionario, es decir, cuando las fuerzas externas y la disipación se equilibran de modo tal que el sistema presenta promedios temporales bien definidos y constantes en el tiempo. Sin embargo, como se discutió en el Capítulo 1, la mayoría de los flujos naturales e industriales de interés no cumplen con este ideal: operan en condiciones fuera de la estacionariedad, con tasas de inyección y disipación de energía que fluctúan significativamente y con estructuras que se reorganizan de manera espontánea a lo largo del tiempo. En tales condiciones, los observables varían en el tiempo de manera que los promedios temporales nunca convergen, haciendo posible que estos sistemas fluctuen aleatoriamente entre dos o más estados (Torre y Burguete 2007). La no estacionariedad afecta las tasas de disipación de energía y las propiedades espectrales del flujo (Berti y col. 2023), lo cual impacta en el mezclado y en el transporte de partículas. Se ha encontrado evidencia de que partículas móviles como el fitoplancton en el océano pueden cambiar su dirección de migración en respuesta a eventos asociados al flujo turbulento en el que se desplazan (Sengupta y col. 2017). Esta variabilidad puede venir en forma de ráfagas (Rodríguez Imazio y col. 2023), o a modulaciones lentas ligadas a forzados externos y variaciones internas que alteran la dinámica y el espectro del flujo. En la naturaleza, tenemos también el caso de la convección atmosférica en erupciones volcánicas inmersas en nubes convectivas y en otros contextos, donde las escalas grandes, responsables de transferir energía hacia las escalas pequeñas, pueden sufrir cambios abruptos o periódicos que modifican significativamente parámetros fundamentales para la turbulencia.

La interacción entre partículas inerciales y este tipo de flujos turbulentos plantea preguntas acerca de fenómenos muy complejos que han sido más estudiados mayormente en condiciones idealizadas. La acumulación preferencial, estudiada extensamente en turbulencia isótropa y homogénea estacionaria cambia en presencia de flujos anisótropos como vimos en el Capítulo 3. No obstante, aún es poco claro cómo se ve afectado este proceso cuando el flujo también deja de ser estadísticamente estacionario. ¿Puede la dinámica temporal del flujo potenciar o disminuir la acumulación preferencial más allá de lo esperado? ¿Qué rol juegan las fluctuaciones lentas de los parámetros turbulentos en la evolución de las estructuras de partículas? Este problema es especialmente relevante ya que, por ejemplo, en nubes, los flujos no son estacionarios. Y la acumulación de partículas controla la tasa de colisión entre partículas, que a su vez controla la tasa de crecimiento de gotas o la tasa de electrificación de la nube (Shaw 2003).

En este capítulo se estudia cómo la modulación temporal natural de flujos fuera del equilibrio afecta los parámetros de la turbulencia y la formación de cúmulos de partículas. Para abordar estas cuestiones analizamos DNS de flujos turbulentos multifase con distintos niveles de no estacionariedad. Estudiamos dos configuraciones representativas: (i) un flujo con forzado independiente del tiempo que genera grandes estructuras coherentes y transitoriamente estables (columnas contra-rotantes, o CRC), y (ii) un flujo turbulento isótropo y homogéneo cuya energía se modula periódicamente en el tiempo (mHIT, por *modulated*-HIT). En ambos casos exploramos cómo la

respuesta de las partículas se acopla a las fluctuaciones del flujo, y analizamos el impacto de esta interacción en la formación de clústeres, la aparición de histéresis y la posible reinterpretación del número de Stokes como una magnitud dinámica. Los resultados que aquí se presentan están publicados en Zapata y col. 2024.

4.1. Turbulencia no estacionaria

Debemos comenzar por ponernos de acuerdo en a qué le llamamos *no-estacionariedad*. Un flujo turbulento siempre presenta fluctuaciones en sus magnitudes globales como la energía o la disipación. Pero estas fluctuaciones están acotadas y son rápidas: ocurren en un tiempo característico del orden del tiempo de giro de los remolinos más grandes. Por otro lado, a veces la turbulencia ocurre en ráfagas o está modulada en tiempos mucho más largos; en estos casos las variaciones en la intensidad suelen ser mayores.

El coeficiente C_K , definido en la ecuación (2.8), es la constante adimensional que fija la amplitud absoluta del espectro en el rango inercial y, por lo tanto, conecta la tasa de transferencia de energía con la energía contenida en las grandes escalas. Este coeficiente mide entonces el desbalance entre las escalas grandes y las chicas del flujo. Para discutir sus implicancias físicas en el contexto de este capítulo, es útil introducir la constante de disipación C_ε

$$C_\varepsilon = \frac{\varepsilon L}{u'^3}, \quad (4.1)$$

donde ε es la tasa de disipación de energía, u' es la velocidad turbulenta r.m.s. y L es la escala integral definida en la Sección 2.1.3.

En simulaciones numéricas de turbulencia estacionaria de hasta 4096^3 puntos en la malla espacial y $R_\lambda \approx 1200$ encuentran $C_K \sim 1.6$ (Kaneda y col. 2003; Ishihara y col. 2009), mientras que campañas atmosféricas recientes, en flujos que alcanzan $R_\lambda \approx 5 \times 10^3$, confirman valores de C_K centrados en 1.5 (Schröder, Bätge y col. 2024). Esta estabilidad en las constantes, que se encuentra típicamente para $R_\lambda > 100$, las convierte en parámetros prácticamente universales para flujos isótropos y homogéneos a alto número de Reynolds.

Sin embargo, como se mencionó previamente, existen contextos en los que estos valores presentan fluctuaciones muy grandes, y que evitan que los podamos seguir considerando como *constantes*. Los resultados de Kaneda y col. 2003; Ishihara y col. 2009 muestran que en casos estacionarios al duplicar R_λ , C_K varía en menos del 3% y C_ε permanece casi constante. En contraste, las mediciones en túneles de viento y de capa límite atmosférica de Schröder, Bätge y col. 2024 revelan una variabilidad importante de alrededor del 15%. Estudios sobre multifractalidad demuestran que la ruptura de isotropía eleva C_K , y rompe la correlación simple con C_ε (Biferale y Procaccia 2005), destacando que la universalidad solo se mantiene en configuraciones cercanas a HIT. Entonces, consideraremos *no estacionario* a un flujo turbulento cuyas cantidades, típicamente constantes en condiciones isótropas y homogéneas, varían de manera significativa, sin permitirnos definir un promedio temporal bien convergido. Estas fluctuaciones *grandes* están típicamente asociadas a un achicamiento del rango inercial, que suele darse debido a efectos de contornos, o anisotropías, o a la presencia de intermitencia intensa (y más usualmente, a todas estas razones combinadas). En este capítulo nos preguntaremos entonces en particular sobre los efectos que esta amplia *variabilidad de las constantes*, a menudo presente en los sistemas turbulentos naturales, tiene sobre los procesos de acumulación preferencial de partículas inerciales.

4.2. Receta para la no-estacionariedad espontánea: flujo CRC

Para estudiar flujos no estacionarios generaremos uno numéricamente utilizando un forzado externo $\mathcal{F}$ dado por

$$\mathcal{F} = F_0 \left[\sin(x) \cos(y) \hat{x} - \cos(x) \sin(y) \hat{y} \right]. \quad (4.2)$$

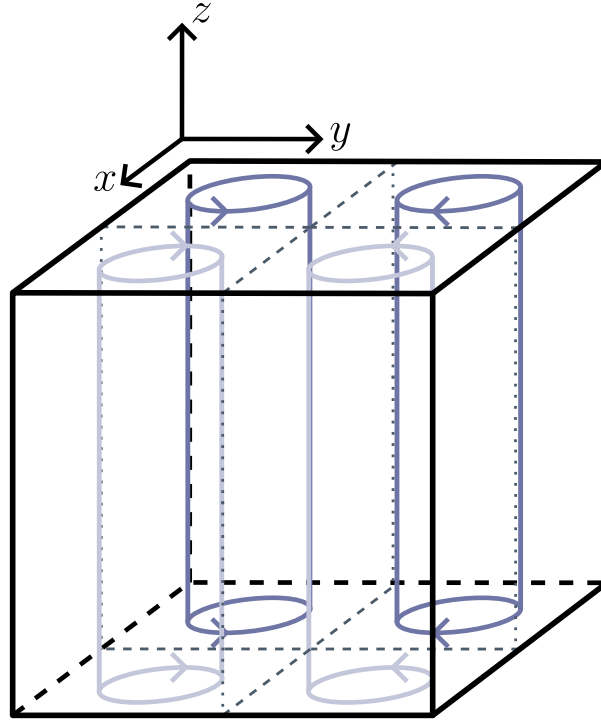


Figura 4.1: Diagrama del flujo CRC. El dominio periódico con volumen $(2\pi L_0)^3$ se marca en líneas negras continuas. Las líneas de guiones indican cuatro celdas con simetría de traslación, cada una ocupada por un vórtice con forma de columna.

Este forzado fue propuesto y estudiado en Goto y J. C. Vassilicos 2015. Es muy similar al forzado de Taylor-Green, discutido en el Capítulo 3, pero sin la dependencia en z . Corresponde a un arreglo de cuatro vórtices contra-rotantes en el plano xy , con simetría traslacional en z . El primer vórtice columnar ocupa el volumen $[0, \pi L_0) \times [0, \pi L_0) \times [0, 2\pi L_0)$, y está separado de los demás por dos capas de flujo de corte verticales en el centro del dominio, alineadas respectivamente con los planos xy y xz (ver la Fig. 4.1).

La dinámica global de este flujo es la siguiente. Mientras las simulaciones de HIT exhiben fluctuaciones en magnitudes globales con un tiempo de correlación proporcional al tiempo integral, en el flujo CRC emerge una dinámica distinta. Se observan grandes excursiones en la disipación de energía y en otras magnitudes globales, resultantes de transiciones del flujo entre dos estados: uno en el que las columnas a gran escala se reconocen con claridad (por ejemplo, mediante la inspección directa de la distribución espacial instantánea de partículas), y otro en el que las columnas se tornan inestables y el sistema presenta un estado más homogéneo. Así, el flujo alterna entre un estado más anisótropo e inhomogéneo, y uno más isótropo y homogéneo, sin elegir en forma permanente a ninguno.

En estudios anteriores se ha reportado una ley de disipación fuera del equilibrio en una amplia variedad de flujos turbulentos no estacionarios (Valente y col. 2014; J. C. Vassilicos 2023), tal que

$$C_\epsilon \sim \frac{\sqrt{\text{Re}_0}}{R_\lambda}, \quad (4.3)$$

donde $\text{Re}_0 = u_0 l_0 / \nu$ es un número de Reynolds global (medio) basado en la velocidad r.m.s. inicial del flujo u_0 y en la escala integral inicial l_0 , y $R_\lambda = u(t) \lambda(t) / \nu$ es el número de Reynolds local en el tiempo basado en la escala de Taylor instantánea $\lambda(t)$ y en la velocidad turbulenta r.m.s. $u(t)$. La constante C_ϵ instantánea se define usando la Ec. (4.1) a partir de la tasa de disipación de energía como $\epsilon(t) = C_\epsilon u^3(t) / L(t)$, donde $L(t)$ es la escala integral instantánea del flujo. Para un estado turbulento estacionario (por ejemplo, en HIT) esta relación se reduce a la conocida ley de disipación $\epsilon = C_\epsilon u^3 / L$ de la Ec. (4.1), que establece que la tasa de disipación de energía está gobernada por el flujo de energía a gran escala hacia escalas menores. En este sentido, en flujos no

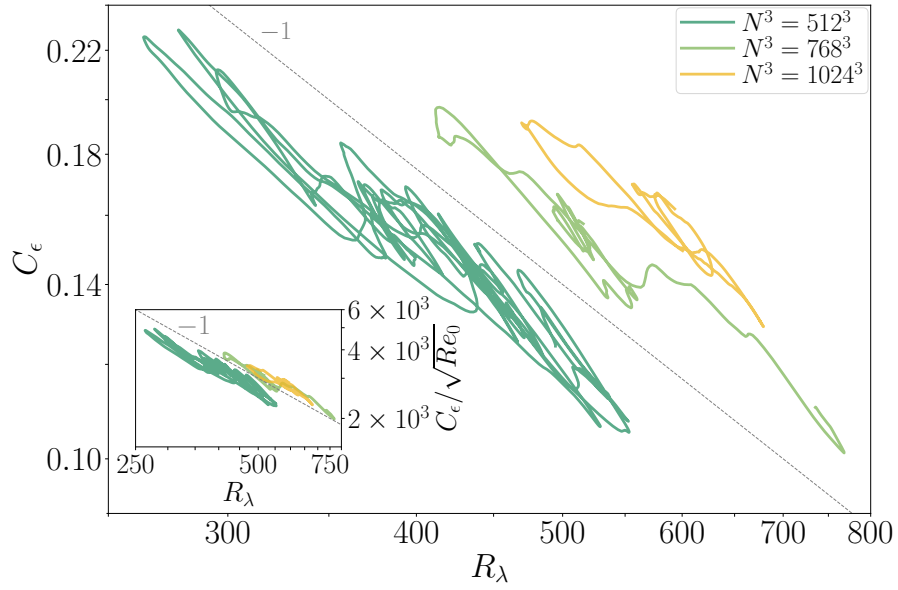


Figura 4.2: Valor instantáneo de C_ϵ en función de R_λ para el flujo CRC en tres resoluciones espaciales distintas. Cada resolución corresponde a una viscosidad diferente y a un número de Reynolds promedio distinto. La línea de puntos con pendiente -1 indica como referencia la relación dada por la Ec. (4.3). Recuadro: C_ϵ compensado por $\sqrt{Re_0}$ en función de R_λ .

estacionarios $C_\epsilon(t)$ también proporciona una medida del desbalance tiempo a tiempo de energía entre escalas.

En la figura 4.2 se observa que los flujos CRC, con viscosidades y resoluciones diferentes, presentan excursiones compatibles con la Ec. (4.3), dado que C_ϵ es inversamente proporcional a R_λ . En el recuadro mostramos C_ϵ compensado por la raíz cuadrada del número de Reynolds de referencia, Re_0 . Es interesante observar cómo colapsan todas las curvas correspondientes a flujos con distintas viscosidades, lo que indica que este comportamiento es independiente del Reynolds, al menos para valores grandes del número de Reynolds como los que se tratan en esta tesis. Para una viscosidad dada (por ejemplo, para $N^3 = 512^3$ puntos en la malla espacial) R_λ y C_ϵ cambian en el tiempo por factores de 2, con una escala temporal típica de las excursiones de $10\langle T \rangle$ a $20\langle T \rangle$, donde $\langle T \rangle$ es el tiempo medio integral, que es el tiempo de giro a gran escala. Estas excursiones, así como su escala temporal característica, son mucho mayores que las asociadas a las fluctuaciones en simulaciones de HIT (que ocurren en escalas temporales del orden del tiempo de giro integral). A pesar de estas diferencias, el espectro instantáneo de energía de las simulaciones CRC sigue mostrando una ley de Kolmogorov.

4.3. Acumulación preferencial en CRC

Queremos saber si estas excursiones en la disipación y en R_λ , similares a las reportadas en otros flujos turbulentos no estacionarios (Goto y J. C. Vassilicos 2015; Valente y col. 2014; J. C. Vassilicos 2023), afectan la formación de cúmulos de partículas y su evolución temporal. Para estimar el nivel de *clustering* en las distintas simulaciones, calculamos nuevamente el teselado tridimensional de Voronoi de las partículas en función del tiempo. Las partículas se integran numéricamente usando el mismo modelo simplificado y la misma metodología que en el Capítulo 3.

Como se muestra en la figura 4.3, el flujo CRC presenta un *clustering* más intenso que HIT al comparar partículas con el mismo número de Stokes (es decir, es más probable encontrar partículas que ocupan volúmenes más chicos, como se evidencia en las colas con mayor probabilidad a la izquierda de las distribuciones). A medida que la inercia de las partículas y St aumentan (a resolución espacial y número de Reynolds global fijos) el *clustering* disminuye, lo que indica que partículas con mayor inercia se agrupan menos tanto en CRC como en HIT (los resultados aquí

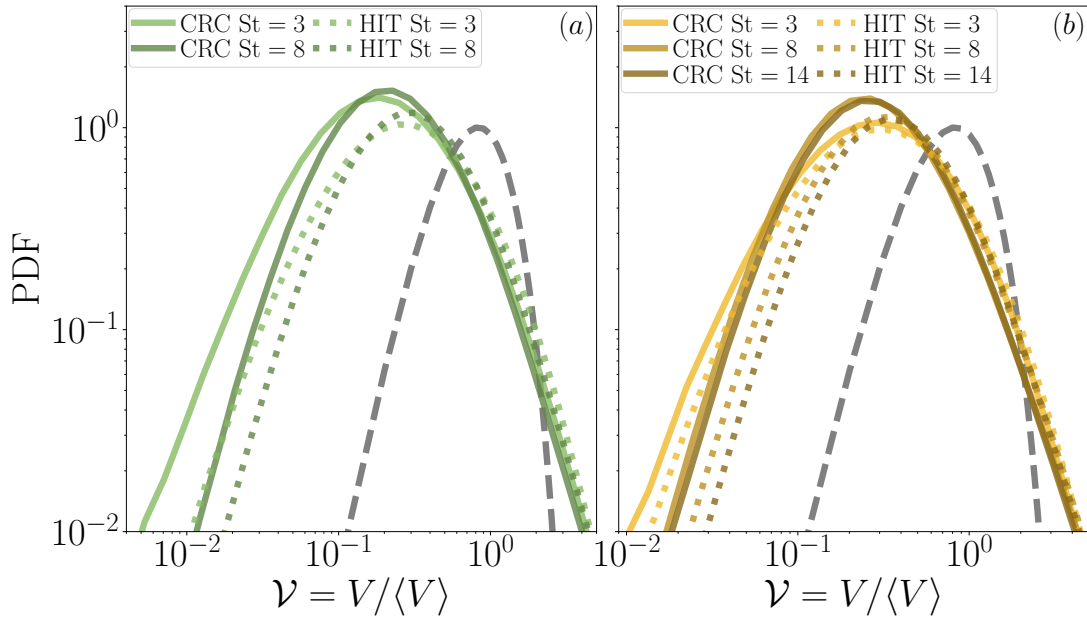


Figura 4.3: Funciones de densidad de probabilidad (PDF) de los volúmenes de Voronoi normalizados por su valor medio, $\mathcal{V} = V/\langle V \rangle$, para partículas inerciales en flujos CRC y HIT, con (a) $N^3 = 768^3$ y (b) $N^3 = 1024^3$ puntos de resolución espacial. En el caso con forzado CRC, las PDF se promedian temporalmente sobre intervalos largos. Un proceso de Poisson aleatorio (RPP), correspondiente a partículas distribuidas al azar, se indica como referencia con la línea discontinua.

presentados corresponden a $St \gtrsim 1$, ya que para $St \rightarrow 0$ y $St \rightarrow \infty$ las partículas no forman cúmulos). Es interesante notar que, en el flujo CRC, para $St = 14$ el *clustering* es similar al de $St = 8$ y menor que para $St = 3$. Las diferencias entre CRC y HIT podrían, en principio, asociarse a la presencia de un flujo a gran escala en las simulaciones CRC, pero esto no basta para explicar el incremento observado en la acumulación de partículas. En otros flujos turbulentos con una circulación a gran escala estacionaria, como en el caso presentado en el Capítulo 3, se ha observado que el *clustering* de partículas es más cercano al de HIT. La razón de la mayor acumulación aquí se vuelve más clara al inspeccionar las PDFs instantáneas de $\mathcal{V}$. Vale la pena notar que todas las PDF de la figura 4.3 están promediadas en una ventana temporal de $\approx 5\langle T \rangle$, usando 10^6 volúmenes de Voronoi en cada instantánea, y con una cadencia de al menos $0,04\langle T \rangle$. Sin embargo, mientras las PDF de $\mathcal{V}$ en HIT son estacionarias, en CRC no lo son.

Las PDFs instantáneas de las partículas en el flujo CRC varían significativamente en el tiempo, y como resultado las PDFs promediadas en el tiempo mostradas en la Fig. 4.3, por sí solas, no representan la dinámica real de acumulación de partículas en este flujo. Entonces calculamos la evolución temporal de C_ϵ , ϵ , R_λ y de la desviación estándar de los volúmenes de Voronoi, $\sigma_{\mathcal{V}}$. Los resultados se muestran en la figura 4.4. Las partículas se inyectan cuando los flujos ya están en un régimen turbulento plenamente desarrollado, en un instante arbitrariamente etiquetado como $t = 0$, y en posiciones aleatorias en el espacio, por lo que a $t = 0$, $\sigma_{\mathcal{V}} = \sigma_{\text{RPP}}$ en todos los casos. Tras un breve estado transitorio, las partículas forman cúmulos, como lo indica el hecho de que $\sigma_{\mathcal{V}} > \sigma_{\text{RPP}}$. Recordemos que mayor dispersión en los volúmenes implica colas más anchas en la PDF, volúmenes más chicos para una fracción de las partículas, y más acumulación. Como ya se ha mencionado, en Goto y J. C. Vassilicos 2015 se reportó que este flujo exhibe un comportamiento irregular de magnitudes a gran escala. Nuestros resultados para C_ϵ y R_λ son compatibles con esta observación: ambas magnitudes presentan grandes excursiones con una escala temporal característica mucho mayor que el tiempo de giro integral. Las fluctuaciones de C_ϵ tienen un tiempo de correlación entre $10\langle T \rangle$ y $20\langle T \rangle$, y dan lugar a fluctuaciones de la tasa de disipación del flujo ϵ con una escala temporal similar. Más sorprendentes son las fluctuaciones de $\sigma_{\mathcal{V}}$, que pueden variar entre $\approx 2,5$ y valores superiores a 6, lo que indica fluctuaciones pronunciadas en el nivel de *clustering* de partículas a medida que el flujo evoluciona.

Comparando las cuatro magnitudes en la figura 4.4, observamos que cuando C_ϵ y ϵ presentan

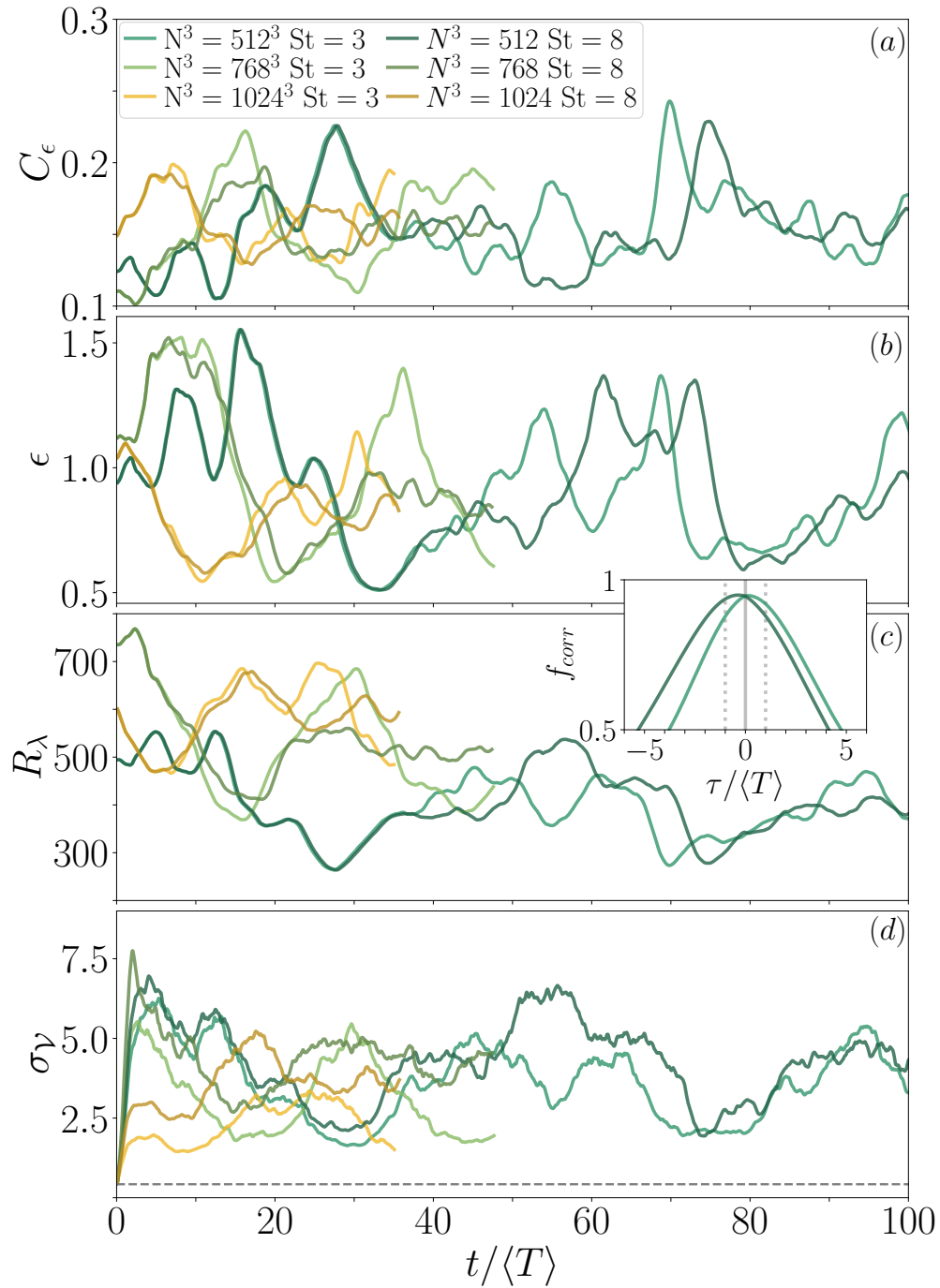


Figura 4.4: Series temporales de (a) C_e , (b) ϵ , (c) R_λ y (d) σ_V para simulaciones del flujo CRC con partículas con $St = 3$ y 8. El tiempo está normalizado por el tiempo medio integral, $\langle T \rangle$, y el valor de la desviación estándar para volúmenes de Voronoi si las partículas están distribuidas al azar, σ_{RPP} , se indica con la línea gris punteada en el panel (d). Recuadro: correlación cruzada de σ_V y R_λ en función del desfase temporal τ .

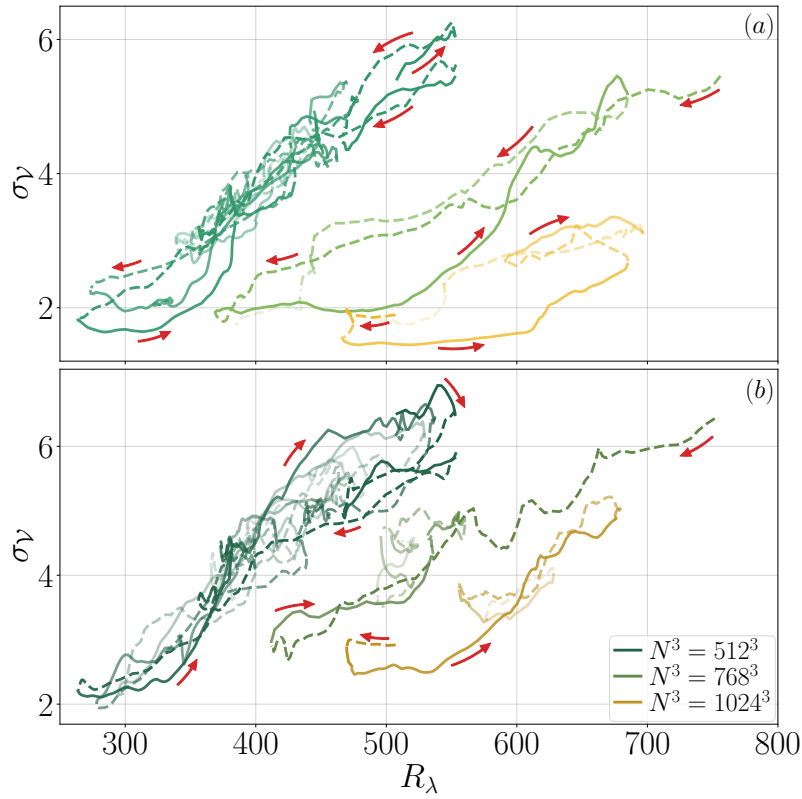


Figura 4.5: Desviación estándar de los volúmenes de Voronoi, σ_V , en función de R_λ para simulaciones del flujo CRC, diferenciando las ramas en las que R_λ crece (líneas continuas) y decrece (líneas discontinuas), para partículas con (a) $St = 3$ y (b) 8. Las flechas rojas indican la dirección de la evolución temporal.

un mínimo local, R_λ y σ_V alcanzan máximos locales. Es decir, la turbulencia se intensifica y las partículas se agrupan más. Para cuantificar la correlación entre el *clustering* y R_λ , en el recuadro de la figura 4.4 se muestra la función de correlación cruzada f_{corr} entre σ_V y R_λ , para la simulación con 512^3 puntos de malla, que es la de mayor tiempo total de integración. La correlación cruzada máxima se alcanza para incrementos temporales $|\tau|/\langle T \rangle \lesssim 1$ (los incrementos negativos se asocian a partículas que se agrupan durante el crecimiento de R_λ). Se obtienen resultados similares cuando la correlación cruzada se calcula con C_ϵ . Por lo tanto, C_ϵ o R_λ y σ_V están correlacionados con un retardo temporal proporcional al tiempo de giro de los remolinos de gran escala. La existencia de este retardo sugiere que la respuesta de las partículas a cambios en las propiedades del flujo puede exhibir histéresis.

La figura 4.5 muestra σ_V en función de R_λ en el flujo CRC, para partículas con $St = 3$ y 8, y para distintas viscosidades y resoluciones espaciales. Los intervalos temporales con R_λ creciente se señalan con líneas continuas, mientras que los intervalos con R_λ decreciente se indican con líneas discontinuas. La figura evidencia una dependencia con el número de Reynolds y confirma la correlación entre estas magnitudes, y la existencia de un defasaje temporal con un ciclo de histéresis superpuesto a las fuertes fluctuaciones.

Como se mencionó anteriormente, este nivel de *clustering* de partículas y sus fluctuaciones son mucho más intensas que en HIT. La figura 4.6 compara los histogramas de σ_V para CRC y para HIT, en la simulación con $N^3 = 768^3$ y $St = 8$. Ambos flujos exhiben valores de σ_V claramente distintos. En HIT, σ_V toma valores entre 0.5 y 1.8, mientras que en CRC los valores van de 0.5 a 7.4, alcanzando su valor máximo alrededor de ≈ 4.5 . No solo σ_V es, en promedio, significativamente mayor en el flujo CRC (es decir, las partículas se agrupan mucho más), sino que la dispersión de los valores de σ_V también es mucho mayor, incluyendo instancias (aunque menos probables) en las que el *clustering* es similar al encontrado en HIT, como las capturadas por la cola izquierda de la PDF. La dispersión en σ_V , y su correlación con R_λ , confirman que el *clustering* extremo observado

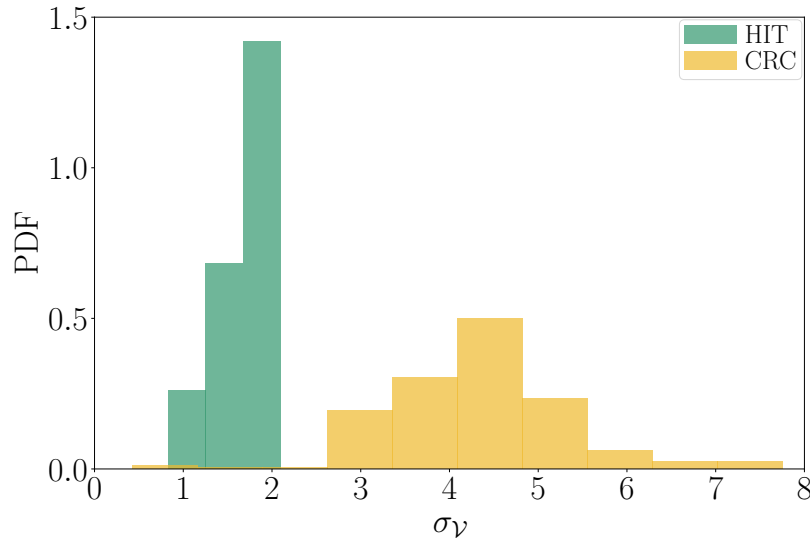


Figura 4.6: PDF de σ_γ para simulaciones de HIT y CRC con $N^3 = 768^3$ y para partículas con $St = 8$. Nótese los valores más altos de σ_γ (es decir, mayor intensidad de *clustering*) en la simulación del flujo CRC, así como la mayor dispersión (es decir, la mayor variabilidad en σ_γ , y por lo tanto en el nivel de acumulación de partículas).

en este flujo está asociado con su dinámica no estacionaria.

4.4. Acumulación preferencial en turbulencia isótropa, homogénea, y no estacionaria (mHIT)

El forzado CRC genera un flujo que, además de ser no estacionario, presenta una circulación a gran escala anisótropa e inhomogénea. Por lo tanto, la acumulación extrema de partículas podría estar influida por estas propiedades del flujo, en lugar de estar impulsada por la no estacionariedad de la turbulencia. Para ayudar a desentrañar los efectos del flujo a gran escala de aquellos causados por la modulación de la tasa de disipación de energía, estudiamos un flujo con otro tipo de forzado. En esta DNS se generó inicialmente con un forzado aleatorio, excitando los mismos modos de Fourier (isótropos) que en HIT. Pero, en lugar de evolucionar las fases en el tiempo, se moduló la amplitud global del forzado como

$$F_0(t) = A_0 \cos^\alpha(f_0 t), \quad (1)$$

donde A_0 y f_0 son, respectivamente, la amplitud inicial del forzado y la frecuencia de modulación. Por otro lado, el exponente α controla qué tan localizada en el tiempo es la perturbación del sistema. Sus valores se eligieron para obtener fluctuaciones en ϵ que se asemejen a las del flujo CRC. Los parámetros utilizados fueron $A_0 = 3,5 U_0^2/L_0$, $f_0 = (\pi/15) U_0/L_0$ y $\alpha = 100$. Estos valores producen picos intensos en la amplitud del forzado que se repiten periódicamente, y que generan sintéticamente una modulación de ϵ , C_ϵ y R_λ pero con un flujo más homogéneo e isótropo. A esta simulación la llamamos HIT modulada (mHIT). Usamos una resolución de 512^3 puntos de malla y una viscosidad cinemática $\nu_{\text{mHIT}} = 1,1 \times 10^{-3} L_0 U_0$. Como en todas las demás simulaciones, esta DNS cumple $\kappa\eta > 1$ en todo momento (es decir, resuelve correctamente a la escala de disipación de Kolmogorov, donde κ es el máximo número de onda resuelto), y presenta una escala integral media $L \approx 1 L_0$.

La figura 4.7 muestra el valor instantáneo de C_ϵ en función de R_λ para mHIT. La ley de disipación fuera del equilibrio reportada para otros flujos turbulentos no estacionarios y observada en el flujo CRC también es compatible con este flujo, con $C_\epsilon \sim \sqrt{\text{Re}_0}/R_\lambda$. Siguiendo los mismos procedimientos que en las otras simulaciones de este capítulo, se inyectaron 10^6 partículas con $St = 8$ cuando el flujo alcanzó un régimen turbulento plenamente desarrollado, en un instante arbitrariamente etiquetado como $t = 0$, y en posiciones aleatorias en el espacio. Se calcularon las PDFs instantáneas de los volúmenes de Voronoi normalizados $\mathcal{V} = V/\langle V \rangle$ para todas las posiciones

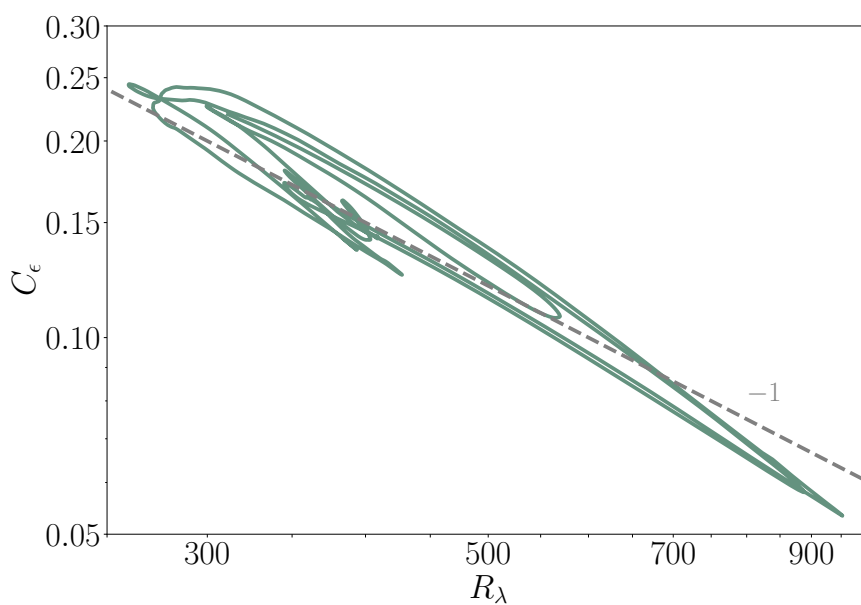


Figura 4.7: Valor instantáneo de C_ϵ en función de R_λ en la simulación mHIT. Se indica como referencia una pendiente de -1 , que en la escala log-log corresponde a la ley de disipación fuera del equilibrio en la Ec. (4.3)

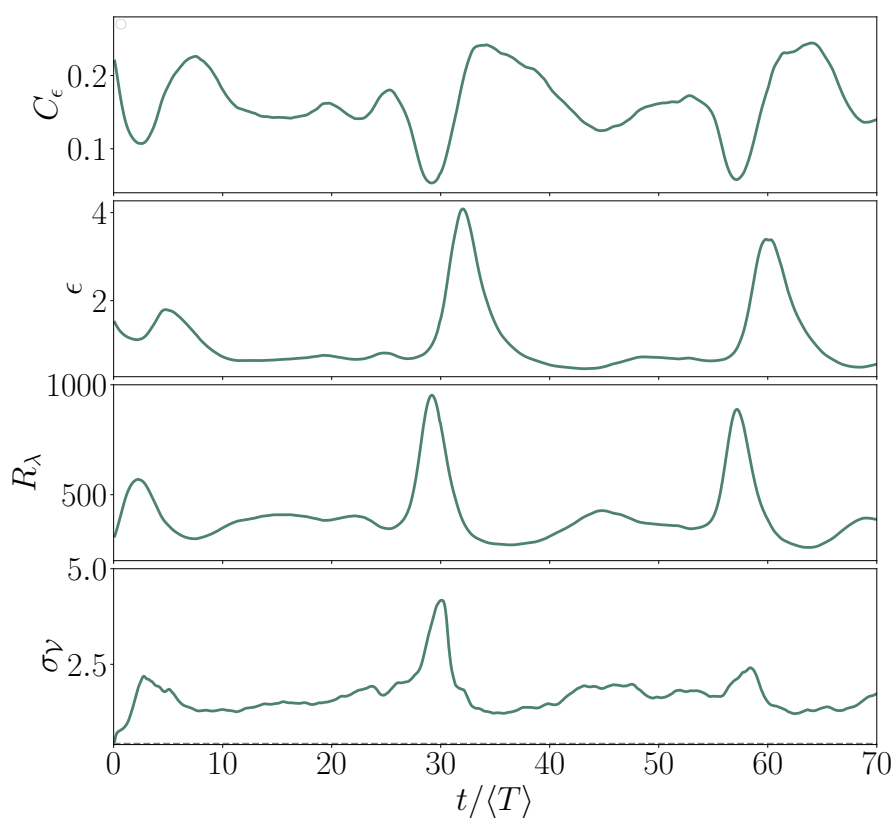


Figura 4.8: Series temporales de (a) C_ϵ , (b) ϵ , (c) R_λ y (d) σ_γ para mHIT con partículas con $St = 8$. El tiempo está normalizado por el tiempo medio de giro de los remolinos de gran escala, $\langle T \rangle$, y σ_{RPP} se indica como referencia con la línea gris punteada en el panel (d). Notar la correlación en los picos de σ_γ y R_λ .

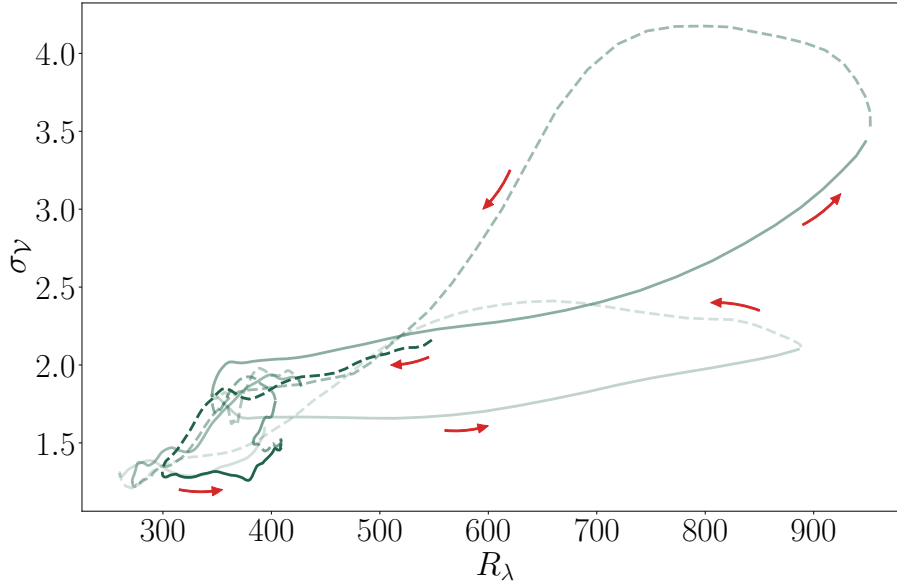


Figura 4.9: Desviación estándar de los volúmenes de Voronoi, σ_V , en función de R_λ para la simulación mHIT, diferenciando las ramas en las que R_λ crece (líneas continuas) o decrece (líneas discontinuas). Las flechas rojas indican la dirección de la evolución temporal.

de las partículas en cada tiempo.

En la figura 4.8 se presentan las series temporales de C_ϵ , ϵ , R_λ y σ_V para este flujo. Al igual que en los otros flujos, en mHIT encontramos que σ_V está correlacionada (anticorrelacionada) con R_λ (C_ϵ y ϵ). Los valores en mHIT exhiben fuertes fluctuaciones alrededor de un valor medio, como en el flujo CRC. Las fluctuaciones en C_ϵ y en ϵ son causadas directamente por la modulación de la amplitud del forzado, y σ_V (la intensidad de acumulación de partículas) responde a las fluctuaciones de las otras magnitudes. El valor medio de σ_V es más cercano al de HIT, aunque se observan excursiones grandes que alcanzan $\sigma_V \gtrsim 4$. Esto confirma que el *clustering* extremo está mayormente asociado a la no estacionariedad del flujo, mientras que la anisotropía e inhomogeneidad de gran escala puede incrementar o no esta acumulación (ver Capítulo 3).

Finalmente, la figura 4.9 muestra σ_V en función de R_λ , confirmando la presencia de un ciclo de histéresis entre el nivel de acumulación de partículas medido por σ_V y la intensidad instantánea de la turbulencia medida por R_λ , y un comportamiento similar al observado en el flujo CRC para distintos valores de R_λ .

4.5. Modelo de Stokes relativo

Es importante notar que el nivel de acumulación de partículas que se observa en los flujos CRC y mHIT cuando la turbulencia se vuelve más intensa es mucho mayor a lo que se espera si simplemente se considera un flujo turbulento más intenso pero estacionario. De alguna forma las “oleadas” esporádicas de turbulencia acumulan fuertemente las partículas. ¿De qué forma afecta esta dinámica fuera del equilibrio del flujo al comportamiento de las partículas?

Podemos considerar primero la situación en la que la turbulencia está en equilibrio escala por escala. Bajo estas condiciones, $Re_0 = u_0 l_0 / \nu \approx uL/\nu$ (donde $u = \langle u(t) \rangle$ es el promedio temporal de la velocidad r.m.s. del flujo, y $L = \langle L(t) \rangle$ es la escala integral promediada). La tasa de disipación de energía también es, como ya sabemos, $\epsilon \approx u^3/L$. Para una partícula esférica pequeña, el tiempo de Stokes puede escribirse como $\tau_p = 2a^2 \rho_p / (9\rho_f \nu)$ (donde a es el radio de la partícula, ρ_p la densidad

de la partícula y ρ_f la densidad del fluido). Entonces

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_\eta} = \frac{2}{9} \frac{\rho_p}{\rho_f} \left(\frac{a}{L} \right)^2 Re_0^{3/2}.$$

Por lo tanto, el número de Stokes de las partículas (y, en consecuencia, la sensibilidad de las partículas a fluctuaciones del flujo en distintas escalas) queda fijado dados un radio de partícula, una razón de densidades y un número de Reynolds del flujo.

Sin embargo, cuando se rompe la estacionariedad escala por escala, debemos usar $\epsilon = C_\epsilon U^3/L$, lo que, usando la ecuación (4.3), resulta en

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_\eta} = \frac{2}{9} \frac{\rho_p}{\rho_f} \left(\frac{a}{L} \right)^2 \frac{Re_0^{7/4}}{R_\lambda^{1/2}}. \quad (4.4)$$

La sensibilidad de las partículas a las fluctuaciones del flujo cambia así según la disipación instantánea (o según el número de Reynolds basado en la escala de Taylor, que es la escala de los remolinos con mayor intensidad). De manera equivalente, puede interpretarse como si la razón efectiva entre el tamaño de la partícula y la escala característica del flujo fuera reemplazada por $a/(LR_\lambda^{1/4})$: la escala integral del flujo “vista” por la partícula depende de R_λ . Quizás contraintuitivamente, para R_λ más grandes las partículas se vuelven más sensibles a los remolinos de mayor escala, lo que resulta en una acumulación de partículas más intensa. Cuando R_λ es menor (C_ϵ mayor), el número de Stokes efectivo de las partículas es mayor y la distribución espacial es más homogénea, con un *clustering* más cercano al observado en el *clustering* inercial en HIT. Cuando R_λ es mayor (C_ϵ menor), el valor efectivo St es menor, y las partículas se acumulan fuera de los vórtices columnares de gran escala en el flujo CRC en un fenómeno que recuerda a la turboforésis (es decir, son expulsadas de los vórtices de acuerdo al mecanismo propuesto por Wang y Maxey 1993), lo que produce una clusterización extrema, como se muestra en la Fig. 4.10. Lo mismo ocurre en el flujo mHIT, aunque en ese caso el tiempo de correlación de las estructuras a gran escala es más corto, resultando en una acumulación máxima de partículas un poco menos intensa.

4.6. Discusión

Los resultados de este capítulo muestran que la no estacionariedad del flujo modifica de manera significativa la organización espacial de las partículas. En el flujo CRC, C_ϵ y R_λ exhiben excursiones intensas con escalas temporales típicas de $10\langle T \rangle$ a $20\langle T \rangle$, cumpliendo una ley de disipación no-estacionaria, $C_\epsilon \sim \sqrt{Re_0}/R_\lambda$. Aun así, los espectros instantáneos de energía conservan un tramo con pendiente $-5/3$, lo que sugiere que las desviaciones dominantes residen en el desbalance escala por escala más que en la estructura inercial del espectro.

La formación de clústeres en este flujo presenta colas más pesadas que la RPP y desplazamientos respecto de HIT. La dispersión σ_v es mayor y más variable en el flujo CRC, con episodios de *clustering* extremo, mientras que al aumentar St (a número de Reynolds global fijo) el *clustering* disminuye en ambos flujos, consistentemente con una menor respuesta de las partículas a gradientes en la escala inercial.

La dinámica temporal revela una respuesta con memoria: σ_v se correlaciona con R_λ y se anticorrelaciona con C_ϵ y con ϵ , con un desfase $|\tau|/\langle T \rangle \lesssim 1$, y la relación paramétrica σ_v vs. R_λ muestra ciclos de histéresis superpuestos a grandes fluctuaciones. Un argumento dimensional racionaliza estas observaciones: usando $\epsilon = C_\epsilon U^3/L$ y $C_\epsilon \sim \sqrt{Re_0}/R_\lambda$ se obtiene $St \sim (2/9)(\rho_p/\rho_f)(a/L)^2 Re_0^{7/4}/R_\lambda^{1/2}$, equivalente a una razón de escalas efectiva $a/(LR_\lambda^{1/4})$. Así, para R_λ mayores las partículas se vuelven más sensibles a remolinos de gran escala y el *clustering* se intensifica, mientras que para R_λ menores sucede lo contrario y la distribución se aproxima a la de HIT.

Para separar el efecto de la inhomogeneidad y anisotropía de gran escala de la no estacionariedad, implementamos la simulación de HIT modulada (mHIT), con amplitud de forzado

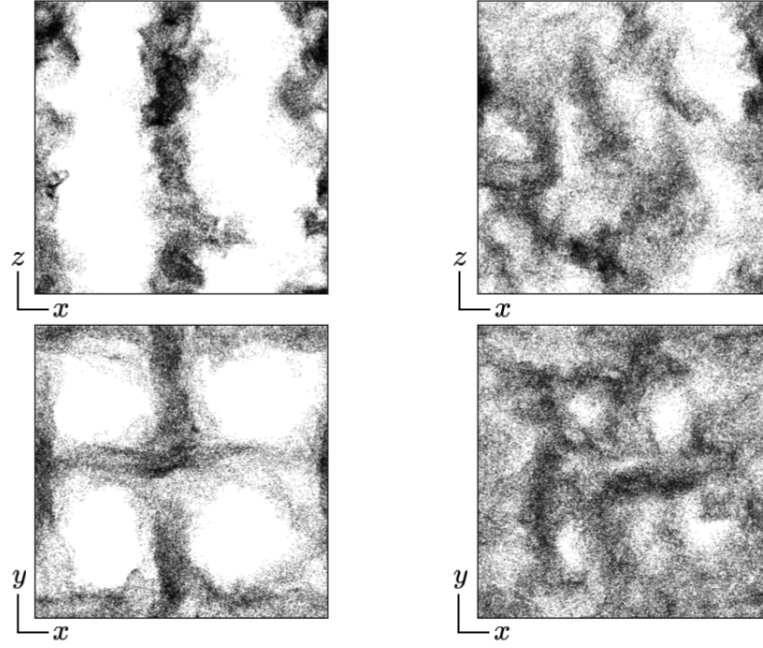


Figura 4.10: Partículas en el flujo CRC en un instante en el que los vórtices columnares son intensos (izquierda), con R_λ grande ($R_\lambda = 540$) y fuerte acumulación de partículas ($\sigma_v = 6,6$); y en un instante en el que los vórtices de gran escala se inestabilizan, el flujo es más homogéneo con R_λ menor ($R_\lambda = 280$), y menor acumulación ($\sigma_v = 1,9$).

$F_0(t) = A_0 \cos^\alpha(f_0 t)$ que reproduce las fluctuaciones de ϵ del caso CRC. En mHIT también se verifica $C_\epsilon \sim \sqrt{\text{Re}_0}/R_\lambda$ y se observan correlaciones y desfases entre σ_v y las magnitudes turbulentas análogas a los del flujo CRC. El valor medio de σ_v es más cercano al de HIT, pero se registran excursiones hasta $\sigma_v \gtrsim 4$, lo que indica que la no estacionariedad es el motor principal del *clustering* extremo, mientras que la anisotropía e inhomogeneidad a gran escala pueden reforzarlo.

Los flujos naturales son no estacionarios: las fuentes volcánicas y otros emisores de material particulado pulsan y oscilan en el tiempo, la convección en nubes es inhomogénea y, en general, la turbulencia atmosférica presenta ráfagas (Rodríguez Imazio y col. 2023). Los resultados presentados aquí muestran que la no estacionariedad del flujo, ya sea aquella que surge de manera natural aun con un forzado estacionario o mediante modular la amplitud del forzado, puede intensificar drásticamente el *clustering* de partículas, muy por encima de lo reportado previamente para turbulencia homogénea e isotropa en estado estacionario. En consecuencia, este efecto, que hasta ahora no fue tenido en cuenta, puede modificar las estimaciones de *clustering* y de segregación de partículas en muchos sistemas. A modo de ejemplo, las estimaciones de frecuencias de colisión entre partículas usando teoría cinética son proporcionales a $n^2 \sim V^{-2}$ (donde n es la densidad de partículas), por lo que cambios en el volumen específico por partícula afectan fuertemente el número de colisiones. Los resultados presentados en este capítulo también abren la puerta a estimar parámetros turbulentos instantáneos a partir de observaciones directas de agregación de partículas (teniendo en cuenta que la dependencia con Re_0 podría diferir entre flujos), y pueden ser útiles para el estudio de otros sistemas no estacionarios fuera del equilibrio. En el próximo capítulo veremos una aplicación de la dinámica de partículas en esta turbulencia “real” a un problema geofísico.

Capítulo 5

Turbulencia multifase en nubes volcánicas

Las erupciones volcánicas inyectan grandes cantidades de ceniza, gases y vapor de agua en la atmósfera. Esto constituye un ejemplo de un flujo turbulento con material particulado en el que la turbulencia no es isotrópica, homogénea ni estacionaria. Y en el que las partículas (ya sean gotas de agua, hielo ya suspendido en la atmósfera, o material volcánico liviano que permanece en suspensión) se acumulan en regiones preferenciales y chocan entre sí. Esta acumulación y el aumento asociado de choques tiene un impacto en la agregación de partículas y en la electrificación de la nube volcánica, como veremos más adelante. Esto nos permite aplicar varios de los resultados previos de esta tesis. Pero para eso debemos también considerar flujos turbulentos con posibles cambios de fase, ya que la humedad ambiental juega un rol importante en la atmósfera y en las nubes.

La interacción del flujo volcánico con la humedad ambiental cumple un papel crucial en la dinámica de la nube volcánica (Woods 1993; Koyaguchi y Woods 1996; Houghton y col. 2015). Se han desarrollado y utilizado modelos unidimensionales (1D) para estudiar el estado estacionario de la nube volcánica y del flujo en el conducto, y entender las contribuciones del agua marina y lacustre (Koyaguchi y Woods 1996; Mastin 2007; Maeno y col. 2022; Rowell y col. 2022; Mastin y col. 2024), de acuíferos subterráneos (Aravena y col. 2018), de glaciares (Hajimirza y col. 2022) y de la humedad atmosférica (Woods 1993; Glaze y col. 1997; Degruyter y Bonadonna 2012; Macedonio y col. 2016) en una erupción. Estos estudios mostraron los efectos del incremento de agua en la nube volcánica, ya sea inyectada desde la superficie terrestre a la atmósfera, o transportada desde la baja atmósfera hacia altitudes mayores. Los modelos de nubes volcánicas 1D pueden representar la incorporación (o “*entrainment*”) de vapor atmosférico desde los flancos de la corriente ascendente usando modelos de turbulencia. En estas condiciones se ha demostrado que la humedad atmosférica tiene efectos significativos sobre la altura de la nube en erupciones relativamente pequeñas, con tasas de erupción másica (MER) $< 10^7 \text{ kg s}^{-1}$ (Woods 1993; Glaze y col. 1997; Degruyter y Bonadonna 2012). Dado que las columnas eruptivas más grandes presentan un área superficial menor en relación con su volumen, son menos sensibles a las condiciones atmosféricas (Degruyter y Bonadonna 2012).

La inyección de agua en la atmósfera por parte de la erupción en situaciones previas de alta humedad atmosférica tiene una naturaleza diferente, en la cual se centra este estudio. La producción de turbulencia en la atmósfera puede ocurrir en la nube sombrilla, algo que los modelos 1D de nubes volcánicas no pueden capturar. Cerminara y col. 2016a; Cerminara y col. 2016b desarrollaron un modelo tridimensional (3D) de nubes, ASHEE, que resuelve flujos multifase con partículas y agua. Aubry y col. 2019 compararon resultados de ASHEE y de un modelo 1D para diversas condiciones atmosféricas. Y aunque ambos modelos mostraron una dependencia consistente con las condiciones ambientales, el modelo 3D predijo sistemáticamente alturas de la nube mayores que el modelo 1D para erupciones grandes con tasas de erupción másica

(MER) $> 3 \times 10^6 \text{ kg s}^{-1}$. Las diferencias se vuelven más significativas para MER aún mayores. Su estudio tuvo como objetivo evaluar el impacto del cambio climático en curso en el transporte de material por nubes volcánicas, y señalaron la importancia de avanzar en el estudio del efecto de la humedad atmosférica en el caso 3D.

La disponibilidad de humedad también puede incrementar la ocurrencia de rayos y las tormentas eléctricas volcánicas, un fenómeno que aporta información sobre la microfísica de nubes y la intensidad de la erupción (Behnke y Bruning 2015; Ichihara y col. 2023). La humedad modifica la electrificación (Büttner y col. 1997; Stern y col. 2019) y la cantidad de partículas de hielo suspendidas, una componente esencial para la formación de rayos eléctricos en erupciones volcánicas (A. R. Van Eaton y col. 2022). Los rayos se producen tanto en las columnas eruptivas como en las nubes sombrilla (A. R. Van Eaton y col. 2022, 2023; Ichihara y col. 2023; Jarvis y col. 2024), y por lo tanto se requieren modelos tridimensionales para capturar estos procesos (Ichihara y col. 2023). Es importante notar aquí que la electrificación de las nubes volcánicas, y de las nubes en general, ocurre por las colisiones de partículas de diferentes tamaños. La turbulencia puede entonces jugar un rol muy importante acumulando a las partículas en regiones donde pueden chocar con mayor frecuencia.

Un ejemplo extremo de estos procesos es el de Hunga Tonga - Hunga Haápai (HTHH), un volcán de caldera submarina del archipiélago de Tonga que erupcionó explosivamente el 15 de enero de 2022, con una potencia récord desde que existen las observaciones instrumentales modernas (Matoza y col. 2022; Astafyeva y col. 2022; Poli y Shapiro 2022; Proud y col. 2022). Entre los puntos importantes de esta erupción se cuentan la producción de una nube de $\approx 58 \text{ km}$ de altura, que se expandió hasta 400 km de diámetro en menos de 1 hora, el transporte de cantidades sustanciales de vapor de agua por encima de la estratósfera (Sellitto y col. 2022; Zhu y col. 2022; Asher y col. 2023), y la generación de la mayor concentración de rayos jamás registrada, alcanzando casi 400.000 descargas en un lapso de 6 horas (Bór y col. 2023). Las descargas se autoorganizaron en un anillo de rayos de radio $\gtrsim 40 \text{ km}$, que persistió durante casi dos horas en la primera fase, y reapareció más tarde con un radio menor durante una segunda fase (Ichihara y col. 2023; A. R. Van Eaton y col. 2023; Jarvis y col. 2024).

En este capítulo consideramos el acoplamiento de una nube volcánica turbulenta que transporta partículas inerciales, con el estado atmosférico subyacente de una atmósfera establemente estratificada en humedad y densidad. Con el objetivo de resolver el efecto de la turbulencia tridimensional de pequeña escala, empleamos un modelo simple para la erupción y para la atmósfera circundante, en lugar de modelos de nube volcánica 1D o 3D más complejos, acoplado al modelo de partículas que usamos en los Capítulos 3 y 4. Mediante una nueva formulación que nos permite modificar parámetros atmosféricos y volcánicos, investigamos cómo la presencia de humedad, en forma de vapor y agua líquida, tanto en la atmósfera como en la nube volcánica, afecta la turbulencia, la acumulación y las tasas de colisión de partículas en la nube, así como su altura máxima y su estabilidad. Los resultados aquí presentados están actualmente en proceso de revisión en una revista internacional con referato (Zapata y col. 2025).

5.1. Erupciones y nubes volcánicas

5.1.1. La erupción de Hunga Tonga - Hunga Haápai de 2022

La erupción de 2022 de Hunga Tonga - Hunga Haápai (HTHH) ofrece un caso natural extraordinario para estudiar el acoplamiento de la nube volcánica con la atmósfera circundante y la dinámica de partículas en flujos turbulentos reales. Durante esta erupción, el volcán produjo varios pulsos en dos fases explosivas principales (4:00-6:30 UTC y 8:00-9:00 UTC) (ver la Fig. 5.1). El pulso primario iniciado a las 4:14 UTC ascendió hasta 57 km s.n.m. (sobre el nivel del mar), y generó un número récord de descargas eléctricas dispuestas geométricamente en una estructura anular (Woods 1993; Koyaguchi y Woods 1996; Houghton y col. 2015). El anillo de rayos osciló a una distancia radial media de $\approx 40 \text{ km}$ del cráter, y pulsos sucesivos emergieron desde el centro durante más de dos horas. En Ichihara y col. 2023, este comportamiento se explicó como el efecto de la turbulencia sobre el *clustering* de partículas, que incrementa las colisiones y la electrifica-

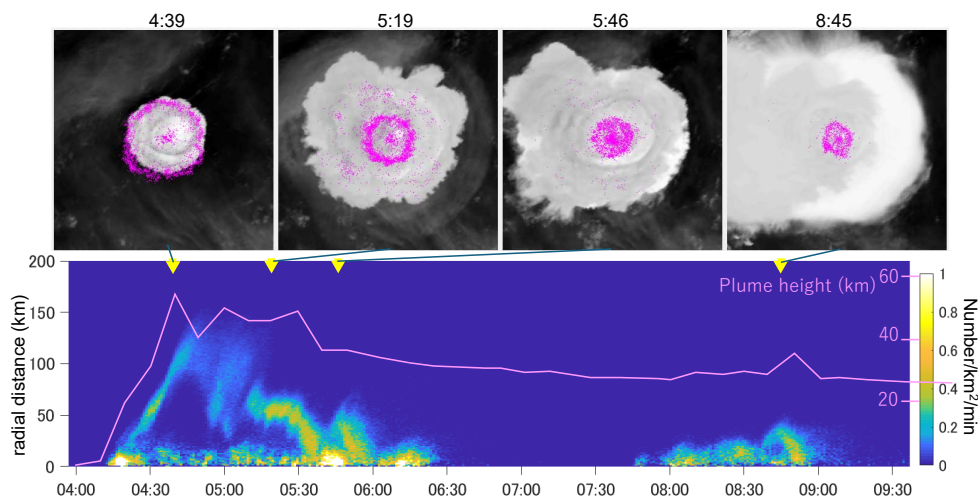


Figura 5.1: Anillos de descargas eléctricas en la erupción del 15 de enero de 2022 de HTHH. Los eventos de rayos en cuatro instantes durante el primer y el segundo pulso se indican con puntos magenta sobre imágenes infrarrojas del satélite Himawari-8 de NICT-Japón ($600\text{ km} \times 600\text{ km}$) que también muestran en grises la expansión de la nube volcánica. Los tiempos de las cuatro imágenes (las tres primeras corresponden al primer pulso y la cuarta al segundo) se señalan con triángulos amarillos en el panel inferior, que muestra los conteos de rayos (en $\text{km}^{-2} \text{ min}^{-1}$) en función del tiempo y de la distancia radial en km (Ichihara y col. 2023), así como la altura de la nube (línea rosa) en km a partir de datos de A. R. Van Eaton y col. 2023. Los datos de descargas eléctricas son de Vaisala.

ción en la región más turbulenta de la nube volcánica en expansión. Esto también es compatible con experimentos de laboratorio en los que la turbulencia incrementa las colisiones, incluso en presencia de partículas cargadas y alta humedad en la columna ascendente (Shaw 2003; Lu y col. 2010; Cimarelli y col. 2014; Gaudin y Cimarelli 2019; Stern y col. 2019), y con los resultados en los capítulos previos que muestran que la turbulencia acumula partículas. Por lo tanto, los rayos pueden considerarse un marcador de los remolinos turbulentos en la nube volcánica en expansión. Durante la fase eruptiva primaria de HTHH, la actividad eléctrica disminuyó gradualmente hasta desaparecer casi por completo hacia las 6:30 UTC. Luego, la fase eruptiva secundaria comenzó alrededor de las 8:00 UTC con tres pulsos de energía creciente, el último de los cuales también estuvo asociado con la generación de un patrón circular de descargas (ver la Fig. 5.1). Sin embargo, en este caso la expansión radial del anillo fue mucho menor que durante el primer pulso, con el anillo oscilando a una distancia radial de aproximadamente 20 km del cráter. La fase primaria introdujo una cantidad inusualmente grande de vapor de agua en la atmósfera (Sellitto y col. 2022; Zhu y col. 2022; Asher y col. 2023; Colombier y col. 2023), en la cual la fase secundaria generó su nube. Como veremos más adelante, esto generó condiciones muy inusuales en la atmósfera con mucha humedad en alturas normalmente secas, condiciones además no estacionarias en las que, como vimos en el Capítulo 4, la turbulencia es diferente a la estudiada comunmente. La actividad eléctrica proporcionó la evidencia más directa de la ocurrencia de esta fase secundaria, aunque también fue indicada por el aumento de la potencia sísmica e infrasónica (Vergoz y col. 2022) y por ondas de gravedad oceánicas (Nishida y col. 2024).

5.1.2. Mecanismos de generación de tormentas eléctricas volcánicas

La electrificación de las nubes volcánicas se debe principalmente a la triboelectrificación dependiente del tamaño en colisiones de partículas de ceniza (Cimarelli y col. 2014; Gaudin y Cimarelli 2019; Méndez Harper y col. 2021) y, adicionalmente, a las colisiones de hidrometeoros formados *in*

situ (A. Prata y col. 2020; A. Van Eaton y col. 2020), cuya tasa de formación está determinada por la contribución del vapor de agua (de origen magmático o externo) transportado por advección en la nube, y por la nucleación de hielo intensificada por la presencia de ceniza volcánica (Cimarelli y Genareau 2022; Cimarelli y col. 2022). Además, como en el caso de erupciones submarinas que rompen la superficie del agua, la fragmentación del magma por contacto con el agua y la siguiente vaporización pueden contribuir a la electrificación de la nube emergente (Blanchard 1964; Büttner y col. 1997; Björnsson y col. 1967; Stern y col. 2019). Por lo tanto, se considera que las descargas eléctricas están íntimamente relacionadas con la naturaleza y el tamaño de las partículas cargadas, su distribución espacial, y la frecuencia de colisiones, de modo que la tasa de rayos podría aportar información sobre la aceleración de partículas y la turbulencia, así como sobre la extensión de la nube (A. Prata y col. 2020; A. Van Eaton y col. 2020; Aizawa y col. 2016; Behnke y Bruning 2015; Cimarelli y col. 2016). Sin embargo, para que las tasas de descargas puedan emplearse para inferir propiedades de la erupción, es necesario investigar más los mecanismos mediante los cuales la turbulencia en las nubes volcánicas afecta la electrificación.

5.1.3. La dinámica de la pluma volcánica

A grandes rasgos, la dinámica de estas columnas se entiende con el modelo clásico de Morton y col. 1956 para flujos de corte no confinados: la incorporación del aire ambiente gobierna cuánto crece y hasta dónde asciende la nube. Con una fuente de intensidad constante (pluma de flujo fijo), el radio aumenta con la altura y con el tiempo de forma acelerada, y en un medio estratificado la columna se detiene al alcanzar su nivel de flotabilidad neutra. La altura máxima crece suavemente con la tasa de inyección de energía de la erupción. Cuando el ascenso se frena y la columna sobrepasa levemente el nivel de flotabilidad neutra, se forma la nube en forma de paraguas que se expande radialmente: su radio crece con el tiempo como una corriente de gravedad. Observaciones y simulaciones tridimensionales confirman estos regímenes y muestran una expansión muy rápida en los primeros instantes, que luego se ajusta a la ley de corriente de gravedad.

Las erupciones combinan fases transitorias y sostenidas: inician con una salida desde el cráter de material con alta densidad y velocidad (la región de empuje gaseoso), que mezcla aire y transforma energía cinética y térmica en flotabilidad, y da paso a una columna convectiva impulsada por esa flotabilidad. Aunque los detalles finos de esa zona inicial (choques, inhomogeneidades, equilibrio térmico incompleto) influyen en la estabilidad y el colapso, ocupa una fracción pequeña de la columna total. Otros factores también desvían a las plumas del ideal: los vientos y, en erupciones submarinas o someras, el agua externa. Este último efecto es no monótono: si entra poca agua, la evaporación aumenta el volumen y la flotabilidad y la columna llega más alto; si entra demasiada, la flotabilidad neta disminuye y la altura final es menor. Casos recientes muestran que incluso con un aporte energético moderado, la formación de una pluma de vapor de baja densidad y alta energía puede alcanzar grandes alturas.

Los modelos multifase 3D mencionados en la introducción de este capítulo incorporan el movimiento relativo gas - partículas (inercia y gravedad) y, aunque suelen centrarse en el cálculo de las tasas de mezcla y en la morfología de gran escala, ya señalan que la turbulencia puede inducir concentración preferencial de partículas. Para aislar los mecanismos esenciales sin ofuscar la física de escalas pequeñas bajo parametrizaciones, los modelos minimales, como los presentados en esta tesis, buscan capturar el papel organizador de la turbulencia en las escalas relevantes, sin depender de modelos de sub-grilla o parametrizaciones para la turbulencia.

5.1.4. Un estudio numérico en atmósfera seca

Un estudio reciente (Ichihara y col. 2023) de la erupción de HTHH en una atmósfera seca propone un modelo idealizado minimal, basado en la aproximación de Boussinesq y partículas pesadas, para explicar los anillos de rayos como consecuencia del *clustering* inercial, sin recurrir a parametrizaciones de la microfísica de nubes. La electrificación se atribuye a colisiones intensificadas por la organización turbulenta de la columna volcánica central y de la nube lenticular estratosférica.

La Fig. 5.2 sintetiza el mecanismo espacial: la vorticidad, como marcador de la intensidad

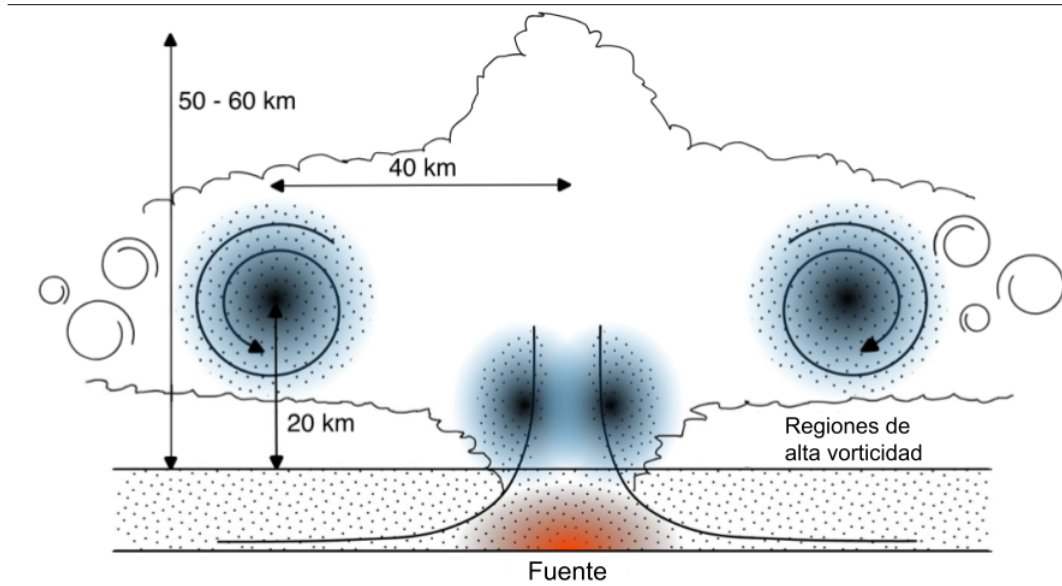


Figura 5.2: Diagrama esquemático de la formación de la nube volcánica en la simulación y del *clustering* de partículas resultante. La fuente de flotabilidad en la base del dominio, mostrada en rojo, genera la nube. La vorticidad, y por tanto la turbulencia, es más intensa en dos regiones: en la región externa de la columna ascendente, donde la cizalla (gradientes de velocidad) es grande, y en una región anular con radio de ≈ 40 km. Estas dos regiones de alta vorticidad corresponden a zonas de acumulación de partículas para todas las especies consideradas. Las colisiones entre estas partículas podrían entonces dar lugar a una fuerte electrificación de dichas regiones. En las simulaciones, la acumulación de partículas se observa por encima de los 10 km. Adaptado de Ichihara y col. 2023.

turbulenta, se maximiza en dos regiones, la capa de cizalla que envuelve a la columna eruptiva y un anillo a $r \approx 40$ km, y ambos máximos coinciden con picos de densidad de partículas para todas las especies. La acumulación aparece por encima de ≈ 10 km y estas mismas zonas concentran la mayor probabilidad de colisiones y, por tanto, la electrificación. El *clustering* inercial en una atmósfera seca está gobernado por estructuras de alta vorticidad que actúan como organizadores espaciales, la capa de cizalla de la columna central y el anillo distante, segregando partículas y amplificando las colisiones entre especies que originan los anillos de rayos.

5.1.5. Humedad ambiente como resultado de las erupciones de HTHH

La erupción de HTHH inyectó una cantidad récord de agua y partículas en la estratósfera, a alturas en las que la atmósfera suele ser muy seca (Zhu y col. 2022; Asher y col. 2023). Para el análisis de este capítulo la humedad relativa atmosférica se obtuvo mediante el análisis de datos de radiosondas lanzadas desde Pago Pago, Samoa Americana (850 km al norte-noreste de HTHH, con globos liberados a las 0:00 y 12:00 UTC) y desde Nadi, Fiyi (820 km al oeste de HTHH, con un globo liberado a las 0:00 UTC). La Fig. 5.3 muestra las observaciones de radiosondeo en Pago Pago a las 0:00 UTC del 15 de enero de 2022, antes del comienzo de la primera fase, y a las 12:00 UTC, 4 horas después de la segunda erupción (los perfiles de otras magnitudes relevantes para nuestro modelo, en Pago Pago y en Nadi antes de la primera erupción, así como para otras erupciones de otros volcanes, se discuten en la Sección 5.2). Es evidente un aumento de la humedad relativa y de la razón de mezcla de agua total entre 20 y 30 km en la baja estratósfera. Podemos suponer que este incremento de humedad es resultado de las erupciones ocurridas entre las 4:00 y 6:00 UTC (ver Zhu y col. 2022; Asher y col. 2023 para más evidencias). La humedad relativa ambiental sobre el cráter durante las erupciones iniciadas a las 8:00 UTC también fue, presumiblemente, significativamente mayor que durante las erupciones tempranas de la primera fase. Como se argumenta a continuación, esta modificación del estado atmosférico de fondo puede dar lugar a rasgos de la turbulencia, del transporte y acumulación de partículas, y de la actividad eléctrica marcadamente distintos.

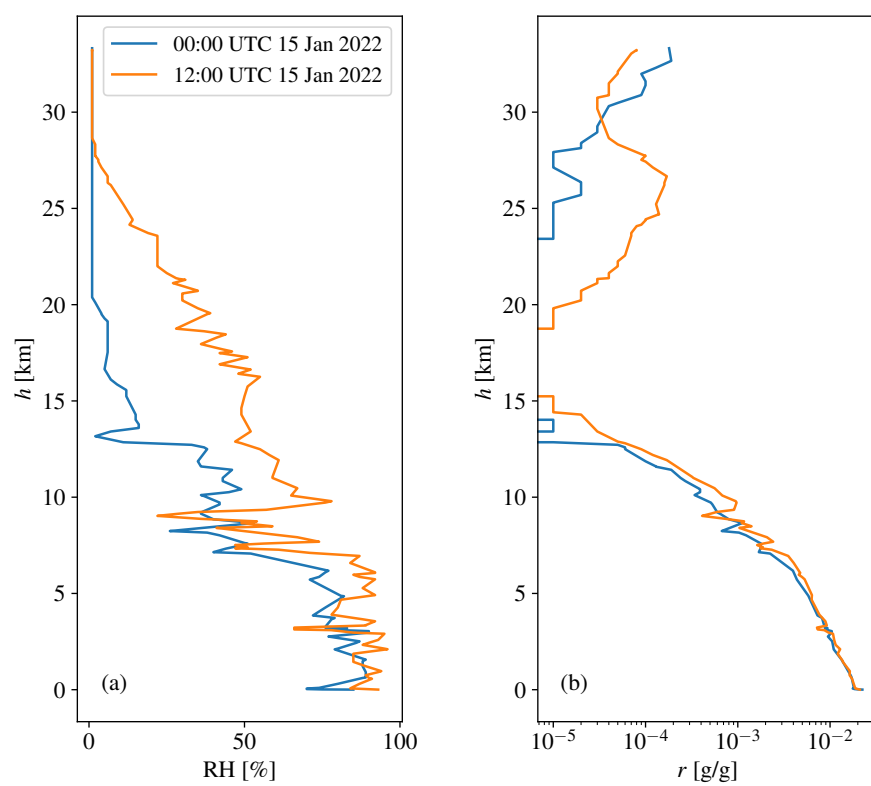


Figura 5.3: (a) Perfil vertical de humedad relativa (RH, en %) a partir de observaciones de radiosondeo en Pago Pago (Samoa Americana, estación meteorológica más cercana) a las 0:00 UTC y a las 12:00 UTC del 15 de enero de 2022 (datos provistos por <https://weather.uwyo.edu/upperair/sounding.shtml>). (b) Ídem para la razón de mezcla de agua total r en función de la altura.

5.2. Modelo de humedad y fuentes

5.2.1. Modelo atmosférico de convección con humedad

En esta sección presentamos un modelo mínimo basado en la aproximación de Boussinesq para una atmósfera húmeda estable y linealmente estratificada, con partículas pesadas. La aproximación de Boussinesq con un gradiente uniforme de la temperatura potencial equivalente no es estrictamente válida en un dominio tan alto como el considerado aquí, ya que dicha temperatura presenta un cambio de pendiente en la tropopausa. Si bien podrían emplearse modelos más completos, nos interesa un modelo sencillo para centrarnos en las escalas verticales donde tiene lugar la dinámica de la nube, siguiendo aproximaciones similares a las usadas en el estudio de la convección húmeda (Hernandez-Duenas y col. 2013). Comenzamos derivando el modelo para el fluido. A este modelo, basado en un modelo previo de Marsico y col. 2019, le añadiremos dos fuentes que nos permitirán controlar de manera independiente la humedad en la atmósfera y en la fuente.

Todas las magnitudes en las ecuaciones que siguen constan de un valor de referencia, un gradiente vertical de fondo estable y una perturbación o anomalía respecto del equilibrio. Para una magnitud cualquiera A podemos escribir

$$A = A_0 + \frac{d\bar{A}}{dz} z + A', \quad (5.1)$$

donde z es la coordenada vertical (positiva hacia arriba) y A' la perturbación. En todos los casos, el gradiente de fondo $d\bar{A}/dz$ está prescrito.

Partimos del modelo para un flujo estratificado a partir de las ecuaciones de Boussinesq con humedad y cambios de fase de Marsico y col. 2019. Cada parcela de aire puede contener vapor de agua o agua líquida, y la cantidad relativa de cada una está dada por la razón de mezcla total de agua, r , de cada parcela, que es

$$r = r_v + r_l, \quad (5.2)$$

donde r_v es la razón de mezcla de vapor y r_l la de la fase líquida. La saturación ocurre cuando r_v supera una razón de mezcla de saturación prescrita $r_{vs}^{(tot)}(z)$, que asumimos depende solo de z . La temperatura potencial equivalente se define como

$$\theta_e = \theta e^{Lr_v/(c_p T)}, \quad (5.3)$$

donde $\theta = T(p_0/p)^{R/c_p}$ es la temperatura potencial, T es la temperatura, p_0 la presión de referencia, p la presión, R la constante de los gases para aire seco, L el calor latente del vapor de agua y c_p el calor específico a presión constante. Para las anomalías podemos linealizar esta relación y, bajo la suposición de que $Lr_{v0}/(c_p T_0) \ll 1$, bien cumplida en condiciones típicas de la alta troposfera, podemos escribir

$$\theta'_e = \theta' + \frac{L}{c_p} r'_v. \quad (5.4)$$

Despreciando por el momento la viscosidad y la difusión, podemos escribir las ecuaciones para la velocidad del fluido $\mathbf{u}$, las fluctuaciones de temperatura potencial equivalente y las anomalías de la razón de mezcla como,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla \left(\frac{p}{\rho_0} \right) + b \hat{\mathbf{z}}, \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial \theta'_e}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \theta'_e = -\frac{d\bar{\theta}_e}{dz} w + s_{\theta_e}, \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial r'}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla r' = -\frac{d\bar{r}_e}{dz} w + s_r, \quad (5.7)$$

donde ρ_0 es la densidad de referencia del fluido, w es la componente vertical de la velocidad y s_{θ_e} y s_r son fuentes que añadimos al modelo de Marsico y col. 2019. En particular,

$$s_{\theta_e} = s_\theta + \frac{L}{c_p} s_v, \quad (5.8)$$

es una fuente de anomalías de temperatura potencial equivalente (con s_θ una fuente de anomalías de temperatura potencial y s_v una fuente de anomalías de vapor de agua), y

$$s_r = s_v + s_l, \quad (5.9)$$

es la fuente de anomalías de la razón de mezcla total de agua (con s_l una fuente anómala de agua líquida). Finalmente, en la Ec. (5.5), b es la anomalía de flotabilidad definida como

$$b = g \left(\frac{\theta'}{\theta_0} + R^* r'_v - r'_l \right), \quad (5.10)$$

con $R^* = R_v/R - 1 \approx 0,61$, donde R_v es la constante de los gases para el vapor.

Estas ecuaciones deben ser complementadas con la termodinámica del cambio de fase entre el líquido y el vapor. Asumimos que cuando este cambio ocurre, es mucho más rápido que la dinámica del fluido, y entonces podemos tomar al cambio de fase como instantáneo. Como parametrización simple de la condensación consideramos entonces $r'_v = \min\{r', r_{vs}(z)\}$ y $r'_l = \max\{0, r' - r_{vs}(z)\}$, donde $r_{vs}(z)$ es el exceso permitido en la razón de mezcla de saturación para las anomalías (Marsico y col. 2019). Bajo esta aproximación podemos definir las anomalías de flotabilidad para las fases no saturada (vapor) y saturada (líquida), b_u y b_s , respectivamente, como

$$b_u = g \left[\frac{\theta'_e}{\theta_0} + \left(R^* - \frac{L}{c_p \theta_0} \right) r' \right], \quad (5.11)$$

$$b_s = g \left[\frac{\theta'_e}{\theta_0} + \left(R^* - \frac{L}{c_p \theta_0} + 1 \right) r_{vs}(z) - r' \right]. \quad (5.12)$$

Podemos entonces reescribir las Ecs. (5.5) a (5.7), añadiendo disipación y difusión, como

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla \left(\frac{p}{\rho_0} \right) + (b_u \Theta_u + b_s \Theta_s) \hat{\mathbf{z}} + \nu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial b_u}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla b_u = -N_u^2 w + \kappa \nabla^2 b_u + s_u, \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial b_s}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla b_s = -N_s^2 w + \kappa \nabla^2 b_s + s_s, \quad (5.15)$$

donde s_u y s_s son las fuentes de flotabilidad de las fases saturada y no saturada, definidas más adelante. La disipación en la Ec. (5.13) para el campo de velocidad toma la forma usual de la ecuación de Navier-Stokes. La difusión de las anomalías de flotabilidad en las Ecs. (5.14) y (5.15) resulta de la difusión térmica y de la difusión másica de las anomalías en la densidad de agua, siguiendo la expresión habitual de la ley de Fick. Estrictamente, la temperatura y cada fase del agua tienen coeficientes de difusión distintos, lo que daría difusividades diferentes para b_u y b_s ; sin embargo, por simplicidad asumimos aquí la misma difusividad para ambas fases. La función $\Theta_u = \Theta(b_u - b_s)$ en la Ec. (5.13) es la función de Heaviside, y $\Theta_s = 1 - \Theta_u$. Finalmente, el cuadrado de las frecuencias de flotabilidad de cada fase se define como

$$N_u^2 = g \frac{d}{dz} \left[\frac{\bar{\theta}_e}{\theta_0} + \left(R^* - \frac{L}{c_p \theta_0} \right) \bar{r} \right], \quad (5.16)$$

$$N_s^2 = g \frac{d}{dz} \left[\frac{\bar{\theta}_e}{\theta_0} - \left(R^* - \frac{L}{c_p \theta_0} + 1 \right) r_{vs}(z) - \bar{r} \right]. \quad (5.17)$$

Por conveniencia, podemos definir también la frecuencia de Brunt-Väisälä del aire seco,

$$N^2 = \frac{g}{\theta_0} \frac{d\bar{\theta}}{dz}. \quad (5.18)$$

Especificar los valores de $d\bar{\theta}_e/dz$, $d\bar{r}/dz$ y dr_{vs}/dz prescribe el estado de la atmósfera y basta para resolver las Ecs. (5.13) a (5.15) una vez fijadas las fuentes, la viscosidad y la difusividad.

Las Ecs. (5.14) y (5.15) tienen dos fuentes s_u y s_s , respectivamente, de flotabilidad de las fases no saturada y saturada, dadas por

$$s_u = g \left[\frac{s_\theta}{\theta_0} + R^* s_v - \left(\frac{L}{c_p \theta_0} - R^* \right) s_l \right], \quad (5.19)$$

$$s_s = g \left[\frac{s_\theta}{\theta_0} + \left(\frac{L}{c_p \theta_0} - 1 \right) s_v - s_l \right]. \quad (5.20)$$

Estas fuentes nos permiten controlar la humedad y la temperatura potencial en la nube volcánica de forma independiente del estado atmosférico de fondo. Podemos extraer humedad e inyectar aire más caliente y seco en la fuente, inyectar energía térmica con la misma humedad que la atmósfera a la altura de la fuente, o inyectar humedad adicional para obtener una nube volcánica más cálida y húmeda. En particular, la diferencia entre las Ecs. (5.19) y (5.20) es

$$s_u - s_s = -g \left(\frac{L}{c_p \theta_0} - R^* - 1 \right) s_r. \quad (5.21)$$

Como $L/(c_p \theta_0) - R^* - 1 > 0$, notar que la diferencia $s_u - s_s$ tiene signo opuesto al de s_r que es la fuente de mezcla de agua total.

5.2.2. Modelo de partículas

Para integrar las partículas resolvemos la aproximación de partícula puntual pesada de la ecuación de Maxey-Riley-Gatignol (Maxey y Riley 1983), tal como hicimos en los resultados presentados en los capítulos anteriores, pero ahora considerando también el efecto de la gravedad dada por

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\tau_p} [\mathbf{u}(\mathbf{x}_p, t) - \mathbf{v}] - g \left(1 - \frac{\rho}{\rho_p} \right) \hat{\mathbf{z}}, \quad (5.22)$$

donde ρ_p es la densidad de la partícula, y $\rho/\rho_p \approx \rho_0/\rho_p$. Bajo estas aproximaciones, la velocidad de sedimentación de las partículas (con el fluido en reposo) es $w \approx g \tau_p (1 - \rho_0/\rho_p)$ (Good y col. 2014). Los detalles de la elección de los parámetros utilizados para las partículas se brindan en la Sección 5.3.

5.3. Parámetros dimensionales

5.3.1. Valores atmosféricos

Un valor atmosférico típico de la frecuencia de Brunt-Väisälä del aire seco, compatible con observaciones de la erupción de HTHH, es $N = 0,01 \text{ s}^{-1}$ (Wright y col. 2022), lo que corresponde a un gradiente vertical típico de temperatura potencial $d\bar{\theta}/dz \approx 3 \times 10^{-3} \text{ K m}^{-1}$ para $\theta_0 \approx 300 \text{ K}$ (Ichihara y col. 2023). Para el modelo turbulento húmedo necesitamos fijar el gradiente vertical de temperatura potencial equivalente, $d\bar{\theta}_e/dz$. En la alta troposfera, que tomamos como referencia para todo el dominio, los valores típicos en regiones tropicales son $\approx 5 \times 10^{-3}$ a 10^{-2} K m^{-1} , y algo menores en latitudes medias (Stull 2015). La Fig. 5.4(a) muestra estimaciones de la derivada vertical de la temperatura potencial equivalente instantánea a partir del radiosondeo más cercano disponible en tres volcanes tropicales activos (Anak Krakatau en Indonesia, Taal en Filipinas; y Hunga Tonga en el Reino de Tonga) antes de que ocurrieran erupciones. Las erupciones de Anak Krakatau en 2018 y de Taal en 2020 comparten características con la de HTHH en 2022, ya que en todos los casos hubo interacción magma-agua, producción de nubes húmedas sostenidas, y generación de rayos (A. Prata y col. 2020; A. R. Van Eaton y col. 2023). Asimismo, los valores típicos de $d\bar{\tau}/dz$ en la alta troposfera están entre $\approx -10^{-7}$ y -10^{-6} m^{-1} (Stull 2015). La Fig. 5.4(b) muestra también la derivada vertical de la razón de mezcla total de agua instantánea en los mismos sitios antes de las erupciones (en esta tesis todas las razones de mezcla se expresan en unidades de g/g).

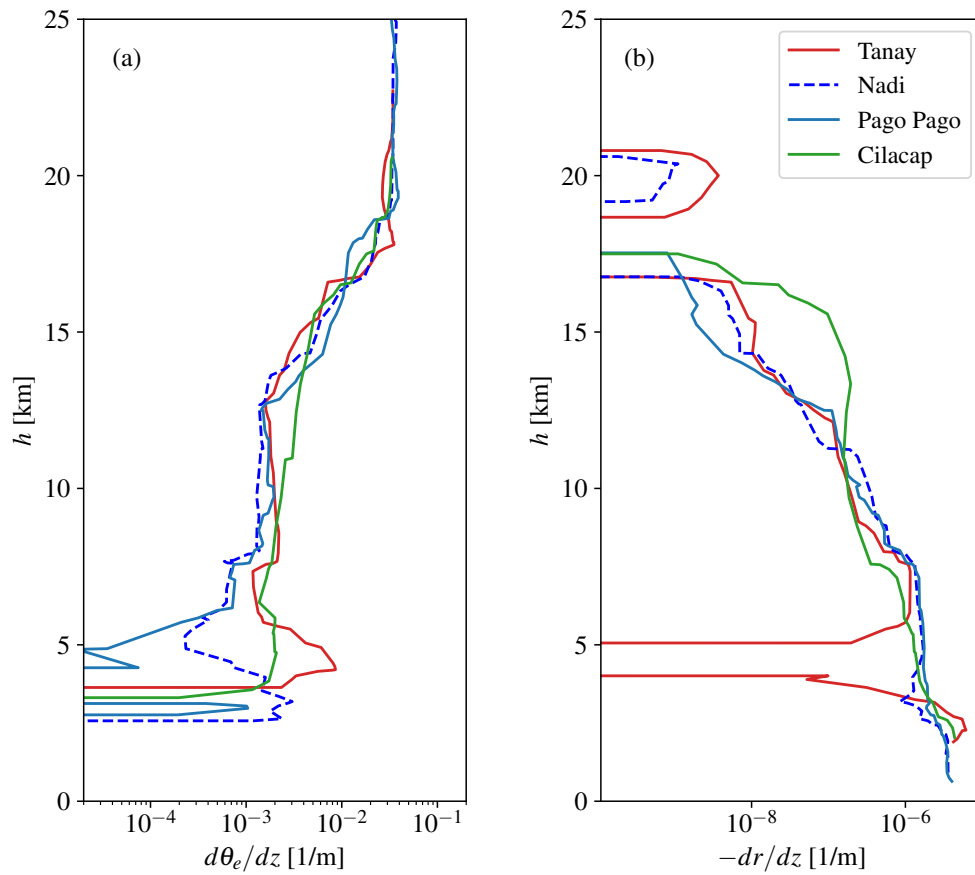


Figura 5.4: (a) Derivada vertical de la temperatura potencial equivalente a partir de observaciones de radiosondeo en Tanay a las 0:00 UTC del 1 de diciembre de 2020 (cerca de Taal), y en Nadi y Pago Pago a las 0:00 UTC del 15 de enero de 2022 (cerca de HTHH), y en Cilacap a las 0:00 UTC del 22 de diciembre de 2018 (cerca de Krakatau). (b) Ídem para la derivada vertical de la razón de mezcla total de agua en función de la altura.

Una elección de $d\bar{\theta}_e/dz \approx 5 \times 10^{-3} \text{ K m}^{-1}$ y $d\bar{r}/dz \approx -5 \times 10^{-7} \text{ m}^{-1}$, compatible con condiciones típicas en regiones tropicales y con las condiciones medidas por radiosondeos en la Fig. 5.4 a $\approx 10\text{-}15 \text{ km}$ de altura, da como resultado $N_u \approx 0,015 \text{ s}^{-1}$. Condiciones a menores alturas en las tres erupciones de la Fig. 5.4, por ejemplo $d\bar{\theta}_e/dz \approx 4 \times 10^{-3} \text{ K m}^{-1}$ y $d\bar{r}/dz \approx -1,5 \times 10^{-6} \text{ m}^{-1}$, también conducen a $N_u \approx 0,015 \text{ s}^{-1}$. Este es además un valor típico para condiciones estables en la atmósfera según Marsico y col. 2019 (comparar también con el valor de N para aire seco, donde se nota que la humedad da lugar a una atmósfera ligeramente más estratificada). Por lo tanto, fijamos N_u en este valor en todas las simulaciones de este estudio.

Una vez fijados estos dos gradientes, N_s depende únicamente de dr_{vs}/dz . Usando valores típicos a esas alturas, para el caso con $d\bar{\theta}_e/dz \approx 5 \times 10^{-3} \text{ K m}^{-1}$ y $d\bar{r}/dz \approx -5 \times 10^{-7} \text{ m}^{-1}$, si $dr_{vs}/dz \approx -10^{-6} \text{ m}^{-1}$ obtenemos $N_s \approx 0,71 N_u$, y para $dr_{vs}/dz \approx -2,1 \times 10^{-6} \text{ m}^{-1}$ obtenemos $N_s \approx 0,38 N_u$. El primer caso corresponde a una atmósfera más fría, mientras que el segundo representa un escenario más cálido o más tropical, en el cual el vapor se transforma en líquido a menor altura. Si consideramos, en cambio, el escenario con $d\bar{\theta}_e/dz \approx 4 \times 10^{-3} \text{ K m}^{-1}$ y $d\bar{r}/dz \approx -1,5 \times 10^{-6} \text{ m}^{-1}$, un valor de $dr_{vs}/dz \approx -10^{-7} \text{ m}^{-1}$ da como resultado $N_s \approx 0,75 N_u$, mientras que para $dr_{vs}/dz \approx -1,8 \times 10^{-6} \text{ m}^{-1}$ obtenemos $N_s \approx 0,33 N_u$.

Por lo tanto, a continuación consideramos tres estados atmosféricos en las simulaciones, todos con $N_u = 0,015 \text{ s}^{-1}$ y, respectivamente, con $N_s = 0,76 N_u$, $0,5 N_u$ y $0,32 N_u$. El primero puede considerarse un caso de fondo más seco o menos saturado, mientras que el último puede interpretarse como una atmósfera más cálida o más saturada, ya sea porque hay más vapor de agua en el estado de fondo, o porque el valor de saturación de vapor decrece más rápidamente con la altura.

5.3.2. Viscosidad cinemática y difusividad

Los únicos parámetros restantes del flujo, la viscosidad cinemática y la difusividad, se fijaron en $\nu = \kappa = 315 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ en las simulaciones de mayor resolución espacial. A diferencia de las frecuencias de flotabilidad, no se trata de valores atmosféricos realistas sino de valores efectivos de viscosidad y difusividad turbulentas necesarios para resolver adecuadamente la disipación con la resolución espacial usada. La elección de un número de Prandtl efectivo $\text{Pr} = \nu/\kappa = 1$ debe interpretarse del mismo modo (Basu y Holtslag 2021).

5.3.3. Parámetros de las partículas

Las partículas resultantes de una erupción volcánica (gotas de agua, cristales de hielo y otras partículas en erupciones) presentan números de Stokes entre 10^{-4} y 10^4 (Esposti Ongaro y Cerminara 2016; Gaudin y Cimarelli 2019), donde St se define como el cociente entre τ_p y un tiempo característico del flujo. La elección de ese tiempo característico varía entre estudios: en Esposti Ongaro y Cerminara 2016 se utilizó el tiempo de giro de los remolinos grandes de la nube turbulenta; en Gaudin y Cimarelli 2019 se empleó el cociente entre el diámetro del cráter y la velocidad de la pluma; mientras que en Cerminara y col. 2016a se usaron, alternativamente, el tiempo típico de giro de remolinos en la columna ascendente a la salida del cráter o el tiempo de giro en la escala de Taylor en la nube convectiva. Aquí mantendremos la elección de comparar τ_p con el tiempo de disipación de Kolmogorov, que será calculado de una forma análoga a la detallada en la Sección 2.1.3, resultando en el número de Stokes $\text{St} = \tau_p/\tau_\eta$, donde $\tau_\eta = \langle \omega^2 \rangle^{-1/2}$ se obtiene a partir del valor cuadrático medio de la vorticidad del flujo. En todas las simulaciones consideramos dos tipos de partículas, con $\text{St} = 10^{-2}$ (que llamaremos “partículas livianas”, L) y 10^{-1} (“partículas pesadas”, H), con 3 millones de partículas en cada conjunto. Como ya se mencionó, las partículas no interactúan: están afectadas por el fluido, pero no tienen ningun efecto sobre él ni interactúan entre sí. Las partículas parten en reposo y están inicialmente distribuidas homogéneamente en una capa delgada en la base del dominio. A medida que la nube volcánica se desarrolla, las partículas en esa capa son advectadas hacia arriba por el fluido.

5.3.4. Fuentes de humedad y de energía

Consideramos tres casos para la configuración de las fuentes definidas por las Ecs. (5.19) y (5.20). En primer lugar, tomamos un caso con $s_u > 0$ y $s_s = 0$. De la Ec. (5.21), como $s_u - s_s > 0$, se deduce que hay un sumidero de humedad en la fuente ($s_r < 0$). En otras palabras, con esta elección inyectamos aire caliente más seco que las parcelas atmosféricas al mismo nivel. A este caso lo denominamos “fuente seca”. En segundo lugar, consideramos una simulación con $s_u = s_s > 0$, que mediante la Ec. (5.21) implica ausencia de fuente de humedad ($s_r = 0$). Es decir, en este caso inyectamos aire caliente con la misma humedad que las parcelas atmosféricas a la altura de la fuente; a este caso lo llamamos “fuente térmica”. Por último, consideramos un caso con $s_u = 0$ y $s_s > 0$, que inyecta aire caliente y humedad, dando lugar a parcelas más flotantes y más saturadas que su entorno a la altura de la fuente. A este caso lo llamamos “fuente húmeda”. Controlar las fuentes nos permite así explorar distintas configuraciones de temperatura y humedad en la nube volcánica.

Si consideramos el caso no forzado ($s_u = s_s = 0$) e incompresible e inviscido ($\nu = \kappa = 0$), las Ecs. (5.13) a (5.15) conservan la energía (Marsico y col. 2019). Su densidad volumétrica está dada por

$$e = e_k + e_{pu} + e_{ps} + e_{lm} = \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2 + \frac{\Theta_u}{2} \left(\frac{b_u}{N_u} \right)^2 + \frac{\Theta_s}{2} \left(\frac{b_s}{N_s} \right)^2 + \frac{\Theta_u}{2} \frac{M^2 N_u N_s}{N_u^2 - N_s^2}, \quad (5.23)$$

donde la energía total es $E = \int e dV$, e_k es la densidad de energía cinética, e_{pu} la energía potencial de la fase no saturada, e_{ps} la de la fase saturada, e_{lm} la densidad de energía latente, y $M = b_u/N_u^2 - b_s/N_s^2$.

Usando esta expresión y las Ecs. (5.14) y (5.15), la tasa de inyección de energía potencial por unidad de masa y de tiempo debida a las fuentes puede estimarse como

$$\epsilon_{pu} = \left\langle \frac{b_u}{N_u} \frac{s_u}{N_u} \right\rangle, \quad (5.24)$$

$$\epsilon_{ps} = \left\langle \frac{b_s}{N_s} \frac{s_s}{N_s} \right\rangle. \quad (5.25)$$

Como ya se discutió, las fuentes en nuestras simulaciones son fuentes de flotabilidad que incluyen anomalías térmicas y de vapor de agua. La energía se inyecta como energía potencial de la fase no saturada, de la fase saturada, o de ambas, provocando el ascenso de las parcelas de fluido. La dependencia espacial de nuestras fuentes en las simulaciones está dada por dos elipsoides gaussianos iguales con una dispersión vertical de 2,8 km y una dispersión horizontal de 5,6 km, ubicados en la base del dominio. Se dejó por debajo de la fuente una capa de amortiguamiento con fluido en reposo para prevenir posibles artefactos asociados a las condiciones de contorno periódicas de las simulaciones. La amplitud de las fuentes se mantiene constante en el tiempo. Las amplitudes se eligieron de modo que el valor medio de la tasa total de inyección fuese $\epsilon_{\text{tot}} \approx 0,9 \text{ W kg}^{-1}$, y su máximo $\epsilon_{\text{máx}} \approx 1,34 \text{ W kg}^{-1}$. Como referencia, para el caso en el que solo forzamos la flotabilidad de la fase no saturada ($s_u > 0$, $s_s = 0$), usando la relación $\dot{E}_{pu} = \epsilon_{pu} \rho_0 V_s$, donde $\rho_0 = 1,199 \text{ kg m}^{-3}$ es la densidad media del aire húmedo en condiciones atmosféricas habituales, y $V_s \approx 10^3 \text{ km}^3$ es el volumen de la fuente, obtenemos un valor medio de $\dot{E}_{pu} \approx 1,17 \times 10^{12} \text{ W}$ y un máximo de $\dot{E}_{pu} \approx 1,75 \times 10^{12} \text{ W}$, comparables con las tasas de inyección de energía del modelo seco usado en Ichihara y col. 2023 y compatibles con estimaciones de la primera erupción de HTHH. Esto resultó además, en las tres configuraciones consideradas para las fuentes, en velocidades ascendentes máximas de las parcelas de fluido cercanas a las fuentes (es decir, en la parte baja de la nube) de $\approx 150 \text{ m s}^{-1}$ compatible con valores típicos en erupciones (Gaudin y Cimarelli 2019; Rowell y col. 2022).

5.4. Simulaciones numéricas

Se realizaron simulaciones del modelo atmosférico húmedo tridimensional, no hidrostático y establemente estratificado, acoplado con partículas inerciales. Las Ecs. (5.13) a (5.15) y (5.22)

Estado de la atmósfera		Fuente seca $s_s = 0$	Fuente térmica $s_u = s_s$	Fuente húmeda $s_u = 0$
Menos saturada	$N_s/N_u = 0,76$	A	D	E
	$N_s/N_u = 0,5$	B		
Más saturada	$N_s/N_u = 0,32$	C		F

Tabla 5.1: Etiquetas de las seis simulaciones. La razón N_s/N_u corresponde a la relación entre las frecuencias de flotabilidad de las fases de agua saturada (líquida) y no saturada (vapor) en la atmósfera; valores más pequeños corresponden a una atmósfera más saturada o más cálida. Las fuentes s_u y s_s corresponden, respectivamente, a las fuentes de las fases de agua no saturada y saturada; distintas elecciones de sus amplitudes dan lugar a una fuente caliente seca, neutra (puramente térmica) o húmeda.

se resolvieron numéricamente con GHOST, y las visualizaciones tridimensionales de partículas se realizaron con VAPOR (Clyne y col. 2007). Estas simulaciones se ejecutaron en un dominio periódico de tamaño $L \times L \times H = 188 \times 188 \times 94 \text{ km}^3$, con resolución espacial $1024 \times 1024 \times 512$. Para verificar la convergencia realizamos además casos con $512 \times 512 \times 256$ y $256 \times 256 \times 128$ (ajustando ν , κ y τ_p), sin observar cambios cualitativos en los resultados.

El flujo es incompresible (número de Mach nulo), con un perfil de temperatura potencial equivalente de fondo lineal en altura. Las partículas, pequeñas y densas, están sometidas a arrastre de Stokes y gravedad (Falkinhoff y col. 2020). El objetivo es capturar la turbulencia húmeda y su efecto sobre la dinámica de partículas en la nube en paraguas; por ello representamos la erupción mediante una fuente localizada y condiciones de contorno simplificadas como de describió en la Sección 5.2). No buscamos reproducir la columna eruptiva ni la física de la región de empuje gaseoso. En Costa y col. 2016; Esposti Ongaro y Cerminara 2016 se presentan otros modelos de nubes volcánicas que representan adecuadamente estas características, aunque en general recurren al modelado simplificado de la turbulencia a cambio.

Como ya se mencionó, consideramos seis configuraciones atmosféricas con N_u fijo ($N_u \approx 0,015, \text{s}^{-1}$) y N_s decreciente ($N_s \approx 0,011, \text{s}^{-1}$, $7,5 \times 10^{-3}, \text{s}^{-1}$ y $4,8 \times 10^{-3}, \text{s}^{-1}$). Menor N_s implica una atmósfera más saturada. También variamos el contenido de agua de la fuente para evaluar el impacto de la saturación de la nube (ver la Tabla 3.1). El forzado consiste en una inyección constante de flotabilidad (calor) y vapor en una región pequeña en la base del dominio, con distintas razones entre ambas tasas; ajustamos estos valores para obtener aportes de energía y descarga de masa compatibles con erupciones típicas, en términos de las fuentes descriptas en la Sección 5.3.4. Aunque la tasa de inyección de energía real varía en el tiempo, aquí la mantenemos constante. De todas formas, las simulaciones resultan naturalmente en flujos no estacionarios. La no estacionariedad puede intensificar el *clustering* y la electrificación, como se discutió en el Cap. 4 y en Zapata y col. 2024. En cada simulación inyectamos dos poblaciones de partículas con $St = 10^{-1}$ y 10^{-2} (denominadas H y L), con 3×10^6 partículas por población, inicialmente en la base del recinto, que son transportadas por la columna ascendente generada por la fuente. Estas simplificaciones permiten resolver explícitamente la turbulencia en un amplio rango de escalas (hasta $\approx 180 \text{ m}$), utilizando una parametrización solo para la transición de fase líquido-vapor y valores efectivos para la viscosidad y difusividad, con todos los demás parámetros con valores realistas.

5.5. Acumulacion preferencial y colisiones

La figura 5.5 muestra un corte vertical central de la razón anómala de mezcla de agua r' , menos el valor de sobresaturación de vapor r_{vs} , en unidades de g/g. Recordar que las cantidades primadas son correcciones respecto del estado atmosférico de fondo (ver los detalles en la Sección 5.2). Cuando $r' - r_{vs} < 0$, las parcelas de aire están más secas o contienen solo vapor de agua. Cuando $r' - r_{vs} > 0$, el exceso en la razón de mezcla, $r' - r_{vs}$, está en forma de agua líquida. Al comparar las simulaciones A, B y C, todas con fuente seca y una atmósfera crecientemente más saturada, se identifican tres tendencias: (i) a medida que aumenta la humedad relativa atmosférica, el vapor de la nube condensa a alturas menores; (ii) el primer “enrollamiento” del flujo, que genera vorticidad, parece ocurrir a un radio menor; y (iii) la cima de la nube volcánica alcanza alturas mayores.

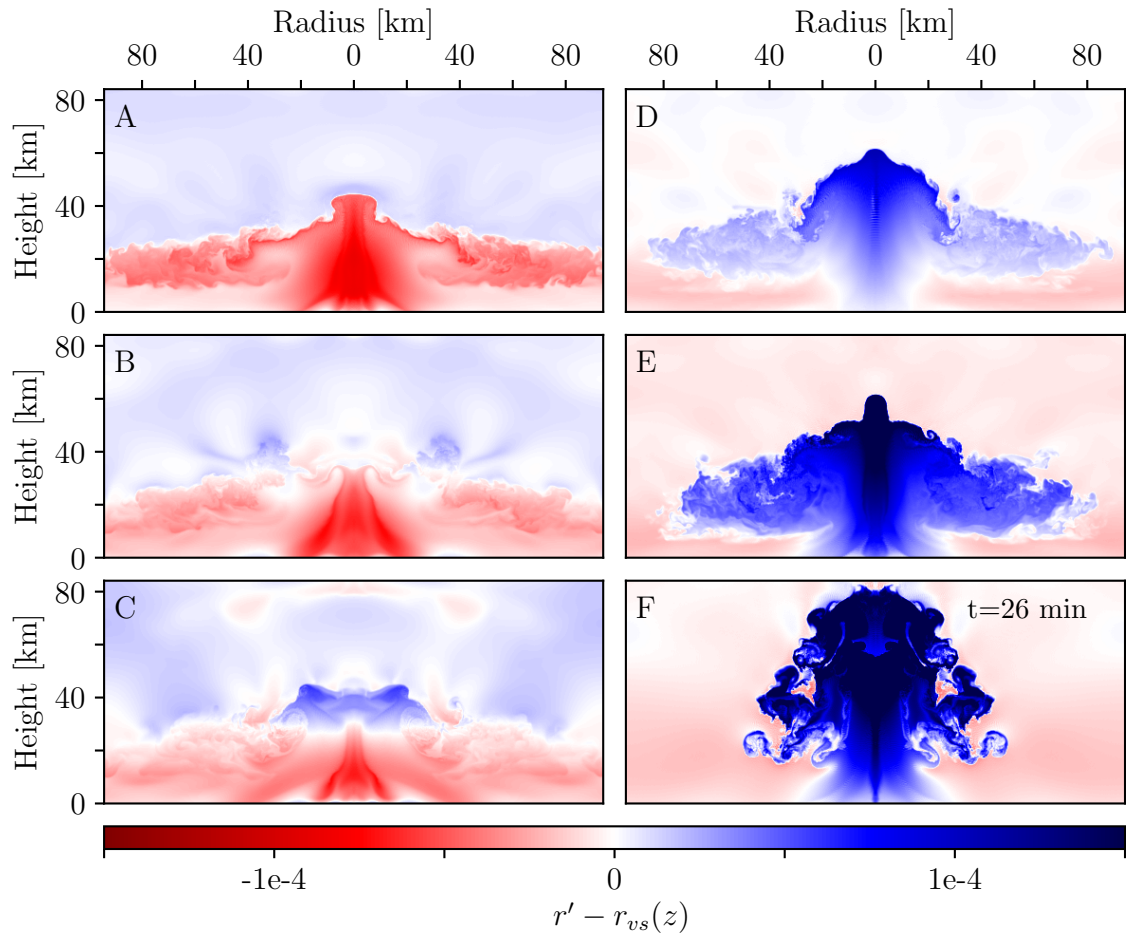


Figura 5.5: Cortes verticales de la razón anómala de mezcla de agua menos el valor de sobresaturación de vapor, $r' - r_{vs}(z)$, en unidades de g/g. Las regiones rojas corresponden a aire seco o a vapor, y las azules a parcelas saturadas (agua líquida). Las simulaciones A, B y C corresponden a una fuente seca en una atmósfera progresivamente más cálida (o más saturada), de A a C. Las simulaciones D y E presentan una cantidad creciente de agua en la fuente, en una atmósfera fija y menos saturada. La simulación F tiene una fuente húmeda en una atmósfera más saturada. Todos los cortes corresponden al tiempo $t = 43$ min, excepto F ($t = 26$ min).

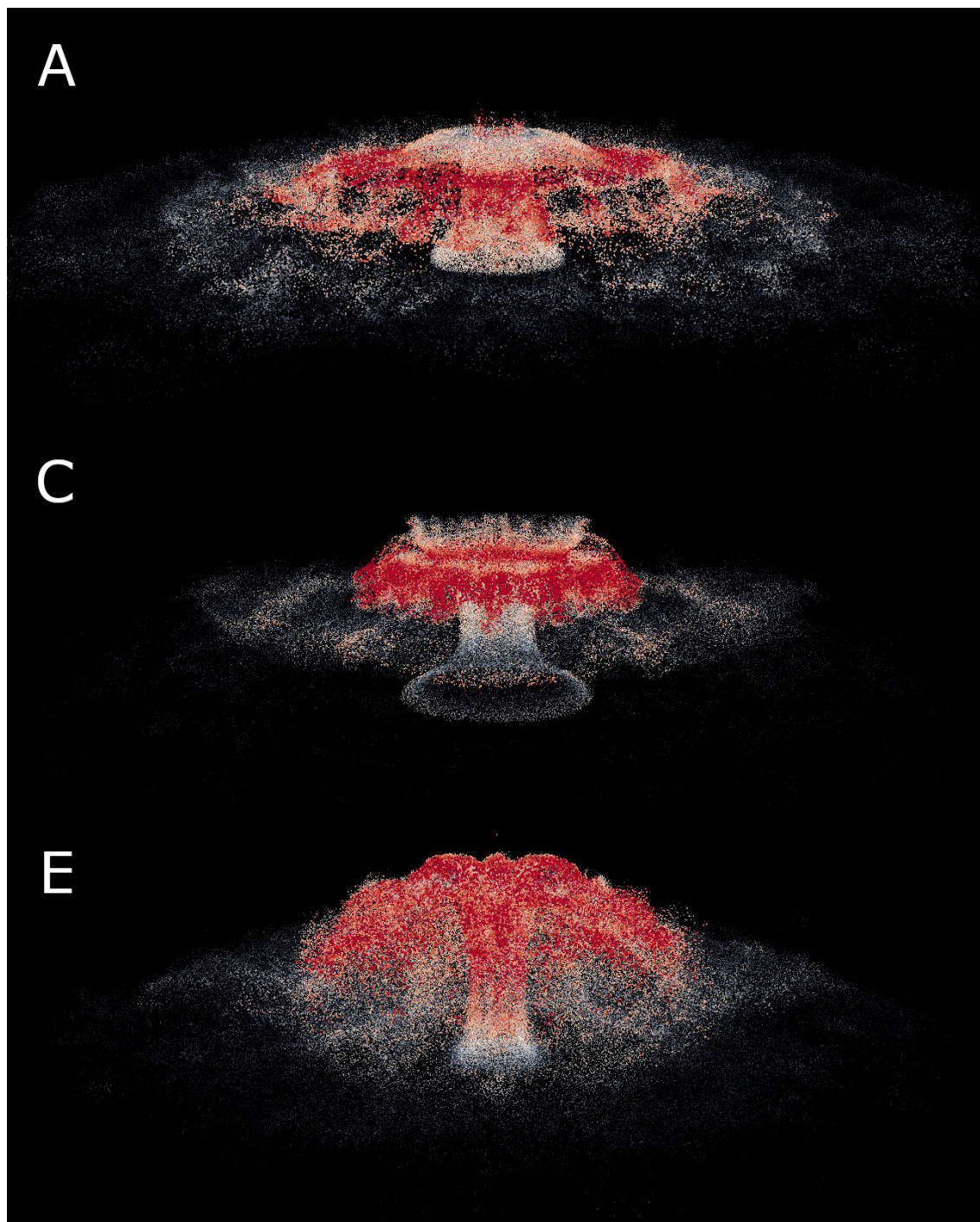


Figura 5.6: Visualización tridimensional de partículas livianas en tiempos tardíos de las simulaciones A, C y E. Las partículas con velocidades grandes se colorean en rojo, mientras que las de velocidades pequeñas se colorean en azul y son más transparentes (las partículas con velocidad instantánea nula se vuelven invisibles). Solo se muestran partículas por encima de 4 km s.n.m.

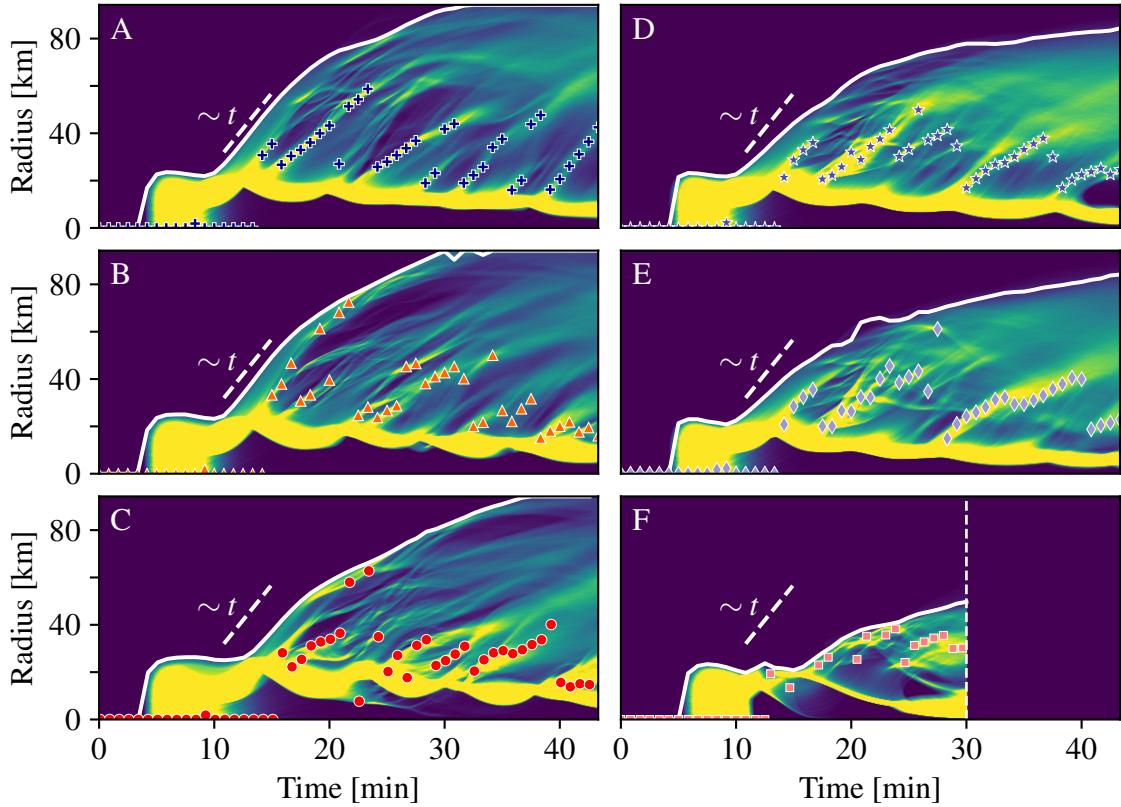


Figura 5.7: Evolución temporal de la distribución radial de partículas en la nube volcánica, promediada verticalmente. Los colores muestran la densidad de partículas livianas, $n_L(r, t)$, con máximos prominentes en amarillo con forma de dedos que se desplazan hacia afuera. La línea blanca traza la evolución del borde de la nube, mientras que los marcadores indican la posición del segundo máximo radial en el número estimado de colisiones entre las partículas livianas (L) y pesadas (H), $N_{L,H}$. Como referencia, una línea discontinua indica un crecimiento lineal en el tiempo. Las simulaciones A, B y C corresponden a una fuente seca en una atmósfera progresivamente más cálida (o más saturada), de A a C. Las simulaciones D y E presentan una cantidad creciente de agua en la fuente, en una atmósfera fija y menos saturada como en A. La simulación F tiene una fuente húmeda en una atmósfera más saturada.

Tendencias similares se observan cuando, para un estado atmosférico fijo, se modifica la cantidad de agua en la fuente (A, D y E). Finalmente, el caso con fuente húmeda en una atmósfera saturada (F) combina estos efectos, dando lugar a una nube muy alta con escasa expansión horizontal y turbulencia intensa en radios más pequeños. Esta simulación debió detenerse antes, cuando la nube alcanzó la parte superior del dominio. El comportamiento global es compatible con estudios previos que muestran que el vapor puede incrementar la tasa de crecimiento y la altura de las nubes volcánicas (Mastin y col. 2024), pero veremos aquí que el agua también impacta la turbulencia y la dinámica de las partículas en la nube volcánica.

Recordamos que en $t = 0$ las partículas se colocan, en todas las simulaciones, en una capa delgada en la base del dominio. Al iniciar la erupción, las partículas se acumulan rápidamente en la columna central antes de ser transportadas hacia afuera. La Fig. 5.6 muestra una visualización tridimensional de la posición de las partículas livianas en tiempos tardíos de las simulaciones A (atmósfera y fuente más secas), C (atmósfera más saturada con fuente seca) y E (atmósfera más seca con fuente húmeda). Las partículas con velocidades grandes se marcan en rojo. En todos los casos, las partículas se acumulan en estructuras con morfología anular en la nube volcánica, pero en los casos C y E dicha acumulación ocurre a una distancia radial menor desde la fuente y a mayores alturas (las partículas pesadas exhiben patrones similares). Al observar la evolución temporal, en el caso C se hacen evidentes oscilaciones lentas tipo onda, con un período fundamental de la fase saturada de $\approx 3,5$ min. Este valor es lo suficientemente lento como para acoplarse con el tiempo de giro de los remolinos más grandes en la nube, que es del mismo orden de magnitud. Por último, en todos los casos con mayor humedad también se observa mayor incorporación del

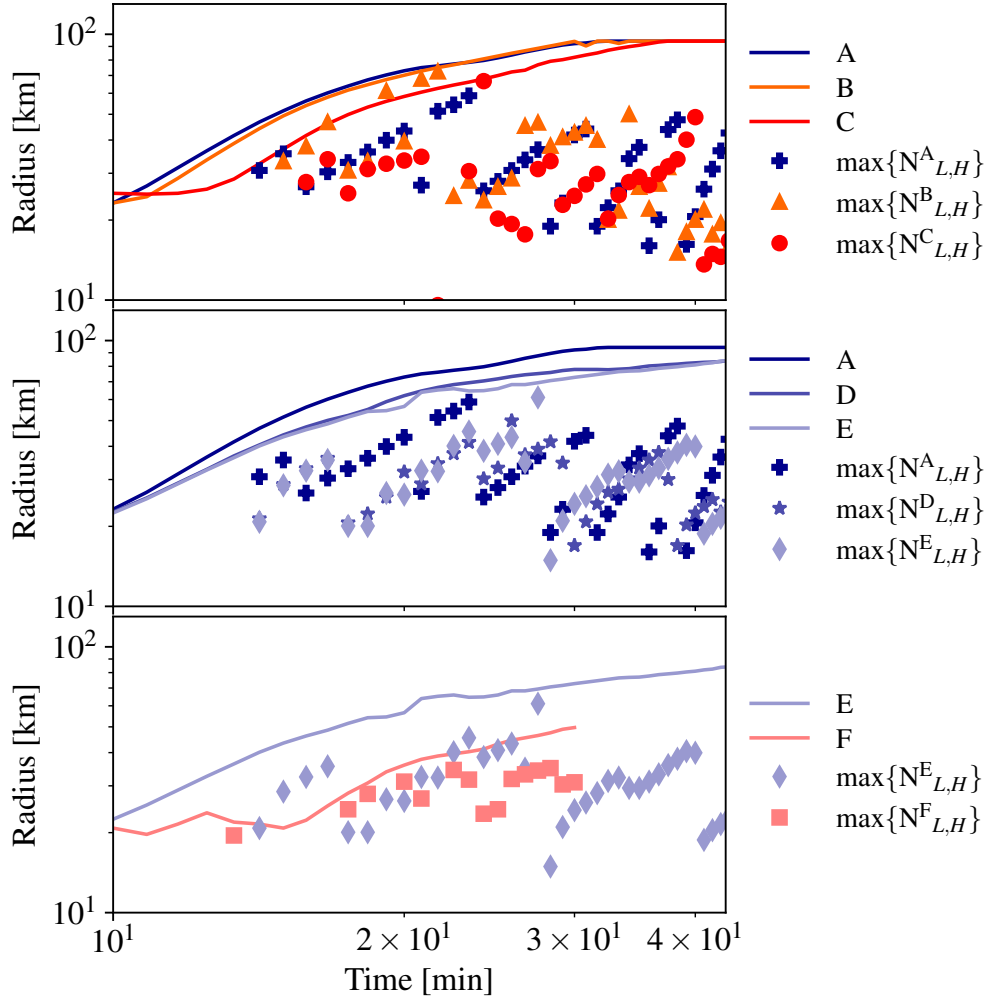


Figura 5.8: Evolución temporal, en escala log-log, del borde de la nube volcánica y de la posición radial del segundo máximo de las colisiones estimadas de partículas para todas las simulaciones. Se emplean los mismos marcadores que en la figura 5.7 para los máximos. El panel superior compara las simulaciones A, B y C (fuente seca y saturación atmosférica creciente). El panel central compara A, D y E (saturación atmosférica fija y fuente progresivamente más húmeda). El panel inferior compara el caso E con F (fuente húmeda en atmósfera húmeda). Aun en escala logarítmica se observa una desaceleración de la expansión de la nube y una disminución del radio del máximo de colisiones estimadas a medida que aumenta la humedad tanto en la atmósfera como en la fuente.

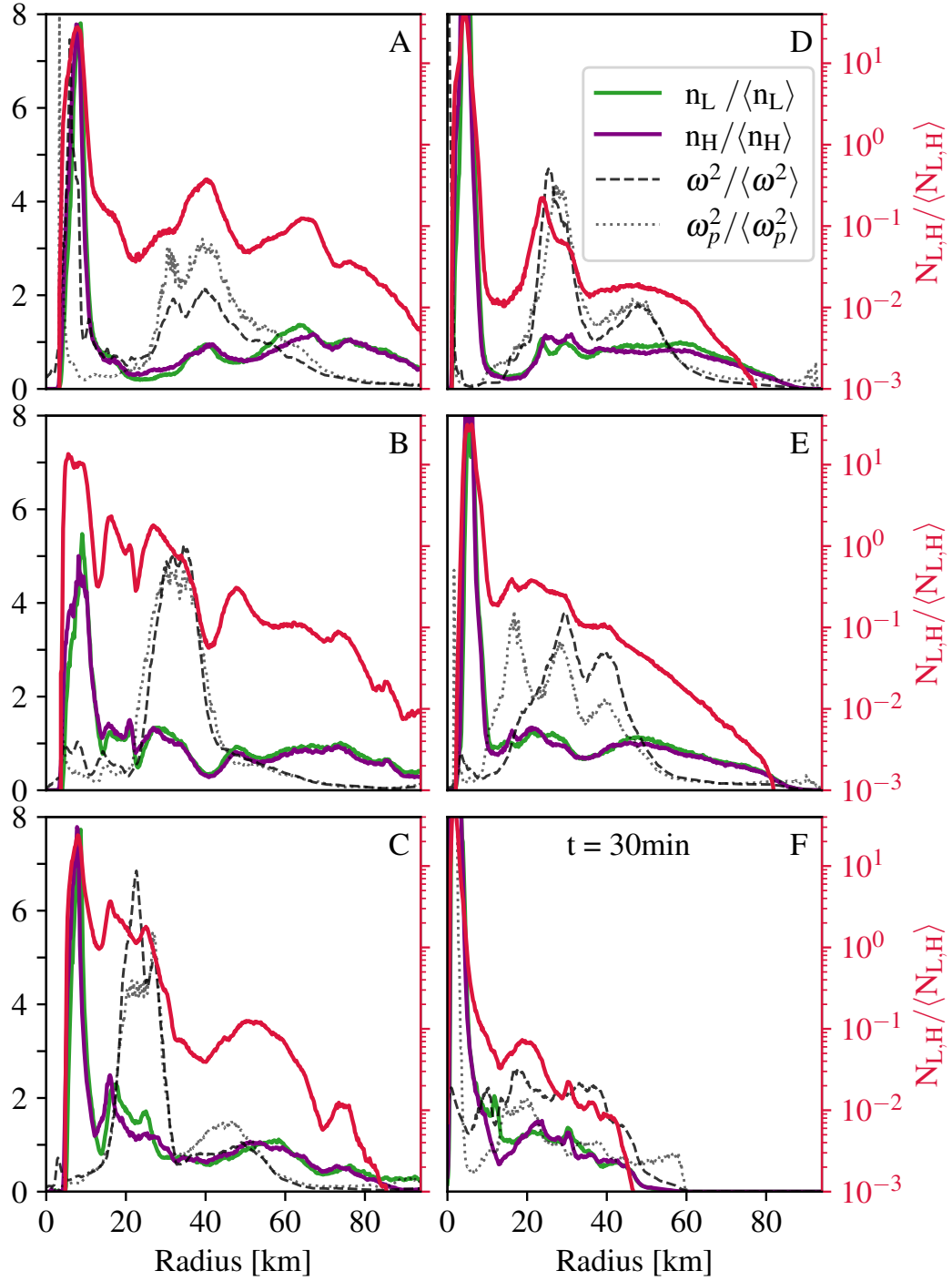


Figura 5.9: Perfiles radiales de magnitudes relevantes para los rayos eléctricos de origen volcánico en el tiempo final de las simulaciones. En escala lineal (indicada por el eje vertical izquierdo) se muestran la densidad de partículas livianas y pesadas, $n_L(r)$ y $n_H(r)$, el campo de vorticidad al cuadrado, $\omega^2(r)$, y la vorticidad promediada solo en las posiciones de las partículas, $\omega_p^2(r)$. Las líneas rojas muestran, en escala logarítmica (indicada por el eje derecho), el perfil radial de las colisiones estimadas entre partículas livianas y pesadas, $N_{L,H}(r)$. Todas las magnitudes se promedian en la dirección vertical dentro de la nube sombrilla y se normalizan por su valor medio sobre todos los radios.

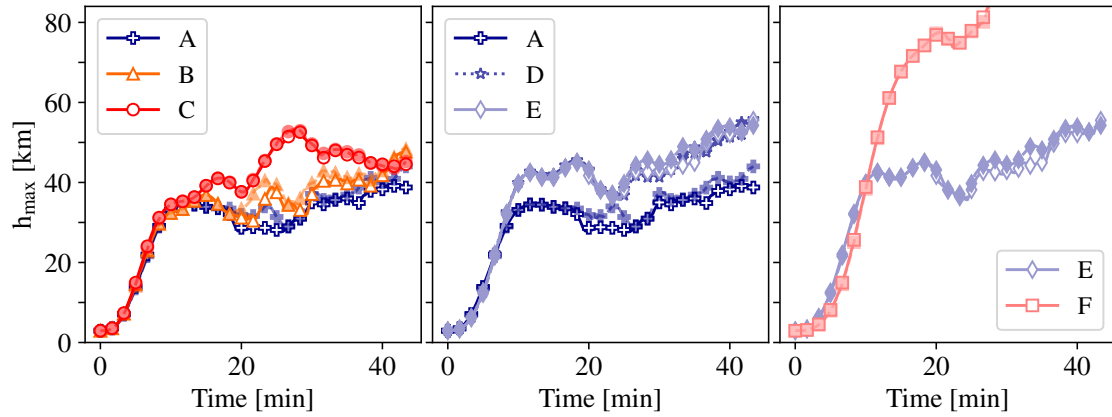


Figura 5.10: Altura máxima alcanzada por las partículas en función del tiempo en todas las simulaciones. Los símbolos vacíos corresponden a partículas livianas (L) y los símbolos llenos a partículas pesadas (H). Las partículas livianas, que siguen el flujo más de cerca, pueden considerarse un indicador de la altura máxima de la columna central y alcanzan mayores altitudes a medida que aumenta la humedad en la atmósfera (casos A, B y C) o en la pluma (casos A, D y E). El caso F (comparado en el último panel con E) presenta una pluma y una atmósfera húmedas, y muestra el crecimiento en altura más rápido. Las partículas pesadas a veces alcanzan alturas mayores que las ligeras como resultado de su inercia.

aire del entorno (*entrainment*) en la corriente ascendente central. También es notable cómo las partículas son impulsadas hacia arriba en una columna más ancha desde la fuente.

La densidad de partículas en la nube volcánica brinda una primera aproximación a la dinámica del material particulado y al número de colisiones. Sin embargo, un aumento en el número de colisiones se traduce en una mayor electrificación solo cuando la acumulación de partículas de diferentes tamaños ocurre en regiones similares (Cimarelli y col. 2014; Gaudin y Cimarelli 2019), ya que son esas colisiones las que pueden producir carga triboeléctrica. Por ello, estimamos el número de colisiones entre partículas livianas y pesadas a partir de la teoría cinética, donde las colisiones son proporcionales al producto de las densidades de partículas y a sus velocidades características,

$$N_{i,j} = C n_i n_j (v_i v_j)^{1/2}, \quad (5.26)$$

donde n_i es la densidad de las partículas con $i = L$ o H , v_i es la velocidad r.m.s. de las partículas, y C es una constante que depende de la sección eficaz de colisiones entre partículas.

La Fig. 5.7 muestra, en todas las simulaciones, la densidad de las partículas livianas promediada verticalmente en la nube volcánica, $n_L(r, t)$, con una escala de colores que va de azul (baja densidad) a amarillo (alta densidad). En la misma figura se presenta la evolución del borde de la nube, definido como el radio al cual la densidad de las partículas más livianas (de menor inercia y, por ende, que siguen mejor al flujo) cae dos órdenes de magnitud; esto se indica con la línea blanca continua. Al inicio, una línea blanca discontinua señala una dependencia lineal con el tiempo. Finalmente, los marcadores muestran la posición del segundo máximo del número de colisiones entre partículas livianas y pesadas, $N_{L,H}$, en función del tiempo (el primer máximo corresponde a la columna ascendente), en donde también se observa electrificación en las mediciones en erupciones volcánicas.

Aunque el radio en el que se acumulan las partículas fluctúa en el tiempo, presenta un promedio bien definido que disminuye al aumentar la humedad. Esto se verifica en las simulaciones A, B y C (con humedad fija en la fuente y mayor saturación atmosférica), así como en A, D y E (con saturación atmosférica fija y mayor contenido de humedad en la nube). La simulación F, que combina una atmósfera más saturada con una fuente húmeda, exhibe el anillo de menor tamaño, con un radio medio de ≈ 20 km. Esto indica que, en atmósferas o nubes más húmedas, el anillo se forma más cerca de la columna central y la nube comienza a expandirse más tarde. Cabe destacar que los resultados para el caso más seco (A) son los más próximos a los reportados en el estudio de formación de anillos en atmósfera seca en Ichihara y col. 2023.

La Fig. 5.8 confirma estas tendencias al comparar la evolución temporal en escala log-log,

del frente de la nube y de la posición radial del segundo máximo de las colisiones estimadas de partículas, $N_{L,H}$, en todas las simulaciones. En todos los casos, a medida que aumenta la humedad, se observa una desaceleración de la expansión radial de la nube sombrilla y una disminución del radio donde ocurre el máximo de colisiones estimadas.

La Fig. 5.9 muestra los perfiles radiales de varias magnitudes, promediadas verticalmente en la nube sombrilla y promediadas en el tiempo alrededor de la etapa final de la erupción volcánica ($t = 43$ min, excepto para la simulación F). Normalizadas por sus valores medios sobre todos los radios, se presentan la vorticidad al cuadrado, ω^2 (que actúa como indicador de la intensidad de la turbulencia), la vorticidad al cuadrado promediada solo en las posiciones de las partículas, ω_p^2 , las densidades de partículas livianas y pesadas, n_L y n_H , y el número estimado de colisiones $N_{L,H}$. El primer máximo de ω^2 corresponde a una región de turbulencia intensa en el borde de la columna central, mientras que un segundo máximo aparece más hacia afuera, asociado al anillo de vorticidad que se forma en la nube sombrilla. Es interesante notar que la acumulación de partículas, y el segundo máximo del número de colisiones $N_{L,H}$, están correlacionados con la intensidad de la turbulencia indicada por ω^2 . A medida que aumenta la humedad, tanto en la atmósfera como en la nube, el primer pico de vorticidad se debilita y el segundo se fortalece, lo que indica que la turbulencia más intensa se desplaza desde la columna central hacia la región circundante de la nube sombrilla. Además, tanto este máximo, como los segundos picos de las densidades de partículas y de la tasa de colisiones, migran hacia radios menores. Esto confirma que, bajo condiciones más húmedas, el anillo turbulento se contrae hacia el interior y se forma, en todos los casos, en las cercanías de las regiones donde la turbulencia es más intensa. No solo crece el pico de la vorticidad normalizada $\omega^2/\langle\omega^2\rangle$ con el aumento de la humedad, sino también su valor absoluto. En otras palabras, la turbulencia en la nube se intensifica conforme aumenta la humedad. Como referencia, los valores de $\langle\omega^2\rangle$ en la nube son $1,9 \times 10^{-3}$, 2×10^{-3} y $2,5 \times 10^{-3} \text{ s}^{-2}$ en las simulaciones A, B y C, y $2,9 \times 10^{-3}$, $3,9 \times 10^{-3}$ y $5,7 \times 10^{-3} \text{ s}^{-2}$ en D, E y F, respectivamente. Por último, aunque los perfiles radiales de ω^2 y ω_p^2 son muy similares, en algunos casos ω_p^2 resulta incluso mayor en los radios donde las partículas se acumulan. Este sesgo indica no solo que las partículas se concentran donde la turbulencia es más intensa, sino también que prefieren explorar regiones de mayor turbulencia dentro de los anillos de vorticidad. Esto sugiere que el proceso por el cual la turbulencia conduce a la acumulación de partículas es el del *clustering* inercial (Shaw 2003; Obligado y col. 2014; Bec y col. 2024), es decir, el mecanismo que estudiamos en los capítulos anteriores.

En la Fig. 5.10 mostramos la altura máxima alcanzada por todas las partículas en función del tiempo (compárese, por ejemplo, con las observaciones de HTHH en la Fig. 5.1). Las partículas livianas sirven como un indicador del tope de la nube, ya que tienen menor inercia y siguen más de cerca el flujo. Inicialmente, hay una fase transitoria que dura hasta $t \approx 10$ minutos, durante la cual las partículas son transportadas rápidamente hacia arriba. Luego, su altura máxima se estabiliza, coincidiendo con la expansión horizontal de la nube, como se muestra en la Fig. 5.7. La humedad tiene un impacto significativo, conduciendo a mayores altitudes de la nube a medida que aumenta la humedad de la atmósfera o de la fuente. A continuación se observa una fase más estacionaria, caracterizada por oscilaciones con periodos de aproximadamente 5 a 10 minutos, en la que cada oscilación alcanza alturas levemente mayores. En algunos casos, las partículas pesadas pueden alcanzar alturas superiores a las de las partículas livianas como resultado de su mayor inercia.

5.6. Discusión

En este capítulo se estudió la dinámica y acumulación de partículas en un flujo geofísico multifase en presencia de humedad, y su impacto en la dinámica y electrificación de nubes volcánicas. Mediante simulaciones de alta resolución de nubes turbulentas con humedad acopladas a la dinámica de partículas inerciales, y utilizando una formulación nueva que permite controlar de forma independiente la humedad atmosférica y la inyección de humedad volcánica junto con el modelo sencillo de partículas inerciales usado en los capítulos 3 y 4, mostramos que el estado de saturación tanto de la atmósfera como de la fuente, y su acoplamiento mutuo, influye de forma significativa en el desarrollo de la nube, la distribución de la turbulencia, la acumulación y las

colisiones entre partículas y, en última instancia, en las tormentas eléctricas volcánicas. Teniendo presentes las limitaciones y simplificaciones de nuestro modelo, las comparaciones razonables con observaciones de la evolución de la nube y con resultados numéricos previos sugieren que un modelo sencillo como este puede emplearse para informar a otros más detallados que incluyan procesos en la escala del cráter o química compleja, así como a estudios que utilicen los rayos como marcadores de la expansión de la nube, de la dinámica turbulenta y de los parámetros de la erupción. En particular, la simulación de un flujo turbulento simplificado pero bien resuelto tridimensionalmente nos permitió seguir explícitamente la evolución microfísica de millones de partículas, aportando información sobre la interacción entre turbulencia, evolución de la nube, estratificación ambiental y cambios de fase.

Los resultados indican que el aumento de la humedad en la atmósfera o en la fuente conduce a una reorganización marcada de las estructuras turbulentas dentro de la nube sombrilla. En entornos más húmedos, el pico de intensidad turbulenta y el *clustering* asociado de partículas se desplazan hacia el interior, formando estructuras anulares a radios menores (≈ 20 km) desde el centro de la erupción. Este comportamiento refleja mejor las observaciones de la segunda fase de la erupción de HTHH, que ocurrió en una estratósfera prehumedecida y mostró anillos de rayos con radios menores que la primera fase. De hecho, el primer pulso de la erupción se inyectó en una atmósfera relativamente seca y determinó las condiciones más saturadas en las que tuvo lugar la segunda fase, como se puede ver en la Fig. 5.3. En contraste, condiciones más secas en las simulaciones, análogas a las que precedieron al primer pulso, producen anillos turbulentos más anchos (de radio ≈ 40 km, como en las observaciones) y una huella de electrificación más extensa. En esta comparación debe tenerse en cuenta que todas nuestras simulaciones comparten la misma tasa de inyección de energía, con el fin de aislar el efecto de la humedad y comparar en igualdad de condiciones. Sin embargo, es probable que las fases primera y segunda del HTHH hayan tenido tasas distintas de inyección de energía y descarga de masa, lo que a su vez habría modificado la evolución de la nube sombrilla y los patrones de anillos de rayos.

Las simulaciones también capturan oscilaciones tipo ondas de gravedad superpuestas al transporte vertical de partículas, con períodos característicos de entre 6 y 20 minutos, como se observa en la Fig. 5.10. Estas oscilaciones, más notorias en atmósferas más húmedas, sugieren un acoplamiento emergente entre la flotabilidad húmeda y la turbulencia estratificada, con el potencial de intensificar el mezclado y la separación de cargas (A. R. Van Eaton y col. 2023). No obstante, las colisiones entre partículas, condición necesaria para la electrificación (Shaw 2003; Cimarelli y col. 2014; Gaudin y Cimarelli 2019) siguen gobernadas fundamentalmente por la intensidad turbulenta local más que por la actividad ondulatoria por sí sola.

Al comparar diagnósticos sintéticos (distribuciones de partículas, tasas de colisiones y altura de la nube) con observaciones características como tasas y patrones espaciales de rayos, ofrecemos una interpretación posible del desarrollo de la actividad eléctrica en erupciones volcánicas. Estos resultados respaldan la hipótesis de que los rayos pueden servir como marcador de la dinámica interna de la nube, de la intensidad de la turbulencia y del contenido de humedad. Estos resultados también son compatibles con observaciones atmosféricas que indican que, incluso en condiciones normales sin actividad volcánica, la humedad puede incrementar significativamente la turbulencia (Wilson y col. 2013). En este sentido, la erupción del HTHH brinda la oportunidad de considerar la condición excepcional de una atmósfera húmeda a gran altura, condición posiblemente pasada por alto en erupciones extremas históricas, y que podría repetirse en el futuro. Cabe señalar que, si bien la humedad atmosférica puede medirse, las condiciones internas de humedad en la nube son extremadamente difíciles de determinar, y los modelos suelen omitir la incorporación de humedad en el entorno estratosférico, habitualmente más seco. Nuestras simulaciones proporcionan una cuantificación de primer orden de cómo la humedad de la erupción volcánica y la del estado atmosférico subyacente pueden interactuar dinámicamente.

Estos resultados motivan varias líneas de investigación. Incorporar modelos más realistas de la fuente eruptiva y de los perfiles atmosféricos puede ayudar a acortar la brecha entre simulaciones idealizadas y estudios de caso específicos. Ampliar el modelo de partículas para incluir interacciones y colisiones explícitas, mecanismos de carga y microfísica del hielo permitiría afinar el vínculo entre turbulencia y electrificación. Por último, el acoplamiento de estas simulaciones con datos

satelitales y de detección de rayos podría habilitar la inferencia en tiempo real de la estructura interna de la nube y la mejora del pronóstico de transporte de cenizas y en el control de riesgos asociado.

Capítulo 6

Conclusiones

Esta tesis estudió la dinámica de material particulado en flujos turbulentos, con el enfoque puesto en entender cómo las desviaciones que se dan en la naturaleza de la teoría fundamental de turbulencia isotropa y homogénea (HIT) afectan la distribución espacial y temporal de partículas inerciales. Para esto, se llevaron a cabo simulaciones numéricas de HIT y de flujos progresivamente más realistas, introduciendo y aislando rupturas de simetría espaciales y temporales. Se analizaron simulaciones del flujo de Taylor-Green (TG) y datos del flujo análogo experimental, el flujo de Von-Karman (VK), ambos con anisotropía e inhomogeneidad espacial. Se estudiaron también flujos no estacionarios, como el flujo CRC, generado mediante un forzado no dependiente del tiempo pero cuyo nivel de turbulencia oscila de manera espontánea, y el flujo mHIT, en el que la turbulencia se modula temporalmente mediante el modulado de la amplitud del forzado. Finalmente, se presentó un modelo mínimo de turbulencia establemente estratificada con humedad, cambios de fase y partículas inerciales, para abordar el problema de la electrificación de nubes volcánicas. En todos estos escenarios se estudió en particular cómo y dónde se acumulan las partículas inerciales, inyectando millones de partículas que evolucionan con un modelo efectivo mínimo y empleando herramientas adaptadas a la geometría del dominio. El objetivo general fue el de acercarnos, de manera progresiva, al estudio de la dinámica de partículas en turbulencia “real”, en comparación con las condiciones más idealizadas en las que suele estudiarse este problema.

En el Capítulo 3 la comparación estadística de formación de cúmulos de partículas en HIT, TG y VK se realizó empleando teselados de Voronoï tridimensionales y estudiando su distribución de probabilidad. Esto permitió estudiar la topología de los cúmulos de partículas, así como de los ceros de los campos de velocidad, vorticidad y aceleración Lagrangiana. En particular, en TG y VK se observó una menor probabilidad de encontrar ceros muy densamente empaquetados de los campos vectoriales que en HIT. También se encontró una desviación de la ley de potencias esperada para el número de ceros de la velocidad con $\mathcal{V}$ (el volumen normalizado de la celda de Voronoï) en TG, que se atribuye al efecto del flujo medio sobre la autocorrelación de los puntos de estancamiento de la velocidad (STPS). Por otro lado, las propiedades de *clustering* de partículas inerciales en TG, cuya dinámica está dictada por el modelo mínimo utilizado, y de las partículas neutralmente flotantes de tamaño comparable a la escala de Taylor en VK, son compatibles con las de las partículas inerciales en HIT, consistente también con las similitudes de la estadística de ceros de aceleración y vorticidad (ZAPS y WZERO) entre TG y HIT para volúmenes $\mathcal{V}$ intermedios. En el experimento VK, las partículas de tamaño comparable a la escala de Taylor forman cúmulos con intensidades similares a las encontradas para las partículas puntuales en las simulaciones. Esto empieza a completar una brecha en el área, dado que se conocían resultados sin acumulación para partículas más pequeñas y con acumulación por mecanismos diferentes para partículas mucho más grandes (Qureshi y col. 2007; Fiabane y col. 2012, 2013; Obligado y col. 2019; Machicoane y col. 2014, 2016). En conjunto, estos resultados muestran que varias propiedades de HIT se extienden a flujos multiescala con circulación media, y que la anisotropía espacial introduce sesgos pero no invalida la caracterización de la concentración preferencial mediante diagramas de Voronoï. Más aun, se presentaron herramientas para asimilar estos sesgos a gran escala en flujos anisótropos y

poder descubrir el mecanismo subyacente de acumulacion. Finalmente, es importante notar que los resultados de este capítulo nos permitieron validar contra experimentos el modelo sencillo de partículas usando un tiempo de relajación efectivo para la partícula. Este modelo fue usado en todo el resto de la tesis.

En el Capítulo 4 se estudió el efecto de la no estacionariedad. En el flujo CRC los parámetros globales presentan excursiones intensas en ventanas temporales amplias, de más de 10 tiempos de giro de los remolinos más grandes. Simultáneamente, los espectros instantáneos de energía conservan un rango inercial bien definido en todo momento. Esto sugiere que las desviaciones dominantes residen en el desbalance escala a escala más que en la forma del espectro. La estadística presenta colas pesadas y un desplazamiento respecto a HIT, pero además una amplia variabilidad temporal, con episodios de acumulación extrema de partículas de más de 7 veces la encontrada en los flujos turbulentos estacionarios estudiados hasta el momento. Al aumentar el número de Stokes, que mide la inercia de las partículas, a Reynolds fijo, el *clustering* disminuye tanto en HIT como en CRC, lo que es consistente con una menor respuesta de las partículas a los gradientes de velocidad del fluido en escalas menores a la propia. Más aun, la dinámica temporal revela memoria: la dispersión de los volúmenes $\mathcal{V}$ se correlaciona con R_λ y se anticorrelaciona con las medidas de disipación (C_ε y ε), con un desfase del orden del tiempo de giro de los remolinos más grandes, y la relación con R_λ exhibe ciclos de histeresis que, aun superpuestos a las grandes fluctuaciones, exploran zonas particulares del espacio de parámetros. Finalmente, se presentó un argumento dimensional que racionaliza estas interpretaciones y lleva a un resultado central, el número de Stokes efectivo de la partícula en estos flujos satisface $St \sim (a/L)^2 Re_0^{7/4} / R_\lambda^{1/2}$, que pone de manifiesto cómo la sensibilidad de las partículas crece con la intensidad global de la turbulencia y decrece con el incremento local de R_λ . Es decir, para R_λ mayores, las partículas se vuelven más sensibles a los remolinos de gran escala y la acumulación se intensifica; para R_λ más chico, ocurre lo contrario, las partículas son más sensibles a las fluctuaciones de escalas pequeñas y el nivel de *clustering* se asemeja más al de HIT. Con el objetivo de separar el efecto de la anisotropía e inhomogeneidad a gran escala del de la no estacionariedad, se analizó también el flujo mHIT, que reproduce de manera forzada las fluctuaciones en la disipación de CRC. En mHIT aparecen correlaciones y desfases entre la dispersión de volúmenes $\mathcal{V}$ y magnitudes turbulentas análogos a los del flujo CRC. Los valores medios de acumulación de partículas se acercan a los de HIT, pero persisten excursiones similares a las encontradas en CRC, compatibles con un nivel de *clustering* extremo. Dado que los flujos naturales suelen ser altamente no estacionarios, como indican por ejemplo estudios recientes que han encontrado que la turbulencia en la atmósfera aparece en forma de ráfagas (Rodríguez Imazio y col. 2023), este efecto que hasta ahora ha sido despreciado puede sesgar las estimaciones de segregación de partículas y de parámetros clave en sistemas reales. Por ejemplo, las tasas de colisiones entre partículas son proporcionales al cuadrado de la densidad de partículas, de modo que perturbaciones en el volumen por partícula impactan directamente en el número de colisiones y las tasas de contacto. De esta forma vimos que aunque la anisotropía y la inhomogeneidad del flujo afectan menos a las partículas, la no estacionariedad del flujo tiene un efecto drástico.

En el Capítulo 5 usamos todas estas herramientas y resultados para abordar el efecto de la humedad en la dinámica de la pluma y en la electrificación de una nube volcánica. Se presentó un modelo de alta resolución que permite tratar de manera desacoplada el contenido de humedad en la atmósfera y el proveniente de la fuente eruptiva. Se mostró que el estado de saturación de ambos y su acoplamiento reorganiza de forma notable la distribución de la turbulencia en la nube, desplazando el pico de intensidad turbulenta (medido por la vorticidad) y de acumulación (medido por la densidad de partículas) hacia el interior en condiciones más húmedas, y hacia radios más grandes en condiciones más secas (o menos saturadas). Esto es consistente con las observaciones de la primera y segunda fase de la erupción del volcán Hunga Tonga - Hunga Haápai, considerando que por la cantidad de agua que puso en la atmósfera la primera fase, la segunda ocurrió en un ambiente mucho más saturado. Las simulaciones logran capturar oscilaciones de tipo ondas de gravedad, con períodos característicos de unos pocos minutos, superpuestas al ascenso de las partículas junto con la columna central, que se hacen más notorias cuando el entorno es más húmedo. Esto sugiere un acoplamiento emergente entre la flotabilidad en un entorno saturado y la turbulencia estratificada como una forma de intensificar el mezclado y la separación de cargas

(A. R. Van Eaton y col. 2023). Aun así, las colisiones entre especies distintas de partículas, condición necesaria para la electrificación, permanecen gobernadas principalmente por la intensidad de la turbulencia local más que por la actividad ondulatoria por sí sola, dado que los máximos de densidad coinciden espacialmente con los máximos de vorticidad. Al contrastar los diagnósticos en datos sintéticos con observaciones de rayos en erupciones, se fortalece la hipótesis de que los rayos sirven como marcador de la dinámica interna de la nube volcánica, de la intensidad turbulenta y del nivel de saturación (Wilson y col. 2013). Dado que la humedad interna de la nube es difícil de medir y típicamente se omite en modelos estratosféricos, las simulaciones brindan una cuantificación de primer orden de la interacción entre la cantidad de humedad en la fuente eruptiva y el estado atmosférico subyacente.

En su conjunto, los resultados de esta tesis nos dejan un mensaje consistente: las desviaciones respecto a HIT, como ser la anisotropía, la inhomogeneidad o la no estacionariedad del flujo, alteran de forma sustancial la manera en que se distribuyen las partículas en estos flujos y, por lo tanto, cambian estimaciones de parámetros cruciales como las tasas de colisión, las leyes de disipación y la respuesta inercial de partículas. En flujos con circulación a gran escala o con energía modulada en el tiempo, el *clustering* puede intensificarse muy por encima de lo esperado para flujos turbulentos isotrópicos, homogéneos y estacionarios, afectando las inferencias sobre transporte, mezclado e interacción entre partículas. En términos generales, las partículas se comportan como un filtro pasa-bajos relativo a su propia escala, que puede ser pensada tanto en términos de su tamaño como de su masa. Las partículas con mucha inercia filtran las fluctuaciones de escalas pequeñas del flujo y quedan gobernadas por la dinámica impuesta por las escalas mayores. Las partículas muy pequeñas o con poca inercia se someten a los gradientes de escalas chicas, viviendo en un entorno más similar a HIT. Pero todos los resultados apuntan a que la segregación de partículas inerciales es un fenómeno dependiente de la escala. Las partículas interactúan con el flujo y se mezclarán eficientemente o no dependiendo de su tamaño relativo a la amplitud del rango inercial de la turbulencia en ese momento. El proceso no es instantáneo, preserva una memoria temporal en la escala del tiempo de giro de los remolinos más grandes, y está altamente afectado por las fluctuaciones a gran escala tanto espaciales como temporales. Esta es la turbulencia “real” de la que hablamos en varios capítulos, en oposición a la turbulencia idealizada. Y que se acerca, progresivamente, a la turbulencia encontrada en la naturaleza. Esta tesis ofrece herramientas robustas para interpretar observaciones *in situ* de sistemas turbulentos naturales y para informar modelos más detallados, y abre la puerta a una gran variedad de estudios, desde la posibilidad de la reconstrucción de parámetros turbulentos instantáneos a partir de patrones de segregación de partículas, hasta la evaluación de riesgos asociados a tormentas eléctricas volcánicas usando modelos de turbulencia multifase.

Bibliografía

- Aartrijk, M. van y Clercx, H. (2010). "Vertical dispersion of light inertial particles in stably stratified turbulence: The influence of the Basset force". En: *Physics of Fluids* 22.1.
- Aizawa, K., Cimorelli, C., Alatorre-Ibarguengoitia, M. A., Yokoo, A., Dingwell, D. B. e Iguchi, M. (2016). "Physical properties of volcanic lightning: constraints from magnetotelluric and video observations at Sakurajima volcano, Japan". En: *Earth Planet Sci. Lett.* 444, págs. 45-55.
- Aliseda, A., Cartellier, A., Hainaux, F. y Lasheras, J. C. (2002). "Effect of preferential concentration on the settling velocity of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence". En: *Journal of Fluid Mechanics* 468, págs. 77-105.
- Angriman, S., Cobelli, P. J., Bourgoin, M., Huisman, S. G., Volk, R. y Mininni, P. D. (2021). "Broken mirror symmetry of tracer's trajectories in turbulence". En: *Physical Review Letters* 127.25, pág. 254502. doi: 10.1103/PhysRevLett.127.254502.
- Angriman, S., Ferran, A., Zapata, F., Cobelli, P. J., Obligado, M. y Mininni, P. D. (2022). "Clustering in laboratory and numerical turbulent swirling flows". En: *Journal of Fluid Mechanics* 948. doi: 10.1017/jfm.2022.713.
- Angriman, S., Mininni, P. D. y Cobelli, P. J. (2020). "Velocity and acceleration statistics in particle-laden turbulent swirling flows". En: *Physical Review Fluids* 5, pág. 064605. doi: 10.1103/PhysRevFluids.5.064605.
- Aravena, A., Vitturi, M. d., Cioni, R. y Neri, A. (2018). "Physical constraints for effective magma-water interaction along volcanic conduits during silicic explosive eruptions". En: *Geology* 46.10, págs. 867-870.
- Asher, E., Todt, M., Rosenlof, K., Thornberry, T., Gao, R.-S., Taha, G., Walter, P., Alvarez, S., Flynn, J., Davis, S. M., Evan, S., Brioude, J., Metzger, J.-M., Hurst, D. F., Hall, E. y Xiong, K. (2023). "Unexpectedly rapid aerosol formation in the Hunga Tonga plume". En: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 120.46, e2219547120.
- Astafyeva, E., Maletckii, B., Mikesell, T. D., Munaibari, E., Ravanelli, M., Coisson, P., Manta, F. y Rolland, L. (2022). "The 15 January 2022 Hunga Tonga Eruption History as Inferred From Ionospheric Observations". En: *Geophysical Research Letters* 49.10. doi: 10.1029/2022GL098827.
- Aubry, T., Cerminara, M. y Jellinek, A. (2019). "Impacts of climate change on volcanic stratospheric injections: comparison of 1-D and 3-D plume model projections". En: *Geophysical Research Letters* 46.17-18, págs. 10609-10618.
- Balamurugan, G., Gopalakrishnan, S. S. y Mandal, A. C. (2025). "An experimental observation of intermittent extreme events in boundary layer transition". En: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 476, pág. 134598. doi: 10.1016/j.physd.2025.134598.
- Basu, S. y Holtslag, A. A. M. (2021). "Turbulent Prandtl number and characteristic length scales in stably stratified flows: steady-state analytical solutions". En: *Environmental Fluid Mechanics* 21.6, págs. 1273-1302.
- Batchelor, G. K. (2000). *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge: Cambridge University Press. doi: 10.1017/CB09780511800955.
- Bec, J., Biferale, L., Cencini, M., Lanotte, A., Musacchio, S. y Toschi, F. (2007). "Heavy particle concentration in turbulence at dissipative and inertial scales". En: *Physical Review Letters* 98.8, pág. 084502. doi: 10.1103/PhysRevLett.98.084502.
- Bec, J., Gustavsson, K. y Mehlig, B. (2024). "Statistical Models for the Dynamics of Heavy Particles in Turbulence". En: *Annual Review of Fluid Mechanics* 56, págs. 189-213. doi: <https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-032822-014140>.

- Behnke, S. A. y Bruning, E. C. (2015). "Changes to the turbulent kinematics of a volcanic plume inferred from lightning data". En: *Geophysical Research Letters* 42.10, págs. 4232-4239.
- Bellani, G. y Variano, E. A. (2012). "Slip velocity of large neutrally buoyant particles in turbulent flows". En: *New Journal of Physics* 14.12, pág. 125009. doi: 10.1088/1367-2630/14/12/125009.
- Berti, S., Boffetta, G. y Musacchio, S. (2023). "Mean flow and fluctuations in the three-dimensional turbulent cellular flow". En: *Physical Review Fluids* 8.5, pág. 054601. doi: 10.1103/PhysRevFluids.8.054601.
- Biferale, L. y Procaccia, I. (2005). "Anisotropy in turbulent flows and in turbulent transport". En: *Physics Reports* 414.23, págs. 43-164. doi: 10.1016/j.physrep.2005.04.001.
- Björnsson, S., Blanchard, D. C. y Spencer, A. T. (1967). "Charge generation due to contact of saline waters with molten lava". En: *J. Geophys. Res.* 72, págs. 1311-1323.
- Blanchard, D. C. (1964). "Charge separation from saline drops on hot surfaces". En: *Nature* 201, págs. 1164-1166.
- Bór, J., T. B., Satori, G., Williams, E., Behnke, S. A., Rycroft, M. J., Buzás, A., Silva, H. G., Kubicki, M., Said, R., Vagasky, C., Steinbach, P., Szabóné André, K. y Atkinson, M. (2023). "Responses of the AC/DC global electric circuit to volcanic electrical activity in the Hunga Tonga-Hunga Ha'apai eruption on 15 January 2022". En: *J. Geophys Res - Atmospheres* 128, e2022JD038238. doi: 10.1029/2022JD038238.
- Bourouiba, L. (2020). "Turbulent Gas Clouds and Respiratory Pathogen Emissions: Potential Implications for Reducing Transmission of COVID-19". En: *JAMA* 323.18, págs. 1837-1838. doi: 10.1001/jama.2020.4756.
- Brandt, L. y Coletti, F. (2022). "Particle-Laden Turbulence: Progress and Perspectives". En: *Annual Review of Fluid Mechanics* 54, págs. 159-189. doi: <https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-030121-021103>.
- Brennen, C. (2005). "Fundamentals of Multiphase Flow". En: *Fundamentals of Multiphase Flow*. doi: 10.1017/CB09780511807169.
- Buaria, D., Pumir, A. y Bodenschatz, E. (2020). "Self-attenuation of extreme events in Navier-Stokes turbulence". En: *Nature Communications* 11, pág. 5852. doi: 10.1038/s41467-020-19530-1.
- Buaria, D., Pumir, A., Bodenschatz, E. y Yeung, P. K. (2019). "Extreme velocity gradients in turbulent flows". En: *New Journal of Physics* 21.4, pág. 043004. doi: 10.1088/1367-2630/ab0756.
- Büttner, R., Röder, H. y Zimanowski, B. (1997). "Electrical effects generated by experimental volcanic explosions". En: *Applied physics letters* 70.14, págs. 1903-1905.
- Calzavarini, E., Kerscher, M., Lohse, D. y Toschi, F. (2008). "Dimensionality and morphology of particle and bubble clusters in turbulent flow". En: *Journal of Fluid Mechanics* 607, págs. 13-24. doi: 10.1017/S0022112008001936.
- Calzavarini, E., Volk, R., Bourgoïn, M., L  v  que, E., Pinton, J.-F. y Toschi, F. (2009). "Acceleration statistics of finite-sized particles in turbulent flow: The role of Fax  n forces". En: *Journal of Fluid Mechanics* 630, págs. 179-189. doi: 10.1017/S0022112009006880.
- Cartwright, J. H. E., Feudel, U., K  rolyi, G., Moura, A. P. S. de, Piro, O. y T  l, T. (2010). "Dynamics of finite-size particles in chaotic fluid flows". En: *Nonlinear Dynamics and Chaos: Advances and Perspectives*. Ed. por M. Thiel, J. Kurths, M. C. Romano, G. K  rolyi y A. de Moura. Understanding Complex Systems. Berlin, Heidelberg: Springer, págs. 51-87. doi: 10.1007/978-3-642-04629-2_4.
- Cerminara, M., Esposti Ongaro, T. y Neri, A. (2016a). "Large eddy simulation of gas-particle kinematic decoupling and turbulent entrainment in volcanic plumes". En: *J. Volcanol. Geoth. Res.* 326, págs. 143-171.
- Cerminara, M., Esposti Ongaro, T. y Berselli, L. C. (2016b). "ASHEE-1.0: a compressible, equilibrium-Eulerian model for volcanic ash plumes". En: *Geoscientific Model Development* 9.2, págs. 697-730.
- Cimarelli, C., Alatorre-Ibarg  engoitia, M. A., Kueppers, U., Scheu, B. y Dingwell, D. B. (2014). "Experimental generation of volcanic lightning". En: *Geology* 42.1, págs. 79-82. doi: 10.1130/G34802.1.
- Cimarelli, C., Alatorre-Ibarg  engoitia, M. A., Aizawa, K., Yokoo, A., D  az-Marina, A., Iguchi, M. y Dingwell, D. B. (2016). "Multiparametric observation of volcanic lightning: Sakurajima volcano, Japan". En: *Geophys. Res. Lett.* 43, págs. 4221-4228.

- Cimarelli, C., Behnke, S., Genareau, K., Harper, J. M. y Van Eaton, A. R. (2022). "Volcanic electrification: recent advances and future perspectives". En: *Bull. Volcanol.* 84, pág. 78.
- Cimarelli, C. y Genareau, K. (2022). "A review of volcanic electrification of the atmosphere and volcanic lightning". En: *J. Volcanol. Geoth. Res.* 422, pág. 107449.
- Cisse, M., Homann, H. y Bec, J. (2013). "Slipping motion of large neutrally buoyant particles in turbulence". En: *Journal of Fluid Mechanics* 735, R1. doi: 10.1017/jfm.2013.490.
- Clyne, J., Mininni, P., Norton, A. y Rast, M. (2007). "Interactive desktop analysis of high resolution simulations: application to turbulent plume dynamics and current sheet formation". En: *New Journal of Physics* 9, págs. 301-301.
- Coleman, S. y Vassilicos (2009). "A unified sweep-stick mechanism to explain particle clustering in two- and three-dimensional homogeneous, isotropic turbulence". En: *Physics of Fluids* 21. doi: 10.1063/1.3257638.
- Colombier, M., Ukstins, I., Tegtmeier, S., Scheu, B., Cronin, S., Thivet, S., Paredes-Mariño, J., Cimarelli, C., Hess, K.-U., Kula, T., Latuila, F. H. y Dingwell, D. B. (2023). "Atmosphere injection of sea salts during large explosive submarine volcanic eruptions". En: *Scientific Reports* 13.1, pág. 14435.
- Costa, A. y col. (2016). "Results of the eruptive column model inter-comparison study". En: *J Volcanol Geotherm Res* 326, págs. 2-25. doi: 10.1016/j.jvolgeores.2016.01.017.
- Davidson, P. (2015). *Turbulence: an introduction for scientists and engineers*. Oxford university press.
- Debue, P., Kuzzay, D., Saw, E.-W., Daviaud, F., Dubrulle, B., Canet, L., Rossetto, V. y Wschebor, N. (2018). "Experimental test of the crossover between the inertial and the dissipative range in a turbulent swirling flow". En: *Physical Review Fluids* 3, pág. 024602. doi: 10.1103/PhysRevFluids.3.024602.
- Degruyter, W. y Bonadonna, C. (2012). "Improving on mass flow rate estimates of volcanic eruptions". En: *Geophysical Research Letters* 39. doi: 10.1029/2012GL052566.
- Del Grosso, N. F., Cappelletti, L. M., Sujovolsky, N. E., Mininni, P. D. y Cobelli, P. J. (2019). "Statistics of single and multiple floaters in experiments of surface wave turbulence". En: *Physical Review Fluids* 4.7, pág. 074805. doi: 10.1103/PhysRevFluids.4.074805.
- Elghobashi, S. (1994). "On predicting particle-laden turbulent flows". En: *Applied Scientific Research* 52.4, págs. 309-329. doi: 10.1007/BF00936835.
- Espanol, B. L., Nosedá, M., Cobelli, P. J. y Mininni, P. D. (2025). "Effect of local flow geometry on particle pair dispersion angle". En: *Phys. Rev. Fluids* 10 (4), pág. 044501. doi: 10.1103/PhysRevFluids.10.044501.
- Esposti Ongaro, T. y Cerminara, M. (2016). "Non-equilibrium processes in ash-laden volcanic plumes: new insights from 3D multiphase flow simulations". En: *J. Volcanol. Geoth. Res.* 326, págs. 127-142.
- Falkinoff, F., Obligado, M., Bourgoïn, M. y Mininni, P. (2020). "Preferential Concentration of Free-Falling Heavy Particles in Turbulence". En: *Phys. Rev. Lett.* 125 (6).
- Ferran, A., Angriman, S., Mininni, P. D. y Obligado, M. (2022). "Characterising single and two-phase homogeneous isotropic turbulence with stagnation points". En: *Dynamics* 2.2, págs. 63-72. doi: 10.3390/dynamics2020004.
- Fiabane, L., Volk, R., Pinton, J.-F., Monchaux, R., Cartellier, A. y Bourgoïn, M. (2013). "Do finite-size neutrally buoyant particles cluster?" En: *Physica Scripta* 2013.T155, pág. 014056.
- Fiabane, L., Zimmermann, R., Volk, R., Pinton, J.-F. y Bourgoïn, M. (2012). "Clustering of finite-size particles in turbulence". En: *Physical Review E* 86, pág. 035301. doi: 10.1103/PhysRevE.86.035301.
- Gatignol, R. (1983). "The Faxén Formulae for a Rigid Particle in an Unsteady Non-Uniform Stokes Flow". En: *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée* 2.2, págs. 143-160.
- Gaudin, D. y Cimarelli, C. (2019). "The electrification of volcanic jets and controlling parameters: A laboratory study". En: *Earth. Planet. Sci. Lett.* 513, págs. 69-80.
- Glaze, L. S., Baloga, S. M. y Wilson, L. (1997). "Transport of atmospheric water vapor by volcanic eruption columns". En: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 102.D5, págs. 6099-6108.
- Good, G. H., Ireland, P. J., Bewley, G. P., Bodenschatz, E., Collins, L. R. y Warhaft, Z. (2014). "Settling regimes of inertial particles in isotropic turbulence". En: *Journal of Fluid Mechanics* 759.

- Gorbunova, A., Balarac, G., Bourgoïn, M., Canet, L., Mordant, N. y Rossetto, V. (2020). "Analysis of the dissipative range of the energy spectrum in grid turbulence and in direct numerical simulations". En: *Physical Review Fluids* 5, pág. 044604. doi: 10.1103/PhysRevFluids.5.044604.
- Goto, S. y Vassilicos (2008). "Sweep-stick mechanism of heavy particle clustering in fluid turbulence". En: *Physical review letters* 100.5, pág. 054503.
- Goto, S. y Vassilicos, J. C. (2006). "Self-similar clustering of inertial particles and zero-acceleration points in fully developed two-dimensional turbulence". En: *Physics of Fluids* 18.11, pág. 115103.
- Goto, S. y Vassilicos, J. C. (2015). "Energy dissipation and flux laws for unsteady turbulence". En: *Physics Letters A* 379.16–17, págs. 1144–1148. doi: 10.1016/j.physleta.2015.02.025.
- Green, A. E. y Taylor, G. I. (1937). "Mechanism of the production of small eddies from larger ones". En: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 158.895, págs. 499–521. doi: 10.1098/rspa.1937.0036.
- Hajimirza, S., Jones, T. J., Moreland, W. M., Gonnermann, H. M. y Thordarson, T. (2022). "Quantifying the water-to-melt mass ratio and its impact on eruption plumes during explosive hydromagmatic eruptions". En: *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 23.5, e2021GC010160.
- Haynes, A. L. y Parnell, C. E. (2007). "A trilinear method for finding null points in a three-dimensional vector space". En: *Physics of Plasmas* 14, pág. 082107.
- Hernandez-Duenas, G., Majda, A. J., Smith, L. M. y Stechmann, S. N. (2013). "Minimal models for precipitating turbulent convection". En: *J Fluid Mech* 717, págs. 576–611.
- Homann, H. y Bec, J. (2010). "Finite-size effects in the dynamics of neutrally buoyant particles in turbulent flow". En: *Journal of Fluid Mechanics* 651, págs. 81–91. doi: 10.1017/S0022112010000923.
- Houghton, B., White, J. D. y Van Eaton, A. R. (2015). "Phreatomagmatic and related eruption styles". En: *The encyclopedia of volcanoes*. Elsevier, págs. 537–552.
- Huck, P. D., Machicoane, N. y Volk, R. (2017). "Production and dissipation of turbulent fluctuations close to a stagnation point". En: *Physical Review Fluids* 2.8, pág. 084601. doi: 10.1103/PhysRevFluids.2.084601.
- Ichihara, M., Mininni, P. D., Ravichandran, S., Cimarelli, C. y Vagasky, C. (2023). "Multiphase turbulent flow explains lightning rings in volcanic plumes". En: *Communications Earth & Environment* 4.1, pág. 417.
- Ishihara, T., Gotoh, T. y Kaneda, Y. (2009). "Study of high-Reynolds number isotropic turbulence by direct numerical simulation". En: *Annual review of fluid mechanics* 41.1, págs. 165–180.
- Jarvis, P., Caldwell, T., Noble, C., Ogawa, Y. y Vagasky, C. (2024). "Volcanic lightning reveals umbrella cloud dynamics of the 15 January 2022 Hunga volcano eruption, Tonga". En: *Bulletin of Volcanology* 86.6, pág. 54.
- Kaimal, J. C., Wyngaard, J. C., Izumi, Y. y Coté, O. R. (1972). "Spectral characteristics of surface-layer turbulence". En: *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 98.417, págs. 563–589. doi: 10.1002/qj.49709841707.
- Kaneda, Y., Ishihara, T., Yokokawa, M., Itakura, K. y Uno, A. (2003). "Energy dissipation rate and energy spectrum in high-resolution direct numerical simulations of turbulence". En: *Physics of Fluids* 15, págs. L21–L24. doi: 10.1063/1.1539855.
- Karpinska, K., Bodenschatz, J. F. E., Malinowski, S. P., Nowak, J. L., Risius, S., Schmeissner, T., Shaw, R. A., Siebert, H., Xi, H., Xu, H. y Bodenschatz, E. (2019). "Turbulence-induced cloud voids: observation and interpretation". En: *Atmospheric Chemistry and Physics* 19.7, págs. 4991–5003. doi: 10.5194/acp-19-4991-2019.
- Kelberla, F. y Mann, J. (2019). "Better turbulence spectra from velocity–azimuth display scanning wind lidar". En: *Atmospheric Measurement Techniques* 12.3, págs. 1871–1888. doi: 10.5194/amt-12-1871-2019.
- Koyaguchi, T. y Woods, A. W. (1996). "On the formation of eruption columns following explosive mixing of magma and surface-water". En: *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 101.B3, págs. 5561–5574.
- Kreuzahler, S., Schulz, D., Homann, H., Ponty, Y. y Grauer, R. (2014). "Numerical study of impeller-driven von Kármán flows via a volume penalization method". En: *New Journal of Physics* 16.10, pág. 103001. doi: 10.1088/1367-2630/16/10/103001.

- Lu, J., Nordsiek, H., Saw, E. W. y Shaw, R. A. (2010). "Clustering of Charged Inertial Particles in Turbulence". En: *Phys. Rev. Lett.* 104 (18), pág. 184505. doi: 10.1103/PhysRevLett.104.184505.
- Lynch, P. (2006). *The Emergence of Numerical Weather Prediction: Richardson's Dream*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Macedonio, G., Costa, A. y Folch, A. (2016). "Uncertainties in volcanic plume modeling: A parametric study using FPLUME". En: *Journal of Volcanology and Geothermal Research* 326. Numerical models of volcanic eruption plumes: inter-comparison and sensitivity, págs. 92-102. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jvolgeores.2016.03.016>.
- Machicoane, N., López-Caballero, M., Fiabane, L., Pinton, J.-F., Bourgoïn, M., Burguete, J. y Volk, R. (2016). "Stochastic dynamics of particles trapped in turbulent flows". En: *Physical Review E* 93.2, pág. 023118.
- Machicoane, N., Zimmermann, R., Fiabane, L., Bourgoïn, M., Pinton, J.-F. y Volk, R. (2014). "Large sphere motion in a nonhomogeneous turbulent flow". En: *New Journal of Physics* 16.1, pág. 013053.
- Maeno, F., Kaneko, T., Ichihara, M., Suzuki, Y. J., Yasuda, A., Nishida, K. y Ohminato, T. (2022). "Seawater-magma interactions sustained the high column during the 2021 phreatomagmatic eruption of Fukutoku-Oka-no-Ba". En: *Communications Earth & Environment* 3.1, pág. 260.
- Marino, R., Feraco, F., Primavera, L., Pumir, A., Pouquet, A., Rosenberg, D. y Mininni, P. D. (2022). "Turbulence generation by large-scale extreme vertical drafts and the modulation of local energy dissipation in stably stratified geophysical flows". En: *Physical Review Fluids* 7.3, pág. 033801.
- Marsico, D. H., Smith, L. M. y Stechmann, S. N. (2019). "Energy Decompositions for Moist Boussinesq and Anelastic Equations with Phase Changes". En: *Journal of the Atmospheric Sciences* 76.11, págs. 3569-3587.
- Mastin, L. G. (2007). "A user-friendly one-dimensional model for wet volcanic plumes". En: *Geochemistry, Geophysics, Geosystems* 8.3.
- Mastin, L. G., Van Eaton, A. R. y Cronin, S. J. (2024). "Did steam boost the height and growth rate of the giant Hunga eruption plume?" En: *Bulletin of Volcanology* 86.7, pág. 64.
- Matoza, R. S., Fee, D., Assink, J. D., Iezzi, A. M., Green, D. N., Kim, K., Toney, L., Lecocq, T., Krishnamoorthy, S., Lalande, J.-M., Nishida, K., Gee, K. L. y col. (2022). "Atmospheric waves and global seismoacoustic observations of the January 2022 Hunga eruption, Tonga". En: *Science* 377.6601, págs. 95-100. doi: 10.1126/science.abo7063.
- Maxey, M. R. y Riley, J. J. (1983). "Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow". En: *The Physics of Fluids* 26.4, págs. 883-889. doi: 10.1063/1.864230.
- Méndez Harper, J., Cimarelli, C., Cigala, V., Kueppers, U. y Dufek, J. (2021). "Charge injection into the atmosphere by explosive volcanic eruptions through triboelectrification and fragmentation charging". En: *Earth and Planetary Science Letters* 574, 117162, pág. 117162. doi: 10.1016/j.epsl.2021.117162. arXiv: 2105.14400 [physics.geo-ph].
- Mininni, Rosenberg, D. L., Reddy, R. y Pouquet, A. (2011). "A hybrid MPI-OpenMP scheme for scalable parallel pseudospectral computations for fluid turbulence". En: *Parallel Computing* 37.6-7, págs. 316-326. doi: 10.1016/j.parco.2011.05.004.
- Monchaux, R., Bourgoïn, M. y Cartellier, A. (2010). "Preferential concentration of heavy particles: A Voronoi analysis". En: *Physics of Fluids* 22.10, pág. 103304. doi: 10.1063/1.3489987.
- (2012). "Analyzing preferential concentration and clustering of inertial particles in turbulence". En: *Int. J. Multiph. Flow* 40.
- Mora, D. O., Bourgoïn, M., Mininni, P. D. y Obligado, M. (2021). "Clustering of vector nulls in homogeneous isotropic turbulence". En: *Physical Review Fluids* 6.2, pág. 024609.
- Mora, D. O., Muñoz Pladellourens, E., Riera Turró, P., Lagauzere, M. y Obligado, M. (2019). "Energy cascades in active-grid-generated turbulent flows". En: *Physical Review Fluids* 4.10, pág. 104601. doi: 10.1103/PhysRevFluids.4.104601.
- Mordant, N., Delour, J., Lévêque, E., Arnéodo, A. y Pinton, J.-F. (2002). "Long time correlations in Lagrangian dynamics: A key to intermittency in turbulence". En: *Physical Review Letters* 89.25, pág. 254502. doi: 10.1103/PhysRevLett.89.254502.
- Mordant, N., Lévêque, E. y Pinton, J.-F. (2004). "Experimental and numerical study of the Lagrangian dynamics of high Reynolds turbulence". En: *New Journal of Physics* 6, pág. 116. doi: 10.1088/1367-2630/6/1/116.

- Mordant, N., Metz, P., Michel, O. y Pinton, J.-F. (2001). "Measurement of Lagrangian Velocity in Fully Developed Turbulence". En: *Physical Review Letters* 87.21, pág. 214501. doi: 10.1103/PhysRevLett.87.214501.
- Mordant, N. y Pinton, J. F. (2000). "Velocity measurement of a settling sphere". En: *The European Physical Journal B* 18.
- Morrison, F. A. (2013). *Data correlation for drag coefficient for sphere*. Inf. téc. Houghton, MI 49931: Department of Chemical Engineering, Michigan Technological University.
- Morton, B. R., Taylor, G. I. y Turner, J. S. (1956). "Turbulent gravitational convection from maintained and instantaneous sources". En: *Proc. R. Soc. A: Math. Phys. Eng. Sci.* 234.1196, págs. 1-23. doi: 10.1098/rspa.1956.0011.
- Nishida, K., Ichihara, M., Kubota, T. y Tonegawa, T. (2024). "Ocean surface gravity waves excited by the 2022 eruption of Hunga Tonga-Hunga Ha'apai Volcano". En: *Geophysical Research Letters* 51.19, e2024GL111983.
- Nowak, J. L., Siebert, H., Szodry, K.-E. y Malinowski, S. P. (2021). "Coupled and Decoupled Stratocumulus-Topped Boundary Layers: Turbulence Properties". En: *Atmospheric Chemistry and Physics* 21, págs. 10965-10991. doi: 10.5194/acp-21-10965-2021.
- Obligado, M., Volk, R., Mordant, N. y Bourgoin, M. (2019). "Preferential concentration of finite solid particles in a swirling von Kármán flow of water". En: págs. 207-216.
- Obligado, M., Teitelbaum, T., Cartellier, A., Mininni, P. y Bourgoin, M. (2014). "Preferential concentration of heavy particles in turbulence". En: *Journal of Turbulence* 15.5, págs. 293-310.
- Oka, S. y Goto, S. (2021). "Generalized sweep-stick mechanism of inertial-particle clustering in turbulence". En: *Physical Review Fluids* 6, pág. 044605. doi: 10.1103/PhysRevFluids.6.044605.
- Pietro, M. D., Hinsberg, M. A. T. van, Biferale, L., Clercx, H. J. H., Perlekar, P. y Toschi, F. (2014). "Clustering of vertically constrained passive particles in homogeneous, isotropic turbulence". En: *arXiv* 1411.1950. Preprint, 7 November 2014.
- Poli, P. y Shapiro, N. M. (2022). "Rapid Characterization of Large Volcanic Eruptions: Measuring the Impulse of the Hunga Tonga Ha'apai Explosion From Teleseismic Waves". En: *Geophys Res Lett* 49.8. doi: 10.1029/2022GL098123.
- Poncet, S., Schiestel, R. y Monchaux, R. (2008). "Turbulence modeling of the von Kármán flow: Viscous and inertial stirrings". En: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 29.1, págs. 62-74. doi: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2007.07.005.
- Pope, S. B. (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.
- Prata, A., Folch, A., Prata, A., Biondi, R., Brenot, H., Cimarelli, C., Corradini, S., Lapierre, J. y Costa, A. (2020). "Anak Krakatau triggers volcanic freezer in the upper troposphere". En: *Scientific Reports* 10.1, pág. 3584.
- Proud, S. R., Prata, A. T. y Schmauss, S. (2022). "The January 2022 eruption of Hunga Tonga-Hunga Ha'apai volcano reached the mesosphere". En: *Science* 378.6619, págs. 554-557. doi: 10.1126/science.abo4076.
- Qureshi, N. M., Bourgoin, M., Baudet, C., Cartellier, A. y Gagne, Y. (2007). "Turbulent transport of material particles: An experimental study of finite size effects". En: *Physical Review Letters* 99, pág. 184502. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.184502.
- Ravelet, F., Marié, L., Chiffaudel, A. y Daviaud, F. (2004). "Multistability and memory effect in a highly turbulent flow: Experimental evidence for a global bifurcation". En: *Physical Review Letters* 93.16, pág. 164501. doi: 10.1103/PhysRevLett.93.164501.
- Reartes, C. y Mininni (2021). "Settling and clustering of particles of moderate mass density in turbulence". En: *Physical Review Fluids* 6.11. Published 15 November 2021, pág. 114304. doi: 10.1103/PhysRevFluids.6.114304.
- Reartes, C. y Mininni, P. D. (2023). "Dynamical regimes and clustering of small neutrally buoyant inertial particles in stably stratified turbulence". En: *Physical Review Fluids* 8.5, pág. 054501.
- Richardson, L. F. (1922). *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Rodriguez Imazio, P., Mininni, P. D., Godoy, A., Rivaben, N. y Dörnbrack, A. (2023). "Not all clear air turbulence is Kolmogorov The fine-scale nature of atmospheric turbulence". En: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 128.2, e2022JD037491.

- Rosenberg, D., Mininni, P. D., Reddy, R. y Pouquet, A. (2020). "GPU Parallelization of a Hybrid Pseudospectral Geophysical Turbulence Framework Using CUDA". En: *Atmosphere* 11.2, pág. 178. doi: 10.3390/atmos11020178.
- Rowell, C. R., Jellinek, A. M., Hajimirza, S. y Aubry, T. J. (2022). "External surface water influence on explosive eruption dynamics, with implications for stratospheric sulfur delivery and volcano-climate feedback". En: *Frontiers in Earth Science* 10, pág. 788294.
- Sagaut, P. (2006). *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows: An Introduction*. 3rd. Berlin: Springer.
- Saito, I. y Gotoh, T. (2018). "Turbulence and cloud droplets in cumulus clouds". En: *New Journal of Physics* 20.2, pág. 023001. doi: 10.1088/1367-2630/aaa229.
- Schröder, M., Bätge, T. y col. (2024). "Estimating the turbulent kinetic energy dissipation rate from one dimensional velocity records". En: *Atmospheric Measurement Techniques* 17, págs. 627-657. doi: 10.5194/amt-17-627-2024.
- Sellitto, P., Podglajen, A., Belhadji, R., Boichu, M., Carboni, E., Cuesta, J., Duchamp, C., Kloss, C., Siddans, R., Bègue, N. y col. (2022). "The unexpected radiative impact of the Hunga Tonga eruption of 15th January 2022". En: *Communications Earth & Environment* 3.1, pág. 288.
- Sengupta, A., Carrara, F. y Stocker, R. (2017). "Phytoplankton can actively diversify their migration strategy in response to turbulent cues". En: *Nature* 543.7646, págs. 555-558. doi: 10.1038/nature21415.
- Shaw, R. A. (2003). "Particle-turbulence interactions in atmospheric clouds". En: *Annual Review of Fluid Mechanics* 35.1, págs. 183-227.
- Shen, X. y Warhaft, Z. (2002). "Longitudinal and transverse structure functions in sheared and unsheared wind-tunnel turbulence". En: *Physics of Fluids* 14.1, págs. 370-381. doi: 10.1063/1.1421059.
- Siebert, H., Franke, H., Lehmann, K., Maser, R., Saw, E. W., Schell, D., Shaw, R. A. y Wendisch, M. (2006). "Probing Finescale Dynamics and Microphysics of Clouds with Helicopter-Borne Measurements". En: *Bulletin of the American Meteorological Society* 87.12, págs. 1727-1738. doi: 10.1175/BAMS-87-12-1727.
- Siebert, H., Shaw, R. A. y Warhaft, Z. (2010). "Statistics of Small-Scale Velocity Fluctuations and Internal Intermittency in Marine Stratocumulus Clouds". En: *Journal of the Atmospheric Sciences* 67.1, págs. 262-273. doi: 10.1175/2009JAS3200.1.
- Stern, S., Cimarelli, C., Gaudin, D., Scheu, B. y Dingwell, D. (2019). "Electrification of experimental volcanic jets with varying water content and temperature". En: *Geophysical Research Letters* 46.20, págs. 11136-11145.
- Stull, R. B. (2015). *Practical meteorology: an algebra-based survey of atmospheric science*. University of British Columbia.
- Sujovolsky, N. y Mininni, P. (2019). "Vertical dispersion of Lagrangian tracers in fully developed stably stratified turbulence". En: *Phys. Rev. Fluids* 4 (1).
- Tagawa, Y., Mercado, J., Prakash, V. N., Calzavarini, E., Sun, C. y Lohse, D. (2012). "Three-dimensional Lagrangian Voronoï analysis for clustering of particles and bubbles in turbulence". En: *Journal of Fluid Mechanics* 693, págs. 201-215.
- Torre, A. de la y Burguete, J. (2007). "Slow Dynamics in a Turbulent von Kármán Swirling Flow". En: *Physical Review Letters* 99.5, pág. 054101. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.054101.
- Toschi, F. y Bodenschatz (2009). "Lagrangian Properties of Particles in Turbulence". En: *Annual Review of Fluid Mechanics* 41, págs. 375-404. doi: 10.1146/annurev.fluid.010908.165210.
- Uhlmann, M. (2020). "Voronoi tessellation analysis of sets of randomly placed finite-size spheres". En: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 555, pág. 124618. doi: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2020.124618>.
- Valente, P. C., Onishi, R. y Silva, C. B. da (2014). "Origin of the imbalance between energy cascade and dissipation in turbulence". En: *Physical Review E* 90.2, pág. 023003. doi: 10.1103/PhysRevE.90.023003.
- Van Eaton, A., Schneider, D., Smith, C., Haney, M., Lyons, J., Said, R., Fee, D., Holzworth, R. y Mastin, L. (2020). "Did ice-charging generate volcanic lightning during the 2016-2017 eruption of Bogoslof Volcano, Alaska?" En: *Bulletin of Volcanology* 82, pág. 24. doi: 10.1007/s00445-019-1350-5.

- Van Eaton, A. R., Smith, C. M., Pavolonis, M. y Said, R. (2022). "Eruption dynamics leading to a volcanic thunderstorm The January 2020 eruption of Taal volcano, Philippines". En: *Geology* 50.4, págs. 491-495.
- Van Eaton, A. R., Lapierre, J., Behnke, S. A., Vagasky, C., Schultz, C. J., Pavolonis, M., Bedka, K. y Khlopenkov, K. (2023). "Lightning rings and gravity waves: Insights into the giant eruption plume from Tonga's Hunga Volcano on 15 January 2022". En: *Geophys Res Lett* 50. doi: 10.1029/2022GL102341.
- Van Hinsberg, M., Clercx, H. y Toschi, F. (2017). "Enhanced settling of nonheavy inertial particles in homogeneous isotropic turbulence: The role of the pressure gradient and the Basset history force". En: *Phys. Rev. E* 95 (2).
- Vassilicos, J. C. (2023). "Beyond Scale-by-Scale Equilibrium". En: *Atmosphere* 14.4, págs. 736. doi: 10.3390/atmos14040736.
- Vergoz, J., Hupe, P., Listowski, C., Le Pichon, A., Garcés, M., Marchetti, E., Labazuy, P., Ceranna, L., Pilger, C., Gaebler, P. y col. (2022). "IMS observations of infrasound and acoustic-gravity waves produced by the January 2022 volcanic eruption of Hunga Tonga: A global analysis". En: *Earth and Planetary Science Letters* 591, págs. 117639.
- Volk, R., Calzavarini, E., Verhille, G., Lohse, D., Mordant, N., Pinton, J.-F. y Toschi, F. (2008). "Acceleration of heavy and light particles in turbulence: Comparison between experiments and direct numerical simulations". En: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 237.14-17, págs. 2084-2089.
- Wang, L.-P. y Maxey, M. R. (1993). "Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence". En: *Journal of Fluid Mechanics* 256, págs. 27-68.
- Wilson, R., Luce, H., Hashiguchi, H., Shiotani, M. y Dalaudier, F. (2013). "On the effect of moisture on the detection of tropospheric turbulence from in situ measurements". En: *Atmospheric Measurement Techniques* 6.3, págs. 697-702.
- Wood, R. (2012). "Stratocumulus Clouds". En: *Monthly Weather Review* 140.8, págs. 2373-2423. doi: 10.1175/MWR-D-11-00121.1.
- Woods, A. W. (1993). "Moist convection and the injection of volcanic ash into the atmosphere". En: *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* 98.B10, págs. 17627-17636.
- Wright, C. J., Hindley, N. P., Alexander, M. J., Barlow, M., Hoffmann, L., Mitchell, C. N., Prata, F., Bouillon, M., Carstens, J., Clerbaux, C. y col. (2022). "Surface-to-space atmospheric waves from Hunga Tonga-Hunga Haapai eruption". En: *Nature* 609.7928, págs. 741-746.
- Xu, H. y Bodenschatz, E. (2008). "Motion of inertial particles with size larger than Kolmogorov scale in turbulent flows". En: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 237.14-17, págs. 2095-2100.
- Yeung, P. K. y Pope, S. B. (1988). "An Algorithm for Tracking Fluid Particles in Numerical Simulations of Homogeneous Turbulence". En: *Journal of Computational Physics* 79.2, págs. 373-416. doi: 10.1016/0021-9991(88)90022-8.
- Yoshimoto, H. y Goto, S. (2007). "Self-similar clustering of inertial particles in homogeneous turbulence". En: *Journal of Fluid Mechanics* 577, págs. 275-286.
- Zapata, F., Mininni, P., Ravichandran, S., Cimarelli, C. e Ichihara, M. (2025). "Turbulence and particle dynamics in volcanic clouds in humid atmospheres". En: *Scientific Reports*. in review.
- Zapata, F., Angriman, S., Ferran, A., Cobelli, P., Obligado, M. y Mininni, P. D. (2024). "Turbulence unsteadiness drives extreme clustering". En: *Physical Review Letters* 132.10, págs. 104005.
- Zhu, Y., Bardeen, C. G., Tilmes, S., Mills, M. J., Wang, X., Harvey, V. L., Taha, G., Kinnison, D., Portmann, R. W., Yu, P., Rosenlof, K. H., Avery, M., Kloss, C., Li, C., Glanville, A. S., Millán, L., Deshler, T., Krotkov, N. y Toon, O. B. (2022). "Perturbations in stratospheric aerosol evolution due to the water-rich plume of the 2022 Hunga-Tonga eruption". En: *Communications Earth & Environment* 3.1, págs. 248.