



**Casa abierta al tiempo**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

UNIDAD IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE PROCESOS E HIDRÁULICA

LABORATORIO DE INGENIERÍA DE REACTORES CATALÍTICOS

---

**Análisis de la dinámica de fluidos en régimen  
turbulento en un lecho empacado con baja  
relación de  $d_t/d_p$**

---

Que para obtener el grado de maestra en ciencias

**PRESENTA**

I.Q. Dalia Nayeli Dorantes Landa

**DIRECTOR**

Dr. Carlos Omar Castillo Araiza

**JURADO**

**Presidente:** Dr. Héctor Felipe López Isunza

**Secretario:** Dr. Jesús Alberto Ochoa Tapia

**Vocal:** Dr. Luis Alberto Ricardez Sandoval

Iztapalapa, Ciudad de México, 10 de Junio de 2021

# Índice general

<b>ÍNDICE GENERAL</b>	<b>I</b>
<b>ÍNDICE DE FIGURAS</b>	<b>II</b>
<b>RESUMEN</b>	<b>IV</b>
<b>NOMENCLATURA</b>	<b>VI</b>
<b>1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	2
1.2. Antecedentes . . . . .	4
1.3. Problema . . . . .	12
1.4. Pregunta de investigación . . . . .	12
1.5. Hipótesis . . . . .	12
1.6. Objetivo general . . . . .	13
1.7. Objetivos particulares . . . . .	13
<b>2. METODOLOGÍA</b>	<b>14</b>
2.1. Descripción del sistema . . . . .	15
2.2. Generación del empaquetamiento . . . . .	16
2.2.1. Empaquetamiento ordenado . . . . .	16
2.2.2. Empaque aleatorio . . . . .	17
2.2.3. Tratamiento de las partículas . . . . .	18
2.3. Modelos locales . . . . .	19
2.3.1. Modelos de turbulencia . . . . .	19
2.4. Modelos pseudo continuos . . . . .	24
2.4.1. Navier Stokes Darcy Forchheimer . . . . .	27
2.4.2. Propuesta del modelo basado en PRS . . . . .	28
<b>3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN</b>	<b>31</b>
3.1. Estructura del lecho empacado . . . . .	32
3.2. Simulaciones locales a nivel de DNS . . . . .	36
3.3. Simulaciones locales a nivel de las RANS . . . . .	41
3.4. Simulaciones considerando los modelos pseudo continuos . . . . .	47
<b>4. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS</b>	<b>54</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>56</b>

# Índice de figuras

2.1.	Representación de las especificaciones del sistema a estudiar. . . . .	15
2.2.	Esquema de la generación del empaquetamiento ordenado . . . . .	16
2.3.	Esquema de generación del empaquetamiento aleatorio. . . . .	17
2.4.	Reducción de las partículas para obtener el enfoque de contacto partícula-partícula y partícula-pared tipo brecha. . . . .	18
2.5.	Referencia de las áreas y volúmenes para un lecho empacado con relación $d_t/d_p=3.07$ . . . . .	25
2.6.	Selección de caras para el cálculo de las interacciones sólido-fluido, fracción vacía y velocidad promedio a partir de las simulaciones locales. . . . .	30
3.1.	Comparación del empaquetamiento de las partículas. . . . .	33
3.2.	Fracción vacía para empaquetamiento ordenado y aleatorio, comparado frente a simulaciones DEM (Yang et al., 2016; Theuerkauf et al., 2006) y la correlación de De Klerk (De Klerk, 2003). . . . .	34
3.3.	Fracción vacía en 2D para el empaque ordenado. . . . .	35
3.4.	Comparación de la caída de presión experimental $dP_{obs}$ (López Isunza, 1983) con la obtenida mediante simulaciones locales para la configuración ordenada $dP_{org}$ , aleatoria $dP_{rand}$ y con una correlación empírica $dP_{erg}$ (Ergun, 1952). . . . .	36
3.5.	Plano del corte en lecho en $r=0.004m$ los diferentes empaquetamientos. . . . .	37
3.6.	Perfiles de la magnitud de la velocidad y líneas de corriente para el empaquetamiento para un $Re_p = 1400$ . . . . .	38
3.7.	Perfiles radiales de la magnitud de la velocidad superficial a diferentes $Re_p$ (70-5313), simulaciones con empaquetamiento ordenado. . . . .	39
3.8.	Comparación del perfil radial de la magnitud de velocidad superficial promedio para la configuración aleatoria y ordenada para $Re_p$ de 700 y 1400. . . . .	40
3.9.	Perfiles de la magnitud de la velocidad y líneas de corriente para el empaque con simulaciones RANS para $Re_p = 1400$ con la configuración ordenada. . . . .	41
3.10.	Perfiles de la magnitud de la velocidad y líneas de corriente para el empaque con simulaciones RANS para $Re_p = 1400$ con la configuración aleatoria. . . . .	42
3.11.	Perfiles radiales de la magnitud de velocidad superficial promedio de las simulaciones RANS para $Re_p$ 700 y 1400 el empaquetamiento ordenado . . . . .	43

3.12. Perfiles radiales de la magnitud de velocidad superficial promedio de las simulaciones RANS para $Re_p$ 700 y 1400 para el empaquetamiento aleatorio . . . . .	44
3.13. Perfiles radiales de la viscosidad turbulenta promedio con empaquetamiento ordenado y aleatorio de simulaciones RANS con el modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ . . . . .	45
3.14. Perfiles radiales de la viscosidad turbulenta promedio con empaquetamiento ordenado y aleatorio de simulaciones RANS con el modelo de turbulencia $\kappa - \omega$ . . . . .	46
3.15. Perfiles radiales de la velocidad de las simulaciones convencionales (NSDF) y locales (PRS) para $Re_p = 700$ con la configuración ordenado. . . . .	48
3.16. Perfiles radiales de la velocidad de las simulaciones convencionales (NSDF) y locales (PRS) para $Re_p = 700$ con la configuración aleatoria. . . . .	48
3.17. Perfiles de velocidad radial comparando los modelos pseudo continuo agregando la viscosidad turbulenta de los modelos de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ y $\kappa - \omega$ con la configuración aleatoria para $Re_p = 700$ . . . . .	49
3.18. Perfiles de velocidad radial comparando los modelos pseudo continuo agregando la viscosidad turbulenta de los modelos de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ y $\kappa - \omega$ con la configuración aleatoria para $Re_p = 1400$ . . . . .	50
3.19. Perfiles radiales de las fuerzas calculadas debido a las interacciones sólido-fluido para la configuración aleatoria a $Re_p$ de 700 y 1400. . . . .	51
3.20. Perfiles radiales de la velocidad comparando el modelo pseudo continuo propuesto con las simulaciones locales para el empaquetamiento aleatorio a $Re_p = 700$ . . . . .	52

# RESUMEN

Los lechos empacados son ampliamente utilizados en diferentes procesos industriales de transformación de compuestos primarios a productos de interés comercial. En particular, el reactor de lecho empacado con baja relación diámetro de tubo a se utiliza en la industria petroquímica para llevar a cabo aquellas reacciones catalíticas que son exotérmicas o endotérmicas. De tal forma que en este reactor, las características termodinámicas y cinéticas de la reacción son las que determinan la configuración geométrica del tubo y del catalizador, lo que a su vez origina la presencia de diferentes patrones de flujo, retromezclado, estancamiento, acanalamiento, entre otros. Diferentes estudios se han realizado en esta clase de reactores con el objetivo de analizar el comportamiento de la dinámica de fluidos, parte de estos estudios se han desarrollado mediante el uso de simulaciones a nivel local ya sea mediante Simulaciones Numéricas Directas (DNS, por sus siglas en inglés) o de las Ecuaciones Promediadas de Navier Stokes (RANS, por sus siglas en inglés). Sin embargo, debido al alto costo computacional requerido en la descripción de la dinámica de fluidos de un reactor a escala industrial se requieren alternativas de modelado que demanden bajo costo computacional. En este escenario, los modelos pseudo continuos resultan una alternativa viable ya que su desarrollo permite que puedan ser aplicados al diseño de reactores a escala industrial incluyendo su optimización y control. Sin embargo, la mayoría de estos modelos pseudo continuos están en términos de parámetros que son determinados a partir de ajuste de datos experimentales, lo cual podría generar incertidumbre en su desarrollo.

Diferentes suposiciones se han realizado en el modelado de la dinámica de fluidos en lechos empacados considerando estos como pseudo continuos, donde la propuesta de la incorporación de la corrección de Brinkman que hace uso de una viscosidad efectiva o una viscosidad turbulenta ha permitido describir observaciones promediadas de la velocidad; no obstante todavía resulta cuestionable la determinación de esta viscosidad.

En este trabajo se desarrolló un modelo pseudo continuo para la descripción de la dinámica de fluidos en un lecho empacado con una relación de diámetro de tubo a diámetro de partícula  $d_t/d_p$  de 3, la descripción del modelo propuesto incluye

el término de resistencias sólido-fluido que será obtenido a partir de las simulaciones locales DNS. La validez del modelo desarrollado se realizó al comparar sus predicciones con promedios de la velocidad obtenidos de simulaciones locales y con predicciones de velocidad obtenidas a partir del modelo convencional Navier-Stokes-Darcy-Forchheimer (NSDF), el cual ha sido ampliamente utilizado en la literatura para describir los perfiles de velocidad en lechos empacados con baja relación de  $d_t/d_p$ . Los resultados mostraron que el traslado de la información local dado por las DNS y RANS (fuerzas sólido-fluido, viscosidad turbulenta) proporciona una mejor descripción de los perfiles de velocidad que los modelos convencionales, traduciéndolo en la confiabilidad del modelo para un análisis del sistema planteado.

# NOMENCLATURA

$u$  Vector de velocidad  $ms^{-1}$

$t$  Tiempo  $s$

$g$  gravedad  $ms^{-2}$ )

$Q_u$  Vector de fuerzas volumétricas  $Pam^{-1}$

$Q_A$  Tensor de fuerzas superficiales  $Pa$

$F$  Vector de fuerzas sólido-fluido  $Pam^{-1}$

$V$  Volumen  $m^3$

$r$  Dirección radial

$z$  Dirección axial

$R$  Radio del tubo  $mm$

$L$  Largo del tubo  $mm$

$d_p$  Diámetro de partícula  $mm$

$A$  Superficie  $m^2$

## Símbolos griegos

$\alpha$  constante de los esfuerzos viscosos en la ecuación de Ergun

$\beta$  Constante de los esfuerzos inerciales en la ecuación de Ergun

$\varepsilon$  Disipación de la energía cinética turbulenta  $m^2s^{-3}$

$\kappa$  Energía cinética turbulenta  $m^2s^{-2}$

$\omega$  Disipación específica de la energía cinética turbulenta  $m^2s^{-3}$

$\phi$  Fracción vacía

$\mu$  Viscosidad dinámica  $Pa\cdot s$

$\mu_t$  Viscosidad turbulenta  $Pa\cdot s$

$\rho$  Densidad del fluido  $Kgm^{-3}$

## Subíndices

$i$  Componente  $r, \theta, z$

$F$  Zona del fluido

$S$  Zona del sólido

$FS$  Zona del contacto sólido-fluido

## Símbolos especiales

$\bar{a}$  Promedio en el tiempo

$a'$  Desviación de la turbulencia

$\langle a \rangle$  Promedio intrínseco

### **Glosario**

**DNS** Simulaciones Numéricas Directas

**RANS** Ecuaciones Promediadas de Navier Stokes

**NSDF** Navier Stokes Darcy Forchheimer

**RLE** Reactores de Lecho Empacado

**CFD** Dinámica de Fluidos Computacional

**PRS** Simulaciones de Partícula Resuelta

**SPC** Simulaciones Pseudo Continuas

# Capítulo 1

## **PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA**

## 1.1. Introducción

Dentro de la industria de procesos químicos, los reactores de lecho empacado (RLE) son utilizados en más de 70 % para la obtención de productos de alto valor agregado (Froment et al., 1990). Aquí los RLE que presentan una baja relación  $d_t/d_p$  y que son enfriados o calentados por las pared son comúnmente utilizados para llevar a cabo reacciones altamente exotérmicas o endotérmicas debido a que en este tipo de reactores se tiene un mejor control en la disipación de calor por la pared (Dixon y van Dongeren, 1998). Sin embargo, los lechos empacados con baja relación  $d_t/d_p$  presentan variaciones en la fracción vacía que dan origen a perfiles de velocidad y, en consecuencia, tienen efecto en los perfiles de temperatura y concentración por lo que es de interés el modelado de la dinámica de fluidos en RLE. En ese sentido, se ha implementado la dinámica computacional de fluidos (CFD, por sus siglas en inglés) para el estudio de los RLE. Diversos estudios se han realizado para RLE con baja relación  $d_t/d_p$  para un bajo número de Reynolds de partícula (Dixon et al., 1984; Partopour y Dixon, 2017; Zhang et al., 2018). Sin embargo, la necesidad del estudio de este tipo de reactores con  $Re_p$  mayores a 500 resulta importante debido a que los RLE operan industrialmente en régimen de flujo turbulento. Si bien las ecuaciones de Navier-Stokes pueden predecir adecuadamente el comportamiento de la dinámica del fluido en régimen laminar y turbulento, el costo computacional resulta elevado, y la descripción de los perfiles de velocidad para sistemas a escala industrial (2-10 m) resulta imposible debido a la cantidad de elementos necesarios para la simulación. Por ello, se han propuesto diferentes enfoques para desarrollar modelos matemáticos que permitan predecir el comportamiento de la dinámica de fluidos en régimen turbulento, tal es el caso de las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas en el tiempo (RANS, por sus siglas en inglés), donde un parámetro a determinar es la viscosidad turbulenta, la cual se obtiene por medio de la aproximación de Boussinesq que utiliza diferentes modelos de turbulencia acoplados a las RANS (Boussinesq, 1877) denominados modelos de una (Bajo Re, Sparlat-Allmaras) y dos ecuaciones ( $\kappa - \epsilon$ ,  $\kappa - \omega$ , SST). Por otro lado, de acuerdo con la literatura el enfoque más utilizado para describir la dinámica de fluidos en RLE considerando régimen turbulento supone al sistema como pseudo continuo, utilizando variantes

del modelo de NSDF (Jafari et al., 2008; Laguerre et al., 2008). No obstante, a pesar de que este tipo de modelos reduce considerable el tiempo de cómputo, depende de coeficientes efectivos denominados descriptores, en los que se incluyen la fracción vacía, viscosidad efectiva, permeabilidad de Darcy y el coeficiente de arrastre de Forchheimer. Estos descriptores normalmente son determinados a partir del ajuste a datos experimentales siendo en algunos casos solo confiables para el sistema de estudio y condiciones de operación donde se determinaron. En este sentido, en el presente trabajo se desarrolla un modelo considerando al sistema como pseudo continuo, donde los descriptores mencionados, especialmente las fuerzas sólido-fluido se obtendrán a partir de las simulaciones locales (DNS y RANS) quitando esa incertidumbre en los modelos que consideran al medio como continuo. Se realizarán dos arreglos de partículas para el lecho empacado con  $d_t/d_p$  de 3, una configuración ordenada y otra aleatoria utilizando el método de cuerpo rígido para su generación. Finalmente, el modelo propuesto se comparará con resultados obtenidos de modelos convencionales, basados en las ecuaciones de NSDF y el resultado promedio de simulaciones locales DNS. El trabajo está conformado por 4 capítulos. El capítulo 1 presenta la motivación del trabajo, el capítulo 2 menciona la metodología llevada a cabo, el capítulo 3 presenta los resultados y discusión. Finalmente, en el capítulo 4 se presentan las conclusiones y perspectivas del trabajo.

## 1.2. Antecedentes

Por su diseño, los reactores de lecho empacado que operan de manera no adiabática y no isotérmica son utilizados ampliamente en la industria petroquímica para llevar a cabo reacciones de oxidación selectiva como la producción de óxido de etileno a partir de etileno (Galan et al., 2009), de anhídrido ftálico a partir de o-xileno (Gimeno et al., 2008), y desde hace varias décadas este tipo de reactor se ha propuesto para poder llevar a cabo la producción de etileno a partir de etano (López et al., 2008). Debido a la exotermicidad de esta clase de reacciones ( $-\Delta H_{rxn}$  300-2000  $kJmol^{-1}$ ) se utilizan los lechos que son empacados con partículas de catalizador no poroso y que presentan una relación de diámetro de tubo a diámetro de partícula  $d_t/d_p < 8$ . La baja relación  $d_t/d_p$  favorece la transferencia de calor (Calderbank et al., 1977; Castillo-Araiza y López-Isunza, 2010). No obstante, esta restricción geométrica genera perfiles de fracción vacía que influyen en la dinámica del fluido dentro del sistema, afectando los distintos mecanismos de transporte de calor y masa, y por consiguiente la velocidad de la reacción.

Se han realizado diversos estudios experimentales y teóricos sobre la dinámica de fluidos en lechos empacados que presentan una baja relación  $d_t/d_p$  (Winterberg y Tsotsas, 2000; Castillo-Araiza y Lopez-Isunza, 2008). Aquí, debido a la cantidad de variables involucradas durante el estudio de los mecanismos de transporte, es necesario el uso de estudios experimentales extensos que permitan su correcta caracterización. En este sentido, los modelos matemáticos resultan ser una alternativa viable que permite realizar el estudio de los diferentes fenómenos de transporte y que a su vez favorecen a su entendimiento. Dos principales enfoques de modelado han sido utilizados en el estudio de lechos empacados: simulaciones de partícula resuelta (PRS, por sus siglas en inglés) y simulaciones considerado al sistema como pseudo continuo.

En las simulaciones PRS, se resuelven las ecuaciones microscópicas de Navier-Stokes o las RANS a través de diferentes métodos de discretización (volumen finito o elemento finito). Las PRS permiten obtener información detallada de fracción vacía, velocidad, presión y fuerzas superficiales, vorticidad e incluso cantidades que solo pueden ser determinadas teóricamente (viscosidad turbulenta) con alta resolución

espacial y en algunos casos temporal (Freund et al., 2003; Bale et al., 2018). En su mayoría, los trabajos reportados en literatura se han orientado a la determinación de perfiles de velocidad, análisis de la caída de presión e identificación de patrones de flujo. Nijemeisland y Dixon (2004) realizaron un estudio utilizando CFD para la transferencia de calor en la pared y el comportamiento del flujo en un lecho empacado con  $d_t/d_p$  de 4, tomaron como referencia una sección del empaque y utilizando condiciones de frontera periódicas lograron describir el patrón de flujo, el cual coincidía con el comportamiento de la transferencia de calor. Eppinger et al. (2011) realizaron simulaciones para lechos empacados con relaciones  $d_t/d_p$  de 3 a 10, la generación del empaque fue por medio del Método de Elemento Discreto (DEM, por sus siglas en inglés), además, se realizó una separación del empaque de la entrada del flujo con el fin de no presentar efectos de entrada. Los resultados mostraron que, la caída de presión en lechos con diferente relación  $d_t/d_p$  no se ve afectada significativamente a bajos flujos, sin embargo, para regímenes de flujo turbulento se presentaron desviaciones hasta el 15 %. En cuanto a la distribución de la velocidad local, se encontró que, para los diferentes números de Reynolds de partícula usados ( $Re_p : 1, 100$  y  $1000$ ) se mostraron regiones donde la dirección del flujo se invierte en comparación con la dirección de flujo de entrada, sin embargo, en la obtención del promedio de la velocidad axial no fue posible capturar ese comportamiento. Partopour y Dixon (2017) reportaron un estudio donde se evalúa el efecto de la geometría en la dinámica de fluidos. La validación de las simulaciones se llevó a cabo comparando las predicciones con observaciones de perfiles de fracción vacía radial y de caída de presión. Para las simulaciones se utilizaron esferas y cilindros con una  $d_t/d_p$  de 7.99 y anillos rasching y cilindros con cuatros agujeros con una  $d_t/d_p$  de 5. Se estudió la dinámica del fluido para un rango del número de Reynolds de partícula entre 1.25 y 123. Para el caso de esferas, los resultados obtenidos de las simulaciones describieron el perfil de la fracción vacía radial obtenido con la ecuación de De Klerk (2003) y la caída de presión obtenida con la ecuación de Ergun. Para todos los empaques, el perfil de fracción vacía cerca de la pared se describió mejor que en la parte central del lecho. A diferencia del empaque con esferas, los resultados teóricos empacando cilindros o anillos rasching presentaron diferencias mayores con respecto a las observaciones experimentales. Lo cual se atribuyó a la orientación

de las partículas cilíndricas, debido a que no se pudo capturar adecuadamente el empaquetamiento de las partículas en el lecho mediante las simulaciones. A pesar de esto, se concluyó que la generación de un empaquetamiento aleatorio por medio de software resulta una opción prometedora para llevar a cabo simulaciones locales que caracterizan la dinámica del fluido en un lecho empacado, siendo más realistas que el uso de empaquetamientos ordenados. Para partículas complejas como cilindros o anillos rasching se debe tomar en cuenta su orientación durante el empaquetamiento aleatorio.

Dixon y Nijemeisland (2001) estudiaron la transferencia de cantidad de movimiento y calor para lechos empacados con  $d_t/d_p$  entre 2 y 4. Las partículas de empaque fueron esferas y las simulaciones se llevaron a cabo a números de Reynolds de partícula entre 373 a 1922. Para la transferencia de cantidad de movimiento, los resultados obtenidos describieron correctamente el campo del vector de velocidad, debido a que se obtuvo el comportamiento típico de un flujo entre dos partículas. Además, se encontró la posibilidad de usar condiciones de frontera periódicas debido a la posición de las partículas. Para la transferencia de calor, se observó la presencia de una capa límite en las superficies sólidas en el lecho. Guardo et al. (2004) evaluaron la transferencia de cantidad de movimiento y calor para un lecho empacado de manera aleatoria considerando 44 esferas y teniendo una  $d_t/d_p$  de 3.923. Las simulaciones en régimen turbulento usaron las ecuaciones RANS con el modelo de turbulencia Spalart-Allmaras y  $\kappa - \epsilon$ . Para la transferencia de cantidad de movimiento, las simulaciones mostraron que en los intersticios generados cerca de los contactos partícula-partícula y pared-partícula se presentaron las mayores velocidades locales, encontrándose ahí la generación de remolinos. Para la caída de presión, en régimen laminar se obtuvo una buena predicción en ambos modelos. Sin embargo, para régimen turbulento, el modelo Spalart-Allmaras logró mejor aproximación con la caída de presión. Para la transferencia de calor, las simulaciones mostraron que la distribución de calor fue directamente proporcional al número de Reynolds de partícula, esto se atribuyó a la energía cinética generada. Con respecto el coeficiente de transferencia de calor en la pared, los modelos de turbulencia mostraron mejor comportamiento que las ecuaciones de Navier-Stokes. Sin embargo, los resultados obtenidos con los modelos de turbulencia difirieron uno del otro. Los mismos auto-

res reportaron en 2005 (Guardo et al., 2005) la evaluación de la influencia de los modelos de turbulencia en el modelado de la transferencia de calor entre la pared del lecho y el fluido. Estos autores utilizaron las ecuaciones RANS con los modelos de turbulencia Spalart-Allmaras y  $\kappa - \epsilon$  de una ecuación,  $\kappa - \epsilon$  RNG, y  $\kappa - \epsilon$  y  $\kappa - \omega$  de dos ecuaciones. Las simulaciones mostraron que todos los modelos de turbulencia predijeron mayores velocidades locales cerca de la pared y en los intersticios entre las partículas debido a la reducción de espacio disponible. Para la caída de presión, todos los modelos de turbulencia predijeron ésta de manera aceptables; sin embargo, el modelo de Spalart-Allmaras fue el que predijo los mejores resultados. Para la transferencia de calor, los perfiles de temperatura obtenidos se vieron afectados por la energía cinética generada durante la transferencia de cantidad de movimiento. Los resultados de las simulaciones con el modelo Spalart-Allmaras permitieron caracterizar adecuadamente el coeficiente de transferencia de calor en la pared, lo cual se relacionó con las funciones de pared incluidas en este modelo de turbulencia.

Reddy y Joshi (2010) realizaron el estudio del efecto de la pared en la caída de presión y en la determinación del coeficiente de arrastre en lechos empacados para diferentes  $d_t/d_p$  y rango de número de Reynolds de partícula, 0.1 a 10,000. Para el régimen laminar, se usaron las ecuaciones de Navier-Stokes y para el régimen turbulento se usaron las ecuaciones RANS con el modelo de turbulencia  $\kappa - \epsilon$ . Para el flujo laminar, se encontró que el coeficiente de arrastre fue más alto que para el régimen turbulento debido a la fricción ocasionada por las superficies sólidas, obteniendo resultados similares a los que predijo la ecuación de Ergun. En trabajos más recientes, Flaischlen y Wehinger (2019) realizaron una generación de empaquetamiento de partículas con diferentes geometrías: esferas, cilindro y anillos rashing. Estos autores utilizaron el método de elemento discreto y el método de cuerpo rígido. La simulación se comparó con datos experimentales de la fracción vacía radial, orientación de las partículas y de la magnitud de la velocidad en la dirección radial. La fracción vacía se predijo adecuadamente para todos los casos de estudio. Además, el método de cuerpo rígido logró mejores resultados en la descripción de la orientación de las partículas, como consecuencia se obtuvo una mejor descripción de los perfiles de velocidad.

Bey y Eigenberger (1997) reportaron perfiles de fracción vacía y perfiles de velo-

cidad radial en un lecho empacado con diferentes geometrías de partículas (esfera, cilindro y anillos) teniendo relaciones de  $d_t/d_p$  entre 3.3-11. Este estudio se llevó a cabo a flujos de entrada entre  $0.5 \text{ m/s}$  y  $1.5 \text{ m/s}$ . Los perfiles de velocidad que se reportan son un promedio axial y angular de 60 mediciones que se obtuvieron con una sonda de un anemómetro. Estos autores evaluaron el efecto de la geometría y dimensión de las partículas, encontrando que los perfiles de velocidad para el empaque con esferas a diferentes  $d_t/d_p$  no se ven influenciados cerca de la pared. Para el cilindro y anillos, se encontró que a mayores  $d_t/d_p$  se obtenían magnitudes de velocidad mayores cerca de la pared. Para el empaque cilíndrico, longitudes mayores originaron perfiles de velocidad menos oscilatorios generando comportamientos tipo flujo pistón en la región central del lecho. Otra contribución de estos autores fue la evaluación del modelo Brinkman, acoplado a la ecuación que desarrolló Ergun (Ergun, 1952), para describir los perfiles de velocidad. En su modelo se hizo uso de una viscosidad efectiva, que aparenta considerar efectos de turbulencia cerca de la pared, la cual mejoró la predicción de los perfiles de velocidad observados.

Calis et al. (2001) realizaron un estudio CFD para un lecho empacado con  $d_t/d_p$  de 1 a 2, para un rango de número de Reynolds de partícula de 10 a 6000. Para las simulaciones en flujo laminar y turbulento, se resolvieron las ecuaciones de Navier-Stokes y las ecuaciones RANS, particularmente el modelo de turbulencia  $\kappa - \epsilon$ , respectivamente. La validación de las simulaciones se realizó utilizando datos de caída de presión y utilizando la corrección de Ergun. Los resultados mostraron que los valores de caída de presión obtenidos por medio de simulaciones CFD para flujo laminar y turbulento fueron mejores que los obtenidos con la correlación de Ergun. Además, para lechos con  $d_t/d_p$  de 1.15 y 1.47 la descripción de observaciones no fue tan adecuada como en el caso de lechos con  $d_t/d_p$  de 1 y 2. Este comportamiento se relacionó con el acomodamiento de las partículas en el lecho empacado. Sin embargo, se concluyó que la descripción del perfil obtenido de velocidad permitió entender los fenómenos que suceden dentro del lecho.

Varios autores se han centrado en el acomodamiento del empaque, siendo una variable importante para que en las simulaciones por medio de CFD se obtengan resultados confiables. Para lechos empacados con esferas, el empaquetamiento ordenado resulta en una primera aproximación para estudiar la dinámica de fluidos.

Sin embargo, existen diferentes enfoques para el acomodamiento de las partículas de forma aleatoria. Los dos enfoques que han sido ampliamente utilizados en la literatura son: DEM y simulaciones de cuerpo rígido. El primer enfoque toma en cuenta la deformación de las partículas que se origina en el contacto entre ellas, generando una influencia en las fuerzas que actúan. El segundo, no presenta tal deformación al contacto entre las partículas, siendo la fuerza actuante en las partículas lo que ocasiona el cambio de movimiento o acomodo de estas. La gran diferencia entre ambas aproximaciones es el tiempo de computo para la generación del empaquetamiento. En ese sentido, diferentes autores recomiendan que las simulaciones de cuerpo rígido resultan válidas para geometrías de partículas sencillas, como lo son las esferas. Además, los catalizadores utilizados en muchos sistemas catalíticos no son deformables por lo que las simulaciones de cuerpo rígido se pueden considerar como adecuadas (Caulkin et al., 2009; Boccardo et al., 2014; Flaischlen y Wehinger, 2019).

A pesar de que las RANS han mostrado buena descripción de la transferencia de cantidad de movimiento, el tiempo de cómputo durante las simulaciones locales es todavía una limitante, pues en aplicaciones de control y optimización donde las dimensiones de los reactores a escala industrial se encuentran entre 2-10 *m* de longitud, los requerimientos computacionales son excesivamente costosos.

El segundo enfoque de modelado está orientado a la disminución del tiempo de cómputo. Aquí las simulaciones pseudo-continuas (SPC) consideran al lecho empaquetado como un medio continuo donde no se distinguen las fases a nivel local, sino que se utilizan coeficientes efectivos que involucran propiedades de ambas fases y que son diferenciadas a través de la fracción vacía. Normalmente, estos coeficientes efectivos son determinados considerando suposiciones deterministas y/o heurísticas. En las SPC la dinámica del fluido es descrita a través de ecuaciones de Navier-Stokes acopladas a los términos de Darcy y Forchheimer, donde estos últimos términos buscan describir las resistencias al flujo producto de la presencia de las partículas. Eisfeld y Schnitzlein (2005) desarrollaron un modelo pseudo continuo para describir los perfiles de velocidad en un lecho empaquetado con baja relación de  $d_t/d_p$ . Este modelo consideró un término adicional que representa las interacciones entre el sólido y fluido. Las simulaciones mostraron resultados adecuados respecto a los datos

experimentales, sin embargo, se tuvo incertidumbre en la caracterización de las resistencias sólido fluido. Recientemente, Donaubauer et al. (2019) desarrollaron un modelo pseudo continuo en dos dimensiones para describir la transferencia de cantidad de movimiento, transferencia de calor y el transporte de masa, evaluando este modelo para describir el comportamiento de sistemas con diferentes geometrías para una  $d_t/d_p$  de 5. Las simulaciones mostraron que los modelos en dos dimensiones proporcionaron resultados aceptables. No obstante, las metodologías para determinar tanto la fracción vacía como la caída de presión, y los parámetros de transporte efectivos, son cuestionables.

En cuanto a SPC considerando la turbulencia, se han reportado diferentes enfoques para describirla. Soullaine y Quintard (2014) desarrollaron modelo de medio efectivo que describiera la turbulencia en un medio poroso. Aplicaron la metodología del promedio volumétrico a los modelos RANS con el objetivo de incluir la viscosidad turbulenta. Además, estos autores desarrollaron el problema de cerradura encontrando similitudes con la ecuación de Darcy-Forchheimer. Para validar el modelo, realizaron una metodología la cual incluía la solución de la caída de presión a partir de las RANS, donde además obtenían los perfiles de la viscosidad efectiva con el fin de obtener una caída de presión reconstruida para compararla con las simulaciones RANS, todo esto se realizó considerando fracción vacía constante. Aparicio-Mauricio et al. (2017) realizaron el estudio de la dinámica de fluidos de un RLE con baja relación  $d_t/d_p$ . Ellos propusieron un nuevo enfoque como un modelo pseudo-continuo que considera dos regiones, región del seno del fluido donde los esfuerzos generados por la presencia de la partícula era descrito por la ley de Darcy-Forchheimer, y la región de la pared donde los esfuerzos viscosos son modelados por el término de Brinkman, considerando la viscosidad turbulenta, la cual se obtuvo por medio de herramientas de ajuste a datos experimentales de velocidad y caída de presión. Los resultados muestran una correcta descripción del modelo respecto a datos experimentales y el enfoque convencional de SPC, i.e. las ecuaciones de NSDF.

En conclusión, trabajos previos han determinado que las PRS pueden proporcionar información importante del comportamiento en RLE (velocidad, caída de presión, fracción vacía) siempre y cuando se considere la generación del empaque y el tamaño de malla. Por otro lado, se han desarrollado modelos pseudo continuos que

describan las interacciones sólido fluido, así como la información del comportamiento turbulento del fluido dentro del empaque, en algunos casos tienen comportamiento aceptables, sin embargo, estas variables no logra tener una captura de la información adecuada. En ese sentido, el trabajo se centra en la captura de la información de simulaciones locales y la generación de un modelo pseudo continuo que incluya la información local para su simulación.

### 1.3. Problema

El presente trabajo se enfoca en el desarrollo de modelos de turbulencia de medio efectivo que describan la transferencia de cantidad de movimiento en un lecho empacado con una relación de diámetro tubo a diámetro de partícula de 3.07 para número de Reynolds de partícula utilizados en la industria (700-5313). Los modelos será capaces de capturar la información de simulaciones locales sin la necesidad de estimar parámetros que caracterizan la transferencia de cantidad de movimiento, como la fracción vacía y las interacciones que existen entre en las superficies sólidas y el fluido. Los modelos se basan en las ecuaciones RANS utilizando las ecuaciones de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$  y  $\kappa - \omega$ .

### 1.4. Pregunta de investigación

¿Es posible desarrollar un modelo matemático pseudo continuo que incluya información de simulaciones locales de la dinámica de un fluido en régimen turbulento en un lecho empacado con baja relación de  $d_t/d_p$ ?

### 1.5. Hipótesis

La información obtenida de simulaciones que describen la dinámica de un fluido a nivel local se puede utilizar para desarrollar un modelo pseudo continuo que permitirá describir los perfiles velocidad en un reactor de lecho empacado con una  $d_t/d_p = 3.07$  a  $Re_p$  utilizados en la industria: 700-5313

## 1.6. Objetivo general

Desarrollar un modelo pseudo continuo que describa la transferencia de cantidad de movimiento considerando la turbulencia en un lecho empacado con una  $d_t/d_p$  3.07 con geometría esférica utilizando aire a condiciones normales.

## 1.7. Objetivos particulares

- Caracterizar la transferencia de cantidad de movimiento a nivel local en régimen turbulento.
- Desarrollar una metodología basada en las simulaciones locales para la determinación de coeficientes usados en el modelo pseudo continuo propuesto.

## Capítulo 2

# METODOLOGÍA

## 2.1. Descripción del sistema

La Figura 2.1 muestra una representación del lecho empacado que se analiza en esta investigación. En este sistema se evaluará la dinámica de un fluido Newtoniano (aire) a condiciones normales ( $T=20^{\circ}\text{C}$  y  $P=1\text{ atm}$ ). Las propiedades termodinámicas del fluido a condiciones normales de temperatura se presentan en la Tabla ???. El tubo donde están empacadas las partículas es un cilindro de 250 cm de longitud y 2.54 cm de diámetro, y las partículas que se empacarán en este tubo son esferas de 8 mm de diámetro. Esta configuración se eligió ya que es la que se reporta para llevar a cabo una oxidación selectiva a nivel industrial (Castillo-Araiza et al., 2007).

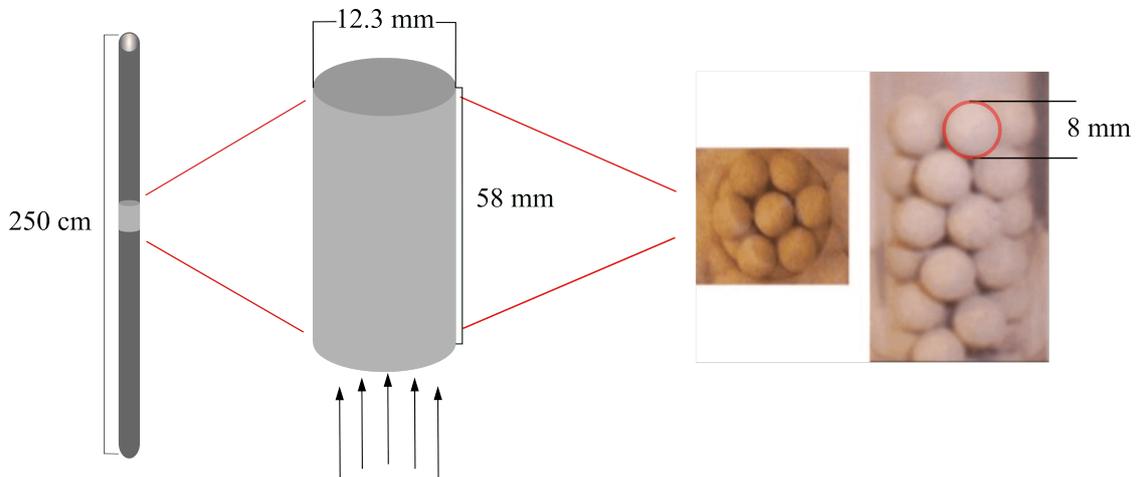


Figura 2.1: Representación de las especificaciones del sistema a estudiar.

Después de un análisis sobre el acomodo de estas partículas en el tubo a través de imágenes del empaque en un tubo acrílico (Figura 2.1) y simulaciones de cuerpo rígido se encontró que la dinámica del fluido se puede caracterizar en una sección del tubo de 58 mm, en ese sentido, las simulaciones locales se llevarán a cabo para un empaquetamiento de partículas para esa longitud de tubo. El empaque está constituido por partículas esféricas no porosas con un diámetro de 8 mm cada una, obteniendo una relación  $d_t/d_p$  de 3.07. La alimentación de aire se hará por la parte de abajo del empaque y los regímenes de flujo utilizados para cada simulación será con números de Reynolds de partícula entre 700 y 5313.

## 2.2. Generación del empaquetamiento

Dos formas de empaque fueron utilizadas para llevar a cabo el estudio de la dinámica del fluido. Por un lado, se considera un empaquetamiento ordenado de las partículas. Mientras que por el otro, se considera empaquetamiento aleatorio. los métodos de empaque y software utilizados en cada método son discutidos con más detalles en las siguientes secciones.

### 2.2.1. Empaquetamiento ordenado

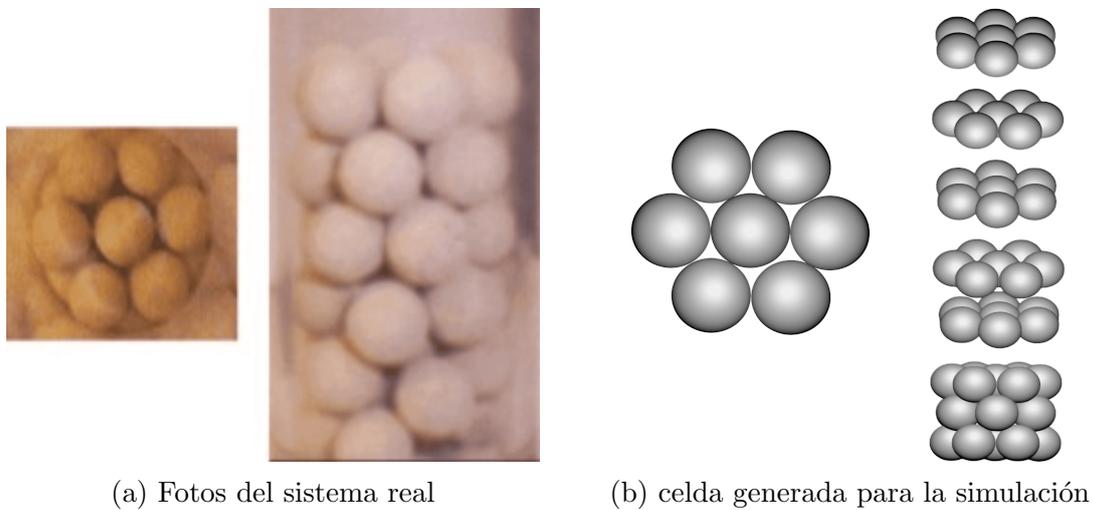


Figura 2.2: Esquema de la generación del empaquetamiento ordenado

Tal como se muestra en la Figura 2.2b el empaclado de las partículas de forma ordenada puede representar adecuadamente el sistema real. Teniendo como base el arreglo de partículas que se presenta en la Figura 2.2b, donde cada cama muestra un arreglo de 7 partículas, 6 partículas en la periferia y una central, las camas de partículas se fueron sobreponiendo e intercalando, considerando una rotación de  $30^\circ$  hasta conseguir un total de 8 capas teniendo un total de 56 partículas. Cabe destacar que para no tener problemas de convergencia durante la simulación numérica se consideró una separación de 0.5% en puntos de contacto entre superficies sólidas. Este enfoque se seleccionó de acuerdo con la literatura, ya que para lechos empacados con  $d_t/d_p$  pequeños (2 y 4) es posible obtener resultados aceptables en la dinámica de fluidos (Dixon y Nijemeisland, 2001; Nijemeisland y Dixon, 2001). Esta consideración ha dado adecuados resultados en estudios de dinámica de fluidos (Bu

et al., 2014). Este tratamiento utilizado en la generación del empaque permite que la generación de malla se lleve a cabo sin elementos sesgados en la región de contactos partícula-partícula, lo que permite una rápida convergencia de las simulaciones.

### 2.2.2. Empaque aleatorio

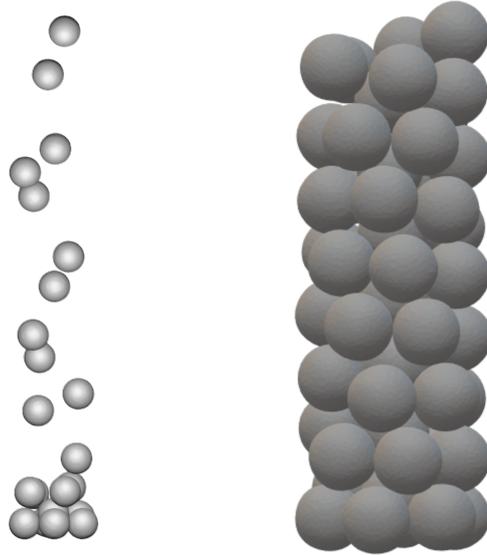


Figura 2.3: Esquema de generación del empaquetamiento aleatorio.

La generación del empaquetamiento aleatorio se ha llevado a cabo usando simulaciones de cuerpo rígido. Para esto, se hace uso de la paquetería de software libre implementada en Blender (Moghaddam et al., 2018). En este software se resuelven las ecuaciones de movimiento de Newton, las cuales permiten describir la velocidad, aceleración, posición y rotación de cada una de las partículas considerando las colisiones partícula-partícula y partícula-pared de manera detallada. Para hacer una correcta comparación con el empaquetamiento ordenado, se utilizó la misma cantidad de partículas en la construcción de ambas celdas de estudio.

Cada partícula en la simulación está formada por 350 caras, logrando una forma esférica aceptable para la generación del empaquetamiento y permitiendo usar una menor cantidad de recursos de cómputo. Por la forma de las partículas, el tipo de colisión que se utilizó es convexa, la cual permite menor uso de recursos de cómputo en la identificación de los puntos de contacto durante la simulación de cuerpo rígido,

con lo que se consiguió tener simulaciones más rápidas y estables que aquellas que usan colisiones de malla.

### 2.2.3. Tratamiento de las partículas

Para una adecuada distribución de la malla, se debe tomar en cuenta el contacto de las partículas tanto entre ellas como con la pared debido que en esas zonas se puede obtener refinamientos excesivos aumentando el número de elementos para resolver en las simulaciones CFD. Por lo que el estudio del contacto partícula-partícula y partícula-pared es importante.

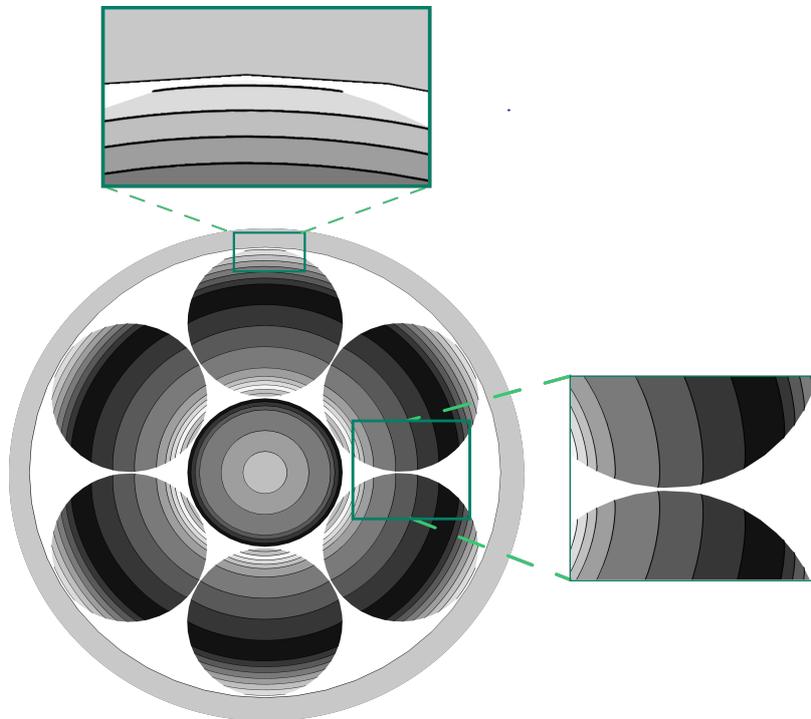


Figura 2.4: Reducción de las partículas para obtener el enfoque de contacto partícula-partícula y partícula-pared tipo brecha.

Para empaques con esferas se han investigado diferentes enfoques para el tratamiento de los puntos de contacto partícula-partícula y partícula-pared y la influencia que genera en la dinámica de fluidos. En estos enfoques se han utilizado puentes cilíndricos, fusión de partículas, un ligero corte entre el contacto de las partículas y brechas (Dixon et al., 2013). Como primer acercamiento, el enfoque de brecha resulta adecuado, el cual realiza una reducción en el tamaño de las partículas al 99 % del tamaño original, este tratamiento no afecta el comportamiento de la dinámica de

fluidos dentro de un lecho empacado con partículas (Nijemeisland y Dixon, 2001). Dicho esto, la Figura 2.4 muestra de forma gráfica la separación de las partículas entre ellas y la pared, producto de la reducción del radio de las partículas.

## 2.3. Modelos locales

Para el estudio de la dinámica de fluidos en el RLE se considera flujo isotérmico, fluido Newtoniano e incompresible con propiedades físicas constantes. Para la simulación se considera aire como fluido con propiedades definidas a  $P=1$  atm y  $T=293$  K, el aire se alimenta desde el fondo a diferentes  $Re_p$  (700,1050,1400,1619, 5313). Bajo estas consideraciones, las ecuaciones de conservación de masa total y Navier-Stokes están descritas como sigue:

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

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.2)$$

Donde  $\mathbf{u}$  es el vector de velocidad en sus tres componentes,  $u_r$ ,  $u_\theta$  y  $u_z$ ,  $\mu$  es la viscosidad dinámica del fluido,  $\rho$  la densidad y  $p$  la presión. En la Ec. (2.2), los términos de la izquierda representan la aceleración e inercia del fluido. Mientras que los términos de la derecha representan las fuerzas de presión y viscosas. Las Ecs. (2.1)-(2.2) están sujetas a las siguientes condiciones de frontera: En la superficie de las partículas y la pared de contención se considera no deslizamiento ( $\mathbf{n} \cdot \mathbf{u} = 0$ ), velocidad de entrada constante en la dirección axial ( $u_z = u_{z_{in}}$ ) y presión atmosférica a la salida del reactor.

### 2.3.1. Modelos de turbulencia

Como se ha mencionado anteriormente, resolver el flujo turbulento por simulaciones DNS en RLE a escala industrial resulta intratable, refiriéndose a que, para un alto número de Reynolds de partícula, las ecuaciones se deben resolver con un malla al nivel de la microescala definida por Kolmogorov (Kolmogorov, 1941). Por ello, se han propuesto diferentes modelos de turbulencia con el objetivo de resolver sis-

temas con flujos turbulentos. En este trabajo, se hace uso de las ecuaciones RANS, que están definidas en términos del tensor de esfuerzos de corte de Reynolds. De acuerdo con (Whitaker, 1968) se considera el promedio en el tiempo de una variable de interés  $S$  (i.e. velocidad, presión, temperatura, etc.) como

$$\bar{S} = \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} S dt \quad (2.3)$$

El comportamiento de una variable local en régimen turbulento a lo largo del tiempo se comporta de forma fluctuante, debido a esto es posible describir cualquier variable local en términos del promedio en el tiempo más la fluctuación de esta

$$\mathbf{x} = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{x}' \quad (2.4)$$

Siendo  $\mathbf{x}$  definida como la velocidad o presión, tal como

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}' \quad (2.5)$$

$$p = \bar{p} + p' \quad (2.6)$$

Para la velocidad y presión, aplicando la definición de la Ec. (2.4) se puede observar en las Ecs. (2.7) y (2.8) que el promedio de una variable promedio es igual al mismo promedio tal que

$$\bar{\mathbf{u}} = \underbrace{\frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \bar{\mathbf{u}} dt}_{\bar{\mathbf{u}}} + \underbrace{\frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \mathbf{u}' dt}_0 \quad (2.7)$$

$$\bar{p} = \underbrace{\frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \bar{p} dt}_{\bar{p}} + \underbrace{\frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} p' dt}_0 \quad (2.8)$$

Para satisfacer las ecuaciones resultantes, el promedio en el tiempo de la fluctuación de la velocidad y presión debe ser cercano a cero por lo tanto en ambos casos  $\overline{\mathbf{v}'} = 0$  y  $\overline{p'} = 0$ . Aplicando las definiciones de las Ecs. (2.3) y (2.4) en la Ec. (2.1).

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0 \quad (2.9)$$

Para la ecuación de movimiento, al aplicar las definiciones de las Ecs. (2.4)-(2.6) se obtiene:

$$\rho \left( \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dt + \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) dt \right) = -\frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \nabla p dt + \rho \mathbf{g} + \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \mu \nabla^2 \mathbf{u} dt \quad (2.10)$$

Desarrollando cada término con la Ecs. (2.5) y (2.6)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \mu \nabla^2 \mathbf{u} dt &= \mu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} \\ \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \nabla p dt &= \nabla \bar{p} \\ \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dt &= \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} \\ \frac{1}{2\Delta t} \int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) dt &= \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} + \overline{\mathbf{u}' \cdot \nabla \mathbf{u}'} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Por lo tanto, aplicando estas definiciones a la Ec. (2.2) en estado transitorio ésta queda como

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} \right) = -\nabla \bar{p} + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} - \overline{\rho \mathbf{u}' \cdot \nabla \mathbf{u}'} \quad (2.12)$$

donde  $\overline{\rho \mathbf{u}' \cdot \nabla \mathbf{u}'}$  =  $\nabla \cdot \overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'}$  ya que se satisface la operación del producto punto en ambos casos, y el tensor de esfuerzos de corte de Reynolds se puede definir como:

$$\bar{\tau}^t = -\overline{\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}'} \quad (2.13)$$

Para resolver la Ec. (2.12) es necesario conocer el valor del tensor de esfuerzos de corte de Reynolds, siendo que, hasta el momento, no se ha podido obtener cerradura al problema de las Ecs. (2.9) y (2.12) sin considerar empirismos. Para obtener las ecuaciones RANS, se aplica la aproximación de Boussinesq (Boussinesq, 1877) donde en el término que describe las fluctuaciones del vector de velocidad se puede describir como una analogía con el término de esfuerzos de corte viscosos, tomando

en consideración que es proporcional al gradiente de velocidad. Por lo tanto, la Ec. (2.13) se puede escribir como

$$\bar{\tau}^t = \mu_t \nabla \bar{\mathbf{u}} \quad (2.14)$$

Con esto, es posible resolver la ecuación sin la dificultad de obtener una solución directa de las desviaciones presentes en el esfuerzo de Reynolds pero con la incertidumbre de un nuevo coeficiente, el cual se discutirá más adelante. Considerando lo anterior, la Ec. (2.12) se puede escribir de la siguiente forma:

$$\rho \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \rho \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} = \rho \mathbf{g} - \nabla \bar{p} + (\mu + \mu_t) \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} \quad (2.15)$$

Al igual que la Ec. (2.2), los términos de la izquierda representan la aceleración e inercia del fluido y los términos de la derecha las fuerzas de presión y viscosas, todos promediados en el tiempo. Cabe destacar que el nuevo parámetro agregado en el término viscoso de la derecha aparece como una consecuencia de aplicar la aproximación de Boussinesq donde  $\mu_T$  representa la viscosidad turbulenta, la cual es una variable característica de cada sistema y condiciones de operación (Launder y Spalding, 1972). Siendo  $\mu_T$  un descriptor que captura la información relacionada con la turbulencia que tiene lugar en el sistema, esencialmente cerca de la pared del tubo, se han propuesto diferentes modelos para determinar este parámetro, a los que se les llama modelos de turbulencia. En general, la mayoría de los modelos de turbulencia basados en las RANS consideran la existencia de una ecuación diferencial de la generación y disipación de la energía cinética generada por la turbulencia en una escala de longitud que se basa en el modelo de Prandtl (Prandtl y Wieghardt, 1945), lo cual es la base para la determinación de la viscosidad turbulenta (Hinze y Uberoi, 1960).

Como en este trabajo, diversos estudios (Linsong et al., 2018; Molina-Herrera et al., 2018) han utilizado los modelos de turbulencia de dos ecuaciones, como el  $\kappa - \varepsilon$  y  $\kappa - \omega$ , en lechos empacados para determinar la viscosidad turbulenta. El motivo principal del uso de estos modelos se debe a que los tiempos de cómputo son menores en relación a otros modelos más complejos y, para sistemas complejos como un lecho empacado con baja relación  $d_t/d_p$  la longitud de escala no puede ser

descrita por medio de modelos de turbulencia de una ecuación. Para el modelo de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$ , la viscosidad turbulenta está definida como

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.16)$$

Donde  $\kappa$  son la energía cinética turbulenta y  $\varepsilon$  la disipación de energía cinética relacionada con los mecanismos de turbulencia. Las ecuaciones para la energía cinética turbulenta y disipación de energía cinética son

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)k = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + \mu_t \left[ \nabla \mathbf{u} : \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right] - \rho \varepsilon \quad (2.17)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\varepsilon = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \left[ \nabla \mathbf{u} : \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right] - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.18)$$

Donde  $C_{\varepsilon 1}$  y  $C_{\varepsilon 2}$  son constantes que permiten caracterizar la generación de turbulencia cerca de la pared y la disipación de la energía cinética, respectivamente,  $\sigma_\kappa$  y  $\sigma_\varepsilon$  son números de Prandtl turbulento que caracterizan la difusión de la energía cinética. En cuanto a las Ecs. (2.17) y (2.18), los términos de la izquierda representan el cambio convectivo de la generación y disipación de la energía cinética, mientras que los términos de la derecha representan la difusión neta, tasa de generación y los términos de sumideros de la energía cinética turbulenta y la disipación de la energía, respectivamente. La viscosidad turbulenta para el modelo  $\kappa - \omega$  se define como

$$\mu_t = \rho \frac{k}{\omega} \quad (2.19)$$

Donde  $\omega$  es la disipación específica turbulenta y está relacionada con la disipación de la energía cinética turbulenta. Las ecuaciones de  $\kappa$  y  $\omega$  son las siguientes

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)k = \nabla \cdot [(\mu + \mu_t \sigma_k^*) \nabla k] + \mu_t \left[ \nabla \mathbf{u} : \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right] - \beta_0^* \rho \omega k \quad (2.20)$$

$$\rho \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\omega = \nabla \cdot [(\mu + \mu_t \sigma_\omega) \nabla \omega] + \alpha \frac{\omega}{\kappa} \mu_t \left[ \nabla \mathbf{u} : \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \right] - \rho \beta_0 \rho \omega^2 \quad (2.21)$$

Donde  $\beta_0^*$ ,  $\beta_0$  y  $\alpha$  son constantes que se determinaron empíricamente. Los términos de las Ecs. (2.20) y (2.21) presenta el mismo significado como en el modelo de  $\kappa - \varepsilon$ . Las condiciones de frontera de entrada y salida para ambos modelos de turbulencia son las mismos que las Ecs. (2.1) y (2.2). Los parámetros utilizados para las simulaciones locales se presentan a continuación

Las condiciones de frontera para los modelos de turbulencia se muestran en las Ecs. (2.22) y (2.23), siendo la columna izquierda para el modelo  $\kappa - \varepsilon$  y la columna derecha para el modelo  $\kappa - \omega$

Paredes

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} &= 0 & \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} &= 0 \\ \nabla \kappa \cdot \mathbf{n} &= 0 & \nabla \kappa \cdot \mathbf{n} &= 0 \\ \varepsilon &= \frac{\rho C_\mu \kappa^2}{\kappa_v \delta^{+\mu}} & \omega &= \frac{\rho \kappa}{\kappa_v \delta^{+\mu}} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Entrada

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{v}} &= -v_0 \mathbf{n} & \bar{\mathbf{v}} &= -v_0 \mathbf{n} \\ \kappa &= \frac{3}{2} (v_0 I_T)^2 & \kappa &= \frac{3}{2} (v_0 I_T)^2 \\ \varepsilon &= \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}} \kappa^{\frac{3}{2}}}{L_T} & \omega &= \frac{\kappa^{\frac{1}{2}}}{\beta_0^{\frac{1}{4}} L_T} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Las condiciones de frontera para la salida en la ecuación de movimiento es  $p = P_{atm}$  y para  $\kappa$ ,  $\varepsilon$  y  $\omega$  son de tipo flujo tapón. Las simulaciones RANS se llevaron a cabo con las Ecs. (2.9) y (2.15) utilizando los modelos de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$  y  $\kappa - \omega$  dados por las Ecs. (2.16)-(2.18) y (2.19)-(2.21), respectivamente. Para lograr una correcta comparación con las simulaciones a nivel DNS, se utilizó la misma cantidad de elementos de malla para las simulaciones correspondientes.

## 2.4. Modelos pseudo continuos

Para desarrollar el modelo pseudo continuo, se utilizó la metodología reportada por Einfeld y Schnitzlein (2005). Usando como referencia la Figura 2.24, la cual es una representación de la geometría del empaque en condiciones ideales de empaquetamiento. Realizando el balance de las ecuaciones definiendo un dominio estadístico

y teniendo presente que la fracción vacía local es una representación de la densidad de existencia de fluido en una determinada posición, se realiza el balance para cualquier cantidad específica ( $x$ ) en el volumen del fluido.

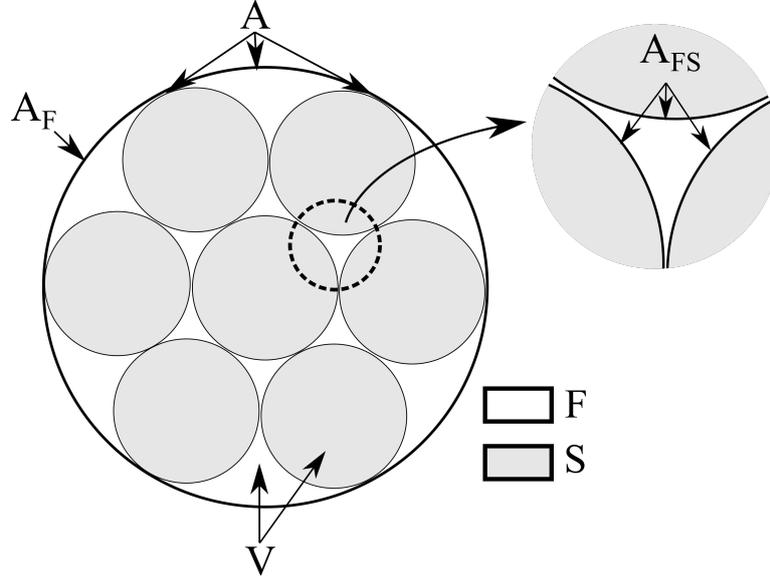


Figura 2.5: Referencia de las áreas y volúmenes para un lecho empacado con relación  $d_t/d_p=3.07$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_F} x dV + \int_A \mathbf{n} \cdot x \langle \mathbf{u} \rangle dA = \int_{V_F} \mathbf{Q}_u dV + \int_A \mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}_A dA \quad (2.24)$$

Siendo  $\mathbf{n}$  el vector normal de la superficie,  $Q_v$  las fuentes volumétricas y  $Q_A$  las fuentes superficiales presentes,  $V_F$  el volumen del fluido y  $A$  se refiere a la superficie cerrada del sistema de estudio donde  $A = A_F + A_{FS}$  y  $A_F$  son las superficies de entrada-salida y  $A_{FS}$  es la superficie en el contacto sólido-fluido, de tal forma que la Ec. (2.24) puede escribirse como

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_F} x dV + \int_{A_F} \mathbf{n} \cdot x \langle \mathbf{u} \rangle dA = \int_{V_F} \mathbf{Q}_u dV + \int_{A_F} \mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}_A dA + \int_{A_{FS}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}_A dA \quad (2.25)$$

Para cuantificar la presencia del fluido o sólido dentro del sistema se agrega el parámetro de fracción vacía  $\phi^*$ , el cual indica la presencia del sólido ( $\phi^*=0$ ) o fluido ( $\phi^*=1$ ).

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi^* x dV + \int_A \phi^* \mathbf{n} \cdot \langle \mathbf{u} \rangle dA = \int_V \phi^* \mathbf{Q}_u dV + \int_A \phi^* \mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}_A dA + \int_{A_{FS}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}_A dA \quad (2.26)$$

Para hacer que la ecuación tenga una descripción más precisa de la fracción vacía, se aplica una distribución radial haciendo que la ecuación sea valida en la zona del fluido y sólido sin tener cambios bruscos, en consecuencia, la integral definida por las interacciones sólido-fluido debe cambiar por una distribución en el volumen debido a que se considera una distribución de la fracción vacía para todo el dominio. Aplicando lo anterior y usando el teorema de la divergencia en el último término de la derecha en la Ec. (2.26), la ecuación resultante es

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \phi x dV + \int_A \phi \mathbf{n} \cdot x \langle \mathbf{u} \rangle dA = \int_V \phi \mathbf{Q}_u dV + \int_A \phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{Q}_A dA + \int_V \Delta \mathbf{F} dV \quad (2.27)$$

Finalmente, aplicando el teorema de la divergencia a las integrales de superficie y aplicando el límite cuando  $V$  tiende a 0 la Ec. (2.27) queda en su forma general como

$$\frac{\partial \phi x}{\partial t} + \nabla \cdot \phi x \langle \mathbf{u} \rangle = \phi \mathbf{Q}_u + \nabla \cdot \phi \mathbf{Q}_A + \Delta \mathbf{F} \quad (2.28)$$

Donde  $\Delta \mathbf{F}$  considera las interacciones sólido-fluido. Para aplicar la Ec. (2.28) en un modelo que describa la cantidad de movimiento se toman las siguientes consideraciones: para la ecuación de continuidad  $x$  tomará el valor de la densidad y considerando que no hay fuentes en el volumen ni en la superficie, además, el sistema ese considera como incompresible. Para la ecuación de cantidad de movimiento,  $x$  toma el valor de  $\rho \mathbf{v}$  y las fuerzas superficiales  $Q_A$  que consideran a la presión ( $p$ ) y los esfuerzos viscosos  $\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$  para un fluido newtoniano. De esta manera, la ecuación de continuidad y la de cantidad de movimiento son las siguientes

$$\nabla \cdot \phi \mathbf{u} = 0 \quad (2.29)$$

$$\nabla \cdot \phi \langle \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{u} \rangle = \rho \mathbf{g} - \nabla \phi \langle p \rangle + \mu \nabla \cdot \nabla \phi \langle \mathbf{u} \rangle + \Delta \mathbf{F} \quad (2.30)$$

En la Ec. (2.30)  $\Delta \mathbf{F}$  involucra los efectos de las interacciones del sólido-fluido dentro del lecho, sin embargo, hasta ahora el valor de este término ha sido aproximado desde diferentes enfoques que son descritos a continuación.

### 2.4.1. Navier Stokes Darcy Forchheimer

Diferentes propuestas se han realizado para describir las fuerzas de resistencia sólido-fluido en RLE. Entre estas, la ecuación de Ergun (Ergun, 1952) es la más utilizada, en esta ecuación  $\Delta \mathbf{F}$  cuantifica los efectos viscosos presente a bajas velocidades de flujo (Blake-Kozeny o Darcy) y las resistencias inerciales cuantificadas por la dependencia cuadrática de la velocidad de flujo (Burke-Plummer o Forchheimer). El acoplamiento de ambos términos permite la determinación de la caída de presión o caracterización de las resistencias sólido-fluido.

$$-\Delta \mathbf{F} = \nabla \cdot \mathbf{I} = \frac{\mu \alpha (1 - \phi)^2}{\phi^3 d_p} \langle \mathbf{u} \rangle + \frac{\rho \beta (1 - \phi)}{\phi^3 d_p} |\langle \mathbf{u} \rangle| \langle \mathbf{u} \rangle \quad (2.31)$$

Donde  $\alpha$  y  $\beta$  son constantes particulares para cada configuración del lecho y su magnitud en algunos casos depende de la fracción vacía y el número Reynolds de partícula (Eisfeld y Schnitzlein, 2001; Koekemoer y Luckos, 2015). Los coeficientes  $\alpha$  y  $\beta$  normalmente son determinados a partir del ajuste con datos de caída de presión experimental o de perfiles de velocidad radial (Castillo-Araiza y Lopez-Isunza, 2008; Guo et al., 2017). Ergun estimó valores de  $\alpha$  y  $\beta$  para lechos empacados con  $d_t/d_p \gg 8$  obteniendo valores de  $\alpha = 150$  y  $\beta = 1.75$ . Siguiendo esta aproximación, la Ec. (2.30) puede escribirse como

$$\nabla \cdot \phi \langle \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{u} \rangle = -\nabla \phi \langle p \rangle + \mu \nabla \cdot \nabla \phi \langle \mathbf{u} \rangle - \left( \frac{\mu \alpha (1 - \phi)^2}{\phi^3 d_p} + \frac{\rho \beta (1 - \phi)}{\phi^3 d_p} |\langle \mathbf{u} \rangle| \right) \langle \mathbf{u} \rangle \quad (2.32)$$

Considerando que la componente  $z$  de la velocidad es mucho mayor que las componentes en  $\theta$  y  $r$  de la velocidad y que  $\frac{\partial p}{\partial z} \gg \left( \frac{\partial p}{\partial r}, \frac{\partial p}{\partial \theta} \right)$  además de que la fracción

vacía solo es función del radio, las Ecs. (2.29) y (2.32) quedan como

$$\phi \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} = 0 \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} \rho \langle u \rangle \phi \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} &= -\phi \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial z} + \mu_{eff} \left( \phi \frac{\partial^2 \langle u \rangle}{\partial r^2} + 2 \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\phi}{r} \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial r} + \langle u \rangle \frac{\partial^2 \langle u \rangle}{\partial r^2} \right) \\ &+ \mu_{eff} \left( \frac{\langle u \rangle}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \phi \frac{\partial^2 \langle u \rangle}{\partial z^2} \right) - \left( \frac{\mu \alpha (1 - \phi)^2}{\phi^3 d_p} + \frac{\rho \beta (1 - \phi)}{\phi^3 d_p} \langle u \rangle \right) \langle u \rangle \end{aligned} \quad (2.34)$$

Las condiciones de frontera consideran que en la entrada la velocidad es homogénea y constante en la dirección  $z$ . Por otro lado, se considera al sistema simétrico, y las paredes no presentan deslizamiento ( $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ ). Además, en la salida del lecho la presión se impone a ser la atmosférica ( $p = P_{atm}$ ).

## 2.4.2. Propuesta del modelo basado en PRS

En este enfoque, para determinar el término  $\Delta \mathbf{F}$  se parte del hecho que  $\Delta \mathbf{F} = \nabla \langle p \rangle$  de donde es posible utilizar el término de caída de presión promedio superficial, el cual se puede obtener utilizando el teorema del promedio espacial (Whitaker, 1996), tal que

$$\langle \nabla p \rangle_{\text{sup}} = \nabla \langle p \rangle_{\text{sup}} + \frac{1}{V} \int_{A_{FS}} \mathbf{n} p dA \quad (2.35)$$

Donde  $A_{FS}$  es el área superficial de las partículas la cual se encuentran en contacto con el fluido,  $V$  es el volumen total de promediado definido como  $V_f + V_s$ . Donde  $V_s$  es el volumen del sólido y  $V_f$  es el volumen del fluido contenido en  $V$ . Despejando el primer término de la derecha en la Ec. (2.35)

$$\nabla \langle p \rangle_{\text{sup}} = \langle \nabla p \rangle_{\text{sup}} - \frac{1}{V} \int_{A_{FS}} \mathbf{n} p dA \quad (2.36)$$

Finalmente, se aplica la definición integral del promedio de una cantidad a la Ec. (2.36) para el primer término de la derecha, quedando la relación de la Ec. (2.31) en términos de cantidades intrínsecas como

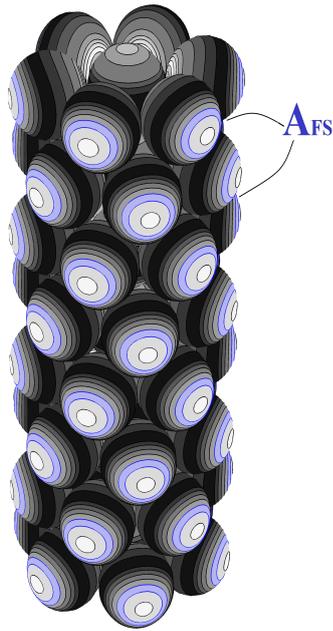
$$\Delta \mathbf{F} = \nabla \langle p \rangle = \frac{1}{V_F} \int_V \nabla p dV - \frac{1}{V_F} \int_{A_{FS}} \mathbf{n} p dA \quad (2.37)$$

Las ecuaciones resultantes para este caso de estudio quedan como

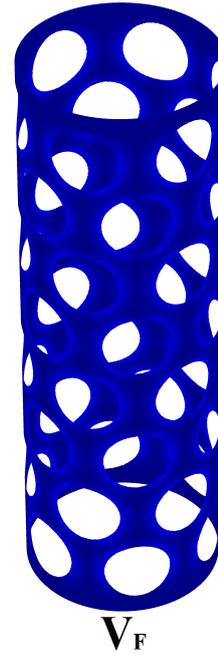
$$\phi \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} = 0 \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \rho \langle u \rangle \phi \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial z} = & -\phi \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial z} + \mu_{eff} \left( \phi \frac{\partial^2 \langle u \rangle}{\partial r^2} + 2 \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{\phi}{r} \frac{\partial \langle u \rangle}{\partial r} + \langle u \rangle \frac{\partial^2 \langle u \rangle}{\partial r^2} \right) \\ & + \mu_{eff} \left( \frac{\langle u \rangle}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \phi \frac{\partial^2 \langle u \rangle}{\partial z^2} \right) + \Delta \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (2.39) \end{aligned}$$

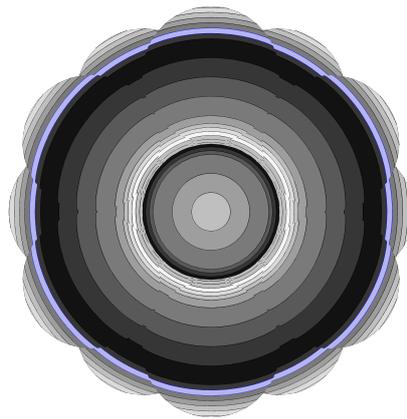
Las integrales en la Ec. (2.37) son las que permiten cuantificar la interacción de fuerzas del sólido-fluido del sistema, esta información resulta de las PRS promediadas como se muestra en la Figura 2.6, donde las integrales de volumen están definidas en la región de volumen del fluido, para una descripción satisfactorio, la celda unitaria utilizada en las PRS se divide en 18 volúmenes radiales, para las integrales de superficie, se consideran las superficies de las partículas contenidas en los volúmenes de promediado. La selección de caras se muestra en la Figura 2.6



(a) selección de caras en vista frontal



(b) selección de volumen



(c) selección de caras en vista superior

Figura 2.6: Selección de caras para el cálculo de las interacciones sólido-fluido, fracción vacía y velocidad promedio a partir de las simulaciones locales.

Finalmente, con el desarrollo de las fuerzas sólido fluido incluidas en el modelo pseudo continuo propuesto y a partir de la metodología para obtener esta información de simulaciones locales, se pretende que los tiempos de computo se reduzcan, además de mejorar la descripción de sistemas complejos como lo es un RLE, con esto será posible un mejor análisis en cuanto a las condiciones de operación necesarias y también para un desarrollo de optimización y control.

## Capítulo 3

# RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A continuación se presentan los resultados obtenidos a partir de las simulaciones locales y las diferentes aproximaciones pseudo continuas. Para la solución de las ecuaciones se hizo uso del software Comsol Multiphysics, el cual utiliza el método de elemento finito. El principio básico del método consiste en la discretización por elementos del sistema a estudiar y en cada nodo se determina una función de forma que aproxime a la solución. Además, siendo las ecuaciones a resolver no lineales, el sistema de ecuaciones obtenidas se resuelve por el método de Newton hasta converger a la tolerancia definida ( $\text{tol}=0.001$ ). Un aspecto importante para resolver por medio del método de elemento finito es el tamaño de la malla, siendo esta definida por el número de elementos que conforma el sistema. Para las simulaciones locales en ambas configuraciones de empaque se realizó una independencia de malla, encontrando que la cantidad mínima para utilizar debe ser de 6.5 millones de elementos. Por otro lado, para las simulaciones pseudo continuas el número de elementos utilizados fue de 25 mil.

### **3.1. Estructura del lecho empacado**

En la Figura 3.1 se presenta la comparación visual entre los empaquetamientos ordenado y aleatorio, donde para ambos casos se utilizó un total de 56 partículas, las cuales son la cantidad de partículas que caben en los 58 mm del largo del empaque elegido para reducir el tiempo de cómputo. Aunque el empaquetamiento aleatorio presenta similitudes con el empaquetamiento ordenado, la longitud empacada con las partículas fue mayor, lo cual puede resultar significativo para la cuantificación de la fracción vacía en cada sistema. Se ha reportado en la literatura visualizaciones 3D de empaquetamientos del tipo aleatorio, presentando patrones parecido a los que se muestran en la Figura 3.1b (Guo et al., 2019; Shoji et al., 2019).

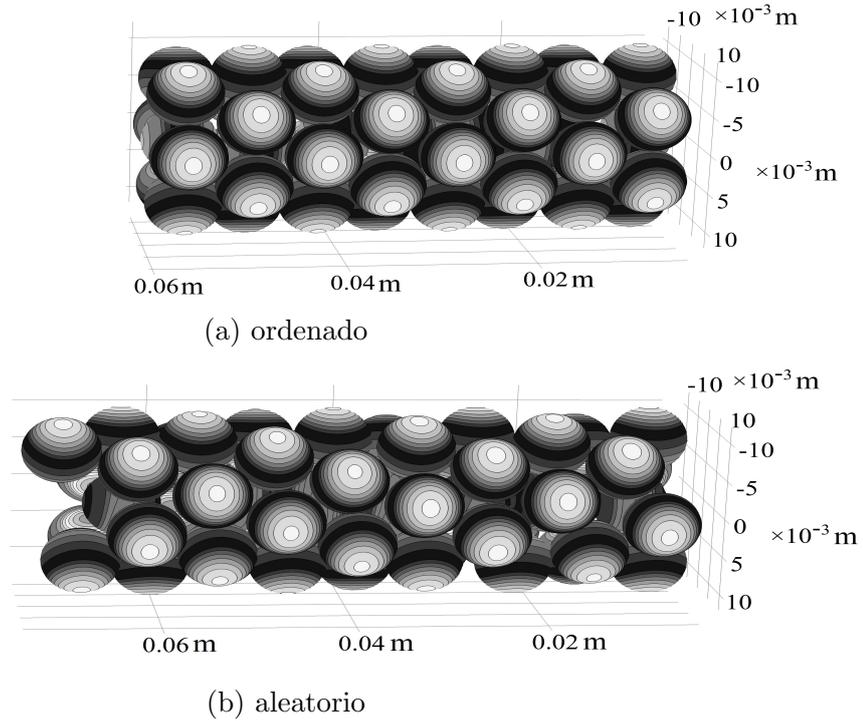


Figura 3.1: Comparación del empaquetamiento de las partículas.

En la Figura 3.2 se muestra la comparación del perfil de fracción vacía en la dirección radial para el empaquetamiento ordenado y aleatorio. Cabe destacar que para el empaquetamiento aleatorio se realizaron tres simulaciones con el fin de observar si en cada una de ellas la diferencia de los perfiles obtenidos fuera considerablemente diferentes entre ellos, los resultados mostraron que no había grandes cambios. Cada punto en esta figura es el promedio en la dirección angular y axial. Asimismo, se presentan los perfiles radiales de la fracción vacía para el empaquetamiento aleatorio a partir de DEM (Theuerkauf et al., 2006; Yang et al., 2016) y una correlación utilizada para lechos empacado con baja relación  $d_t/d_p$  (De Klerk, 2003). En todos los perfiles se observan dos regiones de máximos y mínimos a lo largo de la dirección radial. los máximos valores de fracción vacía se encuentran entre las regiones donde hay contacto partícula-partícula ( $D = 1$ ). Para todas las predicciones, se observa que cerca de la pared ( $D = 0$ ) se tienen un comportamiento similar, sin embargo, para distancias lejos de esta ( $D > 0.5$ ) se muestran diferencias significativas, principalmente para el empaquetamiento ordenado, ya que se tiene una sobreestimación de la fracción vacía con respecto a las predicciones con la configuración aleatoria. Al compararse estas predicciones con las obtenidas con la correlación de De Klerk,

se tiene desviaciones considerables que son más evidentes en la región central del lecho. Por otro lado, las simulaciones realizadas por DEM mostraron mayor parecido al empaquetamiento aleatorio. En general, las predicciones de la fracción vacía son similares a las reportadas en la literatura para lechos empacados con partículas esféricas (Dixon y Partopour, 2020; Eppinger et al., 2011).

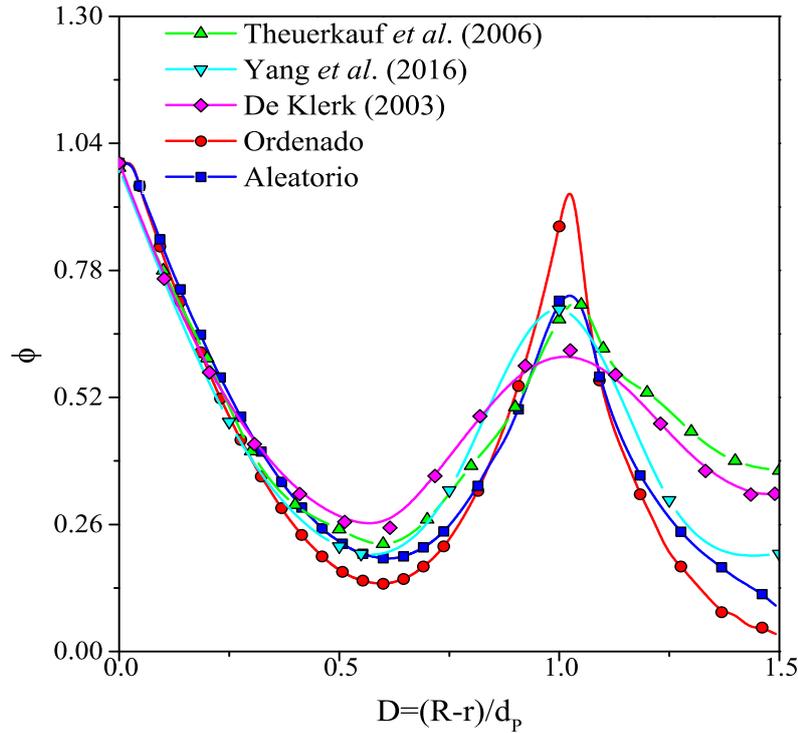


Figura 3.2: Fracción vacía para empaquetamiento ordenado y aleatorio, comparado frente a simulaciones DEM (Yang et al., 2016; Theuerkauf et al., 2006) y la correlación de De Klerk (De Klerk, 2003).

Por otra parte, en la Figura 3.3 se muestran los perfiles de la fracción vacía en la dirección axial y radial. Aquí se observan máximos y mínimos en las posiciones  $r/d_p$  de 0.5 y 1.5, estas posiciones coinciden con las regiones de máximos de la fracción vacía presentadas en la Figura 3.2. La fracción vacía presenta oscilaciones con amplitud de  $0.5d_p$  en la dirección radial y de frecuencia de  $d_p$  en la dirección axial. Finalmente se observa un patrón en el comportamiento de la fracción vacía alrededor del centro del lecho, cerca del intervalo  $2.5-5 d_p$  en dirección axial. En este sentido, se realizó un corte cerca de la zona mencionada para poder observar mejor el efecto del empaque en el transporte de cantidad de movimiento.

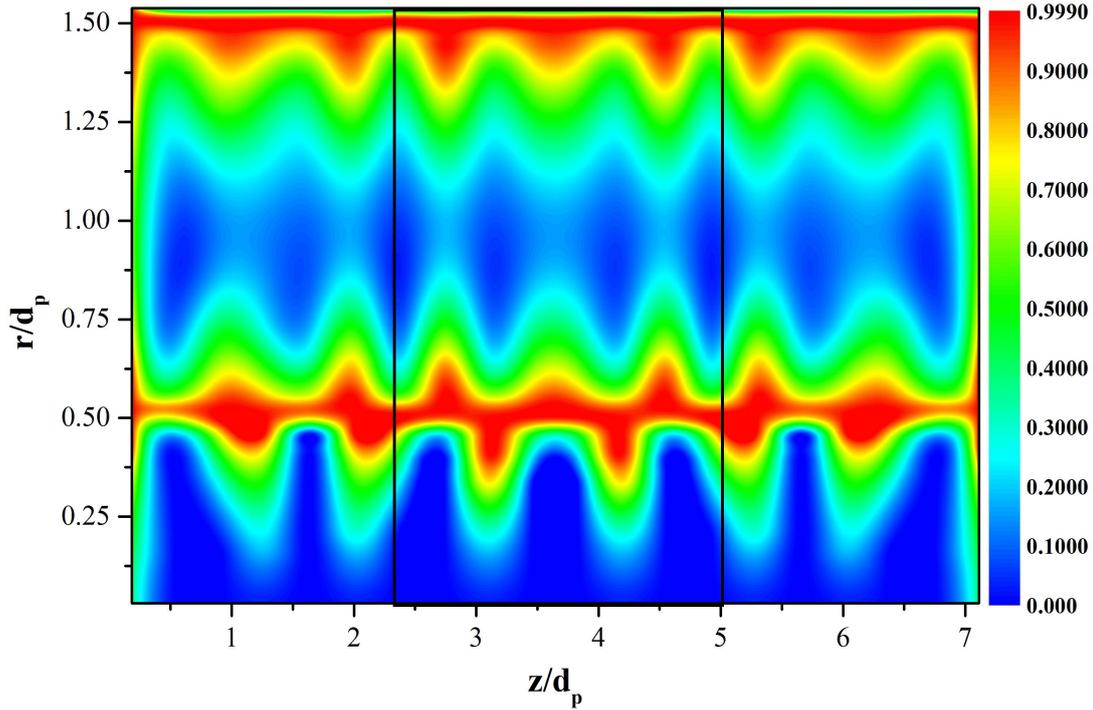


Figura 3.3: Fracción vacía en 2D para el empaque ordenado.

Una forma de evaluar las simulaciones realizadas para los tipos de empaquetamiento utilizado es mediante la descripción de la caída de presión experimental. Por ello, en la Figura 3.4 se muestra una comparación de la caída de presión experimental reportada por López Isunza (1983) con aquella obtenida mediante una correlación (Ergun, 1952) o DNS considerando un empaquetamiento aleatorio y un empaquetamiento ordenado. Los datos experimentales muestran un incremento no lineal la caída de presión, en particular se observan dos pendientes, la primera que va de  $Re_p$  en el intervalo 700-1200 y la segunda en el intervalo  $Re_p$  1200-1600. Para la ecuación de Ergun se reestimaron los valores de las constantes  $\alpha$  y  $\beta$  obteniendo los valores de 293 y 4.4, respectivamente. La predicción de los valores de  $\alpha$  y  $\beta$  presentan un orden de magnitud parecido a los valores reportados por diferentes estimaciones (Castillo-Araiza y Lopez-Isunza, 2008). En esta reestimación el término de Forchheimer, asociado con la contribución inercial y turbulenta, ha tomado mayor peso comparado con el valor nominal establecido por Ergun. Comparando los datos experimentales con las PRS del lecho empacado de manera ordenada se puede observar que para  $Re_p$  pequeños de 700 y 1050 los datos de caída de presión son sobreestimados mientras que los datos son subestimados para número de Reynolds

de partícula mayores a 1050. Cabe resaltar que para el caso donde se consideró un empaquetamiento aleatorio los valores de la caída de presión para  $Re_p$  bajos concuerda mejor con los datos experimentales. Las diferencias presentadas entre las PRS y los datos experimentales son mayores del 15 %, esto se puede deber a la modificación del contacto entre las partículas y partícula-pared para una correcta generación de malla (Reddy y Joshi, 2010).

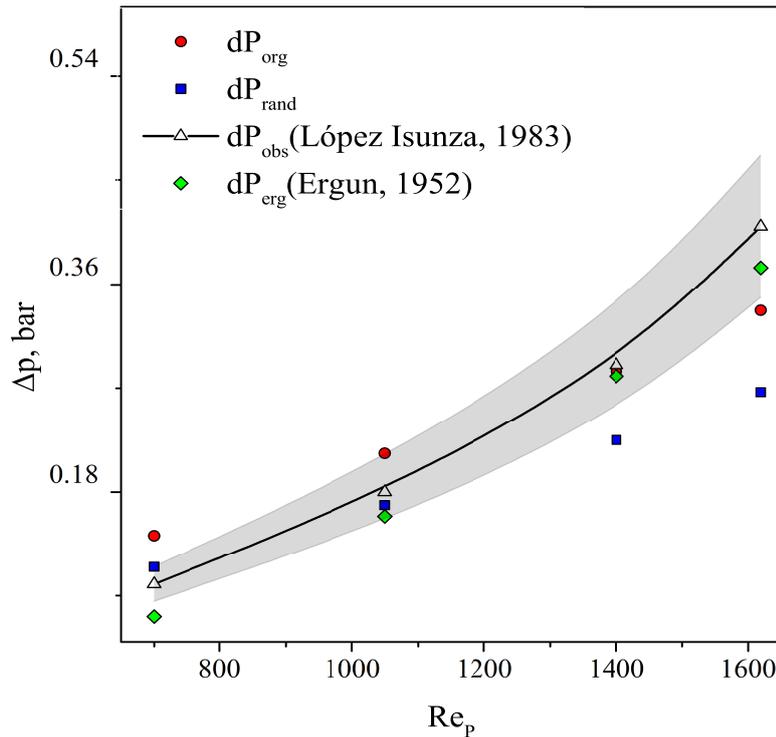


Figura 3.4: Comparación de la caída de presión experimental  $dP_{obs}$  (López Isunza, 1983) con la obtenida mediante simulaciones locales para la configuración ordenada  $dP_{org}$ , aleatoria  $dP_{rand}$  y con una correlación empírica  $dP_{erg}$  (Ergun, 1952).

## 3.2. Simulaciones locales a nivel de DNS

La Figura 3.5 muestra el corte realizado en las celdas de estudio considerando un empaquetamiento ordenado y uno aleatorio. Para comparar los resultados, se seleccionaron planos a un radio de 0.004  $m$  con una longitud de 0.02  $m$ . Ambos planos están ubicados entre la longitud del empaque de 0.02  $m$  y 0.04  $m$ , con el objetivo de no cuantificar los efectos de entrada e identificar las diferencias entre ambas configuraciones. A simple vista se puede notar que, en el empaquetamiento

ordenado, la distribución de las partículas en el corte resulta simétrica mientras que en el empaquetamiento aleatorio muestra mayor desorden en las partículas. Además de no tener la misma simetría que en el empaquetamiento ordenado.

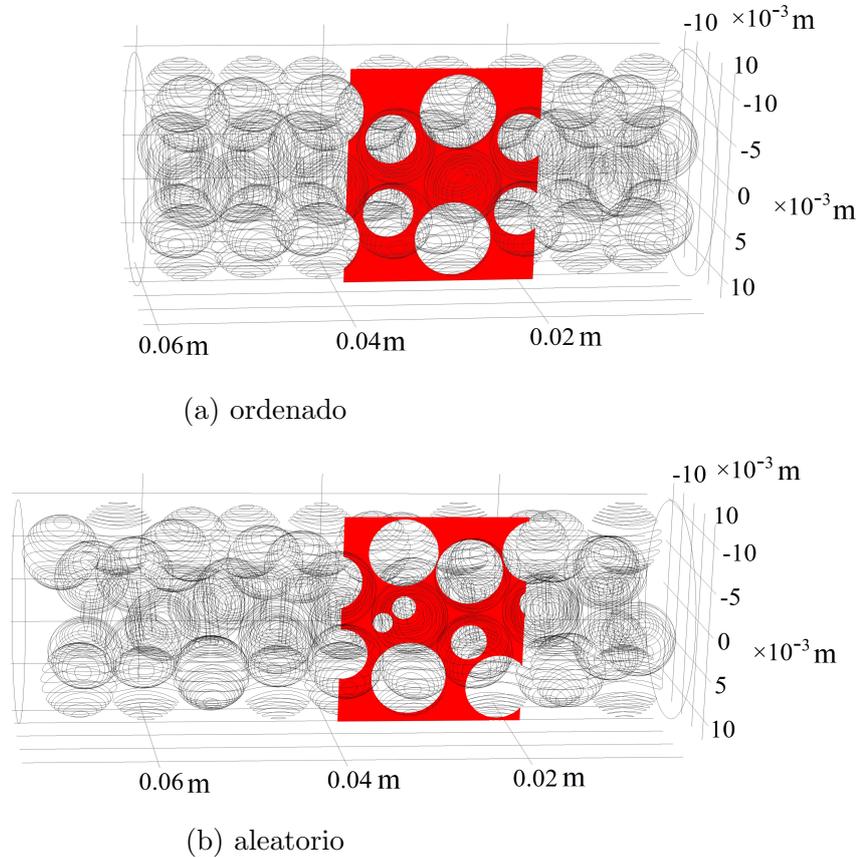


Figura 3.5: Plano del corte en lecho en  $r=0.004m$  los diferentes empaquetamientos.

En la Figura 3.6 se muestra los perfiles locales a nivel DNS del campo de la magnitud de velocidad y las líneas de corriente para un número de Reynolds de partícula de 1400. Debido a la diferencia en el tipo de empaquetamiento, se observaron campos de velocidad diferentes, teniendo magnitudes de velocidad entre 0-19  $m/s$  para las simulaciones con el empaque aleatorio y un rango de 0-16  $m/s$  para la simulación con el empaque ordenado. La velocidad máxima para ambos empaques se presenta principalmente cerca de la pared, debido a las obstrucciones existentes en el contacto partícula-pared que genera el efecto de acanalamiento, como se ha mostrado también en la literatura (Cheng y Yuan, 1997; Huang et al., 2009; Guo et al., 2019). Por otro lado, a partir de las líneas de corriente se observan zonas de recirculación para ambas configuraciones, así como sumideros y fuentes del flujo

generados principalmente entre el contacto de las partículas.

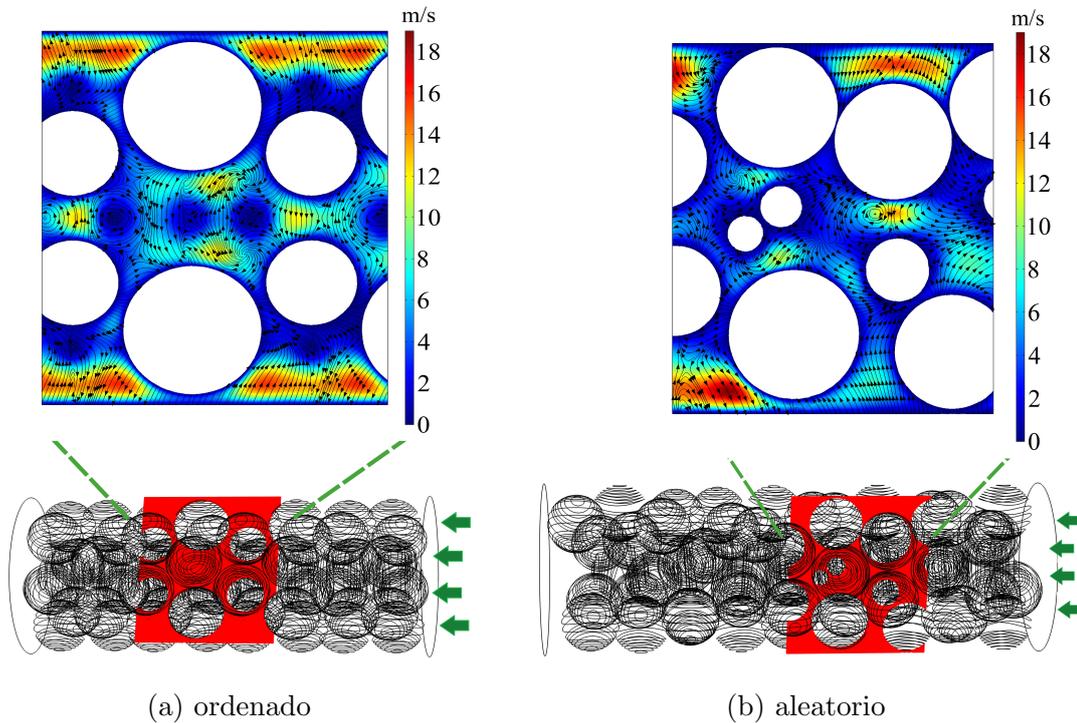


Figura 3.6: Perfiles de la magnitud de la velocidad y líneas de corriente para el empaquetamiento para un  $Re_p = 1400$ .

La Figura 3.7 muestra los perfiles radiales de velocidad promedio superficial para el empaquetamiento ordenado a diferentes  $Re_p$  de 700-5313. El perfil de velocidad promedio presenta dos máximos localizados cerca de la pared ( $r=0.0115 m$ ) mientras que los valores mínimos están localizados en las superficies de las partículas y la pared del lecho. Estos máximos y mínimos concuerdan con la ubicación de los máximos y mínimos de la fracción vacía. Sin embargo, en la región cercana a la pared, el efecto provocado por los esfuerzos debidos a la pared del lecho reduce la velocidad hasta cero, generando gradientes de velocidad prolongados en esta región. Como se muestra en la Figura 3.6, todos los máximos que se encuentran en la región cercana a la pared están ubicados en la misma posición, lo que podría conducir a que las relaciones de esfuerzo de corte se conservan para diferentes valores de velocidad de entrada y que la relación  $u/u_{in}$  podría conservarse a diferentes  $Re_p$ . Además, este resultado indica que la estructura presente en la región cercana de la pared no tiene influencia significativa sobre el perfil de velocidad a  $Re_p$  altos. Por otra parte, los valores máximos de la magnitud de velocidad para cada número de Reynolds de

partícula son de 4  $m/s$  ( $Re_p = 700$ ), 6  $m/s$  ( $Re_p = 1050$ ), 9  $m/s$  ( $Re_p = 1400$ ), 11  $m/s$  ( $Re_p = 1619$ ) y 33  $m/s$  ( $Re_p = 5313$ ).

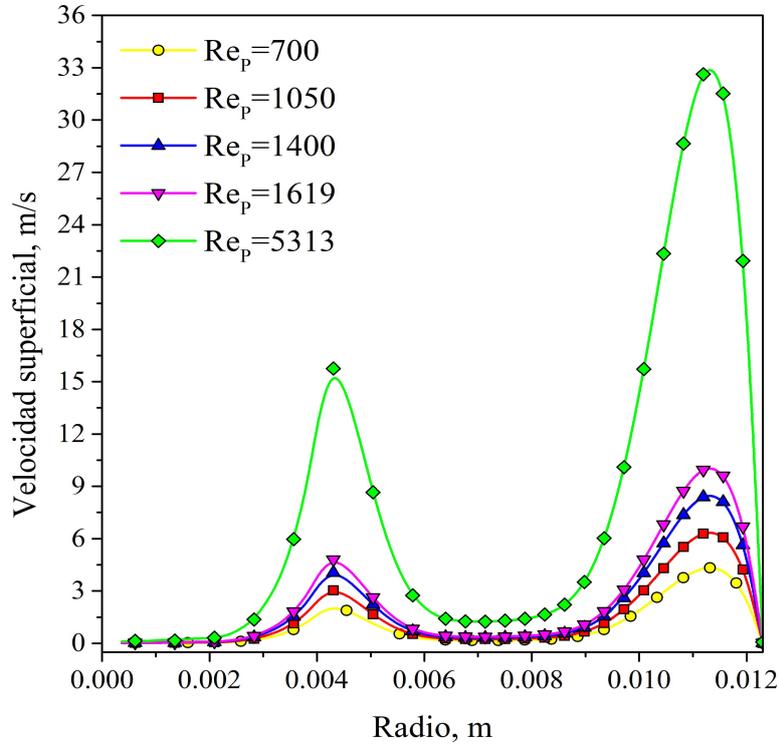


Figura 3.7: Perfiles radiales de la magnitud de la velocidad superficial a diferentes  $Re_p$  (70-5313), simulaciones con empaquetamiento ordenado.

Para mostrar la influencia del empaquetamiento en el perfil de velocidad, en la Figura 3.8 se muestra la comparación de los perfiles radiales de velocidad promedio para el empaquetado de tipo aleatorio y ordenado considerando números de Reynolds de partícula de 700 y 1400. Para la configuración aleatoria, se observan puntos máximos de la velocidad de 3.6  $m/s$  y 7.2  $m/s$ , respectivamente, mientras que para la configuración ordenada los valores alcanzan valores de 4.5  $m/s$  y 8.5  $m/s$ , respectivamente. La diferencia de los valores presentados para ambos empaquetamientos se debe al efecto de la estructura en cada lecho y de los esfuerzos generados por la presencia de las partículas sólidas. El perfil de velocidad determinado para ambas simulaciones ya se ha reportado en la literatura de forma experimental (Winterberg y Tsotsas, 2000)

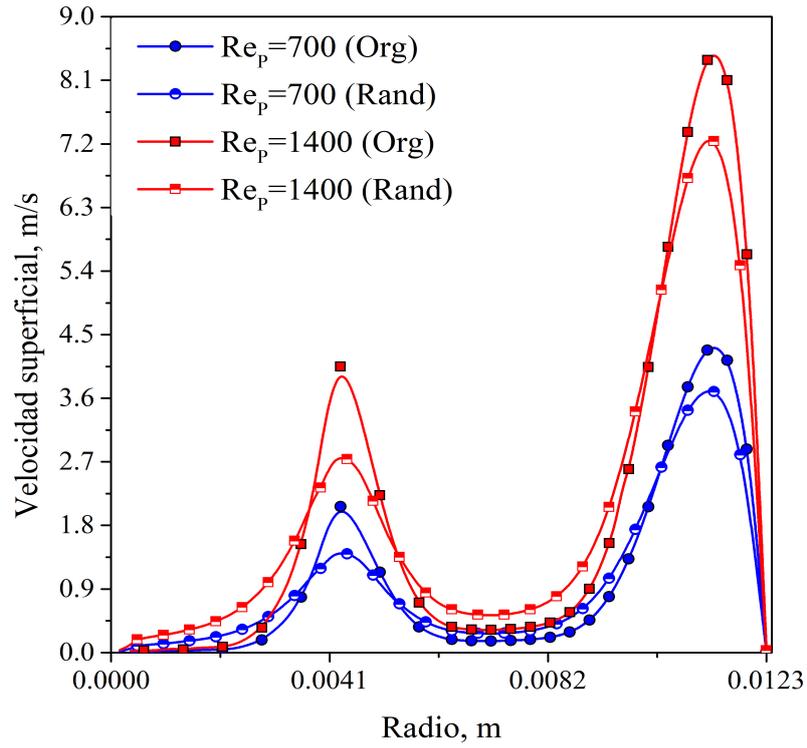


Figura 3.8: Comparación del perfil radial de la magnitud de velocidad superficial promedio para la configuración aleatoria y ordenada para  $Re_p$  de 700 y 1400.

### 3.3. Simulaciones locales a nivel de las RANS

Las Figuras 3.9 y 3.10 se muestran los perfiles de velocidad y líneas de corriente de los modelos de turbulencia  $\kappa-\varepsilon$  y  $\kappa-\omega$  para las dos configuraciones de empaquetamiento, aleatorio y ordenado, a un  $Re_p$  de 1400. Se observa que no hay diferencia considerable entre ambos modelos en cuantos a los perfiles de velocidad y patrón de flujo. Otro punto importante para destacar es que las simulaciones a nivel de las RANS consiguen un patrón de flujo igual que las simulaciones a nivel de las PRS en la mayoría del campo de flujo. Sin embargo, existen diferencias considerables en la región cercana a la pared. Aquí, la magnitud de la velocidad, obtenida al utilizar las RANS es de  $11\text{ m/s}$  mientras que para PRS, la velocidad es cero. Esta diferencia se debe a las condiciones de pared utilizadas en las RANS y su ineficacia en la captura de lo que sucede a nivel de la capa laminar cerca de las superficies sólidas. En ese sentido, para una buena descripción de la pared en las simulaciones RANS, se necesita aplicar un mallado mayor, haciendo que las RANS resulten intratables (Guardo et al., 2005).

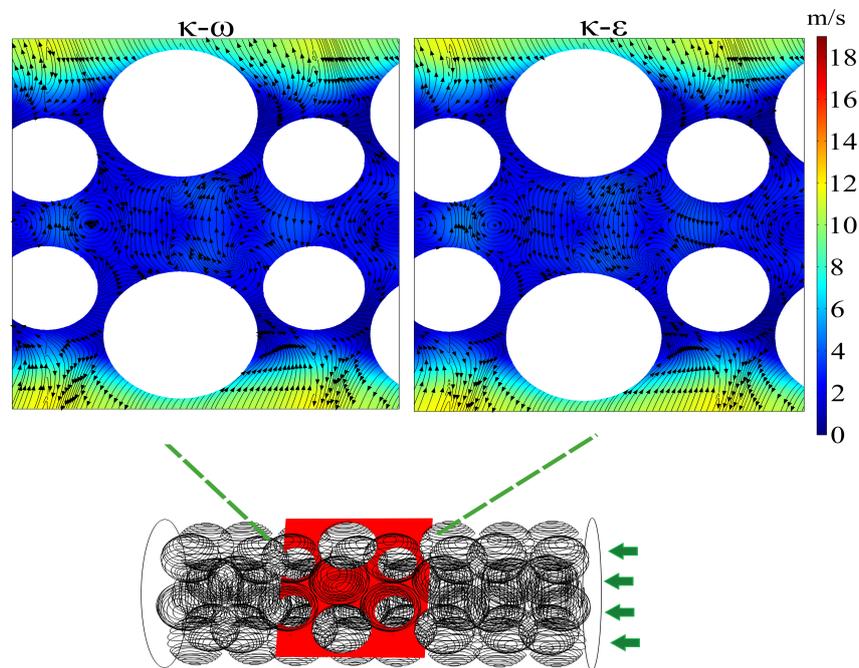


Figura 3.9: Perfiles de la magnitud de la velocidad y líneas de corriente para el empaque con simulaciones RANS para  $Re_p = 1400$  con la configuración ordenada.

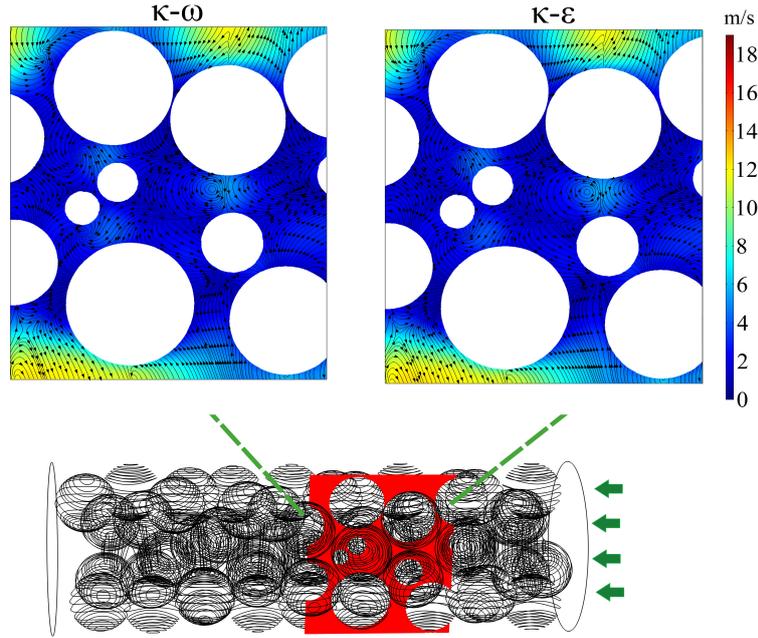


Figura 3.10: Perfiles de la magnitud de la velocidad y líneas de corriente para el empaque con simulaciones RANS para  $Re_p = 1400$  con la configuración aleatoria.

En las Figuras 3.11 y 3.12 se muestran las comparaciones de los perfiles radiales de la magnitud de velocidad promedio de las RANS ( $\kappa-\varepsilon$  y  $\kappa-\omega$ ) y las PRS a  $Re_p$  700 y 1400 considerando ambos tipos de empaquetamientos (aleatorio y ordenado). Los perfiles de la velocidad en la dirección radial siguen la misma tendencia para todas las aproximaciones a los diferentes  $Re_p$ , se predicen similares máximos y mínimos de la magnitud de velocidad. Para el lecho empacado de manera ordenada, los modelos  $\kappa-\varepsilon$  y  $\kappa-\omega$  predicen perfiles de velocidad que se desvían de las PRS, lo cual hace más evidente conforme incrementa el  $Re_p$ . Comparando las RANS con las PRS se pueden observar diferencias en la velocidad de hasta  $1.65 \text{ m/s}$ . Estas diferencias son más evidentes en la región de contacto partícula-partícula localizada en  $r=0.004 \text{ m}$ . En esta zona se presenta un efecto de estrangulamiento que provoca aceleración del fluido, donde las fuerzas inerciales son dominantes. Por otra parte, se encuentran desviaciones de alrededor de  $0.1 \text{ m/s}$  en la región de cambio prolongado de fracción vacía ( $r=0.0078-0.0114\text{m}$ ).

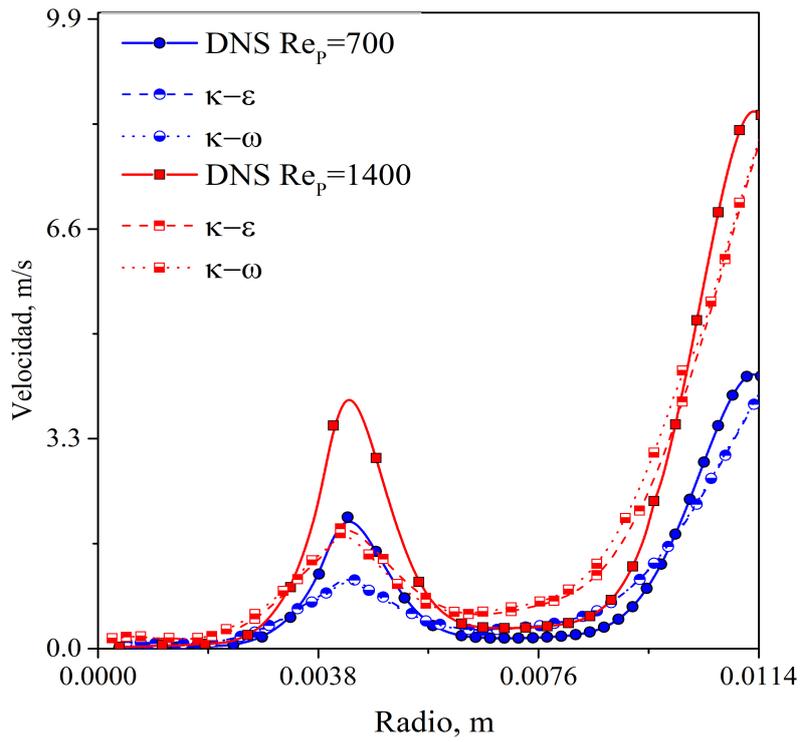


Figura 3.11: Perfiles radiales de la magnitud de velocidad superficial promedio de las simulaciones RANS para  $Re_p$  700 y 1400 el empaquetamiento ordenado

Esto indica que los efectos provocados por la presencia del sólido no son descritos correctamente por las funciones de pared y que está resistencia al movimiento del fluido está siendo subestimada. Para el lecho empacado de manera aleatoria, estas diferencias persisten. Sin embargo, las diferencias encontrada entre las RANS y PRS son menores en comparación con el empaquetamiento ordenado.

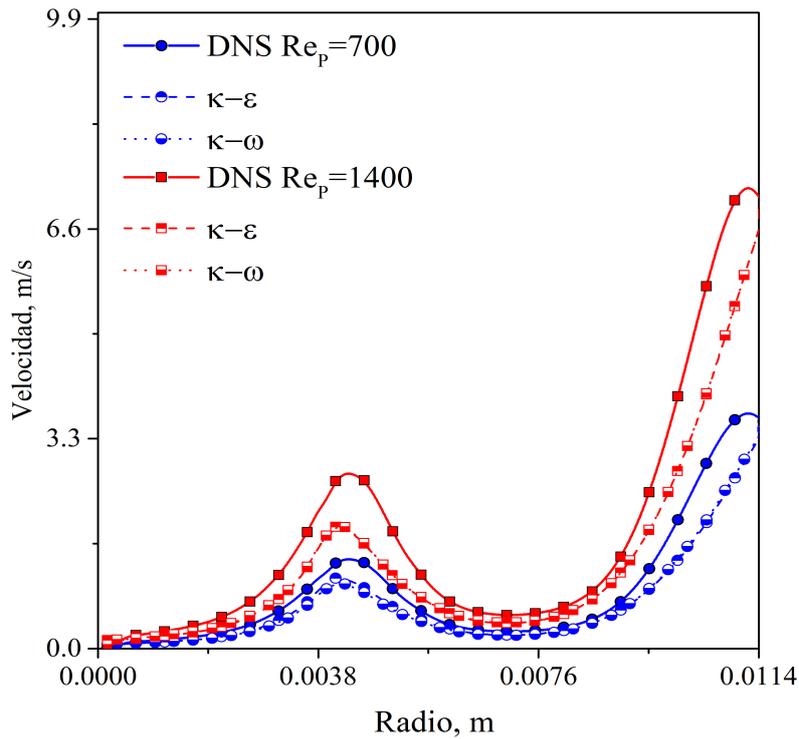


Figura 3.12: Perfiles radiales de la magnitud de velocidad superficial promedio de las simulaciones RANS para  $Re_p$  700 y 1400 para el empaquetamiento aleatorio

Dada la importancia de la viscosidad turbulenta para simulaciones de los modelos pseudo continuos que se presentan más adelante en la Figura 3.13 y 3.14 se muestran los perfiles radiales de la viscosidad turbulenta obtenida con los modelos de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$  y  $\kappa - \omega$  para los dos tipos de empaquetamiento. Para ambos modelos de turbulencia, el orden de magnitud es el mismo que la viscosidad dinámica. Para el modelo de  $\kappa - \omega$ , el valor de la viscosidad turbulenta para Reynolds de partícula de 1400 en ambas configuraciones resulta ser mayor que la viscosidad dinámica y que los valores obtenidos por el modelo  $\kappa - \varepsilon$ . Esto se debe a la forma de la definición de la viscosidad turbulenta. Debido a esto, los modelos de turbulencia usados en las RANS resulta en una aproximación empírica donde se tienen incertidumbres significativas, esencialmente en las predicciones cerca de las superficies sólidas. Otro punto importante es que los valores la viscosidad turbulenta para cada modelo de turbulencia y configuración de empaque presentan diferencias notables a un  $Re_p$  alto, principalmente en el empaquete ordenado, mostrando que este parámetro no es constante en la dirección radial. Sin embargo, para  $Re_p$  bajos, la

viscosidad turbulenta tiende a ser ligeramente constante. Los valores obtenidos de la viscosidad turbulenta mediante las simulaciones locales a nivel RANS mantienen el orden de magnitud reportados en la literatura. Guardo et al. (2005) reportaron la viscosidad turbulenta para un lecho empacado con relación  $d_t/d_p = 3.0$  y para  $Re_p = 100-1000$  con valores de  $1 \times 10^{-5} - 1 \times 10^{-4} \text{Pas}$  en los modelos de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$  y  $\kappa - \omega$ . Aparicio-Mauricio et al. (2017) estimaron el valor de la viscosidad turbulenta para un modelo pseudo continuo, reportaron valores de  $4.6^{-5} \text{Pas}$  para  $Re_p = 700$  y  $4^{-5} \text{Pas}$  para  $Re_p = 1400$ .

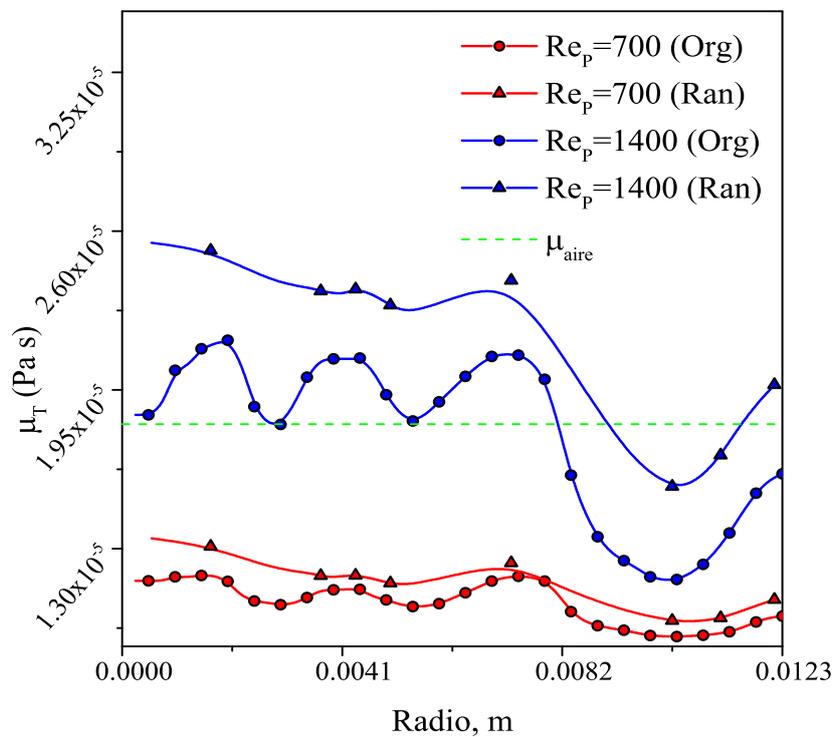


Figura 3.13: Perfiles radiales de la viscosidad turbulenta promedio con empaquetamiento ordenado y aleatorio de simulaciones RANS con el modelo de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$ .

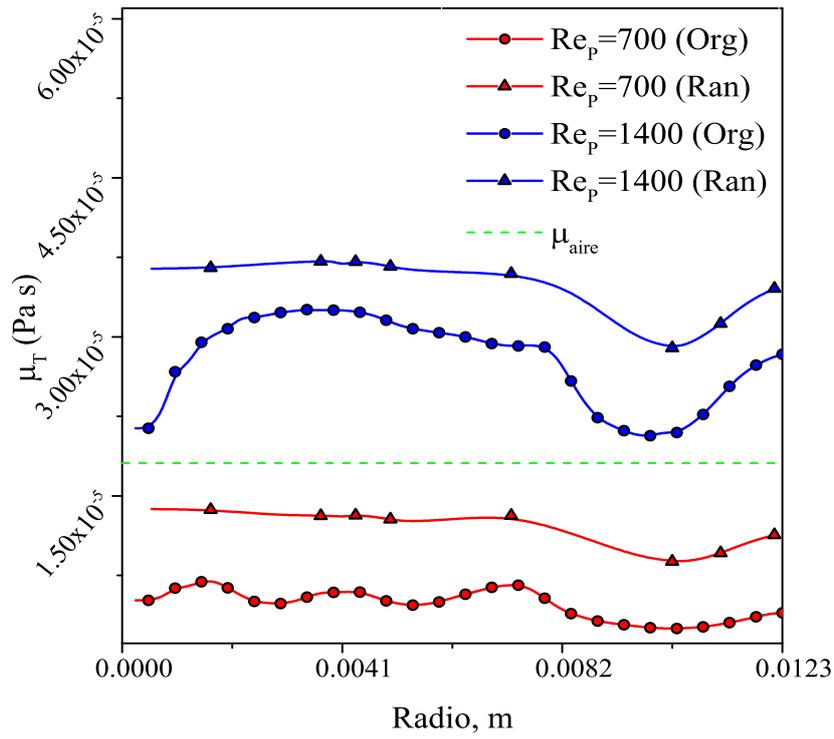


Figura 3.14: Perfiles radiales de la viscosidad turbulenta promedio con empaquetamiento ordenado y aleatorio de simulaciones RANS con el modelo de turbulencia  $\kappa - \omega$ .

### 3.4. Simulaciones considerando los modelos pseudo continuos

El modelo pseudo continuo propuesto se comparó con la ecuaciones de Navier-Stokes-Darcy-Fochheimer que en la literatura representa la propuesta convencional para describir los perfiles de velocidad en lechos empaados con baja  $d_t/d_p$ . Las Figuras 3.15 y 3.16 muestran la comparación del modelo pseudo-continuo convencional (NSDF) con el perfil de velocidad (DNS) a un  $Re_p$  700. Se observa que, en cuando se considera un empaquetamiento ordenado el modelo convencional no logra capturar adecuadamente el comportamiento del perfil radial de la velocidad obtenido mediante las simulaciones a nivel local. Por otro lado, para las simulaciones realizadas con el empaquetamiento aleatorio, se muestra una mejor descripción en la zona cerca de la pared, sin embargo, para la zona alejada de la pared, se observa una sobre estimación de la velocidad en la zona de contacto, partícula-partícula. Las diferencias para ambas configuraciones son causadas por la diferencia en los perfiles radiales de la fracción vacía, ver la Figura 3.2, haciendo notar la importancia de considerar el acomodamiento de las partículas en lechos empaados con baja relación de  $d_t/d_p$ .

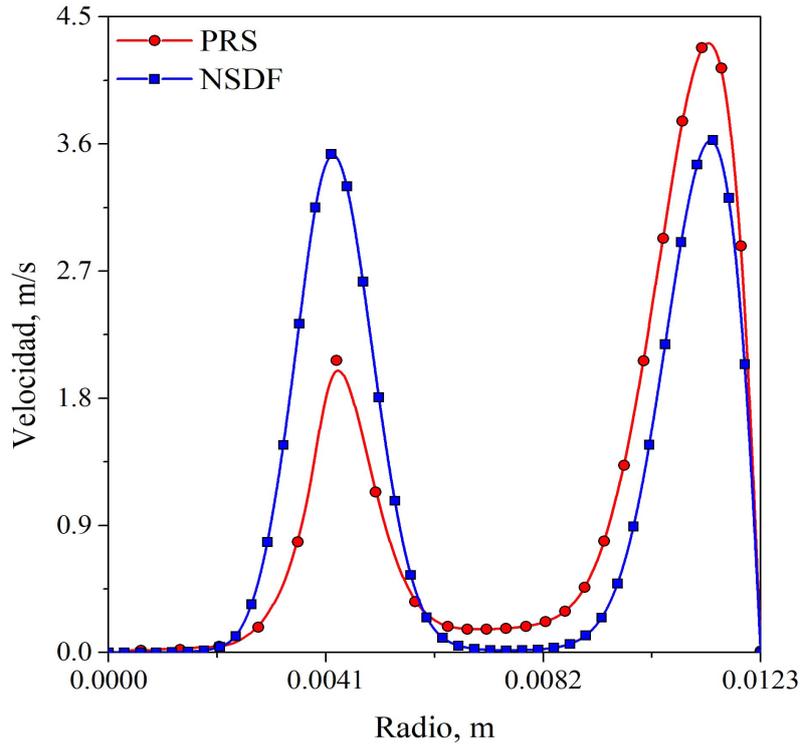


Figura 3.15: Perfiles radiales de la velocidad de las simulaciones convencionales (NSDF) y locales (PRS) para  $Re_p = 700$  con la configuración ordenado.

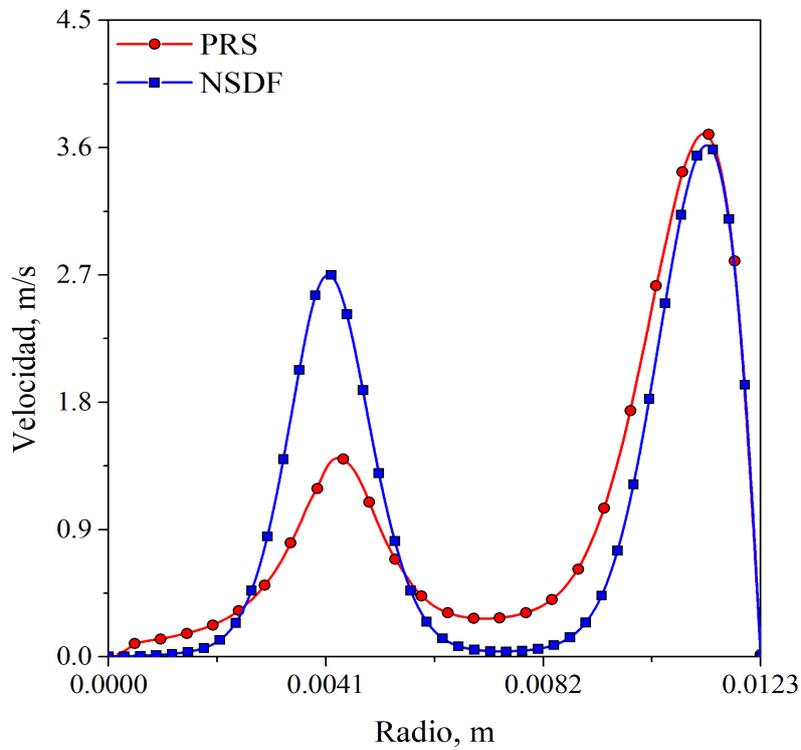


Figura 3.16: Perfiles radiales de la velocidad de las simulaciones convencionales (NSDF) y locales (PRS) para  $Re_p = 700$  con la configuración aleatoria.

De acuerdo con los modelos pseudo continuo tipo Brinkman, se puede considerar la viscosidad efectiva como la suma de la viscosidad turbulenta y la molecular. Tal como se mostró en las Figura 3.13 y 3.14, la adición de la viscosidad turbulenta puede influir en las simulaciones de los modelos pseudo continuos. En ese sentido, las Figuras 3.17 y 3.16 muestran el comportamiento del perfil radial de las simulaciones con los modelos NSDF con la adición de la viscosidad turbulenta en la viscosidad efectiva con ambos modelos de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$  y  $\kappa - \omega$ , para la configuración aleatoria con Reynolds de partícula de 700 y 1400. Se observa que a pesar de presentar comportamientos diferentes en la viscosidad turbulenta para cada modelo de turbulencia utilizado, el comportamiento de ambos en los perfiles radiales para los diferentes  $Re_p$  resultan parecidos. En adición a eso, el comportamiento de la magnitud de velocidad en el contacto partícula-pared se sobreestima a diferencia del modelo sin la adición de la viscosidad turbulenta, por otro lado, en el contacto partícula-partícula los valores se subestiman con respecto al perfil del modelo pseudo-continuo, sin embargo, no logra tener una mejor predicción con respecto a las simulaciones locales.

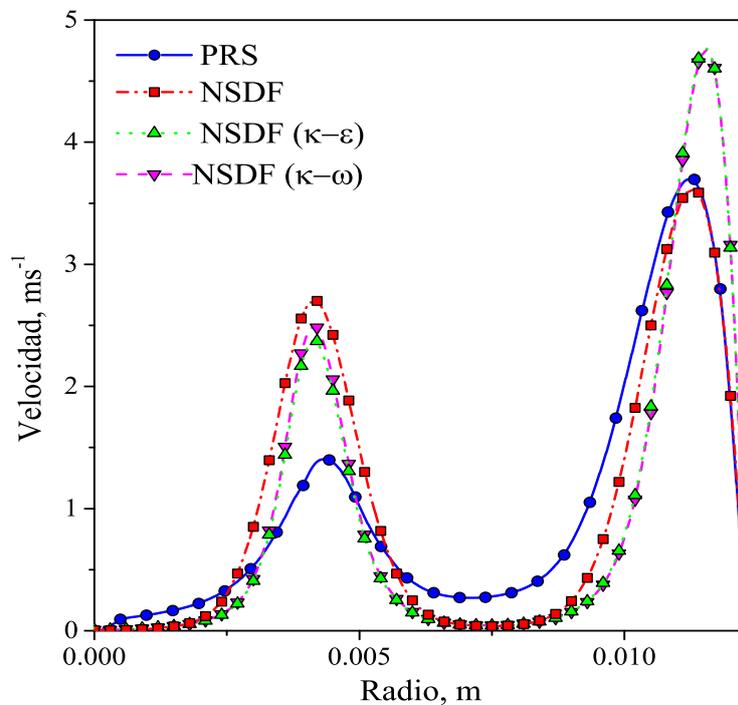


Figura 3.17: Perfiles de velocidad radial comparando los modelos pseudo continuo agregando la viscosidad turbulenta de los modelos de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$  y  $\kappa - \omega$  con la configuración aleatoria para  $Re_p = 700$ .

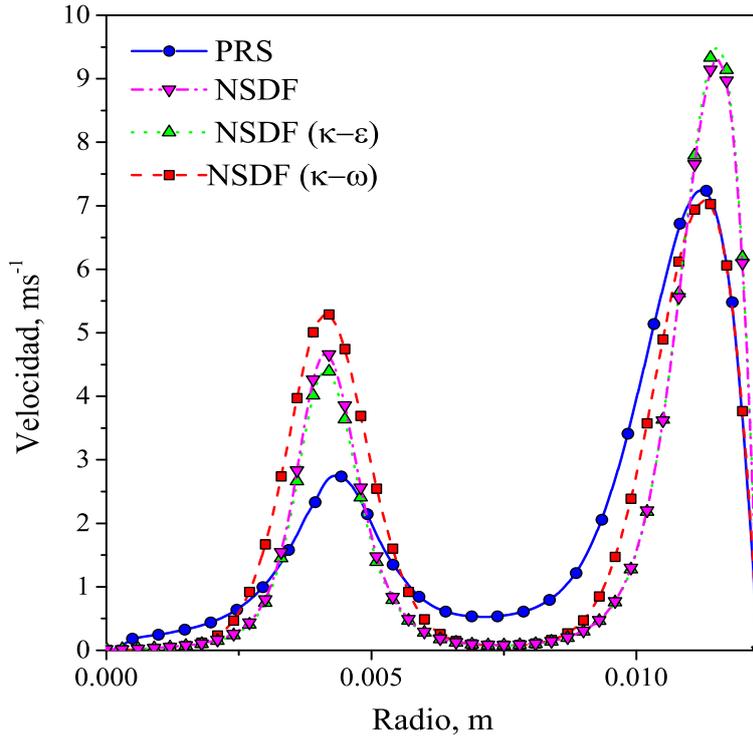


Figura 3.18: Perfiles de velocidad radial comparando los modelos pseudo continuo agregando la viscosidad turbulenta de los modelos de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$  y  $\kappa - \omega$  con la configuración aleatoria para  $Re_p = 1400$ .

Finalmente, los resultados para el modelo pseudo continuo propuesto se presentan únicamente con la configuración aleatoria debido a los resultados obtenidos. La Figura 3.19 muestra los perfiles radiales de las fuerzas en las interacciones solido-fluido obtenidas de las simulaciones locales para Reynolds de partícula de 700 y 1400. Aquí se observa que el comportamiento de las fuerzas resulta inverso de acuerdo con la fracción vacía, siendo el punto más alto de las fuerzas en el centro del empaque, elucidando la mayor resistencia en la zona donde se presenta mayor cantidad de sólido.

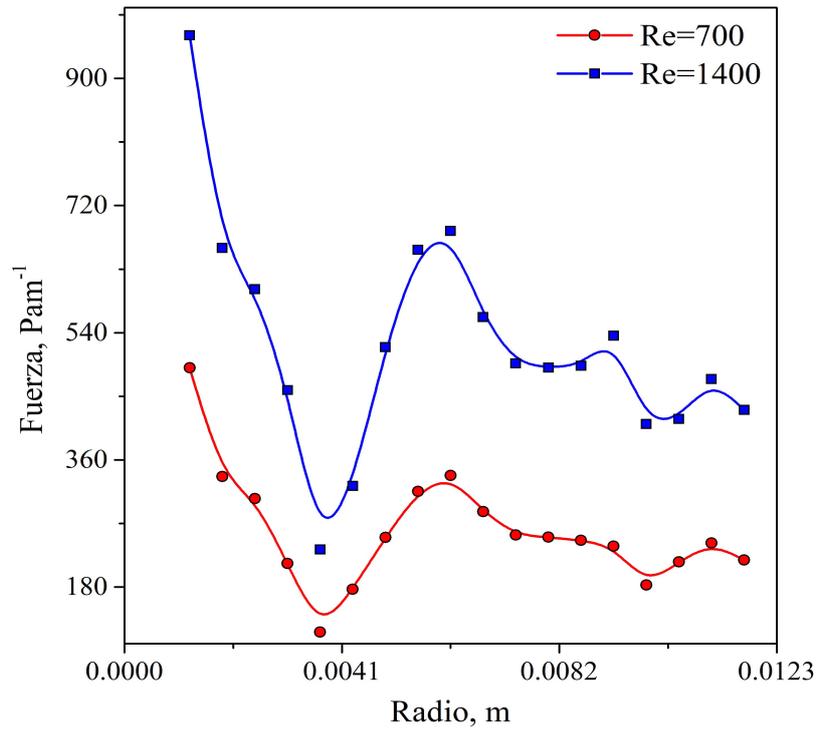


Figura 3.19: Perfiles radiales de las fuerzas calculadas debido a las interacciones sólido-fluido para la configuración aleatoria a  $Re_p$  de 700 y 1400.

La Figura 3.20 muestra los perfiles radiales de la velocidad promedio del modelo pseudo continuo propuesto para la configuración aleatoria a  $Re_p$  700 y 1400. El comportamiento de las simulaciones pseudo continuas resulta mejor que las simulaciones del modelo pseudo continuo convencional, esto da a entender que la influencia de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  a partir de la ecuación de Ergun muestra incertidumbre para capturar las interacciones sólido-fluido. Para la zona cerca de la pared se presentan desviaciones menores del 15 %, siendo iguales estos valores en el contacto partícula-partícula. Sin embargo, en las zonas con mayor cantidad de sólido las diferencias resultan mayores al 15 %

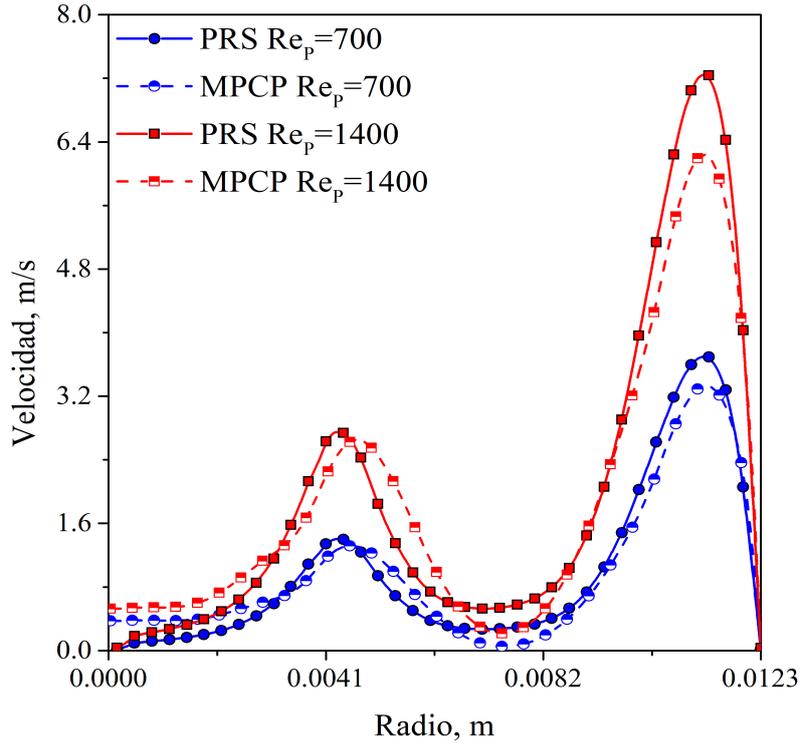


Figura 3.20: Perfiles radiales de la velocidad comparando el modelo pseudo continuo propuesto con las simulaciones locales para el empaquetamiento aleatorio a  $Re_p = 700$

Para el modelo pseudo continuo, se puede notar una subestimación de los perfiles a comparación de las simulaciones locales, además, en el contacto partícula-partícula existe un desfase del punto máximo para ambos modelos. Esto se debe a el cálculo de las fuerzas, ya que se realizó un muestreo de pocos datos, lo cual indica una sensibilidad en el traspaso de datos de los modelos locales al modelo pseudo continuo.

En el presente capítulo, se presentaron los resultados obtenidos de simulaciones locales y pseudo continuas, también de hizo la validez a partir de la caída de presión y la comparación de la configuración del empaque. Los resultados principales de este trabajo fueron la importancia de la determinación de la generación del empaque para un lecho empacado con  $d_t/d_p$  de 3 y la influencia en la fracción vacía, también la necesidad de una correcta selección del modelo de turbulencia, así como la determinación a partir de descripciones locales en donde es posible describir las interacciones que suceden entre el sólido y fluido y aunado a eso, la poca descripción en los modelos pseudo continuos convencionales, de ahí la necesidad de buscar

modelos pseudo continuos que incluyan la menor cantidad de descriptores posibles obtenidos de forma empírica.

# Capítulo 4

## CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

En este trabajo se presentó la propuesta de un modelo pseudo continuo que incluya información de las simulaciones locales, de lo anterior se concluye lo siguiente

- La elección del empaquetamiento de partículas resulta importante para el estudio de un lecho empacado, siendo la configuración ordenada la menos adecuada debido a la inadecuada predicción de la fracción vacía.
- Las simulaciones locales a nivel partícula resuelta lograron capturar la presencia de sumideros y fuentes en la velocidad, indicando un comportamiento turbulento. A pesar de tener el mismo comportamiento para las simulaciones a nivel RANS, estas no lograron una buena predicción en la pared y superficie de las partículas, debido a las funciones de pared que necesitan los modelos de turbulencia empleados. En ese sentido, utilizar un mayor mallado en las simulaciones locales a nivel RANS resulta necesario si se requiere capturar dicha información.
- Para los modelos pseudo continuos, las ecuaciones NSDF en la configuración aleatoria resultaron mejores que las simulaciones en configuración ordenada, sin embargo, la predicción del modelo resulta en una sobreestimación en el contacto partícula-partícula. Aunado a eso, la adición de la viscosidad turbulenta en la viscosidad efectiva no presentó cambios significativos en las viscosidades

turbulentas para ambos modelos de turbulencia, además de no contar con un mejor comportamiento.

- El modelo pseudo continuo propuesto tuvo una mejor predicción que el modelo de NSDF, sin embargo, es necesario tener cuidado en el momento de obtener las fuerzas de las simulaciones locales ya que se presentó una sensibilidad significativa.

Como perspectivas del trabajo se tiene lo siguiente

- Realizar un mejor estudio de las fuerzas obtenidas de los modelos locales a nivel DNS.
- Presentar la propuesta de un pseudo continuo promediado en el tiempo.
- Hacer la evaluación de diferentes modelos de turbulencia en un lecho empacado.

# Bibliografía

- Aparicio-Mauricio, G., Ruiz, R. S., López-Isunza, F., y Castillo-Araiza, C. O. (2017). A simple approach to describe hydrodynamics and its effect on heat and mass transport in an industrial wall-cooled fixed bed catalytic reactor: Odh of ethane on a movnbteo formulation. *Chemical Engineering Journal*, 321:584–599.
- Bale, S., Tiwari, S., Sathe, M., Berrouk, A. S., Nandakumar, K., y Joshi, J. (2018). Direct numerical simulation study of end effects and d/d ratio on mass transfer in packed beds. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 127:234–244.
- Bey, O. y Eigenberger, G. (1997). Fluid flow through catalyst filled tubes. *Chemical Engineering Science*, 52(8):1365–1376.
- Boccardo, G., Del Plato, L., Marchisio, D., Augier, F., Haroun, Y., Ferre, D., y Icardi, M. (2014). Pore-scale simulation of fluid flow in packed-bed reactors via rigid-body simulations and cfd. In *Proceedings of the 10th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and process Industries SINTEF, Trondheim, Norway*, pages 17–19.
- Boussinesq, J. (1877). Theorie de l'écoulement tourbillant. *Mem. Acad. Sci.*, 23:46.
- Bu, S., Yang, J., Zhou, M., Li, S., Wang, Q., y Guo, Z. (2014). On contact point modifications for forced convective heat transfer analysis in a structured packed bed of spheres. *Nuclear Engineering and Design*, 270:21–33.
- Calderbank, P., Chandrasekharan, K., y Fumagalli, C. (1977). The prediction of the performance of packed-bed catalytic reactors in the air-oxidation of o-xylene. *Chemical Engineering Science*, 32(12):1435–1443.

- Calis, H., Nijenhuis, J., Paikert, B., Dautzenberg, F., y Van Den Bleek, C. (2001). Cfd modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing. *Chemical Engineering Science*, 56(4):1713–1720.
- Castillo-Araiza, C., Jiménez-Islas, H., y López-Isunza, F. (2007). Heat-transfer studies in packed-bed catalytic reactors of low tube/particle diameter ratio. *Industrial & engineering chemistry research*, 46(23):7426–7435.
- Castillo-Araiza, C. y López-Isunza, F. (2010). Modeling the partial oxidation of o-xylene in an industrial packed-bed catalytic reactor: the role of hydrodynamics and catalyst activity in the heat transport. *Industrial & engineering chemistry research*, 49(15):6845–6853.
- Castillo-Araiza, C. O. y Lopez-Isunza, F. (2008). Hydrodynamic models for packed beds with low tube-to-particle diameter ratio. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 6.
- Caulkin, R., Jia, X., Xu, C., Fairweather, M., Williams, R. A., Stitt, H., Nijemeisland, M., Aferka, S., Crine, M., Léonard, A., et al. (2009). Simulations of structures in packed columns and validation by x-ray tomography. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 48(1):202–213.
- Cheng, Z.-M. y Yuan, W.-K. (1997). Estimating radial velocity of fixed beds with low tube-to-particle diameter ratios. *AIChE journal*, 43(5):1319–1324.
- De Klerk, A. (2003). Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratio. *AIChE journal*, 49(8):2022–2029.
- Dixon, A. G., DiCostanzo, M. A., y Soucy, B. A. (1984). Fluid-phase radial transport in packed beds of low tube-to-particle diameter ratio. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 27(10):1701–1713.
- Dixon, A. G. y Nijemeisland, M. (2001). Cfd as a design tool for fixed-bed reactors. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 40(23):5246–5254.

- Dixon, A. G., Nijemeisland, M., y Stitt, E. H. (2013). Systematic mesh development for 3d cfd simulation of fixed beds: Contact points study. *Computers & Chemical Engineering*, 48:135–153.
- Dixon, A. G. y Partopour, B. (2020). Computational fluid dynamics for fixed bed reactor design. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, 11:109–130.
- Dixon, A. G. y van Dongeren, J. H. (1998). The influence of the tube and particle diameters at constant ratio on heat transfer in packed beds. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 37(1):23–32.
- Donaubauer, P. J., Schmalhorst, L., y Hinrichsen, O. (2019). 2d flow fields in fixed-bed reactor design: a robust methodology for continuum models. *Chemical Engineering Science*, 208:115137.
- Eisfeld, B. y Schnitzlein, K. (2001). The influence of confining walls on the pressure drop in packed beds. *Chemical engineering science*, 56(14):4321–4329.
- Eisfeld, B. y Schnitzlein, K. (2005). A new pseudo-continuous model for the fluid flow in packed beds. *Chemical engineering science*, 60(15):4105–4117.
- Eppinger, T., Seidler, K., y Kraume, M. (2011). Dem-cfd simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios. *Chemical Engineering Journal*, 166(1):324–331.
- Ergun, S. (1952). Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48:89–94.
- Flaischlen, S. y Wehinger, G. D. (2019). Synthetic packed-bed generation for cfd simulations: Blender vs. star-ccm+. *ChemEngineering*, 3(2):52.
- Freund, H., Zeiser, T., Huber, F., Klemm, E., Brenner, G., Durst, F., y Emig, G. (2003). Numerical simulations of single phase reacting flows in randomly packed fixed-bed reactors and experimental validation. *Chemical engineering science*, 58(3-6):903–910.
- Froment, G. F., Bischoff, K. B., y De Wilde, J. (1990). *Chemical reactor analysis and design*, volume 2. Wiley New York.

- Galan, O., Gomes, V. G., Romagnoli, J., y Ngian, K. F. (2009). Selective oxidation of ethylene in an industrial packed-bed reactor modelling, analysis and optimization. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 7(1).
- Gimeno, M., Gascón, J., Téllez, C., Herguido, J., y Menendez, M. (2008). Selective oxidation of o-xylene to phthalic anhydride over v2o5/tio2 kinetic study in a fluidized bed reactor. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 47(9-10):1844–1852.
- Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M., Recasens, F., y Egusquiza, E. (2005). Influence of the turbulence model in cfd modeling of wall-to-fluid heat transfer in packed beds. *Chemical Engineering Science*, 60(6):1733–1742.
- Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M. A., Recasens, F., y Egusquiza, E. (2004). Cfd flow and heat transfer in nonregular packings for fixed bed equipment design. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 43(22):7049–7056.
- Guo, Z., Sun, Z., Zhang, N., Cao, X., y Ding, M. (2019). Mean porosity variations in packed bed of monosized spheres with small tube-to-particle diameter ratios. *Powder Technology*, 354:842–853.
- Guo, Z., Sun, Z., Zhang, N., Ding, M., y Liu, J. (2017). Pressure drop in slender packed beds with novel packing arrangement. *Powder Technology*, 321:286–292.
- Hinze, J. y Uberoi, M. (1960). Turbulence. *Journal of Applied Mechanics*, 27(3):601.
- Huang, A. Y., Huang, M. Y., Chen, R.-H., y Capart, H. (2009). Influence of aspect ratio on the distribution of porosity and velocity in columns of spheres. *Journal of the Chinese Institute of Engineers*, 32(3):421–426.
- Jafari, A., Zamankhan, P., Mousavi, S., y Pietarinen, K. (2008). Modeling and cfd simulation of flow behavior and dispersivity through randomly packed bed reactors. *Chemical Engineering Journal*, 144(3):476–482.
- Koekemoer, A. y Luckos, A. (2015). Effect of material type and particle size distribution on pressure drop in packed beds of large particles: Extending the ergun equation. *Fuel*, 158:232–238.

- Kolmogorov, A. N. (1941). The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Cr Acad. Sci. URSS*, 30:301–305.
- Laguerre, O., Amara, S. B., Alvarez, G., y Flick, D. (2008). Transient heat transfer by free convection in a packed bed of spheres: Comparison between two modelling approaches and experimental results. *Applied Thermal Engineering*, 28(1):14–24.
- Lauder, B. E. y Spalding, D. B. (1972). *Mathematical models of turbulence*. Number BOOK. Academic press.
- Linsong, J., Hongsheng, L., Shaoyi, S., Maozhao, X., Dan, W., y Minli, B. (2018). Pore-scale simulation of flow and turbulence characteristics in three-dimensional randomly packed beds. *Powder Technology*, 338:197–210.
- López, E., Heracleous, E., Lemonidou, A. A., y Borio, D. O. (2008). Study of a multitubular fixed-bed reactor for ethylene production via ethane oxidative dehydrogenation. *Chemical Engineering Journal*, 145(2):308–315.
- López Isunza, H. F. (1983). *Steady state and dynamic behaviour of an industrial scale fixed bed catalytic reactor*. Tesis doctoral, Universidad de Londres.
- Moghaddam, E. M., Foumeny, E. A., Stankiewicz, A. I., y Padding, J. T. (2018). Rigid body dynamics algorithm for modeling random packing structures of nonspherical and nonconvex pellets. *Industrial & engineering chemistry research*, 57(44):14988–15007.
- Molina-Herrera, F., Castillo-Araiza, C., Jiménez-Islas, H., y López-Isunza, F. (2018). The effect of turbulence on momentum and heat transport in packed beds with low tube to particle diameter ratio. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 16(11).
- Nijemeisland, M. y Dixon, A. G. (2001). Comparison of cfd simulations to experiment for convective heat transfer in a gas–solid fixed bed. *Chemical Engineering Journal*, 82(1-3):231–246.
- Nijemeisland, M. y Dixon, A. G. (2004). Cfd study of fluid flow and wall heat transfer in a fixed bed of spheres. *AIChE journal*, 50(5):906–921.

- Partopour, B. y Dixon, A. G. (2017). An integrated workflow for resolved-particle packed bed models with complex particle shapes. *Powder Technology*, 322:258–272.
- Prandtl, L. y Wieghardt, K. (1945). Über ein neues formelsystem für die ausgebildete turbulenz. *math. Phys. Klasse*, page 6.
- Reddy, R. K. y Joshi, J. B. (2010). Cfd modeling of pressure drop and drag coefficient in fixed beds: Wall effects. *Particuology*, 8(1):37–43.
- Shoji, E., Yamagiwa, K., Kubo, M., Tsukada, T., Takami, S., Sugimoto, K., Ito, D., Saito, Y., y Teratani, S. (2019). Flow visualization of heavy oil in a packed bed using real-time neutron radiography. *Chemical Engineering Science*, 196:425–432.
- Soulaine, C. y Quintard, M. (2014). On the use of a darcy–forchheimer like model for a macro-scale description of turbulence in porous media and its application to structured packings. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 74:88–100.
- Theuerkauf, J., Witt, P., y Schwesig, D. (2006). Analysis of particle porosity distribution in fixed beds using the discrete element method. *Powder Technology*, 165(2):92–99.
- Whitaker, S. (1968). *Introduction to fluid mechanics*. Prentice-Hall.
- Whitaker, S. (1996). The forchheimer equation: a theoretical development. *Transport in Porous media*, 25(1):27–61.
- Winterberg, M. y Tsotsas, E. (2000). Impact of tube-to-particle-diameter ratio on pressure drop in packed beds. *AIChE Journal*, 46(5):1084–1088.
- Yang, J., Wu, J., Zhou, L., y Wang, Q. (2016). Computational study of fluid flow and heat transfer in composite packed beds of spheres with low tube to particle diameter ratio. *Nuclear Engineering and Design*, 300:85–96.
- Zhang, M., Dong, H., y Geng, Z. (2018). Computational study of flow and heat transfer in fixed beds with cylindrical particles for low tube to particle diameter ratios. *Chemical Engineering Research and Design*, 132:149–161.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00145

Matrícula: 2183802335

Análisis de la dinámica de fluidos en régimen turbulento en un lecho empacado con baja relación de  $dt/dp$

Con base en la Legislación de la Universidad Autónoma Metropolitana, en la Ciudad de México se presentaron a las 13:00 horas del día 10 del mes de junio del año 2021 POR VÍA REMOTA ELECTRÓNICA, los suscritos miembros del jurado designado por la Comisión del Posgrado:

DR. HECTOR FELIPE LOPEZ ISUNZA  
DR. LUIS ALBERTO RICARDEZ SANDOVAL  
DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA



Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS (INGENIERIA QUIMICA)

DE: DALIA NAYELI DORANTES LANDA

DALIA NAYELI DORANTES LANDA  
ALUMNA

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

APROBAR.

REVISÓ

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. HECTOR FELIPE LOPEZ ISUNZA

VOCAL

DR. LUIS ALBERTO RICARDEZ SANDOVAL

SECRETARIO

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

El presente documento cuenta con la firma –autógrafa, escaneada o digital, según corresponda- del funcionario universitario competente, que certifica que las firmas que aparecen en esta acta – Temporal, digital o dictamen- son auténticas y las mismas que usan los c.c. profesores mencionados en ella