

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

Grupo de Procesos de Transporte y Reacción en Sistemas Multifásicos.

“Efecto de la turbulencia sobre la hidrodinámica en un lecho empacado con baja relación de diámetro de tubo-partícula”

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN CIENCIAS (INGENIERÍA QUÍMICA).

Presenta: I.Q. José Antonio Ayala Romero

Asesores:

**Dr. Carlos Omar Castillo Araiza
UAM Iztapalapa. México**

**Dr. Abhishek Dutta
Ku-Leuven Group T. Bélgica**

**EFFECTO DE LA TURBULENCIA
SOBRE LA HIDRODINÁMICA EN UN
LECHO EMPACADO CON BAJA RELACIÓN
DE DIÁMETRO DE TUBO-PARTÍCULA**
Tesis que presenta
I.Q. José Antonio Ayala Romero
Para obtener el grado de
Maestro en Ciencias (Ingeniería Química)

ASESORES:

DR. CARLOS OMAR CASTILLO ARAIZA
UAM IZTAPALAPA, MÉXICO

DR. ABHISHEK DUTTA
KU-LEUVEN GROUP T. BÉLGICA

SINODALES:

PRESIDENTE Dr. RICHARD STEVE RUIZ MARTÍNEZ

SECRETARIO Dr. CARLOS OMAR CASTILLO ARAIZA

VOCAL Dra. MIRIAM NOEMÍ MORENO MONTIEL



Agradecimientos.

Agradezco a:

- Dios por permitirme llegar hasta aquí con salud e iluminar mi mente para seguir con el gusto de estudiar y trabajar.
- Mis padres, hermana y cuñado, por apoyarme en todo lo que hago y hasta en lo que no hago. Así como los consejos que me dan.
- Mis amigos de la universidad, en especial a mi hermano David. Así como a las personas que he conocido a lo largo de mi vida escolar.
- A mis maestros de la UAM, a mis sinodales del proyecto, pero en especial al Dr. Omar, que además de ser mi profesor y asesor, también lo considero un amigo que confía en mí y en mi trabajo.
- Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) sobre el proyecto No. 181104 y por su apoyo con la beca que permitió la realización de este trabajo de investigación y la obtención del grado de Maestro en Ciencias.

José Antonio Ayala R.

Resumen

En este trabajo se estudió el efecto de la turbulencia en la hidrodinámica en un lecho empacado con baja relación diámetro de tubo-partícula de 3.048 en un régimen de Re_p 702, 1050 y 1405. Para esto, el lecho empacado se modeló siguiendo dos aproximaciones. En la primera se predijeron los perfiles de velocidad considerando al sistema como pseudo-continuo y en la segunda se predijeron los perfiles de velocidad de manera local (aproximación local) mediante la dinámica de fluidos computacionales (CFD). En estas aproximaciones las predicciones se realizaron con dos clases de modelos, las ecuaciones de Navier-Stokes (NS) y las ecuaciones RANS (Reynolds averaged Navier Stokes) acopladas a dos modelos de turbulencia, $k-\varepsilon$ o $k-\omega$. Las ecuaciones RANS, se obtuvieron a partir de las ecuaciones de NS que fueron temporalmente promediadas.

Los principales resultados en este estudio sugieren que para modelar la hidrodinámica se usen las ecuaciones RANS pero que la viscosidad turbulenta sea un parámetro efectivo que sea estimado mediante el uso de observaciones de velocidad experimentales u obtenidas mediante la aproximación local, debido a la mala predicción de los modelos de turbulencia siguiendo la aproximación del pseudo-continuo lo que se relaciona con los términos heurísticos que se emplean para considerar la generación de turbulencia debido a la presencia del sólido en el lecho empacado.

Índice General

Nomenclatura.....	7
Índice de Tablas	9
Índice de Figuras	10
Capítulo 1	12
Introducción.....	12
Capítulo 2	15
Generalidades.....	15
2.1. Teoría de la turbulencia	15
2.4. La ecuación de Reynolds.....	18
2.5. La teoría de longitud de mezclado	19
2.6. Modelo de turbulencia k- ϵ y k- ω	23
2.7. Métodos numéricos de solución	24
Capítulo 3	25
Antecedentes	25
Capítulo 4	31
Hipótesis y objetivos	31
4.1. Hipótesis.....	31
4.2. Objetivos.....	31
4.2.1 Objetivo general	31
4.4. Particulares.....	31
Capítulo 5	32
Metodología	32
5.1. Sistema a modelar.....	32
5.2. Modelos hidrodinámicos	34
5.2.2. Perfiles de fracción vacía.....	36
5.3. Aproximación del pseudo-continuo.....	37
5.3.1. Ecuaciones RANS-E	37
5.3.2. Modelo k- ϵ	38

5.3.3. Modelo $k-\omega$	39
5.4 Aproximación Local	41
5.4.1. Ecuaciones RANS.....	41
5.4.2. Modelo $k-\varepsilon$	42
5.4.3. Modelo $k-\omega$	43
Capítulo 6	44
Resultados y discusiones.....	44
6.1. Aproximación del pseudo-continuo	44
6.2. Aproximación local.....	55
6.3. Aproximación del pseudo-continuo versus aproximación local.....	62
Capítulo 7	65
Conclusiones	65
Referencias	67
Apéndice A.....	72
Apéndice B.....	82

Nomenclatura

a_v	Área por unidad del volumen de sólido	m^{-1}
Da	Coefficiente de Darcy	
D	Diámetro del lecho empacado	m
d_t	Diámetro de tubo	m
d_p	Diámetro de la partícula	m
Fr	Coefficiente de Forchheimer	
g	Vector de aceleración de gravedad	$m.s^{-2}$
G	Flujo másico en el lecho	$kg.m^{-2}.s^{-1}$
k	Tensor de permeabilidad	m^2
k, k_s	Permeabilidad en el lecho	m^2
L	Longitud del lecho	m
P	Presión	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
Re	Número de Reynolds	
Re_p	Número de Reynolds de partícula en el lecho	
R_t	Radio del tubo	m
R	Posición radial en el lecho	m
U	Vector de la velocidad intersticial	$m.s^{-1}$
V, v	Velocidad superficial	$m.s^{-1}$
V	Vector de velocidad superficial	$m.s^{-1}$
V_z	Velocidad superficial axial	$m.s^{-1}$

V_r	Velocidad superficial radial	$m.s^{-1}$
V_o	Velocidad superficial a la entrada del lecho	$m.s^{-1}$
V_p	Volumen superficial de la partícula	m^3
μ_{ef}	Viscosidad efectiva	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
μ_f	Viscosidad del fluido	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ν_f	Viscosidad cinemática del fluido	$m^2.s^{-1}$
α	Factor geométrico que afecta las resistencias viscosas	
β	Factor geométrico que afecta las resistencias inerciales	
ε	Fracción vacía en un lecho	
$\bar{\varepsilon}$	Fracción vacía promedio del lecho	
∇^2	Operador de laplace	
ρ_f	Densidad del fluido	$kg.m^{-3}$
ρ_s	Densidad del sólido	$kg.m^{-3}$
ρ_b	Densidad del lecho	$kg_{sólido}.m^{-3}$
ε	Disipación viscosa	m^2/s^3
ω	Disipación viscosa turbulenta	$1/s$
k	Energía cinética turbulenta	m^2/s^2
μ_t	Viscosidad turbulenta	$Pa.s$
CFD	Dinámica de fluidos computacional	

Índice de Tablas

Página

Tabla 2.1: Modelos utilizados para describir turbulencia	21
Tabla 5.1: Datos geométricos y físicos del lecho empacado	31
Tabla 5.2: Casos de estudios a las que se quieren los perfiles velocidad	32

Índice de Figuras	Página
Figura 5.1: Fotografía que muestra el arreglo de las esferas de catalizador en el interior de un tubo con características geométricas iguales a aquéllas que se representan en la Tabla 5.1	31
Figura 6.1: a) Lecho empacado a simular con una relación de d_t/d_p igual a 3.048 y b) predicciones de la fracción efectiva utilizando la correlación empírica de A. de-Klerk	43
Figura 6.2: Caída de presión en el lecho empacado estudiado	43
Figura 6.3: Perfil de velocidad axial en función del radio del lecho empacado a diferentes Re_p (702, 1053 y 1405) utilizando la aproximación del pseudo-continuo con las ecuaciones de NS-E.	44
Figura 6.4: Componente de velocidad axial como función del radio y longitud del lecho empacado utilizando las ecuaciones de NS-E. a) Re_p 702, b) Re_p 1053 y c) Re_p 1405	45
Figura 6.5: Predicciones de la velocidad axial en función del radio del lecho empacado utilizando las ecuaciones RANS-E y $k-\varepsilon$ a Re_p de 702, 1053 y 1405	47
Figura 6.6: Perfil de velocidad de la componente de velocidad axial como función del radio y longitud del lecho empacado utilizando las ecuaciones de RANS-E y $k-\varepsilon$ a: a) Re_p 702, b) Re_p 1053 y c) Re_p 1405	48
Figura 6.7: Perfil de velocidad axial como función del radio del lecho empacado utilizando las ecuaciones de RANS-E con $k-\omega$ a Re_p 702, 1053 y 1405	49
Figura 6.8: Simulaciones de la velocidad axial como función del radio y longitud del lecho empacado utilizando las ecuaciones de RANS-E con $k-\omega$ a) Re_p 702, b) Re_p 1053, c) Re_p 1405	50
Figura 6.9: Perfil de viscosidad turbulenta a Re_p de 702, 1053 y 1405: a) $k-\varepsilon$ y b) $k-\omega$	51

Figura 6.10: Perfil de energía cinética turbulenta a Re_p 702 1053 y 1405: a) $k-\varepsilon$ y b) $k-\omega$.	52
Figura 6.11: : Perfil de disipación turbulenta a Re_p 702 1053 y 1405: a) $k-\varepsilon$ y b) $k-\omega$	53
Figura 6.12: a) Lecho empacado a simular mediante la aproximación local, b) Perfil promediado radial local	54
Figura 6.13: Perfil de velocidad axial promediado en la coordenada radial y tangencial aplicando las ecuaciones de NS a un Re_p de 1405.	55
Figura 6.14: Campo de velocidad axial en el lecho empacado aplicando las ecuaciones de NS a un Re_p de 1405	56
Figura 6.15: Perfil de velocidad bajo la consideración del flujo turbulento a nivel local a un Re_p 1405. a) Velocidad axial respecto al radio y b) velocidad radial respecto al radio	57
Figura 6.16: Perfil de velocidad bajo la consideración del flujo turbulento a nivel local a un Re_p 1405 A) velocidad axial respecto al radio, B) velocidad radial respecto al radio	58
Figura 6.17: Perfiles de energía y disipación bajo la consideración del flujo turbulento a nivel local a un Re_p 1405. a) Energía cinética turbulenta $k-\varepsilon$ vs $k-\omega$ vs NS, b) disipación viscosa $k-\varepsilon$ y b) disipación viscosa $k-\omega$	59
Figura 6.18: comparación de los perfiles de viscosidad turbulenta local para los 3 casos de estudio ($k-\varepsilon$, $k-\omega$ y NS) usando $Re_p=1405$	60
Figura 6.19: Perfil de velocidad axial utilizando la aproximación local y del pseudo-continuo aplicando las ecuaciones de NS y RANS: a) NS-E vs. NS, b) NS-E vs RANS acoplado con $k-\varepsilon$ y c) NS-E vs RANS acoplado con $k-\omega$. Usando un Re_p 1405	62
Figura 7.1: Perfiles de velocidad comparando observaciones (Eigenberger, G. 1997) y un modelo turbulento aplicando RANS, estimando una viscosidad efectiva que considera la viscosidad turbulenta y del fluido	64

Capítulo 1

Introducción

Parte de los estudios teórico-experimentales en reactores de lecho empacado se han dirigido a aquéllos que operan en forma no-isotérmica y no-adiabática, algunos de los cuales operan con reacciones altamente exotérmicas. Estos reactores pertenecen a una clase que se distingue por tener la presencia de gradientes de temperatura y concentración apreciables, además de una alta sensibilidad a cambios pequeños en las condiciones de operación (Castillo Araiza, C. 2007), (Castillo Araiza, C.O. and López Isunza, F. 2008). Particularmente, las reacciones de oxidación parcial se han llevado a cabo en reactores de lecho empacado con una baja relación diámetro de tubo-partícula ($d_t/d_p < 10$), ya que por su alta exotérmicidad esta configuración del sistema permite un adecuado enfriamiento de la reacción disminuyendo la desactivación del catalizador por sinterizado, entre otros fenómenos asociados a la reacción, lo cual se refleja en obtener selectividades de interés para la industria (Bey, O. Eigenberger, G. 1997).

Para llevar a cabo tanto el diseño eficiente de un reactor catalítico como su optimización es necesario construir un modelo adecuado que considere los distintos fenómenos catalíticos y de transporte de momento, calor y masa. Trabajos teóricos y experimentales sobre reacciones catalíticas de oxidación parcial en reactores de lecho empacado que presentan una baja relación d_t/d_p , han tenido por objetivo desarrollar modelos para describir su estado estacionario y el comportamiento transitorio; sin embargo, hasta el momento esto no ha sido exitoso debido a la gran complejidad que representa describir la fuerte interacción entre las reacciones altamente exotérmicas y el transporte de momento, masa y calor dentro del reactor (Nijemeisland, M.). Actualmente, la mayoría de los modelos propuestos en la literatura (Castillo-Araiza, C. 2007; Daszkowski, T. Eigenberger, G. 1992; López-Isunza, F. 1983; Kaviany, M. 1995) describen el comportamiento de un reactor de lecho fijo para una reacción de oxidación parcial en un sistema con una baja relación de d_t/d_p se considera un comportamiento hidrodinámico del tipo pistón y no toman en cuenta la distribución de fracción vacía dentro de lecho como consecuencia de la baja relación de d_t/d_p . Por otro lado, se sabe que en lechos empacados con relaciones d_t/d_p menores a 10 se tiene una distribución de fracción vacía la cual tiene un efecto directo sobre el perfil de velocidad y por ende en los distintos mecanismos de transporte y catalíticos (Wilcox. David C. 2000).

De hecho, existen varias investigaciones (Bey. O. Eigenberger, G. 1997; Giese, M, Rottshafer, K. and Vortmeyer, D. 1998) que han señalado la importancia de tomar en cuenta los perfiles de velocidad en el reactor, ya que sin esto aparentemente no es posible describir adecuadamente observaciones de temperatura y concentración.

En la mayoría de los estudios que predicen, el campo de velocidad en un lecho empacado que presentan una baja relación de d_t/d_p considera al sistema como pseudo-continuo y utilizan la ecuación de Navier-Stokes acoplada con la ecuación de Ergun (NS-E) que considera las interacciones fluido-sólido. Esta ecuación de NS-E se ha utilizado para describir el comportamiento hidrodinámico de un fluido en régimen laminar y turbulento (Kufner, R. and Hofmann. 1990). El efecto turbulento normalmente se ha considerado mediante el termino inercial de la ecuación de Ergun (Castillo Araiza, C. 2007) o utilizando una viscosidad efectiva en el término viscoso de la ecuación de Navier-Stokes (Wilcox. David C. 2000). Si bien estas aproximaciones han descrito observaciones, no muestran el papel que juega la turbulencia en la hidrodinámica dentro de un lecho empacados. Por lo anterior esta investigación se dirige a entender el papel de la turbulencia en la hidrodinámica dentro de un lecho empacado que presenta una relación de d_t/d_p menor a 12.

Para lograr este objetivo, se describen los perfiles de velocidad utilizando las ecuaciones de NS-E temporalmente promediadas (modelo RANS-E), donde para describir la producción y la disipación de la energía cinética del flujo a través del lecho empacado se emplearon los modelos de turbulencia $k-\epsilon$ y $k-\omega$.

En el capítulo 2 se presenta de manera general varios conceptos sobre la hidrodinámica y el papel de la turbulencia. Se dan los modelos principales que se han utilizado en la literatura para describir los perfiles de velocidad en el caso de un régimen laminar, y un régimen turbulento. En el caso de turbulencia, se discute sobre los perfiles energéticos, disipaciones y viscosidades turbulentas cercanas y lejanas de la pared. Finalmente se da una breve introducción sobre los métodos de solución que se usan en la actualidad para resolver los distintos modelos hidrodinámicos; tales como, elemento finito y colocación ortogonal.

En el capítulo 3 se presentan los antecedentes que se tienen sobre el modelado de la hidrodinámica en lechos empacados.

En el capítulo 4 se presenta el planteamiento de esta investigación, mostrando la hipótesis, objetivos y metas planteadas, que de una forma permiten conocer los alcances de este proyecto.

En el capítulo 5 se presenta la metodología que se usa para cumplir con el objetivo y metas del proyecto. Particularmente, se presentan los sistemas que se van a estudiar y las aproximaciones que se utilizan para modelar su hidrodinámica. Por ejemplo se muestran las ecuaciones NS-E y los modelos de turbulencia RANS, tales como $k-\varepsilon$ o $k-\omega$.

En el capítulo 6 se presentan los principales resultados que se obtienen en esta investigación. Finalmente en el capítulo 7 se presentan las conclusiones generales y algunas sugerencias para un trabajo a futuro.

Capítulo 2

Generalidades

2.1. Teoría de la turbulencia

El movimiento turbulento de un fluido es una condición de flujo en el cual diversas cantidades como la velocidad, presión, concentración y temperatura, presentan variaciones de forma aleatoria en el espacio-tiempo coordinado que se describe. No obstante, se puede discernir distintos promedios estadísticos en tiempo y espacio para describir el movimiento turbulento (Hinze. 1975). El flujo turbulento presenta las siguientes características (Bakker. 2006).

- **Irregularidad:** La irregularidad se manifiesta en la aparición de fluctuaciones de las variables de flujo (velocidad, presión, temperatura, concentración) con tamaños y tiempo muy dispares (diferentes escalas). Se producen fluctuaciones no estacionarias en flujos inicialmente estacionarios. A pesar de ser un fenómeno determinista, los flujos turbulentos parecen caóticos e impredecibles, lo que justifica el uso de métodos estadísticos para su estudio.
- **Tridimensionalidad:** Pueden existir flujos turbulentos que al ser promediados en el tiempo, resulten ser bidimensionales, incluso pueden existir movimientos turbulentos en los que las escalas más grandes de la turbulencia sean fundamentalmente bidimensionales. Sin embargo, a medida que se desciende en el tamaño de las escalas dentro del amplio espectro que caracteriza a la turbulencia se encuentra que el movimiento asociado a estas escalas pequeñas es siempre tridimensional.
- **Disipación:** Los flujos turbulentos son siempre disipativos es decir una vez que se ha desarrollado el flujo turbulento, la turbulencia tiende a mantenerse, aunque para ello necesite de un aporte continuo de energía. Esta energía se extrae del flujo principal y se invierte en aumentar la energía interna mediante procesos de deformación a los que se ven sometidas las partículas fluidas. La turbulencia necesita de una transferencia continua de energía para reponer esas pérdidas viscosas.
- **Difusividad:** los fenómenos de transporte de masa, momento y energía se ven notablemente amplificados por efecto de la turbulencia. Esto se debe a las fluctuaciones del movimiento turbulento. Si bien estas fluctuaciones tienen lugar a escalas mucho mayores que la escala molecular, producen

efectos difusivos semejantes a los de carácter molecular (al menos cualitativamente).

La turbulencia se origina principalmente por inestabilidades en el flujo, comúnmente asociadas a altos números de Reynolds y perturbaciones en el flujo, tales como interacciones de un cuerpo ajeno al flujo. Esto se explica debido a que la fuente de turbulencia son las inestabilidades del flujo cortante. La turbulencia generalmente es no-isotrópica, esto es, varía de intensidad y dirección, pero algunos flujos tienen un limitado intervalo de escalas de remolino que se pueden idealizar como isotrópicos, o independientes de la dirección.

2.2. Cascada de energía y las escalas de la turbulencia

En el desarrollo de la turbulencia, los vórtices de mayor tamaño interactúan con el flujo principal y extraen energía de éste. El tamaño o escala de estos vórtices es comparable a la escala del flujo. Sin embargo, estos vórtices son inestables en sí mismos, y por efecto de la cortadura o de la interacción entre ellos, tienden a dividirse en vórtices más pequeños que a su vez tienden a dividirse. Este proceso de rompimiento se produce en cascada, por lo que en un movimiento turbulento coexisten una gran variedad de escalas, correspondientes a distintos tamaños de vórtices, los cuales son arrastrados y estirados por la acción de los gradientes de velocidad del flujo medio dominante y por su interacción con los demás vórtices. Este proceso de división continua hasta que la escala de los vórtices es tan pequeña que el número de Reynolds de los mismos no es lo suficientemente grande como para que la inestabilidad persista. En estos vórtices pequeños, la energía cinética contenida en los vórtices se transforma en energía térmica por disipación viscosas a este proceso completo se le denomina cascada de energía (Bakker. 2006; Guo B, Yu A, Wright B, Zulli P. 2003)

2.3. Escalas de turbulencia

Habitualmente, esta variedad de vórtices de diferentes escalas que existen en cualquier flujo turbulento se puede agrupar en tres escalas

- **Macro escala:** Es a escala asociada a los vórtices más grandes; sean U , L y t la velocidad, la longitud y el tiempo característico de estos vórtices (que además coinciden con las variables características del flujo), respectivamente. El número de Reynolds asociado será el mismo que el flujo principal: Las características de estos grandes vórtices dependen de las

condiciones de contorno del flujo y presentan un marcado carácter anisótropo (dependientes de la dirección).

- **Escalas intermedias:** Son escalas inferiores a la macro escala, en las que todavía no existe disipación de energía; se van a denominar u , λ y τ a la velocidad, la longitud y el tiempo característico de estos vórtices.
- **Micro escala:** Es la escala más pequeña, en la que se produce la disipación de energía; sus valores característicos se van a denominar u_0 , λ_0 y τ_0 . Al contrario que la macro escala, estos torbellinos o remolinos presentan un carácter isótropo, es decir, el flujo ha olvidado de donde procede.

Teniendo en cuenta estas escalas, a continuación se analiza el proceso denominado cascada de energía. La energía específica contenida en los grandes vórtices por unidad de tiempo será:

$$e_L = \frac{U^2/2}{t} = \frac{U^3}{L} \quad 2.1$$

Mientras que la energía específica disipada por unidad de tiempo en la macro escala está determinada por:

$$\Phi_L = \frac{\mu}{\rho} (\nabla \cdot U)^3 = \frac{\mu U^3}{\rho L^2} \quad 2.2$$

Por lo que la relación entre la energía contenida y la energía disipada es:

$$\Phi = \frac{\rho UL}{\mu} = \text{Re} \geq 1 \quad 2.3$$

De donde se deduce que la relación entre la energía contenida y la energía disipada es despreciable. Por tanto, toda su energía se transfiere a los vórtices de escalas intermedias:

$$e_L = e_\lambda = U^3 L^{-1} \approx u^3 \lambda^{-1} \quad 2.4$$

Una escala intermedia, el cociente entre la energía transportada y disipada es también igual al número de Reynolds asociado a dicha escala, esto es:

$$\frac{e_\lambda}{\Phi_\lambda} = \frac{\rho U^3}{\mu U^2} \approx \frac{\lambda^{-1}}{\lambda^{-2}} \approx \text{Re}_\lambda \left(\frac{\lambda}{L} \right)^{4/3} \quad 2.5$$

Como el cociente de longitudes todavía no es muy pequeño, el número de Reynolds asociado a la es escala grande y la disipación de energía todavía es despreciable. Entonces, se puede plantear que:

$$e_L \approx e_\lambda \rightarrow U^3 L^{-1} \approx u^3 \lambda^{-1} \quad 2.6$$

Expresión que representa la cascada de energía. Por lo tanto, a nivel micro-escala se tiene:

$$\frac{e_\lambda}{\Phi_\lambda} = \frac{\rho u_0^3 l^{-1}}{\mu u_0^2 l^{-2}} \approx \frac{\rho u \lambda}{\mu} \approx \text{Re}_L \left(\frac{\lambda_0}{L} \right)^{4/3} \quad 2.7$$

Como la energía transportada es del mismo orden que la energía disipada, el anterior cociente será del orden de la unidad:

$$\frac{e_\lambda}{\Phi_\lambda} \approx 1 \rightarrow \text{Re}_L \left(\frac{\lambda_0}{L} \right)^{4/3} = 1 \rightarrow \frac{\lambda}{L} \approx \text{Re}_L^{-3/4} \quad 2.8$$

Esta expresión relaciona las longitudes características de la micro escala y de la macro escala. En la bibliografía se denomina a λ_0 como micro escala de Kolmogorov, que es aquella en la que se disipa toda la energía y cuyo Reynolds asociado vale la unidad. En la expresión anterior, se aprecia que a medida que aumenta el Reynolds del flujo principal, la diferencia entre la escala de Kolmogorov y la escala macroscópica se hace cada vez mayor.

2.4. La ecuación de Reynolds

La teoría clásica de la descripción de la turbulencia cubre desde el periodo de 1895-1970 (Reynolds. 1895) introduce las ecuaciones de movimiento promediadas en el tiempo. Alrededor de 1970, se introducen otras aproximaciones para la descripción de la turbulencia, definiéndose dos grandes metodologías. La primera de estas se basa en la aplicación de la aproximación clásica de las ecuaciones promediadas en el tiempo y propone el uso de dos ecuaciones de transporte para modelar la energía cinética y la tasa de disipación turbulenta, ambas cantidades características de la turbulencia. La viscosidad turbulenta está relacionada a la fluctuación de estos parámetros. La otra aproximación es el uso de ecuaciones de promedio espacial. Este llamado bajo el nombre de: modelo de simulación de remolinos a gran escala (LES, por sus siglas en inglés) o de remolinos grandes; lo que se pretende con el modelo LES es simular las escalas más grandes y sencillas de resolver del movimiento, mientras que se acepta que las pequeñas escalas no están presentes. La introducción de estos modelos conjuntamente con el desarrollo de las computadoras ha abierto la posibilidad de estudiar diversos modelos que describen la turbulencia, junto con el mejoramiento en las propuestas de solución por métodos

numéricos. El estudio de la dinámica computacional de fluidos bajo el ámbito de la programación es lo que da origen al campo de estudio denominado CFD.

Debido a la alta complejidad de la turbulencia resulta muy difícil describir el flujo de manera puntual y solo para un tipo de tamaño de remolinos, por lo cual, Reynolds propone que el flujo turbulento se puede descomponer en dos partes de tal manera que el flujo turbulento se resuelve a escalas lo más pequeñas posibles. De esta manera en un flujo estadístico en estado estacionario como lo es el flujo turbulento, cada variable se puede escribir como la suma de un valor promedio y las fluctuaciones alrededor de un valor medio.

$$\Omega(x,t) = \bar{\Omega}(x,t) + \Omega'(x,t) \quad 2.9$$

Donde Ω puede ser cualquier variable de flujo como: velocidad, presión, temperatura o concentración. Este valor promedio representa una escala a la cual se puede resolver el flujo de una manera computacionalmente económica, y son las variaciones lo que representa la escala menor de turbulencia y que requeriría de una descripción estadística. Por lo cual se define el promedio temporal de la siguiente manera:

$$\bar{\Omega}(x,t) = \frac{1}{t_0} \int_{t-\frac{1}{2}t_0}^{t+\frac{1}{2}t_0} \Omega(x,t) dt \quad 2.10$$

Este proceso de promedio en el tiempo para un flujo turbulento se introduce para alcanzar las leyes de movimiento para las cantidades medias. El promedio temporal se define como la forma de remover la influencia de las fluctuaciones turbulentas sin destruir la dependencia temporal con otros fenómenos no estacionarios con escala de tiempo diferente a aquellas asociadas con la turbulencia.

2.5. La teoría de longitud de mezclado

Boussinesq (J. Boussinesq.1877) fue el primero en intentar relacionar el tensor de esfuerzos de Reynolds con la velocidad promedio del flujo al realizar una analogía con la ley de viscosidad de Stokes para flujo laminar introduciendo un coeficiente de mezclado para el tensor de esfuerzos de Reynolds, así se relaciona cada componente de la siguiente manera:

$$\tau_{xy} = -\rho u'_x u'_y = \frac{\mu}{\rho} \frac{d\bar{u}}{dy} \quad 2.11$$

El coeficiente tiene la desventaja de tratar de representar una viscosidad de remolino la cual no es una propiedad del fluido como lo es la viscosidad dinámica lo que representa la mayor limitación del modelo. Por otro lado, Prandtl basado en la idea de la viscosidad de los gases usando la teoría cinética de los gases, propone y visualiza que conforme el fluido sigue una trayectoria desde la pared hacia la zona donde existe el flujo turbulento las partículas de fluido se agrupan en un (cluster o racimo) de partículas el cual se mueve como un todo en las dos direcciones. Si se considera que el cumulo de partículas que viene de una capa nivel de fluido situada en $(y_1 - l)$ con velocidad $\bar{u}(y_1 - l)$ se desplaza l sobre la distancia en la dirección y . Esta distancia es conocida como la longitud de mezclado de Prandtl (Prandtl, 1945) Como el cumulo de partículas conserva su momento, su nueva velocidad en la posición es menor que la velocidad que prevalece en esa posición y_1 . Entonces la diferencia de velocidad es:

$$\Delta\bar{u}_1 = \bar{u}(y_1) - \bar{u}(y_1 - l) \approx l \frac{d\bar{u}}{dy} \quad 2.12$$

En donde se ha utilizado la expansión en series de Taylor para la velocidad en $(y_1 - l)$ despreciando todos los términos de mayor orden de manera similar se tiene,

$$\Delta\bar{u}_1 = \bar{u}(y_1 + l) - \bar{u}(y_1) \approx l \frac{d\bar{u}}{dy} \quad 2.13$$

Considerando el flux de momento turbulento promedio que se da sobre el plano dado el mezclado se puede definir el transporte de momento por unidad de área como,

$$\frac{1}{2} \rho (v'^2)^{1/2} = (\Delta\bar{u}_1 + \Delta\bar{u}_2) \approx \rho (v'^2)^{1/2} l \frac{d\bar{u}}{dy} \quad 2.14$$

En este caso se considera la velocidad de las fluctuaciones en dirección $y (v'^2)^{1/2}$ lo que representa el promedio de la velocidad de las fluctuaciones al transferirse momento de los dos planos, esta velocidad se conoce como la raíz del promedio del cuadrado de la velocidad de las fluctuaciones este valor tienen la característica de funcionar como una restricción que se debe de satisfacer para que la longitud de mezclado sea válida. Una interpretación física de la longitud de mezclado consiste en entenderla como la distancia transversal que se debe ser recorrida por una aglomeración de partículas de fluido viajando con su velocidad promedio inicial con el fin de hacer que la diferencia entre su velocidad y la velocidad en su nueva posición sea igual a la fluctuación promedio en el flujo turbulento.

Consecuentemente el flux de momento promediado en el tiempo es proporcional a:

$$\rho(v_{rms})l \frac{d\bar{u}}{dy} \quad 2.15$$

Observando esta última expresión se tiene una expresión equivalente al componente del tensor de esfuerzos cortantes, por lo que se puede escribir:

$$\tau_{xy} = c_1 \rho(v_{rms})l \frac{d\bar{u}}{dy} \quad 2.16$$

c_1 es una constante de proporcionalidad para tener unidades homogéneas. De esta manera si ahora se define un coeficiente de transferencia o de intercambio turbulento para el momento se tiene:

$$\mu = c_1 \rho(v_{rms})l \quad 2.17$$

Donde ahora se tiene una viscosidad de remolino la cual toma un papel similar al de la viscosidad del fluido, y mantiene una forma similar a la obtenida por el modelo de viscosidad de Newton para flujo laminar.

Se puede observar que si v_{rms} y l se definen, se puede calcular la viscosidad de remolino, sin embargo, si se considera un valor constante para la viscosidad de remolino en un flujo turbulento es equivalente a asumir que se tiene solo una longitud, característica de mezclado y solo una velocidad de escala representativa v_{rms} . Esta es la primera restricción del modelo.

Finalmente en un modelo de viscosidad de remolino, se asume que el tensor de esfuerzos de Reynolds y el flux escalar turbulento se relacionan al campo promedio por las relaciones:

$$-\rho \bar{u}'_x \bar{u}'_y \approx \rho \mu_t \frac{d\bar{u}}{dy} \quad 2.18$$

$$-\bar{u}'_x \bar{T} \approx \alpha \frac{d\bar{u}}{dx} \quad 2.19$$

Sustituyendo en las ecuaciones anteriores se tienen las ecuaciones para modelar la turbulencia en dos dimensiones, las cuales describen el comportamiento en el sistema. (Kufner, R. and Hofmann, 1990; Nakayama, A. and Kuwahara, F. 1999).

Ecuación de movimiento en la dirección x

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial \bar{u}_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y} \right) = \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 \bar{u}_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}_x}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y} \right) \quad 2.20$$

Ecuación de movimiento en la dirección y

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial \bar{u}_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial \bar{u}_y}{\partial y} \right) = \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 \bar{u}_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}_y}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_t \frac{\partial \bar{u}_x}{\partial y} \right) \quad 2.21$$

En 1924 Killer y Friedmann introdujeron la idea de utilizar ecuaciones de transporte para describir el comportamiento de las cantidades características de turbulencia. Posteriormente Kolmogorov (1941) (Wilcox, David C. 2000) y Prandtl (1945) sugirieron de forma independiente cada uno, que la viscosidad de remolino se puede encontrar de la proporcionalidad:

$$\mu_t \propto \rho \sqrt{k L^r} \quad 2.22$$

Donde k es la energía cinética turbulenta:

$$k = \frac{1}{2} (\bar{u}_1'^2 + \bar{u}_2'^2 + \bar{u}_3'^2) \quad 2.23$$

Y L^r es la escala de referencia de la turbulencia. Además estos investigadores propusieron que es posible determinar la distribución de k en función (x, t) resolviendo una ecuación de transporte para esta cantidad. Tomando en cuenta esta posibilidad se han desarrollado modelos de turbulencia los cuales se clasifican de acuerdo al número de ecuaciones de transporte usados para las cantidades turbulentas (Bakker, 2006., Lightfoot, E.N. 2002; Guo B., Yu A., Wright B., Zulli P. 2003; Jones, W.P. and Launder, B.E. 1973; Logtenberg, S. and Dixon A. G. 1998). La Tabla 2.1, muestra los principales modelos de turbulencia que se han utilizado para describir la energía cinética turbulenta y cuando es el caso su disipación, por lo cual hay una variedad de modelos que consideran solo una variable o más variables de acuerdo al interés de cada sistema de estudio o los fenómenos que se requieran estudiar.

Tabla 2.1. Modelos utilizados para describir turbulencia

Modelos de turbulencia		
Nombre	Numero de ecuaciones para modelar el flujo turbulento	
Modelos de 1 ecuación	1	k, Modelo de Spalart-Allmaras, LES.
Modelos de 2 ecuaciones	2	k-ε (estándar, realizable), k-ω
Modelos de viscosidad remolinos no lineales	6	$-\rho \langle u_i u_j \rangle = 2\mu_t F_{nl(nolineal)}$

2.6. Modelo de turbulencia k-ε y k-ω

No existe un modelo universal para todos los casos donde un fluido se transporta en un determinado sistema, pero los modelos k-ε y k-ω, son una aproximación clásica al modelado del flujo turbulento derivados de las ecuaciones de NS bajo condiciones temporales. El modelo estándar de cada uno de estos modelos de turbulencia ha sido modificado para mejorar las predicciones de flujo en distintas configuraciones sistemas donde se tiene flujo turbulento, por ejemplo: flujo cortante libre, flujo libre o turbulencia por convección y para la descripción cerca de una pared y/o al centro de un lecho. Para resolver el sistema de ecuaciones de los modelos k-ε y k-ω es necesario establecer condiciones de frontera. Por lo general estas son similares a las que se aplican a una ecuación escalar. Sin embargo, cerca de una pared pueden existir diferencias significativas; el principal problema que se presenta se deriva de las diferentes escalas de turbulencia presentes en un flujo cerca la pared. Una posibilidad es resolver las ecuaciones a una posición por encima de la pared. La condición “natural” para la energía cinética turbulenta es que sea cero en la pared, sin embargo, esta condición produciría una singularidad en la ecuación de transporte para la energía disipativa debido a la relación ε/k y ω/k (Wilcox. David C. 2000; Rodi, W. 1980; Kufner, R. and Hofmann, 1990).

Por otra parte las condiciones de frontera cercanas a la pared para los estudios turbulentos tienen un comportamiento especial, debido a que estos modelos solo resuelven el sistema hasta cierta región cercana a la pared, por lo tanto la velocidad no es cero como los casos laminares donde la velocidad tiende a cero al acercarse al tubo debido a esfuerzos de corte viscosos (Bakker. 2002).

2.7. Métodos numéricos de solución

La estrategia global para resolver las Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) radica en reducirlas a una o más ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) o a un conjunto de ecuaciones algebraicas y la solución de estos sistemas se logra aplicando métodos numéricos. Los métodos numéricos básicamente consisten en la discretización de los operadores diferenciales, con el fin de obtener sistemas de ecuaciones algebraicas en el caso de EDP elípticas o sistemas de EDO en el caso de EDP de tipo parabólico. La discretización de un dominio implica el diseño de una red o malla formada por una serie de interacciones llamadas nodos o celdas. Para cada nodo se aplica la aproximación de las EDP(s) de gobierno, con el fin de generar un sistema de ecuaciones algebraicas o algebraicas- diferenciales acopladas que al resolverse, darán los valores puntuales de las variables dependientes del sistema de EDP en malla en cuestión. (Ver apéndice A). Sin embargo la solución, se puede llevar a cabo por medio de distintas herramientas tal es el caso de COMSOL Multiphysics, anteriormente llamado FEMLAB, es un software para el modelado de sistemas físicos basándose en el FEM. Este software facilita los pasos en el proceso de modelado, mediante una interfaz que permite obtener una solución a través de la combinación de distintos fenómenos físicos (de ahí proviene el nombre Multiphysics).

El proceso que se lleva a cabo para realizar un modelado mediante simulaciones con ayuda de COMSOL Multiphysics se define a través de los siguientes pasos: la creación de una geometría, la creación de una malla controlada por la física, la especificación de una física(s), la elección del tipo de solución y la visualización de los resultados. Este software muestra una desventaja que se considera de las más importantes, el tiempo que tarda el usuario en obtener un resultado certero puede ser prolongado. Esta desventaja se presenta a menudo en usuarios que apenas están aprendiendo a manejar el software y depende de varios factores; del diseño de la geometría ya que puede resultar complicado, si la geometría tiene un diseño complicado la generación de la malla puede requerir de mucho tiempo y, además, se debe tener conocimiento previo acerca del estudio que desea realizar, para incorporar todos los parámetros necesarios antes de finalizar el modelado del problema, de lo contrario, no podrá obtener un resultado instantáneo y convincente. (Ver Apéndice B)

Por otro lado este método computacional hace el uso del método del elemento finito (ver apéndice B1) el cual es una técnica que soluciones o se aproxima a una solución a unos sistemas de ecuaciones relacionadas con un problema aplicado. Sin embargo para que este método funcione requiere que el problema se encuentre definido en un espacio geométrico, o un dominio, para así ser subdividido en un

número finito de regiones pequeñas, formando una especie de red o malla (mesh), lo cual indica que cada división es única o no necesariamente ortogonal lo cual es posible utilizar triángulos, cuadrados o tetraedros en cada elemento.

Capítulo 3

Antecedentes

Una cantidad significativa de trabajos referentes al modelado de reactores catalíticos que operan de forma no isotérmica y no adiabática, han tenido como objetivo describir los perfiles de concentración, temperatura y de velocidad a nivel piloto e industrial (Delmas, H., and Froment, G.F. 1988; Kaviany, M. 1995). La mayoría de estos estudios han considerado que el perfil de velocidad axial del fluido es uniforme (flujo pistón) en la coordenada radial. Sin embargo, algunos autores demuestran que es necesario incluir un modelo hidrodinámico que describan los perfiles de velocidad en el modelo general del reactor catalítico. En este sentido, en los siguientes párrafos se presentan aquéllas aproximaciones hidrodinámicas que se han aplicado en la literatura para describir los perfiles de velocidad en un lecho empacado esencialmente con una relación de d_t/d_p menor a 10.

Los estudios sobre la hidrodinámica en lechos empacados datan desde hace más de 100 años. Henry Darcy (Darcy, H. 1856), propone un modelo para predecir la velocidad media en lechos empacados con partículas pequeñas de tamaño uniforme. El estudio se hace a bajas velocidades de flujo de alimentación. Las resistencias dominantes al paso del flujo se deben a los esfuerzos de corte viscosos en las superficies sólidas. Estas resistencias viscosas se consideran en el modelo de velocidad de Darcy con el uso de la viscosidad del fluido (μ_f) y la permeabilidad del lecho. Este modelo tiene la siguiente forma:

$$v = -\frac{K}{\mu_f} \left[\frac{dp}{dz} - \rho g \right] \quad 3.1$$

La permeabilidad (K) es una medida cuantitativa que se relaciona fenomenológicamente con la facilidad que tiene un fluido a transportarse a través de un lecho empacado. Actualmente existen muchas relaciones que definen a la

permeabilidad en términos de la fracción vacía (Castillo-Araiza, C. 2007; De Klerk, A. 2003), sin embargo, su definición matemática sigue teniendo incertidumbre hoy en día.

Actualmente, la ecuación de Darcy se utiliza sólo para determinar la velocidad en un régimen laminar para lechos empacados que presentan una fracción vacía menor a 0.5, ya que ésta no considera los efectos inerciales y las pérdidas por fricción se han balanceado con la caída de presión. Aunado a lo anterior, la ecuación de Darcy no considera los esfuerzos de corte viscosos ocasionados por la pared del lecho, siendo válida para sistemas con una relación de d_t/d_p mucho mayor a 12. Actualmente se reconocen que los efectos no Darcianos (inerciales) son significativos en la operación de reactores de lecho empacado industriales, donde se utilizan velocidades de alimentación altas, y por lo tanto tienen que ser considerados en el modelo hidrodinámico, que es esencialmente semi-heurístico.

La hidrodinámica en un lecho empacado que presenta una relación de d_t/d_p menor a 10 es compleja debido a la variación de la fracción vacía que se tiene en éste. Actualmente, los perfiles de velocidad se han descrito a nivel local mediante el uso de CFD, sin embargo, esta clase de aproximaciones requiere de tiempos de computo muy altos (Dixon A. G., Nijmeisland M. and Stitt E. H. 2006; Logtenberg, S. and Dixon A. G. 1998) por lo que se hace impráctico el modelado de un reactor industrial donde existe una interacción compleja entre los distintos mecanismos de transporte y reacción. Debido a esto, se siguen utilizando modelos que capturen la información fenomenológica en el sistema teniendo un costo computacional mínimo. En esta clase de aproximaciones se considera al lecho empacado como pseudo-continuo. Bajo esta consideración, los perfiles de velocidad se han descrito con modelos semi-heurísticos que se basan en las ecuaciones modificadas de NS utilizando relaciones empíricas que describen la fracción vacía del sistema que se estudia (Magnico P. 2003;). Esta forma de modelar el campo de velocidad en un lecho empacado se conoce también como “método aproximado de ingeniería”, que se basa en los trabajos de Darcy (Darcy, H.1856), Forchheimer (Forchheimer. 1935), Ergun (Ergun, S. 1952) y Brinkman (Brinkman, H., C. 1947). Si bien este método aproximado se ha utilizado por más de 50 años para predecir los perfiles de velocidad en un lecho empacado, se siguen teniendo incertidumbres, por ejemplo, la velocidad cerca de la pared (fracción vacía cercana a uno) se sobreestima. Para corregir esto, se hace uso de un parámetro empírico conocido como la viscosidad efectiva (μ_{ef}). La viscosidad efectiva es un parámetro de ajuste que es función de la relación de d_t/d_p y el número de Reynolds. Por la importancia de esta clase aproximación en el modelado de los perfiles de velocidad en reactores de lecho empacado en los siguientes puntos se presenta un resumen sobre algunos estudios hidrodinámicos en lechos empacados con baja relación de d_t/d_p .

Delmas y Froment (Delmas, H., and Froment, G.F. 1988) evaluaron el efecto hidrodinámico en la predicción de los perfiles de temperatura y concentración en un reactor de lecho empacado con una relación de d_v/d_p igual a 6.25 que operaba a un Reynolds de partícula (Re_p) alrededor de 500. La reacción que se estudió fue una oxidación parcial de hidrocarburos. El modelo hidrodinámico que se usó fue el siguiente:

$$-\nabla p = \nabla \cdot (\mu_f \nabla v) + 0.20 \left[1 + 3.55 \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \right] \frac{\rho v^2}{d_t} + 7.53 \left(\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon} \right) \left[1 + 4 \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \right] \frac{\mu v^2}{d_t^2} \quad 3.2$$

Kufner y Hofmann (Kufner, R. and Hofmann.1990) describieron la hidrodinámica en un lecho empacado con una relación de d_v/d_p alrededor de 6 en un rango de Re_p entre 500 y 2000. Para predecir los campos de velocidad utilizaron el mismo modelo hidrodinámico que Delmas y Froment (Delmas, H., and Froment, G.F. 1988). El modelo predijo adecuadamente las observaciones de velocidad en el centro del lecho pero no en la región cercana a la pared. Este modelo hizo uso de una ecuación empírica para predecir los perfiles de fracción vacía radiales.

Eigenberger y Daszkowski (Daszkowski, T., Eigenberger, G. 1992) evaluaron el efecto hidrodinámico en la predicción de los perfiles de concentración y temperatura en un reactor de lecho empacado donde tenía lugar la oxidación parcial de propeno. Este reactor se empacó con un catalizador de paladio, donde la relación de d_v/d_p fue de 5.1 y el Re_p fue de alrededor de 600. El modelo que se utilizó para describir los perfiles de velocidad se propuso en términos de la velocidad intersticial y se resolvió en conjunto con los modelos pseudo-homogéneos de masa y calor. Este modelo hidrodinámico está dado por la siguiente ecuación:

$$\rho u \cdot \nabla u = -\nabla p + \mu_f \nabla^2 u - \frac{\mu_f}{K} \varepsilon u - \frac{\rho}{K_z(\varepsilon) d_p} \varepsilon^2 u^2 \quad 3.3$$

Este modelo es la ecuación de Navier-Stokes-Darcy-Forchheimer, que fue propuesto inicialmente por Vortmeyer et al. (Vortmeyer, D. and Schuster, J. 1983). Las permeabilidades K y K_z son las mismas que se manejan en la ecuación de Ergun (Ergun, S. 1952). Froment (Froment, G.F. 1988) predijo los perfiles de velocidad de un fluido compresible en un lecho empacado bajo condiciones no-isotérmicas. El sistema de estudio fue un lecho empacado que uso relaciones de d_v/d_p entre 5-20 y números de Reynolds de partícula (Re_p) entre 100-1000. El modelo hidrodinámico

utilizado fue la ecuación de NS-E, despreciando los términos inerciales de la ecuación de NS:

$$\frac{\rho}{\varepsilon} \frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_f}{\varepsilon} \nabla u \right) - \frac{\mu_f}{K} u - \frac{\rho}{K_z(\varepsilon) d_p} u^2 + \mathcal{G} \quad 3.4$$

El término adicional a la ecuación \mathcal{G} considera las fuerzas viscosas para un fluido compresible. En su estudio se encontró que este término fue insignificante con respecto al término viscoso de Ergun. Papageorgiou y Froment (Papageorgiou, J.N., Froment, G.F. 1995) realizaron simulaciones sobre un reactor de lecho fijo para la oxidación parcial de o-xileno a anhídrido ftálico utilizando un catalizador soportado en TiO₂. La relación de $d_t/d_p=5.8$. Su modelo hidrodinámico fue la ecuación de NS-E:

$$\rho u \cdot \nabla u = -\nabla p + \mu_f (\nabla^2 u) - \frac{\mu_f}{K} u - \frac{\rho}{K_z(\varepsilon) d_p} u^2 \quad 3.5$$

Bey y Eigenberger (Bey, O., Eigenberger, G. 1997) predijeron los campos de velocidad en un lecho empacado que manejó relaciones de diámetro de tubo a partícula entre 3.3 y 11, para un rango de Re_p entre 50 y 1000. La hidrodinámica de este lecho se estudió utilizando diferentes geometrías como empaque: esferas, anillos y cilindros. Para predecir los campos de velocidad se utilizó la ecuación de NS-E:

$$\rho u \cdot \nabla u = \nabla p = \frac{\mu_f}{\varepsilon} \nabla \cdot (\varepsilon \nabla u) - \frac{\mu_f}{K} \varepsilon u - \varepsilon^2 \frac{\rho}{K_z(\varepsilon) d_p} u^2 \quad 3.6$$

Giese et al. (Giese, M, Rottshafer, K. and Vortmeyer, D. 1998) realizaron un estudio hidrodinámico obteniendo observaciones de velocidad intersticial en lechos empacados con esferas, cilindros y anillos raschig. La relación de d_t/d_p fue alrededor de 9.3 y el rango de Re_p utilizado estuvo entre 4 y 530. Estos autores utilizaron la ecuación de Brinkman-E para predecir los perfiles de velocidad observados. El modelo se resolvió en términos de la velocidad superficial y se usa una viscosidad efectiva para ajustar los resultados experimentales. Winterberg y Tsotsas (Tsotsas, E. and Schlunder, E. 1990) estudiaron el impacto de la fracción vacía y los efectos de fricción en la predicción de la caída de presión en un lecho empacado. Para esto utilizaron sistemas con diversas relaciones de d_t/d_p (4-40) y Re_p entre 1 y 1000. El modelo hidrodinámico que utilizaron fue la ecuación de Brinkman. Se predijeron los perfiles de concentración y temperatura en un reactor con esferas, cuya relación

d_t/d_p fue igual a 8 y un Re_p alrededor de 600. Einfeld y Schnitzlein utilizando un modelo de NS-E predijeron los perfiles de velocidad en un lecho empacado que presenta una relación de diámetro de tubo a partícula menor a 10. Las predicciones muestran la incertidumbre que se tienen para describir las velocidades locales en regiones de alta fracción vacía, ya que normalmente se sobre estima su magnitud.

Castillo Araiza (Castillo, Araiza. C. 2007) incorporó la hidrodinámica para predecir el comportamiento observado en un reactor de lecho fijo con una relación de d_t/d_p igual a 3.048, para la oxidación parcial de o-xileno a anhídrido ftálico. Para describir los campos de velocidad se empleó la ecuación de NS con los términos de Darcy (Da) y Forchheimer (Fr) que consideran las interacciones del sólido con el fluido. Las constantes que son características de los términos de Da y Fr se determinaron ajustando los datos experimentales de caída de presión a diferentes flujos de alimentación. Los resultados de estos autores sugieren que las mejores predicciones tienen lugar cuando se incorpora el efecto hidrodinámica en la transferencia de calor y masa. Castillo-Araiza y López- Isunza (Castillo- Araiza, C.O. and López-Isunza, F. 2008) evaluaron diferentes modelos hidrodinámicos que han sido utilizados para predecir los campos de velocidad en lechos empacados con baja relación de diámetros de tubo a partícula. Donde concluyen que el empleo de la ecuación de N-S con los términos de Da y Fr utilizando una ecuación empírica para describir el perfil de fracción vacía y estimando la magnitud de los efectos viscosos e inerciales de datos experimentales de caída de presión es una aproximación confiable para predecir los perfiles de velocidad en lechos empacados con una baja relación de diámetro de tubo a partícula. Estos autores muestran que a flujos de alimentación bajos los efectos viscosos dominan. Mientras que a flujos de alimentación altos los efectos inerciales, particularmente en regiones con altas fracciones vacías, son dominantes.

En pocos trabajos (Kufner, R. and Hofmann, 1990, Vortmeyer, D. and Schuster, J. 1983) se han utilizado modelos de turbulencia para describir los campos de velocidad considerando al sistema como pseudo-continuo. Sin embargo, estas simulaciones han sido en lechos empacados con una relación de d_t/d_p mayor a 10. Aunado al hecho de que no se presentan perfiles de velocidad al modelar la turbulencia por lo que no es claro el efecto de ésta en la hidrodinámica, Baoyu et al. (Baoyu et al. 2003) realizaron un estudio en dos dimensiones (2-D) basado en el flujo de aire a través de un lecho empacado con partículas esféricas. En este trabajo los autores comparan tres modelos hidrodinámicos que incluyen las ecuaciones para el transporte de energía cinética turbulenta y la disipación de la energía cinética turbulenta aplicados a una columna empacada operada de forma isotérmica. Estas ecuaciones de turbulencia presentan dos términos extras S_k y S_ϵ que constituyen la relación entre la producción de energía cinética y su disipación debido a la presencia

del medio poroso; estos términos varían de acuerdo con los diferentes autores (Takeda, 1994; Nakayama y Kuwahara 1999; De Lemos y Pedras y 2001). Estos autores observaron, al mantener un número de Reynolds de partícula constante, que la viscosidad efectiva utilizando el modelo de (Nakayama y Kuwahara 1999), es independiente del tamaño de la partícula, mientras que en los otros dos modelos propuestos por Takeda et. al. (Takeda, 1994; Piedras y de Lemos, 2001) se muestra una fuerte dependencia al tamaño de la partícula.

Nijemeisland (Nijemeisland et al. 2004) realizó un estudio teórico experimental en tres dimensiones mediante CFD, en un lecho empacado donde la relación de diámetro de tubo a partícula d_t/d_p es igual a 4 el lecho empacado fue operado con un $Re_p=1000$. La simulación corresponde a un experimento, en el que la pared del tubo es calentada por un flujo de vapor, y la energía se transfiere de la pared al fluido. Para predecir los perfiles de velocidad se utilizó la ecuación de Navier-Stokes en su versión promediada (modelo RANS), suplementada con los modelos de turbulencia $k-\epsilon$ o $k-\omega$. Mientras que para predecir los perfiles de temperatura se empleó el modelo de transferencia de calor donde se incorpora la conductividad térmica de remolino k_t que es función de la energía cinética turbulenta y la disipación de la misma. El campo de flujo obtenido muestra regiones de flujo invertido entre las partículas así como flujo de recirculación cerca de los puntos de contacto de las partículas; características similares fueron reportadas por Nijemeisland y Dixon (Nijemeisland y Dixon 2001). Las componentes de velocidad axial y radial se dimensionan utilizando la velocidad promedio de entrada y los resultados muestran velocidades cercanas a cero en las zonas cercanas a las partículas, mientras que los valores máximos se encuentran en la zona cercana a la pared y a una distancia de un diámetro de partícula.

Dixon et al. (Dixon et al. 2004) realizó un estudio numérico en tres dimensiones (3-D) utilizando CFD para modelar la hidrodinámica en un lecho empacado donde se hizo fluir aire. La relación de diámetro de tubo a partícula d_t/d_p fue igual a 4 y el Re_p utilizado fue de 986. Para predecir los perfiles de velocidad utilizaron la ecuación de NS en su versión promediada (modelo RANS), acoplada a los modelos de turbulencia. Para predecir los perfiles de temperatura se emplea un modelo pseudo-homogéneo donde se incluye un término fuente de generación de calor (Sh), que toma en cuenta la transferencia de calor entre las partículas y la pared del lecho empacado. El campo de flujo obtenido muestra que para esta geometría y condiciones de operación, el flujo inercial es dominante y los resultados se validan al comparar los perfiles radiales de temperatura predichos por el modelo con los datos experimentales obtenidos por Nijemeisland y Dixon (Nijemeisland y Dixon, 2001).

Capítulo 4

Hipótesis y objetivos

4.1. Hipótesis

Al considerar la turbulencia en el modelado de la hidrodinámica en un lecho empacado con baja relación de d_t/d_p a flujos en régimen laminar y turbulento permitirá su en la predicción de los perfiles de velocidad e inferir su posible efecto en el modelado de reactores catalíticos donde tiene lugar reacciones altamente exotérmicas.

4.2. Objetivos

4.2.1 Objetivo general

Modelar la hidrodinámica en un lecho empacado con una relación de d_t/d_p igual a 3.048 tomando en cuenta el efecto de la turbulencia.

4.4. Particulares

- Describir la hidrodinámica considerando al sistema como pseudo-continuo (aproximación continua) y de manera local (aproximación local) aplicando las ecuaciones de Navier-Stokes acoplada o no a los términos de Darcy y Forchheimer.
- Describir la hidrodinámica considerando al sistema como pseudo-continuo (aproximación continua) y de manera local (aproximación local) aplicando las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas acopladas con las ecuaciones que describen la turbulencia $k-\epsilon$ o $k-\omega$ considerando o no a los términos de Darcy y Forchheimer.

Capítulo 5

Metodología

En este capítulo se presenta el sistema a modelar, y las aproximaciones que se utilizan para describir su comportamiento hidrodinámico. En general se presentan dos aproximaciones, una que se basa en considerar al sistema como pseudo-continuo (aproximación continua) y otra donde se considera el sistema a nivel local (aproximación local). En ambas aproximaciones se evalúan modelos que se basan en las ecuaciones NS y RANS con el objetivo de evaluar el papel de la turbulencia en el comportamiento hidrodinámico en un lecho empacado que presentan una relación de diámetro de tubo a partícula igual a 3.048 y que se opera a Re_p industriales (702, 1050 y 1405).

5.1. Sistema a modelar

Las características geométricas del lecho empacado que se estudia, se presentan en la Tabla 5.1. Este sistema tiene dimensiones de un reactor catalítico de lecho fijo a nivel piloto donde se llevan a cabo la reacción de oxidación parcial. El catalizador empacado es esférico y no amorfo. En este sistema se destaca que el fluido que se alimenta al lecho empacado es aire en un rango de Re_p de partícula entre 702- 1405, la longitud del lecho es de 2.6 metros y la relación de diámetro de tubo a partícula es de 3.048, lo que genera perfiles de fracción vacía en los ejes axial, radial y tangencial, ver Figura 5.1. Particularmente en la vista frontal se observan dos zonas de alta fracción vacía, una cerca de la pared y otra a una distancia de un diámetro de partícula de ésta.

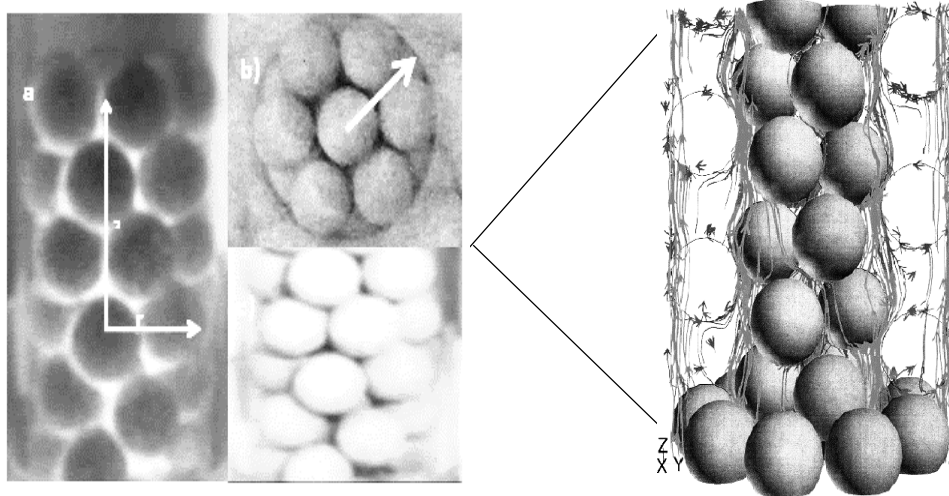


Figura 5.1: Fotografía que muestra el arreglo de las esferas de catalizador en el interior de un tubo con características geométricas iguales a aquéllas que se representan en la Tabla 5.1 (Castillo, Araiza, C. 2007). a) Negativo de la vista lateral, b) vista superior y c) vista lateral.

Tabla 5.1: Datos geométricos y físicos del lecho empacado

Reactor	Valor	Unidades
Longitud	2.6	m
Diámetro	0.025	m
Relación de d_t/d_p	3.048	adimensional
Densidad del aire	1.293	kg/m ³
Flujo volumétrico de aire	4.004	m ³ /h
Reynolds de partícula	702, 1050 y 1405	adimensional
Catalizador solido		
Diámetro	0.0082	m

En la Tabla 5.2 se presentan datos de caída de presión del lecho empacado que se estudia en este trabajo. Estos datos de caída de presión juegan un papel esencial en el modelado hidrodinámico ya que es el término fuente tanto en las ecuaciones NS como RANS considerando o no la aproximación pseudo-continua.

Tabla 5.2: Casos de estudios a las que se quieren los perfiles velocidad

Simulación	V, ms ⁻¹	Re _p	ΔP, N.m ⁻²
1	1.13	720	9800
2	1.70	1050	18500
3	2.27	1405	29300

5.2. Modelos hidrodinámicos

5.2.1. Navier-Stokes-Darcy-Forchheimer (NS-E)

El modelo utilizado para predecir los campos de velocidad mediante la aproximación del pseudo-continuo considera las siguientes cuestiones fundamentales:

1. Se describe el movimiento del fluido a través de esferas solidas
2. Se considera al sistema como un medio pseudo-continuo.
3. El fluido es newtoniano e incompresible
4. La viscosidad y densidad son constantes.

El modelo hidrodinámico en términos de la velocidad intersticial, que acopla la ecuación de Navier-Stokes con los términos de Darcy y Forcheeimer que describen a la interacción entre el fluido y el sólido es:

Ecuación de continuidad:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \phi v_r) + \frac{\partial \phi v_z}{\partial z} = 0 \quad 5.1$$

Ecuación de Navier-Stokes-Darcy-Forchheimer (NS-E)

Componente z

$$\rho_f \left[\frac{\partial \phi v_z}{\partial t} + \phi v_r \frac{\partial \phi v_z}{\partial r} + \phi v_z \frac{\partial \phi v_z}{\partial z} \right] = - \frac{\partial \phi P_z}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi v_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \phi v_z}{\partial z^2} \right] - \left[\frac{\mu_f}{K} \phi v_z + \frac{\rho_f}{K_z} \phi^2 v_z^2 \right] + \phi \rho_f g_z$$

5.2

Componente r

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varphi v_r}{\partial t} + \varphi v_r \frac{\partial \varphi v_r}{\partial r} + \varphi v_z \frac{\partial \varphi v_z}{\partial z} \right] = -\frac{\partial \varphi P_r}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi v_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \varphi v_z}{\partial z^2} \right] - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi v_r + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 v_r^2 \right] + \varphi \rho_f g_z$$

5.3

Los términos de Darcy y Forchheimer consideran las interacciones entre el sólido y el fluido. Su efecto depende de la magnitud del número de Reynolds de partícula. Las interacciones entre el sólido y fluido cuando los esfuerzos de corte viscosos son dominantes se pueden cuantificar con el término de Darcy:

$$Da = \frac{\mu_f}{K} \varphi v_z \quad 5.4$$

Los efectos inerciales se cuantifican con el término de Forchheimer, dado por la siguiente Ecuación:

$$Fr = \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 v_z^2 \quad 5.5$$

Las condiciones de frontera son:

$$t=0 \quad v_z = v_{z0}; v_r = v_{r0} \quad 5.6$$

$$r=0 \quad \frac{\partial v_z}{\partial r} = \frac{\partial v_r}{\partial r} = 0 \quad 5.7$$

$$r=R_t \quad v_z = v_r = 0 \quad 5.8$$

$$z=0 \quad v_z = v_{z0}; v_r = 0 \quad 5.9$$

$$z=L \quad \frac{\partial v_z}{\partial z} = \frac{\partial v_r}{\partial z} = 0 \quad 5.10$$

Donde, los parámetros de permeabilidad para el lecho empacado son:

$$K = \frac{\varphi^2 dp^2}{\alpha (1-\varphi)^2} \quad 5.11$$

$$K_z = \frac{\varphi^3 dp}{\beta(1-\varphi)} \quad 5.12$$

$$\alpha = 1028; \beta = 1.15 \quad 5.13$$

Los valores de α y β son constantes que caracterizan la magnitud de los efectos viscosos e inerciales, respectivamente. Estos valores son característicos del lecho empacado que se estudia y dependen del Re_p y la relación de diámetro de tubo-partícula. Los valores de α y β se estiman a partir de observaciones de caída de presión (Ergun, 1952; Castillo-Araiza et al., 2007).

5.2.2. Perfiles de fracción vacía

Los perfiles de fracción vacía se relacionan con el comportamiento hidrodinámico del lecho empacado. Por ejemplo, un incremento de la velocidad de flujo en la vecindad del sólido se refleja en un espesor de la capa límite despreciable. Por lo contrario, a una velocidad de flujo baja los efectos de fricción en las superficies solidas son dominantes, en este caso el espesor de la capa limite alrededor de las superficies sólidas es importante.

La fracción vacía juega un papel importante en la caída de presión y en la permeabilidad en un lecho empacado, principalmente en un lecho con una relación de d_t/d_p menor a 10. Sin embargo, aún existe incertidumbre en la descripción de los perfiles de fracción vacía y de las distintas configuraciones que tiene el empaque dentro del lecho. Debido a esto, es importante cuantificar los perfiles de fracción vacía en estos sistemas, por su efecto en los campos de velocidad, y por consecuencia en los fenómenos de transporte de calor y masa en reactores de lecho empacado.

Actualmente se emplean varios métodos experimentales para cuantificar los perfiles de fracción vacía. El método más común consiste en colocar resina epóxica en el lecho empacado para mantener a las partículas dentro de una posición fija y medir la fracción vacía, la cual se calcula por un balance de materia. Existen otras técnicas para medir los perfiles de fracción vacía en un lecho empacados, sin embargo, no se tratan en este trabajo

En la aproximación continua se necesita del uso de una correlación que describa el perfil de fracción vacía en el radio del lecho empacado. En este estudio se utiliza la expresión empírica de de-Klerk (De Klerk, A. 2003), la cual se ha caracterizado por describir con relativo éxito a una gran cantidad de perfiles experimentales de

fracción vacía. Esta correlación describe los perfiles de fracción vacía en dos regiones del lecho empacado, cerca de la pared y en el centro:

Para:

$$\frac{(R_T - r)}{dp} < 0.637 \quad 5.14$$

$$\varphi(r) = 2.14 \left[\frac{(R_T - r)}{dp} \right]^2 - 2.53 \left[\frac{(R_T - r)}{dp} \right] + 1 \quad 5.15$$

Para:

$$\frac{(R_T - r)}{dp} > 0.637 \quad 5.16$$

$$\varphi(r) = \varphi_\infty + 0.29 \exp \left[-0.6 \left\{ \frac{(R_T - r)}{dp} \right\} \right] + \cos \left[2.3\pi \left\{ \frac{(R_T - r)}{dp} - 0.16 \right\} \right] + 0.15 \exp \left[-0.9 \left\{ \frac{(R_T - r)}{dp} \right\} \right] \quad 5.17$$

5.3. Aproximación pseudo-continua.

5.3.1. Ecuaciones RANS-E

La formulación de las ecuaciones promediadas, se basa principalmente en dividir el vector velocidad en dos componentes, que toman en cuenta las fluctuaciones debido a la turbulencia y a un componente instantáneo debido a la velocidad en cada punto local dentro de un tubo.

$$v = \bar{v} + v' \quad 5.18$$

$$P = \bar{P} + P' \quad 5.19$$

Partiendo de NS-E y utilizando las consideraciones 5.17 y 5.18 se tiene la siguiente RANS-E:

La ecuación de continuidad.

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \varphi \bar{v}_r) + \frac{\partial \varphi \bar{v}_z}{\partial z} = 0 \quad 5.20$$

Componente z

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} + \overline{v_r} \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial z} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + \varphi (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \overline{v_z}}{\partial z^2} \right]$$

$$- \rho_f \varphi \frac{2}{3} \frac{\partial k}{\partial z} - \varphi \frac{\mu_f}{K} \overline{v_z} - \frac{1}{K_z} \varphi^2 \left[\rho_f \overline{v_z}^2 + \mu_t \left(2 \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} + \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \rho_f k \delta_{ij} \right] + \varphi \rho_f g_z$$

5.21

Componente r

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_r}}{\partial t} + \overline{v_r} \frac{\partial \overline{\varphi v_r}}{\partial r} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{\varphi v_r}}{\partial z} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_r}}{\partial z} + \varphi (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \overline{v_z}}{\partial z^2} \right] \quad 5.22$$

$$- \rho_f \varphi \frac{2}{3} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (rk)}{\partial z} \right) - \varphi \frac{\mu_f}{K} \overline{v_r} - \frac{1}{K_z} \varphi^2 \left[\rho_f \overline{v_r}^2 + \mu_t \left(2 \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial r} + \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} \right) - \frac{2}{3} \rho_f k \delta_{ij} \right]$$

Esta ecuación promediada RANS-E se acopla con los modelos de turbulencia correspondiente para determinar el perfil de velocidad promediado temporalmente en términos de disipaciones turbulentas y producción de energías cinéticas turbulentas (ver apéndice A y B).

5.3.2. Modelo k-ε

El modelo de dos ecuaciones es uno de los más utilizados para modelar la producción y disipación de energía turbulenta. Este modelo consta de ecuaciones, que proporciona información para identificar el efecto turbulento en la hidrodinámica del lecho empacado (Kufner, R. and Hofmann, 1990; Wilcox. David C. 2000)

Para coordenadas cilíndricas las ecuaciones de producción y disipación de energía turbulenta con presencia de sólido están dadas por:

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \overline{v_z} k) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial r} \right] + \left[\mu_t \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \overline{v}}{\partial r} - \rho_f \varepsilon - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi \overline{v_z} + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \overline{v_z}^2 \right]$$

5.22

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \varepsilon \overline{v_z}) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] + \left[\left(C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} \right) - \left(\frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right) \right] \frac{\partial \overline{v}}{\partial r} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \frac{\varepsilon^2}{k} - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi \overline{v_z} + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \overline{v_z}^2 \right] \quad 5.23$$

Los valores de las constantes de cierre se han establecido a partir de trabajos experimentales, y se ha encontrado que funciona bien para una amplia gama de fluidos. Estos valores se utilizan en este estudio y toman los siguientes valores:

$$\sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3, C_{\varepsilon 1} = 1.44, C_{\varepsilon 2} = 1.92, C_\mu = 0.09 \quad 5.24$$

Donde:

La viscosidad turbulenta se define como:

$$\mu_t = \rho_f C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad 5.25$$

La energía cinética turbulenta se define como:

$$k = \frac{1}{2} \bar{v}^2 \quad 5.26$$

Las condiciones de frontera están dadas por:

$$t = 0 \quad v_z = \bar{v}_{z0}; v_r = \bar{v}_{r0} \quad 5.27$$

$$r = 0 \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} = \frac{\partial \bar{v}_r}{\partial r} = 0 \quad 5.28$$

$$r = R_t \quad \bar{v}_z = \bar{v}_r = 0 \quad (\mu_f + \mu_t) \left[\nabla v + (\nabla v)^T - \frac{2}{3} \rho_f k \right] = \rho_f v_r \quad 5.29$$

$$z = 0 \quad v_z = \bar{v}_{z0}; v_r = 0 \quad 5.30$$

$$z = L \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial z} = \frac{\partial \bar{v}_r}{\partial z} = 0 \quad 5.31$$

5.3.3. Modelo k- ω

El modelo K-omega es uno de los más utilizados modelos de turbulencia. Se trata de un modelo de dos ecuaciones, eso significa, que incluye dos ecuaciones de transporte adicionales para representar las propiedades de turbulencia del flujo. Esto permite un modelo de dos ecuaciones para dar cuenta de los efectos de historia como la convección y la difusión de la energía turbulenta. (Kufner, R. and Hofmann, 1990; Wilcox. David C. 2000)

Para coordenadas cilíndricas las ecuaciones de producción y disipación de energía turbulenta con presencia de sólido están dadas por:

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rk\bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu_f + \sigma^* \mu_t) \frac{\partial k}{\partial r} \right] + \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \beta^* \rho_f \omega k - \left[\frac{\mu_f}{K} \phi \bar{v}_z + \frac{\rho_f}{K_z} \phi^2 \bar{v}_z^2 \right] \quad 5.32$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\omega \bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial r} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \beta \rho_f \omega^2 - \left[\frac{\mu_f}{K} \phi \bar{v}_z + \frac{\rho_f}{K_z} \phi^2 \bar{v}_z^2 \right] \quad 5.33$$

Donde:

$$\mu_t = \rho_f \frac{k}{\omega} \text{ y } \varepsilon = \beta^* \omega k \quad 5.34$$

Los valores de las constantes se han establecido a partir de trabajos experimentales, y se ha encontrado que funciona bien para una amplia gama de fluido. Estos valores son utilizados en este estudio y son:

$$\alpha = \frac{5}{9}; \beta = \frac{3}{40}; \beta^* = \frac{9}{100}, \sigma = \frac{1}{2}, \sigma^* = \frac{1}{2} \quad 5.35$$

Aplicando las siguientes condiciones de frontera:

$$t = 0 \quad v_z = \bar{v}_{z0}; v_r = \bar{v}_{r0} \quad 5.36$$

$$r = 0 \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} = \frac{\partial \bar{v}_r}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial k}{\partial r} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = \frac{\partial \omega}{\partial r} = 0 \quad 5.37$$

$$r = R_t \quad \bar{v}_z = \bar{v}_r = 0 \quad \frac{\partial k}{\partial r} = 0; \varepsilon_{wall} = \frac{\rho c_\mu k^2}{k_\nu \mu}; \omega_{wall} = \frac{\rho c_\mu k^2}{k_\nu \mu} \quad 5.38$$

$$z = 0 \quad v_z = \bar{v}_{z0}; v_r = 0 \quad k_{wall} = \frac{3}{2} (v_0 I_T); \varepsilon_{wall} = \frac{c_\mu^{3/4} k^{3/2}}{L_T}; \omega_{wall} = \frac{k^{1/2}}{\beta_0^{1/4} L_T} \quad 5.49$$

$$z = L \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial z} = \frac{\partial \bar{v}_r}{\partial z} = 0 \quad \frac{\partial k}{\partial z} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = \frac{\partial \omega}{\partial z} = 0 \quad 5.40$$

Donde L_T y I_T son la longitud turbulenta y la intensidad turbulenta respectivamente, donde ambas tienen valor de 1.

5.4 Aproximación Local

Para este caso la ecuación de NS no toma en cuenta la interacción solido-fluido (Ergun) ni tampoco una función de fracción vacía ϕ tal como el caso pseudo continuo debido a que el sistema será en 3D. Partiendo de esta idea; la ecuación de NS es de la siguiente manera:

Componente z

$$\rho_f \left[\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] = -\frac{\partial P_z}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] + \rho_f g_z \quad 5.41$$

Componente r

$$\rho_f \left[\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right] = -\frac{\partial P_r}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right] \quad 5.42$$

Componente Θ

$$\rho_f \left[\frac{\partial v_\theta}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right] = -\frac{\partial P_\theta}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] \quad 5.43$$

5.4.1. Ecuaciones RANS

La formulación de las ecuaciones promediadas locales, se basa principalmente en dividir el vector velocidad en dos componentes, que toman en cuenta las fluctuaciones debido a la turbulencia y a un componente instantáneo debido a la velocidad en cada punto local dentro de un tubo. Por lo tanto las ecuaciones RANS son similares a las que se usan en la aproximación de pseudo-continuo.

Esta ecuación promediada RANS se acopla con los modelos de turbulencia correspondiente para determinar el perfil de velocidad promediado temporalmente en términos de disipaciones turbulentas y producción de energías cinéticas turbulentas (ver apéndice A y B).

5.4.2. Modelo k-ε

Para coordenadas cilíndricas las ecuaciones de producción y disipación de energía turbulenta con presencia de sólido están dadas por:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \varepsilon \bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] + \left[\left(C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} \right) - \left(\frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right) \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \frac{\varepsilon^2}{k}$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \varepsilon \bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] + \left[\left(C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} \right) - \left(\frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right) \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \quad 5.44$$

Los valores de las constantes de cierre se han establecido a partir de trabajos experimentales, y se ha encontrado que funciona bien para una amplia gama de fluidos. Estos valores se utilizan en este estudio y toman los siguientes valores:

$$\sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3, C_{\varepsilon 1} = 1.44, C_{\varepsilon 2} = 1.92, C_\mu = 0.09 \quad 5.45$$

Donde:

La viscosidad turbulenta se define como:

$$\mu_t = \rho_f C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad 5.46$$

La energía cinética turbulenta se define como:

$$k = \frac{1}{2} \bar{v}'^2 \quad 5.47$$

Las condiciones de frontera están dadas de igual manera como el caso pseudo-continuo

5.4.3. Modelo k- ω

Para coordenadas cilíndricas las ecuaciones de producción y disipación de energía turbulenta con presencia de sólido están dadas por:

$$\begin{aligned} \rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \omega \bar{v}_z) \right] &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial r} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \beta \rho_f \omega^2 \\ \rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \omega \bar{v}_z) \right] &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial r} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \beta \rho_f \omega^2 \end{aligned} \quad 5.48$$

Donde:

$$\mu_t = \rho_f \frac{k}{\omega} \text{ y } \varepsilon = \beta^* \omega k \quad 5.49$$

Los valores de las constantes se han establecido a partir de trabajos experimentales, y se ha encontrado que funciona bien para una amplia gama de fluido. Estos valores son utilizados en este estudio y son:

$$\alpha = \frac{5}{9}; \beta = \frac{3}{40}; \beta^* = \frac{9}{100}, \sigma = \frac{1}{2}, \sigma^* = \frac{1}{2} \quad 5.50$$

Las condiciones de frontera son similares al caso pseudo-continuo.

Capítulo 6

Resultados y discusiones.

En las siguientes secciones se presentan los resultados obtenidos del estudio hidrodinámico en un lecho empacado con una relación de d_t/d_p igual a 3.048 (ver Tabla 5.1). Este sistema se modela considerando los siguientes casos de estudio:

- Sección 6.1: Se presentan las simulaciones considerando al sistema como pseudo-continuo. Se utilizaron los modelos de NS-E y RANS-E acoplado con modelos $k-\varepsilon$ o $k-\omega$.
- Sección 6.2: Se presentan las simulaciones modelando al sistema localmente. Se utilizaron los modelos de NS y RANS acoplado a las ecuaciones $k-\varepsilon$ o $k-\omega$.
- Sección 6.3: Se comparan los resultados obtenidos en las secciones 6.1 y 6.2

6.1. Aproximación del pseudo-continuo

Las simulaciones que se presentan en esta sección consideran al lecho empacado como una fase continua (aproximación del pseudo-continuo). En esta aproximación se utiliza una ecuación para describir el perfil de fracción vacía que sólo es función del radio del tubo. La Figura 6.1a muestra el lecho empacado que se estudia en este trabajo, donde se observa la presencia de fracciones vacías altas, tanto en la pared del lecho como a un diámetro de partícula de ésta. La Figura 6.1b muestra la predicción de la fracción vacía radial utilizando la correlación de A. de Klerk ([De Klerk, A. 2003](#)). Esta predicción muestra que es capaz de capturar el perfil de fracción vacía que se tiene en el lecho empacado. No obstante, la fracción vacía en cada posición radial es un promedio tangencial y axial; es decir, esta correlación no puede describir la fracción vacía como función de la posición axial y tangencial del sistema.

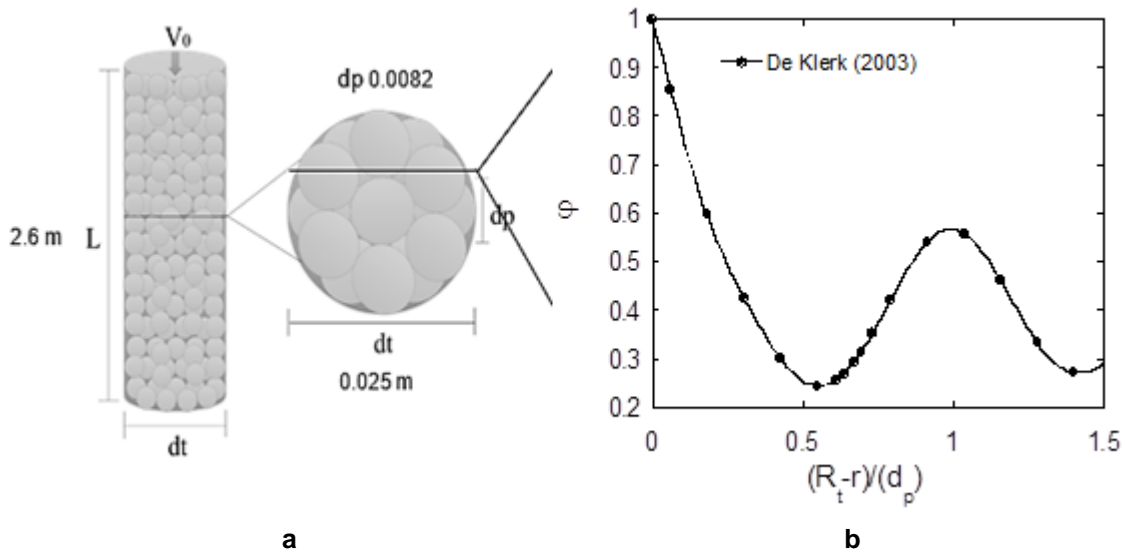


Figura 6.1: a) Lecho empacado a simular con una relación de d_t/d_p igual a 3.048 y b) predicciones de la fracción efectiva utilizando la correlación empírica de A. de-Klerk

La Figura 6.2 muestra datos de caída de presión axial en función del Re_p . Esta clase de datos de caída de presión es esencial para modelar la hidrodinámica en un lecho empacado, ya que la caída de presión es el termino fuente en las ecuaciones de NS-E y RANS-E. En esta misma figura se muestra la capacidad de predicción de la ecuación de Ergun con los parámetros restimados por Castillo-Araiza (Castillo, Araiza, 2008), que son $\alpha=1028$ y $\beta=1.15$. Los valores originales obtenidos por Ergun (Ergun, 1952) son $\alpha=150$ y $\beta=1.75$. La Ecuación de Ergun con los valores originales no predice adecuadamente la caída de presión a Re_p altos. La caída de presión indica que en lecho empacado se tiene un efecto complejo tanto de los fenómenos viscosos como inerciales.

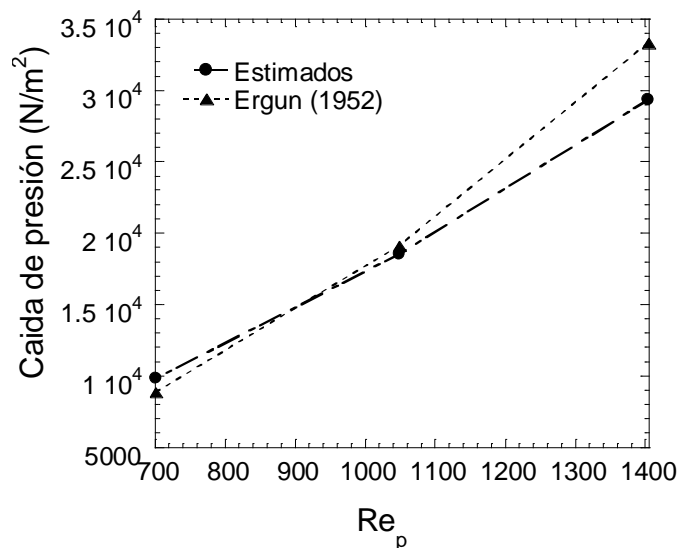


Figura 6.2: Caída de presión en el lecho empacado estudiado (Castillo, Araiza, 2008)

Las Figuras 6.3 y 6.4 presentan los perfiles de velocidad axial en función del radio en el lecho empacado, lo cuales son predichos con las ecuaciones de NS-E (ver capítulo 5) acopladas a la ecuación que describe la fracción vacía (De Klerk. 2003) y utilizando la caída de presión experimental (ver figura 6.2). Esta clase de modelado se utiliza normalmente para simular el comportamiento hidrodinámico en un lecho empacado que presenta una relación de d_i/d_p menor a 10. Las predicciones hidrodinámicas se realizan en el rango de Re_p de 702 a 1405, los cuales son de interés académico ya que son los utilizados a nivel industrial para cierta clase de reacciones, como la oxidación parcial de o-xileno (Castillo, Araiza. 2008). En estas Figuras se observa que la velocidad axial varía en función del radio del lecho pero no es función de la posición axial y tangencial. Esto se debe a que la ecuación de fracción vacía sólo es función del radio. Para todos los Re_p el modelo captura la información del perfil de fracción vacía (ver Figura 6.1b), teniendo las máximas velocidades en la pared del lecho y a un diámetro de partícula de ésta. No se presentan los perfiles de velocidad radial y tangencial ya que su magnitud es cercana a cero como consecuencia de que los gradientes de presión en estas coordenadas radial y tangencial tomaron un valor de cero durante las simulaciones. En estas figuras también se observa que cuando incrementa el Re_p , los fenómenos inerciales se vuelven dominantes con respecto a los viscosos, teniendo como resultado un mayor valor de la velocidad axial local al incrementar el Re_p , tal como se ha observado en trabajos utilizando la aproximación de pseudo-continuo para modelar la hidrodinámica en un lecho empacado presentando una relación de d_i/d_p menor a 10 (Delmas and Froment 1988; Daszkowski and Eigenberger. 1992; Papageorgiou y Froment; Giese et al. 1998).

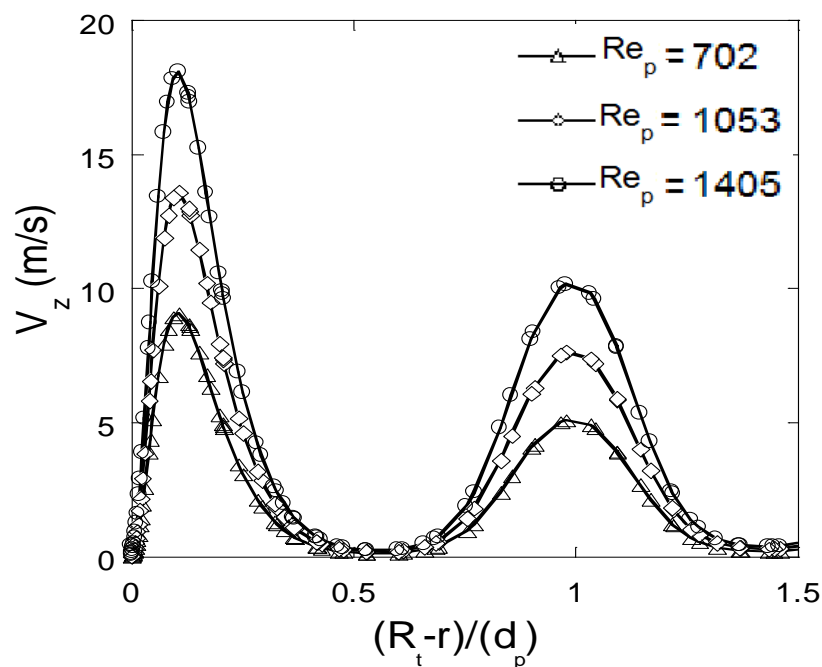


Figura 6.3: Perfil de velocidad axial en función del radio del lecho empacado a diferentes Re_p (702, 1053 y 1405) utilizando la aproximación del pseudo-continuo con las ecuaciones de NS-E.

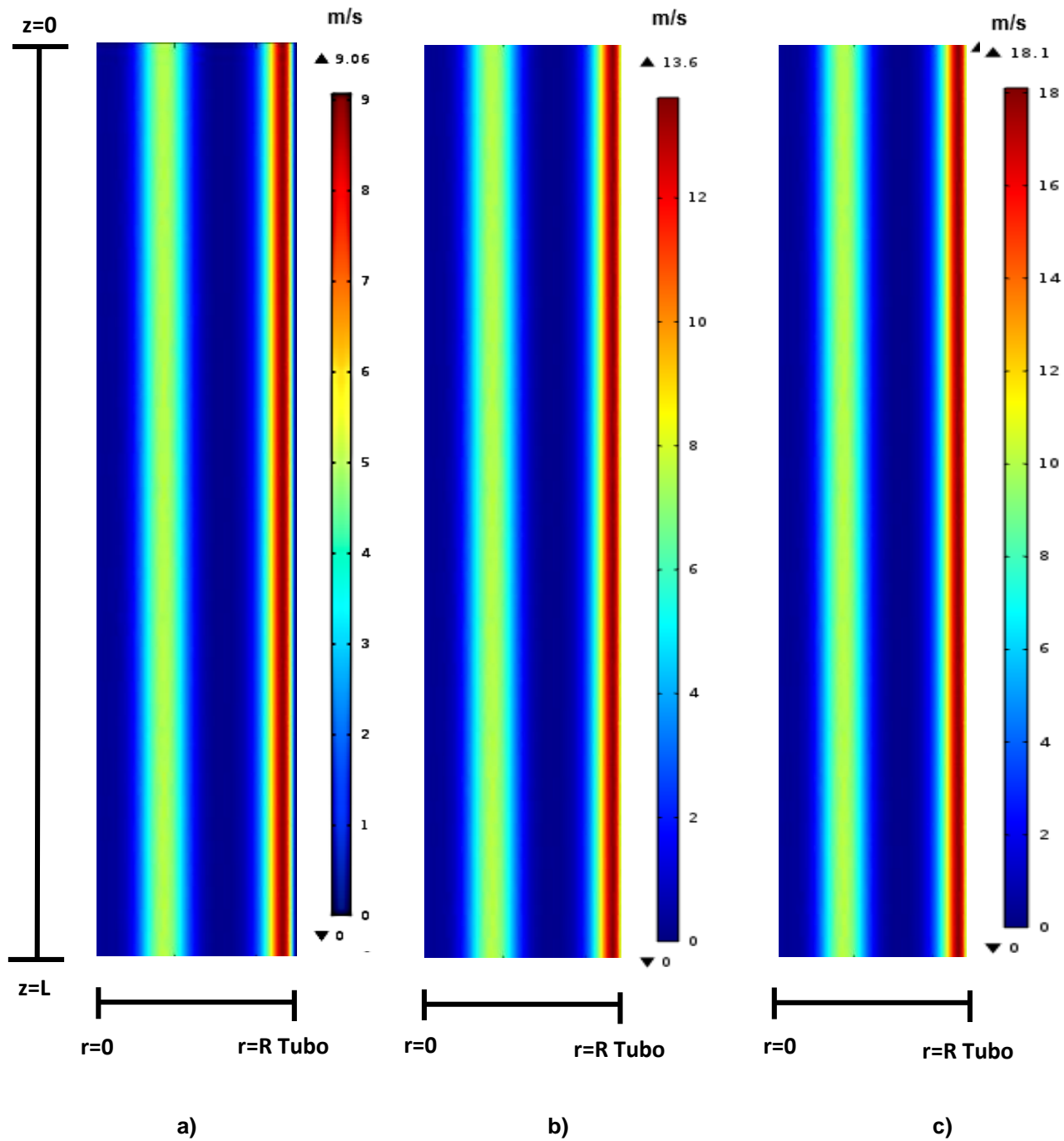


Figura 6.4: Componente de velocidad axial como función del radio y longitud del lecho empacado utilizando las ecuaciones de NS-E. a) Re_p 702, b) Re_p 1053 y c) Re_p 1405

Si bien el uso de las ecuaciones de NS-E utilizando la aproximación del pseudo-continuo es la forma convencional para predecir los perfiles de velocidad en un lecho con una relación de d_t/d_p menor a 10 para Re_p donde se tienen un flujo turbulento, se debe tener claro que este modelo no se desarrolló para describir los perfiles de velocidad en este régimen de flujo. De hecho, hasta donde se tiene conocimiento no hay en la literatura trabajos que modelen esta clase de lechos con baja relación de d_t/d_p utilizando modelos de turbulencia siguiendo la aproximación del pseudo-continuo. Con este antecedente, en este trabajo se utilizan las ecuaciones RANS-E utilizando la aproximación de Boussinesq (E, Spiegel. and G, Veronis. 1960) para evaluar el efecto de los fenómenos turbulentos en la descripción de la hidrodinámica en lecho empacado que se presenta en la Figura 6.1. Las Figuras 6.5 y 6.6 muestran los perfiles de velocidad axial aplicando RANS-E acoplado al modelo k- ϵ para un rango de Re_p de 702 a 1405. Este modelo RANS-E (ver capítulo 5) se acopla a las ecuaciones de fracción vacía (De Klerk. 2003). En la Figura 6.5 se presentan los perfiles de velocidad axial como función del radio del lecho empacado. La velocidad axial alcanza valores mínimos en la pared del lecho y mayores en el centro de éste. La magnitud de la velocidad axial local incrementa a un mayor Re_p . Sin embargo, se observa que la velocidad axial local alcanza un valor mínimo de 1.5 m/s para un Re_p de 702 y un valor máximo de 9.17 m/s para un Re_p de 1405, lo cual es totalmente diferente a lo que se predice con el modelo de NS-E, que predijo una velocidad axial local con un valor mínimo de 0 para los tres Re_p y un valor máximo aproximado de 18.1 m/s para un Re_p de 1405. Los valores de la velocidad axial local predichos con el modelo RANS-E acoplado con k- ϵ sugieren que la viscosidad turbulenta es mucho mayor que la viscosidad del fluido, prediciendo valores de la velocidad axial local menores a aquéllos obtenidos con el modelo NS-E. Estudios en la literatura sobre la teoría de turbulencia relacionada con las cascadas de energía (Rodi, W. 1980; Wilcox, David C. 2000; Kolmogorov. 1962) han elucidado el efecto de la pared en la predicción de las cascadas de energía, comentando sobre la incertidumbre que tienen los modelos de turbulencia de dos ecuaciones para modelar la producción y disipación de energía turbulenta en esta región.

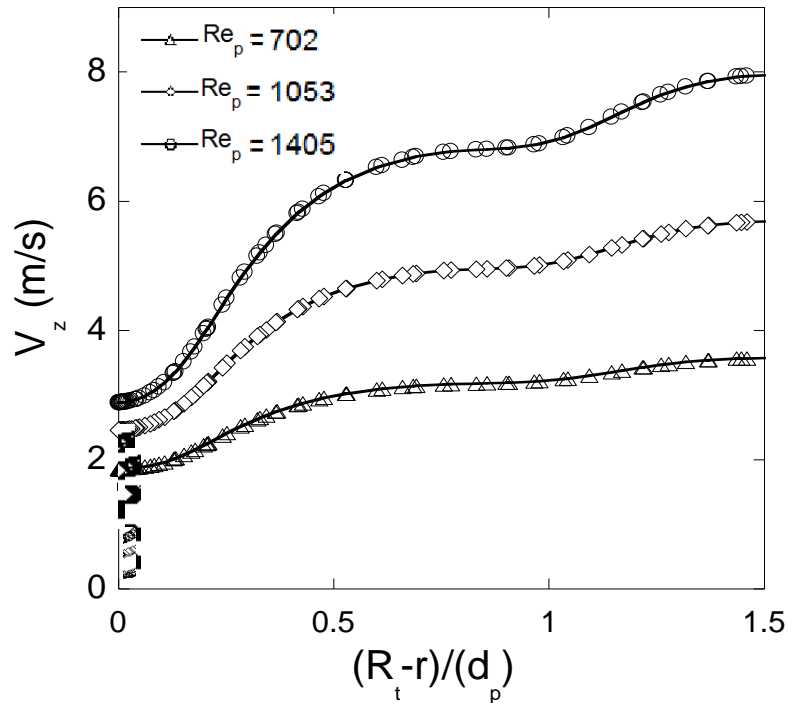


Figura 6.5: Predicciones de la velocidad axial en función del radio del lecho empacado utilizando las ecuaciones RANS-E y $k-\varepsilon$ a Re_p de 702, 1053 y 1405

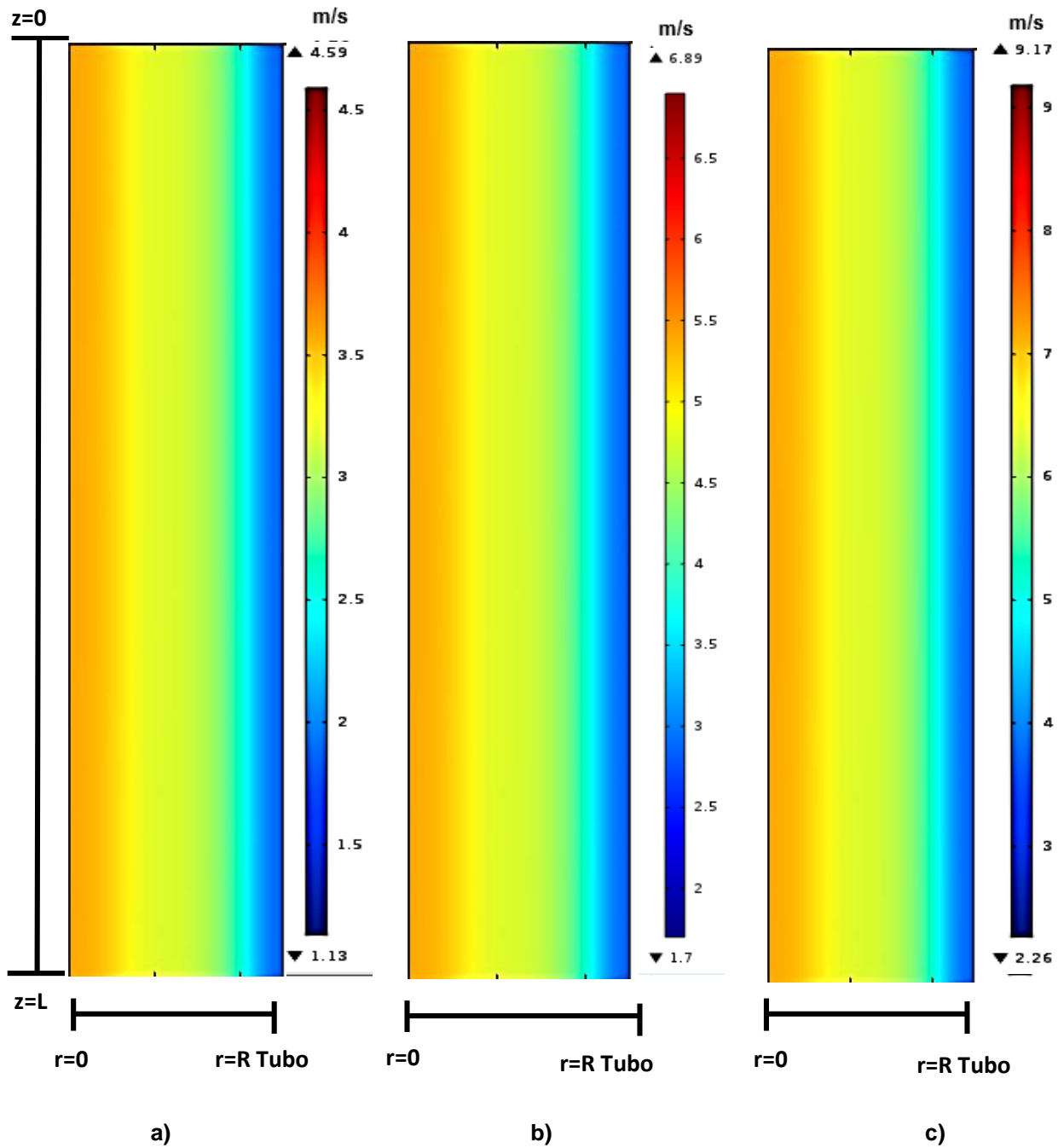


Figura 6.6: Perfil de velocidad de la componente de velocidad axial como función del radio y longitud del lecho empacado utilizando las ecuaciones de RANS-E y $k-\epsilon$ a) Re_p 702, b) Re_p 1053 y c) Re_p 1405

Las Figuras 6.7 y 6.8 presentan los perfiles de velocidad axial aplicando las ecuaciones RANS-E con $k-\omega$ para un rango de Re_p de 702 a 1405. Este modelo RANS-E utilizando $k-\omega$ (ver capítulo 5) se acopla con las ecuaciones de fracción vacía (De Klerk. 2003). En la Figura 6.7 se presentan los perfiles de velocidad axial como función del radio del lecho. La velocidad axial alcanza valores mínimos cerca de la pared del lecho. La magnitud de la velocidad axial local incrementa al incrementar el Re_p . Se observa que la velocidad axial local alcanza un valor mínimo de 2 m/s para un Re_p de 702 y un valor máximo de 6.5 m/s para un Re_p de 1405, teniendo predicciones similares al modelo RANS-E con $k-\epsilon$ pero totalmente diferentes a aquéllas que se obtienen al utilizar el modelo de NS-E. Los valores de la velocidad axial local predichos con las ecuaciones RANS-E con $k-\omega$ o $k-\epsilon$ tienen comportamientos parecidos y predicen órdenes de magnitud similares, lo cual sugiere que estos modelos predicen valores de la viscosidad turbulenta mayores a la viscosidad del fluido (Rodi, W. 1980; Wilcox, David C. 2000; Kolmogorov. 1962), lo cual se relaciona con las predicciones de velocidad obtenidas.

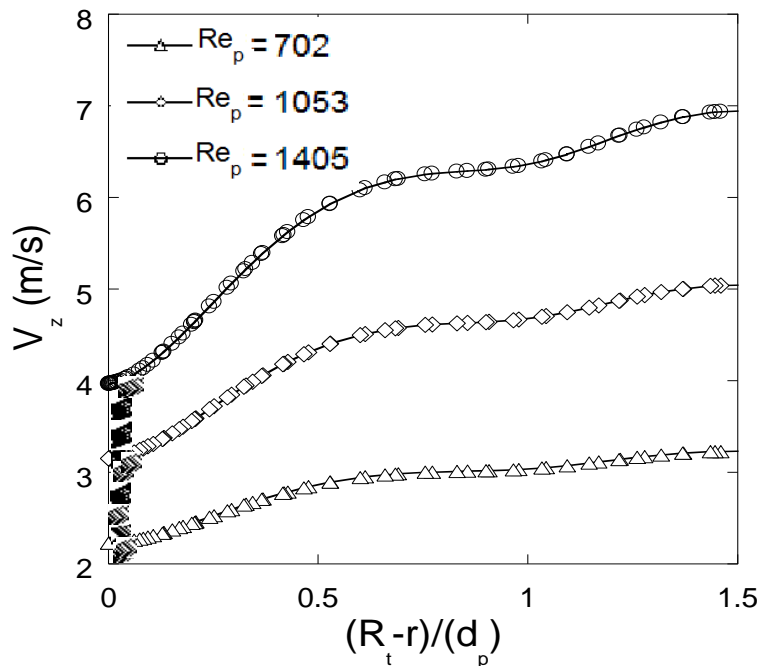


Figura 6.7: Perfil de velocidad axial como función del radio del lecho empacado utilizando las ecuaciones de RANS-E con $k-\omega$ a Re_p 702, 1053 y 1405

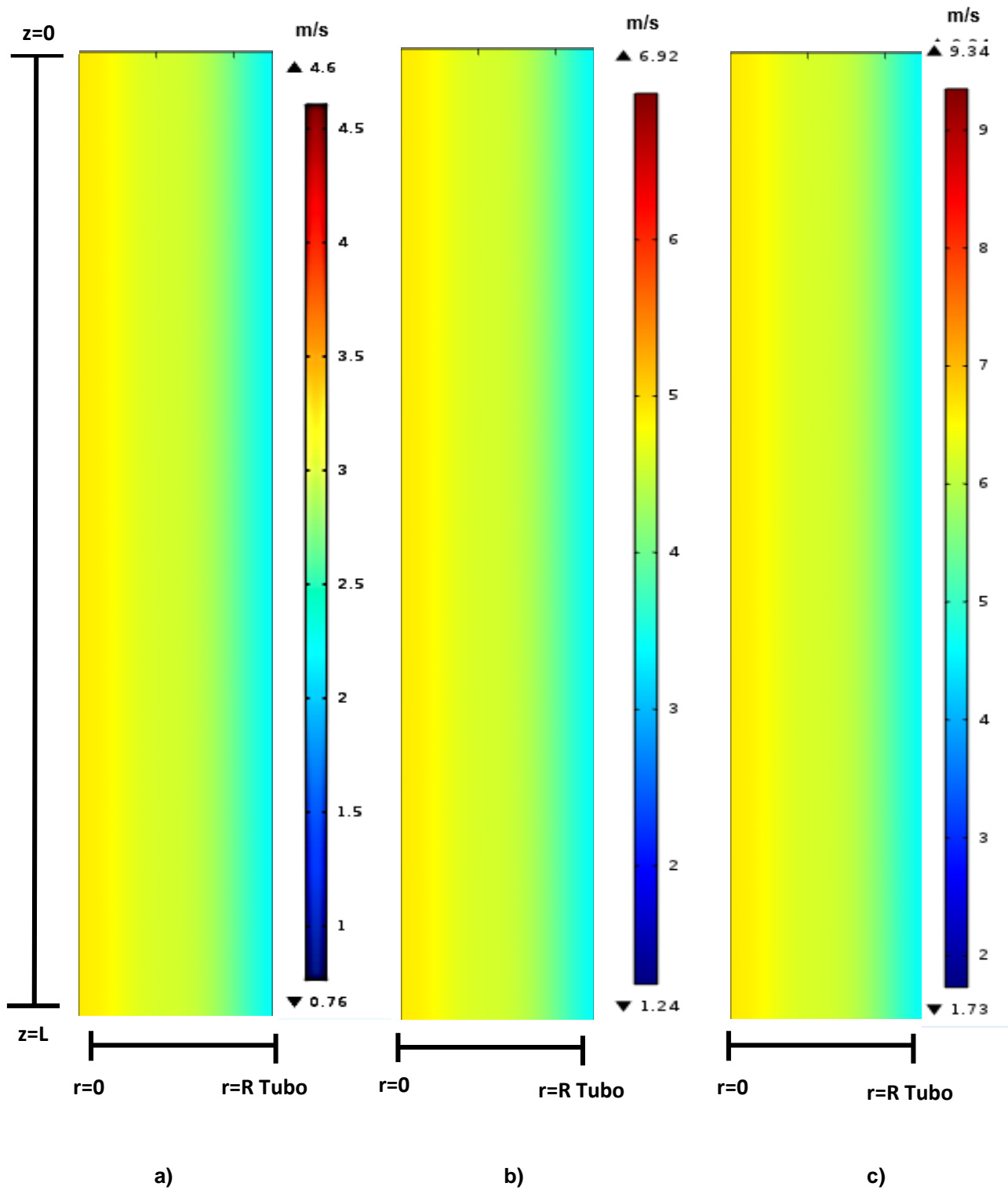


Figura 6.8: Simulaciones de la velocidad axial como función del radio y longitud del lecho empacado utilizando las ecuaciones de RANS-E con $k-\omega$ a) Re_p 702, b) Re_p 1053, c) Re_p 1405

De acuerdo con lo anterior, al utilizar las ecuaciones RANS-E acopladas con $k-\varepsilon$ y $k-\omega$ se predicen perfiles de velocidad similares, indicando como la producción y disipación de energía son predichas con la misma confianza utilizando los modelos de turbulencia $k-\varepsilon$ y $k-\omega$. La Figura 6.9 presenta las viscosidades turbulentas locales aplicando los modelos de turbulencia $k-\varepsilon$ y $k-\omega$. Particularmente en esta figura se muestra el efecto del Re_p en la viscosidad turbulenta. Se observa que la viscosidad turbulenta varía significativamente a lo largo del radio del lecho empacado. El modelo de $k-\varepsilon$ presenta la mayor viscosidad turbulenta en la pared del lecho, de ahí se tienen valores altos a 0.5 y a 1.5 diámetros de partícula de la pared, estos dos valores se obtienen en zonas del lecho empacado donde se tienen las menores fracciones vacías. Por otro lado, el modelo de $k-\omega$ presenta sólo un máximo de viscosidad turbulenta a 0.5 diámetro de partícula de la pared del lecho. Las diferencias se relacionan con la forma en que se define la variable (ε o ω) que se relaciona con las escalas de longitud turbulenta y tiempos promediados, que son clave para predecir adecuadamente los fenómenos de turbulencia. Las predicciones de $k-\varepsilon$ parecen tener sentido ya que altas viscosidades turbulentas se tienen en zonas donde se tiene la presencia de paredes en el lecho empacado (Wilcox, David C. 2000), lo cual se relaciona con la producción y disipación de energía turbulenta. Al relacionar el perfil de velocidad axial con la viscosidad turbulenta, se puede inferir que la variable (ε o ω) que se relaciona con las escalas de longitud y tiempo turbulentas, son significativas en la pared del lecho. Esto va de acuerdo a lo reportado en teorías sobre turbulencia (Kolmogorov, 1962) las cuales muestran que cerca de una pared la energía cinética disminuye y la disipación de la misma aumenta por acción de la formación de remolinos en esta zona.

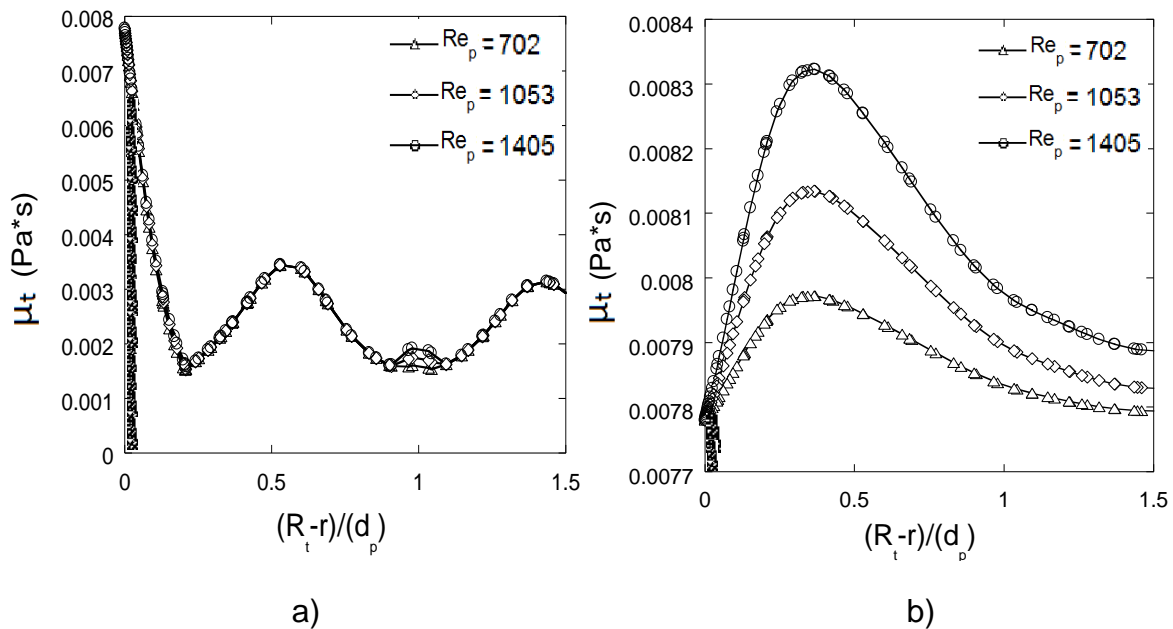


Figura 6.9: Perfil de viscosidad turbulenta a Re_p de 702, 1053 y 1405: a) $k-\varepsilon$ y b) $k-\omega$

En la Figura 6.10 y 6.11 se presenta una comparación de la energía cinética turbulenta y la disipación viscosa, respectivamente como función del radio del lecho, para los modelos de $k-\varepsilon$ y $k-\omega$. En estas figuras se muestra el efecto del Re_p en la energía cinética y su disipación. Para ambos modelos de turbulencia, se observa que aun mismo Re_p la energía cinética y su disipación incrementan al acercarse a la pared del lecho empacado. Así mismo, se encontró que al incrementar el Re_p , la energía cinética y su disipación aumentan su valor. En estas predicciones tanto el modelo $k-\varepsilon$ como el $k-\omega$ predicen ordenes de magnitud similares para la energía cinética y la variable (ε o ω) relacionada con las escalas de longitud turbulenta y tiempo promediado, situación observada por otros autores (Kufner, R. and Hofmann. 1990). Esta similitud se puede relacionar con las predicciones obtenidas de la velocidad axial al aplicar estos dos modelos de turbulencia bajo la aproximación del pseudo-continuo.

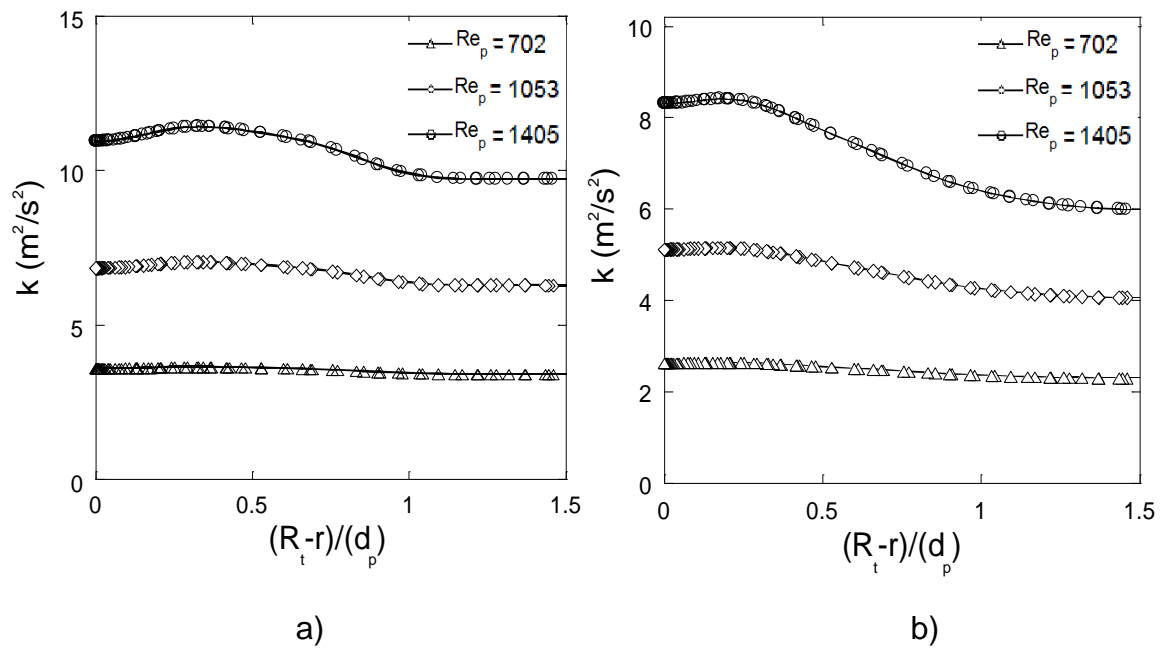


Figura 6.10: Perfil de energía cinética turbulenta a Re_p 702 1053 y 1405: a) $k-\varepsilon$ y b) $k-\omega$.

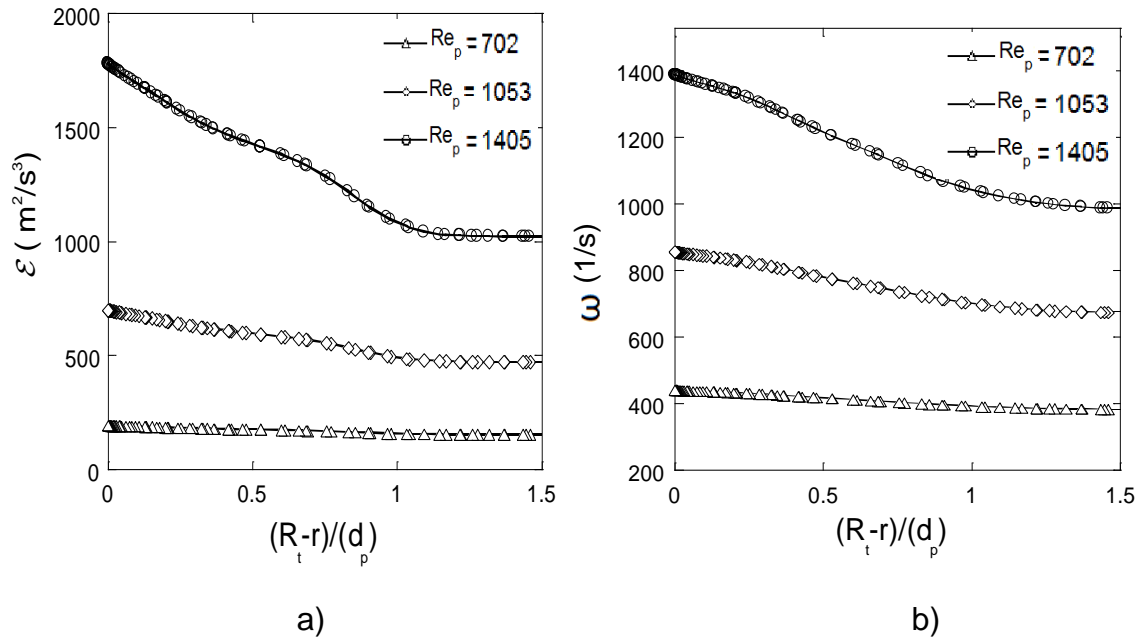


Figura 6.11: Perfil de disipación turbulenta a Re_p 702 1053 y 1405: a) k - ε y b) k - ω

6.2. Aproximación local

Las simulaciones hidrodinámicas que se presentan en esta sección consideran la heterogeneidad del lecho empacado, describiendo localmente el comportamiento de la velocidad (aproximación local). En esta aproximación no se utiliza una ecuación para describir el perfil de fracción vacía que sólo es función del radio del lecho. De tal forma que en las zonas donde pasa el fluido se utilizan las ecuaciones de transporte de momento correspondientes y en las zonas donde se tiene el sólido no se considera la presencia del fluido, algo que sí se consideraba en la aproximación del pseudo-continuo. La Figura 6.12 muestra el lecho empacado en 3D que se estudia en este trabajo y que se describió en el capítulo 5. Se observa la presencia de fracciones vacías altas, tanto en la pared del lecho como a un diámetro de partícula, similares a las que indica la correlación de A. De Klerk (De Klerk, 2003). En esta Figura también se muestran el perfil de fracción vacía radial promediado adimensional del dibujo en 3D. Se observa que la correlación de A. De Klerk fue adecuada para capturar la información de la fracción vacía en la aproximación del pseudo-continuo.

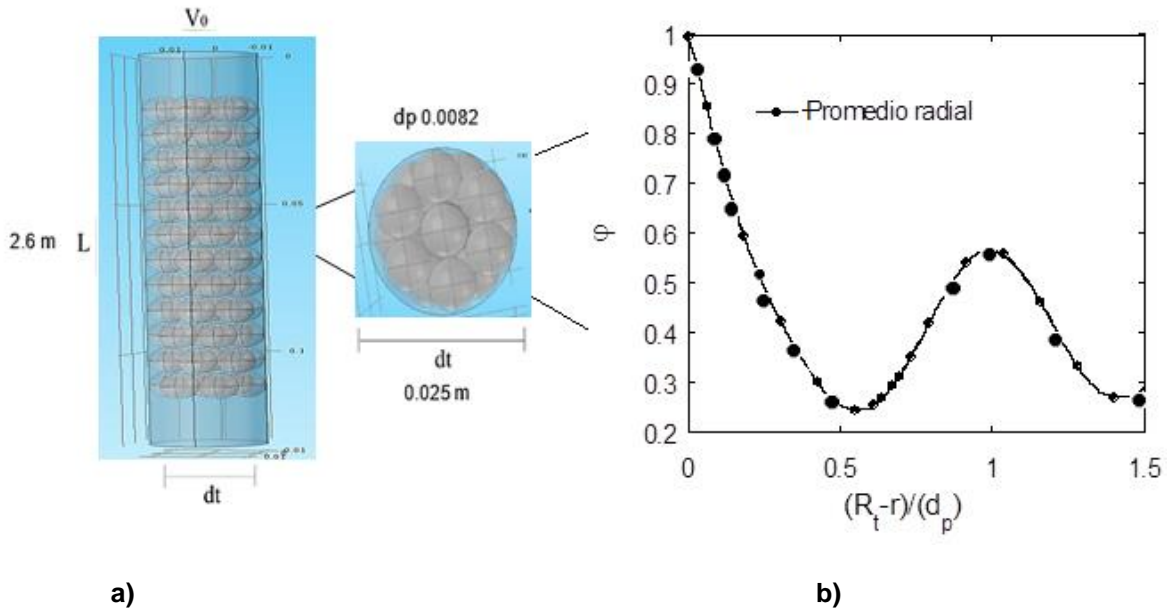


Figura 6.12: a) Lecho empacado a simular mediante la aproximación local, b) Perfil promediado radial local

El modelado lecho empacados que presentan una baja relación de dt/d_p utiliza los modelos de turbulencia de dos ecuaciones bajo el concepto de CFD. Sin embargo, en este trabajo como primer paso se modelo mediante CFD el lecho empacado pero utilizando las ecuaciones de NS. En las Figuras 6.13 y 6.14 se presentan los perfiles de velocidad axial promediados respecto al radio del lecho empacado a un Re_p de 1405. En esta figura la velocidad mayor se encuentra cerca de la pared del lecho y a un diámetro de partícula de ésta. Se observa que velocidades de cero son observadas en la pared del lecho y en el centro del lecho, lo cual tiene sentido al ver el arreglo de partículas que se muestra en la Figura 6.12. Similar a las predicciones cuando se utiliza la aproximación del pseudo-continuo, las mayores velocidades locales se tienen en zonas de alta fracción vacía.

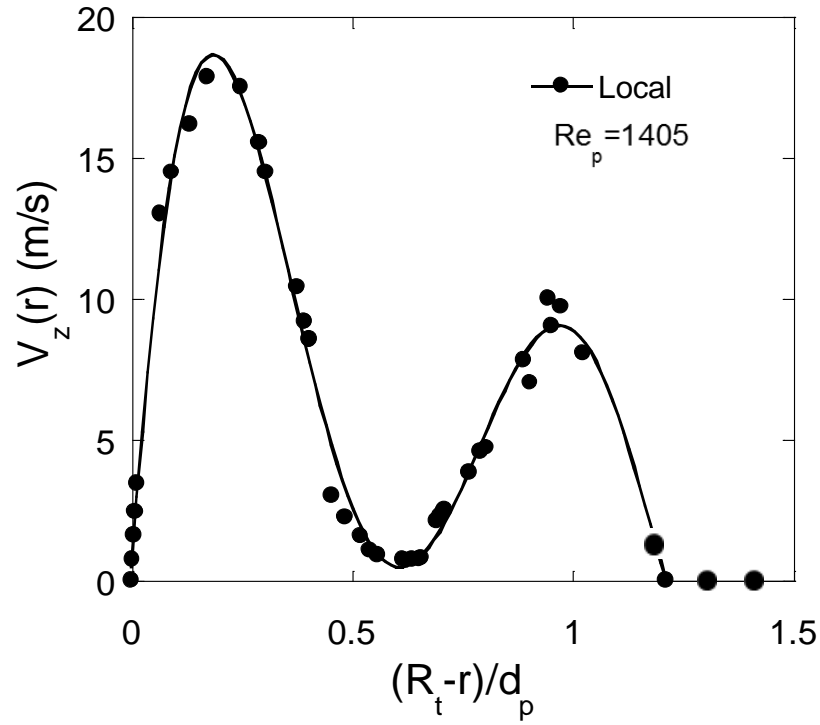


Figura 6.13: Perfil de velocidad axial promediado en la coordenada radial y tangencial aplicando las ecuaciones de NS a un Re_p de 1405.

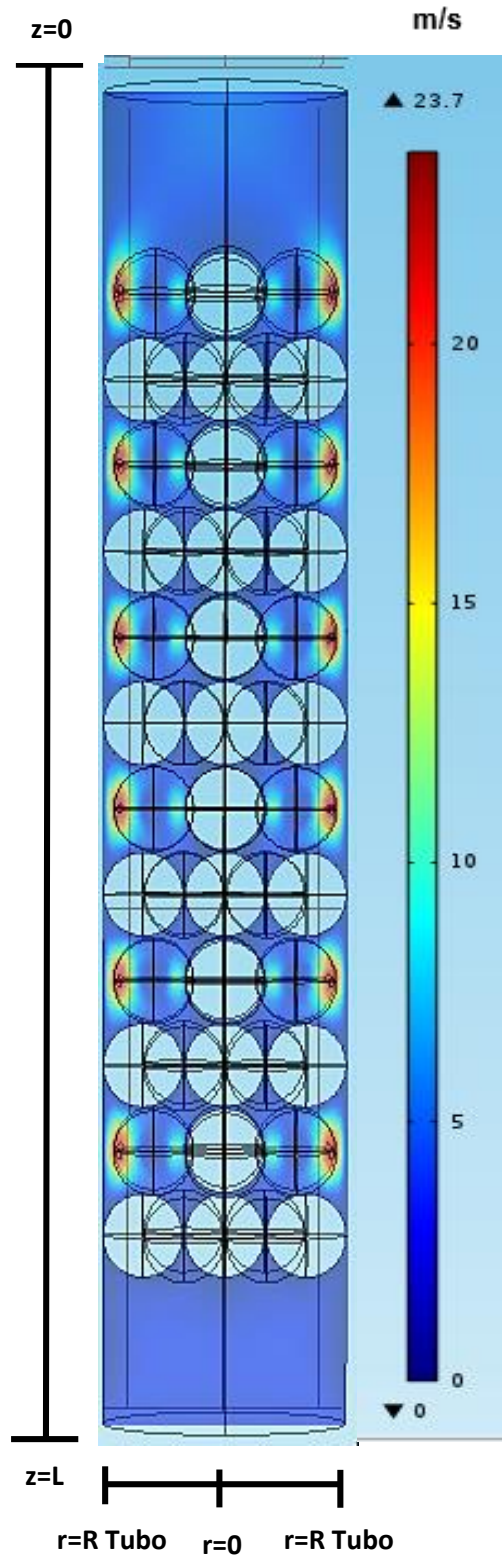


Figura 6.14: Campo de velocidad axial en el lecho empacado aplicando las ecuaciones de NS a un Re_p de 1405.

Las Figuras 6.15a y 6.15b presentan los perfiles de velocidades axial y radial promediados, respectivamente. Estos perfiles de velocidad se predicen al usar los modelos RANS acoplados a $k-\omega$ o $k-\epsilon$ para un Re_p de 1405. Se observa que tanto el modelo $k-\omega$ como $k-\epsilon$ predicen comportamientos similares de velocidad axial y velocidad radial, teniendo máximos de velocidad local en la pared del lecho y alrededor de un diámetro de partícula de ésta. No obstante el modelo $k-\omega$ predice magnitudes de velocidad mayores, i.e., en la pared la velocidad axial es 25 m/s para $k-\omega$ y 10 m/s para $k-\epsilon$, mientras que para la velocidad radial, cerca de la pared, la máxima velocidad local es de 1.4 m/s para $k-\epsilon$ y 0.15 m/s para $k-\omega$. Al comparar las predicciones del modelo RANS con aquéllas de NS, se observa que la velocidad no es cero en la pared del lecho, lo cual se debe, a la formación de remolinos en esta zona, (Eric Furbo. 2010). Los valores de la velocidad axial predichos con el modelo RANS acoplado con $k-\omega$ o $k-\epsilon$ tienen magnitudes similares al modelo NS. Ambos modelos de turbulencia predijeron una viscosidad turbulenta mucho mayor a la viscosidad del fluido. Este valor de viscosidad turbulenta se relaciona con los valores predichos de la producción de energía turbulenta (ver Figura 6.17a) y su disipación (ver Figura 6.17b y Figura 6.17c). Estos resultados concuerdan con aquellos estudios sobre turbulencia en lechos sin empaque donde una mayor velocidad local provoca que la producción y disipación de energía sea dominante (Rodi, W. 1980; Wilcox. David C. 2000; Guo B. and Yu A. 2003).

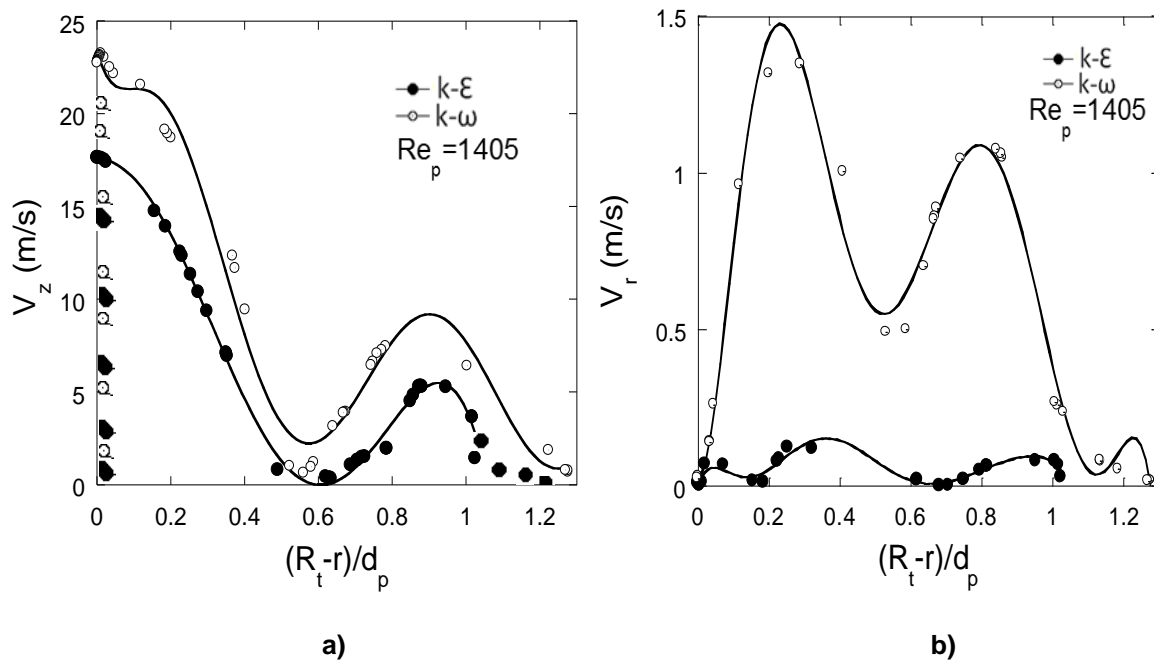


Figura 6.15: Perfil de velocidad bajo la consideración del flujo turbulento a nivel local a un Re_p 1405. a) Velocidad axial respecto al radio y b) velocidad radial respecto al radio

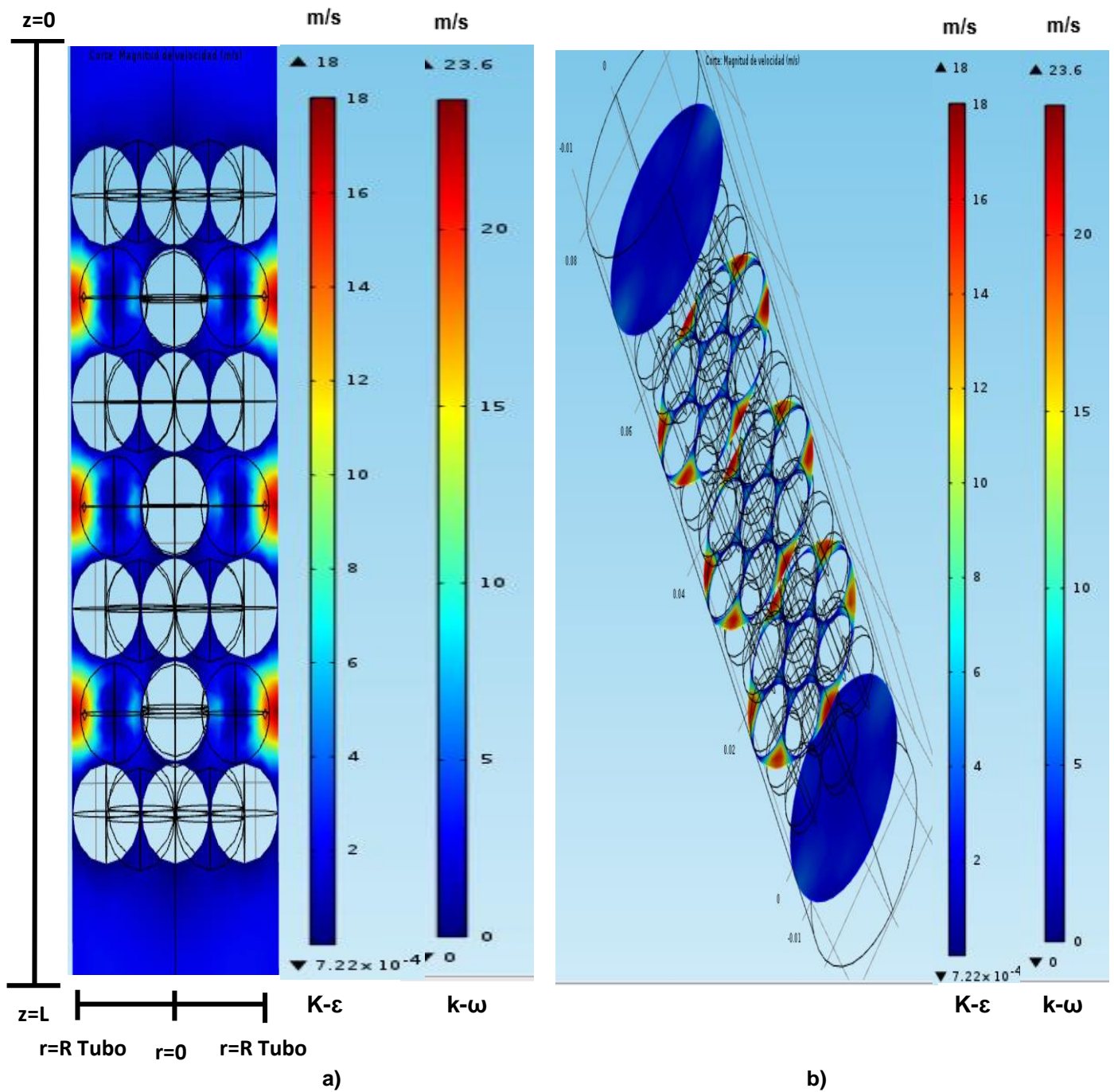
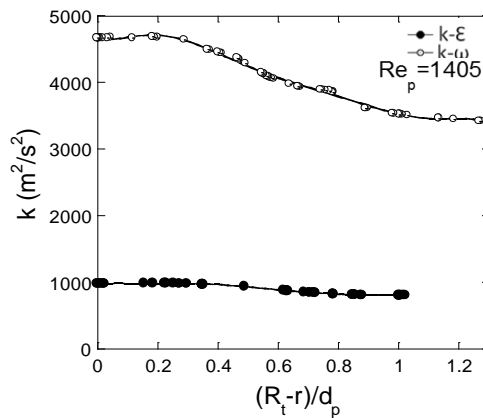
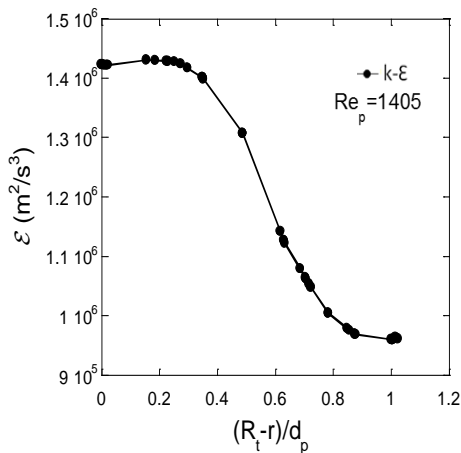


Figura 6.16: Perfil de velocidad bajo la consideración del flujo turbulento a nivel local a un Re_p 1405 A) velocidad axial respecto al radio, B) velocidad radial respecto al radio

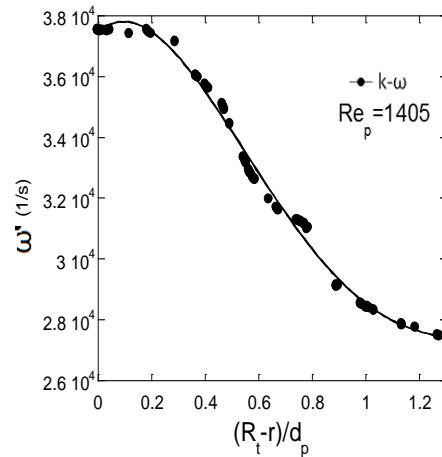
En la Figura 6.17 se presenta la energía cinética turbulenta y su disipación como función del radio del lecho, simulados con el modelo RANS acoplado a $k-\epsilon$ o $k-\omega$. Esta figura muestra como la variación de la energía cinética y su disipación aumenta al acercarse a la pared del lecho. La energía como su disipación predicha con $k-\epsilon$ o $k-\omega$ es similar en comportamiento, pero no en orden de magnitud, lo cual indica que cada modelo de turbulencia predice de manera diferente las cascadas de energía turbulentas. La Figura 6.18 presenta las viscosidades turbulentas respecto al radio del lecho utilizando los modelos $k-\epsilon$ o $k-\omega$ para un Re_p de 1405. En estos perfiles se observa una mayor magnitud de viscosidad turbulenta ($0.17 \text{ Pa}\cdot\text{s}$) usando $k-\epsilon$ con respecto a la viscosidad turbulenta que se obtiene ($0.04 \text{ Pa}\cdot\text{s}$) al utilizar $k-\omega$.



a)



a)



c)

Figura 6.17: Perfiles de energía y disipación bajo la consideración del flujo turbulento a nivel local a un Re_p 1405. a) Energía cinética turbulenta $k-\epsilon$ vs $k-\omega$ vs NS, b) disipación viscosa $k-\epsilon$ y b) disipación viscosa $k-\omega$

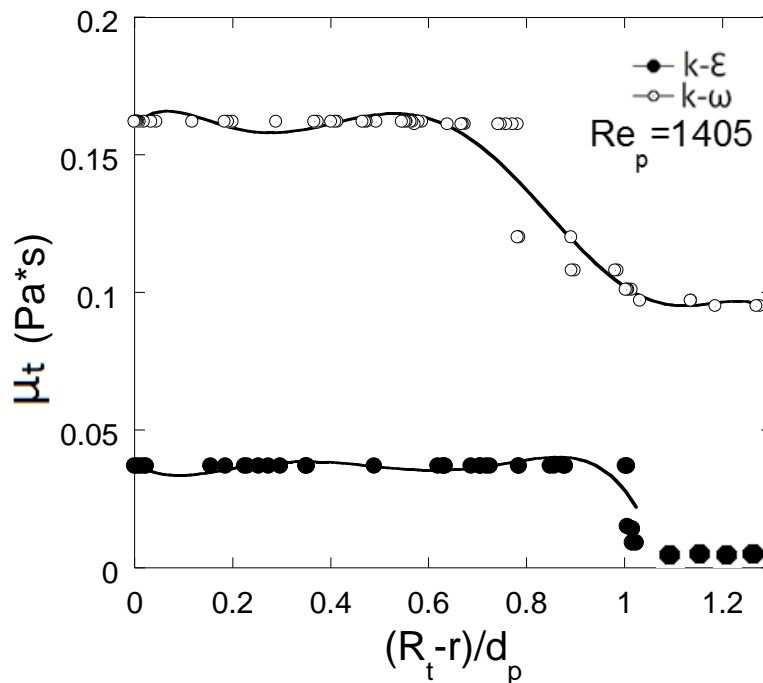
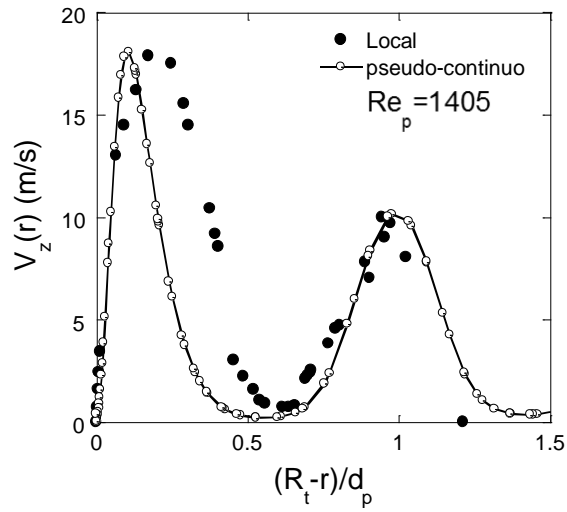


Figura 6.18: comparación de los perfiles de viscosidad turbulenta local para los 3 casos de estudio (k- ϵ , k- ω y NS) usando $Re_p=1405$

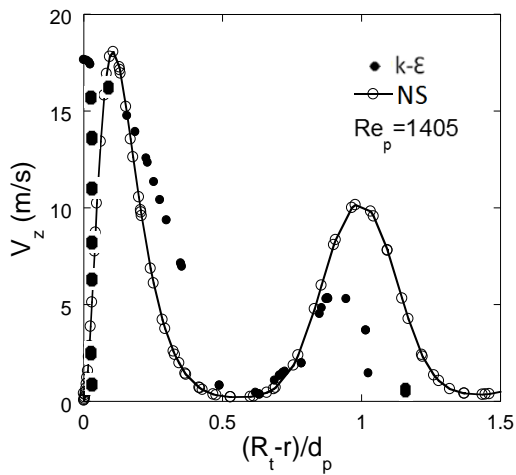
6.3. Aproximación pseudo-continua versus aproximación local

La Figura 6.19 muestra una comparación entre la aproximación pseudo-continua y aproximación local. La Figura 6.19a muestra una comparación de los perfiles de velocidad axial promediados en función del radio predichos con NS-E y NS (CFD). Ambas aproximaciones predicen máximas velocidades locales en las regiones de alta fracción vacía, cerca de la pared y a un diámetro de partícula de ésta. La aproximación local predice una amplitud del perfil de velocidad axial cerca de la pared mayor que aquél que se predice con la aproximación del pseudo-continuo. La Figura 6.19b muestra una comparación de los perfiles de velocidad axial promediados en función del radio del lecho al utilizar las ecuaciones de NS-E y RANS acoplada con k- ϵ . La Figura 6.19c muestra una comparación de los perfiles de velocidad axial promediados en función del radio del lecho al utilizar las ecuaciones de NS-E y RANS acoplada con el modelo de turbulencia k- ω . Las simulaciones con la aproximación local predice perfiles de velocidad similares a los obtenidos con la aproximación de continuo utilizando el modelo NS-E, sin embargo,

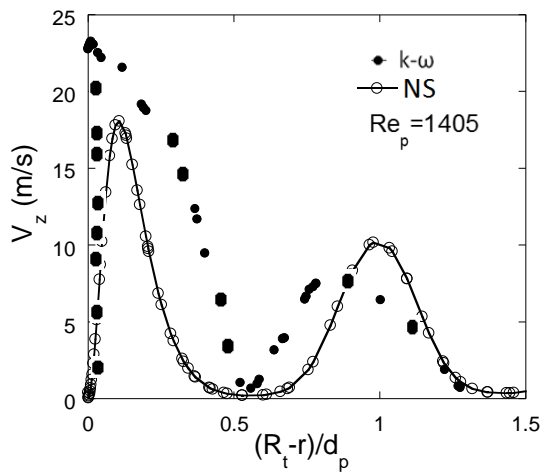
los modelos de turbulencia no predicen una velocidad igual a cero en la pared del lecho, lo cual se relaciona con la presencia de remolinos en esta zona. La Figura 6.19b muestra una comparación de los perfiles de velocidad axial promediados en función del radio del lecho al utilizar las ecuaciones de RANS-E y RANS acopladas con $k-\epsilon$. La Figura 6.19c muestra una comparación de los perfiles de velocidad axial promediados en función del radio del lecho al utilizar las ecuaciones de RANNS-E y RANS acopladas con el modelo de turbulencia $k-\omega$. Estas figuras muestran que los modelos de turbulencia utilizando la aproximación del continuo predicen perfiles de velocidad totalmente diferentes a aquéllos obtenidos con la aproximación local. Lo que relaciona con una mala predicción de la producción y disipación de energía turbulenta cuando la aproximación continua se aplica. Con base en lo anterior, los resultados sugieren que el modelado de la hidrodinámica en lechos empacados con baja relación de diámetro de tubo a partícula es un tema aún sin resolver. La aproximación del pseudo-continuo utilizando la ecuación de NS-E parece ser suficiente para predecir el campo de velocidad, sin embargo, simulaciones bajo condiciones de reacción utilizando tanto la aproximación local como la del pseudo-continuo son necesarias para llegar a una conclusión contundente.



a)



b)



c)

Figura 6.19: Perfil de velocidad axial utilizando la aproximación local y del pseudo-continuo aplicando las ecuaciones de NS y RANS: a) NS-E vs. NS, b) NS-E vs RANS acoplado con k-ε y c) NS-E vs RANS acoplado con k-ω. Usando un Re_p 1405

Capítulo 7

Conclusiones

Debido a los altos tiempos de computo, en el modelado de reactores catalíticos se necesitan de modelos hidrodinámicos que consideren al sistema como pseudo-continuo, sin embargo esta clase de modelos ignoran el efecto de la turbulencia. En este trabajo se estudió el efecto de la turbulencia en la hidrodinámica en un lecho empacado con baja relación diámetro de tubo-partícula de 3.048 para un rango de Re_p entre 702-1405. Para esto, el lecho empacado se modeló siguiendo dos aproximaciones. En la primera se predijeron los perfiles de velocidad considerando al sistema como pseudo-continuo y en la segunda se predijeron los perfiles de velocidad de manera local mediante CFD.

Los resultados mediante la aproximación local sugieren que las ecuaciones RANS acopladas con modelos de turbulencia de dos ecuaciones $k-\epsilon$ o $k-\omega$ no son capaces de describir el comportamiento de un lecho empacado bajo la consideración del pseudo-continuo. Particularmente se infiere una sobreproducción de energía turbulenta cerca de la pared del lecho que resulta en valores sobrestimados de la viscosidad turbulenta en esta zona y a lo largo del radio del lecho que provoca un efecto significativo de los esfuerzos de corte viscosos y turbulentos sobre el campo de velocidad del fluido. Lo anterior hace que las velocidades en zonas de alta fracción vacía sean menores que aquellas velocidades obtenidas con la aproximación local o incluso con las ecuaciones de NS siguiendo la aproximación del pseudo-continuo. Esta mala predicción de los modelos de turbulencia siguiendo la aproximación del pseudo-continuo se relaciona con los términos heurísticos que se emplean para considerar la generación de turbulencia debido a la presencia del sólido en el lecho empacado. Por lo que nuevas aproximaciones son necesarias para utilizar esta clase de modelos de turbulencia.

Con base en los resultados obtenidos se sugiere que para modelar la hidrodinámica se utilice las ecuaciones RANS pero que la viscosidad turbulenta sea un parámetro efectivo que sea estimado mediante el uso de observaciones de velocidad experimentales u obtenidas mediante la aproximación local. En la siguiente figura se muestra un ejemplo de esta aproximación para describir observaciones en un lecho empacado con esferas que tiene una relación de d_t/d_p igual a 5.1 a un Re_p de 618. Este perfil muestra el perfil de velocidad respecto al radio del lecho. El valor de la viscosidad efectiva tiene un valor de 1.7×10^{-6} Pa*s. Con este parámetro efectivo estimado de viscosidad usando RANS, el perfil de velocidad se comporta de manera

similar a las ecuaciones de NS-E. Esto indica que no es necesario aplicar modelos de 2 ecuaciones para describir flujos turbulentos, si se estiman parámetros efectivos que tomen en cuenta el nivel de turbulencia.

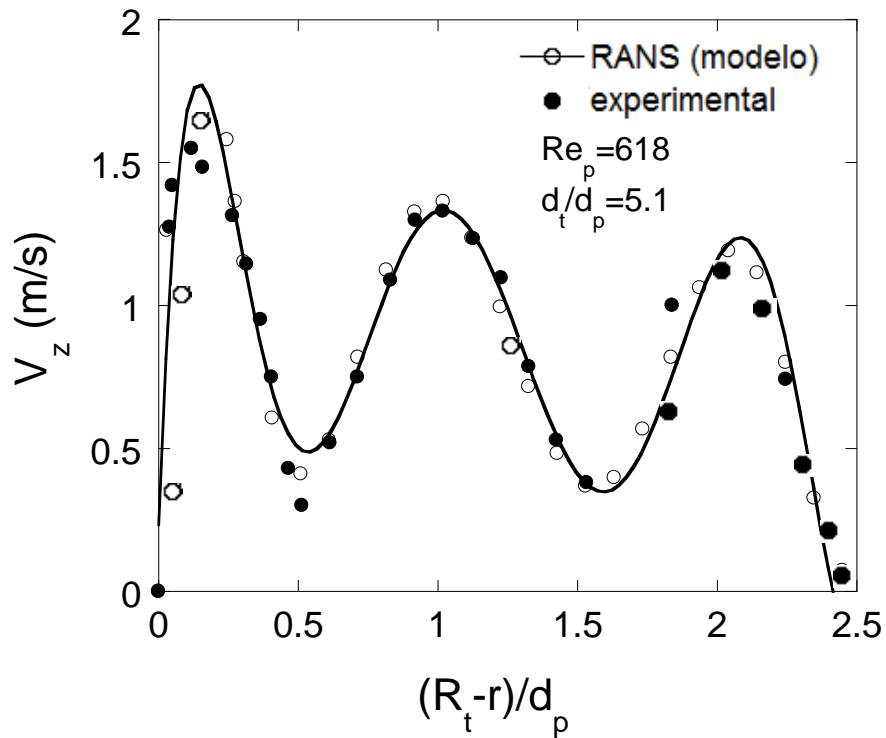


Figura 7.1: Perfiles de velocidad comparando observaciones (Eigenberger, G. 1997) y un modelo turbulento aplicando RANS, estimando una viscosidad efectiva que considera la viscosidad turbulenta y del fluido ($\mu_t + \mu_i$).

Referencias

- [1] Bakker. The focus of the class is on applied Computational Fluid Dynamics (CFD). Course materials can be found below. Cambridge University Press.2002-2006.
- [2] Bey, O., Eigenberger, G. (1997). Fluid Flow and through catalyst filled tubes. Chemical Engineering Science 52, 1365-1376.
- [3] Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N. (2002). Transport Phenomena. 2a ed. John Wiley & Sons, Inc., N.Y.
- [4] Brinkman, H., C. (1947). A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. Applied Scientific Research (A1), 27-34.
- [5] Castillo, Araiza, C. (2007). Estudio del comportamiento del reactor de Oxidación de o-xileno a anhídrido ftálico. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, Tesis Doctoral, México.
- [6] Castillo, Araiza., Jiménez, Islas, H., and López, Isunza, F. (2007). Heat transfer studies in packed bed catalytic reactors of low tube/particle diameter radio. Industrial and Engineering Chemistry Research 46, 7426-7435.
- [7] Castillo, Araiza, C.O. and López, Isunza, F. (2008). Hydrodynamic Models for Packed Beds with Low Tube-to-Particle Diameter Ratio. International Journal of Chemical Reactor Engineering. Vol.6, Article 1.
- [8] Darcy, H. (1856). Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon, Dalmon, Paris.
- [9] Daszkowski, T., Eigenberger, G. (1992). Are-evaluation of fluid flow heat transfer and chemical reaction in catalyst filled tubes. Chemical Engineering Science 47, 2245-2250.
- [10] Delmas, H., and Froment, G.F. (1988). A simulation model accounting for structural radial no uniformities in fixed bed reactors. Chemical Engineering Science 43, 2281-2287.
- [11] De Klerk, A. (2003). Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratios. Journal of American Institute of Chemical Engineers 49, 2022-2029.

- [12] Dixon A. G., Nijmeisland M. and Stitt E. H. "Packed tubular reactor modeling and catalyst design using computational fluid dynamics" *Adv. Chem. Eng.* Vol. 31, 307- 389 (2006).
- [13] Ergun, S. (1952). Fluid flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress*, 48, 89-94.
- [14] Forchheimer. (1935). *Tratado de hidráulica*. Ed. Labor Barcelona Spain.
- [15] Giese, M, Rottshafer, K. and Vortmeyer, D. (1998). Measured and modeled superficial flow profiles in packed beds with liquid flow. *AIChE Journal* 44, 484-490.
- [16] Guo B., Yu A., Wright B., Zulli P., "Comparison of several turbulence models applied to the simulation of gas flow in a packed bed", *Third International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries CSIRO, Melbourne, Australia*; pp: 509-514, 10-12 Dec. (2003).
- [17] Henkes, R.A.W.M., Van der Vlugt, F.F. and Hoogend, C.J. (1991). Natural convection flow in a square cavity calculated with low-Reynolds-number turbulent models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34. (2), P.p.337 388.
- [18] Jones, W.P. and Launder, B.E. (1973). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*.
- [19] Kaviany, M. (1995) *Principles of heat transfer in porous media*. Springe-Verlag, N.Y
- [20] Kufner, R. and Hofmann, (1990). Implementation of radial porosity and velocity distribution in a reactor model for heterogeneous catalytic gas phase reactions. *Chemical Engineering Science* 8, 2141-2147.
- [21] Logtenberg, S. and Dixon A. G. (1998). Computational fluid dynamics studies of fixed bed heat transfer. *Chemical Engineering and Processing*. Vol. 37.P.p 7-21.
- [22] López-Isunza, F. (1983). *Steady State and Dynamic Behavior of an Industrial Fixed Bed Catalytic Reactor*. Ph.D. Thesis, Imperial College University of London.
- [23] Magnico P., "Hydrodynamic and transport properties of packed beds in small tube-to-sphere diameter ratio: pore

scale simulation using an Eulerian and a Lagrangian approach”, Chemical Engineering Science, Vol. 58, Issue 22, 5005-5024 (2003).

[24] Martínez, M. Pallares, J., López, J., López, A., Albertos, F., García, M. A. (2012). Numerical simulation of the liquid distribution in a trickle-bed reactor. Chemical Engineering Science 76, 49-57.

[25] Molerus, O., (1977). Druckverlustg Leichung fur die Durch-stromung von Kugelschuttungen im Laminaren und im Ubergangs bereich,” Chem. Eng. Tech., 49, 675.

[26] Morales, M., Spinn, C.W. and Smith J. M. (1951). Velocities and Effective Thermal Conductivities in Packed Beds. Industrial and Engineering. Engineering and Process development, P.p. 225, 231.

[27] Nakayama, A. and Kuwahara, F. (1999). A macroscopic turbulence model for flow in a porous medium, 72,269-275.

[28] Nijemeisland, M. and Dixon, A.G. (2001a). Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed, Chem. Eng. J., 82: 23.

[29] Nijemeisland, M. and Dixon, A.G. (2004b). CFD Study of Fluid and Wall Heat Transfer in a Fixed Bed of Spheres, AIChE J., 50: 906-921.

[30] Papageorgiou, J.N., Froment, G.F. (1995). Simulation models accounting for radial voidage profiles in fixed-bed reactors. Chemical Engineering Science 50 (19), 3043.

[31] Rodi, W. 1980. Turbulence models and their applications in hydraulics. IAHR Monograph, Junio.

[32] Henkes, R.A.W.M., Van der Vlugt, F.F. and Hoogend, C.J. (1991). Natural convection flow in a square cavity calculated with low-Reynolds-number turbulent models. International Journal of Heat and Mass Transfer, 34. (2), P.p.337 388.

[33] Jones, W.P. and Launder, B.E. (1973). The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. International Journal of Heat and Mass Transfer.

[34] Kaviany, M. (1995) Principles of heat transfer in porous media. Springer-Verlag, N.Y

[35] Kufner, R. and Hofmann, (1990). Implementation of radial porosity and velocity distribution in a reactor model for heterogeneous catalytic gas phase reactions. Chemical Engineering Science 8, 2141-2147.

[36] Logtenberg, S. and Dixon A. G. (1998). Computational fluid dynamics studies of fixed bed heat transfer. Chemical Engineering and Processing. Vol. 37.P.p 7-21.

[37] López-Isunza, F. (1983). Steady State and Dynamic Behavior of an Industrial Fixed Bed Catalytic Reactor. Ph.D. Thesis, Imperial College University of London.

[38] Martínez, M. Pallares, J., López, J., López, A., Albertos, F., García, M. A. (2012). Numerical simulation of the liquid distribution in a trickle-bed reactor. Chemical Engineering Science 76, 49-57.

[39] Molerus, O., (1977). Druckverlustg Leichung fur die Durch-stromung von Kugelschuttungen im Laminaren und im Ubergangs bereich,," Chem. Eng. Tech., 49, 675.

[40] Morales, M., Spinn, C.W. and Smith J. M. (1951). Velocities and Effective Thermal Conductivities in Packed Beds. Industrial and Engineering. Engineering and Process development, P.p. 225, 231.

[41] Nakayama, A. and Kuwahara, F. (1999). A macroscopic turbulence model for flow in a porous medium, 72,269-275.

[42] Nijemeisland, M. and Dixon, A.G. (2001a). Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed, Chem. Eng. J., 82: 23.

[43] Nijemeisland, M. and Dixon, A.G. (2004b). CFD Study of Fluid and Wall Heat Transfer in a Fixed Bed of Spheres, AIChE J., 50: 906-921.

[44] Papageorgiou, J.N., Froment, G.F. (1995). Simulation models accounting for radial voidage profiles in fixed-bed reactors. Chemical Engineering Science 50 (19), 3043.

[45] Pedras, M.H.J. and de Lemos, M.J.S. (2001). Macroscopic turbulence modeling for incompressible flow through undefomable porous media, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 44, 1081-1093.

[46] Rodi, W. 1980. Turbulence models and their applications in hydraulics. IAHR Monograph, Junio.

[47] Saunders, O. A., and Ford, H. (1940). Heat Transfer in the Flow of Gas Through a bed of Solid Particles. *J. of the Iron and Steel Inst.*, 141, 291 (1940).

[48] Taskin, M., and Dixon, A. G. (2008). CFD Study of the Influence of Catalyst Particle Design on Steam Reforming Reaction Heat Effects in Narrow Packed Tubes. *Ind. Eng.* 47, 5966-5975.

[49] Tsotsas, E. and Schlunder, E. (1990). Heat transfer in packed beds with fluid flow: remarks on the meaning and the calculation of a heat transfer coefficient at the wall *Chemical Engineering Science* 45 (4), 819-837.

[50] Vortmeyer, D. and Schuster, J. (1983). Evaluation of steady flow profiles in rectangular and circular packed beds by a variational method. *Chem. Eng. Sci.*, 38, 1691-1699.

[51] Wilcox. David C. Turbulence Modelling for CFD. California. USA. Second Edition. CDW Industries. March 2000

[52] Furbo. Eric. Evaluation of RANS turbulence models for flow problems with significant impac of boundary layers. UPPSALA UNIVERSITET. December 2010

Apéndice A

Deducción de ecuaciones de transporte hidrodinámico (Navier-Stokes, Ecuaciones promediadas de Navier-Stokes (RANS-E), k- ω y k- ϵ .)

1. Modelo usando la aproximación del pseudo-continuo hidrodinámico en un fluido incompresible, dt/dp menores a 10 y velocidades de alimentación altas. (Re_p altos > 300)

Ecuación de continuidad

$$\boxed{\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \varphi v_r) + \frac{\partial \varphi v_z}{\partial z} = 0} \quad 1$$

Ecuación de Navier-Stokes-Ergun en dirección axial

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varphi v_z}{\partial t} + \varphi v_r \frac{\partial \varphi v_z}{\partial r} + \varphi v_z \frac{\partial \varphi v_z}{\partial z} \right] = - \frac{\partial \varphi P_z}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi v_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \varphi v_z}{\partial z^2} \right] - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi v_z + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 v_z^2 \right] + \varphi \rho_f g_z \quad 2$$

Donde el primer término, son las fuerzas inerciales provenientes de N-S; el segundo término es la caída de presión; esfuerzos de corte viscoso; interacciones solido-fluido, donde consideran resistencias viscosas e inerciales al paso del fluido, debido a la presencia del solido (Ergun)

Modelos a resolver:

Ecuación de N-S-E

$$\boxed{\rho_f \left[\frac{\partial \varphi v_z}{\partial t} \right] = - \frac{\partial \varphi P_z}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi v_z}{\partial r} \right) \right] - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi v_z + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 v_z^2 \right] + \varphi \rho_f g_z} \quad 3$$

C.F

$$t = 0 \quad v_z = v_{z0}; v_r = v_{r0} \quad 4$$

$$r = 0 \quad \frac{\partial v_z}{\partial r} = \frac{\partial v_r}{\partial r} = 0 \quad 5$$

$$r = R_l \quad v_z = v_r = 0 \quad 6$$

$$z = 0 \quad v_z = v_{z0}; v_r = 0 \quad 7$$

$$z = L \quad \frac{\partial v_z}{\partial z} = \frac{\partial v_r}{\partial z} = 0 \quad 8$$

Donde de Ergun, los parámetros de permeabilidad para el lecho empacado son:

$$K = \frac{\varphi^2 dp^2}{\alpha(1-\varphi)^2} \quad 9$$

$$K_z = \frac{\varphi^3 dp}{\beta(1-\varphi)} \quad 10$$

$$\alpha = 1028; \beta = 1.15 \quad 11$$

Valores de alfa y beta tienen la contribución de efectos viscosos e inerciales, para relaciones dt/dp menor a 10, re-estimados a partir de los valores reportados por Ergun, debido a que no existen valores reportados de perfiles de velocidad intersticial, se toman en cuenta valores reportados de caída de presión, que está íntimamente relacionado a perfiles de velocidades dentro del lecho.

Para tener una adecuada predicción de los perfiles de velocidad, los parámetros α y β fueron re-estimados utilizando los datos de caída de presión que se observaron en el reactor a escala industrial. Es decir, la contribución de los esfuerzos viscosos, α , los cuales dominan en un régimen de flujo laminar, y la contribución debida a los efectos inerciales, β , los cuales son importantes en un régimen de flujo de transición y turbulento.

Perfil de fracción vacía, Expresión empírica De Klerk

Para.

$$\frac{(R_T - r)}{dp} > 0.637 \quad 12$$

Por lo tanto. En la región cercana a la pared:

$$\varphi(r) = 2.14 \left[\frac{(R_T - r)}{dp} \right]^2 - 2.53 \left[\frac{(R_T - r)}{dp} \right] + 1 \quad 13$$

Para.

$$\frac{(R_T - r)}{dp} < 0.637 \quad 14$$

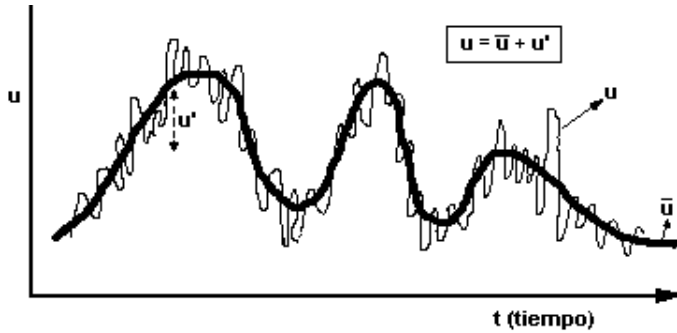
Por lo tanto, en la región central del lecho:

$$\varphi(r) = \varphi_{\infty} + 0.29 \exp \left[-0.6 \left\{ \frac{(R_T - r)}{dp} \right\} \right] + \cos \left[2.3\pi \left\{ \frac{(R_T - r)}{dp} - 0.16 \right\} \right] + 0.15 \exp \left[-0.9 \left\{ \frac{(R_T - r)}{dp} \right\} \right] \quad 15$$

2. Modelos de Turbulencia en lechos empacados, bajo la consideración de flujo turbulento en fluidos incompresibles y ecuaciones RANS.

Basado en la siguiente figura:

Ecuaciones RANS-E



Sabiendo que:

$$v = \bar{v} + v' \quad 16$$

$$P = \bar{P} + P' \quad 17$$

La ecuación de continuidad.

$$\nabla \cdot \bar{\varphi v} = 0 \quad 18$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \varphi \bar{v}_r) + \frac{\partial \varphi \bar{v}_z}{\partial z} = 0 \quad 19$$

Ecuación promediada temporalmente de Navier-Stokes-Ergun

Partiendo de NS-E y considerando solo el efecto radial de la ecuación axial.

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varphi v_z}{\partial t} + \varphi v_r \frac{\partial \varphi v_z}{\partial r} + \varphi v_z \frac{\partial \varphi v_z}{\partial z} \right] = - \frac{\partial \varphi P_z}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi v_z}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \varphi v_z}{\partial z^2} \right] - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi v_z + \frac{\rho_f}{K_z} \varepsilon \varphi^2 v_z^2 \right] + \varphi \rho_f g_z \quad 20$$

Donde la ecuación, finalmente nos que:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} + \overline{v_r} \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial z} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + \varphi (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \overline{v_z}}{\partial z^2} \right] - \rho_f \varphi \frac{2}{3} \frac{\partial k}{\partial z} - \varphi \frac{\mu_f}{K} \overline{v_z} - \frac{1}{K_z} \varphi^2 \left[\rho_f \overline{v_z}^2 + \mu_t \left(2 \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} + \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \rho_f k \delta_{ij} \right] + \varphi \rho_f g_z$$

21

Promediando temporalmente, tenemos que:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + \mu_f \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} \right) \right] - \left[\frac{\mu_f}{K} \overline{\varphi v_z} + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \overline{v_z}^2 + \frac{\rho_f \overline{v'v'}}{K_z} \right] + \varphi \rho_f g_z \quad 22$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} \right) \right] - \frac{\mu_f}{K} \overline{\varphi v_z} - \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \overline{v_z}^2 - \frac{\rho_f \overline{v'v'}}{K_z} + \varphi \rho_f g_z \quad 23$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} \right) \right] - \frac{\mu_f}{K} \overline{\varphi v_z} - \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \overline{v_z}^2 - \frac{1}{K_z} \overline{\tau_{ij}} + \varphi \rho_f g_z \quad 24$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} \right) \right] - \frac{\mu_f}{K} \overline{\varphi v_z} - \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \overline{v_z}^2 - \frac{\rho_f \mu_t}{K_z} \left[\nabla \overline{v} + (\nabla \overline{v})^T \right] + \varphi \rho_f g_z \quad 25$$

Por ultimo tenemos que la ecuación RANS tiene la siguiente forma:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} \right) \right] - \frac{\mu_f}{K} \overline{\varphi v_z} - \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \overline{v_z}^2 - \frac{\rho_f \mu_t}{K_z} \left[2 \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} + \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial z} \right] - \frac{2}{3} \rho_f k \delta_{ij} + \varphi \rho_f g_z \quad 26$$

Simplificando, tenemos que:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} \right) \right] - \frac{\mu_f}{K} \overline{\varphi v_z} - \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \overline{v_z}^2 - \frac{\rho_f \mu_t}{K_z} \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} - \frac{2}{3} \rho_f k \delta_{ij} + \varphi \rho_f g_z \quad 27$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial t} + \overline{v_r} \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial r} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{\varphi v_z}}{\partial z} \right] = -\frac{\partial \overline{\varphi P_z}}{\partial z} + \varphi (\mu_f + \mu_t) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \overline{v_z}}{\partial z^2} \right] - \rho_f \varphi \frac{2}{3} \frac{\partial k}{\partial z} - \varphi \frac{\mu_f}{K} \overline{v_z} - \frac{1}{K_z} \varphi^2 \left[\rho_f \overline{v_z}^2 + \mu_t \left(2 \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{v_z}}{\partial r} + \frac{\partial \overline{v_r}}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \rho_f k \delta_{ij} \right] + \varphi \rho_f g_z \quad 28$$

NOTA: Teniendo la ecuación promediada RANS-E, usamos los modelos de turbulencia correspondiente para determinar el perfil de velocidad promediado temporalmente en términos de disipaciones viscosas turbulentas y energías cinéticas turbulentas.

a. Modelo k-ε

Es el modelo de 2 ecuaciones más utilizado el cual consta de ecuaciones, el cual proporciona información para identificar el efecto turbulento, mostrando perfiles de energía cinética turbulenta y disipación turbulenta.

El modelo esta expresado de la siguiente forma:

Para la energía cinética turbulenta.

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + v_j \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \rho_f \varepsilon \quad 29$$

Donde el primer término es el término transitorio, el segundo es el transporte convectivo, transporte difusivo, rapidez de producción energética o generación, y rapidez de destrucción o disipación de energía.

Donde los esfuerzos de corte viscoso por acción de un sólido y un fluido son:

$$P_k = \tau_{ij} \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} \right) \quad 30$$

Lo cual tenemos:

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + v_j \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \tau_{ij} \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} \right) - \rho_f \varepsilon \quad 31$$

Por lo tanto en forma vectorial, esto es igual a:

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v}k) \right] = \nabla \cdot \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + \left[\mu_t \left(\nabla \cdot \bar{v} + (\nabla \cdot \bar{v})^T \right) \right] \nabla \bar{v} - \rho_f \varepsilon \quad 32$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v}k) \right] = \nabla \cdot \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \nabla \bar{v} - \rho_f \varepsilon \quad \text{Sí;} \quad 33$$

Delta de Kronecker $\begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$

Ahora en coordenadas cilíndricas.

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{v}_z k) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial r} \right] + \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \rho_f \varepsilon \quad 34$$

Debido a que existen interacciones solido-fluido, habrá que considerar resistencias viscosas e inerciales al paso del fluido (Ergun).

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{v}_z k) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial r} \right] + \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \rho_f \varepsilon - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi \bar{v}_z + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \bar{v}_z^2 \right] \quad 35$$

Para la disipación viscosa

Tenemos que.

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + v_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} P_k \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \frac{\varepsilon^2}{k} \quad 36$$

Y por lo tanto en forma vectorial, tenemos que:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + v_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \tau_{ij} \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} \right) \frac{\varepsilon}{k} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \frac{\varepsilon^2}{k} \quad 37$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v} \varepsilon) \right] = \nabla \cdot \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \cdot \varepsilon \right] + \left[C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t (\nabla \cdot \bar{v} + (\nabla \cdot \bar{v})^T) \right] \nabla \bar{v} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \frac{\varepsilon^2}{k} \quad 38$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v} \varepsilon) \right] = \nabla \cdot \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \cdot \varepsilon \right] + \left[\left(C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} \right) - \left(\frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right) \right] \nabla \bar{v} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \frac{\varepsilon^2}{k} \quad 39$$

Ahora en coordenadas cilíndricas

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \varepsilon \bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] + \left[\left(C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} \right) - \left(\frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right) \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \frac{\varepsilon^2}{k} \quad 40$$

Debido a que existen interacciones solido-fluido, habrá que considerar resistencias viscosas e inerciales al paso del fluido (Ergun).

$$\rho_f \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \varepsilon \bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\mu_f + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] + \left[\left(C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} \right) - \left(\frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right) \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - C_{\varepsilon 2} \rho_f \frac{\varepsilon^2}{k} - \left[\frac{\mu_f}{K} \phi \bar{v}_z + \frac{\rho_f}{K_z} \phi^2 \bar{v}_z^2 \right] \quad 41$$

Los valores de las constantes de cierre se han establecido a partir de trabajos experimentales, y se ha encontrado que funciona bien para una amplia gama de fluido. Estos valores son:

$$\sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3, C_{\varepsilon 1} = 1.44, C_{\varepsilon 2} = 1.92, C_\mu = 0.09 \quad 42$$

Modelo k- ω

El modelo K- ω es uno de los más utilizados modelos de turbulencia. Se trata de un modelo de dos ecuaciones, eso significa, que incluye dos ecuaciones de transporte adicionales para representar las propiedades de turbulencia del flujo. Esto permite un modelo de dos ecuaciones para dar cuenta de los efectos de historia como la convección y la difusión de la energía turbulenta.

La primera variable es transportada energía cinética turbulenta, k . La segunda variable transportado en este caso es la disipación específica, ω . Es la variable que determina la escala de la turbulencia, mientras que la primera variable, k , determina la energía en la turbulencia.

El modelo esta expresado de la siguiente forma:

Para la energía cinética turbulenta.

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + v_j \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu_f + \sigma^* \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k - \beta^* \rho_f \omega k \quad 43$$

Donde:

$$P_k = \tau_{ij} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \quad 44$$

Por lo tanto, en forma vectorial, tenemos que:

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v}k) \right] = \nabla \cdot [(\mu_f + \sigma^* \mu_t) \nabla k] + \tau_{ij} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) - \beta^* \rho_f \omega k \quad 45$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v}k) \right] = \nabla \cdot [(\mu_f + \sigma^* \mu_t) \nabla k] + \left[\mu_t (\nabla \cdot \bar{v} + (\nabla \cdot \bar{v})^T) \right] \nabla \bar{v} - \beta^* \rho_f \omega k \quad 46$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v}k) \right] = \nabla \cdot [(\mu_f + \sigma^* \mu_t) \nabla k] + \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \nabla \bar{v} - \beta^* \rho_f \omega k \quad 47$$

Por lo tanto en coordenadas cilíndricas, tenemos que:

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rk\bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu_f + \sigma^* \mu_t) \frac{\partial k}{\partial r} \right] + \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \beta^* \rho_f \omega k \quad 48$$

Debido a que existen interacciones solido-fluido, habrá que considerar resistencias viscosas e inerciales al paso del fluido (Ergun).

$$\rho_f \left[\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rk\bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu_f + \sigma^* \mu_t) \frac{\partial k}{\partial r} \right] + \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \beta^* \rho_f \omega k - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi \bar{v}_z + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \bar{v}_z^2 \right] \quad 49$$

Para la disipación viscosa

$$\rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + v_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + \alpha P_k \frac{\omega}{k} - \beta \rho_f \omega^2 \quad 50$$

Por lo tanto, en forma vectorial, tenemos que:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v} \omega) \right] = \nabla \cdot \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \nabla \omega \right] + \alpha \frac{\omega}{k} \tau_{ij} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) - \beta \rho_f \omega^2 \quad 51$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v} \omega) \right] = \nabla \cdot \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \nabla \omega \right] + \alpha \frac{\omega}{k} \left[\mu_t (\nabla \cdot \bar{v} + (\nabla \cdot \bar{v})^T) \right] \nabla \bar{v} - \beta \rho_f \omega^2 \quad 52$$

$$\rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v} \omega) \right] = \nabla \cdot \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \nabla \omega \right] + \alpha \frac{\omega}{k} \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \nabla \bar{v} - \beta \rho_f \omega^2 \quad 52$$

sí;

$$\text{Delta de Kronecker} \quad \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Por lo tanto en coordenadas cilíndricas, tenemos que:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\omega \bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial r} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \beta \rho_f \omega^2 \quad 53$$

Debido a que existen interacciones solido-fluido, habrá que considerar resistencias viscosas e inerciales al paso del fluido (Ergun).

$$\rho_f \left[\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\omega \bar{v}_z) \right] = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[(\mu_f + \sigma \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial r} \right] + \alpha \frac{\omega}{k} \left[\mu_t \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \rho_f k \delta_{ij} \right] \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} - \beta \rho_f \omega^2 - \left[\frac{\mu_f}{K} \varphi \bar{v}_z + \frac{\rho_f}{K_z} \varphi^2 \bar{v}_z^2 \right] \quad 54$$

Donde:

$$\mu_t = \rho_f \frac{k}{\omega} \text{ and } \varepsilon = \beta^* \omega k \quad 55$$

Los valores de las constantes se han establecido a partir de trabajos experimentales, y se ha encontrado que funciona bien para una amplia gama de fluidos. Estos valores son:

$$\alpha = \frac{5}{9}; \beta = \frac{3}{40}; \beta^* = \frac{9}{100}, \sigma = \frac{1}{2}, \sigma^* = \frac{1}{2} \quad 56$$

C.F

$$t = 0 \quad v_z = \bar{v}_{z0}; v_r = \bar{v}_{r0}$$

64

$$r = 0 \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial r} = \frac{\partial \bar{v}_r}{\partial r} = 0 \quad \frac{\partial k}{\partial r} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = \frac{\partial \omega}{\partial r} = 0 \quad 57$$

$$r = R_t \quad \bar{v}_z = \bar{v}_r = 0 \quad k_{wall} = \varepsilon_{wall} = \omega_{wall} = f(v_z) \quad 58$$

$$z = 0 \quad v_z = \bar{v}_{z0}; v_r = 0 \quad k_{wall} = \varepsilon_{wall} = \omega_{wall} = f(v_{z(r)}) \quad 59$$

$$z = L \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial z} = \frac{\partial \bar{v}_r}{\partial z} = 0 \quad \frac{\partial k}{\partial z} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = \frac{\partial \omega}{\partial z} = 0 \quad 60$$

Apéndice B

Métodos de solución de las ecuaciones de transporte hidrodinámico (Navier-Stokes, Ecuaciones promediadas de Navier-Stokes, $k-\omega$ y $k-\epsilon$).

B1. Método de elemento finito

El análisis de elementos finitos (FEA) es el modelado de productos y sistemas en un entorno virtual, con el propósito de encontrar y resolver potenciales (o actuales) problemas estructurales o de rendimiento. FEA es la aplicación práctica del método de elementos finitos (FEM), que es utilizado por ingenieros y científicos para matemáticamente modelar y resolver numéricamente problemas de complejas estructuras, fluidos y de multifísica. El software FEA puede ser utilizado en una amplia gama de industrias, pero es más comúnmente utilizado en las industrias aeronáutica, biomecánica y de automoción.

Uno de los modelos de elementos finitos (FE) cuenta con un sistema de puntos, llamados "nodos", que constituyen la forma del diseño. Conectados a estos nodos están los mismos elementos finitos que forman la malla de elementos finitos y contienen el material y las propiedades estructurales del modelo, la definición de cómo va a reaccionar a ciertas condiciones. La densidad de la malla de los elementos finitos puede variar a través del material, en función del cambio esperado en los niveles de estrés de un área en particular. Partes que experimentan grandes cambios en stress por lo general requieren una densidad de malla superiores a los que la experiencia de variación supone poco o ningún esfuerzo. Los puntos de interés pueden incluir los puntos de fractura del material previamente probado, filetes, esquinas, detalles complejos, y áreas de alto estrés.

Los modelos FE pueden ser creados usando elementos en una dimensión (1D haz), dos dimensiones (2D shell) o tridimensionales (3D sólido). Mediante el uso de vigas y conchas en lugar de elementos sólidos, un modelo representativo se puede crear con menos nodos sin comprometer la precisión. Cada combinación de modelos requiere una diversa gama de propiedades que se definen como:

- Áreas de la sección
- Momentos de inercia
- torsión constante
- Espesor de la chapa
- resistencia a la flexión
- corte transversal

Para simular los efectos de los entornos reales de trabajo en la FEA, los distintos tipos de carga se pueden aplicar a la modelo de elementos finitos, incluyendo:

- nodal: fuerzas, momentos, los desplazamientos, velocidades, aceleraciones, temperatura y flujo de calor

- Elemental: carga distribuida, presión, temperatura y flujo de calor
- Las cargas de aceleración del cuerpo (la gravedad)

Los tipos de análisis son:

- estática lineal: análisis lineal con las cargas aplicadas y las limitaciones que son estáticas
- estática y la dinámica no lineal: los efectos debidos al contacto (donde una parte del modelo entra en contacto con otra), las definiciones de material no lineal (plasticidad, elasticidad, etc) y el desplazamiento de gran tamaño (las cepas que superan la teoría de baja cilindrada que limitan un enfoque de análisis lineal)
- Modos Normal: frecuencias naturales de vibración
- Respuesta dinámica: las cargas o movimientos que varían con el tiempo y la frecuencia
- Pandeo: carga crítica en la que una estructura se vuelve inestable
- La transferencia de calor: el cambio de conducción, radiación

Los resultados típicos calculados por el programa incluyen:

- nodal desplazamientos, velocidades y aceleraciones
- Las fuerzas elementales, deformaciones y tensiones

Beneficios de la FEA

FEA puede ser utilizado en el diseño de nuevos productos, o para refinar un producto ya existente, para asegurar que el diseño será capaz de realizar las especificaciones antes de la fabricación. Con FEA puede:

- Predecir y mejorar el rendimiento y fiabilidad del producto
- Reducir la creación de prototipos físicos y pruebas
- Evaluar los diferentes diseños y materiales
- Optimizar el diseño y reducir el uso de materiales

Software FEA

Estos son algunos ejemplos de aplicaciones de software FEA:

NX Nastran: es un programa análisis de elementos finitos, que analiza el estrés, la vibración, un fallo estructural /durabilidad, transferencia de calor, el ruido/ acústica y el aleteo / aeroelasticidad.

Femap: es un CAD-independiente, para la ingeniería FEA avanzada. Se proporciona a los ingenieros y analistas con una solución de modelado de FEA para manejar incluso las tareas más complejas con facilidad, precisión y rentabilidad.

Solid Edge Simulation-consol multiphysics software: es una herramienta integrada FEA para ingenieros de diseño para validar diseños de piezas y montaje digital en el entorno de Solid Edge. Basado en la probada tecnología de modelado

de Femap de elementos finitos, Solid Edge Simulation reduce significativamente la necesidad de prototipos físicos, reduciendo así el material y los costos de las pruebas, mientras se ahorra en tiempo de diseño.

Los siguientes componentes de software son utilizados por los desarrolladores de software FEA como base para sus aplicaciones:

Parasolid es el software 3D de modelado geométrico, que permite a los usuarios de los productos de Parasolid modelar piezas complejas y ensamblajes. Se utiliza como motor de la geometría en cientos de diferentes CAD, CAM y CAE.

En resumen, el desarrollo y análisis de métodos numéricos, como el Método de Volumen Finito y el Método de Elemento Finito entre otros, que aproximan soluciones de problemas donde intervienen ecuaciones diferenciales parciales, requiere de una relación entre teorías matemáticas, modelado físico y análisis numérico. El método de Elemento Finito es uno de los métodos numéricos más utilizados en la actualidad por su potencia para encontrar la solución aproximada a muchos problemas. Sin embargo, existen otros métodos numéricos más recientes y cuyo campo de investigación tanto teórica como aplicada está activo, uno de ellos y en el que nos enfocaremos en este trabajo, es el Método de Volumen Finito. Como primer análisis, iniciamos con la derivación y el desarrollo de ambos métodos para destacar algunas de sus principales semejanzas y diferencias en su planteamiento, que son importantes para los objetivos de este trabajo, como por ejemplo el tipo de funciones de prueba que se utilizan en cada uno. Posteriormente mediante códigos desarrollados en una plataforma de programación, se implementan ambos métodos y con estos se encuentra la solución aproximada de algunos tipos de problemas prueba para los cuales se conoce la solución analítica y que son representativos. Se comparan ambas soluciones, estableciendo sus semejanzas y diferencias, y analizando algunos puntos como la rapidez de convergencia de ambas aproximaciones. También se expondrán las ventajas o desventajas de usar uno u otro método. Tomando en cuenta el primer análisis y los resultados obtenidos aplicando los dos métodos a los diferentes problemas, se podrá tener una idea de cuando usar uno u otro método.