



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA

**DESCRIPCIÓN, EVOLUCIÓN CRONOLÓGICA Y APLICACIÓN EN LA
INGENIERÍA QUÍMICA DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS
COMPUTACIONAL**

TESIS
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA
DANIEL GONZÁLEZ URQUIZA

ASESOR
JOSE ANTONIO ORTIZ RAMIREZ

Ciudad Universitaria, CDMX, 2021





Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: Profesor: JOSE ANTONIO ORTIZ RAMIREZ
VOCAL: Profesor: JOSE ARTURO MORENO XOCHICALE
SECRETARIO: Profesor: HUMBERTO HINOJOSA GOMEZ
1er. SUPLENTE: Profesor: HECTOR JAVIER MARTINEZ GRIMALDO
2° SUPLENTE: Profesor: DAVID FRAGOSO OSORIO

**SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA: FACULTAD DE QUÍMICA,
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

ASESOR DEL TEMA:

JOSE ANTONIO ORTIZ RAMIREZ

SUSTENTANTE:

DANIEL GONZÁLEZ URQUIZA

Resumen

El siguiente trabajo de titulación es una investigación sobre los aspectos generales de la Dinámica de Fluidos Computacional, desde la perspectiva de un estudiante de Ingeniería Química.

Se aborda una descripción general de la técnica, se hace una remembranza de las aportaciones que diferentes investigadores hicieron al método de simulación, dándole cada vez más formalidad a lo largo de los años. Un breve estudio sobre las leyes físicas a las que recurre la técnica CFD para representar a los fluidos se incluye en la obra. Así mismo, se discute una selección de publicaciones académicas sobre el tema para mostrar el impacto que tiene la técnica en distintas aplicaciones de ciencia e ingeniería.

Su aplicación permite diseñar equipos más eficientes y seguros, al mismo tiempo que se busca minimizar el suministro de servicios auxiliares que demandan las operaciones unitarias. Esto se traduce en mayores ganancias para la industria, mayor seguridad para los trabajadores operando los equipos y proyectos con menor impacto ambiental.

La Dinámica de Fluidos Computacional se encuentra en una etapa madura y su uso se ha extendido a una gran cantidad de áreas de la ingeniería, por lo que la industria necesita de personal capaz de hacer uso de este tipo de herramientas tecnológicas.

Este trabajo se realizó para servir como un primer acercamiento para los estudiantes deseosos de incursionar en la técnica y tener una mejor idea sobre los elementos que la conforman y, con ayuda de dos casos de estudio, los procedimientos que se deben seguir para construir las simulaciones, así como de las limitaciones de la herramienta.

Contenido

Resumen	3
Contenido	4
Lista de ilustraciones	5
Lista de Tablas	6
Acrónimos.....	6
Restricciones del proyecto de tesis.....	7
1.-Introducción	9
1.1.-Objetivos de la tesis	9
1.1.1.-Objetivo general.....	9
1.1.2.-Objetivos particulares	9
1.2.-Una descripción general de la técnica CFD.....	9
1.3.-Aplicaciones de la técnica CFD.....	10
1.4.-Elementos de la técnica CFD	17
1.5.-Etapas en la resolución de un problema CFD	18
1.6.-Beneficios de la aplicación de CFD	19
2.-Evolución de la técnica CFD.....	21
2.1.-Inicios.....	22
2.2.-Mejoramiento de los métodos numéricos	23
2.3.-Software comercial y consolidación de la técnica.....	25
3.-Herramientas matemáticas	28
3.1.-Aspectos de las ecuaciones gobernantes en CFD y métodos de solución	28
3.2.-Ecuaciones gobernantes.....	29
3.3.-Conservación de masa.....	30
3.4.-Conservación de momentum.....	31
3.5.-Conservación de energía	33
3.7.-Métodos numéricos en CFD.....	35
3.8.- Solución de la ecuación de Poisson mediante MDF	36
3.8.1.-Objetivo	36
3.8.2.- Planteamiento.....	36
3.8.3.- Solución.....	38
4.-Situaciones especiales de flujo en IQ	42
4.1.-Turbulencia	42

4.2.-Flujo multifásico	46
5.-CFD en Ingeniería Química	49
5.1.-Definición de fluido	50
5.2.- Flujo en Operaciones Unitarias	51
5.3.-CFD aplicada en IQ.....	53
5.4.-CFD aplicada en ingeniería de reactores	65
5.5.-Cálculo de caída de presión en lecho empacado con ANSYS Fluent.....	71
5.5.1.-Objetivo	71
5.5.2.-Marco teórico.....	71
5.5.3.-Metodología del trabajo	72
5.5.4.-Resultados.....	74
5.5.6.-Discusión de resultados.....	79
6.-Conclusión.....	80
6.1.-Discusión de toda la obra.....	80
6.2.-Lecciones aprendidas	81
6.3.-Areas de oportunidad.....	82
Referencias	84
Apéndice.....	89
Derivada material o derivada lagrangiana	89
Teorema de Reynolds	89
Teorema de Gauss o de la divergencia	89

Lista de ilustraciones		Pág.
1.1	Simulación del barco FerryCat	11
1.2	Simulación de impacto de olas	14
1.3	Simulación de vías respiratorias	15
1.4	Simulación del flujo alrededor de un ala	16
3.1	Ilustración de un volumen de control	29
3.2	Componentes del tensor de esfuerzos	32
3.3	Discretización del dominio del ducto	37
3.4	Perfil rudimentario de velocidades	40
4.1	Velocidad en flujo turbulento	42
4.2	Flujo jet, turbulento	43
4.3	Remolinos	44
4.4	Mapa de Baker	47

4.5	Regímenes de flujo a dos fases	47
5.1	Simulación de un intercambiador de calor	54
5.2	Simulación de destilación	55
5.3	Diagrama del proceso de destilación	56
5.4	Contorno de velocidad de aceite en separador.	57
5.5	Contorno de velocidad de agua en separador.	58
5.6	Contorno de fracción de volumen de aceite.	58
5.7	Contorno de fracción de volumen de agua	59
5.8	Simulación de ciclones	60
5.9	Contornos en válvula de compuerta	61
5.10	Análisis estructural de válvula de compuerta	62
5.11	Geometría de válvula de desfogue	63
5.12	Líneas de corriente en válvula de desfogue	64
5.13	Contornos de presión en válvula de desfogue	64
5.14	Esquema de TBRs	66
5.15	Régimen Trickle-Flow	67
5.16	Simulación de un reactor de HDT	69
5.17	Simulación VOF de un TBR (Heirari)	70
5.18	Simulación VOF de un TBR (Wei Du)	70
5.19	Geometría y malla construidas	73
5.20	Diagrama de flujo de la metodología	74
5.21	Perfil de presión en lecho empacado (gas)	75
5.22	Cuadro de diálogo en fluent (gas)	75
5.23	Perfil de presión en lecho empacado (líquido)	76
5.24	Cuadro de diálogo en fluent (líquido)	77
5.25	Perfil de presión en lecho empacado (multifase)	78
5.26	Cuadro de diálogo en fluent (multifase)	78

Lista de Tablas		pág.
2.1	Software para simulación CFD	25
4.1	Modelos RANS	45
5.1	Caída de presión calculada (ecuación de Ergun, gas)	76
5.2	Caída de presión calculada (ecuación de Ergun, Líquido)	77

Acrónimos

CFD Dinámica de Fluidos Computacional

DNS Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation)

HDO	Hidrodeoxigenación
HDT	Hidrotratamiento
IQ	Ingeniería Química
LES	Large Eddy Simulation
LMTD	Logarithmic Mean Temperature Difference (en inglés de diferencia de temperatura media logarítmica)
MDF	Método de Diferencias Finitas
MVF	Método de Volumen Finito
MEF	Método de Elemento Finito
ONU	Organización de las Naciones Unidas
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes (ecuaciones de Navier-Stokes Reynolds-promediadas)
SIQMA	Sociedad de Ingenieros Químicos Metalúrgicos Alumnos
TBR	Trickle Bed Reactor, Reactor de lecho por goteo
UDF	User Defined Function
VOF	Volume of Fluid

Restricciones del proyecto de tesis

En el trabajo a continuación se han excluido de los temas tratados los aspectos computacionales y de programación inherentes a la Dinámica de Fluidos Computacional, es decir, aquellos que tienen que ver directamente con los algoritmos y estrategias necesarias para crear el mallado de la geometría de los sistemas en estudio. No serán revisados los parámetros de rendimiento del hardware ni las técnicas de paralelización de los códigos para mejor administrar los recursos computacionales. Tampoco se profundizará sobre las metodologías algebraicas, y sus códigos correspondientes, utilizadas para resolver las matrices tri-diagonales generadas al aplicar los métodos de discretización de las ecuaciones gobernantes.

Quedará pendiente detallar sobre las características que deben poseer la geometría de una simulación CFD, en el sentido de facilitar la convergencia de la solución, y los archivos de diseño asistido por computadora o CAD que representan computacionalmente a dichas geometrías.

La derivación y validación de cada uno de modelos matemáticos empleados en las aplicaciones que se comentan en el trabajo queda fuera del alcance de esta tesis, únicamente se abordarán las ecuaciones de conservación que aplican a la generalidad de los fluidos.

Suya es la fuerza y el valor es vuestro,
vuestra será la gloria;
pues lidiar con valor y por *la gente*
es el mejor presagio de victoria.
Acometed, que siempre
de quien se atreve más el triunfo ha sido;
quien no espera vencer, ya está vencido.

De "La victoria de Junín, Canto a Bolívar" por José
Joaquín Olmedo

1.-Introducción

1.1.-Objetivos de la tesis

1.1.1.-Objetivo general

Realizar una investigación sobre los aspectos generales de la Dinámica de Fluidos Computacional, desde la perspectiva de un estudiante de Ingeniería Química. Brindando un panorama claro y formal sobre los procesos que se llevan a cabo en la implementación de la técnica.

1.1.2.-Objetivos particulares

- Describir los elementos que conforman la técnica mencionando su intervención en las etapas que se deben atravesar para la construcción de simulaciones con CFD.
- Ubicar temporalmente los eventos que condujeron a la consolidación de la técnica CFD como una herramienta útil para la ciencia e ingeniería.
- Exponer las ecuaciones de conservación de masa, momentum y energía que rigen el comportamiento de los fluidos y de las que se vale la técnica CFD para simular los fenómenos de la naturaleza.
- Discutir la trascendencia de la técnica CFD en la disciplina de la ingeniería química al revisar una selección de trabajos académicos publicados.
- Ilustrar los procesos que se llevan a cabo en CFD mediante dos casos de estudio:
 - 1) Solución de la ecuación de Poisson mediante el MDF
 - 2) Cálculo de la caída de presión en un lecho empacado empleando ANSYS Fluent.

1.2.-Una descripción general de la técnica CFD

El flujo ocurre en muchas situaciones, tanto industriales y de la aplicación de la técnica, como de la naturaleza, muchos de los mecanismos que transportan las sustancias necesarias para el funcionamiento de los organismos ocurren mediante el movimiento de material continuo, en los vasos sanguíneos fluye la sangre que lleva el oxígeno y los nutrientes necesarios para la vida, de manera semejante ocurre en las plantas. Las corrientes marinas y los vientos atmosféricos son también fundamentales para el

funcionamiento de los ecosistemas alrededor del orbe, en estos procesos la materia recorre grandes distancias fluyendo.

La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) es una técnica para abordar el estudio de sistemas en donde se presenta flujo de fluidos, ya sea con reacción química o de composición constante. Se utiliza para simular sistemas de flujo de interés para la ciencia e ingeniería; implica la predicción del flujo, transferencia de calor, transferencia de masa, reacciones químicas y otros fenómenos asociados al flujo mediante la resolución de las ecuaciones matemáticas que describen la física gobernante del sistema, esto se consigue mediante el empleo de métodos numéricos.

Es el proceso de hacer una aproximación (teórica) del comportamiento de estos sistemas y su representación con imágenes, pueden ser fotografías o videos, de los perfiles de velocidad, temperatura, presión o cualquier otra variable de particular interés para el problema en cuestión. Se suele utilizar una escala de colores para representar los diferentes valores que toma la propiedad de la que se busca obtener información.

Adquiere el adjetivo de computacional porque se vale de recursos de supercómputo, estos pueden ser servidores, clústeres o supercomputadoras. Este poder de procesamiento es necesario para ser capaces de realizar una enorme cantidad de iteraciones, calculadas al momento de aplicar los métodos numéricos pertinentes para resolver las ecuaciones que rigen el problema en cuestión, estas se encuentran acopladas en sistemas de ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden. ¡Incluso con un buen arsenal de recursos computacionales el cálculo de las soluciones para problemas de ingeniería puede demorar meses!

1.3.-Aplicaciones de la técnica CFD

La técnica CFD es muy poderosa y se ejerce en una amplia gama de aplicaciones, tanto industriales como científicas. Entre ellas (Versteeg & Malalasekera, 2007):

- Aerodinámica de aeronaves y vehículos: sustentación y resistencia.
- Hidrodinámica de barcos.
- Plantas de energía: combustión en motores de combustión interna y turbinas de gas.
- Turbo maquinaria: flujo dentro de equipos rotativos, difusores etc.
- Ingeniería eléctrica y electrónica: enfriamiento de dispositivos incluyendo microcircuitos.
- Ingeniería de procesos químicos: mezclado y separación, moldeo de polímeros.
- Ambiente interno y externo de edificios: carga de vientos, calefacción, refrigeración y ventilación.
- Ingeniería marina: cargas en estructuras costa fuera.
- Ingeniería ambiental: dispersión de contaminantes y efluentes.
- Hidrología y oceanografía: flujo en ríos, estuarios y océanos.
- Meteorología: predicción del clima.
- Ingeniería biomédica: flujo de la sangre en venas y arterias.

Se describirán con mayor detalle ejemplos de algunas de estas áreas. En hidrodinámica de barcos, la compañía de astilleros noruega Fjellstrand AS en 1999 se aventuró en la propuesta de un innovador ferry multicasco, el FerryCat, por lo que contrató al Instituto Noruego de Investigación Tecnológica Marina (MARINTEK) para realizar la optimización de la forma del casco y sus pruebas, generando valiosa información a través de simulaciones CFD.

En aquel estudio se utilizó el concepto de *superficie libre* para calcular el campo de flujo alrededor de la coraza de las embarcaciones, se resolvieron las ecuaciones de continuidad de masa y momentum para el flujo de un fluido viscoso incompresible, junto con un modelo que aplica una distribución radial de velocidad axial y tangencial para representar y simplificar el efecto del propulsor. En esta investigación se empleó el método de volumen finito para resolver las ecuaciones gobernantes del sistema. (Östman & Oye, 2003)

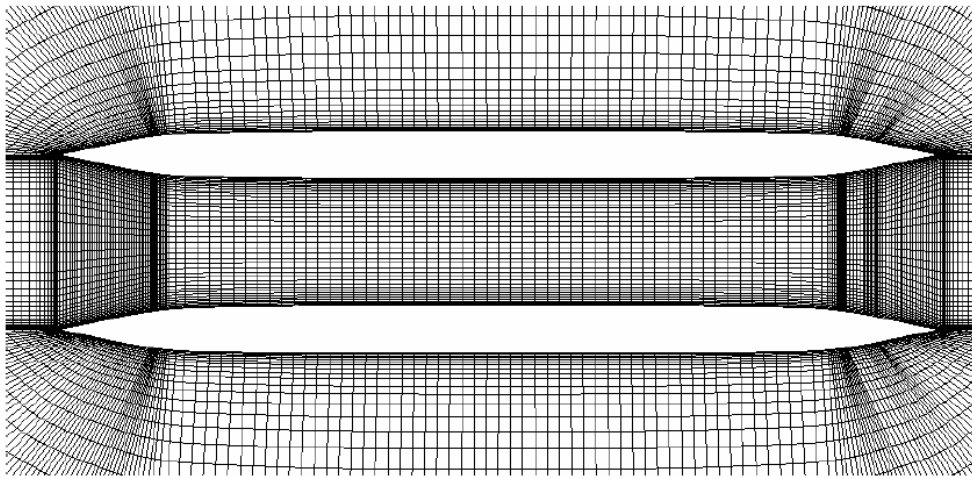


Ilustración 1.1a Trabajo mediante CFD para simular la operación del FerryCat. a) Mallado en la región interfacial de la superficie libre.

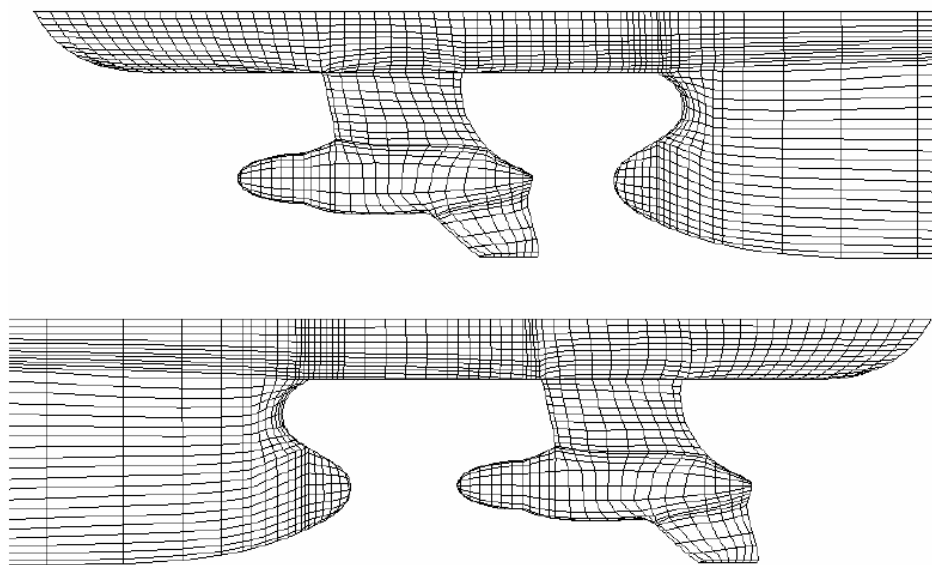


Ilustración 1.1b Vista lateral del FerryCat y su malla en la vecindad del propulsor

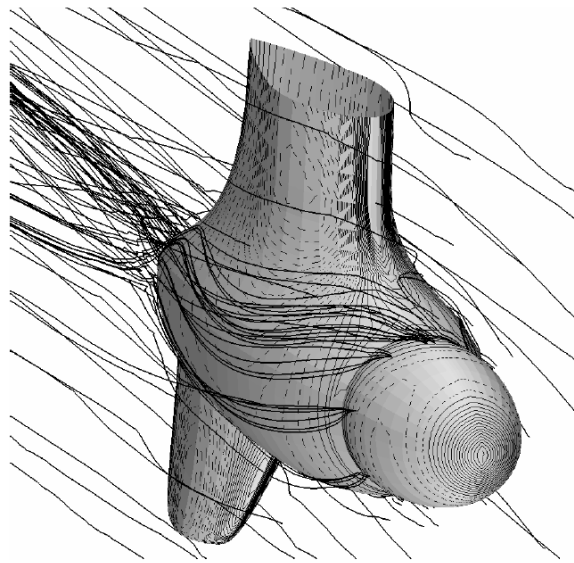


Ilustración 1.1c Distribución de presión calculada incluyendo líneas de corriente alrededor del propulsor.

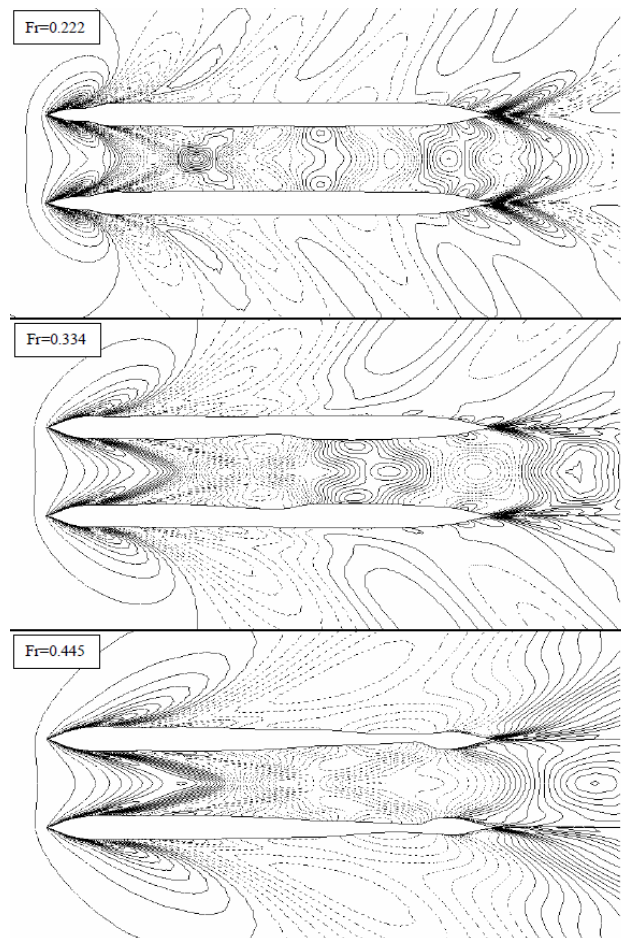


Ilustración 1.1d Contorno de olas de la embarcación a diferentes velocidades.

El estudio arrojó valores para el arrastre de la embarcación, información que es indispensable para la optimización de su casco, además se pudo ver la interacción entre los dos cascos y la elevación del oleaje a diferentes velocidades. También se pudo encontrar una buena similitud con los resultados obtenidos mediante las pruebas experimentales.

En ingeniería marina se ha empleado la técnica en el desarrollo de convertidores de energía de olas, desde 1976 se desarrollaron los fundamentos teóricos de estos dispositivos, pero no fue hasta finales del siglo XX, que los avances en poder computacional permitieron a los modelos numéricos de entonces obtener el coeficiente hidrodinámico para una geometría arbitraria.

Es oportuno mencionar que las pruebas experimentales en tanques de laboratorio son difíciles de escalar por las diferentes reglas que aplican para las dos fases, además, realizar la medición de variaciones de presión muy localizadas es una tarea de gran dificultad, así pues, el análisis numérico mediante la técnica CFD se ha propuesto como un valioso recurso para superar estas dificultades.

En 2004 se utilizó el modelo computacional (CFD) de un convertidor de energía de olas que resolvió las ecuaciones Euler para el flujo alrededor de una columna oscilante de agua. El desarrollo de estos modelos se enfocó en obtener una estimación de la producción energética promedio anual. (Folley, 2016)

En un comienzo las simulaciones de convertidores de energía de olas se realizaron con modelos para fluido incompresible tanto para la fase gaseosa como para la líquida, tal suposición es válida para muchas situaciones ya que el agua es muy difícil de comprimir y tomar en cuenta la fase gaseosa como incompresible no presenta desviaciones importantes en la dinámica de la fase líquida en los convertidores de energía de olas.

Sin embargo, en condiciones de tormenta, debido a la compleja interacción de las fases al generarse burbujas y grandes gradientes de presión, los modelos incompresibles pierden validez, en las vecindades de las burbujas la presión puede disminuir tanto que el líquido que las rodea se evapora para después condensarse cuando la presión se reestablece, esto afecta de manera importante la dinámica del flujo.

Claramente los códigos de modelos incompresibles no pueden aproximar este comportamiento, ni siquiera aquellos en los que se considera el aire como compresible y el agua incompresible. Se podría pensar que, debido al acolchonamiento que podrían ofrecer las burbujas en el agua, las cargas violentas de oleaje se estiman con mayor magnitud con un modelo incompresible, y por lo tanto, los estudios de resistencia del equipo podrían seguir siendo válidos al sobreestimar la presión por el impacto, el problema con esta hipótesis es que este enfoque no captura la física del sistema y, en consecuencia, el modelo incompresible puede fácilmente arrojar soluciones espurias y subestimar importantemente la presión que deberá ser soportada por el convertidor.

La siguiente ilustración es el resultado de una investigación CFD empleando el modelo AMAZON-CW, en el cual ambas fases son tratadas como fases compresibles y el agua puede cambiar de fase en respuesta a grandes variaciones locales de presión, el modelo del flujo trata a la ola de agua dispersa como una mezcla compresible de aire y agua con propiedades materiales homogéneas. (Folley, 2016)

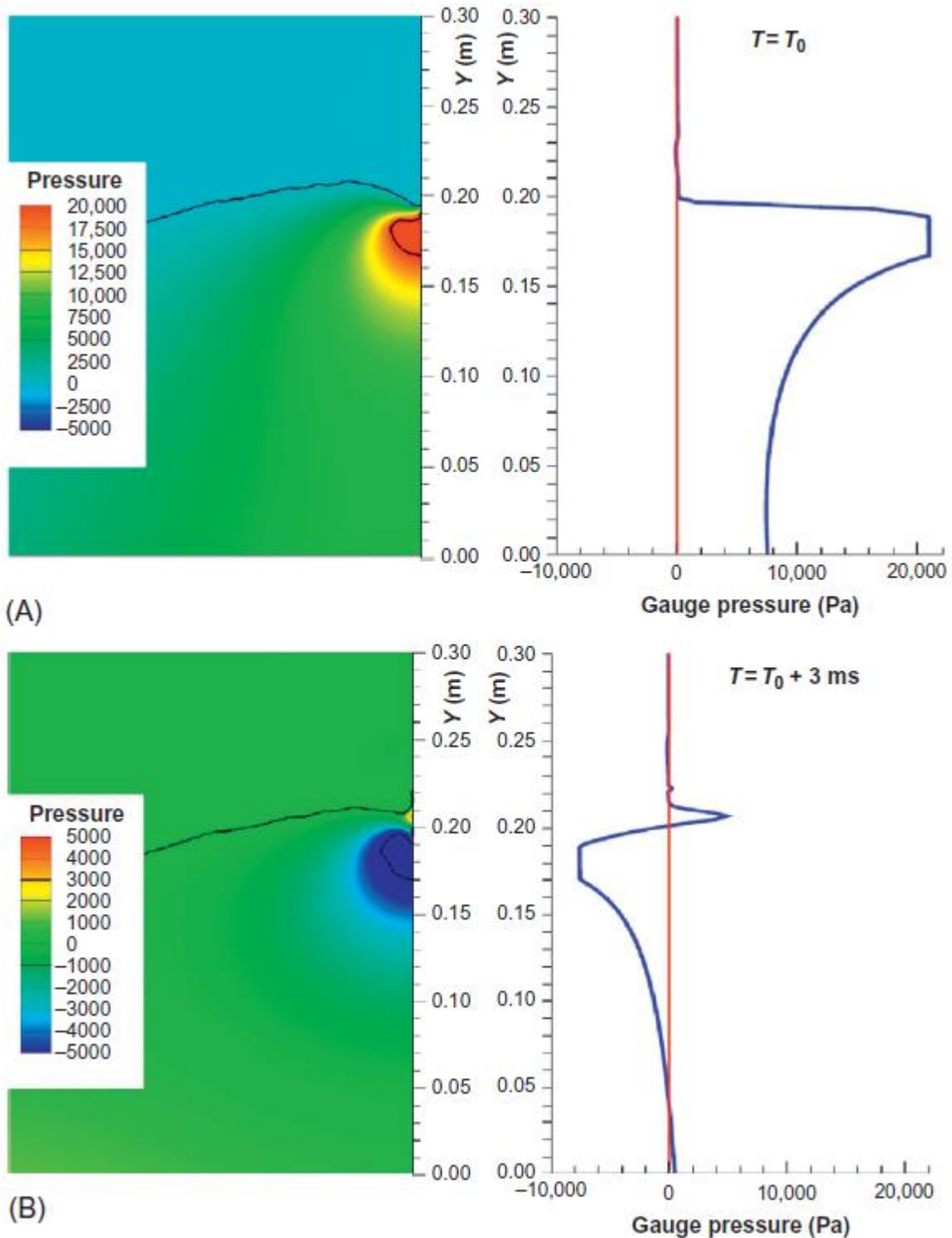


Ilustración 1.2 Simulación compresible con modelo CFD del impacto violento de cargas de oleaje en una pared vertical a dos tiempos distintos. A) Fotografía a $T=T_0$ momento del impacto, B) Fotografía a $T=T_0+30\text{ms}$. En ambas instantáneas se muestra el contorno de la interfase líquido-gas y el perfil de presión evaluado en la frontera de la pared a diferente altura.

En el terreno de la ingeniería biomédica la técnica ha sido ocupada para modelar el flujo sanguíneo, como ya fue mencionado antes, pero también se ha utilizado en la simulación

del flujo en vías respiratorias, el estudio realizado por Prashant Das (Das et al., 2018) es un ejemplo de este tipo de investigaciones, en este análisis se aplicó CFD con el fin explorar oportunidades para aumentar la deposición de medicamentos en aerosol en niños, basándose en la fisiología respiratoria y la teoría de fenómenos de transporte.

Prashant, en su trabajo, implementó una geometría idealizada, validada para representar las vías respiratorias desde la boca hasta los pulmones; el ritmo de respiración que implementaron en su investigación se tomó de estudios previos reportados en la literatura.

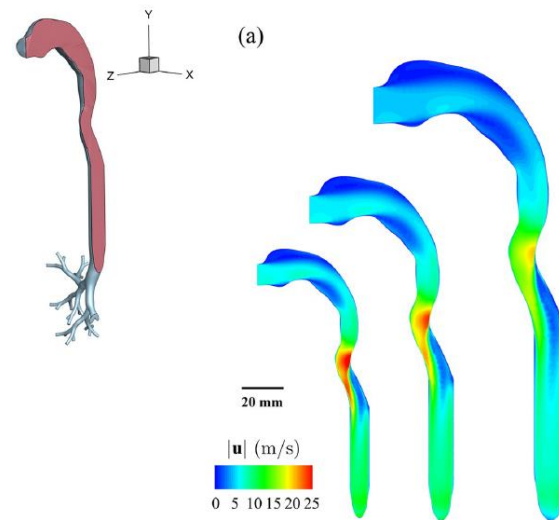


Ilustración 1.3 a) Se muestra la geometría de las vías respiratorias utilizada en la simulación de Prashant Das, así como un mapa de contorno de velocidades promedio del flujo respiratorio de aire en un corte de perfil de la geometría de diferentes edades.

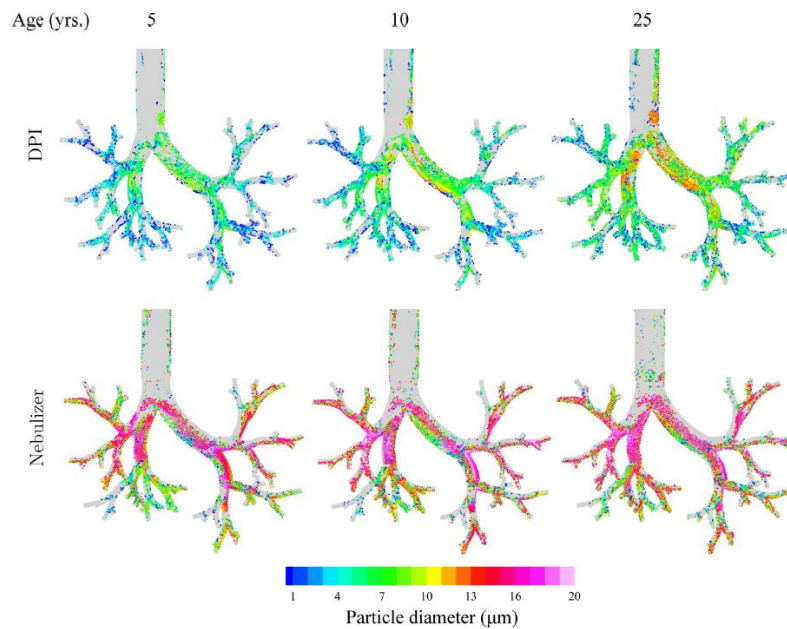


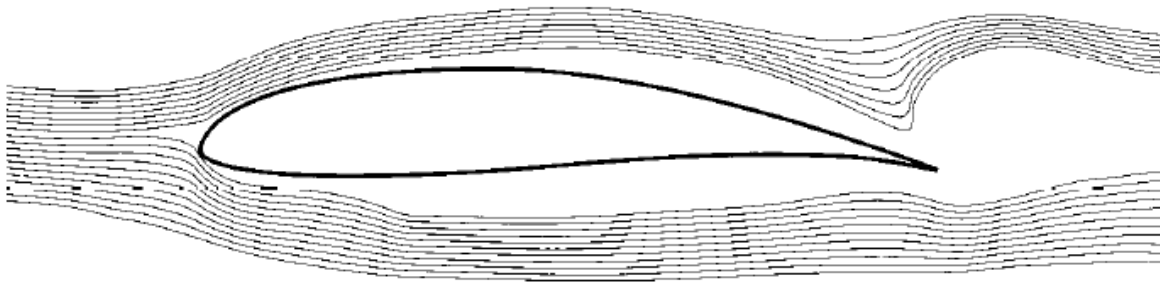
Ilustración 1.3 b) Deposición de partículas de diferente diámetro en las vías respiratorias de grupos de diferentes edades (5, 10 y 25) y dos tipos de medicamentos, se observa que las partículas de menor diámetro logran llegar más lejos en el conducto respiratorio.

La investigación permitió a los científicos encontrar una curva que ajusta a la deposición de partículas de aerosol en función del número adimensional de Stokes, Stk , usado para describir el movimiento de partículas suspendidas en el flujo de un fluido. Este resultado permitió definir un rango de tamaño óptimo para las partículas de aerosoles, que evoluciona con la edad y varía en cada dispositivo inhalador. De esta forma, la técnica CFD, descrita en este trabajo, tiene el potencial de servir como herramienta para el establecimiento de estrategias de diseño para optimizar la deposición de medicamentos para tratamientos respiratorios.

Los resultados que puede arrojar la técnica CFD son directamente análogos a aquellos obtenidos en túneles de viento, ambos representan conjuntos de datos para configuraciones de flujo dadas a diferentes números de Mach, Reynolds, etc (Anderson, 1995). Esto hace extremadamente útil a la técnica CFD en la ingeniería aeronáutica.

Kothari y Anderson, en 1978, desarrollaron un programa capaz de calcular el campo de flujo viscoso en dos dimensiones alrededor de superficies sustentadoras (alas de avión) de interés. Para obtener dicho campo de flujo el programa resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes, para un fluido compresible, utilizando la metodología implícita de diferencias finitas. (Kothari & Anderson, Jr., 1985).

a)



b)

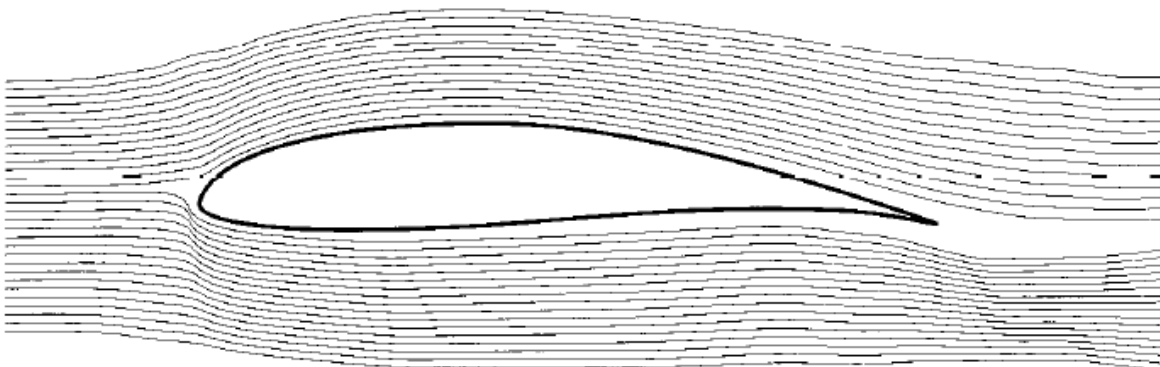


Ilustración 1.4 Líneas de flujo para dos regímenes de flujo diferentes alrededor de un ala de avión Wortmann FX63-137. a) flujo laminar. b) flujo turbulento.

1.4.-Elementos de la técnica CFD

Se hablará de los elementos de la técnica CFD como aquellos recursos, objetos y/o entes de información que conforman el proceso de desarrollar un trabajo de simulación que aplique esta técnica. Se describirán a continuación resaltándolos en letra negrita.

Se parte de una **geometría**, esta debe representar adecuadamente la forma física del sistema en estudio, sobre o dentro de ella fluyen los fluidos en la realidad y que se pretenden simular por medio de un instrumento computacional, a esta región del espacio en la que fluyen las sustancias se le define como el **dominio**, en él se aplican las teorías científicas y las estrategias matemáticas pertinentes para encontrar la solución del sistema en particular que se investiga, estableciendo valores iniciales o condiciones de frontera.

La **malla**, que se obtiene mediante el proceso de mallado, es un objeto utilizado para dividir el dominio en unidades o elementos de volumen más pequeños y de una geometría sencilla, frecuentemente llamados celdas. En cada una de las celdas se obtendrá una solución y la información generada en esta pasará a sus vecinas, donde se efectuarán los mismos cálculos que en celdas anteriores siguiendo con este proceso hasta abarcar todas las celdas de la malla y conseguir una solución que converja en todo el dominio.

Para representar los fenómenos físicos que se quieren visualizar es necesario establecer un marco teórico que represente adecuadamente los fenómenos a los que están sometidos los fluidos y dispositivos mecánicos (alas, aletas, hélices, corazas, paredes, válvulas, etc.) en la simulación, es decir, implementar las **ecuaciones gobernantes** que rigen los problemas de flujo de fluidos, estas son, típicamente, las ecuaciones de Navier-Stokes, dichas ecuaciones fueron formuladas hace alrededor de 200 años y son expresiones matemáticas de las leyes de conservación de masa, energía y momentum.

Los **métodos de resolución** de las ecuaciones gobernantes que se utilizan en la técnica CFD son métodos numéricos que transforman los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden a sistemas de ecuaciones algebraicas, a este proceso se le llama discretización. Existen principalmente tres métodos de discretización: Diferencias Finitas, Volumen Finito y Elemento Finito. Sobre estos aspectos matemáticos y numéricos se abundará en el Capítulo 3, ahí se abordará más a detalle lo que describen estas ecuaciones.

Las **imágenes de post-procesamiento** permiten visualizar en cada punto diferentes propiedades del sistema en estudio, varios ejemplos de estas se mostraron en la sección 1.3, aunque también se pueden generar películas para modelos transitorios. Estas imágenes se obtienen después de interpretar los resultados arrojados por la solución del problema y surgen del proceso de evaluar numéricamente las ecuaciones gobernantes.

Para que cada uno de estos elementos tengan un buen desempeño es indispensable contar con un **código** eficiente y adecuado, una **computadora** con buena capacidad de procesamiento y **practicantes** con una entrenada destreza para entender, enfrentar y poder dar respuestas a los problemas físicos, matemáticos y de programación que surgen en el desarrollo de una investigación con CFD. Conocimientos de dinámica de fluidos, ecuaciones diferenciales, métodos numéricos y programación son requeridos a un nivel

importante de especialización, pues la calidad de las simulaciones dependerá fuertemente del grado de instrucción del practicante.

1.5.-Etapas en la resolución de un problema CFD

Los programas que se usan para la implementación de la técnica CFD son códigos de programación hechos para computar los algoritmos numéricos capaces de solucionar los problemas de flujo de fluidos, existe software libre, en donde la entrada y obtención de información es más sofisticada en comparación con las paqueterías comerciales, que ofrecen interfaces para el usuario a lo largo de las diferentes etapas de desarrollo del trabajo, con ayuda de ellas es posible implementar en la simulación los parámetros del problema en cuestión.

En general se puede decir que existen tres etapas en el desarrollo de una simulación de CFD, estas son: preprocesamiento, solución y postprocesamiento, en pocas palabras se pueden describir como la entrada de información al programa, la manipulación numérica de esta información y su interpretación, respectivamente.

Preprocesamiento:

Se toma en cuenta como preprocesamiento a toda la fase inicial de un proyecto de CFD, es cuando se introduce al programa, a través de una interfaz, toda la información que describe al problema, esto implica:

- Definición de la geometría y el dominio del problema.
- Obtención de la malla.
- Selección de los fenómenos físicos y/o químicos que quieren ser modelados.
- Definición de las propiedades físicas, químicas y termodinámicas de los fluidos y materiales.
- Especificación de las condiciones de frontera.

Solución:

Una vez que se ha definido al problema, el siguiente paso es efectuar la solución de los modelos físicos y químicos que se buscan representar, para esto el programa interpreta la información que se le ha dado y la transforma a una forma adecuada para el solver, que es la parte del programa o código que se ocupa de encontrar la solución para el problema planteado, este se encarga de realizar la tarea de la discretización del problema, es decir, convertir las ecuaciones gobernantes, que son ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden, en ecuaciones algebraicas; su segunda tarea es encontrar la solución del sistema de ecuaciones generado a través de algún método iterativo.

Postprocesamiento:

Esta etapa se refiere a la obtención de los parámetros de interés, tras haber obtenido las propiedades del flujo en los pasos anteriores, y a la visualización de la información generada en planos, graficas, esquemas o contornos. Los paquetes comerciales de CFD incluyen herramientas que ofrecen la posibilidad de generar estos diagramas con mayor facilidad.

Esta característica de la técnica CFD, la de brindar imágenes que ilustran con un alto grado de detalle el comportamiento del sistema en estudio, ha supuesto un gran beneficio en la comunicación de ideas por parte de los expertos hacia los no especialistas y partes interesadas en la investigación, diseño, reconfiguración, operación y desarrollo de los proyectos.

1.6.-Beneficios de la aplicación de CFD

Es posible utilizar los métodos numéricos empleados en CFD para resolver las ecuaciones de la dinámica de fluidos, y con ello realizar simulaciones que representan una buena aproximación al comportamiento real de alguna aplicación industrial, gracias al poder de procesamiento que han adquirido los equipos de cómputo. La disponibilidad de procesadores de alto rendimiento más asequibles, junto con el surgimiento de paquetes comerciales de CFD con interfaces de usuario amigables para los practicantes, han elevado el interés en la técnica desde la última década del siglo pasado. (Versteeg & Malalasekera, 2007)

Usar CFD como una herramienta de diseño en ingeniería tiene muchas ventajas en comparación con los enfoques basados en la experimentación, además, permite resolver problemas complejos de flujo de fluidos en donde el enfoque analítico está falto de soluciones. Los principales beneficios son:

- Diseños más rápidos y baratos: Los tiempos de espera para conseguir los elementos necesarios para montar los sistemas de experimentación y su escalamiento son batidos por el tiempo de procesamiento en que los equipos de supercómputo logran encontrar las soluciones a los modelos que permiten optimizar los diseños. Por otro lado, el costo de la experimentación, en términos de renta de instalaciones, compra de material, el sueldo de los investigadores, etc., es proporcional al número de puntos de datos y al número de configuraciones examinadas. En contraste, la técnica CFD permite generar amplios volúmenes de información con virtualmente ningún costo adicional, permitiendo que los estudios de parametrización sean muy baratos de realizar, como, por ejemplo, para optimizar el desempeño de los equipos que se diseñan.
- Estudio de sistemas en condiciones extraordinarias: Desde la revisión del comportamiento de los equipos operando bajo condiciones de sobre diseño o de alto riesgo, hasta la estimación de escenarios catastróficos como accidentes nucleares y fenómenos naturales, como en la resistencia de estructuras ante vientos de tormenta, oleajes, etc. La técnica CFD brinda la posibilidad de explorar el comportamiento de sistemas en situaciones en las que sería imprudente o cuestionable llevar a cabo experimentos, esto sin representar en ningún grado una amenaza que comprometa la salud de los investigadores o potenciales víctimas indirectas, la integridad de los alrededores o el equilibrio medioambiental.
- Visualización de Resultados: Los enormes volúmenes de información generada en el cálculo de las soluciones numéricas de los problemas de flujo brindan la

posibilidad de producir diagramas, películas, mapas de contorno, etc. muy detallados del sistema o proceso que se examina. Ver y representar en imágenes los resultados que surgen de la aplicación de la teoría que se aprende en los cursos de ciencia e ingeniería, relacionados a la técnica CFD, supone un apoyo sin precedentes para transmitir y explicar, a los interesados, las averiguaciones hechas por los investigadores, mismas que son necesarias para la toma de decisiones en los proyectos.

En el aprendizaje de la dinámica de fluidos la técnica CFD también se presenta como un recurso educacional. Aunque el estudio de la dinámica de fluidos computacional, generalmente, se lleva a cabo al nivel de posgrado, las paqueterías comerciales de software han permitido introducir la enseñanza de la técnica CFD a los salones de clase de licenciatura.

Jiyuan Tu y Guan-Heng Yeoh, profesores de universidad y expertos en CFD, señalan en su libro *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach* que el desarrollo de software comercial cada vez más amigable con el usuario permite a los estudiantes, de carreras donde se abordan problemas de flujo de fluidos y transferencia de calor, reafirmar conceptos propios de la mecánica de medios continuos y de fenómenos de transporte, en particular, por la capacidad de visualizar las soluciones mediante esquemas muy detallados y por ofrecer a los profesores la posibilidad de crear problemas y ejemplos originales, ampliando, en gran medida, el reducido acervo de ejemplos clásicos que comúnmente se abordan en los salones de clases de todo el mundo. Con lo anterior, se logra mejorar la intuición de los educandos sobre el comportamiento de los fluidos al fluir. (Tu et al., 2013)

2.-Evolución de la técnica CFD

La consolidación de la técnica CFD estuvo muy ligada al incremento del poder de procesamiento de las computadoras digitales. Sin el desarrollo de esta tecnología los problemas de diseño relacionados con la mecánica de fluidos eran resueltos principalmente usando métodos analíticos, o empíricos en naturaleza, todavía hasta inicios de la Segunda Guerra Mundial.

Antes de esto, hubo unos pocos pioneros en el uso de análisis numérico para resolver problemas en el terreno de la dinámica de fluidos, los cálculos eran hechos a mano y una sola solución implicaba una gran cantidad de trabajo. Ahora es mucho más corto el tiempo que se invierte en obtener soluciones mediante métodos numéricos gracias al poder de cómputo que existe actualmente. Hoy en día es posible asignar un problema de dinámica de fluidos para ser resuelto mediante la técnica CFD, como tarea en un curso de licenciatura, esperando obtener una buena respuesta, mientras que en 1950 - 1960 pudo haber representado un problema muy tardado de resolver por medio de métodos numéricos.

En CFD convergen diversas ramas de estudio, esto hace que las contribuciones que se hicieron a lo largo de los años para integrar la técnica de simulación proviniesen de diferentes épocas del desarrollo científico. En cada campo de investigación donde se usa CFD se aplican modelos particulares, pero, se puede decir que los tres pilares del conocimiento sobre los que se sostiene la técnica son: dinámica de fluidos, métodos numéricos y computación.

Es el resultado de la conjunción de diversos métodos que constituyen la técnica. El método analítico, que establece las relaciones matemáticas en la teoría del movimiento de los fluidos, el método numérico, que evalúa numéricamente, tras un proceso de discretización, las ecuaciones gobernantes para encontrar una solución, y el método computacional, para generar el código, que ordene a la computadora realizar los cálculos que conducen a la solución, y el hardware mismo que deberá ser capaz de procesar toda la información.

Durante la segunda mitad del siglo pasado, inició el aumento de importancia que ha tenido la Dinámica de Fluidos Computacional como una nueva metodología para enfrentar los problemas en mecánica de fluidos y fenómenos de transporte. La evolución de los métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales comenzó aproximadamente a principios del siglo XX. La computadora digital fue inventada a finales de la década de los 30's y se comenzó a usar para resolver problemas numéricos. Pero, esta invención no revolucionó por sí sola la práctica. La explosión en la actividad computacional no comenzó sino en la década de 1960, cuando se tuvo computadoras digitales de gran velocidad.

Por otro lado, el costo de los experimentos ha ido incrementando constantemente durante el mismo periodo de tiempo. No se espera que los métodos computacionales reemplacen a los métodos experimentales, más bien, que los métodos numéricos sean utilizados para reducir el rango de las condiciones sobre las cuales los experimentos son realizados en las situaciones de diseño de flujo de fluidos y transferencia de calor.

2.1.-Inicios

Las ecuaciones de Navier-Stokes, que describen el movimiento de los fluidos, reciben su nombre después de dos físicos que las dedujeron, el primero fue Claude-Louis Marie Henri Navier (1785–1836), cuyo trabajo *Sur les lois des mouvements des fluides, en ayant égard à l'adhésion des molécules*, publicado en 1821 en los *Annales de Chimie et de Physique*, fue el primero en introducir formalmente a la fricción en las ecuaciones de movimiento de fluidos. Navier la nombró ecuación de movimiento para fluido viscoso. (Bistafa, 2017).

El segundo fue George Gabriel Stokes (1819–1903), sin embargo, ellos dos no se conocieron, para cuando la obra *On the Theories of the Internal Friction of Fluids in Motion*, de Stokes, fue publicada por la Cambridge Philosophical Society en 1845, Navier ya había fallecido. Estas ecuaciones fueron vueltas a deducir por, al menos, otros tres científicos; Cauchy en 1823, Poisson en 1829 y Saint-Venant en 1837. No había consenso, la discusión estaba abierta, pues los enfoques para abordar el problema variaban. (Darrigol, 2009).

La razón por la que se relacionó a Stokes con el nombre de la ecuación, y no la de todos los demás investigadores que se embarcaron en su deducción, quizá tenga que ver con que él hizo una extensiva comparación de teoría y experimentos propuestos por distintos científicos (Bistafa, 2017).

Fue Prandtl quien, alrededor de cien años después de la primera formulación de Navier, adoptó la nomenclatura de “ecuaciones de Navier-Stokes” en su trabajo *Fundamentals of hydro and aerodynamics*, publicado en 1934. Aunque, desde 1873, Hermann Von Helmholtz ya había reconocido a las ecuaciones de hidrodinámica (en la forma propuesta por Navier y Stokes) como las expresiones exactas de las leyes que gobiernan el movimiento de los fluidos reales. (Masuda, 2012) (Prandtl, Tietjens & Rosenhead, 1934).

La comunidad científica ha podido encontrar soluciones analíticas para un limitado número de situaciones, en las cuales las ecuaciones completas de movimiento de los fluidos pueden ser simplificadas, pero pronto resultó evidente la necesidad de idear nuevos métodos para encontrar soluciones en sistemas de interés para la industria, pues la menor variación a las situaciones ideales en las que se encuentran disponibles soluciones exactas provoca que estas pierdan totalmente su validez. Además, los avances que facilitaron la deducción de soluciones exactas fueron, mayoritariamente, de naturaleza fortuita, por lo que se requería una manera diferente de enfrentar estos problemas. (Von Neumann, 1981).

La aproximación de derivadas por diferencias finitas es uno de los métodos más simples y antiguos para resolver numéricamente ecuaciones diferenciales. Ya era conocido por Leonhard Euler (1707-1783) ca.1768, en una dimensión espacial, y se le atribuye a Carl Runge (1856-1927) su extensión a dos dimensiones ca. 1908 (Blazek, 2005). Uno de los primeros en aplicar este método numérico a las ecuaciones de la dinámica de fluidos fue Lewis Fry Richardson (1881-1953).

Richardson reconocía la dificultad de utilizar un enfoque analítico para resolver las ecuaciones de conservación, en 1907 publicó un artículo en el que propuso una metodología para determinar, mediante dibujo a mano alzada, las líneas de flujo en una

corriente dada. (Richardson, 1907). El propósito de Richardson en esta obra era principalmente manifestar la urgencia por implementar nuevas estrategias y como preámbulo para su siguiente publicación *The Approximate Arithmetical Solution by Finite Differences of Physical Problems Involving Differential Equations, with an Application to the Stresses in a Masonry Dam* (1909), aquí aplica el método de diferencias finitas para resolver la ecuación de Laplace, pero resalta que este procedimiento es susceptible de ser extendido a otras ecuaciones diferenciales. (Richardson, 1910)

La aportación más trascendente de Richardson llegó en 1922 al escribir su libro *Weather Prediction by Numerical Process*, aquí presentó un procedimiento para generar pronósticos climatológicos, aplicando el método de diferencias finitas a las ecuaciones que él se refería, en su libro, como de continuidad de masa, velocidad y energía, ahora conocidas como ecuaciones de Navier-Stokes (Richardson, 2007).

El trabajo de Richardson no recibió demasiada atención, en la comunidad de matemáticos del Trinity College juzgaron el trabajo como matemáticas aproximadas y no estaban impresionados (Hunt, 1998). El principal inconveniente de sus hallazgos era que, para predecir el clima del siguiente día, realizar los cálculos necesarios para ofrecer un pronóstico se demoraba tres meses. ("Lewis Fry Richardson | British physicist", 2020)

Courant, Friedrichs y Lewy, en 1928 publicaron un artículo donde atendían cuestiones de existencia y unicidad para las soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales parciales, esto fue de enorme relevancia, al darle un mayor grado de formalidad al método. Una prueba de la importancia de este trabajo es que se volvió a publicar en 1967 en el IBM Journal of Research and Development (Courant, Friedrichs & Lewy, 1928).

En 1940 Southwell introdujo un esquema de relajación que fue ampliamente usado en resolver problemas estructurales y de dinámica de fluidos donde se necesitaba un esquema de relajación mejorado. En 1955 Allen y Southwell aplicaron el esquema de Southwell para resolver el flujo incompresible y viscoso; su solución la obtuvieron con cálculos hechos a mano y significó una cantidad tremenda de trabajo. (Anderson et al., 2013)

Aunque, en un principio, el trabajo de Richardson no atrajo demasiados halagos, sin duda, fue un gran precedente de todos los estudios sobre soluciones numéricas para las ecuaciones de la dinámica de fluidos que siguieron. Su metodología continuó siendo mejorada por diversos investigadores y eventualmente, con la invención de las computadoras, se evidenció la enorme utilidad del procedimiento que él había propuesto.

2.2.-Mejoramiento de los métodos numéricos

La primera persona en acuñar el nombre Dinámica de Fluidos Computacional, en idioma inglés, fue Pat Roache en su libro *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, en 1972. Pero antes de llegar a ese punto, los métodos numéricos debieron ser optimizados. (Runchal, 2009)

Durante la segunda guerra mundial y al finalizar, se comenzó a hacer mucho trabajo en el uso de métodos numéricos para resolver problemas de dinámica de fluidos. El profesor John Von Neumann desarrolló un método para evaluar la estabilidad de los métodos

numéricos de problemas de estado transitorio. Neumann no publicó su método, fueron O'Brien, Hyman y Kaplan quienes en 1950 presentaron una explicación detallada en un artículo donde presentan la práctica manera de evaluar la estabilidad ideada por Neumann.

Peter Lax desarrolló una técnica para fluidos computacionales que incluía ondas de choque que representan discontinuidades en las variables de flujo. Esto lo logró gracias al uso de la forma de la ley de la conservación de las ecuaciones gobernantes y es referido como captura de choque.

Al mismo tiempo se estaban teniendo avances en el desarrollo de métodos para problemas elípticos y parabólicos. Frenkel en 1950 presentó la primera versión del esquema de relajación sucesiva para resolver la ecuación de Laplace, esto mejoró de manera sustancial la velocidad de convergencia. Peaceman y Rachford (1955) y Douglas y Rachford (1956) desarrollaron una nueva familia de métodos implícitos para ecuaciones parabólicas y elípticas en las cuales la dirección de barrido era alternada y el tamaño de intervalo no tenía restricciones. Este método es referido como ADI por sus siglas en inglés (alternating direction implicit) y fue mejorado por Briley y McDonald, Beam y Warming. Esta implementación ayudó a que los solvers fueran rápidos y eficientes para hallar las soluciones de las ecuaciones de Euler y Navier-Stokes.

Las investigación para resolver las ecuaciones del flujo mediante métodos numéricos continuó en la década de los sesenta, en Los Alamos, se desarrollaron esquemas como el método particle-in-cell (PIC) que usaba la naturaleza disipativa del esquema de diferencias finitas para difuminar el impacto durante varios intervalos de la malla, siendo la primera computadora en simular problemas de CFD. El equipo pasó unos diez años trabajando en estos modelos computacionales que son los modelos fundamentales de una gran cantidad de modelos actuales .

Para 1967, Douglas Aircraft perfeccionó métodos de análisis de diferencias finitas de tres dimensiones. El análisis fue un tanto básico y fue desarrollado para flujo sobre una superficie sustentadora. Años después fue conocido como el método del tablero ya que la geometría analizada fue simplificada para hacer los cálculos más sencillos.

Desde este punto en adelante, la técnica CFD se basó principalmente en matemáticas innovativas y programación computacional. Boeing incorporó a su tecnología ecuaciones de potencial completo en 1970. Las ecuaciones de Euler para flujos supersónicos fueron incorporadas en los códigos en 1981. Conforme la etapa temprana del desarrollo de CFD adquirió madurez, fue notable que las compañías involucradas buscaran promover su uso en la industria, quienes más interés tenían en incursionar en la técnica era la NASA y Boeing. (Khalil, 2012)

Para 1990 la tecnología y los recursos computacionales disponibles habían avanzado lo suficiente para que la ingeniería comenzara a ver las aplicaciones en el diseño automotriz. GM y Ford adoptaron esta tecnología en 1995 y comenzaron a hacer coches que fueron mucho más aerodinámicos comparados con los vagones cuadrados del pasado.

2.3.-Software comercial y consolidación de la técnica

Un hombre que marcó un antes y un después en el desarrollo de la Dinámica de Fluidos Computacional fue Brian Spalding (1923-2016), quien se desempeñó como profesor del Imperial College en Londres, Inglaterra. Su trabajo condujo a la elaboración del libro *Heat and Mass Transfer in Recirculating Flows*, en 1969, que fue la primera investigación de CFD en donde se lidiaba con la forma elíptica de las ecuaciones de Navier-Stokes, a la vez que presentaba el código ANSWER para resolverlas. Ese mismo año Spalding logró constituir la primera empresa dedicada a la consultoría apoyada en CFD, CHAM (Combustión, Heat and Mass Transfer Ltd.) (Gosman, 1969).

Spalding también destacó por haber sido fundador de la primer herramienta de software CFD disponible comercialmente, PHOENICS, que debutó en el año 1978. En ese entonces, la única alternativa en existencia era el código TEACH, del Imperial College, pero que presentaba grandes limitaciones. CHAM continuó siendo la única compañía que proveyera servicios comerciales en CFD hasta la aparición de la empresa Create, Inc. (Runchal, 2009).

Hacia finales de la década de los setenta surgió Create, Inc. en Nuevo Hampshire, EE. UU. Aquí se desarrolló Fluent, otro importante código de CFD, en 1983. Su primer nombre comercial fue CREATE X. Hecho por el profesor James Swithenbank junto con su equipo, incluyendo a Ferit Boysan, de la Universidad de Sheffield en Reino Unido. La primer versión era capaz de manejar mallas en dos y tres dimensiones, en coordenadas cartesianas y polares, flujo en estado estacionario en condiciones de régimen laminar o turbulento, transferencia de calor, combustión, una fase dispersa, convección natural y una interfaz fácil de usar (Lyczkowski, 2018).

Create, Inc. atravesó por varios cambios de propietario y nombre, hasta constituirse en 1988 como Fluent, Inc. El software que ofrecía esta empresa, llamado de la misma manera, se convirtió en el programa comercial más ampliamente usado en el mundo, en 2006 fue adquirido por ANSYS, Inc. Empresa que ha continuado actualizándolo.

En la fase más reciente de la evolución de la técnica CFD los equipos de cómputo han ido aumentando su disponibilidad, estos, al adquirir cada vez un tamaño más compacto y, sobre todo, abaratare su precio en el mercado, han posibilitado extender el uso de la Dinámica de Fluidos Computacional a un mayor número de usuarios, ante esta oportunidad han surgido un buen número de programas o paqueterías con solvers para resolver problemas de CFD.

Tabla 2.1 Software para simulación CFD

ANSYS	Es el software más usado para simulaciones computacionales de dinámica de fluidos, se fundó en 1970 y ha sido reconocida como una de las compañías de mayor innovación a nivel mundial, con presencia en más de cincuenta países. La empresa se dedica al desarrollo, comercialización y soporte de software de
-------	---

	<p>simulación, usado para predecir cómo se comportarán productos diseñados en ambientes reales. Se ofrecen diferentes módulos dependiendo lo que se quiere simular, con esta paquetería se puede abordar también problemas relacionados con campos electromagnéticos, materiales, condiciones de luminosidad, semiconductores, problemas de ingeniería de estructuras, acústica, entre otros. ("Engineering Simulation & 3D Design Software ANSYS", 2020).</p>
PHOENICS	<p>Es otro software comercial para simulaciones de escenarios que incluyan fluido, calor o transferencia de masa, reacciones químicas y combustión para una amplia gama de aplicaciones. Se fundó en 1974, actualmente las oficinas principales están en Wimbledon, Inglaterra, con subsidiarias en Japón y Rusia y agencias en otros veinticinco países. ("CHAM PHOENICS", 2020)</p>
Simcenter STAR-CCM+	<p>Siemens Digital Industries Software ofrece el simulador Simcenter STAR-CCM+, es una completa solución multifásica para la simulación de productos y diseños que operan en condiciones reales. Este programa añade la optimización y el estudio del diseño automatizado al conjunto de herramientas de simulación para problemas de dinámica de fluidos, de baterías, simulación acoplada, diseño exploratorio, maquinas eléctricas, electroquímica, reología, objetos en movimiento y mecánica de sólidos. ("STAR-CCM+", 2020)</p>
COMSOL Multiphysics	<p>Es un software de simulación de propósitos generales para modelar diseños, dispositivos y procesos de todos los campos de la ingeniería, manufactura e investigación científica. Permite convertir modelos en aplicaciones de simulación para ser usados en diferentes etapas del proceso de producción. ("COMSOL: Multiphysics Software for Optimizing Designs", 2020)</p>

OpenFOAM	Es un software de CFD de código abierto y libre, desarrollado desde 2004 en el Imperial College, institución con una fuerte tradición en investigación de la mecánica de fluidos. Está organizado en un conjunto de módulos que posibilitan la resolución de problemas, desde complejos flujos de fluidos que involucran reacciones químicas, turbulencia, transferencia de calor, acústica, mecánica de sólidos y electromagnética.
SimFlow	Un grupo de ingenieros jóvenes fascinados por las capacidades de OpenFOAM crearon SimFlow en 2013. Querían facilitar el uso de esta tecnología, hacerla manejable para ahorrar tiempo en las simulaciones. Es un software comercial que cuenta con una versión libre en modo de evaluación con la que se pueden resolver muchos problemas complejos con los que se enfrenta un ingeniero, estudiante o científico. ("CFD Software - SimFlow CFD", 2020)

Actualmente, el software más usado en el ámbito de la simulación CFD es ANSYS. Aunque los precios de las licencias pueden representar una limitante, principalmente en el caso de que el usuario no sea una empresa solvente o una universidad, ya que para poder hacer uso comercial del software es necesario contar con las mismas, el aprendizaje de la técnica puede ser emprendido de manera autodidacta y económica. Dentro del sitio web de la empresa se encuentra disponible la descarga de una versión estudiantil con licencia renovable de un año. ("Free Student Software | ANSYS Student", 2020)

Un auxiliar en la difusión de herramientas computacionales es el free software, que son códigos abiertos, es decir, susceptibles de ser modificados, y gratuitos. Afortunadamente, en muchas disciplinas ha surgido software gratis cuyo nivel de calidad y sofisticación compite a la par con aquellos comerciales; en CDF, OpenFOAM es el más conocido y usado.

A pesar de que los métodos computacionales, hoy en día, son precisos y ampliamente usados, no sustituirán, probablemente, jamás a las pruebas experimentales, sin embargo, resulta de enorme utilidad recurrir a la simulación computacional para reducir el número de puntos sobre los cuales hay que hacer mediciones experimentales para explorar el desempeño de sistemas industriales.

3.-Herramientas matemáticas

3.1.-Aspectos de las ecuaciones gobernantes en CFD y métodos de solución

El modelamiento matemático en la dinámica de fluidos se basa en las leyes de conservación de masa, momentum y energía, cada ley de conservación lleva a una ecuación gobernante del tipo diferencial parcial para una propiedad del flujo en particular. Por ejemplo, de la ley de conservación de energía deriva la ecuación de energía, en términos de la temperatura. La ecuación incluye expresiones matemáticas que representan la velocidad de cambio de energía/entalpía, lo cual permite que pueda ser usada para generar una película del comportamiento de la temperatura del sistema basándose en la técnica de CFD. Similarmente, para cada propiedad del flujo, hay una ecuación diferencial parcial gobernante que es transformada a un sistema de ecuaciones algebraicas lineales, con la incógnita siendo la propiedad del flujo. (Sharma, 2017)

Además de las leyes de conservación, con frecuencia, es necesario incorporar al programa CFD el cálculo de otras expresiones matemáticas que representan al fenómeno físico que se quiere simular, ya sea porque estas permiten reproducir una mejor aproximación de la realidad o porque es necesario considerar otros términos para definir adecuadamente el modelo que se quiere estudiar. Para tales expresiones matemáticas, en los casos cuando está disponible dentro de la paquetería comercial, se puede dar la instrucción al software, a través de la interfaz del programa, para la ejecución del algoritmo que realiza su implementación al modelo matemático y posteriormente su aproximación numérica en el cálculo de la solución. Algunos ejemplos de este tipo especial de expresiones se discutirán en el Capítulo 5 de esta obra, en el caso de reactores de hidrotreatmento de aceite vegetal, en el cual ocurren complejas interacciones entre las 3 fases involucradas en la reacción.

En la situación de que no exista la posibilidad de seleccionar la opción en el software para el cálculo de la ecuación descriptora del sistema que se desea simular, es necesario desarrollar e incorporar códigos de programación para este fin, por ejemplo, en Ansys Fluent se hace mediante User-Defined-Functions (UDFs), funciones definidas por el usuario que son operaciones programadas en el lenguaje C. (Fluent UDF manual, 2013)

Estas expresiones matemáticas que se incorporan a los programas de CFD se usan para diferentes propósitos dentro de la simulación, como:

- Modificar condiciones de frontera, definiciones para el cálculo de propiedades de los materiales, velocidad de reacciones de superficie o volumétricas, términos de generación/consumo en las ecuaciones de transporte, términos de difusión, interacción de fases para intercambio de momentum, masa o energía, etc.
- Ajustar valores computados cada cierto número de iteraciones.
- Inicializar la solución.
- Mejorar los cálculos en el postprocesamiento de la simulación.
- Mejorar los modelos existentes del programa CFD.

Para resolver las ecuaciones que rigen la física de los problemas que se resuelven mediante CFD existen tres diferentes corrientes de técnicas de solución numérica: Diferencias Finitas, Elemento Finito y métodos espectrales. El método de Volumen Finito, que es una formulación específica del método por diferencias finitas, es el fundamentalmente empleado por los códigos de CFD bien establecidos y desarrollados, como CFX Ansys, Fluent, PHOENICS y STAR-CD, esto es principalmente por compartir con la teoría de la dinámica de fluidos, o ambos considerar para su formulación, el concepto de volumen de control. En términos generales, el algoritmo numérico consta de los siguientes pasos:

1. Integración de las ecuaciones gobernantes del flujo de fluidos en todos los elementos de volumen que delimita la malla del dominio.
2. Discretización, que implica la conversión de las ecuaciones integrales resultantes en un sistema de ecuaciones algebraicas.
3. Solución de las ecuaciones algebraicas mediante un método iterativo.
(Versteeg & Malalasekera, 2007)

3.2.-Ecuaciones gobernantes

El propósito de este trabajo de titulación es plasmar los elementos básicos en los que se apoya la técnica CFD para crear simulaciones de la física real de un determinado sistema, por lo que se abordará de manera conceptual las implicaciones de las ecuaciones gobernantes y sus términos matemáticos.

Se deja a voluntad del lector profundizar sobre la deducción de las ecuaciones, en la forma de las ecuaciones de Navier-Stokes, para este fin se sugiere el libro *Fundamental Mechanics of Fluids* por el autor Ian G. Currie, en dicha obra se llega a las ecuaciones tomando en cuenta el concepto del continuo, esta idea considera que el flujo está constituido por materia continua y el comportamiento individual de las moléculas es ignorado. A cada punto de este continuo flujo se le asocia un único valor de velocidad, presión, densidad, temperatura, etc. (Currie, 2013) Sin embargo, la deducción de estas ecuaciones se puede encontrar en una gran variedad de fuentes en la literatura.

Volumen de control:

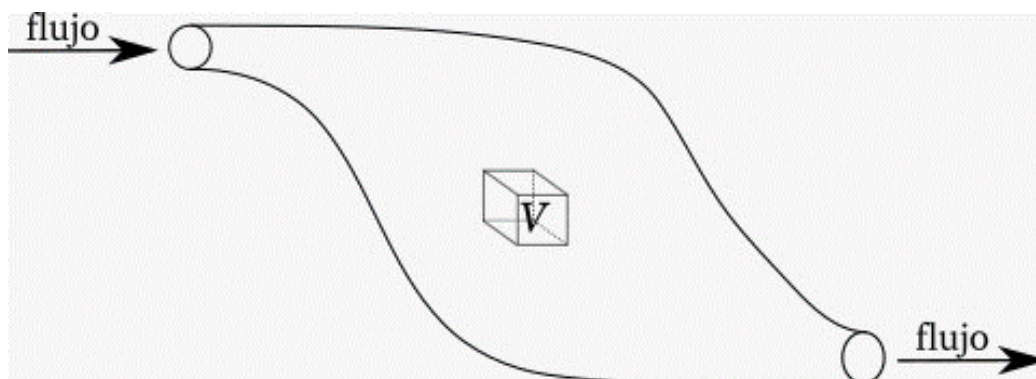


Ilustración 3.1 Representación esquemática de un volumen de control inmerso en el bulto de un fluido.

Antes de abordar la discusión sobre las leyes de conservación se explicará un concepto al cual se recurre con frecuencia en la deducción de las ecuaciones de conservación. Se habla de una *partícula de fluido* como la porción más pequeña de fluido en la que las moléculas individuales no tienen influencia en sus propiedades macroscópicas, a dicho elemento de fluido se le llama volumen de control.

Es posible tomar en cuenta un volumen de control de forma arbitraria, en el cual cada principio de conservación se aplica a una integral sobre el volumen de control. Por ejemplo, $\int_V \rho dV$, es la masa total contenida en el volumen de control, donde ρ es la densidad del fluido. El principio de conservación de masa se aplica a esta cantidad, resultando en una ecuación integro-diferencial, de manera similar ocurre para las demás propiedades.

3.3.-Conservación de masa

El principio de conservación de masa señala que si se selecciona específicamente a la masa contenida en una *partícula de fluido* de volumen V , que se encuentra inmersa en un fluido, y es observada conforme el flujo fluye se apreciará, entonces, que su forma y tamaño cambian a la vez que avanza la partícula seleccionada, sin embargo, su masa permanece constante. La manera matemática de expresar este enunciado es como sigue:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho dV = 0 \quad (ec. 3.1)$$

El operador $\frac{D}{Dt}$ es la derivada material, representa al cambio total en la cantidad $\int_V \rho dV$ visto por un observador que se encuentra siguiendo a una masa específica del flujo, esto es en el marco de referencia lagrangiano. La expresión $\int_V \rho dV$ representa a la masa del fluido contenida en V . La ecuación 3.1 implica que la masa de V inmersa en el fluido permanece constante en el intervalo diferencial de tiempo Dt en que se observa al sistema y su cambio es igual a cero.

Por el teorema de transporte de Reynolds (ver apéndice), que relaciona la derivada lagrangiana, $\frac{D}{Dt}$, de una integral de volumen de una masa dada a una integral de volumen en el que el integrando contiene únicamente derivadas eulerianas, siendo u_i la velocidad, la ecuación 3.1 se puede expresar como:

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) \right] dV = 0 \quad (ec. 3.1b)$$

Como la masa de volumen V ha sido escogida arbitrariamente diferente de cero, la única manera en que la ecuación anterior se satisface, para todo $V \neq 0$, es que el integrando sea cero. Entonces la ecuación que expresa la conservación de masa llega a ser:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (ec. 3.2)$$

Esta ecuación matemática dice algo más aparte de la conservación de masa, esta, al ser afectados sus términos por el operador diferencial parcial en las direcciones x_i , establece

implícitamente que la velocidad es continua, por esta razón la ecuación 3.2 es conocida como la *ecuación de continuidad*.

Cuando el cambio en la densidad del fluido puede ser despreciable, esta puede ser considerada constante. Aquellos fluidos que cumplen con esta característica reciben el nombre de *incompresibles*, esto significa que a una masa dada siendo seguida mientras fluye, no solo se observará que su masa permanece constante, de igual manera lo hará su volumen, y, en consecuencia, su densidad. Matemáticamente se puede expresar lo anterior como $\frac{D\rho}{Dt} = 0$, esto permite, de la ecuación 3.2, llegar a la expresión simplificada:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{ec. 3.3})$$

Que es, también, la ecuación de continuidad válida para fluidos incompresibles.

3.4.-Conservación de momentum

La ecuación de momentum se deduce al aplicar la segunda ley de movimiento de Newton a un elemento de fluido, esta establece que la velocidad en la que el momentum de una masa de fluido cambia es igual a la suma de las fuerzas externas que actúan sobre ella. Dichas fuerzas externas se clasifican en dos categorías: fuerzas de volumen y fuerzas de superficie.

Fuerzas de cuerpo o volumen, se les llama a las fuerzas cuyo origen se encuentra lejos del elemento de control, las fuerzas de volumen varían muy levemente respecto a la posición y actúan uniformemente en todas las partes de la masa seleccionada. De ahí que la fuerza total que se ejerce sobre el elemento de fluido es proporcional a su volumen. Ejemplos de este tipo de fuerzas son la gravitacional, electromagnética, centrífuga, de Coriolis.

Por otro lado, las fuerzas de superficie actúan solo si los elementos del fluido están en contacto, por lo tanto, se manifiesta únicamente en las fronteras del elemento de fluido, de ahí que son llamadas "fuerzas de superficie". La presión termodinámica y los esfuerzos viscosos se consideran fuerzas de superficie en el estudio del movimiento de los fluidos.

Ahora se verán las matemáticas implícitas en el enunciado de conservación de momentum, si \mathbf{f} es un vector que representa a la resultante por unidad de masa de las fuerzas de volumen que actúan sobre el elemento de fluido, la fuerza total de cuerpo actuando sobre la masa dada de volumen V es $\int_V \rho \mathbf{f} dV$. Así mismo, si \mathbf{P} es el vector resultante de las fuerzas de superficie por unidad de área entonces $\int_S \mathbf{P} dS$ es la fuerza de superficie total que se ejerce sobre la superficie S que envuelve al elemento de fluido de volumen V . Después, si la masa de un volumen arbitrariamente escogido es observada en el marco de referencia lagrangiano, la velocidad de cambio de momentum de la masa contenida en V se escribe matemáticamente como $\frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV$, \mathbf{u} es el vector de velocidad. Entonces, la ecuación matemática que resulta de imponer la ley física de la conservación de momentum sobre un elemento de fluido es:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV = \int_S \mathbf{P} dS + \int_V \rho \mathbf{f} dV \quad (\text{ec. 3.4})$$

En la expresión anterior, el término asociado con las fuerzas de superficie tiene nueve componentes relacionados con los esfuerzos viscosos, un esfuerzo normal y dos esfuerzos cortantes por cada plano coordenado en el espacio tridimensional, con ayuda de la ilustración 3.2 podemos visualizar mentalmente de mejor manera estos efectos sobre un volumen de control.

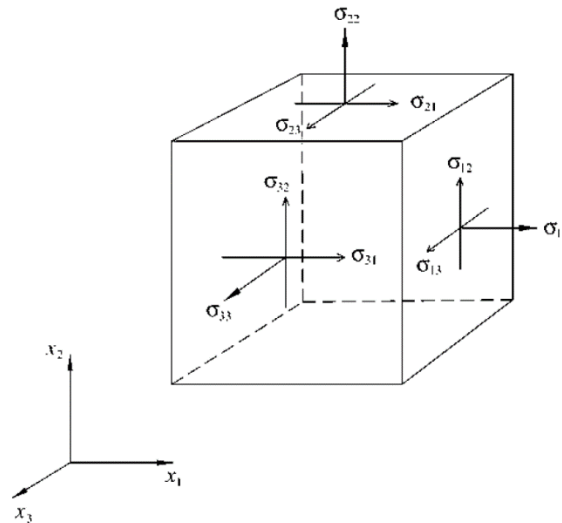


Ilustración 3.2 Las componentes del esfuerzo que sufre el elemento de fluido tienden a actuar sobre un punto a medida que la longitud del cubo tiende a cero. Las coordenadas cartesianas x, y, z , son $x_1, x_2, y x_3$ respectivamente.

Una componente particular de \mathbf{P} se representa mediante el símbolo σ_{ij} , esto permite identificar a cada componente por medio de dos subíndices, i e j . El primer subíndice indica el plano $x_i = \text{constante}$ sobre el cual actúa el esfuerzo, el segundo indica la dirección en la que este esfuerzo se ejerce. Este vector de superficie es un tensor de segundo orden, con tres componentes actuando sobre cada plano coordenado. Entonces, para una superficie arbitrariamente orientada cuya normal unitaria tiene componentes n_1, n_2 y n_3 , la fuerza en la superficie es $P_j = \sigma_{ij}n_i$, i se suma de 1 a 3. Por lo que la ecuación 4 puede reescribirse como:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{u} dV = \int_S \sigma_{ij} n_i dS + \int_V \rho \mathbf{f} dV$$

Recurriendo al teorema de Reynolds, la derivada lagrangiana que afecta al lado izquierdo de la ecuación puede removerse y en su lugar obtener una ecuación únicamente con derivadas eulerianas. En el otro lado de la ecuación, se puede igualar el primer término de la derecha a una integral de volumen aplicando el teorema de Gauss (ver apéndice), entonces se llega a la ecuación:

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_j u_k) \right] dV = \int_V \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} dV + \int_V \rho f_j dV$$

Arreglando los términos, esta misma ecuación se puede expresar como:

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_j u_k) - \int_V \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} - \rho f_j \right] dV = 0$$

La arbitrariedad en la elección del volumen de control deja ver que para que esta ecuación se satisfaga, el integrando de la expresión debe ser cero, encontramos entonces:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_j u_k) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho f_j$$

Es posible simplificar la expresión anterior al desarrollar los términos del lado izquierdo de la igualdad y encontrar que algunos de ellos agrupan a la ecuación de continuidad multiplicada por u_j . Entonces la ecuación que se deduce de la segunda ley de Newton y que establece la conservación de momentum es:

$$\rho \frac{\partial u_j}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial u_j}{\partial x_k} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho f_j \quad (ec. 3.5)$$

El lado izquierdo de la ecuación 3.5 representa la velocidad de cambio en el momentum de un elemento de fluido, el primer término corresponde a la aceleración temporal, el segundo término es la aceleración convectiva que toma en cuenta las aceleraciones locales, como las ocasionadas por obstáculos. Del lado derecho de la ecuación se encuentran los términos que ocasionan las aceleraciones, el primero se debe al gradiente de esfuerzo cortante superficial, mientras que el segundo es debido a fuerzas de cuerpo que actúan sobre la masa, como la gravedad.

3.5.-Conservación de energía

Para llegar a la ecuación de conservación de energía se parte de aplicar la primera ley de la termodinámica a un elemento de fluido inmerso en un flujo, esto es que la velocidad de cambio de la energía total de un elemento de fluido mientras fluye es igual a la suma de la velocidad a la que se realiza trabajo sobre el sistema y la velocidad a la que se añade calor por conducción. Se considera la energía total a la suma de la energía interna e y la energía cinética por unidad de masa $\frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$.

Con lo anterior en mente, nuevamente aplicamos la derivada material a la energía contenida en un elemento de fluido que se encuentra fluyendo. La energía total por unidad de volumen de esta masa es $\rho e + \frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$, de tal forma que la energía total contenida en V es

$\int_V \left[\rho e + \frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right] dV$. En la discusión de la conservación de momentum se identificaron las fuerzas que actúan sobre la masa de fluido en consideración, el trabajo hecho en el fluido por estas fuerzas esta dado por el producto de su velocidad y la componente de cada fuerza que es colineal con la velocidad, es decir, el trabajo es el producto escalar de el vector velocidad con el vector fuerza. Entonces, el trabajo hecho por las fuerzas de superficie esta dado por $\int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{P} dS$, por otro lado, el trabajo hecho por las fuerzas de volumen se representa mediante la expresión $\int_V \mathbf{u} \cdot \rho \mathbf{f} dV$. Por último, necesitamos una expresión para el calor añadido al fluido. Definiendo al vector \mathbf{q} como el flux de calor conductivo que sale del volumen de control, la cantidad de calor por unidad de tiempo por unidad de área es $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}$, donde \mathbf{n} es la normal unitaria hacia afuera. De manera que la cantidad neta de calor que sale del volumen de control es $\int_S \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS$.

Ahora es posible escribir el enunciado de la primera ley de la termodinámica de forma analítica. Aplicando la derivada lagrangiana a la energía total contenida en el elemento de fluido e igualando este término a la suma del trabajo realizado en el sistema más el calor añadido, establecemos la siguiente ecuación matemática:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \left[\rho e + \frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right] dV = \int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{P} dS + \int_V \mathbf{u} \cdot \rho \mathbf{f} dV - \int_S \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS$$

Aquí se está tomando en cuenta el valor del trabajo como positivo cuando se realiza sobre el sistema, el término del calor, al ser el calor que sale del volumen de control, se escribe precedido por un signo negativo, al ser \mathbf{q} energía que pierde el sistema, y adquiere un valor positivo cuando gana calor de los alrededores.

Nuevamente se echa mano del teorema de Reynolds para dejar el término a la izquierda de la igualdad expresado solamente con derivadas eulerianas. Del lado derecho de la ecuación, es necesario encontrar expresiones de integrales de volumen equivalentes a las de integrales de superficie, para esto recordemos que \mathbf{P} se relaciona al tensor de esfuerzos mediante $P_j = \sigma_{ij} n_i$, evaluando esta expresión en la integral de fuerzas de superficie se puede aplicar el teorema de Gauss a las dos integrales de área de la ecuación anterior. Un cambio de notación es necesario ahora que el tensor de esfuerzos será incorporado a la ecuación anterior. Entonces, se encuentra que:

$$\begin{aligned} \int_V \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho u_j u_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\rho e + \frac{1}{2} \rho u_j u_j \right) u_k \right] \right\} dV \\ = \int_V \frac{\partial (u_j \sigma_{ij})}{\partial x_i} dV + \int_V u_j \rho f_j dV - \int_V \frac{\partial q_j}{\partial x_j} dV \end{aligned}$$

Como el volumen sobre el cual se integran todos los términos es el mismo y se ha escogido arbitrariamente distinto de cero, la suma de todos los integrandos debe ser cero, entonces se puede escribir:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho u_j u_j \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\left(\rho e + \frac{1}{2} \rho u_j u_j \right) u_k \right] = \frac{\partial (u_j \sigma_{ij})}{\partial x_i} + u_j \rho f_j - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}$$

Esta ecuación se puede simplificar desarrollando los productos de las derivadas parciales y encontrando que algunos términos se igualan a cero con base en la ecuación de continuidad (ecuación 3.2). Se llega a la ecuación:

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial e}{\partial x_k} + \rho u_j \frac{\partial u_j}{\partial t} + \rho u_j u_k \frac{\partial u_j}{\partial x_k} = u_j \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + u_j \rho f_j - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (ec. 3.6)$$

Se puede observar que el tercer y cuarto término del lado izquierdo de la igualdad junto con el primero y el tercero del lado derecho de la ecuación, agrupan la ecuación de momentum, ecuación 3.5, multiplicada por la velocidad u_j . Entonces los podemos extraer de la ecuación 3.6, y llegar a una ecuación que expresa la conservación de la energía térmica:

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho u_k \frac{\partial e}{\partial x_k} = \sigma_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (ec. 3.7)$$

Los términos que se suprimieron corresponden a términos de energía mecánica, la ecuación de momentum puede ser vista como un balance de fuerzas, con j como el subíndice libre, de ahí que el producto punto de cada fuerza con la velocidad u_j da la velocidad a la que se realiza trabajo (energía mecánica) sobre el elemento de fluido debido a las fuerzas mecánicas.

Por otro lado, la ecuación 3.7 es un balance de energía térmica, generalmente se conoce simplemente como la ecuación de energía. Todo el lado izquierdo de la ecuación 3.7 representa la velocidad de cambio en la energía interna, el primer término es el cambio temporal, mientras que el segundo es debido a cambios locales convectivos causados por el flujo del fluido desplazándose de una zona a otra. El lado derecho de la ecuación de energía representa a las causantes del cambio en la energía interna, el primero de estos términos a la derecha representa la conversión de energía mecánica a energía térmica debida a la acción de los esfuerzos en la superficie del elemento de fluido.

3.7.-Métodos numéricos en CFD

El método de discretización es una aproximación matemática para convertir las ecuaciones diferenciales parciales gobernantes en ecuaciones algebraicas lineales, convirtiendo el problema de cálculo en uno de álgebra. Asumiendo que las ecuaciones gobernantes tienen validez sobre el interior del dominio, el método se aplica sobre cada punto de la malla, por lo tanto, la aplicación de un método de discretización lleva a una ecuación algebraica lineal para cada punto de la malla, esto genera un sistema cerrado de ecuaciones algebraicas, con un número de ecuaciones igual al número de puntos de la malla.

Hay principalmente tres métodos de discretización: Método de Diferencias Finitas (MDF), Método de Volumen Finito (MVF) y el Método de Elemento Finito (MEF). El MDF es el más antiguo, mientras que el MVF es un método reciente en CFD. El MEF es mayormente empleado a problemas estructurales, relacionados con la mecánica de sólidos. (Sharma, 2017)

En el MVF, algunos de los términos de las ecuaciones de conservación son convertidos y evaluados como fluxes en los lados de cada celda, como el flux entrando a un determinado volumen es igual al que sale del volumen adyacente, el MVF es conservativo. Esta inherente propiedad de conservación hace del MVF el tipo de discretización predilecta en CFD (Moukalled et al., 2016).

Los procedimientos más populares para resolver la matriz generada por el sistema de ecuaciones algebraicas es el algoritmo para matrices tridiagonales, o algoritmo de thomas, y el algoritmo SIMPLE, que recibe su nombre del acrónimo en inglés Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations, para asegurar un correcto acoplamiento entre la presión y la velocidad. (Versteeg & Malalasekera, 2007).

3.8.- Solución de la ecuación de Poisson mediante MDF

3.8.1.-Objetivo

Con el propósito de ejemplificar conceptualmente los procesos que sigue un programa de CFD se resolverá un problema típico de dinámica de fluidos mediante el MDF.

3.8.2.- Planteamiento

Se busca encontrar la velocidad de un flujo estacionario laminar que circula por un ducto de sección transversal rectangular con velocidad cero en las paredes y sujeto a una presión constante en la dirección longitudinal del ducto (ver Ilustración 3.3 a). Se parte de tomar las ecuaciones de conservación de momentum, que describen el movimiento de los fluidos, y con la información del problema eliminar los términos que se pueden igualar a cero.

En coordenadas cartesianas se tiene:

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) &= - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right] + \rho g_x \\ \rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) &= - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right] + \rho g_y \\ \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) &= - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z \end{aligned}$$

Los términos tachados se cancelan porque se considera que el flujo avanza en la dirección z y, por ende, el vector velocidad únicamente tiene valor distinto de cero en la tercera componente. $v_x = v_y = 0$. Por la ecuación de continuidad, si el área transversal del ducto no varía a lo largo de z entonces v_z permanece constante en todo el eje z , y su cambio en esta dirección equivale a cero, $\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$. Debido a la condición de estado estacionario se deduce que el efecto del paso del tiempo no tiene impacto en las variables que describen el movimiento del flujo y todos los cambios en relación con el tiempo equivalen a cero, esto es $\partial_t \mathbf{v} = 0$. En cuanto a la presión, se asume que su variación únicamente ocurre en la dirección del flujo, en este caso z , por lo que la variación respecto a las otras direcciones es igual a cero. No se toma en cuenta la aceleración de la gravedad o su componente en la dirección z es igual a cero.

Así se llega a la ecuación de Poisson:

$$\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial P}{\partial z}$$

Se indica en el problema una caída de presión constante a lo largo de z , y tomando en cuenta que las propiedades físicas del sistema permanecen constantes, se puede igualar el término a la derecha de la igualdad, en la ecuación anterior, a una constante C con dimensiones $m^{-1}s^{-1}$.

Para resolver el problema por el método de diferencias finitas es necesario mallar la región transversal del flujo, dividirla en celdas, y localizar nodos en los vértices, este proceso se puede ver representado en la ilustración 3.3.

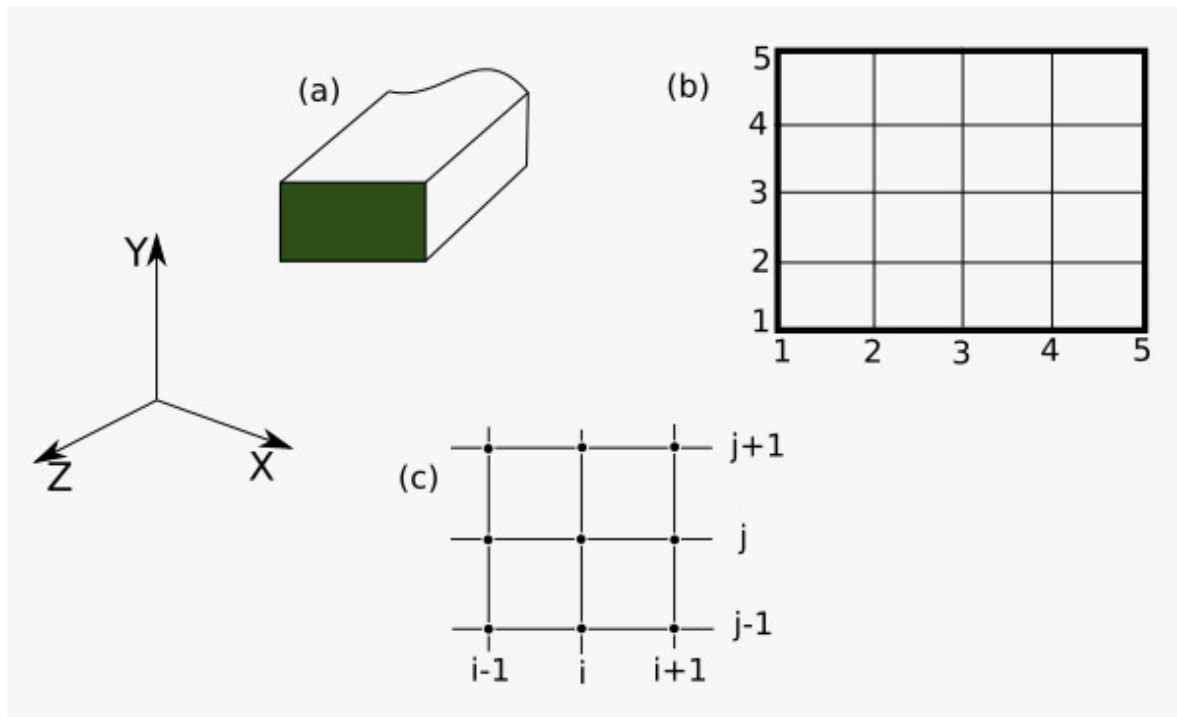


Ilustración 3.3 Flujo totalmente desarrollado en un ducto rectangular. a) Dominio computacional del problema. b) discretización en una malla con 16 celdas. c) Nomenclatura de los nodos para las aproximaciones mediante diferencias finitas.

3.8.3.- Solución

Se sigue con discretizar la ecuación de la siguiente manera, si $f(i)$ es la función f evaluada en el nodo i entonces la derivada está dada por:

$$f'(i) = \frac{f(i) - f(i-1)}{h}$$

De igual forma para la segunda derivada se tiene la expresión:

$$f''(i) = \frac{f'(i) - f'(i-1)}{h}$$

Para la segunda derivada en el nodo $i+1$

$$f''(i+1) = \frac{\frac{f(i+1) - f(i)}{h} - \frac{f(i) - f(i-1)}{h}}{h}$$

Se llega a la siguiente expresión para la segunda derivada:

$$f''(i+1) = \frac{1}{h^2} [f(i+1) - 2f(i) + f(i-1)]$$

Para este caso, en el que las velocidades en z que se quieren calcular se acomodan en un arreglo cuadrangular, las variables adquieren un subíndice i y j para ubicarlas en renglones y columnas, respectivamente. La ecuación de Poisson que describe el sistema que se está estudiando queda como sigue:

$$\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta y^2} = C$$

En esta ecuación se aprecia que el índice que se desplaza cuando se deriva respecto a x es i y cuando se deriva respecto a y es j . Se puede reescribir como:

$$\frac{1}{\Delta x^2} u_{i-1,j} - \left(\frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} \right) u_{i,j} + \frac{1}{\Delta x^2} u_{i+1,j} + \frac{1}{\Delta y^2} u_{i,j-1} + \frac{1}{\Delta y^2} u_{i,j+1} = C$$

Donde $u_{i,j}$ es la velocidad en la dirección z evaluada en el nodo i, j . Se sabe, de la condición de no deslizamiento en las paredes, que las velocidades en la frontera del flujo es cero, se tiene $u_{1,j} = u_{5,j} = u_{i,1} = u_{i,5} = 0$. Entonces debemos encontrar una ecuación para los nueve nodos internos de nuestra malla. Si se considera $C = -100$ un tamaño de paso en x de $\Delta x = 0.1$ y de $\Delta y = 0.05$, se evalúa:

- Para $u_{2,2}$:

$$100u_{1,2} - 1000u_{2,2} + 100u_{3,2} + 400u_{2,1} + 400u_{2,3} = -100$$

- Para $u_{3,2}$:

$$100u_{2,2} - 1000u_{3,2} + 100u_{4,2} + 400u_{3,1} + 400u_{3,3} = -100$$

- Para $u_{4,2}$:

$$100u_{3,2} - 1000u_{4,2} + 100u_{5,2} + 400u_{4,1} + 400u_{4,3} = -100$$

- Para $u_{2,3}$:

$$100u_{1,3} - 1000u_{2,3} + 100u_{3,3} + 400u_{2,2} + 400u_{2,4} = -100$$

- Para $u_{3,3}$:

$$100u_{2,3} - 1000u_{3,3} + 100u_{4,3} + 400u_{3,2} + 400u_{3,4} = -100$$

- Para $u_{4,3}$:

$$100u_{2,3} - 1000u_{3,3} + 100u_{4,3} + 400u_{3,2} + 400u_{3,4} = -100$$

- Para $u_{2,4}$:

$$100u_{1,4} - 1000u_{2,4} + 100u_{3,4} + 400u_{2,3} + 400u_{2,5} = -100$$

- Para $u_{3,4}$:

$$100u_{2,4} - 1000u_{3,4} + 100u_{4,4} + 400u_{3,3} + 400u_{3,5} = -100$$

- Y, por último, para $u_{4,4}$:

$$100u_{3,4} - 1000u_{3,4} + 100u_{5,4} + 400u_{3,3} + 400u_{4,5} = -100$$

Se obtuvieron 9 ecuaciones con 9 incógnitas, que son las velocidades en los nodos interiores de la malla. Es posible representar este sistema de ecuaciones algebraicas lineales en una matriz A de 9×9 y hacer:

$$Au = b$$

Donde:

$$A = \begin{bmatrix} -1000 & 100 & 0 & 400 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 100 & -1000 & 100 & 0 & 400 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 100 & -1000 & 0 & 0 & 400 & 0 & 0 & 0 \\ 400 & 0 & 0 & -1000 & 100 & 0 & 400 & 0 & 0 \\ 0 & 400 & 0 & 100 & -1000 & 100 & 0 & 400 & 0 \\ 0 & 0 & 400 & 0 & 100 & -1000 & 0 & 0 & 400 \\ 0 & 0 & 0 & 400 & 0 & 0 & -1000 & 100 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 400 & 0 & 100 & -1000 & 100 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 400 & 0 & 100 & -1000 \end{bmatrix}$$

$$u = \begin{bmatrix} u_{2,2} \\ u_{3,2} \\ u_{4,2} \\ u_{2,3} \\ u_{3,3} \\ u_{4,3} \\ u_{2,4} \\ u_{3,4} \\ u_{4,4} \end{bmatrix} ; \quad b = \begin{bmatrix} C \\ C \\ C \\ C \\ C \\ C \\ C \\ C \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -100 \\ -100 \\ -100 \\ -100 \\ -100 \\ -100 \\ -100 \\ -100 \\ -100 \end{bmatrix}$$

Al resolver el sistema se encuentra que la solución para u es:

$$u = \begin{bmatrix} 0.280488 \\ 0.331707 \\ 0.280488 \\ 0.368293 \\ 0.439024 \\ 0.368293 \\ 0.280488 \\ 0.331707 \\ 0.280488 \end{bmatrix}$$

Entonces se puede generar una gráfica que ilustre un perfil de velocidades a lo largo del plano xy.

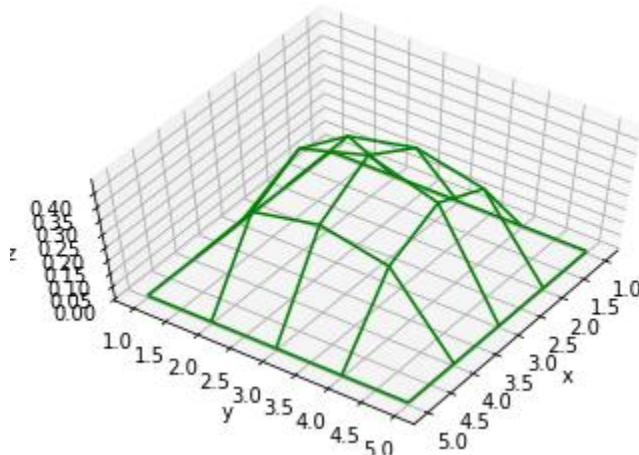


Ilustración 3.4 Perfil rudimentario de velocidades generado en Python. Esta grafica permite apreciar el cambio de la velocidad respecto a la posición dentro de un plano que corta transversalmente el ducto rectangular por el que avanza el flujo en el caso de estudio.

Si se desea profundizar en la formalidad de los métodos numéricos que se utilizan en CFD, para este fin, se recomienda el libro *Computational Fluid Dynamics for Engineers and Scientists* (Jayanti, 2018).

4.-Situaciones especiales de flujo en IQ

4.1.-Turbulencia

El número de Reynolds de un flujo proporciona información acerca de la relación que tienen las fuerzas inerciales, asociadas con la convección (i. e. velocidad), con las fuerzas viscosas del material fluyendo. De la observación experimental, se sabe que, a condiciones de operación por debajo del número de Reynolds crítico, Re_{crit} , el flujo es suave y las capas adyacentes del fluido se deslizan una sobre otra de manera ordenada. Si las condiciones de frontera permanecen fijas en el tiempo se alcanzará el estado estacionario. A esta situación, en la que se comporta el flujo, se le denomina régimen laminar.

Cuando se presentan valores de número de Reynolds mayores a Re_{crit} una complicada serie de eventos ocurren, eventualmente provocando un cambio radical en el comportamiento del flujo. Se presenta un estado donde el flujo se desenvuelve de manera caótica y aleatoria. El movimiento se vuelve intrínsecamente inestable aun cuando se imponen condiciones de frontera constantes. La velocidad, y otras propiedades del flujo, varían de forma fuertemente irregular. Este régimen es conocido como régimen turbulento.

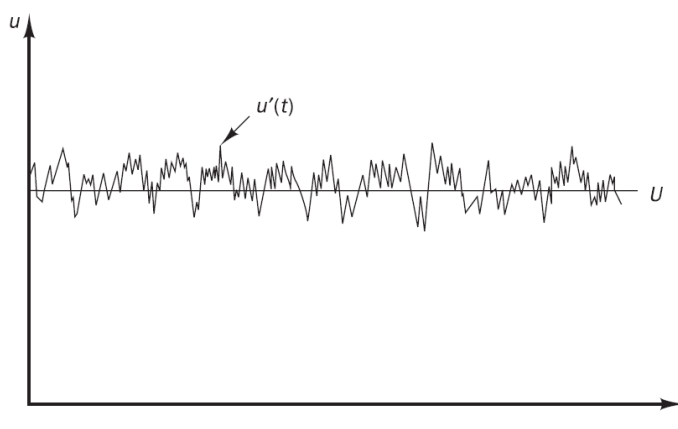


Ilustración 4.1 Típica gráfica de la velocidad medida en un punto dentro de un campo de flujo turbulento (Versteeg & Malalasekera, 2007).

La velocidad en la ilustración 4.1 se descompone en un valor constante promedio U y un término fluctuante, $u'(t)$, sumado a él: $u(t) = U + u'(t)$. Esta consideración recibe el nombre de descomposición de Reynolds.

Incluso en circunstancias de flujo en las que la velocidad y presión promedio varían solamente en una o dos dimensiones espaciales, las fluctuaciones turbulentas se manifiestan en todo el espacio tridimensional. Aunado a esto, visualizaciones empíricas de flujos turbulentos revelan estructuras rotacionales dentro del flujo, llamados remolinos.

El movimiento turbulento acarrea vorticidad, con ejes de rotación en todas las direcciones, y se compone de remolinos interactuando los unos con otros, estos se generan de

diferentes tamaños. Las dimensiones de dichas estructuras rotacionales pueden estar en el rango del tamaño del dominio del flujo (p. ej. el diámetro de una tubería) a remolinos pequeños, en los que las fuerzas viscosas toman relevancia y ocurre disipación.

Los remolinos grandes son, en general, los más energéticos y extraen energía del movimiento promedio; estos se desintegran en remolinos más pequeños, transmitiendo su energía en un proceso llamado cascada de energía. Resultando, netamente, en el intercambio de momentum ocasionado por el transporte convectivo de los remolinos, que provoca que las capas de fluido moviéndose a altas velocidades desaceleren y las capas más lentas que incrementen su velocidad. Suscitando la aparición de esfuerzos cortantes adicionales sufridos por las capas del fluido, a los que se les conoce como esfuerzos de Reynolds (Versteeg & Malalasekera, 2007).

Como consecuencia, calor, masa y momentum son intercambiados de manera muy eficaz. Por ejemplo, una traza de tinta que es inyectada en un punto, dentro de un flujo turbulento, se romperá rápidamente y se difundirá en el seno de todo el flujo. Tal mezclado tan efectivo da la pauta para valores altos en los coeficientes de difusión de masa, calor y momentum. Quizá sea por esta razón que la mayoría de los flujos con utilidad para la ingeniería sean turbulentos, así que el régimen turbulento no es solo de interés teórico. Los ingenieros requieren de herramientas accesibles capaces de representar los efectos de la turbulencia.



Ilustración 4.2 Flujo jet, turbulento. (Van Dyke, 1982).

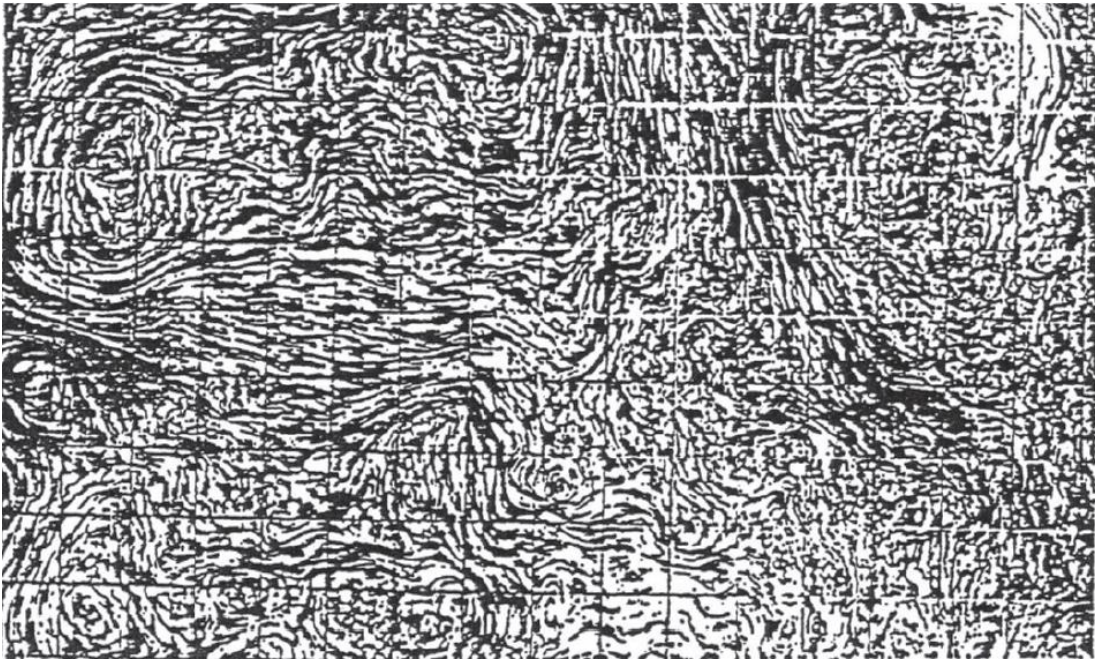


Ilustración 4.3 Remolinos turbulentos en la superficie de un tanque agitado de agua, es posible apreciar los diferentes tamaños en los que se forman (Rodi et al., 2013).

Importantes esfuerzos se han realizado con el objetivo de desarrollar métodos numéricos con la capacidad de capturar los efectos debidos a la turbulencia. Tales métodos pueden ser agrupados dentro de las siguientes tres categorías:

Simulación Numérica Directa (DNS)

La turbulencia está gobernada por las mismas ecuaciones básicas que aplican a la generalidad de los flujos laminares, es decir, las ecuaciones de Navier-Stokes, estas, junto con la ecuación de continuidad, describen los complejos detalles del fluctuante movimiento turbulento. Hoy en día es posible resolver numéricamente estas ecuaciones, un método que logra este fin sin incorporar ningún modelo es la Simulación Numérica Directa (DNS, por sus iniciales en inglés).

En este enfoque, se deben representar a todas las escalas de los remolinos, por lo que el tamaño de las celdas en la malla numérica deberá ser más pequeño que las estructuras rotacionales en movimiento más chicas, en donde la disipación de energía ocurre tras la desintegración de remolinos grandes en muchos otros de menor magnitud. En la ilustración 5.3 se puede ver que la malla numérica puede estar compuesta por celdas más grandes que los remolinos en donde ocurre disipación, por lo que no podrían ser representados.

Un inconveniente de esta metodología es que el poder computacional necesario para obtener soluciones para flujos turbulentos aumenta rápidamente con el número de Reynolds (Rodi et al., 2013).

Ecuaciones RANS

Se ha señalado como los métodos numéricos se desarrollaron hasta después de la aparición de aparatos que efectuaran cálculos velozmente (computadoras), por esta misma razón fue que se desarrollaron métodos estadísticos, en los que las fluctuaciones turbulentas son promediadas, en consecuencia, se resuelven ecuaciones que gobiernan cantidades promedio del flujo. Estas ecuaciones se denominan ecuaciones de Navier-Stokes Reynolds-Promediadas (RANS, por sus siglas en inglés), y, por ende, estos métodos reciben el nombre de métodos RANS.

En orden de lograr calcular flujos turbulentos con las ecuaciones RANS es necesario desarrollar modelos de turbulencia para predecir los esfuerzos de Reynolds, estos términos son desconocidos y deben ser descritos por un modelo antes de que las ecuaciones promedio del flujo puedan ser resueltas. Los modelos de este tipo reciben el nombre de modelos estadísticos de turbulencia o modelos RANS.

Los modelos RANS más comunes son clasificados con base en el número adicional de ecuaciones de transporte que se incorporan para ser resueltas junto con las ecuaciones RANS del flujo.

Tabla 4.1 Lista de modelos RANS.

No. de ecuaciones de transporte adicionales	Nombre
0	Modelo de longitud de mezcla
1	Modelo Spalart-Allmaras
2	Modelo $k-\epsilon$
	Modelo $k-\omega$
	Modelo algebraico de esfuerzos
7	Modelo de esfuerzos de Reynolds

La mayoría de las veces no es necesario conocer el detalle de los efectos de la turbulencia, por lo que este es el método más comúnmente usado, entre los modelos RANS más populares están el modelo $k-\epsilon$ y el modelo de esfuerzos de Reynolds. Los recursos computacionales necesarios para producir cálculos razonablemente precisos son modestos, por lo que el método ha sido el predilecto por los ingenieros durante, al menos, las últimas tres décadas (Versteeg & Malalasekera, 2007).

Simulación de Grandes Remolinos (LES)

Se encuentra en un punto medio entre las dos metodologías anteriormente mencionadas. Al igual que en el enfoque DNS, también se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes, pero solamente para los movimientos más grandes en la escala de una malla dada. Para evaluar a los remolinos de un tamaño menor que el de las celdas son promediados localmente, y su efecto debe ser evaluado mediante algún modelo SGS (Sub-Grid-Scale, inglés de “por debajo de la escala de la malla”).

El cálculo de la turbulencia con este enfoque demanda mayor capacidad computacional que el método RANS, pero no tiene el mismo problema que el método DNS en cuanto al incremento de poder de procesamiento en función del número de Reynolds.

4.2.-Flujo multifásico

El flujo multifásico se caracteriza por la presencia simultánea de distintas fases que pueden encontrarse en tres estados: líquido, sólido o gaseoso. El flujo a dos fases está constituido por únicamente dos fases, el flujo multifásico es una mezcla de más de dos fases, lo que lo hace más complejo que el flujo a dos fases, pero la mayor parte de los problemas fundamentales del flujo multifásico se encuentran presentes ya en la teoría del flujo bifásico (Morel, 2015).

Tanto el flujo a dos fases como el flujo multifásico se puede encontrar en situaciones naturales e industriales. En meteorología se presenta en lluvias, nevadas, granizo, deshielo, y formación de nubes. Está presente en todos los procesos en los que ocurre cambio de fase, es decir, condensación y ebullición. Tales procesos de transferencia de calor y masa tienen una variedad de aplicaciones como reactores nucleares de agua presurizada y de agua en ebullición, plantas convencionales de energía eléctrica, motores de combustión interna, motores de cohetes de combustible sólido y líquido, evaporadores, condensadores, unidades de destilación, reactores químicos, lechos empacados, etc.

La primera impresión puede llevar a considerar que los sistemas fluyentes de dos o más fases y su fenomenología asociada comparten pocas cosas en común. Esta acepción ha marcado la tendencia de analizar los problemas de un sistema, componente o proceso en particular, y generar modelos o correlaciones específicas para cada aplicación, de poca validez general para otras tecnologías, ralentizando la generación de modelos versátiles. (Ishii, 2014).

El flujo a dos fases se caracteriza también por presentar interfases que separan a cada fase, algunas propiedades físicas son discontinuas en la interfase, como la densidad y la velocidad en los sistemas gas-líquido. Las interfases se mueven, se deforman y son numerosas, lo que las hace muy difíciles de modelar. Los flujos bifásicos pueden ser clasificados en regímenes, en una manera similar en la que se clasifica el flujo monofásico en régimen laminar o turbulento.

En el pasado, métodos simplificados para estimar parámetros hidrodinámicos, como la caída de presión, fueron desarrollados, como el modelo Lockhart-Martinelli y el modelo homogéneo estable (Thome, 2016). Sin embargo, estos modelos no gozaban de probada confiabilidad, aunque eran útiles para estimar el diseño de procesos en ingeniería. Entre los más usados está el propuesto por Martinelli, que consta en identificar, con ayuda de cantidades adimensionales, el régimen que se debería esperar tomando en cuenta el mapa empírico de Baker para dos fases.

Baker, quien fuera el primero en reconocer la importancia de identificar los patrones de flujo bifásico para el cálculo de la caída de presión, utilizó coordenadas conjugadas para mapear la transición de los regímenes de flujo. Baker trazo G/λ vs $L\lambda\Psi/G$, donde G y L son el flujo másico de gas y líquido, respectivamente, λ y Ψ son parámetros adimensionales dados por:

$$\lambda = \left[\left(\frac{\rho_G}{0.075} \right) \left(\frac{\rho_L}{62.3} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad \Psi = \frac{73}{\sigma} \left[\mu_L \left(\frac{62.3}{\rho_L} \right)^2 \right]^{\frac{1}{3}}$$

Aquí, la densidad está en lb ft^{-3} , la viscosidad, μ , en cp , y la tensión superficial, σ , en dina cm^{-1} .

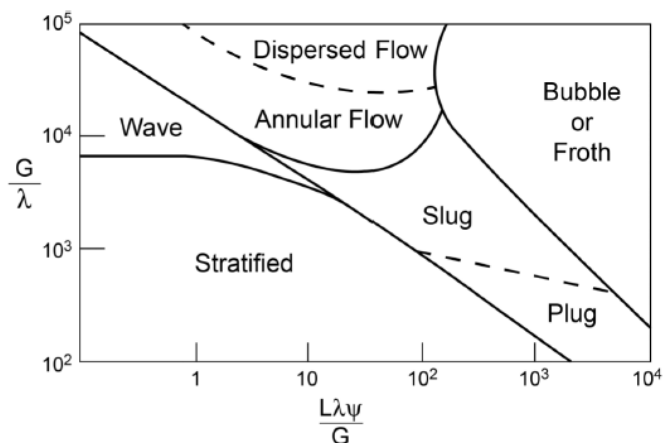


Ilustración 3.4 Mapa de Baker para patrones de flujo a dos fases en tuberías horizontales (Baker, 1954).

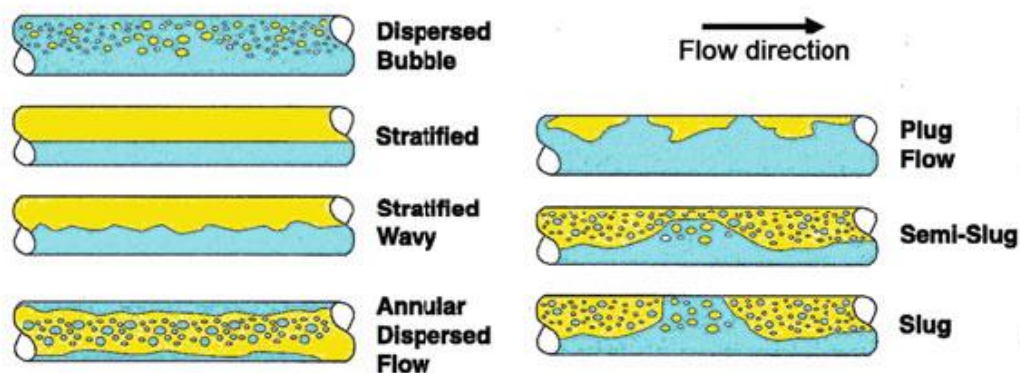


Ilustración 4.4 Patrones o regímenes identificados en el mapa de Baker (Yadigaroglu, 2018).

Después de identificar el patrón del flujo se aplica la correlación correspondiente para calcular otros parámetros del método de Martinelli. A pesar de que se reconoce su inexactitud esta metodología es muy usada, pero la recomendación dada en la literatura es hacer los cálculos en todos los regímenes aplicando un factor de seguridad, y poner en consideración los resultados para definir la situación más esperada (Ludwig, 2001).

Al ser estos sistemas tan complejos, rara vez son resueltos mediante estrategias analíticas y las soluciones numéricas son preferidas en su lugar. Las ecuaciones que describen el comportamiento de estos sistemas pueden dividirse en dos clases: ecuaciones de balance y relaciones de cerradura o constitutivas. Las ecuaciones de balance son las de conservación de masa, momentum y energía aplicadas al flujo multifásico, cuando se hace este tratamiento surgen nuevas variables que indeterminan al sistema de ecuaciones (Morel, 2015).

Con el fin de construir soluciones numéricas útiles es indispensable disponer de un conjunto apropiado de ecuaciones de cerradura, estas son, ecuaciones de estado, ecuaciones mecánicas constitutivas y ecuaciones constitutivas de energía (Kolev, 2012)(Ishii, 2014).

Toda la variedad de situaciones de flujo multifásico es muy compleja y no existe una metodología general para todos los tipos de flujo. Tradicionalmente, el modelado de flujo multifásico en el marco de trabajo de las simulaciones CFD ha tomado tres rutas diferentes (Jayanti, 2018):

- Categoría A: Son casos en los que el principal interés es hallar la ubicación y trayectoria de la interfase. El campo de flujo es usualmente calculado tomando propiamente en cuenta condiciones de frontera cinemáticas y dinámicas en la interfase. El problema de ruptura de presas y chapoteo de tanques llenos, son ejemplos clásicos evaluaciones comparativas. Estos casos son enfrentados con el modelo VOF (Hirt & Nichols, 1982) o el método del conjunto de nivel (Osher & Sethian, 1988).
- Categoría B: Casos en los que una fase es continua mientras que la otra se encuentra de forma dispersa en concentraciones diluidas. En estos casos se espera poca interacción entre las partículas de la fase dispersa, y la interacción entre la fase continua y la fase particulada puede ser evaluada mediante cálculos de trayectoria de partículas. Este enfoque es conocido como Euleriano-Lagrangiano, Euleriano (para la fase continua)-Lagrangiano (para la fase dispersa). Esta aproximación es válida para la combustión de combustibles sólidos y líquidos.
- Categoría C: Casos en los que una fase es continua y otra esta dispersa, pero en altas concentraciones volumétricas. En este caso la aproximación más aceptada es la formulación Euleriana-Euleriana para ambas fases y la inclusión un modelo de “continuo interpenetrado” para considerar la presencia parcial de ambas fases en todos los puntos del dominio computacional.

5.-CFD en Ingeniería Química

Tras la primera revolución industrial, los equipos utilizados en las fábricas eran construidos y diseñados por ingenieros mecánicos y civiles. La industria química del siglo XIX comenzó a emplear químicos para el control y la investigación de los procesos de producción, pero a finales de siglo se advertiría, ya, la necesidad de contar con ingenieros con conocimientos en química y la capacidad de emprender el diseño de plantas químicas, para sustancias que nunca se habían producido en escalas industriales, de manera que estas operasen lo más eficientemente posible. Así nació, en 1887, la carrera de Ingeniería Química, propuesta por George E. Davis en un ciclo de conferencias en Manchester, Inglaterra. (Valiente, 2008)

Los primeros grandes avances en la teoría de la dinámica de fluidos fueron protagonizados, principalmente, por físicos y matemáticos, un puñado de décadas antes de que Davis planteara la creación de una nueva disciplina llamada Ingeniería Química. Por lo que el desarrollo de las ideas fundacionales de la dinámica de fluidos se llevó a cabo sin la participación de los ingenieros químicos.

La introducción de cursos especializados en mecánica de fluidos y en transferencia de masa y energía, a los planes de estudio de ingeniería química, ocurrió en el momento en que se reconoció el hecho de que ciertos procesos físicos y químicos, junto con sus correspondientes principios fundamentales, son compartidos por una extensa diversidad de tecnologías. Un texto precursor, en el que quedó plasmada esta idea, fue publicado en 1923 por Walker, Lewis y McAdams, titulado *Principles of Chemical Engineering*. (Walker et al., 1923).

Una reacción natural, por parte de la comunidad de ingenieros químicos, a esta nueva concepción fue la gradual aparición de la mecánica de fluidos y los fenómenos de transporte (término usado por los ingenieros químicos para referirse a los procesos asociados a la transferencia de masa, momentum y energía) en las bases de la investigación y enseñanza de las operaciones unitarias.

Se vio en el capítulo 2, de este texto, que la falta de herramientas computacionales en las primeras décadas del siglo XX frenó el desarrollo de metodologías que proponían nuevas aproximaciones para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes. Incluso desde la formulación de estas ecuaciones, no se tenía seguridad sobre el significado o la utilidad de las deducciones, el mismo Navier consideraba su trabajo como una hipótesis (Darrigol, 2009), Stokes probablemente murió sin saber que las ecuaciones que él había encontrado, sumado a un grupo de científicos, llevarían su nombre a un lado del de Navier. Una situación similar atravesó la ingeniería química.

Es evidente que la mayoría de las operaciones unitarias se llevan a cabo en equipos de elaboradas geometrías, al mismo tiempo que se aplican combinaciones complejas de procesos que involucran dinámica de fluidos, fenómenos de transporte, reacción química y termodinámica. De tal modo que la disponibilidad de soluciones exactas, de relevancia para algún proceso de interés, era prácticamente inexistente. Esto derivó en que el estudio de los principios teóricos tuviese un impacto menos trascendental que una bien desarrollada

aproximación empírica (situación que prevalece hasta la fecha en una importante cantidad de aplicaciones).

Aun frente a estas dificultades, los ingenieros químicos se han ido involucrando cada vez más en la formulación de modelos matemáticos relativos al movimiento de los fluidos. Una importante contribución se produjo en 1960, con el libro *Transport Phenomena*, escrito por los ingenieros químicos Bird, Stewart, y Lightfoot, este texto ha sido de gran utilidad en la enseñanza de la mecánica de fluidos y los fenómenos de transporte en los cursos de la carrera. (Bird et al., 1960)

Otras significativas aportaciones se han logrado en temas relativos a métodos asintóticos y numéricos para el análisis detallado de correlaciones entre grupos adimensionales, flujos a número de Reynold bajo, flujo de Stokes o de arrastre aplicado a emulsiones, suspensiones y otros materiales particulados, movimiento browniano y fenómenos interfaciales. Recientemente, la escala de los procesos de interés ha decrecido, a tal grado en que en algunas situaciones es necesario tomar en cuenta fuerzas intermoleculares que actúan sobre distancias cortas. Sin olvidar la sofisticación de las herramientas computacionales. (Leal, 2007).

5.1.-Definición de fluido

Se ha hablado del tipo de problemas que aborda la Dinámica de Fluidos Computacional y de sus herramientas, hace falta, en esta obra, establecer la característica principal de los fluidos. La observación casual del entorno lleva a considerar como fluidos a los gases y líquidos, excluyendo de este grupo a la materia sólida, aunque esta distinción es aceptada en muchos ámbitos de la ingeniería, no es ventajosa para la mecánica de fluidos. Es conveniente adoptar una definición formal y más descriptiva de fluido.

La noción permite distinguir entre los fluidos y los sólidos principalmente porque los fluidos toman la forma del recipiente que los envuelve cuando se les confina, mientras que los segundos pueden conservar una figura sosteniéndose sobre su propio bulto de materia. Hasta ahora, en la tesis, se ha ocupado una aproximación macroscópica para describir el movimiento de los fluidos, se considerará un enfoque microscópico por un momento.

Las fuerzas intermoleculares, en el estado sólido, restringen el movimiento libre de las moléculas porque su energía cinética, asociada con la temperatura, no es suficientemente grande para vencer la fuerza de atracción entre moléculas vecinas. En contraste, en los estados líquido y gaseoso la energía cinética de las moléculas permite a estas desplazarse por todo el volumen del material.

Esto deriva en que, aunque no sean análogas sus fuerzas (y esto es importante tenerlo presente), la elasticidad sea una propiedad más relevante para los sólidos y, en cambio, para los fluidos es de mayor trascendencia la viscosidad. Conviene, entonces, hacer la distinción entre los cuerpos rígidos y fluidos por su respuesta ante la aplicación de fuerzas de corte.

Un fluido es toda sustancia que al sufrir la acción de un esfuerzo cortante el bulto de su material desarrolla un gradiente de velocidad (Wilkes, 2005), por el mecanismo de

transporte molecular de momentum. Esto significa que al imponerse sobre un fluido una fuerza de corte externa este se deformará continuamente, mientras que en los sólidos las fuerzas elásticas establecen un equilibrio, balanceando el esfuerzo cortante, siempre que no se rebase el límite elástico del material provocando el cese de la deformación.

La velocidad a la que el fluido se deforma depende, no solo de la magnitud de las fuerzas externas que actúan sobre él, sino que también interviene la viscosidad, esta es la resistencia del fluido a fluir al aplicársele un esfuerzo cortante.

5.2.- Flujo en Operaciones Unitarias

El entendimiento de la mecánica de fluidos es esencial para el IQ puesto que la mayoría de los procesos químicos se llevan a cabo, parcial o totalmente, en fase fluida. Ejemplos abundan en las industrias química, bioquímica, energética, de fermentados, materiales, minera, petrolera, petroquímica, farmacéutica, de plásticos, tratamiento de agua, etc.

Dos buenas razones para hacer énfasis en los fluidos son, en primer lugar, que a condiciones típicas de operación una extensa variedad de materias primas existe ya sea como líquidos o gases, o en su defecto pueden ser transformadas a alguna de estas fases. En segundo lugar, normalmente es mucho más eficiente y económico trabajar con fluidos que con sólidos. Incluso algunas operaciones con sólidos pueden ser realizadas de manera que se asemejan a un fluido, partículas de sólido son transportadas por una corriente fluida, ejemplos pueden presentarse en la industria cementera o en el transporte de partículas de carbón en ductos, en los que se usa agua como el medio agitante y transportador.

Se enlistarán algunos ejemplos sobre operaciones unitarias y situaciones de la ingeniería química en las que el flujo es fundamental para su operación y desempeño.

Bombas y Compresores:

Un fluido puede ser enviado de un lugar a otro por medio de estos equipos que imparten energía al fluido, las bombas a líquidos y los compresores a gases, incrementando su presión y permitiendo así que el fluido avance venciendo la resistencia que opone a su movimiento la tubería y la viscosidad del material transportado.

Flujo en Lechos Empacados:

El flujo a través de lechos empacados ocurre en varias situaciones de la ingeniería química. Ejemplos de este tipo de sistemas son el flujo de gas por un reactor tubular de lecho fijo con partículas de catalizador, y el flujo de agua alrededor de cilindros empacados con resinas de intercambio iónico para el tratamiento de aguas residuales. El flujo de hidrocarburo en un medio poroso, en las formaciones rocosas, es un fenómeno muy relacionado. En todos los casos resulta necesario calcular la caída de presión para determinado caudal, la cual puede ser muy substancial si las partículas son pequeñas.

Filtración:

Los paquetes de filtración son dispositivos diseñados para remover partículas sólidas de una corriente de fluido, frecuentemente líquidos. Esto se logra instalando alguna capa o

pañó en el área transversal del flujo, mediante platos de filtración, o por acción de una fuerza centrífuga que se le aplica al fluido.

Columnas de Destilación:

Estos equipos son grandes cilindros o corazas metálicas que se ocupan para separar mezclas de sustancias aprovechando los diferentes puntos de ebullición que poseen las distintas fracciones en ella, los compuestos más volátiles se concentran en la parte superior de la torre, mientras que los compuestos con menor punto de ebullición en el fondo. En la torre, que está dividida en platos, la mezcla se introduce en los platos intermedios, típicamente debe constar de un rehervidor que evapora los líquidos en el fondo de la columna, una parte de ellos son retirados como colas de destilación, y la otra parte se regresa a alguna etapa a cierta altura cerca del fondo de la torre como vapor. El vapor asciende por los platos o placas de la torre hasta llegar a un condensador, aquí las fracciones ligeras se condensan, una parte se regresa a la parte superior de la torre como reflujo que escurre de nuevo hacia el fondo, y otra parte de la corriente líquida se saca del proceso como producto.

Intercambiadores de calor:

De doble tubo, frecuentemente usados en la industria farmacéutica, de flujo cruzado, para el intercambio de calor en gases, o los más usados en la industria de procesos, de coraza y tubos. Son equipos utilizados para poner en contacto térmico a dos corrientes de proceso, y así calentar o enfriar una cantidad continua de material. Para mejorar la transferencia de calor se instalan mamparas en el lado externo de los tubos, superficies extendidas o aletas, bancos de tubos, múltiples pasos, todas estas medidas solas o en combinación (Valiente, 1988).

Condensadores y Rehervidores:

Los equipos llamados condensadores se ocupan para hacer pasar un vapor o una mezcla de vapores al estado líquido mediante la extracción de calor. Estos aparatos son muy utilizados en las operaciones de destilación, evaporación, refrigeración y licuefacción. Con frecuencia el calentamiento de muchos fluidos se hace mediante vapor de agua, que se condensa al transferir su calor latente. Muchos de los condensadores son del tipo de los cambiadores de haz y envolvente.

En los rehervidores de tipo marmita ocurre la ebullición en la alberca de líquido que inunda al haz de tubos, las fases se separan en el espacio provisto por el domo y el líquido remanente se derrama por el vertedero como producto de fondos en procesos de destilación. Los rehervidores tipo marmita cuentan con un domo para separar los vapores que retornan a la columna (Valiente, 1988).

Flujo en cabezales y separadores:

Los sistemas superficiales de producción de hidrocarburos son, tradicionalmente, competencia de los ingenieros petroleros, pero, en lo que se refiere, al menos, a muchas de las operaciones que intervienen en la parte del proceso de producción en superficie, posterior al cabezal del pozo, los ingenieros químicos son profesionales capaces de lidiar con los problemas que surgen en el sistema de separación, compresión, calentamiento,

vacío, estabilización y deshidratación del crudo, junto con el transporte y acondicionamiento de condensado.

Los productos que se buscan obtener después de que la mezcla de hidrocarburos atraviese los equipos de las instalaciones superficiales son: crudo estabilizado, de mayor cantidad y calidad posible, gas sin problemas de condensación en los ductos de transporte (gas natural) y gas condensado (GLP).

Redes contra incendio:

Los objetivos de un sistema de supresión de incendios son proveer de enfriamiento, para controlar y evitar la propagación de fuego, y proveer la extinción del incendio. Se debe escoger dentro de una variedad de métodos disponibles para apagar un posible conato de incendio, esto acorde al tipo de fuego esperado.

Los sistemas que arrojan agua a la zona en donde se han producido llamas son comunes, esto debido a que el agua es, relativamente, un recurso económico y disponible en grandes cantidades. Posee una alta capacidad para acumular calor, al vaporizarse se expande desplazando enormes volúmenes de oxígeno, limitando, de este modo, el proceso de combustión. Estos sistemas están constituidos por rociadores, tuberías, bombas, válvulas (de diluvio, de aislamiento, etc.), mangueras, boquillas, hidrantes o bocas de incendio, cortinas de agua, etc.

Además del agua, se pueden utilizar otros fluidos como espumas, útiles donde se encuentran grandes cantidades de hidrocarburos, dióxido de carbono, especial para fuegos eléctricos y donde es necesario no dañar equipo ni dejar residuos, agentes químicos secos o húmedos, de agente limpio, etc. (Nolan, 2017)

Flujo en tuberías y accesorios:

El manejo de fluidos es una de las técnicas más antiguas, es posible encontrar grandes civilizaciones de antaño, desde Egipto y Mesopotamia hasta los mayas y aztecas, canales de riego, acueductos, diques y colectores de aguas negras. En siglos recientes se ha perfeccionado la tecnología de transportar a los fluidos en tubos de hierro fundido, y de otros metales, capaces de resistir altas presiones y el contacto con otros materiales diferentes al agua. (Valiente, 2002)

En la actualidad los ingenieros tienen que calcular y diseñar enormes ductos que puedan conducir una gran variedad de fluidos como agua, aire, petróleo, gas natural, incluso materiales como azufre fundido (Baron, Lawrence & King, 1996). Las tuberías de las instalaciones industriales usualmente están integradas por válvulas y accesorios, como codos, Tes, medidores, etc. Evaluar la resistencia al flujo de fluidos es necesario para determinar las características del flujo en un sistema de tuberías completo (Flow of fluids through valves, fittings and pipe, 1982).

5.3.-CFD aplicada en IQ

Con el fin de aumentar la competitividad, las industrias se ven obligadas a enfrentar el gran reto de satisfacer las necesidades de la población sin comprometer el futuro y el equilibrio

de los ecosistemas. Para esto es necesario lograr que los procesos de producción sean más energéticamente eficientes, seguros, y con mayor flexibilidad de operación, al mismo tiempo que se reducen emisiones. La técnica CFD puede ser empleada con este fin para optimizar el diseño de los equipos en los que se llevan a cabo las operaciones unitarias.

Se han hecho estudios para mejorar, por ejemplo, el diseño de intercambiadores de calor. Chamil Abeykoon, en su artículo (Abeykoon, 2020), presenta el diseño y optimización de un intercambiador de calor empleando el solver Fluent de la paquetería comercial de ANSYS. En su trabajo, Abeykoon, se avoca al diseño de un intercambiador de calor de coraza y tubos mediante el método LMTD y posteriormente ocupa el software de CFD para realizar una investigación sobre el rendimiento de distintas configuraciones de intercambiadores variando parámetros de diseño como el número de tubos y mamparas en la coraza.

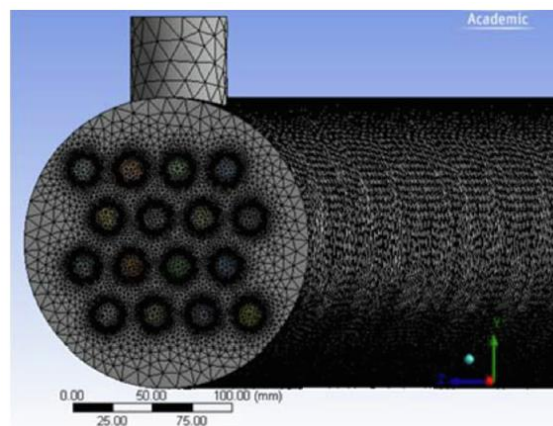


Ilustración 5.1 a) Mallado de la geometría de un intercambiador de 16 tubos.

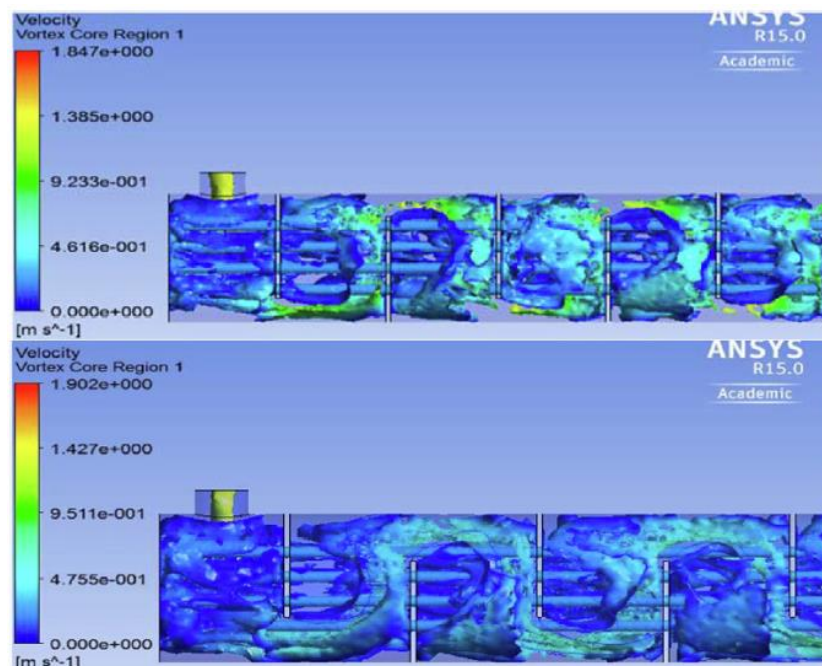


Ilustración 5.1 b) Se muestra la naturaleza de los vórtices provocados por los baffles dentro de la coraza.

En su estudio realizó simulaciones de seis intercambiadores distintos, los resultados permitieron seleccionar aquel que presentó el desempeño ideal, los parámetros de salida se compararon con los generados mediante el método de diferencia de temperatura media logarítmica, encontrando buena similitud entre los valores. El resultado más importante fue la caída de presión, esto debido a que en el diseño era de principal interés optimizar este valor en un mínimo de manera tal que no fuera necesario proveer de mayor energía al fluido que circula por fuera de los tubos para hacerlo atravesar todo el proceso.

Se ha aplicado CFD también a platos en columnas de destilación, tal como lo hizo Galih Bangga, Felicia Novita y Hao-Yee Lee, de la Universidad de Stuttgart, que analizaron mediante diferentes métodos de simulación computacional la destilación reactiva de ácido acético y metanol para producir acetato de metilo y agua. Este trabajo lo hicieron con el especial propósito de complementar los resultados computados por dos distintos programas de simulación de procesos, Aspen Plus V9 y ANSYS Fluent 17.1. El primero es un simulador de procesos y el segundo emplea el enfoque de la Dinámica de Fluidos Computacional para predecir el comportamiento de sistemas fluidos. (Bangga et al., 2019)

El procedimiento que siguieron constó de realizar la simulación del proceso en el software Aspen Plus V9 para generar datos de composición en las etapas de la torre, estos datos posteriormente se emplearon como información de entrada para la simulación CFD, en la cual se analizó el comportamiento de un solo plato de la columna, encontrando que los resultados obtenidos en ambos programas constituían una predicción más completa de los fenómenos de transporte que ocurren al interior del equipo de destilación.

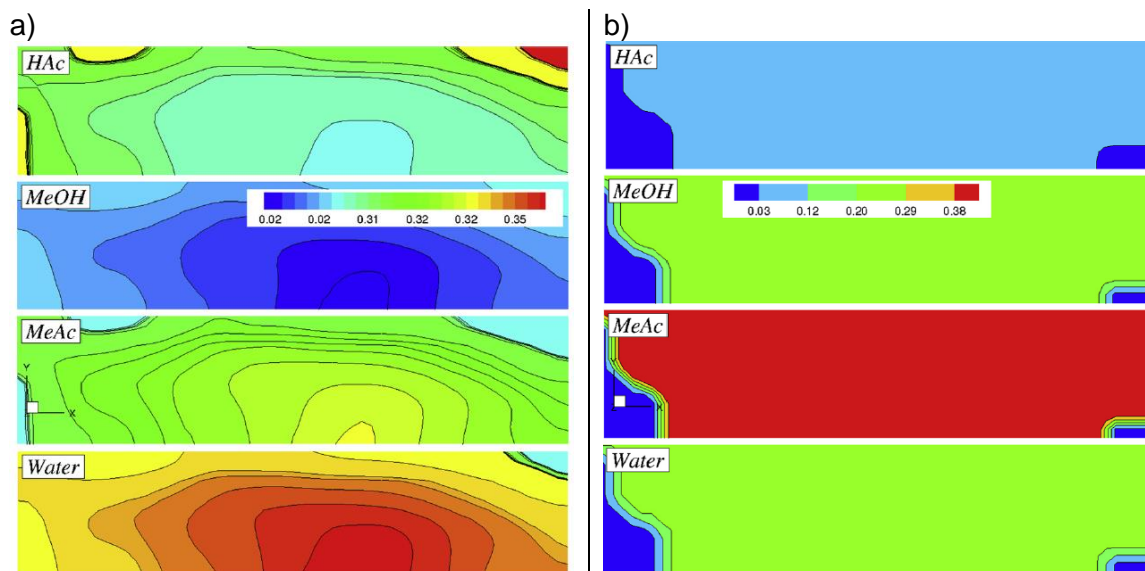


Ilustración 5.2 a) Distribución de los distintos componentes químicos en el plato, o etapa de destilación, en términos de fracción molar para la fase líquida. b) Resultados CFD de la fracción molar de la mezcla en la fase vapor para cada componente.

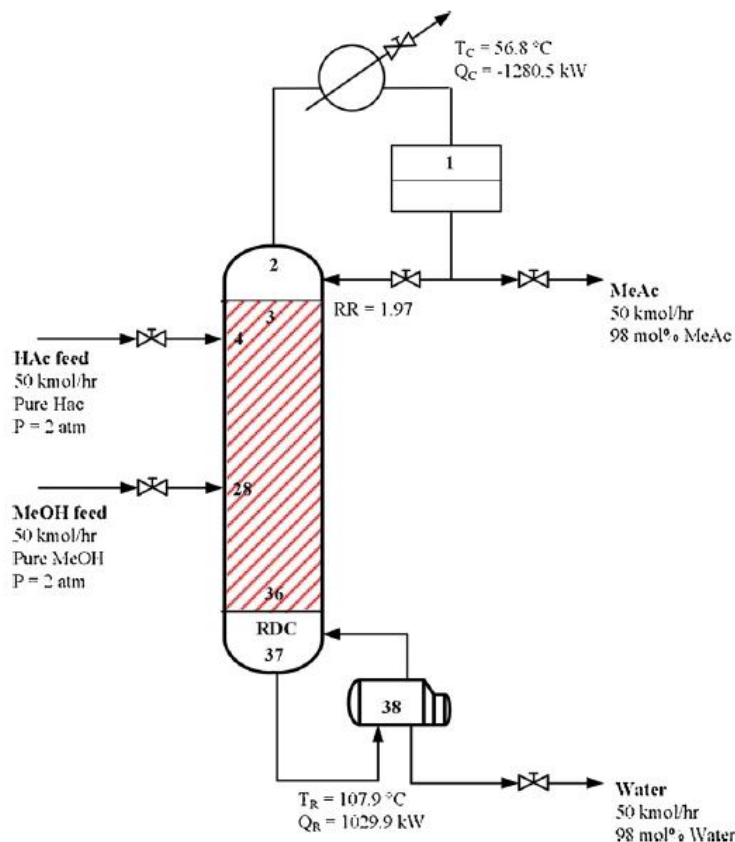


Ilustración 5.3 Diagrama del proceso de destilación reactiva estudiado por Bangga, ácido acético y metanol son alimentados en las etapas 4 y 28, de la torre, mientras que la fracción ligera, acetato de metilo, es retirado por el domo de la torre y por el fondo se obtiene agua.

La simulación CFD fue llevada a cabo en la etapa 25 de la columna tomando como input la información del perfil de fracción molar que arrojó el software de procesos Aspen. Lo más valioso que resaltan los investigadores de este trabajo es que se pudo observar que la velocidad superficial de los fluidos dentro del equipo tiene un fuerte impacto en la producción de acetato de metilo, además, pudieron encontrar un valor óptimo para su operación gracias a la aplicación del estudio hecho con Dinámica de Fluidos Computacional.

La técnica CFD es capaz de abordar sistemas multifásicos de forma altamente satisfactoria, como el que se ha visto anteriormente en el caso de un flujo bifásico de líquido y vapor. Se pueden encontrar en la literatura bastantes estudios para revisar el comportamiento de corrientes de gas granuladas (es decir, una mezcla sólido-gas) en procesos de separación.

Una situación, que se presenta con frecuencia, en la ingeniería química es el aprovechamiento de una caída de presión en un recipiente o tanque para separar componentes volátiles de una corriente líquida de proceso, a esta operación se le conoce en la disciplina como tanque *flash*. Los hay también para separar tres fases, este tipo de recipientes son comunes de encontrar como primer elemento de las instalaciones superficiales, por el que deberá atravesar la corriente de hidrocarburos que sale de un pozo petrolero. Su finalidad es separar exitosamente gas, aceite y agua.

Se debe procurar su diseño para que los productos obtenidos sean estables. Es necesario obtener aceite que no desprenda vapores, ya que, de lo contrario, la expansión de volumen dificulta peligrosamente su almacenamiento y transporte. Así mismo, el gas no puede ser susceptible de condensarse, pues la presencia de gotas en una corriente de alimentación a un compresor puede fácilmente arruinar estos costosos aparatos.

Dentro de estos equipos, se instala un dispositivo para disminuir el momentum de la corriente en la entrada del separador, reduciendo la alta velocidad de la mezcla. El gas se separa del líquido, y este cae sobre platos perforados instalados con la finalidad de estabilizar el hidrocarburo, formando dos capas distintas de aceite y agua. Una mampara o placa de vertedero se instala al otro extremo del separador, entre la salida de aceite y la salida de agua, para separar a las dos fases líquidas.

El enfoque utilizado para el diseño de separadores trifásicos se basa en la fórmula semiempírica obtenida de la ley de Stokes, sobre la fuerza de fricción experimentada por objetos esféricos moviéndose en el seno de un fluido viscoso (Arnold & Stewart, 2008). A pesar de que este enfoque brinda estrategias útiles para el diseño, información crucial para el desempeño del separador no es considerada. En la entrada del separador se pueden presentar diferentes regímenes de flujo y es indispensable considerar realísticamente el tamaño de las gotas y su distribución a lo largo del equipo para evaluar los efectos ocasionados por coalescencia.

Con el fin de evaluar el desempeño y comportamiento del flujo en un proceso de separación de este tipo, N. Kharoua, L.Khezzar y H. Saadawi realizaron una simulación CFD con la geometría de un separador de la compañía petrolera Abu Dhabi Company for Onshore Oil Operations (Kharoua, Khezzar & Saadawi, 2013).

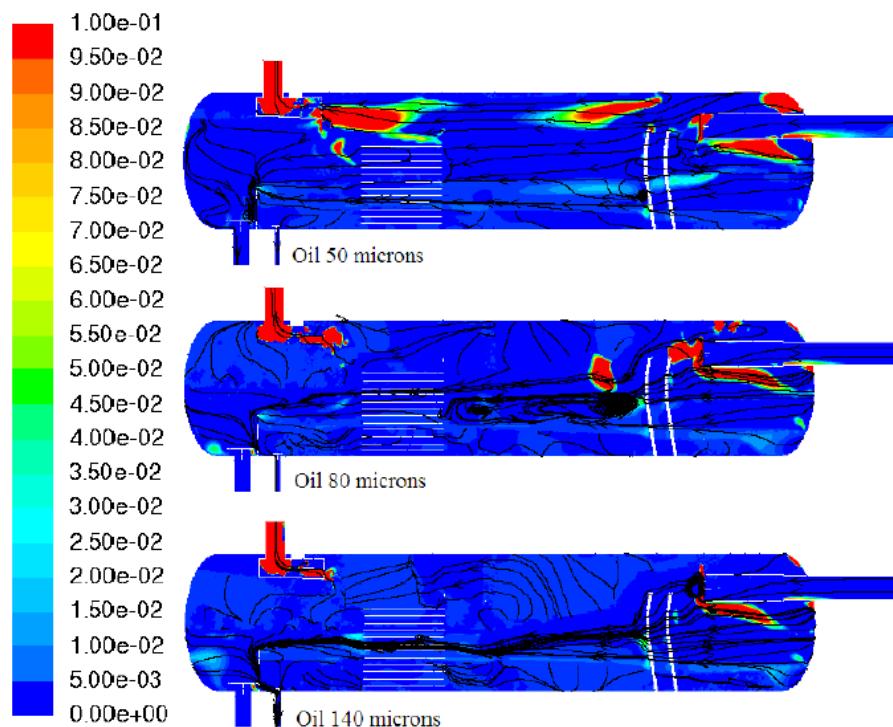


Ilustración 5.4 Distribución de velocidad en z del aceite (m/s).

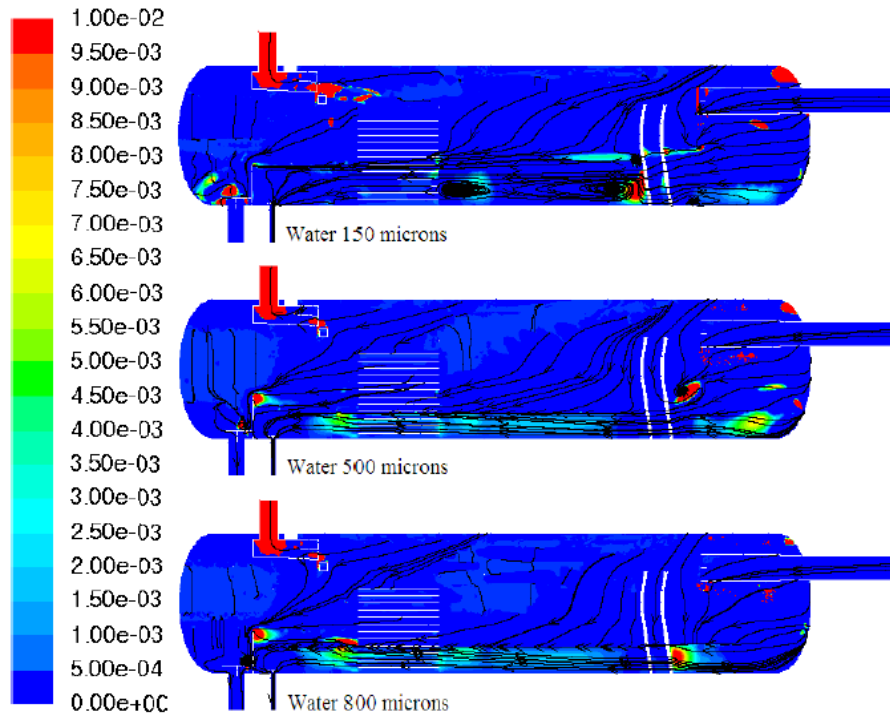


Ilustración 5.5 Distribución de velocidad en z del agua (m/s).

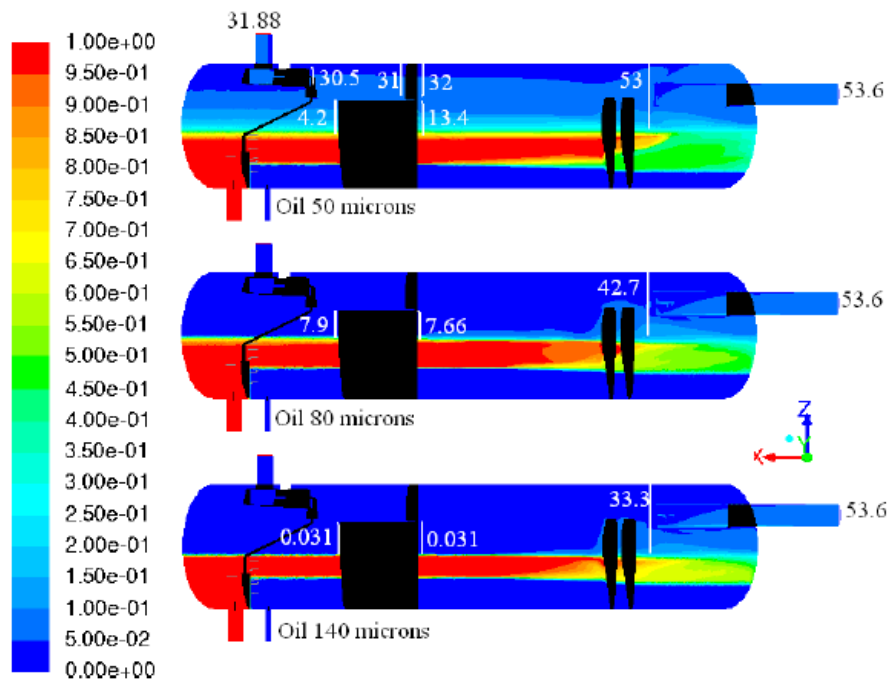


Ilustración 5.6 Contornos de la fracción de volumen de aceite.

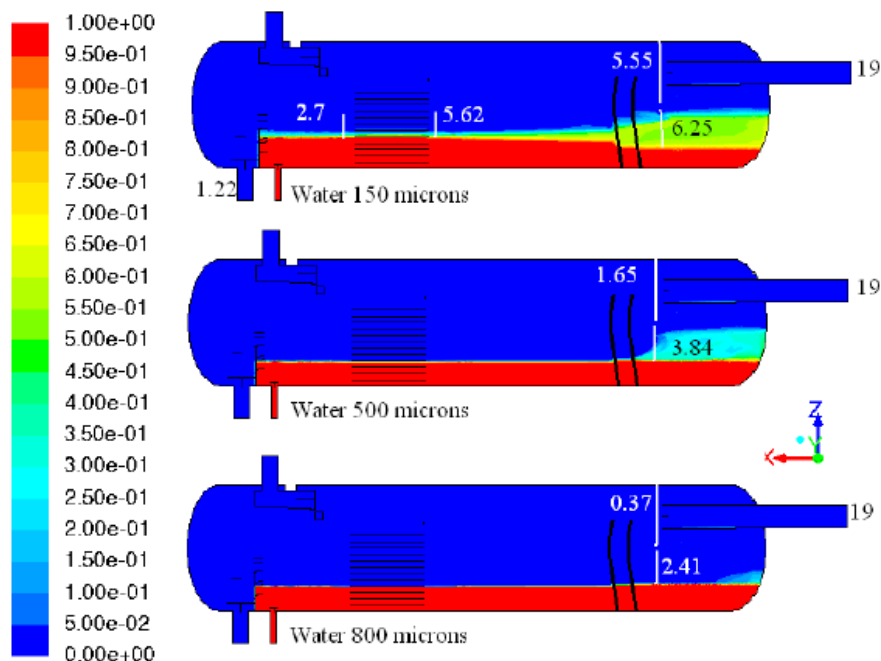


Ilustración 5.7 Contornos de fracción de volumen de agua.

El estudio CFD, bajo el enfoque Euleriano-Euleriano, de los separadores permitió confirmar el hecho de que el dispositivo reductor de velocidad, en la entrada del taque, juega un papel fundamental en iniciar la coalescencia. Además de resaltar la importancia de la distribución de tamaños de gota para predecir con precisión el desempeño del separador y el comportamiento del flujo multifásico al interior del recipiente.

Sakura Ganegama y Andrew Leung, de la Universidad de la Ciudad de Hong Kong, realizaron el modelado CFD de un ciclón (Ganegama & Leung, 2015), que son equipos utilizados con el fin de remover componentes suspendidos de una corriente generalmente gaseosa aprovechando una fuerza centrífuga para retirar las partículas de mayor peso y purificar la corriente gaseosa. En su trabajo se enfocaron en probar el desempeño de diferentes geometrías para el colector de polvos a la salida del equipo, esto lo lograron utilizando el solver CFX, también de la paquetería comercial de ANSYS.

Algo particularmente interesante de este estudio es que se compararon parámetros del desempeño del equipo obtenidos experimentalmente con aquellos resultados generados por la simulación numérica. Para modelar el flujo en el ciclón se empleó el método Large Eddy Simulation LES que representa de manera adecuada y computacionalmente económica la turbulencia del flujo, junto con el modelo Standard Smagorinsky para el cálculo de esfuerzos cortantes, generados por vórtices o remolinos, más pequeños que la escala de la malla empleada para el problema.

Estas herramientas sirven para modelar realísticamente el flujo turbulento puesto que los remolinos que se generan en estos sistemas tienen una influencia gobernante sobre detalles relevantes del desarrollo del flujo, como la distribución de velocidades o distribución de presión en la región de flujo y cerca de las fronteras, por lo que es información valiosa para el diseño mecánico de los equipos. (Mallik et al., 2020) (Rodi et al., 2013)

El análisis hecho por Ganegama y Leung dejó ver que el cambio de geometría en la salida del ciclón provoca un cambio importante en la trayectoria de las partículas que se buscan remover, por lo que la eficiencia de recolección debe estar fuertemente influenciada por la forma geométrica de esta parte del equipo.

En la evaluación de la caída de presión las simulaciones de CFD sobreestimaron los valores obtenidos experimentalmente, esto debido a que algunas consideraciones respecto a la fase sólida fueron hechas para simplificar el modelo utilizado, ignorando los efectos de reducción de turbulencia por efecto de los polvos, amontonamiento de partículas y la mayor fricción que se da en las paredes.

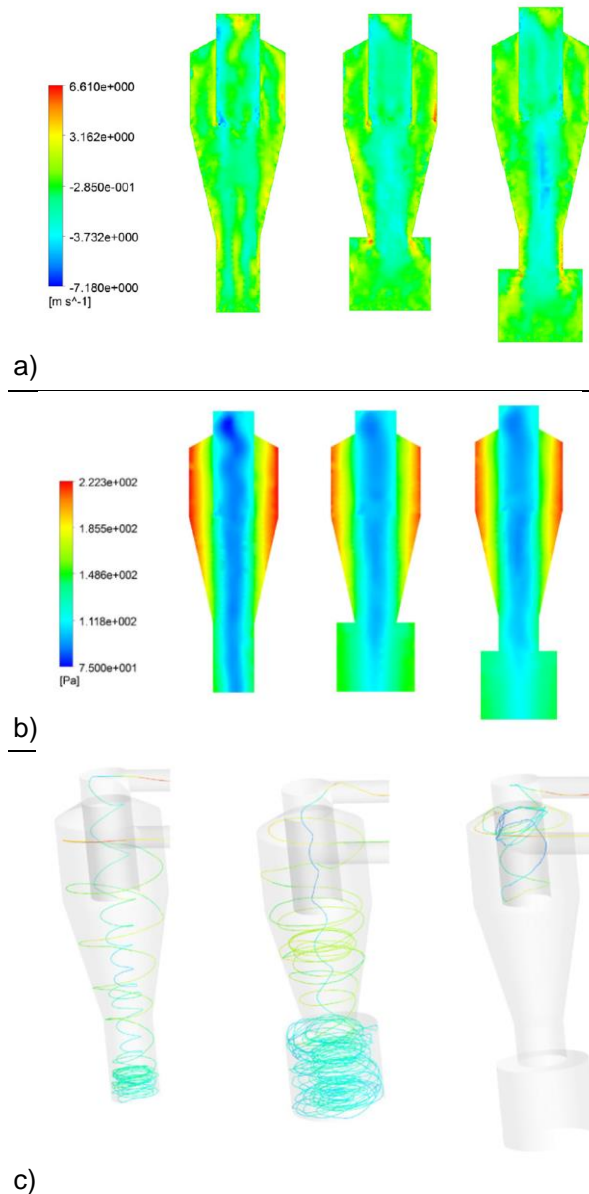


Ilustración 5.8 Resultados CFD para diferentes geometrías de colector de polvos a la salida del ciclón. a) Contorno de velocidad axial en dirección eje vertical del separador. b) Contorno de Presión dentro del ciclón. c) Trayectoria de partículas de polvo a lo largo del equipo.

Durante un curso introductorio a ANSYS fluent & mechanical, impartido en la Facultad de Química por personal de grupo SSC en coordinación con SIQMA, en el cual participó el autor de esta tesis, se generó una simulación CFD, como caso de estudio o tutorial, del flujo de agua alrededor de la compuerta de una válvula cerca de un codo, con la conexión de otra corriente a diferente temperatura. Se revisó el procedimiento para habilitar, en el solver, los modelos de energía para obtener el perfil de temperaturas en la mezcla de las corrientes. Se generaron los perfiles de velocidad, temperatura y presión.

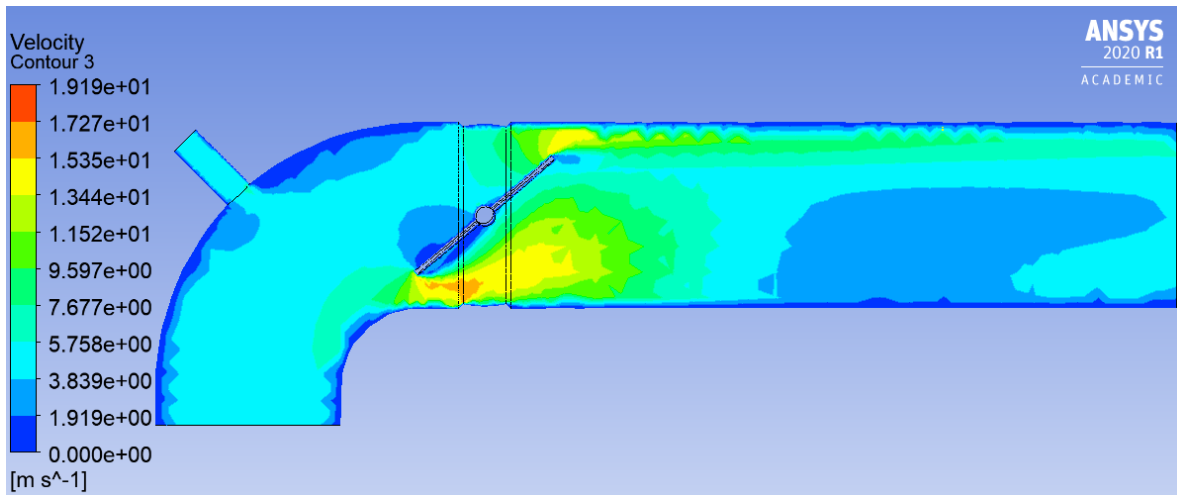


Ilustración 5.9 a) Contorno de velocidad alrededor de una válvula de compuerta.

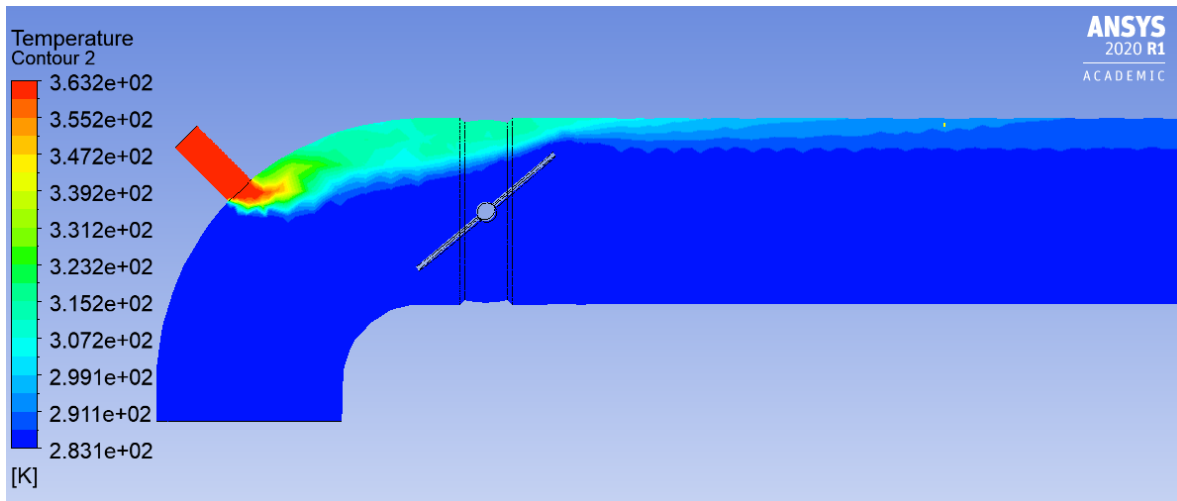


Ilustración 5.9 b) Contorno de temperatura en la mezcla de dos corrientes a diferente temperatura.

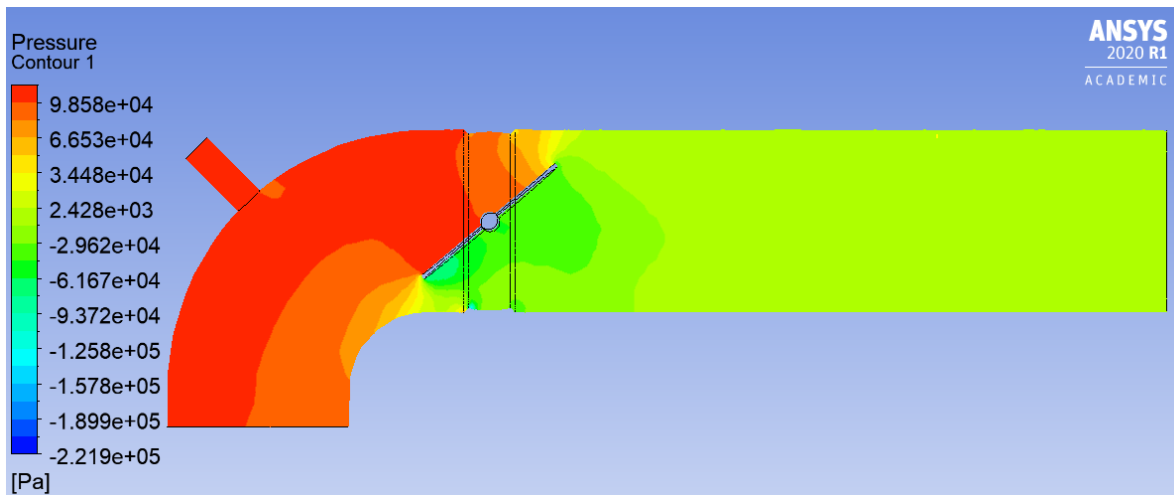


Ilustración 5.9 c) Contorno de presión alrededor de una válvula de compuerta.

La información generada en la simulación CFD permitió evaluar los esfuerzos sufridos por los componentes de la tubería, y, con estos valores, se puede producir un estudio para explorar la deformación en la estructura de los accesorios. ANSYS ofrece módulos para crear este tipo de simulaciones. Aquí, se presentan imágenes de la simulación generada en las clases del curso, anteriormente mencionado, con el fin de ilustrar el potencial de exploración que brinda la Dinámica de Fluidos Computacional.

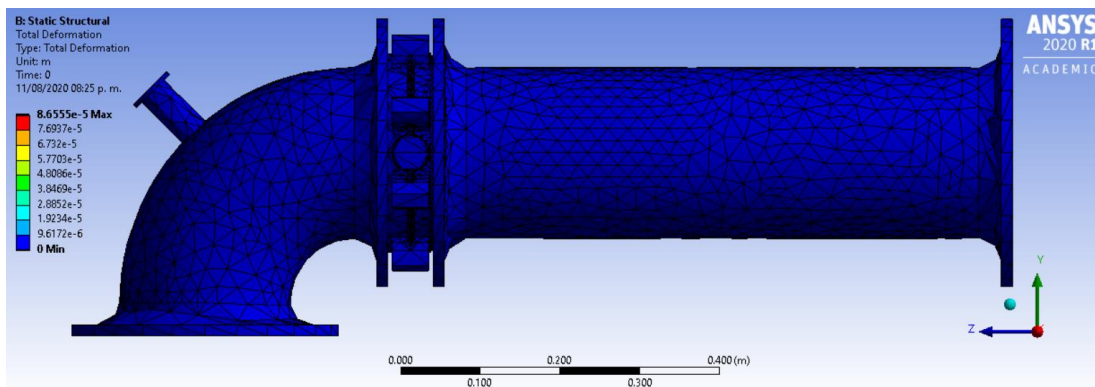


Ilustración 5.10 a) Deformación de la tubería en el tiempo inicial.

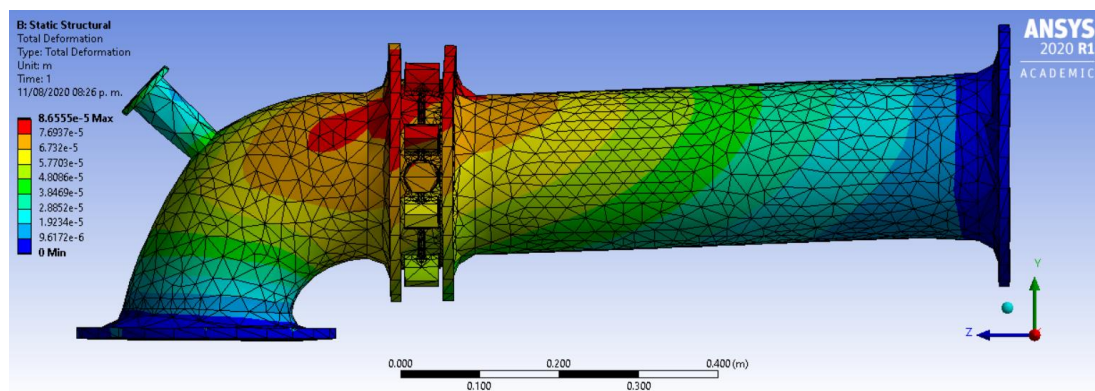


Ilustración 5.10 b) Deformación de la tubería con el transcurrir del tiempo.

Los gobiernos, con frecuencia, imponen legislaciones especificando requerimientos mínimos de seguridad con relación a sistemas de desfogue de procesos y plantas de vapor. En casi todas las instancias, al menos en parte, la referencia es el código ASME para calderas y recipientes a presión, sección VIII, División 1 (recipientes a presión) y/o División 2, sección VII, reglas recomendadas para el mantenimiento de calderas. El código ASME requiere que todos los tanques a presión sean protegidos con un dispositivo de desfogue que prevenga la presión al interior de elevarse más allá del 10% arriba de la presión máxima permisible de trabajo (Ludwig, 2001).

Las válvulas de desfogue son diseñadas y usadas para abrirse cuando sea necesario liberar presión en exceso y cerrar para interrumpir el flujo una vez que las condiciones de operación se hayan restablecido. En la Universidad de Newcastle, Inglaterra, Song, junto con otros investigadores, hicieron un estudio numérico para investigar las características de la hidrodinámica de una válvula de desfogue. Usaron el código CFX para incorporar una malla dinámica, múltiples dominios y el movimiento del pistón de la válvula.

Incorporando geometrías precisas del tanque y de la válvula, el estudio CFD les permitió investigar las características fluidas y dinámicas de la válvula. Proponen que el modelo desarrollado tiene gran potencial de asistir a los ingenieros en el diseño preliminar de este y otro tipo de válvulas, pues lograron determinar la respuesta de la válvula al proceso de apertura y cierre, situación que es difícil, si no imposible, de observar experimentalmente (Song et al., 2014).

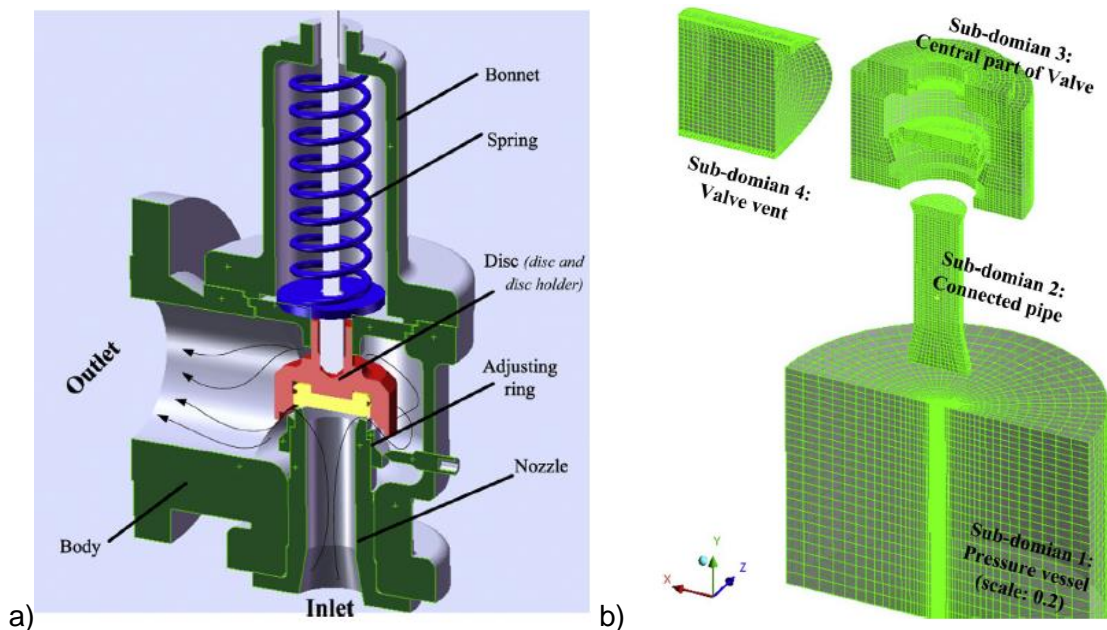


Ilustración 5.11 a) Geometría de la válvula estudiada por Song et al. b) Mallado del tanque y la región de la válvula.

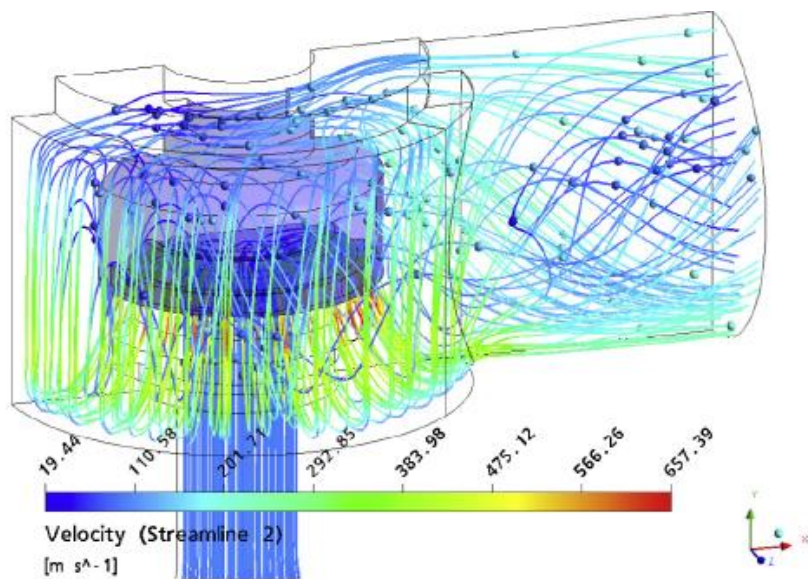


Ilustración 5.12 Líneas de corriente en la válvula.

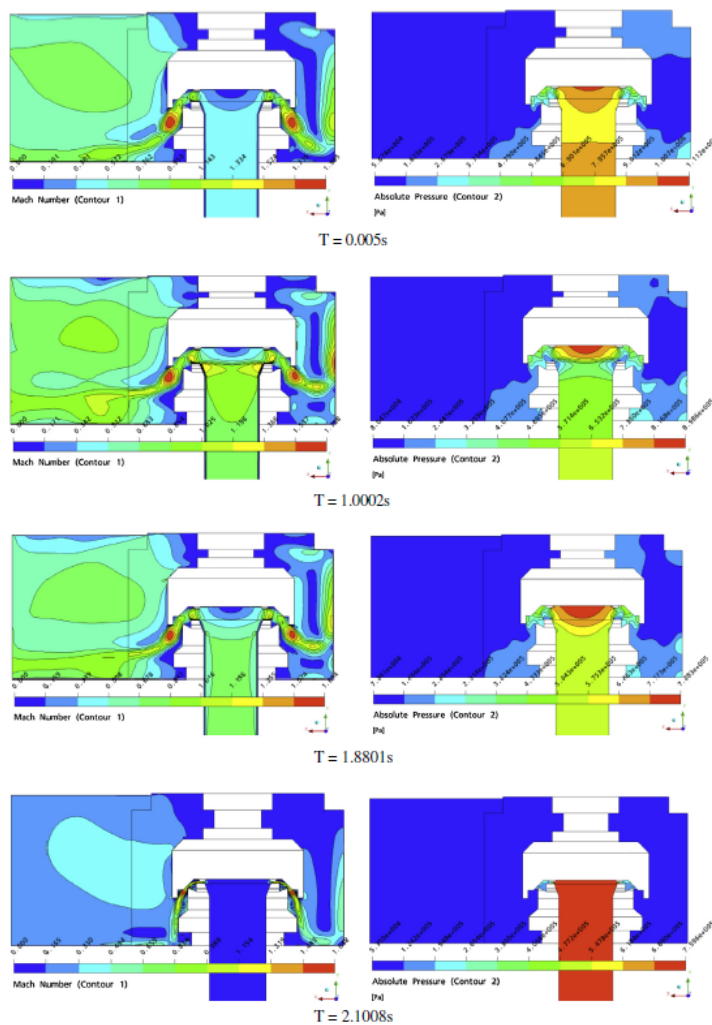


Ilustración 5.13 Contornos de numero de Mach (izquierda) y contornos de presión absoluta (derecha).

Debido a que el flujo es una situación recurrente en la gran mayoría, si no es que, en la totalidad, de los procesos que aborda la Ingeniería Química es que la Dinámica de Fluidos Computacional es susceptible de emplearse en una amplia variedad de aplicaciones de esta rama de la ingeniería. Hay que tener siempre presente que esto es posible solamente cuando existe un marco teórico que permita implementar en la simulación el efecto de los fenómenos que se quieren estudiar.

Solamente con expresiones matemáticas que representen adecuadamente la física del sistema y con un código que compute eficientemente las operaciones necesarias para encontrar la solución numérica se pueden generar simulaciones próximas a la realidad. En la medida que estas condiciones se cumplan en un trabajo de simulación numérica se podrá hacer una mejor predicción del comportamiento del sistema y, por lo tanto, lograr diseñar equipos que provoquen un menor impacto ambiental al asegurar que estos operen de la manera más eficiente posible.

Si bien la Dinámica de Fluidos Computacional es una herramienta extraordinariamente útil para darnos una idea bastante precisa de lo que ocurre al interior de los equipos y con esta información realizar ingeniería de suprema calidad, nunca será capaz de reproducir exactamente la realidad, quizá ni si quiera la que es capaz de percibir un ser humano.

5.4.-CFD aplicada en ingeniería de reactores

El diseño de reactores químicos en los que se llevan a cabo las transformaciones de compuestos químicos en otros es un área de particular dominio del ingeniero químico. Estos procesos, ya sean realizados por lotes o de manera continua, se dan en un medio fluido, incluso en los casos en los que la reacción se da sobre la superficie de un catalizador sólido. El transporte de masa hasta el área reactiva es responsabilidad de un flujo que acarrea los compuestos hasta ahí. La convección de calor es de crucial importancia para proveer de energía necesaria a la reacción y también para evitar el aumento peligroso de temperatura.

El uso de CFD para incursionar en el estudio de reactores se ha extendido ampliamente a lo largo de las últimas décadas y es posible encontrar en la literatura una enorme cantidad de trabajos que se dedican a estudiar estos equipos. Se puede encontrar también un gran número de configuraciones diferentes de flujo para hacer entrar en contacto las diferentes corrientes de proceso. Desde lo que se puede conceptualizar como un recipiente sencillo en el que se vierten los reactivos hasta que se convierten en productos y son extraídos en un reactor por lotes, hasta un reactor de lecho fluidizado en el que distintas fases intervienen en la reacción y partículas sólidas (pellets impregnados con catalizador) se encuentran circulando dentro del equipo sin ser expulsadas. Se hablará puntualmente de un proceso reactivo de biorefinamiento para presentar una introducción de la aplicación de CFD a la Ingeniería de Reacción.

Las biorrefinerías se presentan como aliadas para alcanzar la meta de disminuir la dependencia del crudo y contribuir a cumplir con los objetivos de la agenda por el desarrollo sostenible de la ONU. En estas, diferentes tipos de biomasa es transformada en un amplio espectro de productos y energía. La biomasa puede proceder de una fuente forestal, de agricultura, acuicultura y residuos industriales y domésticos, incluyendo madera, cultivos

agrícolas, residuos orgánicos (de animales y plantas), residuos forestales y biomasa acuática (Pandey, Höfer, Larroche, Taherzadeh & Nampoothiri, 2015).

Un ejemplo de los procesos que pueden ocurrir en una biorrefinería es el procesamiento de biomasa para la obtención de aceite vegetal como combustible, pero el uso de aceite vegetal directamente arruina los motores al ocurrir polimerización y formación de depósitos de carbono en motores de inyección directa (Randall, 1985). Una alternativa es la producción de biodiesel mediante una reacción de transesterificación de aceites vegetales con metanol, pero la disponibilidad de metanol y su incompatibilidad con motores de gasolina representan grandes desventajas para su uso extendido (Leng, Mohamed & Bhatia, 1999).

Recientemente se ha venido empleando la tecnología de hidrotratamiento HDT (que se utiliza en las refinerías de petróleo para remover componentes como nitrógeno, azufre, anillos aromáticos y metales pesados) para convertir materia prima lipídica, como triglicéridos que componen aceites vegetales, en combustibles, los dos productos principales son un combustible líquido, con propiedades similares al Diesel del petróleo, y propano, este último en fase gaseosa (Guzman, Torres, Prada & Nuñez, 2010).

El hidrotratamiento comúnmente se lleva a cabo en reactores del tipo Trickle Bed Reactor (TBR) o de lecho de goteo, este es un reactor heterogéneo en el que tres fases distintas entran en contacto para que se produzca la reacción. Consisten en una columna empacada por la cual fluyen gas y líquido de manera descendente en un medio poroso, como se muestra en la ilustración 5.14. En el caso del hidrotratamiento de aceites vegetales estos se definen como la fase líquida, hidrógeno como fase gaseosa y el catalizador, generalmente CoMo o NiMo/Al₂O₃, la fase sólida.

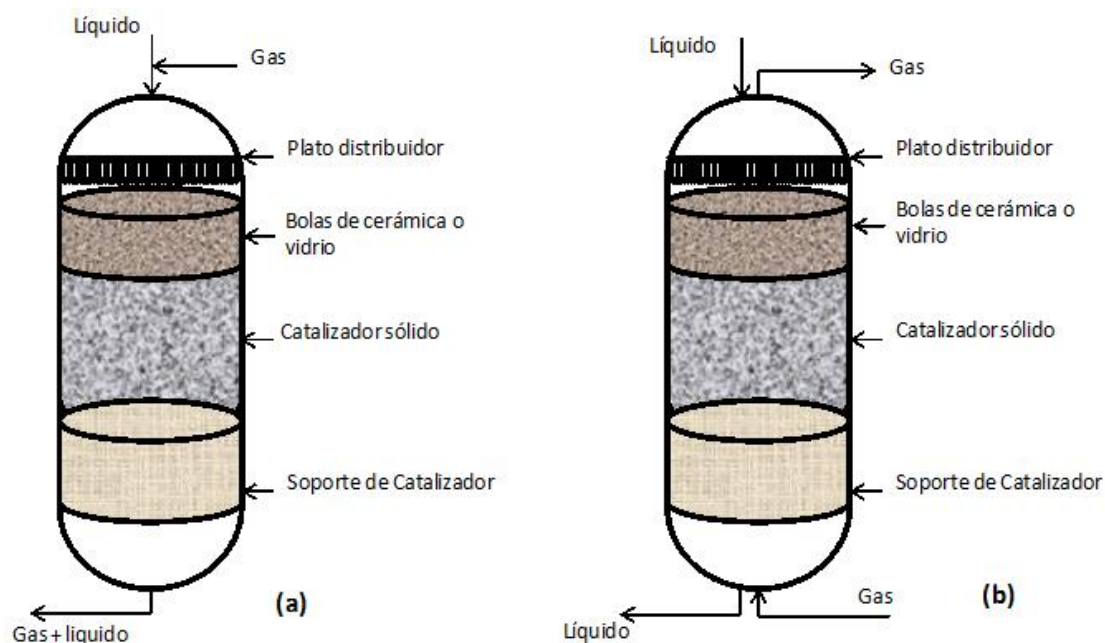


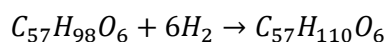
Ilustración 5.14 Reactores trickle bed, en la figura (a) se muestra un reactor en flujo cocorriente, en el caso (b) el gas fluye en contracorriente al líquido (9).

La reacción de hidrodeoxigenación HDO es fuertemente exotérmica y, por lo tanto, es de particular interés obtener información del perfil de temperatura del reactor para recomendar

estrategias para el diseño de reactor y formas de remover el calor de reacción. Así mismo, un entendimiento fundamental de la hidrodinámica del flujo en el reactor es indispensable para su diseño, escalamiento y buen desempeño. Por ejemplo, el gradiente de presión se necesita para evaluar la disipación de energía mecánica debido al flujo bifásico a través del lecho empacado, se necesita también para dimensionar el equipo necesario para bombeo y compresión, y se usa para correlaciones que describen la transferencia de masa entre las fases (Mitra, 2011).

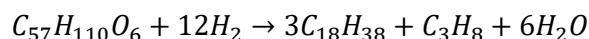
El hidrotratamiento se lleva a cabo con la finalidad de remover el contenido de oxígeno de las moléculas de triglicéridos presentes en aceites vegetales y producir hidrocarburos que son más compatibles con combustibles fósiles. Dentro de los componentes del aceite vegetal se encuentran la tripalmitina, trioleína, trilinoleína y triestearina, en mayor o menor proporción dependiendo de la fuente. Durante el hidrotratamiento ocurren reacciones de hidrodeoxigenación e hidrodecarboxilación, las cuales producen heptadecano, octadecano y propano ($C_{17}H_{38}$, $C_{18}H_{38}$, C_3H_8), además de agua y dióxido de carbono como productos secundarios. Adicionalmente, se puede dar la descarboxilación, pero esta se presenta en menor proporción. Las reacciones que se ocurren son las siguientes:

- Hidrogenación

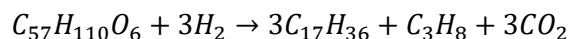


Se hidrogenan los dobles enlaces que poseen los triglicéridos insaturados, en la reacción anterior trilinoleína $C_{57}H_{98}O_6$ es saturada con átomos de hidrógeno para romper los dobles enlaces entre carbonos, el triglicérido obtenido, susceptible de producir alcanos, es la triestearina $C_{57}H_{110}O_6$.

- Hidrodeoxigenación



- Hidrodecarboxilación



Mediante dos mecanismos de reacción, hidrodeoxigenación e hidrodecarboxilación, los triglicéridos saturados se rompen en moléculas más pequeñas, produciendo alcanos de alto valor industrial.

Cuando los reactantes líquido y gas fluyen sobre las partículas del catalizador ocurren interacciones complejas entre las fases fluidas y la fase sólida estacionaria, estas interacciones provocan que se puedan presentar diferentes patrones de flujo. Los principales factores que definen el tipo de flujo que se presenta son la densidad del empaque, el tamaño de partícula, velocidad de gas y líquido y propiedades físicas de las fases fluidas (Ranade, Chaudhari & Gunjal, 2011).

A valores de número de Reynolds bajos, se infiere un régimen trickle flow o de goteo (Ilustración 5.15). En este tipo de flujo el líquido fluye en forma de película sobre las partículas de

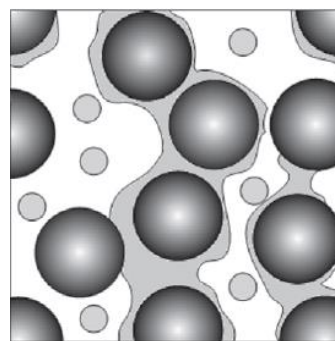


Ilustración 5.15 Representación del régimen trickle flow (Ranade et al., 2011)

catalizador. Esto se da porque a bajas velocidades del líquido, las fuerzas inerciales son débiles comparadas con las fuerzas superficiales locales y el esparcimiento del líquido es principalmente controlado por presión capilar.

Un conocimiento detallado sobre la naturaleza del flujo multifásico y los complejos mecanismos que lo gobiernan hace falta para deducir modelos útiles en el diseño de reactores de lecho de goteo, las correlaciones existentes aún son imprecisas, comúnmente este tipo de reactores se diseñan construyendo una planta piloto y posteriormente escalando, es por esta razón que la técnica CFD brinda la posibilidad de realizar una aproximación económicamente rentable.

El modelo euleriano multifásico en ANSYS fluent permite el modelado de múltiples fases separadas que interactúan entre sí. Las fases pueden ser líquidas, gaseosas o sólidas en casi cualquier combinación. En este enfoque las diferentes fases son tratadas matemáticamente como un continuo interpenetrado, pero dado que el volumen de una fase no puede ser ocupado por otra fase, el concepto de fracción de volumen es introducido para cada fase. Las fracciones de volumen se asumen como funciones continuas en el espacio y tiempo, su suma siempre es 1.

Para representar la interacción entre las fases se ha empleado en diferentes estudios el modelo desarrollado por Attou y Ferschneider (Attou & Ferschneider, 1999), sin embargo, también es posible ocupar modelos más simples ya cargados en ANSYS como Schiller-Naumann o Gidaspow, ya que la implementación de las ecuaciones de Attou y Ferschneider se hace con ayuda de UDF (User Defined Functions), cuyo manejo representa un grado más de complejidad en el manejo del software.

El modelo de Attou y Ferschneider modifica directamente la expresión del tensor de esfuerzos en la ecuación de momentum, esto tras hacer un balance de masa y otro de fuerzas para cada fase, así como una expresión para el gradiente de presión capilar deducida de un balance de momentum aplicado en la interfase gas-líquido, este es un modelo que modifica las ecuaciones de Navier-Stokes específicamente para representar un reactor TBR. Mientras que el modelo Schiller-Naumann y Gidaspow son correlaciones para calcular el intercambio de momentum mediante un coeficiente de arrastre e incorporarlo en un término de generación en la ecuación de conservación de cada fase.

César Mendoza, de la Universidad Nacional de Colombia, en su tesis de maestría desarrolló una simulación para estudiar la transferencia de calor en un reactor de hidrotreatmento de aceites vegetales. En su trabajo empleo cinéticas de reacción globales, estas son expresiones que toman en cuenta los efectos de resistencia a la transferencia de masa, adsorción en la superficie del catalizador, reacción química, desorción etc (Mendoza, 2012). Las cinéticas de reacciones heterogéneas suelen describirse satisfactoriamente mediante una expresión del tipo Langmuir-Hinshelwood, pero para la determinación de cinéticas de este tipo requiere encontrar el valor de coeficientes complicados de obtener.

Para lidiar con esta dificultad los investigadores suelen, con la condición de que sea impuesto un exceso de hidrógeno, simplemente aplicar un modelo del tipo de la ley de velocidad de reacción para ajustar los datos experimentales y obtener parámetros cinéticos (Tirado, Ancheyta & Trejo, 2018). Hay que tener presente que la ley de velocidad de reacción es poco confiable para ser implementada fuera del rango experimental en que

fueron determinados los parámetros cinéticos (energía de activación y factor preexponencial). (Attanatho, 2012)

Mendoza, en su tesis, aplica un balance de moles del éster a hidrotrotar a un volumen de control de aceite, encontrando la siguiente relación matemática:

$$\frac{dF}{dV_{ac}} = r_s$$

Donde F es el flujo molar del éster, definido por $F = F_0(1 - X)$, siendo F_0 el flujo molar inicial y X la conversión de la reacción. Consideró la cinética global experimentada por Sebos para evaluar r_s (Sebos et al, 2009). Después de hacer un tratamiento matemático, considerando un factor de volumen de 0.033 para el aceite de palma, respecto al volumen total del reactor, encontró que la ecuación necesaria para representar la reacción química en el lecho empacado es:

$$\ln(1 - X) = -0.033 \frac{\pi D^2 k_{HDO}}{4 F_0} C_{est,0} Z_{reactor}$$

Esta ecuación, junto con una similar para cada especie reactiva, fueron implementadas mediante una UDF en el software ANSYS Fluent que añade esta expresión en un término de generación/consumo en la ecuación balance de masa de cada especie.

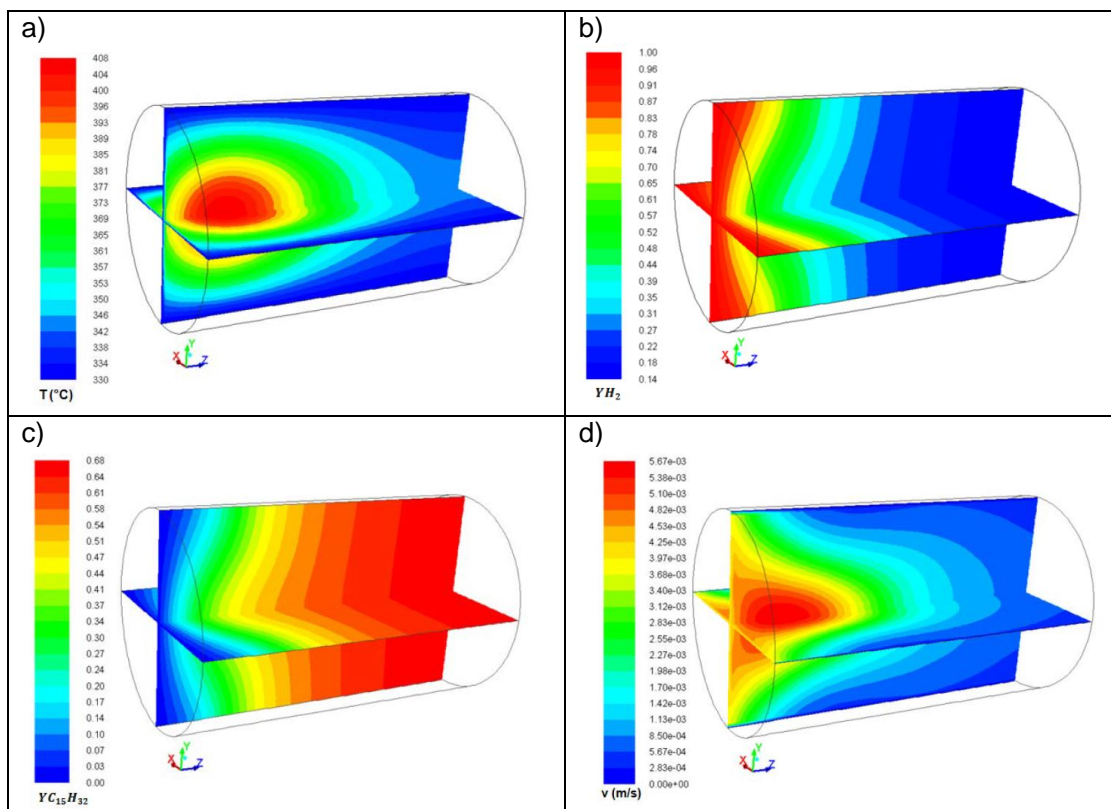


Ilustración 5.16 Resultados de la simulación CFD de César Mendoza para un reactor de hidrotrotamiento de aceites vegetales (Mendoza, 2012). a) Contorno de temperatura dentro del reactor. b) Contorno de fracción masa del gas hidrógeno. c) Fracción molar del alcano C15 producido en la reacción. d) Contorno de velocidad.

Hay tres modelos implementados en Ansys Fluent para simular flujos multifásicos bajo el enfoque euleriano-euleriano. Estos son los modelos de Volumen de Fluido (Volume of Fluid, VOF, por sus siglas en inglés), modelo euleriano y modelo de la mezcla (mixture model). El más complejo de ellos es el modelo euleriano, en el cual se resuelve un sistema de N número de ecuaciones de momentum y continuidad para cada fase, el modelo de la mezcla es una simplificación del anterior hecha tras usar una sola ecuación de momentum para toda la mezcla usando velocidades relativas, aproximando un flujo multifásico como uno homogéneo. Por otro lado, el método VOF se emplea cuando encontrar la interfase entre dos o más fluidos inmiscibles es de especial interés. En este modelo un solo conjunto de ecuaciones de momentum se comparte entre todos los fluidos y la fracción de volumen de todas las especies es calculada en cada celda del dominio (ANSYS Fluent Theory Guide, 2013) (Ansys Fluent Users Guide, 2013).

Dos ejemplos de la aplicación del modelo VOF en reactores de goteo continuo son los estudios de Heidari et al y de Du et al (Heidari & Hashemabadi, 2013)(Du et al, 2017). En ellos resultaba importante evaluar la transferencia de calor entre los fluidos y la distribución de líquido a lo largo del lecho empacado, respectivamente. Imágenes de los resultados que se pueden obtener utilizando el enfoque VOF se muestran a continuación:

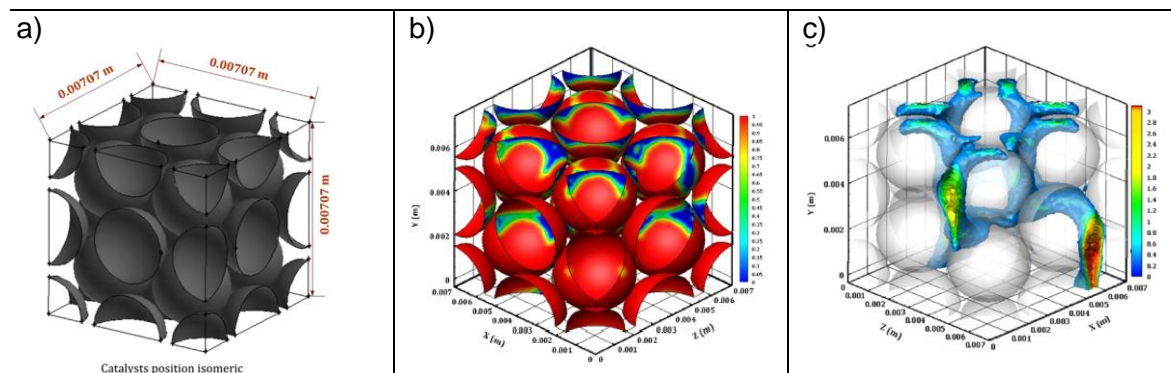


Ilustración 5.17 Resultados obtenidos por Heidari et al, en el estudio VOF de un TBR. a) geometría empleada para la generación de la malla. b) Contorno de la fracción de volumen del líquido. c) Contorno de velocidad de la mezcla de fluido.

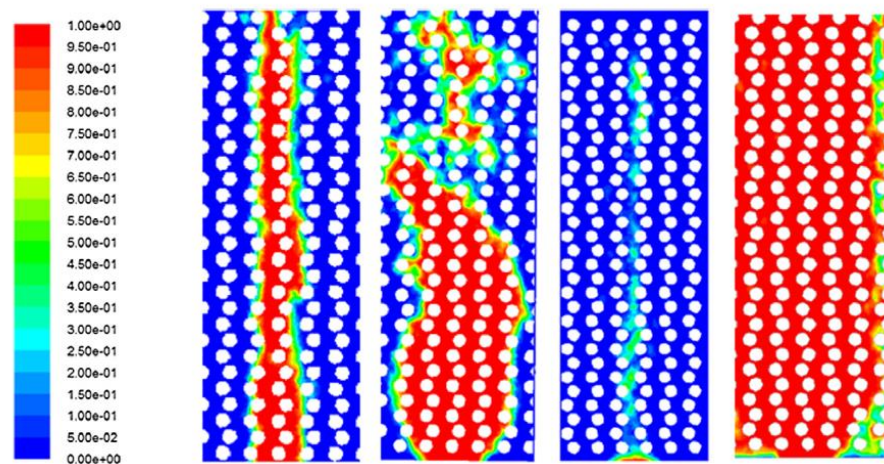


Ilustración 5.18 Contornos de la fracción de volumen del líquido a diferentes condiciones de flujo obtenidos en la simulación CFD de un TBR hecha por Wei Du et al, aplicando el modelo VOF.

Se puede intuir que la aplicación de un modelo pertinente para la representación del sistema es una tarea puesta a discreción de los practicantes, por lo que es necesario revisar la validez de las suposiciones sobre las que cada modelo parte para hacer sus deducciones matemáticas. Diferentes enfoques se pueden utilizar para aproximarse al mismo problema, la conveniencia de escoger uno, entre varios que pueden existir, dependerá del tipo de información que se pretende obtener.

Un resumen bastante completo de los estudios CFD que se han hecho sobre reactores TBR es el hecho por Yining Wang et al, en su artículo Modelling and Simulation of Trickle-Bed Reactors Using Computational Fluid Dynamics: a State-of-The-Art Review, en él incluye una tabla que recopila una gran cantidad de trabajos publicados y el enfoque utilizado en cada uno de ellos. (Wang et al., 2013)

5.5.-Cálculo de caída de presión en lecho empacado con ANSYS Fluent

5.5.1.-Objetivo

Se generó una simulación CFD de la caída de presión de flujos de hidrógeno, estearina, y multifásico, combinando los dos componentes, a través de un lecho empacado con anillos tipo raschig de 0.001 m de longitud y 0.0028 m de diámetro, a una presión 80 bar y 603 K. Esto con la finalidad de presentar, en este trabajo de titulación, una metodología para desarrollar una simulación CFD en el contexto de la ingeniería química.

5.5.2.-Marco teórico

En la simulación se utilizó el modelo de medio poroso para representar al lecho empacado. Para implementar el modelo poroso se calcularon los coeficientes de resistencia viscosa e inercial utilizando las siguientes ecuaciones que vienen reportadas en la guía de usuario de ANSYS fluent.

$$\alpha = \frac{D_p^2}{150} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2}$$

Donde α es la permeabilidad, D_p es el diámetro de partícula y ε es la porosidad. El inverso de la permeabilidad equivale al coeficiente de resistencia viscosa. Para determinar el coeficiente de resistencia inercial C_2 se emplea la siguiente ecuación.

$$C_2 = \frac{3.5 (1 - \varepsilon)}{D_p \varepsilon^3}$$

Se consideró como medio poroso un lecho empacado con anillos tipos raschig, mediante correlaciones encontradas en la literatura se determinó el diámetro equivalente de partícula mediante la Ec. 5.1. La porosidad se calculó mediante la Ec. 5.2.

$$D_p = \left(D_a L_a + \left(\frac{D_a^2}{2} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{Ec. 5.1}$$

(Mears, 1971)

$$\varepsilon = 0.38 + 0.073 \left(1 + \frac{\left(\left(\frac{D}{D_p} \right) - 2 \right)^2}{\left(\frac{D}{D_p} \right)^2} \right) \quad \text{Ec. 5.2}$$

(Froment, 1979)

Donde D_a y L_a son el diámetro y la longitud del pellet, D es el diámetro del reactor.

Se usó la ecuación de Ergun para calcular y comparar con el resultado CFD la caída de presión en un lecho poroso empacado. También se calculó la caída de presión del flujo multifásico por el empaque del reactor mediante la correlación de Ellman, Midoux, Laurent, y Carpentier. (Ranade, Chaudhari & Gunjal, 2011).

5.5.3.-Metodología del trabajo

Se definieron las propiedades químicas y termodinámicas, de los componentes que intervienen en el proceso mediante correlaciones (obtenidas con el simulador de procesos Aspen Plus V10) válidas para el rango de temperatura de operación del reactor.

Posteriormente se comenzó a construir la simulación empezando por definir la geometría del reactor en el módulo DesignModeler, ilustración 5.19 (a), para lo cual se construyó un cilindro que representaría el lecho empacado del reactor tubular. Se hizo con un modelo "primitivo" de la siguiente manera:

Create → Primitives → Cylinder

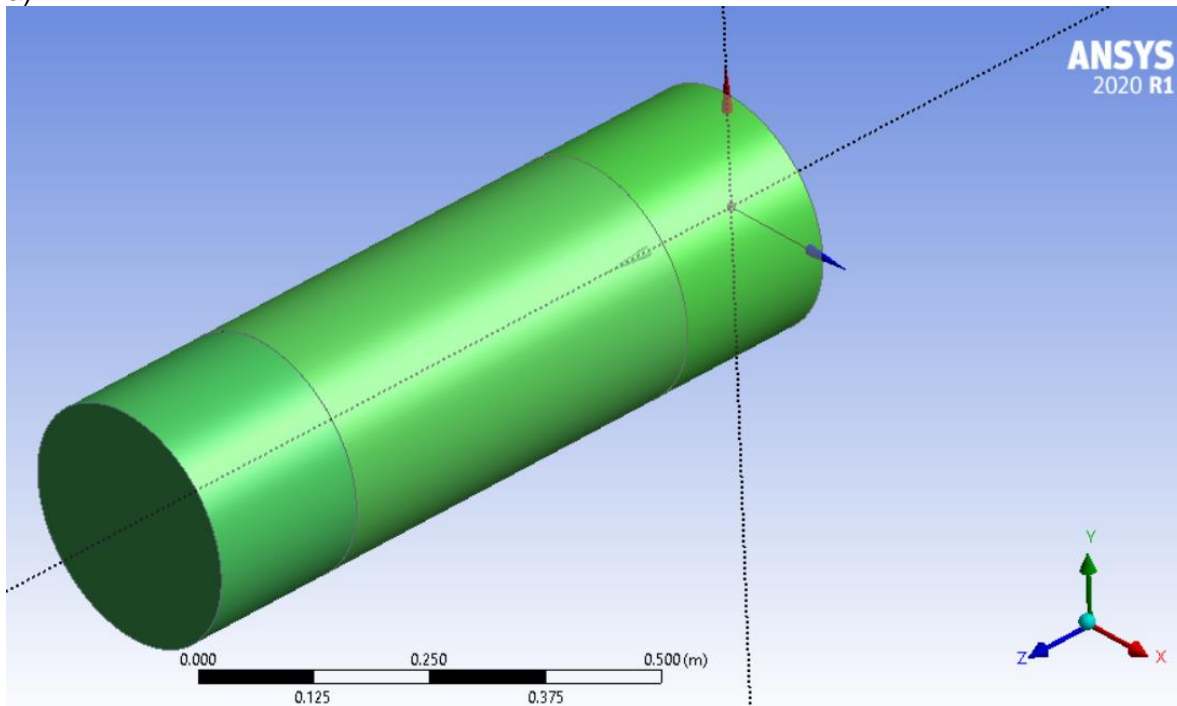
Después de esto simplemente se define las coordenadas de los centros de las caras del cilindro y el radio del cilindro, esto en el árbol de bosquejo que aparece del lado izquierdo, se sigue con un clic derecho en el objeto nuevo que se ha definido y se selecciona *generate*, entonces la geometría queda definida. Se escogieron dimensiones de 290mm de diámetro y 490mm de largo, siguiendo el trabajo realizado en el estudio de Mendoza. (Mendoza, 2012).

A continuación, se transfirió la información del modelo geométrico al módulo Meshing en el cual se define la malla, que servirá para dividir el espacio en elementos finitos de volumen (Madenci & Guven, n.d.). Se buscó generar un mallado con la calidad suficiente para que el modelo convergiera hasta encontrar una solución satisfactoria. Para esto se verificó que los parámetros de métrica del mallado, tales como *skewness*, que es una medida de que tan simétricos son los elementos finitos, y la calidad ortogonal cayeran dentro de valores aceptables para todas las celdas.

Esto se logró insertando un método de mallado *MultiZone* con un tipo de malla *hexa*, siguiendo la recomendación de expertos por parte de Grupo SSC a los que se les consultó, indicando que lo ideal es trabajar con elementos hexaédricos, sin embargo, los tetraedros también pueden servir, siempre teniendo en cuenta una calidad ortogonal mayor a 0.15 y

un *skewness* no mayor a 0.9. Con este fin se aplicó la función *inflation* (que es un método para modificar el tamaño de los elementos en una zona de la malla) en la región de la pared del cilindro para generar un crecimiento gradual de los elementos hacia el centro.

a)



b)

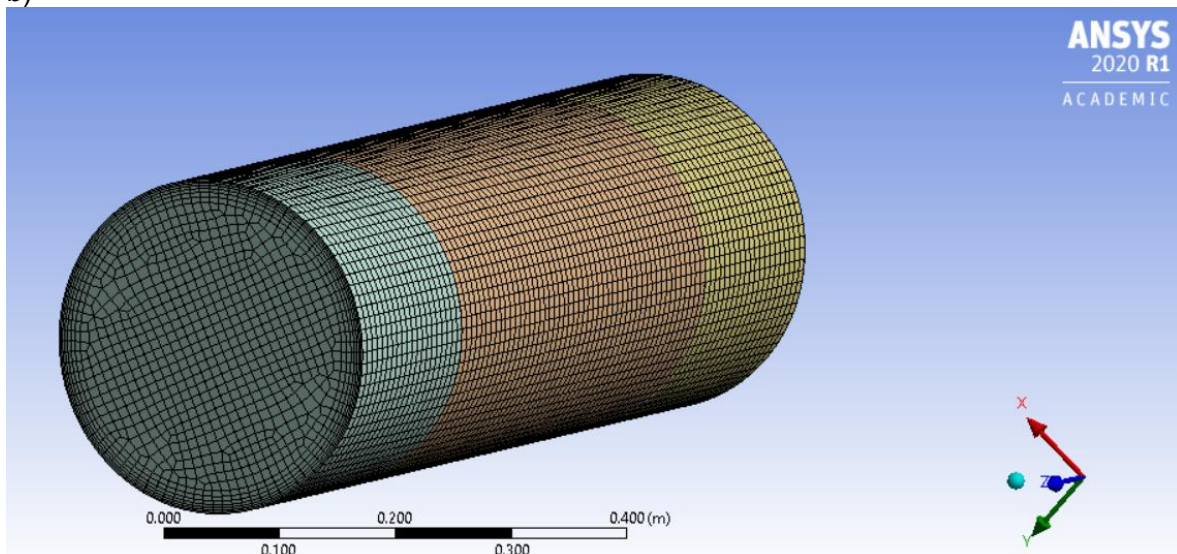


Ilustración 5.19 (a) Geometría del reactor de hidrotatamiento. (b) Malla del dominio del flujo en el reactor.

Una vez hecho todo lo anterior fue posible seguir con la construcción del caso de simulación en *Fluent*, que es en donde se incorporan todas las físicas que se desean representar. Se

dieron de alta los componentes de la reacción química y se implementaron los modelos de medio poroso, multifase euleriano-euleriano con interacción entre fases Schiller-Naumann para drag y flujo laminar.

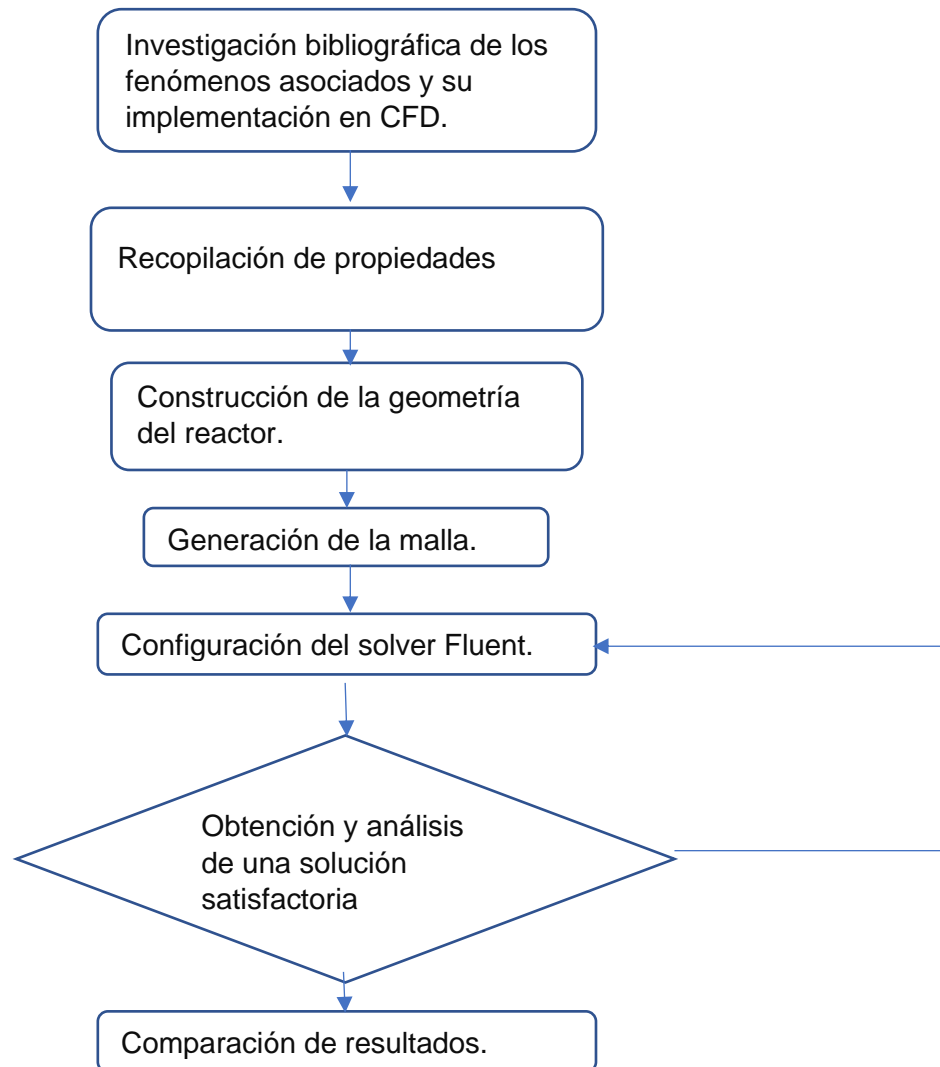


Ilustración 5.20 Diagrama de flujo de la metodología empleada para construir la simulación CFD.

5.5.4.-Resultados

En un primer paso, se simuló solamente el flujo de 1 m/s de hidrógeno a una temperatura de 603.15 K y presión de 80 bar a través de un medio poroso cilíndrico, con dimensiones de 0.49 m de largo y 0.29 m de diámetro. Se considero un pellet tipo anillo de 1 mm de diámetro por 2.8 mm de largo, para el cual se obtuvo un valor de 1.8 mm de diámetro equivalente y una porosidad de 0.5242. Tras obtener estos parámetros se evaluaron las ecuaciones para obtener los coeficientes de resistencia del lecho empacado, a la

resistencia inercial corresponde un valor de 6365.09 1/m^2 , para la resistencia viscosa se obtuvo un valor de $7.145\text{E}+07 \text{ 1/m}^2$.

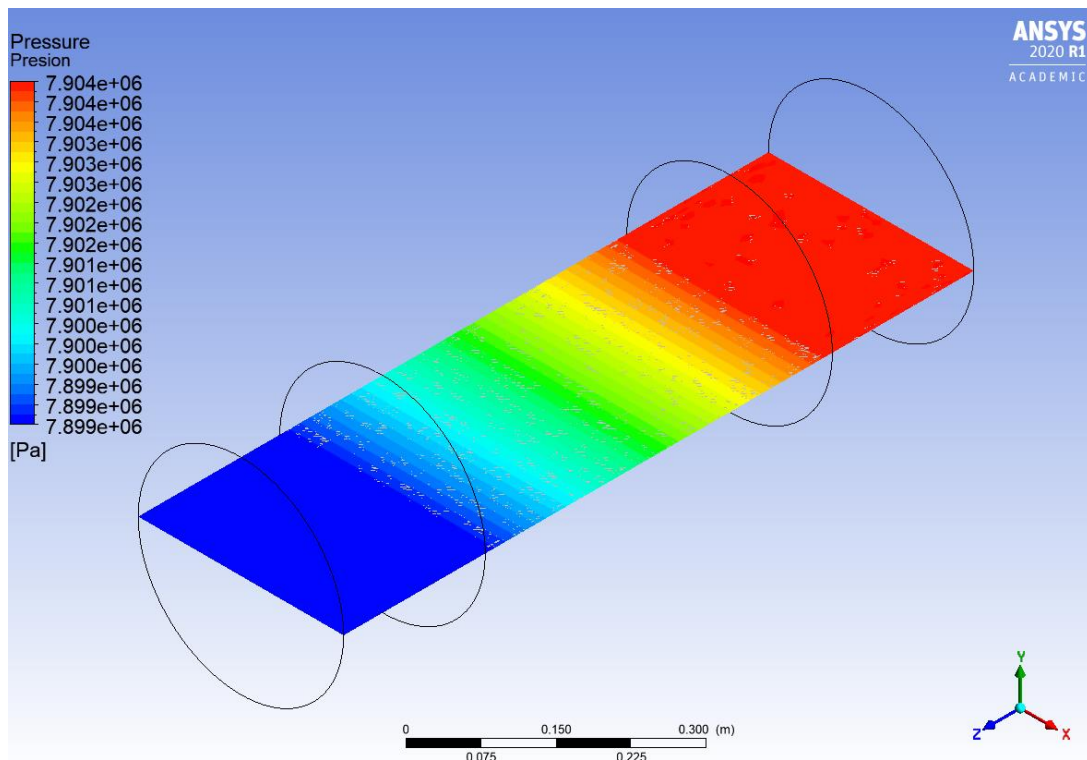


Ilustración 5.21 Perfil de caída de presión para el flujo de gas hidrógeno.

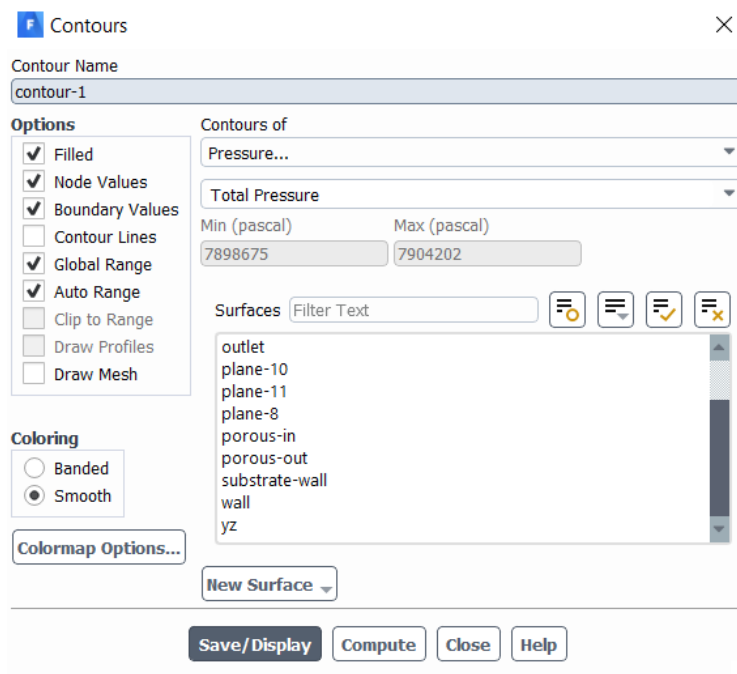


Ilustración 5.22 Cuadro de diálogo en ANSYS Fluent para obtener el contorno de presión del flujo de gas.

En la Tabla 5.1 se muestran los resultados obtenidos mediante la ecuación de Ergun.

Tabla 5.1 Caída de presión del flujo de gas calculada mediante la ecuación de Ergun.

Caída de Presión	ΔP	5523	Pa
Presión en la entrada	P1	7904198	Pa
Presión en la salida	P2	7898675	Pa

En un segundo caso, se simuló solo el flujo de 1 m/s de estearina a las mismas condiciones en las que se simuló el flujo de hidrógeno.

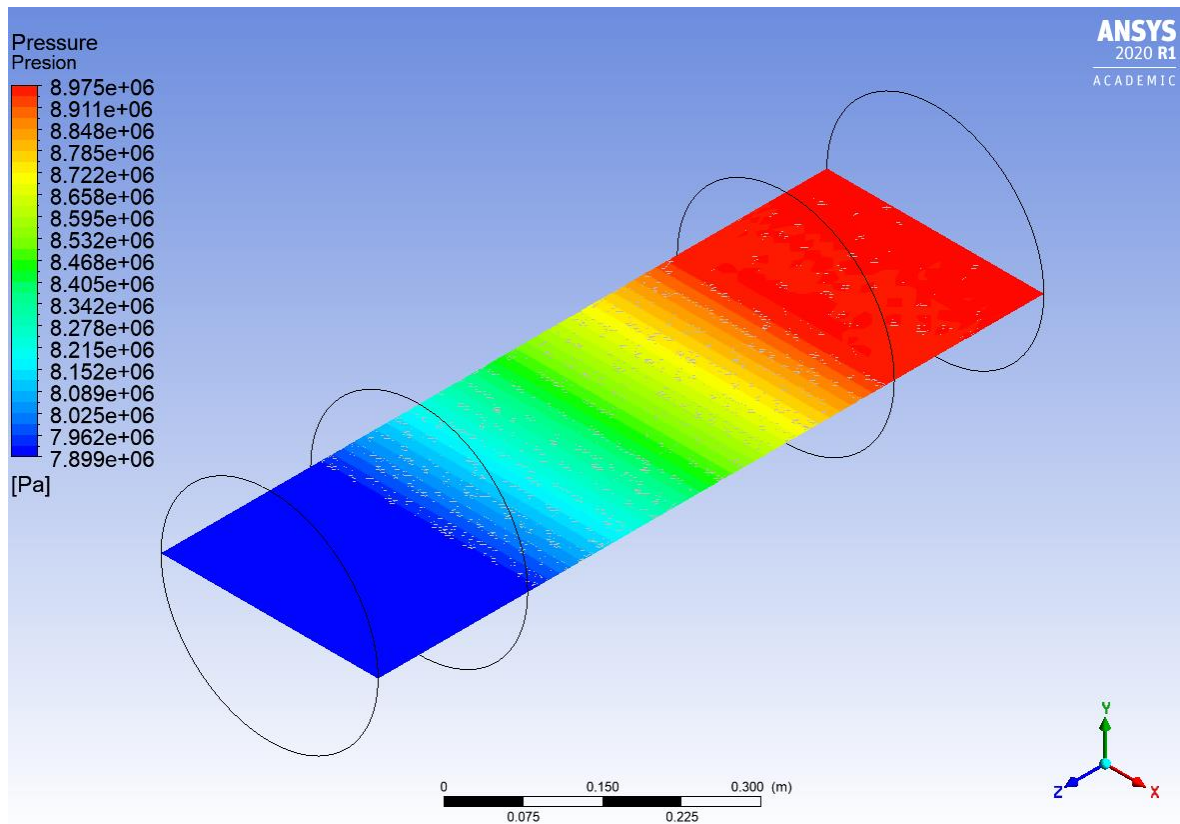


Ilustración 5.23 Perfil de caída de presión para el flujo de estearina.

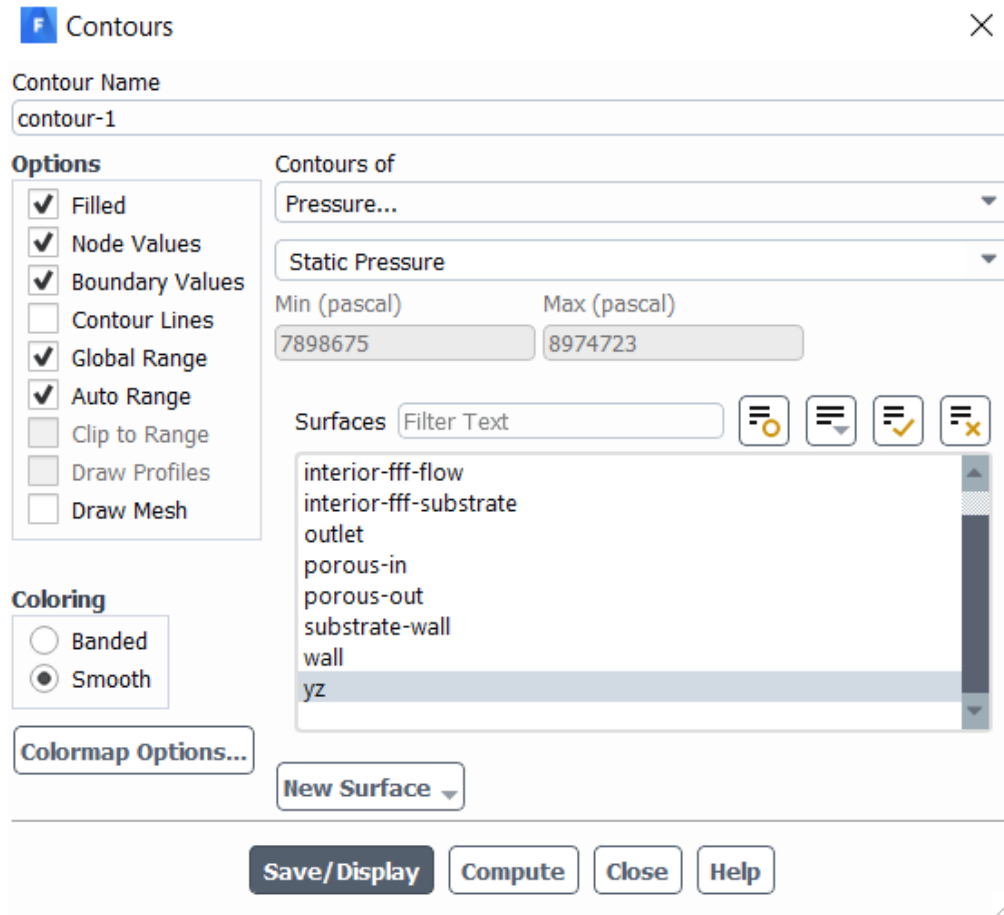


Ilustración 5.24 cuadro de dialogo en ANSYS Fluent para obtener el contorno de presión de flujo de líquido.

En la siguiente tabla se muestran los resultados obtenidos mediante la ecuación de Ergun para el flujo del líquido.

Tabla 5.2 Caída de presión del flujo de líquido calculada mediante la ecuación de Ergun.

Caída de Presión	ΔP	1076168	Pa
Presión de Entrada	P1	8974843	Pa
Presión de Salida	P2	7898675	Pa

Por último, se realizó la simulación del flujo multifásico, 0.21 kg/s de hidrógeno y 0.0039 kg/s de estearina en medio poroso con el modelo euleriano-euleriano, se indicó interacción entre fases tipo Schiller-Naumann, se declararon los coeficientes de resistencia inercial y viscosa. Estos coeficientes toman el mismo valor para ambas fases ya que solo son función de la porosidad y el diámetro equivalente de partícula.

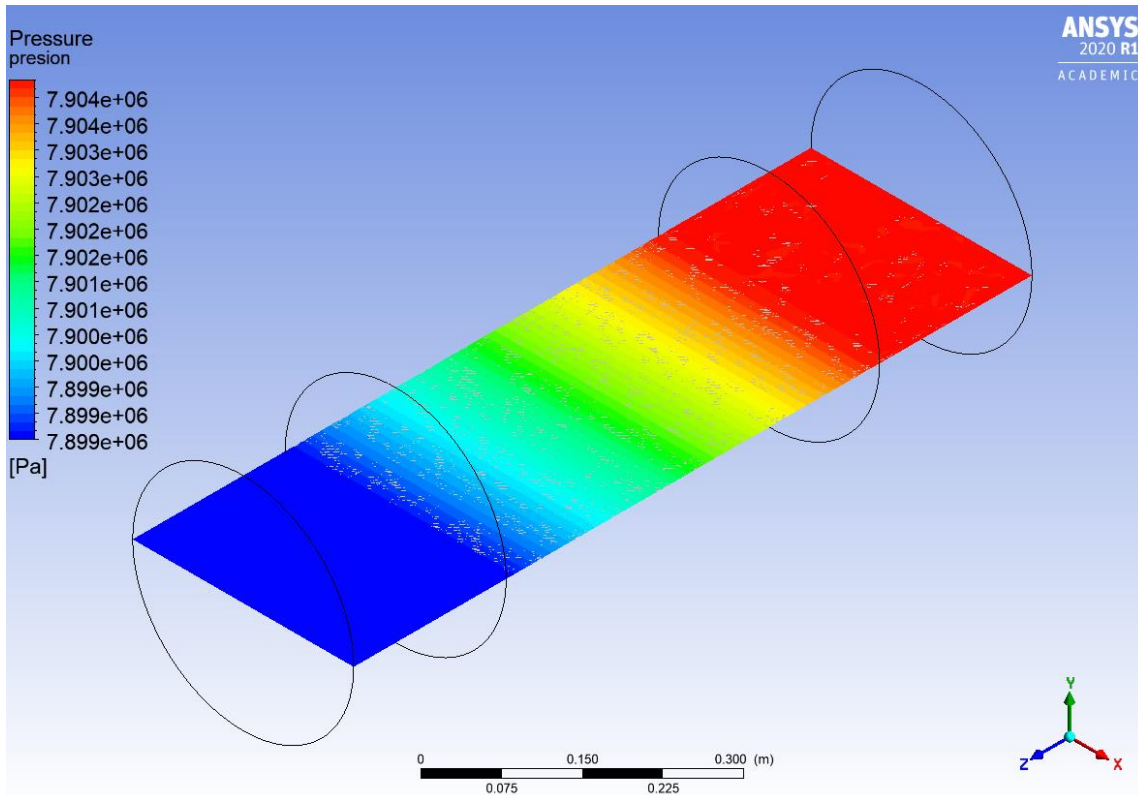


Ilustración 5.25 Caída de presión en el flujo multifásico.

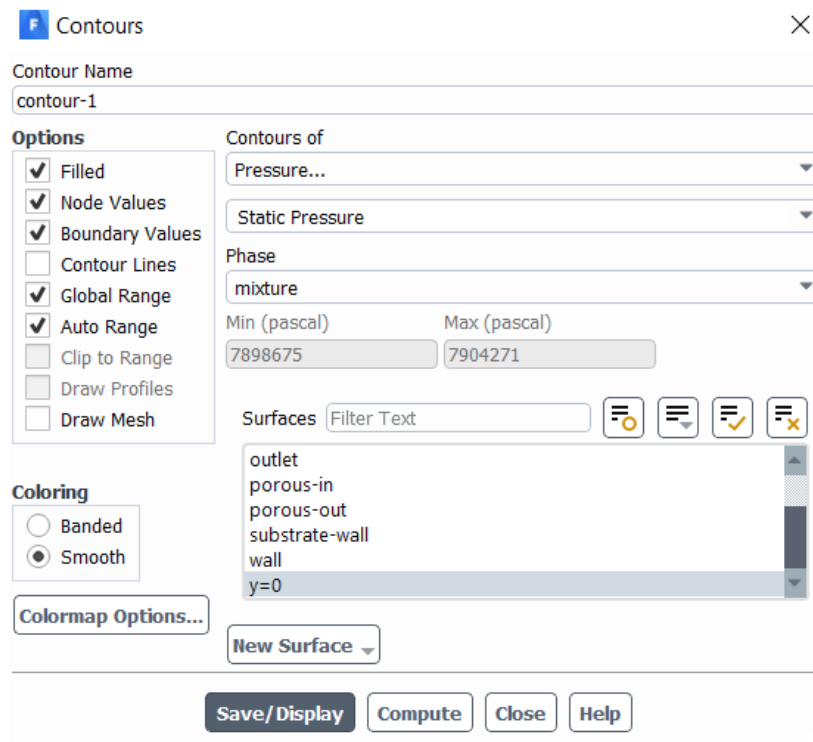


Ilustración 5.26 Cuadro de diálogo en ANSYS Fluent para obtener el contorno de presión de flujo multifásico.

En este caso se usó la correlación de Ellman, Midoux, Laurent, y Carpentier para comparar la caída de presión obtenida con el solver Fluent, considerando una velocidad de 1 m/s, la caída de presión calculada mediante esta ecuación es de 141635 Pa.

5.5.6.-Discusión de resultados

El diámetro equivalente de partícula y la porosidad del lecho son los parámetros que se ocupan en el cálculo de los coeficientes de resistencia que ocupa el software Fluent para poder representar el modelo poroso, estos parámetros también se requieren en el cálculo de la caída de la presión mediante la ecuación de Ergun.

Se pudieron obtener resultados consistentes para la caída de presión para el flujo de gas y de líquido, pues los valores obtenidos mediante el solver de Fluent y los calculados con la ecuación de Ergun para el flujo de una fase, arrojaron valores bastante cercanos. La variación entre la caída de presión estimada mediante estos dos métodos fue de 0.07% y 0.01% en los casos de gas y líquido, respectivamente.

La ilustración 5.21 muestra el perfil de presión del flujo de gas en el lecho empacado, se observa que a medida que el flujo avanza en el reactor la presión disminuye debido a la disipación de energía por fricción al entrar al medio poroso. La caída de presión es baja como resultado de la baja velocidad a la que se encuentra fluyendo el gas a través del sistema.

La ilustración 5.23 muestra el perfil de presión del flujo de líquido, en comparación con el caso del gas este flujo presentó una mayor caída de presión, esto se debe a la mayor densidad que posee el líquido y la velocidad a la que este fluye por el medio poroso es mayor.

Para las simulaciones del flujo multifásico no se encontraron resultados similares entre las dos metodologías empleadas, el resultado calculado mediante la correlación de Ellman, Midoux, Laurent, y Carpentier da el valor 141635 Pa mientras que la encontrada por Fluent en la simulación CFD fue de 5596 Pa. Esto se puede deber a una incorrecta representación del intercambio de momentum entre las fases, en este estudio se empleó el modelo Schiller-Naumann, pero se encontró en la literatura que el modelo más apropiado es el de Attou y Ferschneider (Attou & Ferschneider, 1999).

6.-Conclusión

La Dinámica de Fluidos Computacional es una técnica versátil para conducir el estudio de sistemas fluidos, su aplicación se extiende a una muy diversa gama de situaciones de ciencia e ingeniería. Esto se debe a que el flujo es un fenómeno presente en la mayoría de los procesos que ocurren tanto en el entorno natural como tecnológico. Lo anterior coloca a los proyectos enfocados en desarrollar modelos, métodos de solución, códigos y software de CFD frente a una gran cantidad de posibilidades para implementar sus productos.

En CFD convergen varias disciplinas a un nivel avanzado de especialización, pues la descripción analítica de la dinámica de fluidos y sus efectos asociados requiere de un fuerte sentido de la abstracción, de igual forma, es indispensable saber ordenarle a una computadora las instrucciones para calcular la enorme cantidad de operaciones necesarias para encontrar la solución de los problemas, y, después, indicarle que muestre la información generada de manera que pueda ser interpretada fácilmente por el practicante.

A medida que los usuarios de software CFD posean un mayor grado de entrenamiento en matemáticas, programación, dinámica de fluidos y en su campo de estudio, será que sus simulaciones semejarán más próximamente la realidad de sus investigaciones. La técnica CFD no puede por sí sola predecir cómo se comportarán los sistemas que no se han modelado previamente. Se vio a lo largo de la tesis que los efectos provocados en diferentes condiciones de flujo se implementan recurriendo a expresiones matemáticas, estos son los modelos, sin ellos es imposible que los procesadores puedan darnos alguna predicción que valga la pena. Es aquí donde es clave la preparación del profesionista.

6.1.-Discusión de toda la obra

Se vio al comienzo del trabajo de tesis que la técnica CFD es una herramienta susceptible de ser utilizada en una enorme variedad de tecnologías, también se habló sobre su potencial para ser implementada en evaluar el resultado de catástrofes ambientales, como el estudio de los contaminantes dispersados en el aire por la explosión de un pozo petrolero (Zhu & Chen, 2010).

Es una técnica en un estado maduro, se señalaron las diferentes etapas que se deben atravesar en el proceso de crear una simulación numérica CFD. En cada parte del proceso intervienen conocimientos que provienen de diferentes campos de la ciencia y la tecnología, estos pueden ser diseño industrial y mecánico, para la creación de las geometrías que deberán ser trabajadas, programación, para comprender, crear, modificar y/o implementar los modelos que necesitan ser evaluados, y la especialidad en ciencia o ingeniería que corresponde a los sistemas o situaciones que desean ser estudiadas.

Después, se comentaron los sucesos que fueron transformando la concepción de las ideas con relación a los fluidos. La gestación de la técnica se dio en una época en la que las herramientas tecnológicas de cálculo no existían, o apenas comenzaban a ser ideadas, por

lo que los ingenieros y científicos tardaron tiempo en encontrarle un uso práctico a la teoría del movimiento de los fluidos. Una vez que las computadoras fueron desarrolladas, la técnica CFD comenzó a cobrar cada vez mayor importancia y protagonismo. Un punto de inflexión definitivamente fue la creación de paqueterías comerciales, que permitieron facilitar y extender el uso de la herramienta numérica a todo el espectro que hoy existe de estudios CFD.

Una breve discusión de la representación matemática, o analítica, de los principios de conservación de masa, momentum y energía que se usan para describir el movimiento de los fluidos se presentó en el capítulo 3. Estas son las ecuaciones en las que se apoya la técnica CFD para abordar el estudio de la totalidad de los flujos. Son sistemas de ecuaciones diferenciales parciales, no lineales, de segundo orden; por lo que la solución mediante estrategias analíticas se antoja ambiciosa y falta de certidumbre sobre su consecución.

Los métodos numéricos brindan la posibilidad de encontrar soluciones numéricas de las ecuaciones de la Dinámica de Fluidos Computacional, que, si bien son aproximadas, no son sencillas de obtener. Es necesario una comprensión con buenas bases acerca de los aspectos fenomenológicos, sus implicaciones matemáticas, las estrategias de convergencia, su implementación mediante códigos, etc.

Estos métodos, y sobre todo las herramientas de cálculo computacional, han posibilitado la solución de modelos que describen situaciones complejas que se presentan en el universo de los fluidos. Durante el siglo XX, y ya desde finales del XIX, con el ingeniero Osborne Reynolds, se venían realizando investigaciones en turbulencia y flujos multifásicos, produciendo modelos que hoy en día pueden ser evaluados mediante el empleo de métodos numéricos.

En el último capítulo se comentó la importancia que tiene la teoría de la dinámica de fluidos y de los fenómenos de transporte, así como su inclusión, en el marco de la disciplina de la ingeniería química. Se comentó el hecho de que estas ideas ayudaron a unificar el entendimiento de los principios que rigen el desempeño de las operaciones unitarias. Se hizo énfasis de la presencia del flujo en los procesos que son sujeto de estudio de los ingenieros químicos.

Una selección de estudios en los que la técnica, descrita a lo largo de toda la obra, se aplica a sistemas de ingeniería química se incluye, con el fin de ilustrar la adaptabilidad del enfoque a diferentes procesos. Sin embargo, la cantidad de publicaciones que se pueden encontrar en la literatura es muy extensa, incluso en el campo limitado a la ingeniería química; la utilidad de la técnica para el diseño, evaluación, optimización, etc. de equipos concernientes a la ingeniería química ha sido probada en cada uno de ellos.

6.2.-Lecciones aprendidas

Como estudiante de ingeniería química, la realización de este trabajo presenta una introducción, en el entendimiento de la carrera, de una metodología de vanguardia para la investigación de uno de los sujetos de estudio más profundamente intrínsecos de la

disciplina, al mismo tiempo, significa una herramienta con el potencial de evaluar el desempeño de equipos de la industria con niveles altos de sofisticación y detalle que nunca habían sido posibles de demandar en el diseño de los procesos.

Ha servido también para identificar los modelos que describen las complejas configuraciones en las que se puede presentar el flujo de fluidos. Nada en la técnica CFD es posible sin antes partir de modelos matemáticos que nos brinden información sobre las fuerzas a las que están sujetos los fluidos que se desean representar por medios computacionales. Aquí se han comentado y clasificado según su aplicabilidad a patrones o regímenes de flujo.

También se ha puesto en contexto, tras haber discutido los eventos del pasado que arrojaron avances que derivaron en la conformación de la técnica, el desarrollo de la teoría de la dinámica de fluidos y los fenómenos de transporte. Esto es de ayuda para identificar las razones por las que, tradicionalmente, se han preferido desarrollar correlaciones y reglas heurísticas en el diseño y escalamiento de procesos químicos industriales.

6.3.-Areas de oportunidad

A consideración del autor, con la elaboración de este texto, ha sido evidenciada la necesidad de orientar la enseñanza y práctica de la profesión hacia el uso de herramientas de simulación computacional como lo es la Dinámica de Fluidos Computacional. Hoy en día, la humanidad ha vencido la resistencia que suponían los métodos analíticos para dar solución a la elaborada teoría de la mecánica de fluidos en situaciones de utilidad para la ingeniería.

En un apéndice del libro, *The History of Multiphase Science and Computational Fluid Dynamics* (Lyczkowski, 2018), el autor sugiere una serie de objetivos para la comunidad de usuarios CFD que aplican la técnica en procesos químicos, vale la pena retomarlos aquí:

- Demostrar el valor y la factibilidad de la técnica CFD para el diseño de procesos en la industria química.
- Desarrollar y refinar metodologías para obtener mayor provecho de las herramientas existentes de CFD.
- Garantizar un impacto tangible en los negocios de la inversión en CFD.
- Identificar nuevas características de software que son críticas en la finalidad de incrementar los beneficios económicos de implementar CFD y colectivamente influenciar a los vendedores de software para su provisión.

Es momento de utilizar las reglas heurísticas y correlaciones para el diseño preliminar de los equipos, y fortalecer el análisis de simulaciones CFD para ingeniar el diseño final de equipos de mayor eficiencia. Los métodos numéricos ya fueron empleados una vez para revolucionar la carrera armamentística, pero es tiempo de utilizar estos recursos del pensamiento humano para idear nuevas tecnologías limpias, que ayuden a resolver la crisis climática, a las que urgen encontrar configuraciones que aseguren su viabilidad.

Así pues, la Dinámica de Fluidos Computacional plantea un reto emocionante para el ingeniero químico, que invita a reflexionar sobre las habilidades que debe adquirir un profesionalista de la carrera para poder sacar provecho de los recursos tecnológicos que tiene al alcance en la tarea de enfrentar los problemas de su competencia de cara al resto del siglo XXI.

Referencias

Versteeg, H., & Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics* (2nd ed., p. 1). Pearson Education Ltd.

Östman, A., & Oye, I. (2003). RANS solver applied for hydrodynamic analysis of twin-hull ferry. *Computational Fluid Dynamics technology in ship hydrodynamics*.

Folley, M. (2016). *Numerical modelling of wave energy converters* (1st ed., pp. 4,113).

Das, P., Nof, E., Amirav, I., Kassinos, S., & Sznitman, J. (2018). Targeting inhaled aerosol delivery to upper airways in children: Insight from computational fluid dynamics (CFD). *PLOS ONE*, 13(11), e0207711. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0207711>

Anderson, J. (1995). *Computational fluid dynamics* (1st ed., p. 6). McGraw-Hill.

KOTHARI, A., & ANDERSON, JR., J. (1985). Flows over low Reynolds number airfoils - Compressible Navier-Stokes numerical solutions. *23Rd Aerospace Sciences Meeting*. <https://doi.org/10.2514/6.1985-107>

Tu, J., Liu, C., Yeoh, G., & Jiyuan Tu. (2013). *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach* (2nd ed., pp. 6-8). Butterworth-Heinemann.

Bistafa, S. (2017). On the development of the Navier-Stokes equation by Navier. *Revista Brasileira De Ensino De Física*, 40(2). doi: 10.1590/1806-9126-rbef-2017-0239

Darrigol, O. (2009). *Worlds of flow*. Oxford: Oxford University Press.

MASUDA, S. (2012). THE STUDY OF MATHEMATICAL HISTORY ON THE EQUATIONS OF NAVIER-STOKES AND BOLTZMANN AS THE MICROSCOPICALLY-DESCRIPTIVE HYDRODYNAMIC EQUATIONS (Mathematical analysis of the Euler equation: 100 years of the Karman vortex street and unsteady vortex motion). *数理解析研究所講究録*, 1776.

Prandtl, L., Tietjens, O., & Rosenhead, L. (1934). *Fundamentals of Hydro and Aeromechanics*. Mineola: Dover Publications, Incorporated.

Von Neumann, J. (1981). The Principles of Large-Scale Computing Machines. *IEEE Annals of The History of Computing*, 3(3), 263-273. doi: 10.1109/mahc.1981.10025

Blazek, J. (2005). *Computational fluid dynamics: principles and applications* (Second edition). Elsevier.

Richardson, L. (1907). A Freehand Graphic way of determining Stream Lines and Equipotentials. *Proceedings Of The Physical Society Of London*, 21(1), 88-124. doi: 10.1088/1478-7814/21/1/306

Richardson, L. (1910). On the approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Proceedings of The Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 83(563), 335-336. doi: 10.1098/rspa.1910.0020

Richardson, L. F., & Lynch, P. (2007). *Weather prediction by numerical process* (Second edition).

Hunt, J. (1998). LEWIS FRY RICHARDSON AND HIS CONTRIBUTIONS TO MATHEMATICS, METEOROLOGY, AND MODELS OF CONFLICT. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1), xiii-xxxvi. doi: 10.1146/annurev.fluid.30.1.0

Lewis Fry Richardson | British physicist. (2020). Retrieved 7 August 2020, from <https://www.britannica.com/biography/Lewis-Fry-Richardson>

Anderson, D. A., Pletcher, R. H., & Tannehill, J. C. (2013). *Computational fluid mechanics and heat transfer* (Third edition). CRC Press/Taylor & Francis Group.

Runchal, A. (2009). Brian Spalding: CFD and reality – A personal recollection. *International Journal Of Heat And Mass Transfer*, 52(17-18), 4063-4073. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2009.03.058

Khalil, E. E. (2012). CFD History and Applications. *CFD Letters*, 4(2), 43–46.

Gosman, A. (1969). *Heat and mass transfer in recirculating flows*. London: Acad. Pr.

Lyczkowski, R. (2018). *The history of multiphase science and computational fluid dynamics* (1st ed.). Springer International Publishing.

Engineering Simulation & 3D Design Software | ANSYS. Ansys.com. recuperado el 21 de febrero de 2020, de <https://www.ansys.com/>.

CHAM | PHOENICS. Cham.co.uk. (2020). 2020 recuperado el 21 de febrero de 2020, de <http://www.cham.co.uk/phoenics.php>.

STAR-CCM+. Siemens Digital Industries Software. (2020). 2020 recuperado el 21 de febrero de 2020, de <https://www.plm.automation.siemens.com/global/es/products/simcenter/STAR-CCM.html>.

COMSOL: Multiphysics Software for Optimizing Designs. COMSOL Multiphysics®. (2020). recuperado el 21 de febrero de 2020, de <https://www.comsol.com/>.

Free Student Software | ANSYS Student. (2020). Retrieved 14 August 2020, from <https://www.ansys.com/academic/free-student-products>

Sharma, A. (2016). *Introduction to computational fluid dynamics: development, application and analysis*. Wiley.

ANSYS Inc. (2013). *Fluent UDF Manual* (15th ed.). Canonsburg, PA.

Currie, I. (2013). *Fundamental mechanics of fluids*. Boca Raton, FL: Taylor & Francis.

Moukalled, F., Mangani, L., & Darwish, M. (2016). *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*. Springer International Publishing.

Jayanti, S. (2018). *Computational fluid dynamics for Engineers and Scientists* (1st ed.). Chennai, India: SPRINGER.

Van Dyke, M. (1982). *An album of fluid motion*. Stanford, CA.: Parabolic Press.

Rodi, W., Constantinescu, G., & Stoesser, T. (2013). *Large-eddy simulation in hydraulics*. Taylor and Francis/Balkema.

Morel, C. (2015). *Mathematical Modeling of Disperse Two-Phase Flows* (1st ed.). Cham: Springer International Publishing.

Ishii, M. (2014). *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. Springer.

- Thome, J. (2016). *Encyclopedia of two-phase heat transfer and flow*. Singapore: World Scientific.
- Baker, O. (1954). Simultaneous flow of oil and gas. *Oil and Gas J.* 53, pp. 185–195.
- Yadigaroglu, G., & Hewitt, G. F. (2018). *Introduction to multiphase flow: basic concepts, applications and modelling*. Springer.
- Ludwig, E. E. (2001). *Applied process design for chemical and petrochemical plants (3rd ed.)*. Butterworth-Heinemann.
- Kolev, N. I. (2012). *Multiphase flow dynamics (Fourth edition)*. Springer.
- Hirt CW, Nichols BD (1982) Volume of fluid method for dynamics of free boundaries. *J Com Phys* 39:201–225
- Osher S, Sethian JA (1988) Fronts propagating with curvature dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J Comput Phys* 79:12–49
- Valiente Banderas, A., & Stivalet Corral, R. (2008). *La ingeniería química: el poder de la transformación (1st ed.)*. Ciudad de México: Universidad Nacional Autónoma de México.
- Walker, W. H., Gilliland, E. R., Lewis. Warren Kendall, & McAdams, W. H. (1923). *Principles of chemical engineering (1st ed.)*. McGraw-Hill.
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (1960). *Transport phenomena (1st. ed.)*. J. Wiley.
- Leal, L. G. (2007). *Advanced transport phenomena: fluid mechanics and convective transport processes*. Cambridge University Press.
- Wilkes, J. (2005). *Fluid Mechanics for Chemical Engineers with Microfluidics and CFD, Second Edition (2nd ed.)*. Prentice Hall.
- Valiente, A. (1988). *Problemas de transferencia de calor*. Noriega.
- Nolan, D. (2017). *Handbook of fire and explosion protection engineering principles (3rd ed.)*. [Place of publication not identified]: WILLIAM ANDREW Publishing.
- Valiente Banderas, A. (2002). *Problemas de flujo de fluidos (2nd ed.)*. México: Editorial Limusa S.A de C.V.
- Baron, J., Lawrence, J., & King, G. (1996). *Design and construction of the world's longest liquid sulphur pipeline*. Lecture, International Pipeline Conference.
- Crane Co. (1982). *Flow of fluids through valves, fittings and pipe*. Stamford, CT.
- Abeykoon, C. (2020). Compact heat exchangers – Design and optimization with CFD. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 146, 118766. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118766>
- Bangga, G., Novita, F., & Lee, H. (2019). Evolutional computational fluid dynamics analyses of reactive distillation columns for methyl acetate production process. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 135, 42-52. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2018.11.015>
- Arnold, K., & Stewart, M. (2008). *Surface production operations (Third edition)*. Elsevier.
- Kharoua, N., Khezzar, L., & Saadawi, H. (2013). CFD Modelling of a Horizontal Three-Phase Separator: A Population Balance Approach. *American Journal Of Fluid Dynamics*, 101-118. doi: 10.5923/j.ajfd.20130304.03

- Ganegama Bogodage, S., & Leung, A. Y. T. (2015). CFD simulation of cyclone separators to reduce air pollution. *Powder Technology*, 286, 488–506. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2015.08.023>
- Mallik, M. S. I., Hoque, M. A., & Uddin, M. A. (2020). Comparative Study of Standard Smagorinsky Model and Dynamic Smagorinsky Model in Large Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow. *Journal of Scientific Research*, 12(1), 39–53. <https://doi.org/10.3329/jsr.v12i1.41924>
- Pandey, A., Höfer, R., Taherzadeh, M., Nampoothiri, K. M., & Larroche, C. (2015). *Industrial biorefineries and white biotechnology*. Elsevier.
- Randall, D. (1985). *DECARBOXYLATION AND HYDROGENATION OF SAFFLOWER AND RAPESEED OILS AND SOAPS TO PRODUCE DIESEL FUELS* (Master of Science in Chemical Engineering). Montana State University.
- Leng, T., Mohamed, A., & Bhatia, S. (1999). Catalytic conversion of palm oil to fuels and chemicals. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 77(1), 156-162. doi: 10.1002/cjce.5450770126
- Guzman, A., Torres, J., Prada, L., & Nuñez, M. (2010). Hydroprocessing of crude palm oil at pilot plant scale. *Catalysis Today*, 156(1-2), 38-43. doi: 10.1016/j.cattod.2009.11.015.
- Mitra, S. (2011). *Modeling and Simulation of Trickle Bed Reactor with Internals Using CFD* (Master of Technology). Indian Institute of Technology, Kanpur.
- Mitra, Subhasish. (2011). *Computational Fluid Dynamics Modeling of Trickle Bed Reactor*.
- Ranade, V. V., Chaudhari, R. V., & Gunjal, P. R. (2011). *Trickle bed reactors: reactor engineering & applications*. Elsevier.
- Attou, A., & Ferschneider, G. (1999). A two-fluid model for flow regime transition in gas–liquid trickle-bed reactors. *Chemical Engineering Science*, 54(21), 5031-5037. doi: 10.1016/s0009-2509(99)00226-2
- Mendoza, C. (2012). *SIMULACIÓN CFD DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR EN UN REACTOR DE HIDROTRATAMIENTO DE ACEITES VEGETALES DE SEGUNDA GENERACIÓN* (Magister). Universidad Nacional de Colombia.
- Tirado, A., Ancheyta, J., & Trejo, F. (2018). Kinetic and Reactor Modeling of Catalytic Hydrotreatment of Vegetable Oils. *Energy & Fuels*, 32(7), 7245-7261. doi: 10.1021/acs.energyfuels.8b00947
- Attanatho, L. (2012). *Performances and kinetic studies of hydrotreating of bio-oils in microreactor*.
- SEBOS, I., MATSOUKAS, A., APOSTOLOPOULOS, V., & PAPAYANNAKOS, N. (2009). Catalytic hydroprocessing of cottonseed oil in petroleum diesel mixtures for production of renewable diesel. *Fuel* (Guildford), 1, 145.
- ANSYS Inc. (2013). *ANSYS Fluent Theory Guide* (15th ed.). Canonsburg, PA.
- ANSYS Inc. (2013). *ANSYS Fluent Users Guide* (15th ed.). Canonsburg, PA.
- Heidari, A., & Hashemabadi, S. (2013). Numerical evaluation of the gas–liquid interfacial heat transfer in the trickle flow regime of packed beds at the micro and meso-scale. *Chemical Engineering Science*, 104, 674-689. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2013.09.048>

Du, W., Zhang, J., Lu, P., Xu, J., Wei, W., He, G., & Zhang, L. (2017). Advanced understanding of local wetting behaviour in gas-liquid-solid packed beds using CFD with a volume of fluid (VOF) method. *Chemical Engineering Science*, 170, 378–392. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.02.033>

Wang, Y., Chen, J., & Larachi, F. (2013). Modelling and simulation of trickle-bed reactors using computational fluid dynamics: A state-of-the-art review. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 91(1), 136.

Mears, D. E. (1971). The role of axial dispersion in trickle-flow laboratory reactors. *Chemical Engineering Science*, 26(9), 1361–1366. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(71\)80056-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(71)80056-8)

Froment, G. F. (1979). *Chemical reactor analysis and design* / Gilbert F. Froment, Kenneth B. Bischoff. John Wiley & Sons.

Zhu, Y., & Chen, G. (2010). Simulation and assessment of SO₂ toxic environment after ignition of uncontrolled sour gas flow of well blowout in hills. *Journal Of Hazardous Materials*, 178(1-3), 144-151. doi: 10.1016/j.jhazmat.2010.01.055

Apéndice

Derivada material o derivada lagrangiana

$\frac{D\alpha}{Dt}$ Representa el cambio total en la cantidad α de un elemento de fluido que es observado siguiendo su flujo, el término $u_k \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right)$ expresa el hecho de que, dentro de un campo de flujo independiente del tiempo, en que las propiedades del fluido y su movimiento dependen solamente de las coordenadas espaciales, en un elemento de fluido dado hay un cambio en α debido al hecho de que cambia su posición conforme avanza en el flujo y por lo tanto α va tomando distintos valores conforme fluye dicha partícula de fluido. u_k es el vector de velocidad $\mathbf{u} = \langle u, v, w \rangle$.

$$\frac{D\alpha}{Dt} = \frac{\partial \alpha}{\partial t} + u_k \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right)$$

$$\frac{D\alpha}{Dt} = \frac{\partial \alpha}{\partial t} + u \frac{\partial \alpha}{\partial x} + v \frac{\partial \alpha}{\partial y} + w \frac{\partial \alpha}{\partial z}$$

En notación vectorial:

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

Teorema de Reynolds

Relaciona la derivada lagrangiana de una integral de volumen a una integral con derivadas únicamente eulerianas.

$$\frac{D}{Dt} \int_V \alpha dV = \int_V \left[\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\alpha u_k) \right] dV$$

En notación vectorial:

$$\frac{D}{Dt} \int_V \alpha dV = \int_V \left[\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{u}) \right] dV$$

Teorema de Gauss o de la divergencia

Relaciona una integral de superficie a una de volumen, V es un volumen dado y S es la superficie en envuelve a V , la normal unitaria a S se denota por \mathbf{n} , \mathbf{a} es cualquier vector.

$$\int_S \mathbf{a} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \nabla \cdot \mathbf{a} dV$$