



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
MECÁNICA – TERMOFLUIDOS

**ESTUDIO DE LA ENTROPÍA GRANULAR EN FLUJOS BIFÁSICOS GAS-
SÓLIDOS EN EL RÉGIMEN TURBULENTO**

MODALIDAD DE GRADUACIÓN: TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:
FIS. ALAN TONATIUH LOBATO GARCÍA

TUTOR
DR. JOSÉ ENRIQUE GUZMÁN VÁZQUEZ, INSTITUTO DE INGENIERÍA, UNAM

CDMX ENERO 2020



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

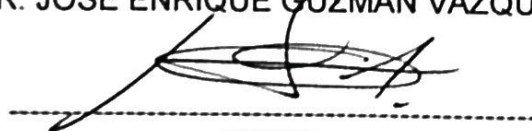
JURADO ASIGNADO:

Presidente:	Dr. Méndez Lavielle Federico
Secretario:	Dr. Rendón Garrido Pablo Luis
1 er. Vocal:	Dr. Guzmán Vázquez José Enrique
2 do. Vocal:	Dr. Velasco Segura Roberto
3 er. Vocal:	M. I. Echeverría Arjonilla Carlos

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:
Torre del Instituto de Ingeniería de la U.N.A.M.

TUTOR DE TESIS:

DR. JOSÉ ENRIQUE GUZMÁN VÁZQUEZ

A handwritten signature in black ink, consisting of a series of loops and strokes, positioned above a horizontal dashed line.

FIRMA

Agradecimientos

A mis familia, mi madre, padre y hermano, por acompañarme en esta etapa y ser ese soporte para salir adelante.

A Mariana, siempre diciéndome que yo puedo y estar a mi lado.

A mis amigos de la torre, el Alan, Baez, Gerardo, JC, Marcel y León, haciendo de esto algo más entretenido.

Al Dr. Enrique Guzmán que me dio la oportunidad de realizar este trabajo bajo su tutela y guía.

A Carlos (maestro, doctorante), que no habrá sido cotutor, pero no se salvó de ser sinodal. Este trabajo no habría sido posible sin él.

Al Dr. Federico Méndez, buen profesor en la maestría a más de sinodal de este trabajo.

A los doctores Pablo y Roberto, que desde mi paso por Ciencias estuvieron y esta vez les tocó de este lado ser parte del cierre de este trabajo. Gracias por sus observaciones.

Resumen

El presente documento contiene los detalles del desarrollo teórico de una ecuación de transporte para la entropía, con la cual puedan ser estudiados los flujos de mezclas constituidas por gases y partículas sólidas. Flujos de este tipo se presentan en diversos sistemas naturales e industriales. Por ejemplo, en erupciones volcánicas, en dispositivos de transporte neumático, en reactores químicos, en procesos de inyección, etc.

El caso que motiva el presente trabajo se refiere, en particular, a la producción de gas metano en yacimientos con arenas no consolidadas. Al reducirse la presión en la tubería de producción, ingresa al conducto una masa de gas que se expande rápidamente, acarreando consigo una cierta cantidad de sólidos (polidispersos). Aunque este trabajo se limita a un medio granular monodisperso como primera aproximación, el proceso considerado es general en cuanto a que el flujo es turbulento y se puede considerar el caso compresible.

El tratamiento para obtener la ecuación de transporte para la entropía se apoyó en la teoría cinética de gases, así como en la teoría de mezclado. Es importante recalcar que en la literatura científica disponible no ha sido reportada, hasta el momento, una ecuación de transporte para la entropía de la mezcla. A modo de prueba preliminar de la ecuación, se realizó una evaluación de la entropía de la fase sólida con los datos experimentales obtenidos en el laboratorio.

Índice general

Índice de figuras	v
Índice de tablas	vii
Nomenclatura	1
1. Introducción	3
1.1. Flujos de mezclas gas-sólido	3
1.2. Motivación	4
1.3. Antecedentes	7
1.4. Consideraciones preliminares	13
1.5. Objetivos	15
2. Marco Teórico	17
2.1. Funciones de distribución	17
2.2. Transporte irreversible	20
2.3. Teoría de mezclado	29
3. Ecuaciones para la fase granular	33
3.1. Consideraciones de modelado	33
3.2. Ecuación maestra de transporte para la fase granular	35
3.3. Ecuación de conservación de masa	41

3.4. Ecuación de conservación del momentum	42
3.5. Ecuación de conservación de la energía	44
3.6. Ecuación de transporte para la entropía	45
4. Ecuaciones de transporte para la fase gaseosa	48
4.1. Ecuaciones de la mezcla	48
4.2. Ecuación de entropía	51
5. Aplicación a un flujo experimental	55
5.1. Experimentos	55
5.2. Discretización de la ecuación de transporte	58
5.3. Estimación de la entropía granular	61
6. Resultados	64
Conclusiones	70
Bibliografía	73

Índice de figuras

1.1.	Dos extremos de flujos rápidos con mezclas gas-sólido: (a) Realización experimental de chorros granulares [21]. (b) Erupción del volcán de Colima, México (foto: Sergio Tapiro).	4
1.2.	(a) Sistema de producción en aguas profundas. (b) Tren de válvulas para un sistema de producción en aguas profundas.	5
1.3.	(a) Procesos de formación de hidratos de metano en presencia de agua. La figura muestra también el crecimiento de capas adheridas a la pared de la tubería su crecimiento como función del tiempo (ver, por ejemplo, [33] [6]). (b) Tapón formado por la aglomeración de hidratos de metano dentro de una tubería de Petrobas (Imagen tomada de Sloan, D. 2011)	7
1.4.	Esquema del proceso de flujo analizado.	15
2.1.	Registro a manera de histograma de las partículas que golpean la pantalla.	19
2.2.	Función de distribución de probabilidad.	20
3.1.	Esquematización de la colisión entre dos partículas.	40
5.1.	Foto que muestra el montaje de la zona de grabación.	56
5.2.	Esquema del PSTV	56

5.3. Instantánea del flujo. La imagen muestra a las partículas del medio granular mientras son arrastradas por el flujo de aire a gran velocidad.	57
5.4. Diagrama de la evolución temporal de las posiciones de las partículas entre dos cuadros.	58

Índice de tablas

6.1. Valores de las propiedades de los fluidos en la sección de medición. Estos valores se mantienen constantes en dicha sección.	65
6.2. Valores obtenidos de promediar todos los datos y calcular las ve- locidades fluctuantes usando $z\sigma/\sqrt{n_i}$	66
6.3. Valores obtenidos de promediar todos los datos y calcular las ve- locidades fluctuantes usando $z\sigma$	66
6.4. Valores obtenidos de promediar dividiendo los datos en dos grupos.	67
6.5. Valores obtenidos de promediar dividiendo los datos en cinco grupos.	67
6.6. Valores obtenidos para el término asociado a la fuerza de arrastre propuesto, así como para la entropía. Cada bloque corresponde a un manejo de datos diferente.	69

Nomenclatura

L	Longitud característica del sistema
u_{fm}	Velocidad media del gas
ν_f	Viscosidad cinemática del gas
μ_f	Viscosidad dinámica del gas
$\tilde{d}$	Diámetro de las partículas
ρ_s	Densidad sólido
ρ_f	Densidad gas
$Re_L = u_{fm}L/\nu_f$	Número de Reynolds
$Re_p = \rho_f d \vec{u}_f * -\vec{c} /\mu_f$	Número de Reynolds para la partícula
$\vec{u}_f^*$	Velocidad de aproximación gas desde distancia larga

$\vec{c}$		Velocidad instantánea de la partícula
$\vec{f}$	$= \tau_d^{-1}(\vec{u}_f * -\vec{c})$	Fuerza de arrastre
τ_d	$= \tau_v / (a_0 Re_p^\sigma)$	Tiempo de relajación de fuerza de arrastre
τ_v	$= \rho_s d^2 / 18 \mu_f$	Tiempo de relajación viscoso
$\vec{u}_s, \vec{u}_f$		Velocidades promedio locales del partícula(s) y gas(f)
$\vec{u}'_f, \vec{C}$		Velocidades fluctuantes del gas y partícula
Re_m	$= \rho_f d \vec{u}_f - \vec{u}_s / \mu_f$	Reynolds promedio local de la partícula
τ_d	$= \tau_v / (a_0 Re_m^\sigma)$	Tiempo de relajación de fuerza de arrastre, para el Reynolds promedio
$\vec{f}_m$	$= \tau^{-1}(\vec{u}_f - \vec{u}_s)$	Fuerza de arrastre promedio
$\vec{f}'$	$= \tau^{-1}(\vec{u}'_f - \vec{C})$	Fuerza de arrastre fluctuante
$\vec{b}$		Fuerzas externas por unidad de masa
n		Densidad numérica
α	$\rho_s \alpha_s = nm$	Fracción volumétrica

Introducción

1.1. Flujos de mezclas gas-sólido

El estudio de los flujos bifásicos constituidos por una fase gaseosa y una compuesta por partículas sólidas tiene gran relevancia en las aplicaciones industriales. Al remitirse a la literatura científica donde se analizan casos como el presentado en éste trabajo, se encontrarán diversos temas que motivan dichas investigaciones: los lechos fluidizados en reactores químicos, las tuberías de producción, el control de la generación de contaminantes, sistemas de generación geotérmica, el transporte neumático, los procesos de inyección de polvos, la minería del carbón, etc. [3]. Por ejemplo, los lechos fluidizados están presentes en un proceso de gran importancia en la refinación de petróleo, el craqueo catalítico. A través de los tubos de producción (pozos y tuberías ascendentes) se realiza la extracción de gas y petróleo, elementos centrales para la generación de energía y aprovechados por la industria en general. Asimismo, en el transporte de granos dentro de la industria agrícola, y el procesamiento de agentes químicos y medios granulares en las industrias farmacéutica, química y de alimentos, constituyen procesos fundamentales en dichos ámbitos.

En la naturaleza, por otra parte, se encuentran diversos ejemplos de fenómenos que involucran interacciones de gases con partículas. En este ámbito encontramos

problemas como la dispersión de polen, de polvos, de arenas, y de contaminantes, en la atmósfera y en la hidrosfera. La figura 1.1 ilustra dos casos particulares: una realización experimental de chorros de alta velocidad de material granular mezclado con aire, y un proceso natural representado por la erupción del volcán de Colima, México, ocurrida en 2018.

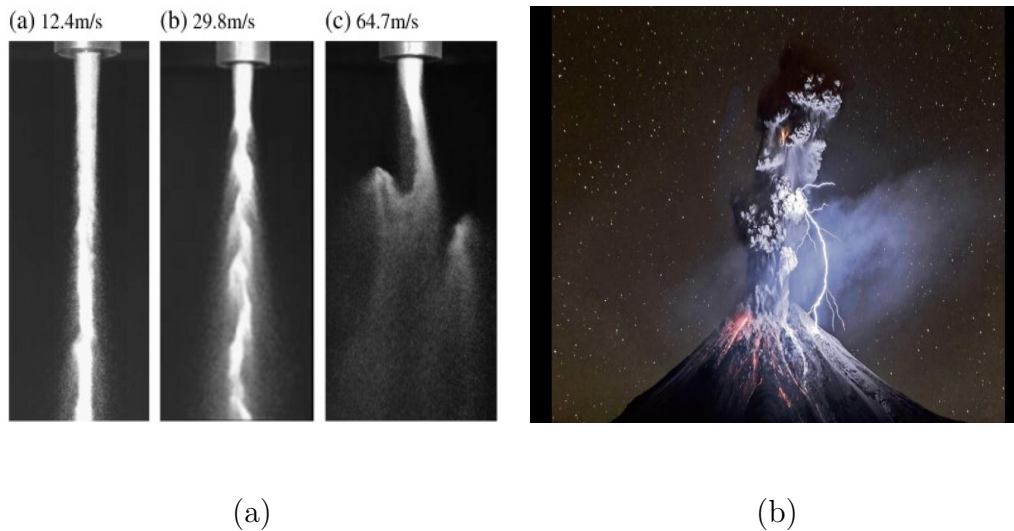


Figura 1.1: Dos extremos de flujos rápidos con mezclas gas-sólido: (a) Realización experimental de chorros granulares [21]. (b) Erupción del volcán de Colima, México (foto: Sergio Tapiro).

1.2. Motivación

Un caso que reviste una importancia especial en el ámbito nacional es el que concierne a la producción de gas metano en aguas profundas del Golfo de México. La configuración de un sistema típico de producción se ilustra en la figura 1.2a. La relevancia viene dada, entre otras cosas, por los enormes volúmenes de producción involucrados, por los costos asociados y, sobre todo, por los enormes problemas y retos técnicos asociados a su extracción.

En México se tiene una complejidad particular en estos procesos, porque los yacimientos sedimentarios usualmente están constituidos por rocas carbonatadas y areniscas no consolidadas. A causa de la fuerte caída de la presión que sucede durante la producción, el gas se expande rápidamente, creando un esfuerzo que separa dichas arenas. Como resultado de ello, la corriente de gas acarrea una cantidad muy significativa de partículas finas con distribuciones específicas de tamaño. A pesar de que las terminaciones de los pozos se diseñan previendo la instalación de cedazos y trampas (p. ej. ciclónicas) para retener estas partículas, en la práctica una parte de ellas no logra ser filtrada y fluye junto con el gas. Adicionalmente, una fracción finita de agua puede ser arrastrada desde los acuíferos colindantes.

Lo anterior conlleva una serie de procesos que merman la capacidad de producción y reducen la vida útil de las instalaciones. Por ejemplo, se presentan efectos de erosión exacerbada en algunos puntos del sistema de producción, depósitos en equipos y accesorios, etc. (Fig. 1.2b) Más importante, sin embargo, es el problema de la formación de hidratos de metano.

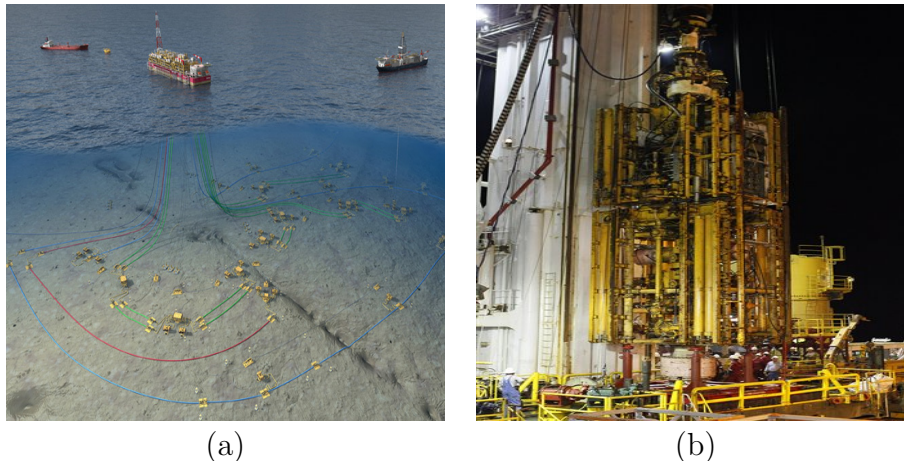


Figura 1.2: (a) Sistema de producción en aguas profundas. (b) Tren de válvulas para un sistema de producción en aguas profundas.

En presencia de agua, el gas metano puede dar lugar a la formación de estructuras moleculares muy estables, gracias a su regularidad geométrica, conocidas como caltratos. A partir de estas estructuras básicas, comienza el crecimiento de los cristales que conforman los hidratos de metano. Algunos especialistas en el tema, han externado la sospecha de que la presencia de los granos de arena y arcillas sirven como centros de nucleación para la formación de dichos hidratos; es decir, que su presencia incentiva la formación de hidratos de metano.

Tras su formación, los hidratos continúan fluyendo a lo largo del aparejo de producción. En ese trayecto pueden recorrer distancias que van de 1 a 3 kilómetros, incluso más dependiendo del sistema, de modo que los procesos dinámicos del flujo les llevan a formar agregados de partículas (Fig. 1.3a). Con un tiempo de residencia suficientemente elevado, el proceso de aglomeración eventualmente da lugar a la formación de grandes depósitos y tapones que pueden llegar a bloquear el conducto por completo. La fotografía de la figura 1.3b muestra una tubería bloqueada por un tapón.

Evidentemente, hay una importancia económica asociada a este fenómeno, y los riesgos inherentes a las operaciones de desbloqueo de las tuberías pueden tener consecuencias catastróficas.

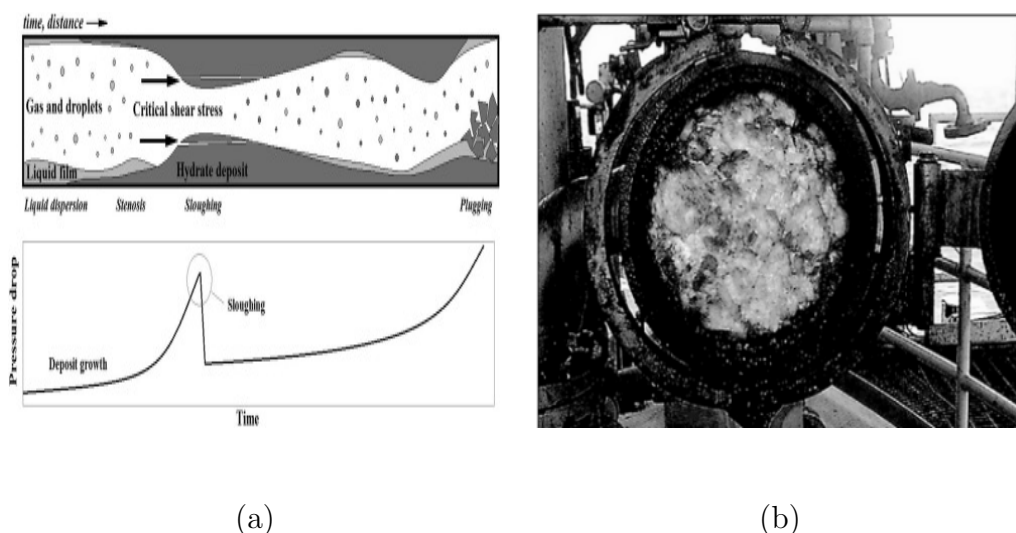


Figura 1.3: (a) Procesos de formación de hidratos de metano en presencia de agua. La figura muestra también el crecimiento de capas adheridas a la pared de la tubería su crecimiento como función del tiempo (ver, por ejemplo, [33] [6]). (b) Tapón formado por la aglomeración de hidratos de metano dentro de una tubería de Petrobras (Imagen tomada de Sloan, D. 2011) .

Claramente, los flujos que se establecen en dichos sistemas de producción, sobre todo en los pozos, conciernen a las mezclas de gases y sólidos. De acuerdo con algunos datos publicados (p. ej. [19] [8]), los flujos en los pozos pueden ingresar en el régimen compresible tenue. Bajo estas condiciones se puede asumir que dichos flujos ocurren en un régimen turbulento totalmente desarrollado.

1.3. Antecedentes

El estudio teórico de los flujos multifásicos requiere extender los conceptos y métodos que se emplean en el análisis de flujos de una sola fase [3]. Técnicamente esto implica considerar las leyes fundamentales de conservación, expresadas por medio de las ecuaciones de transporte, y el conjunto de relaciones constitutivas

que cierran el problema. En este sentido, se entiende que una fase está constituida por una sustancia con propiedades físicas y químicas que la distinguen de otras sustancias. Pueden haber, entonces, las siguientes dos situaciones: 1) que dos fases correspondan a dos estados de agregación diferentes de una misma sustancia, y 2) que dos fases correspondan a sustancias totalmente diferentes.

En principio, las leyes de conservación se aplican igualmente a cada una de las fases y el acoplamiento se da a través de condiciones de cierre. Por ejemplo, la formulación general para cualquiera de las ecuaciones macroscópicas de transporte adopta la forma [12]

$$\frac{d}{dt} \rho_k \psi_k + \nabla \cdot (\rho_k \psi_k \mathbf{u}_k) + \nabla \cdot \mathbf{J}_k - \rho_k \phi_k = 0.$$

La interacción entre las fases se manifiesta como un intercambio de masa, momento, energía, etc. a través de la interfase. Dicho intercambio se expresa por medio de las condiciones de *salto*

$$\sum_k \dot{m}_k \psi_k + \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{J}_k + \phi_I = 0.$$

Las cantidades ψ_k , $\mathbf{J}_k$, ϕ_k , y ϕ_I representan, respectivamente, a la propiedad específica que se transporta, al flujo y a los términos fuente (en la fase k y en la interfase I).

De acuerdo con lo anterior, el desarrollo de una formulación continua para el transporte de la entropía pasa por considerar la relación formal entre la energía y la entropía $U_i = U_i(S_i, v_i)$. De ella sigue que

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{1}{T_i} \frac{dU_i}{dt} + \frac{P}{T_i} \frac{dv_i}{dt},$$

donde se identifica a U_i como la energía interna, a T_i como la temperatura y a v_i como el volumen específico de la fase en cuestión [11].

Como es de esperar, este tipo de modelado encuentra serias complicaciones en muchas situaciones de interés. Por una parte las interfaces, que son tantas como los medios involucrados en el proceso, están cambiando constantemente. Por otro lado el intercambio de las propiedades (masa, momento, etc.) a través de las interfase puede ser muy complejo, y puede requerir modelos específicos para cada uno de los términos no homogéneos. También debe hacerse hincapié en que, aún para el flujo más simple posible, el número de variables y parámetros pasa de 5 en el caso monofásico, a 13 en el caso bifásico. Por supuesto el espacio paramétrico puede ser considerablemente mayor en los problemas más generales. Estas complicaciones han dado lugar a que las formulaciones rigurosas cedan el paso a las siguientes dos grandes tendencias de modelado: las formulaciones promediadas (que derivan en los balances locales instantáneos) y las formulaciones mecanicistas.

En el caso concreto de los flujos bifásicos dispersos, donde la fase discreta se distribuye en el seno de la fase continua, tales formulaciones suelen ser impracticables debido al elevado número de partículas involucradas en la mayoría de los casos. El flujo que nos ocupa es un claro ejemplo de esta categoría. Debido a esto se emplean formulaciones promediadas como una alternativa que simplifica el tratamiento. No obstante, prevalecen diversos obstáculos de difícil resolución. Por ejemplo, cuando la fase dispersa está formada por burbujas, o por gotas, las interfases se deforman y surgen los procesos de ruptura y coalescencia. En cambio, si la fase dispersa está constituida por partículas sólidas, se hacen muy relevantes otros grados de libertad y factores tales como: la esfericidad de las partículas, la geometría superficial, las distribuciones de tamaños, las propiedades físico-químicas, las rotaciones, etc.

En vista de las problemáticas expuestas, han surgido vertientes más sofisticadas de modelado y análisis. Éstas conciernen la aplicación de la teoría cinética de gases diluidos introducida y expandida por Maxwell y Boltzmann en el siglo XIX, y posteriormente continuada por Chapman y Enskog a principios del siglo XX [2]. En este sentido, la fase granular del flujo bifásico se trata como si fuera un gas de partículas macroscópicas con propiedades determinadas. Es importante señalar que, a diferencia de los gases moleculares y atómicos, los gases de partículas macroscópicas implican diferencias sutiles pero importantes. En especial se debe reconocer que las partículas macroscópicas convierten energía mecánica en energía térmica cuando ocurren las colisiones inelásticas. Esto cambia drásticamente el comportamiento colectivo del medio granular, dando lugar a procesos colectivos tales como la formación de aglomeraciones.

Los primeros esfuerzos para modelar flujos rápidos de granulares se apoyaron en el trabajo de Bangold [11], [3]. Bangold dedujo que la presión del gas granular es proporcional al cuadrado del gradiente de velocidades, al tamaño de las partículas y a la densidad de partículas. Inicialmente estos esfuerzos fueron de tipo empírico y heurístico. Después la vertiente teórica recibió un gran impulso en las décadas de los años ochenta y noventa. Entre los principales exponentes de la aplicación y desarrollo de la teoría se encuentran Savage y Jeffrey [16], y Jenkins y Savage [29]. A partir de entonces, autores como Gidaspow, Jackson, Sinclair, Pita, Sundarean, Lun y Savage, hicieron contribuciones importantes.

En particular el trabajo publicado por Lun et. al. en 1984 [23] muestra con mucha claridad los elementos centrales del tratamiento teórico de los medios granulares desde el punto de vista de la teoría cinética de gases. En forma resumida el programa de Lun et al. establece que [3], la temperatura de la fase granular se define a través de las componentes de la velocidad fluctuante $\mathbf{C}$ promediadas

sobre el ensamble (indicado por el símbolo $\langle \cdot \rangle$):

$$T = \frac{1}{3} (\langle C_1^2 \rangle + \langle C_2^2 \rangle + \langle C_3^2 \rangle).$$

Entonces, la ecuación de la energía se puede expresar en términos de esta temperatura como sigue

$$\frac{2}{3} \rho_s \alpha \frac{DT}{Dt} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \sigma_{ij} - \Gamma.$$

La manera en la que se modelan el flujo de calor q_i , el tensor de esfuerzos σ_{ij} , y la función de disipación Γ , difieren de un autor a otro. En la propuesta de Lun estas cantidades adoptan las siguientes formas: para el vector de flujo de calor granular se tiene que

$$q_i = -\rho_s D \left(g_3 T^{1/2} \frac{\partial T}{\partial x_i} + g_4 T^{3/2} \frac{\partial \alpha}{\partial x_i} \right),$$

mientras que el tensor de esfuerzos granulares viene dado por la expresión

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & \left(\rho_s g_1 T - \frac{4\pi^{1/2}}{3} \rho_s \alpha^2 (1 + \epsilon) g_0 T^{1/2} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \\ & - 2\rho_s D g_2 T^{1/2} \left(\frac{1}{2} (u_{ij} + u_{ji}) - \frac{1}{3} u_{kk} \delta_{ij} \right), \end{aligned}$$

y la función de disipación por

$$\Gamma = \frac{\rho_s g_5 T^{3/2}}{D}.$$

Por otra parte, la función de distribución radial de partículas es

$$g_0 = (1 - \alpha/\alpha^*)^{-2.5\alpha^*},$$

donde α^* es la fracción máxima de sólidos que pueden ser sometidos a corte. Las cantidades g_1, g_2, g_3, g_4 , y g_5 , son funciones únicamente de α , la fracción de partículas, y ϵ , el coeficiente de restitución. Sus formas funcionales explícitas pueden ser consultadas en [23] y [3]. Aquí solamente se señala que para ciertos tipos de flujos las expresiones se simplifican enormemente; por ejemplo en flujos planos tipo Couette.

Uno de los problemas más complejos de modelar es de las interacciones partícula-partícula y partícula-gas. Este último tipo de interacción es el dominante y por tal motivo ha merecido mucho la atención de diversos investigadores. Los modelos más conocidos para el arrastre son los propuestos por Gidaspow, Syamlal O'Brien y Hill Koch Ladd [24]. De los mencionados, el modelo de Hill Koch Ladd se obtiene a partir de simulaciones numéricas a diferencia de los otros que tienen un sustento experimental.

Asimismo, se puede mencionar el trabajo de Sinclair y Jackson (1989) [31], en el cual se considera un flujo completamente desarrollado e interacciones por colisiones entre partículas. Sinclair y Jackson hacen notar que las velocidades del fluido y las partículas tienen componentes locales promediadas y aleatorias, y que son precisamente las interacciones entre la parte fluctuante y la parte promedio de su movimiento las que generan esfuerzos en el medio.

Pita y Sudaresan, tres años más tarde, resuelven computacionalmente el modelo propuesto por Sinclair y Jackson y realizan una comparación con resultados experimentales [26]. Las relaciones constitutivas que usan las retoman de los trabajos de Lun y Savage, así como los de Ding y Gidaspow. Pita y Sudaresan confirmaron que al considerar las colisiones entre partículas como elásticas, surgen importantes discrepancias entre la predicción teórica y la realidad experimental.

Finalmente cabe comentar que los trabajos numéricos orientados a resolver las ecuaciones (dinámica computacional de fluidos) se dividen en dos enfoques principales: el enfoque Euleriano-Lagrangiano y el enfoque Euleriano-Euleriano. En el primero las ecuaciones se resuelven para cada partícula de los fluidos, mientras el segundo considera las dos fases como continuos. Los sistemas de ecuaciones en ambos casos se cierran usando las relaciones constitutivas propuestas por los autores mencionados en esta sección, con correcciones propias a cada caso de estudio.

1.4. Consideraciones preliminares

La razón fundamental para abordar el problema propuesto desde el punto de vista cinético es la rapidez del proceso de flujo y sus detalles. En estos casos coexisten múltiples escalas de tiempo, y el tratamiento mesoscópico en el que la escala de tiempo del flujo está más próxima a la escala de tiempo de relajación del medio granular sugiere adoptar un punto de vista estadístico. De esta forma los procesos rápidos pueden ser calculados mediante derivaciones de funciones de distribución que están muy próximas a sus formas de equilibrio.

Cabe reconocer que las ecuaciones cinéticas pueden ser derivadas de la ecuación para la entropía, aunque esta vía no es usual. De hecho, la ecuación de Boltzmann misma puede ser derivada de una expresión para la producción de la entropía, previo conocimiento detallado de las interacciones binarias entre partículas [34].

Con el objeto de desarrollar la ecuación de transporte para la entropía del flujo bifásico considerado, se toma como punto de partida el trabajo de Lun et. al. publicado en 2003 [22]. En esencia se considera a la fase granular como un gas de partículas macroscópicas inmersas en otro gas microscópico, el cual se trata

separado como un medio continuo, y se procede a desarrollar la ecuación de evolución para una propiedad arbitraria aplicando los conceptos de la teoría cinética de gases.

El tratamiento expuesto permite, en principio, estudiar flujos de gases con partículas dispersas en el régimen diluido. Para efectos de modelado se considera una corrección a las contribuciones debidas a las interacciones gas-partícula y partícula-partícula, cuya expresión se da a través de la integral de colisión. Dichas contribuciones constituyen, en última instancia, los términos fuente que representan la producción local de entropía debida a ambos tipos de interacción.

El flujo considerado está confinado dentro de una tubería vertical de sección transversal circular. Éste se produce por el desplazamiento de una masa de aire a una velocidad relativamente elevada, de modo que el régimen de flujo es turbulento (Figura 1.4). Esta corriente de aire contiene una fracción volumétrica finita de partículas esféricas. Como primera aproximación orientada a simplificar los procedimientos matemáticos se asume que el gas granular es monodisperso, es decir, que todas las partículas tienen el mismo tamaño.

Asimismo, se supone que las interacciones entre partículas se dan por efecto de colisiones binarias elásticas. En otras palabras, únicamente participan dos partículas en cada colisión y no existe correlación entre ellas previa a la colisión. Según se deduce de las observaciones experimentales y de las simulaciones numéricas, la aproximación de esferas rígidas es adecuada en regímenes de flujo elevados y diluidos [3]. En las interacciones que existen entre el gas y las partículas, domina el régimen inercial. Esto significa que las fuerzas de arrastre son importantes. La figura 1.4 esquematiza las características del sistema de flujo.

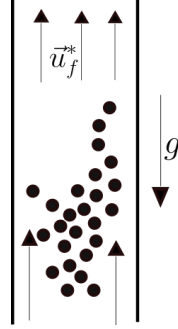


Figura 1.4: Esquema del proceso de flujo analizado.

Con el objeto de realizar una primera evaluación de la ecuación de transporte derivada, se desprecian las interacciones partícula-partícula. Lo anterior es válido en el régimen diluido, que es el que se verifica en el experimento con el que se valida el modelo. Es importante mencionar, que la ecuación se evalúa en un dominio de dos dimensiones (2-D) que corresponde al plano focal donde se realiza la medición experimental de las velocidades granulares.

1.5. Objetivos

El objetivo general del trabajo es presentar un sistema completo de ecuaciones de transporte para estudiar el flujo de mezclas de gases con partículas. El objetivo particular, es derivar una ecuación de transporte conjugada para la entropía de la mezcla. Cabe comentar que, hasta donde se ha podido averiguar, dicha ecuación no ha sido reportada en la literatura científica disponible.

El alcance del trabajo incluye la evaluación de la entropía correspondiente a la fase granular con los datos experimentales disponibles. Esto permitirá hacer una primera estimación de las variaciones de la entropía en las condiciones de flujo que interesa investigar.

Como hipótesis de trabajo se plantea lo siguiente: la entropía de la fase granular contribuye relativamente poco al incremento de la entropía general del flujo bifásico, debido principalmente a que la temperatura granular se mantiene relativamente baja durante el flujo.

Marco Teórico

En el año 2003 Lun C.K. y Savage S.B. [22] publicaron un artículo en el que se desarrollan las ecuaciones que describen flujos inerciales de suspensiones turbulentas compuestas por dos fases: una sólida y otra gaseosa. Se llega a un conjunto de ecuaciones para ambas fases. Como se mencionó anteriormente el modelo realiza un planteamiento estadístico para llegar a las ecuaciones de transporte de la fase sólida. Para la fase gaseosa primero se consideran las ecuaciones que describen el fluido completo conformado por ambas fases, dadas por la teoría de mezclado. Por lo anterior, en este capítulo se presentan las ideas principales de la de la física estadística así como de la teoría de mezclado. Estos conceptos serán usados más adelante para desarrollar las ecuaciones de transporte que describen el fenómeno.

2.1. Funciones de distribución

Cuando el resultado de un experimento no puede ser determinado de forma exacta, aún las condiciones de éste se mantengan lo más similar posible, se tiene que recurrir a probabilidades. Cada que se realiza un experimento se obtiene un sólo resultado, a esto se le llama evento simple. Si se realiza un experimento N veces, y vemos que un evento i ocurre n_i veces, podemos obtener la frecuencia

con la que se repite dicho evento

$$F_i = \frac{n_i}{N}. \quad (2.1)$$

La frecuencia es, por lo general, diferente para distintos grupos de experimentos (la repetición de N experimentos). Lo que se quiere es eliminar la dependencia de la frecuencia del número de experimentos. Si suponemos que el experimento se realiza siempre de la misma forma y se realizan varios experimentos, de tal manera que N sea extremadamente grande, equivale a quitar tal dependencia. Con lo anterior la frecuencia tenderá a un valor límite, al que se conoce como probabilidad. La probabilidad de que suceda un evento i está dada por

$$P_i = \lim_{N \rightarrow \infty} F_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_i(N)}{N}. \quad (2.2)$$

Lo que tenemos entonces es una colección de N sistemas idénticos, en el sentido de que no se pueden distinguir los sistemas uno del otro. A la colección de estos sistemas se le conoce como ensamble. Lo anterior se puede ver equivalentemente como haber realizado un experimento en cada miembro del ensamble [15]. La probabilidad debe cumplir con dos propiedades

$$P_i \geq 0 \quad \text{y} \quad \sum_i P_i = 1. \quad (2.3)$$

Supongamos que tenemos un experimento con s eventos simples, cada uno con su probabilidad asociada. Tenemos entonces que la probabilidad depende de que evento s tomemos, es decir $P(s)$, la cual se le conoce como función de distribución de la probabilidad. La función $P(s)$ establece la forma en la que se distribuye la probabilidad sobre los eventos s .

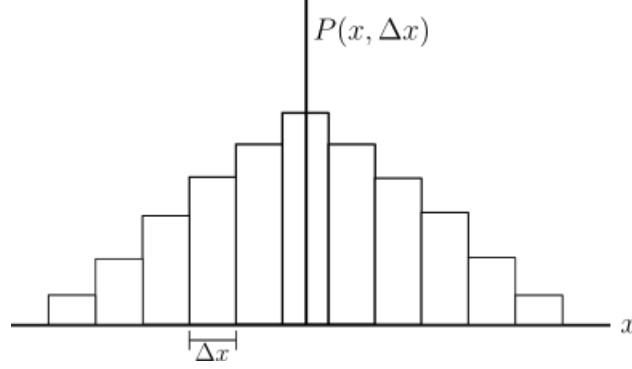


Figura 2.1: Registro a manera de histograma de las partículas que golpean la pantalla.

En un caso más general, podemos tener un experimento en el que se tenga un rango de eventos posibles. Tomemos por ejemplo un gas que escapa de un contenedor para el cual queremos conocer la probabilidad de que un átomo que salió vaya en cierta dirección [15]. Para esto, se ubica una pantalla fluorescente que se ilumina cada que un átomo la golpea. Los átomos pueden golpear cualquier parte de la pantalla. Para poder llevar un registro de los átomos lo que se hace es dividir la pantalla en franjas de ancho Δx , de forma que cuando un átomo golpee la división se sabrá por dónde paso y se puede contar. Cada franja corresponde a un evento posible, por lo que entonces tenemos un rango de eventos posibles. Haciendo lo anterior se tiene un número de golpes por franja, al que dividido por el total de átomos detectados en toda la pantalla corresponde a la probabilidad (o frecuencia) de que un átomo llegue a dicha franja (Figura 2.1).

Si el número de átomos totales aumenta, tendremos la probabilidad de cada evento usando la definición dada por la ecuación (2.2). Si las franjas se hicieran cada vez más delgadas, se podría conocer con más detalle el fenómeno, pero a su vez la probabilidad de que un átomo golpee una franja se reduciría, tendiendo a

cero en un caso crítico. Esto se considera formalmente como

$$f(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{P(x, \Delta x)}{\Delta x}, \quad f(x)dx = P(x, dx). \quad (2.4)$$

A $f(x)$ se le conoce como función de distribución de probabilidades o función de distribución (Figura 2.2). Esta idea se puede extender a más de un evento, que en el ejemplo podría corresponder a determinar la probabilidad de que un átomo caiga entre dos puntos x y y . Así, en lugar de una franja en donde las partículas colisionan, tenemos un área en donde pueden ubicarse. La probabilidad sería entonces dada por

$$P(x, y, dx, dy) = f(x, y)dx dy. \quad (2.5)$$

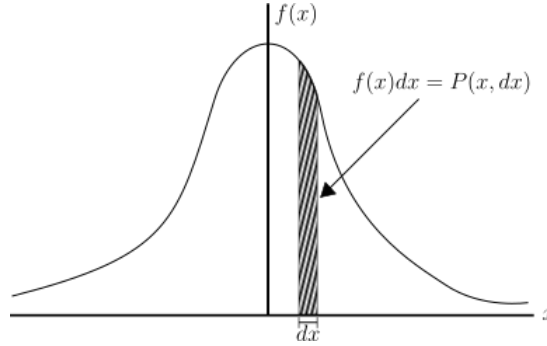


Figura 2.2: Función de distribución de probabilidad.

2.2. Transporte irreversible

Durante el proceso de flujo, el medio granular evoluciona de manera irreversible. Desde el punto de vista mesoscópico dicha evolución se da en términos del tiempo de relajación característico para la duración de las interacciones (colisio-

nes) entre partículas $\tau = r_o/c$, que es más rápido que la correspondiente escala de tiempo hidrodinámica $t = L/u$ (escala macroscópica). La cantidad r_o es el radio de colisión, λ la trayectoria libre media, L la longitud característica, $\vec{c}$ la velocidad térmica media de las partículas, y $\vec{u} \sim \vec{c}$ es la velocidad local del sonido. Como $r_o \ll \lambda \ll L$, entonces $\tau \ll t_k \ll t$, en el que t_k claramente corresponde al tiempo promedio entre colisiones. En este contexto, el régimen cinético es el que está próximo al estado de equilibrio, y los procesos irreversibles que sufre el medio granular son bien descritos por ecuaciones cinéticas.

Las ecuaciones cinéticas, a su vez, determinan la evolución de la distribución de probabilidad del ensamble de partículas [34], [11]. Sigue que las propiedades del fluido se obtienen a partir de las soluciones de las ecuaciones cinéticas.

El teorema de Liouville determina la evolución de la función de distribución de velocidades del medio granular $f(\vec{r}, \vec{u}; t)$ cuando es para un solo un componente. En presencia de una fuerza macroscópica externa $\vec{F}$ capaz de cambiar el estado de movimiento de las partículas, la variación total de la distribución de velocidades con respecto al tiempo, en el marco de referencia de las partículas, está dada por

$$Df = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{u} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{u}}. \quad (2.6)$$

En esta expresión f es la distribución de velocidades, $\vec{u}$ las velocidades de las partículas, y $\vec{r}$ las posiciones de las partículas. Conforme el flujo desplaza al número de partículas $f d\mu$ contenidas dentro del volumen elemental $d\mu$, la variación total de f debe ser equilibrada por la tasa de cambio en f relacionada con la dispersión de partículas, hacia adentro y afuera del volumen, a causa de la colisiones

$$Df = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c. \quad (2.7)$$

Aquí es importante hacer notar que el primer miembro de la ecuación representa cambios asociados a efectos macroscópicos, mientras que el segundo miembro se debe a efectos puramente microscópicos. Obviamente las colisiones entre partículas son irreversibles, de modo que $(\frac{\partial f}{\partial t})_c$ es el término que efectivamente da cuenta de la irreversibilidad en la evolución. Cuando el medio granular fluye en el régimen diluido, como en el presente caso, las interacciones son de corto alcance y la distinción entre los dos términos es adecuada. Evidentemente, el problema que queda es el de establecer la forma funcional de $(\frac{\partial f}{\partial t})_c$.

Cabe mencionar que el teorema de Liouville constituye el medio a través del cual es posible establecer las características del transporte para cualquier propiedad $\phi_i = \phi_i(\vec{r}, \vec{u}, t)$. Tomando en consideración los momentos señalados en la sección anterior se puede demostrar que [34]

$$\frac{\partial n\bar{\phi}}{\partial t} + \nabla \cdot (n\vec{v}\bar{\phi} + n\vec{c}\bar{\phi}) + n\vec{F} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \vec{u}} = \int \phi \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c d\vec{u}. \quad (2.8)$$

Este resultado contiene explícitamente los términos de la velocidad promedio y sus fluctuaciones, es decir, $\vec{u} = \vec{v} + \vec{c}$.

En 1872 Boltzmann dio a conocer la forma funcional del segundo miembro en (2.7) con base en los detalles de las colisiones binarias. Esta integral de colisión fue derivada bajo el supuesto de que las partículas involucradas no están correlacionadas en el espacio de velocidades, lo cual significa que las partículas no tienen dependencia alguna antes de la colisión. Sigue que la probabilidad de que una partícula colisione con otra es proporcional al producto de las funciones de distribución para una sola partícula ($f^{(i)}$) dado por $f^{(1)}f^{(2)}$. El supuesto de que la probabilidad conjunta no esté sujeta a correlaciones preexistentes es conocido con el nombre de hipótesis del caos molecular (concepto introducido por Boltzmann).

Para ser concretos, y como preámbulo al desarrollo propuesto, delineamos aquí el planteamiento de Boltzmann (los detalles se pueden consultar en [2], [11] y [34]). Considérense colisiones entre partículas de distintas clases en el régimen diluido, tal que

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = \sum C_{ij} = \sum C(f^{(i)}, f^{(j)}), \quad (2.9)$$

con $C_{ij} = C(f^{(i)}, f^{(j)})$ indicando las contribuciones causadas por colisiones entre partículas de las clases i y j . Las partículas se aproximan con una velocidad relativa

$$\vec{u}_i - \vec{u}_j = g_{ij} \vec{k}_{ij}$$

antes de la colisión, y se alejan con velocidad relativa

$$\vec{u}'_i - \vec{u}'_j = g'_{ij} \vec{k}'_{ij}$$

después de la colisión. Los vectores unitarios $\vec{k}_{ij}$ y $\vec{k}'_{ij}$ indican ambas direcciones. De igual forma, las velocidades de los centros de masa, antes y después de la colisión, están dadas por

$$M_i \vec{u}_i - M_j \vec{u}_j = \vec{G}_{ij}$$

y

$$M_i \vec{u}'_i - M_j \vec{u}'_j = \vec{G}'_{ij},$$

donde la $M_i = m_i/(m_i + m_j)$ y $M_j = m_j/(m_i + m_j)$. Por conservación de momento lineal y de energía, la colisión es simétrica, y por tanto

$$g_{ij} = g'_{ij} \quad \text{y} \quad \vec{G}_{ij} = \vec{G}'_{ij}.$$

Ahora, $g_{ij} f^{(i)} d\vec{u}_i$ es el número de partículas que se aproximan a la partícula j por unidad de tiempo, a través del cono de ángulo sólido $d\vec{k}_{ij}$. Dado que hay un número $f^{(j)} d\vec{u}_j d\vec{r}$ en el elemento de espacio fase $d\vec{u} d\vec{r}$, la tasa total de colisiones

está dada por

$$f^{(i)} f^{(j)} g_{ij} d\vec{u}_i d\vec{u}_j d\vec{r}.$$

Por otra parte, la trayectoria de dispersión después de la colisión $\vec{k}'_{ij}$ puede tener cualquier orientación. La probabilidad de que la colisión cambie la dirección $\vec{k}_{ij}$ (contenida en la sección de dispersión cónica definida por $d\vec{k}_{ij}$) a $\vec{k}'_{ij}$ (contenida en la sección de dispersión cónica definida por $d\vec{k}'_{ij}$) está dada por

$$W(\vec{k}_{ij}|\vec{k}'_{ij}; g'_{ij}) d\vec{k}_{ij}.$$

Por lo tanto, el número de partículas que abandona el elemento $d\vec{u}_i d\vec{r}$ debido a colisiones con partículas j tal que $\vec{u}_j$ y $\vec{k}'_{ij}$ se encuentran en los intervalos $d\vec{u}_j$ y $d\vec{k}'_{ij}$ es

$$d\vec{u}_i d\vec{r} [f^{(i)} f^{(j)} g_{ij} W(\vec{k}_{ij}|\vec{k}'_{ij}; g'_{ij}) d\vec{k}'_{ij} d\vec{u}_j],$$

y el número total de partículas perdidas por unidad de tiempo para todas las velocidades y todas las direcciones es

$$d\vec{u}_i d\vec{r} \iint f^{(i)} f^{(j)} g_{ij} W(\vec{k}_{ij}|\vec{k}'_{ij}; g'_{ij}) d\vec{k}'_{ij} d\vec{u}_j. \quad (2.10)$$

De la misma forma pueden producirse colisiones que hacen ingresar partículas i al elemento de volumen $d\vec{u}_i d\vec{r}$ cuando $-\vec{u}'_i \rightarrow \vec{u}_i$. Por consiguiente

$$d\vec{u}'_i d\vec{r} \iint f^{(i)'} f^{(j)'} g'_{ij} W(-\vec{k}'_{ij}|\vec{k}_{ij}; g_{ij}) d\vec{k}_{ij} d\vec{u}_j. \quad (2.11)$$

La simetría de las colisiones implica que las ecuaciones son invariantes frente a inversiones temporales ($t \rightarrow -t$), por lo cual las secciones eficaces de dispersión se mantienen inalteradas. Adicionalmente, como las fuerzas de interacción son centrales (e.g. tipo Coulomb) también hay simetría con respecto a la inversión de

coordenadas. Se concluye, entonces, que

$$W(\vec{k}_{ij}|\vec{k}'_{ij}; g_{ij}) = W(-\vec{k}'_{ij}|\vec{k}_{ij}; g_{ij}) = W(\vec{k}'_{ij}|\vec{k}_{ij}; g_{ij}).$$

Estas consideraciones permiten combinar las expresiones (2.10) y (2.11) en la forma $d\vec{u}_i d\vec{r} C(f^{(i)}, f^{(j)})$, donde

$$C(f^{(i)}, f^{(j)}) = \iint (f^{(i)'} f^{(j)'} - f^{(i)} f^{(j)}) g_{ij} W(\vec{k}_{ij}|\vec{k}'_{ij}; g_{ij}) d\vec{k}'_{ij} d\vec{u}_j \quad (2.12)$$

es la integral de colisión de Boltzmann. La ecuación integro-diferencial que resulta cuando se incorpora este funcional en (2.7) es la célebre ecuación de Boltzmann.

Como se mencionó anteriormente, la dificultad técnica estriba en resolver la integral de colisión. Por esta razón se han desarrollado diversas aproximaciones útiles que permiten realizar una integración simplificada. El esquema más sencillo se refiere al modelo de relajación propuesto por Bathnagar, Gross y Krook en 1954. Considerando únicamente interacciones binarias entre partículas de una sola clase i se tiene

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \sum C_j, \quad (2.13)$$

donde C_j representa las contribuciones debidas a las colisiones indicadas. En vista de que el régimen está cercano al estado estacionario, la discrepancia entre la distribución del estado actual con respecto a la distribución de equilibrio es

$$\frac{f - f^{eq}}{f^{eq}} \ll 1. \quad (2.14)$$

Esto permite hacer la aproximación BGK como sigue

$$Df = \sum_j C_j = \sum_j \nu_j (f_j^{eq} - f_j), \quad (2.15)$$

donde ν_j es la frecuencia de colisiones. De la misma manera se pueden considerar colisiones binarias entre partículas i y j de un sistema de dos o más componentes, en cuyo caso se tiene

$$D_i f_i = \sum_j C_{ij} = \sum_j \nu_{ij} (f_j^{eq} - f_j). \quad (2.16)$$

Es importante señalar que esta aproximación es muy útil para realizar los cálculos de la tasa de producción de entropía. Sin embargo, los trabajos más recientes superan el modelo BGK en función del número de detalles relacionados con las colisiones.

El modelo de Fokker-Planck permite abordar detalles desde una perspectiva más amplia. Para un solo componente

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = - \frac{\partial}{\partial \vec{u}} \cdot \vec{J}, \quad (2.17)$$

con $\vec{J}$ representando en este caso al término de flujo. Este término de colisión se puede desarrollar, vía un desarrollo de Taylor a segundo orden, como sigue

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = - \frac{\partial}{\partial \vec{u}} \cdot (\vec{A}f) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \vec{u} \partial \vec{u}} : (\vec{B}f). \quad (2.18)$$

En la sección 3.2 se establecen los detalles del vector $\vec{A}$ y del tensor $\vec{B}$ para el caso que nos ocupa.

Es especialmente importante observar que la formulación de Fokker-Planck puede ser extendida de inmediato para tomar en cuenta interacciones distantes; por ejemplo, en el caso en el que se tienen partículas cargadas eléctricamente. Aquí se recurre a este mismo esquema con el propósito incluir las perturbaciones

del campo debido a la presencia de otras partículas con las que no necesariamente se producen colisiones. Estas interacciones se denotan como interacciones sólido-gas. Debe considerarse ahora que la distribución de velocidades f se modifica en función de dichas interacciones. La forma en la que sucede el cambio está dictado por la probabilidad de transición $P(\vec{u}/\Delta\vec{u})$ de que la partícula cambie su velocidad en $\Delta\vec{u}$ en un cierto tiempo Δt . Es decir

$$f(\vec{u}, t) = \int f(\vec{u} - \Delta\vec{u}, t - \Delta t) P(\vec{u} - \Delta\vec{u}|\Delta\vec{u}) d(\Delta\vec{u}). \quad (2.19)$$

La cantidad $\Delta\vec{u}$ representa los cambios acumulativos en la velocidad. Estos cambios se mantienen pequeños en comparación con la velocidad media. La forma de los tensores de Fokker-Plank está dada por [34]

$$\vec{A} = \frac{\langle \Delta\vec{u} \rangle}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int \Delta\vec{u} P(\vec{u}|\Delta\vec{u}) d(\Delta\vec{u}), \quad (2.20)$$

y

$$\vec{B} = \frac{\langle \Delta\vec{u} \Delta\vec{u} \rangle}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int \Delta\vec{u} \Delta\vec{u} P(\vec{u}|\Delta\vec{u}) d(\Delta\vec{u}). \quad (2.21)$$

Estas expresiones se detallan más adelante en el marco del desarrollo de la ecuación de transporte para la entropía (sección 3.2).

Flujos isentrópicos

Con el fin de establecer claramente lo que significa que el medio granular evolucione fuera del equilibrio, contrastamos brevemente con caso límite en el que dicho sistema alcanza un estado de equilibrio. Consideremos nuevamente la ecuación de Boltzmann

$$Df^{(i)} = \iint (f^{(i)'} f^{(j)'} - f^{(i)} f^{(j)}) g_{ij} W(\vec{k}_{ij}|\vec{k}_{ij}'; g_{ij}) d\vec{k}_{ij}' d\vec{u}_j.$$

En el régimen isentrópico la integral de colisión se desvanece

$$\left(\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} \right)_c = 0$$

de forma que $Df^{(i)} = 0$, es decir,

$$\frac{\partial f^{(i)}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \frac{\partial f^{(i)}}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f^{(i)}}{\partial \vec{u}} = 0.$$

Esto implica, en otras palabras, que la evolución del medio granular en el flujo queda sujeta puramente a efectos macroscópicos de tipo reversible. Aunque no se ha insistido mucho en ello, es indispensable reconocer que la integral de colisión representa, en efecto, los términos de producción de entropía. Una forma de ver con claridad lo dicho, es invocando al teorema H de Boltzmann

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{k} \int s \, dr \leq 0,$$

cuya esencia es equivalente al principio macroscópico postulado por Clausius en 1854. En este caso la entropía está dada por (p. ej. [34])

$$s = -k \sum \iiint \ln f^{(i)}(f^{(i)'} f^{(j)'} - f^{(i)} f^{(j)}) g_{ij} W(\vec{k}_{ij} | \vec{k}_{ij}'; g_{ij}) d\vec{k}_{ij}' d\vec{u}_j d\vec{u}_i,$$

donde $k = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K es la constante de Boltzmann. La cantidad s solamente puede hacerse cero cuando $f^{(i)'} f^{(j)'} = f^{(i)} f^{(j)}$, implicando ello la condición de equilibrio. Bajo estas circunstancias

$$Df^{(i)} \rightarrow Df^{eq} = 0,$$

en la que f^{eq} representa a la distribución de equilibrio de Maxwell.

Se concluye entonces, que la integral de colisión define completamente el proceso de incremento (producción) irreversible de la entropía a nivel cinético, y que fuera del equilibrio la distribución no puede ser la de Maxwell. Se postula entonces que la función apropiada para el proceso de flujo difiere en alguna medida de esta última

$$f = f^{eq}(1 - \phi), \quad \phi \ll 1.$$

La forma de la función ϕ puede ser determinada a partir de la relación anterior y de las expresiones para Df que ya se discutieron. Por ejemplo, en la aproximación BGK se tiene que $\phi = -t_k D \ln f^{eq}$, de la que se obtiene

$$\phi = -t_k \left[\left(\frac{mc^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) \vec{c} \cdot \nabla \ln T + \frac{m}{kT} \vec{c} \vec{c} : \nabla \vec{v} \right].$$

Las cantidades que aparecen tienen el significado usual, y $\vec{c}\vec{c}$ es un tensor de segundo orden sin traza.

2.3. Teoría de mezclado

La clasificación de los flujos bifásicos, siguiendo a Ishii [14], puede hacerse según las fases presentes en la mezcla o bien con base en las estructuras en la interfase así como su distribución. La primera clasificación resulta sencilla considerando sólo tres estados de la materia; los tipos de mezcla son entonces:

- Gas-sólido
- Gas-líquido
- Líquido-sólido
- Líquidos inmiscibles

La mezcla entre líquidos inmiscibles no está compuesta por dos fases, pero para fines prácticos se puede trabajar como tal.

Dado que el cambio de las interfases se da de forma continua, la clasificación a partir de las estructuras presentes en la mezcla es más complicada. Son tres clases posibles para los flujos bifásicos a partir de la geometría de las interfases: flujo separado, de transición o mezclado, y flujo disperso. Estos a su vez tienen subclases. Los flujos separados incluyen películas y flujos estratificados, así como regímenes anulares y chorros. La clase de flujos dispersos se clasifica dependiendo la fase en la que esté la parte dispersa, con lo que se tienen: flujo de burbujas, gotas o vapor, y de partículas. Los flujos de transición o mezclado, se da cuando hay tanto flujos separados como dispersos, y se pueden dividir de acuerdo a las fases presentes en la dispersión.

Como se había mencionado antes, los problemas que involucran tener más de una fase se caracterizan por la presencia de varias interfases que separan los componentes. Si se usa la teoría de medio continuo, se tendría que considerar un campo dividido en regiones de una sola fase con fronteras cambiantes. Se llegarían así a las ecuaciones de transporte para cada fase, siendo necesarias las condiciones de frontera y continuidad apropiadas. Bajo ese razonamiento, el problema queda formulado en términos de variables instantáneas locales. Los problemas que se presentan al tratar de ésta forma a los sistemas bifásicos son: la existencia de múltiples interfases deformables cuyo movimiento es desconocido; el surgimiento de fluctuaciones de las variables debido a la presencia de turbulencia y el movimiento de las interfases; y la existencia de discontinuidades en las propiedades cuando se está sobre la interfaz.

Lo anterior hace que resolver las ecuaciones instantáneas sea algo virtualmente imposible. La forma en que se abordan entonces estos problemas es promediando

las ecuaciones a resolver, con los que se pueden despreciar las fluctuaciones instantáneas. Las formas de promediar se pueden dividir en tres grupos: Euleriano, Lagrangiano, y estadístico de Boltzmann. Estos a su vez tienen subdivisiones dependiendo de la variable por la cual se esté promediando.

La idea principal del promedio Euleriano, es que las coordenadas espaciales y temporales se consideran como variables independientes, que es el tratamiento estándar para obtener las ecuaciones de la mecánica de medio continuo. Al tratarse de operadores integrales, el efecto de realizar el promedio a las variaciones instantáneas o locales es que éstas se suavizan en el dominio de interés. El promediado Lagrangiano, que se realiza en el marco de la descripción Lagrangiana, está relacionado con la dinámica de las partículas de forma individual.

Cuando tenemos partículas involucradas en la dinámica de un fluido, cuantas más haya más será la influencia que tengan sobre el fenómeno. Para éstos casos es que se usa el promediado estadístico de Boltzmann. La forma en que esto se hace es escribiendo una ecuación de balance para la función de densidad de partícula, llamada ecuación de Boltzmann. Este tipo de promediado es el que se usa en el presente trabajo para las correcciones de las ecuaciones de la fase granular.

Aparte de los grupos anteriormente mencionados, los promediados se pueden dividir según el operador con el cual se realice:

(I) Promedio Euleriano

Función: $F = F(t, \vec{x})$

Promedio temporal: $\frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta} F(t, \vec{x}) dt$

Promedio volumétrico: $\frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} F(t, \vec{x}) dV$

(II) Promedio Lagrangiano

Función: $F(t, \vec{X}); \vec{X} = \vec{X}(\vec{x}, t)$

Promedio temporal: $\frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} F(t, \vec{X}) dt$

Promedio volumétrico: $\frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} F(t, \vec{X}) dV$

Independientemente del tipo de promediado, cuando se hace temporalmente podemos definir reglas de promediado, (como aparecen en [18], corroboradas por el autor) donde las barras indican que se habla del valor promedio:

1. $\bar{\bar{a}} = \bar{a}$
2. $\bar{a'} = 0$
3. $\overline{ka} = k\bar{a}$ con k constante.
4. $\overline{a+b} = \bar{a} + \bar{b}$
5. $\overline{ab} = \bar{a}\bar{b} + \overline{a'b'}$
6. $\overline{abc} = \bar{a}\bar{b}\bar{c} + \overline{ab'c'} + \overline{ba'c'} + \overline{ca'b'} + \overline{a'b'c'}$
7. $\overline{abcd} = \bar{a}\bar{b}\bar{c}\bar{d} + \overline{d\bar{c}a'b'} + \overline{b\bar{d}a'c'} + \overline{d\bar{a}b'c'} + \overline{da'b'c'} + \overline{b\bar{c}a'd'} + \overline{a\bar{c}b'd'} + \overline{c\bar{a}b'd'} + \overline{b\bar{a}c'd'} + \overline{ba'c'd'} + \overline{a\bar{b}c'd'} + \overline{a'b'c'd'}$
8. $\frac{\overline{\partial a}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{a}}{\partial x_i}$
9. $\left(\frac{\partial a}{\partial x_i} \right)' = \frac{\partial a'_i}{\partial x_i}$

Ecuaciones para la fase granular

Las ecuaciones que describen la dinámica de la fase granular se desarrollan con base en los conceptos presentados en el capítulo anterior. Primero se establecen las consideraciones principales para la fase sólida. Inmediatamente se llega a la ecuación “maestra” de transporte, denominada así ya que se obtiene una expresión general al usar el ensamble promedio para cualquier propiedad del granular. Se cierra el capítulo presentando las ecuaciones de transporte de masa, momento, energía cinética, y entropía.

3.1. Consideraciones de modelado

La transferencia de energía y momento en un fluido con partículas inmersas, se da de varias formas: la fuerza de gravedad, esfuerzos entre partículas y fluido, y las fuerzas generadas por el fluido mismo. En este caso el fluido continuo, que es el aire, es turbulento, con o sin la presencia de partículas. El número de Reynolds del sistema, con una longitud característica esta dado por $Re_L = u_{fm}L/\nu_f$, donde u_{fm} y ν_f son la velocidad media y su viscosidad cinemática, respectivamente. La fuerza predominante para la interacción entre partículas y el fluido es la de arrastre, por lo que no se toman en cuenta las fuerzas de sustentación y otras debidas a rotaciones de las partículas. Del primer aspecto, surge el problema de

las condiciones de continuidad en las interfaces, que con las fluctuaciones obligan a usar tratamientos estadísticos. Es importante señalar que las discontinuidades introducen cambios drásticos espaciales y temporales de las variables.

Las variaciones de la fuerza de arrastre para el Reynolds particular de una partícula esférica de diámetro $\tilde{d}$ esta dada por

$$\vec{f} = \tau_d^{-1}(\vec{u}_f^* - \vec{c}), \quad (3.1)$$

donde $\vec{u}_f^*$ es la velocidad de aproximación del gas a la partícula, $\vec{c}$ es la velocidad de la partícula, τ_d es el tiempo de relajación de arrastre $\tau_d = \tau_v/(a_0 Re_p^\gamma)$, el cual depende del tiempo de relajación viscoso, y Re_p es el número de Reynolds para la partícula dado por $Re_p = \rho_f \tilde{d} |\vec{u}_f^* - \vec{c}| / \mu_f$, con ρ_f la densidad del fluido. Los valores constantes a_o y γ , están determinados por los cambios del régimen de Stokes al de Newton

$a_0 = 1$	$\gamma = 0$	$Re_p < 1$
$a_0 = 1$	$\gamma = 0.27$	$1 < Re_p < 3$
$a_0 = 0.4$	$\gamma = 0.54$	$30 < Re_p < 10^3$

El tiempo de relajación viscoso para una sola partícula se define como $\tau_v = \rho_s \tilde{d}^2 / 18 \mu_f$, con μ_f la viscosidad dinámica.

Para el caso turbulento, no se tiene una forma específica para definir la velocidad entre el fluido y la partícula. Se asume que el número de Reynolds para la partícula Re_p se puede remplazar por un Reynolds promedio local, dado por

$$Re_m = \rho_f \tilde{d} |\vec{u}_f - \vec{u}_s| / \mu_f, \quad (3.2)$$

con $\vec{u}_f$ y $\vec{u}_s$ las velocidades promedio locales del gas y partículas, respectivamente. Con esto, lo que se logra es aproximar el tiempo de relajación para cada partícula individual por un valor local promedio. Bajo este supuesto la ecuación (3.1) se puede descomponer en una parte promedio y una fluctuante dadas por

$$\vec{f}_m = \tau_d^{-1}(\vec{u}_f - \vec{u}_s), \quad (3.3)$$

$$\vec{f}' = \tau_d^{-1}(\vec{u}' - \vec{C}), \quad (3.4)$$

con el tiempo de relajación de arrastre dado por

$$\tau_d = \tau_v / (a_0 Re_m^\gamma). \quad (3.5)$$

En las ecuaciones (3.1) y (3.4) los sufijos f y s son para la fase del fluido y sólida respectivamente. Las cantidades primadas son las cantidades fluctuantes, y las del sufijo m son los valores promedio.

3.2. Ecuación maestra de transporte para la fase granular

La teoría granular de transporte se usa para obtener las ecuaciones de conservación correspondientes al medio granular. Se sigue lo realizado en el artículo de Lun *et.al.* 1984 [23] y en el libro de Hirschfelder *et.al.* [13]. Lo primero que se define es el ensamble promedio para una propiedad ψ

$$\langle \psi \rangle = \frac{1}{n} \int \psi f^{(1)}(\vec{r}, \vec{c}; t) d\vec{c}, \quad (3.6)$$

donde $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{c}; t)$ es la función de distribución de velocidad para una sola partícula, y n es la densidad de número de partículas. El ensamble promedio corresponde a realizar un promediado de Boltzmann, como el que se menciona en la sección 2.3. En el presente trabajo se consideran interacciones binarias, es decir, entre dos partículas. La función de distribución f establece las velocidades de las partículas como función de la posición, la velocidad instantánea y el tiempo. Si se tiene $f^{(1)}(\vec{r}, \vec{c}; t)d\vec{r}d\vec{c}$, lo que tenemos es la probabilidad de que la partícula esté dentro $d\vec{r}$ situada alrededor de $\vec{r}$ y con velocidad $d\vec{c}$, situada alrededor de $\vec{c}$ al tiempo t (ver sección 2.1). En ausencia de colisiones, las moléculas se mueven de forma tal que, a un tiempo $t + dt$, sus posiciones están dadas por $[\vec{r} + \vec{c}dt]$ y el momento por $[\vec{c} + \vec{c}dt]$, por lo que

$$f^{(1)}(\vec{r}, \vec{c}, t)d\vec{r}d\vec{c} = f^{(1)}([\vec{r} + \vec{c}dt], [\vec{c} + \vec{c}dt], [t + dt])d\vec{r}d\vec{c}. \quad (3.7)$$

Cuando existen colisiones y también se considera la interacción con el fluido, las partículas no terminan en las posiciones y velocidades al tiempo $t + dt$. Podrá pasar que partículas abandonen su estado normal de acuerdo con la distribución, y otras que no estaban originalmente en ese estado lo adquieran. Estas pérdidas y ganancias se representan usando dos términos $\Gamma^{(-)}d\vec{r}d\vec{c}dt$ y $\Gamma^{(+)}d\vec{r}d\vec{c}dt$, respectivamente. Se sigue que la función de distribución se pueda escribir como

$$f^{(1)}([\vec{r} + \vec{c}dt, [\vec{c} + \vec{c}dt/m], [t + dt])d\vec{r}d\vec{c} = f^{(1)}(\vec{r}, \vec{c}, t)d\vec{r}d\vec{c} + \sum_j [\Gamma_{ij}^{(+)} - \Gamma_{ij}^{(-)}]d\vec{r}d\vec{p}dt. \quad (3.8)$$

La función de evolución para la distribución de velocidad de una sola partícula se obtiene al expandir el término izquierdo de la ecuación anterior (3.8), y posteriormente derivarla con respecto al tiempo. Introduciendo este concepto en el

teorema de Liuville se obtiene

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla f^{(1)} + \vec{b} \cdot \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \vec{c}} = \sum_j [\Gamma_{ij}^{(+)} - \Gamma_{ij}^{(-)}]. \quad (3.9)$$

Los términos de pérdidas y ganancias se van a sustituir por propuestas particulares para el problema. La expresión que se tiene para la ecuación de evolución es

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla f^{(1)} + \vec{b} \cdot \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \vec{c}} = \left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{fs} + \left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{ss}, \quad (3.10)$$

en la que $\vec{b}$ son las fuerzas de cuerpo. Podemos reconocer una ecuación tipo Boltzmann en el resultado anterior. Los dos términos del lado derecho de la ecuación, que sustituyen a las pérdidas y ganancias en (3.9), corresponden a tasas de cambio de $f^{(1)}$ debido a las interacciones fluido-partícula (sufijo fs), y debido a las interacciones partícula-partícula (sufijo ss).

La consideración debida a la turbulencia del fluido debe entrar en las interacciones fluido-partícula. En este caso las partículas tendrán un cambio de momento al interactuar con el flujo en su vecindad después durante un intervalo τ de tiempo. Si se asume que la turbulencia es completamente aleatoria, cabe anticipar que no habrá histéresis. Esto se traduce en que las interacciones partícula-fluido se pueden considerar como procesos de Markov, en los que las funciones de distribución sólo dependen del estado actual. Es mediante la ecuación Chapman-Kolmogorov que un proceso de Markov se introduce al modelo

$$f^{(1)} = \int f^{(1)}(\vec{c} - \Delta\vec{c}, t - \tau) \Pi_{fs}(\vec{c}\Delta\vec{c}, \Delta\vec{c}) d(\Delta\vec{c}) \quad (3.11)$$

con $\Pi_{fs}(\vec{c}\Delta\vec{c}, \Delta\vec{c})$ la probabilidad de transición para que una partícula cambie su velocidad en una cantidad $\Delta\vec{c}$ en un tiempo τ . El integrando de la ecuación (3.11) se puede expandir en series de Taylor a primer orden en τ y a segundo

orden en $\Delta\vec{c}$

$$f(\vec{c}, t) = \int d(\Delta\vec{c}) \left\{ f(\vec{c}, t) \Pi(\vec{c}, \Delta\vec{c}) - \tau \frac{\partial f}{\partial t} \Pi(\vec{c}, \Delta\vec{c}) \right. \quad (3.12)$$

$$\left. - \Delta\vec{c} \cdot \frac{\partial f \Pi}{\Delta\vec{c}} + \frac{1}{2} \overline{\overline{\Delta\vec{c} \Delta\vec{c}}} : \frac{\partial^2 f \Pi}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} + \dots \right\}. \quad (3.13)$$

Dividiendo entre τ en el límite en que este tiende a cero obtenemos la ecuación de Fokker-Planck

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} \right)_{fs} = - \frac{\partial}{\partial \vec{c}} \cdot \left(\frac{\langle \Delta\vec{c} \rangle_f}{\tau} f^{(1)} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} : \left(\frac{\langle \Delta\vec{c} \Delta\vec{c} \rangle_f}{\tau} f^{(1)} \right), \quad (3.14)$$

en la que $\langle \Delta\vec{c} \rangle_f$ y $\langle \Delta\vec{c} \Delta\vec{c} \rangle_f$ son los ensambles promedio del momento y el cambio de energía del fluido. La ecuación Fokker-Planck está asociada a la evolución de la función de densidad de probabilidad de velocidad de una partícula bajo la influencia de fuerzas de arrastre, principalmente.

Se asume que la hipótesis ergódica es valida en este caso. Esta implica que los promedios temporales de las propiedades en ensambles de sistemas similares en un instante de tiempo dado, es equivalente a los promediados temporales de las propiedades instantáneas de un sólo ensamble. Con dicha consideración el promedio del ensamble de la fase gaseosa es igual promedio temporal

$$\frac{\langle \Delta\vec{c} \rangle_f}{\tau} = \frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t \frac{\overline{d\vec{c}}}{dt} = \vec{f}_m + \vec{f}', \quad (3.15)$$

donde la barra denota un promediado temporal, y podemos ver que aparecen las fuerzas de arrastre promedio y fluctuantes. De la ecuación (3.4), la parte fluctuante del promedio temporal se reescribe como

$$\vec{f}' = -\tau_d^{-1} \vec{C}. \quad (3.16)$$

El término $\vec{f}_m$ se considera como una fuerza externa a la fase sólida, y se incluye al vector de fuerzas de cuerpo que aparece en (3.10). Se tiene entonces que

$$\vec{b} = \vec{g} + \vec{f}_m, \quad (3.17)$$

donde $\vec{g}$ es la gravedad.

El segundo término de la ecuación de Fokker-Planck se puede relacionar a la parte fluctuante del primer término[34]. La relación correspondiente

$$\vec{B} = 2\tau_d^{-1}T\vec{\delta}, \quad (3.18)$$

donde $\vec{\delta}$ es el tensor de Kronecker, $T = \langle C^2 \rangle / 3$ la temperatura granular, y $\vec{B}/2 = \frac{\langle \Delta \vec{c} \Delta \vec{c} \rangle_f}{2\tau}$ es la tasa de transferencia de energía cinética a la fase particulada del flujo vía las fluctuaciones de las fuerzas entre fases.

Por otra parte el término que describe las interacciones partícula-partícula en la ecuación (3.10) se obtienen siguiendo el trabajo de Lun et. al. [23]. La consideración que se hace es para partículas duras e inelásticas con un diámetro $\tilde{d}$. Cuando dos partículas con velocidades $\vec{c}_1$ y $\vec{c}_2$ colisionan, la distancia entre los centros de las mismas es de $\tilde{d}$. Si el centro (O_2) de una de las partículas se localiza en $\vec{r}$ (vector de posición), el centro (O_1) de la otra estará ubicado en $\vec{r} - \tilde{d}\vec{k}$, donde $\vec{k}$ vector unitario a lo largo de la línea que une los centros O_1 y O_2 (figura 3.1). Un tiempo δt después de la colisión, la partícula con centro O_1 se habrá desplazado una distancia $\vec{c}_{12}\delta t$ con respecto a la partícula O_2 , siendo $\vec{c}_{12} = \vec{c}_1 - \vec{c}_2$ la diferencia de velocidades entre ambas partículas antes de la colisión. Para que la colisión ocurra, la partícula O_1 debe de estar en un rango $\tilde{d}^2\delta\vec{k}(\vec{c}_{12} \cdot \vec{k})\delta t$.

El número probable de colisiones tal que O_2 cae dentro del volumen δr , para

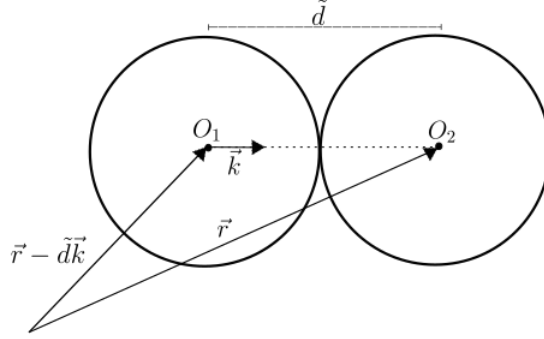


Figura 3.1: Esquematzación de la colisión entre dos partículas.

los que $\vec{c}_1$, $\vec{c}_2$, y $\vec{k}$ queda dentro de los rangos $\delta\vec{c}_1$, $\delta\vec{c}_2$ y $\delta\vec{k}$ está dada por

$$\tilde{d}^2(\vec{c}_{12} \cdot \vec{k}) f^{(2)}(\vec{r} - \tilde{d}\vec{k}, \vec{c}_1; r, \vec{c}_2; t) \delta\vec{k} \delta\vec{c}_1 \delta\vec{c}_2. \quad (3.19)$$

Después de la colisión, las propiedades ψ_1 y ψ_2 asociadas a cada partícula, habrán sufrido un cambio siendo ψ'_1 y ψ'_2 los valores después de la colisión.

Tomando el caso en que las partículas están por colisionar ($\vec{c}_{12} \cdot \vec{k} > 0$), la taza de incremento para el valor medio de ϕ_c será la misma para ambas partículas. Esta taza por unidad de volumen es

$$\phi_c = \tilde{d}^2 \int_{\vec{c}_{12} \cdot \vec{k} > 0} (\psi'_2 - \psi_2)(\vec{c}_{12} \cdot \vec{k}) f^{(2)}(\vec{r} - \tilde{d}\vec{k}, \vec{c}_1, r, \vec{c}_2, t) d\vec{k} d\vec{c}_1 d\vec{c}_2, \quad (3.20)$$

para la partícula O_2 . Si nos fijamos en la otra partícula, la taza es

$$\phi_c = \tilde{d}^2 \int_{\vec{c}_{12} \cdot \vec{k} > 0} (\psi'_1 - \psi_1)(\vec{c}_{12} \cdot \vec{k}) f^{(2)}(\vec{r}, \vec{c}_1, \vec{r} + \tilde{d}\vec{k}, \vec{c}_2, t) d\vec{k} d\vec{c}_1 d\vec{c}_2.$$

Las dos ecuaciones anteriores se pueden manipular. Expandiendo la primer expresión en serie de Taylor, y sumando a la segunda se pueden obtener dos términos para las contribuciones debido a las colisiones entre partículas. Los términos que

se obtienen de la interacción partícula-partícula son un flujo de la propiedad debido a las colisiones

$$\theta = -\frac{\tilde{d}^3}{2} \int_{\vec{c}_{12} \cdot \vec{k} > 0} (\psi'_1 - \psi_1) (\vec{c}_{12} \cdot \vec{k}) \vec{k} f^{(2)}(\vec{r} - \frac{1}{2}\tilde{d}\vec{k}, \vec{c}_1, \vec{r} + \frac{1}{2}\tilde{d}\vec{k}, \vec{c}_2, t) d\vec{k} d\vec{c}_1 d\vec{c}_2, \quad (3.21)$$

y una fuente o sumidero por colisiones

$$\chi = \frac{\tilde{d}^2}{2} \int_{\vec{c}_{12} \cdot \vec{k} > 0} (\psi'_2 + \psi'_1 - \psi_1 - \psi_2) (\vec{c}_{12} \cdot \vec{k}) f^{(2)}(\vec{r} - \tilde{d}\vec{k}, \vec{c}_1, r, \vec{c}_2, t) d\vec{k} d\vec{c}_1 d\vec{c}_2. \quad (3.22)$$

Así, tendríamos las expresiones para las interacciones gas-partícula (ecuación (3.14)) y partícula-partícula (ecuaciones (3.21) y (3.22)) que aparecen en la ecuación (3.10). Multiplicando por ψ , que es cualquier propiedad transportada de la fase granular y sacando el ensamble promedio, llegamos la ecuación general para el cambio temporal cualquier propiedad de la fase sólida

$$\frac{\partial \langle n\psi \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle n\vec{c}\psi \rangle - \langle nD\psi \rangle = \langle \vec{f}' \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \vec{c}} \rangle + \frac{1}{2} \langle \vec{B} : \frac{\partial^2 \psi}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} \rangle - \nabla \cdot \vec{\theta}(\psi) + \chi(\psi), \quad (3.23)$$

donde

$$D\psi = \frac{\partial \psi}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla \psi + \vec{b} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \vec{c}}.$$

3.3. Ecuación de conservación de masa

En este caso sustituimos ψ por la masa de la partícula, $\psi = m$. Como la masa no tiene dependencia temporal ni de la velocidad

$$Dm = \frac{\partial m}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla m + \vec{b} \cdot \frac{\partial m}{\partial \vec{c}} = 0,$$

$$\left\langle \vec{f}' \cdot \frac{\partial m}{\partial \vec{c}} \right\rangle = \frac{1}{2} \left\langle \vec{B} : \frac{\partial^2 m}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} \right\rangle = 0.$$

Si se supone que no hay cambios en la masa de las partículas después de la colisión

$$\nabla \cdot \vec{\theta}(m) = \chi(m) = 0,$$

los únicos términos que sobreviven son

$$\frac{\partial \langle nm \rangle}{\partial t} \quad \text{y} \quad \nabla \cdot \langle n \vec{c} m \rangle,$$

por lo que para $\psi = m$ la ecuación (3.24) se reduce a

$$\frac{\partial \langle \rho_s \alpha_s \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \vec{c} \rho_s \alpha_s \rangle = 0.$$

Se debe tener en cuenta que $\langle \rho_s \alpha_s \rangle = \rho_s \alpha_s$ por la definición del ensamble promedio, y por la hipótesis $\langle \vec{c} \rangle = \vec{u}_s$. La ecuación de continuidad es entonces

$$\frac{\partial (\rho_s \alpha_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{c} \rho_s \alpha_s \vec{u}_s) = 0. \quad (3.24)$$

3.4. Ecuación de conservación del momentum

En este caso la propiedad transportada es el momento lineal, por lo que se sustituye ψ por $m\vec{c}$. El primer término en la ecuación maestra (3.23) que es la derivada temporal queda como

$$\frac{\partial \langle nm \vec{c} \rangle}{\partial t} = \frac{\partial \langle \alpha_s \rho_s \vec{c} \rangle}{\partial t} = \frac{\partial (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s)}{\partial t}.$$

El siguiente término de la ecuación, $\nabla \cdot \langle n \vec{c} m \vec{c} \rangle$, queda como

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle n \vec{c} m \vec{c} \rangle &= \nabla \cdot \langle \rho_s \alpha_s \vec{c} \vec{c} \rangle = \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{c} \vec{c} \rangle) = \\ &= \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{C} \vec{C} \rangle), \end{aligned}$$

recordando que la velocidad se descompone en una parte promedio y otra fluctuante $\vec{c} = \vec{u}_s + \vec{C}$. Los productos que pudieran aparecer del tipo $\vec{u}_s \vec{C}$ se eliminan cuando se realiza el promediado [32].

El término que contiene la derivada material se reduce a

$$\begin{aligned} D(m \vec{c}) &= \frac{\partial(m \vec{c})}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla(m \vec{c}) + \vec{b} \cdot \frac{\partial(m \vec{c})}{\partial \vec{c}} = \vec{b} \cdot m \\ \langle n D m \vec{c} \rangle &= \langle n m \vec{b} \rangle = \alpha_s \rho_s \vec{b}, \end{aligned}$$

ya que $\vec{c}$ es la velocidad instantánea de la partícula. Así mismo los términos debidos a la interacción gas-partícula se simplifican de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \langle \vec{f}' \cdot \frac{\partial m}{\partial \vec{c}} \rangle &= \langle \vec{f}' \cdot m \rangle = \langle \tau^{-1} m \vec{C} \rangle = 0, \\ \frac{1}{2} \langle \vec{B} : \frac{\partial^2(m \vec{c})}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} \rangle &= 0. \end{aligned}$$

De los términos que toman las contribuciones por colisiones θ y χ , sólo contribuye el término

$$\theta(m \vec{c}) = -\frac{d^3}{2} \int_{\vec{c}_{12} \cdot k > 0} m(\vec{c}'_1 - \vec{c}_1)(\vec{c}_{12} \cdot k) k f^{(2)}(r - \frac{1}{2} dk, \vec{c}_1, r + \frac{1}{2} dk, \vec{c}_2, t) dk d\vec{c}_1 d\vec{c}_2.$$

Expandiendo nuevamente la velocidad en su parte fluctuante y promedio y dado que θ es un promedio, los términos que van a quedar son los productos entre fluctuaciones y entre fluctuaciones y promedios. Lo anterior se muestra al poder

expresar θ como

$$\theta(m\vec{C}) = -\frac{d^3}{2} \int_{c_{12} \cdot k > 0} m(C'_1 - C_1)(\vec{c}_{12} \cdot k) k f^{(2)}(r - \frac{1}{2}dk, \vec{c}_1, r + \frac{1}{2}dk, \vec{c}_2, t) dk d\vec{c}_1 d\vec{c}_2.$$

De lo anterior, la ecuación de conservación del momento queda como

$$\frac{\partial(\alpha_s \rho_s \vec{u}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) = \alpha_s \rho_s \vec{b} - \nabla \cdot P_s. \quad (3.25)$$

En esta ecuación $P_s = P_{sk} + P_{sc}$ el cual identificamos como un tensor que toma los esfuerzos totales, siendo el subíndice sk la contribución cinética y el subíndice sc la contribución por colisiones. Dadas por:

$$P_{sk} = \alpha_s \rho_s \langle \vec{C} \vec{C} \rangle, \quad P_{sc} = \vec{\theta}(m\vec{C}). \quad (3.26)$$

3.5. Ecuación de conservación de la energía

La ecuación de transporte de la energía cinética se obtiene al substituir ψ por $mc^2/2$ en la ecuación maestra (3.23). Su forma final es

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} \frac{\partial(\alpha_s \rho_s T)}{\partial t} + \frac{3}{2} \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s T) = & -P_s : \nabla \vec{u}_s - \nabla \cdot q_s - \gamma_s \\ & + \alpha_s \rho_s \langle \vec{f} \cdot \vec{C} \rangle + \frac{1}{2} \alpha_s \rho_s \langle \vec{B} : \vec{\delta} \rangle, \end{aligned} \quad (3.27)$$

$P_s = P_{sk} + P_{sc}$ es el tensor que se definió para la ecuación de momentum (3.26), y $q_s = q_{sk} + q_{sc}$ es el flujo total de energía traslacional

$$q_{sk} = \alpha_s \rho_s \langle C^2 \vec{C} \rangle / 2, \quad q_{sc} = \vec{\theta}(mC^2/2).$$

El término γ_s , se identifica como la tasa de energía disipada por colisiones por unidad de volumen

$$\gamma_s = -\chi(mC^2/2).$$

Por otro lado, la primer derivada temporal que aparece se obtiene de realizar

$$\frac{\partial \langle nmc^2/2 \rangle}{\partial t} = \frac{\partial(\alpha_s \rho_s T)}{\partial t},$$

recordando que $T = \langle C^2 \rangle/3$.

El segundo término del lado izquierdo $\frac{3}{2} \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s T)$, así como $\nabla \cdot q_s$, y γ_s , se obtienen del término

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle n \vec{c} m c^2 \rangle &= \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s / 2 \langle \vec{c} c^2 \rangle) = \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s / 2 \langle (\vec{u}_s + \vec{C}) c^2 \rangle) \\ &= \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s [\langle \vec{u}_s c^2 \rangle + \langle \vec{C} c^2 \rangle]) = \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s [3/2 \langle \vec{u}_s T \rangle + 1/2 \langle \vec{C} C^2 \rangle]). \end{aligned}$$

Los dos últimos términos $\alpha_s \rho_s \langle \vec{f} \cdot \vec{C} \rangle$ y $\frac{1}{2} \alpha_s \rho_s \langle \vec{B} : \vec{\delta} \rangle$, se obtienen de hacer el promediado después de considerar las partes fluctuantes y promedio de la derivada.

3.6. Ecuación de transporte para la entropía

Para obtener la ecuación de transporte para la entropía se hace la sutitución de ψ por ms_s , agregando m para que $\alpha_s \rho_s$ aparezca en la ecuación. Se hace un análisis similar al que se hizo para obtener las ecuaciones de continuidad y de momento. La entropía también estará compuesta por una parte promedio y una fluctuante $s = \bar{s}_s + S_s$.

Con lo anterior, la primer derivada temporal que aparece en (3.24) queda

como

$$\frac{\partial \langle n m s_s \rangle}{\partial t} = \frac{\partial (\alpha_s \rho_s \langle s_s \rangle)}{\partial t} = \frac{\partial (\alpha_s \rho_s \bar{s}_s)}{\partial t}.$$

Los siguientes términos de la ecuación son

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \langle n \vec{c} m s_s \rangle &= \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{c} s_s \rangle) = \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle (\vec{u}_s + \vec{C})(\bar{s}_s + S_s) \rangle) = \\ \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{u}_s \bar{s}_s + \vec{u}_s S_s + \vec{C} \bar{s}_s + \vec{C} S_s \rangle) &= \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \bar{s}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{C} S_s \rangle). \end{aligned}$$

Como s_s no tiene dependencia temporal, espacial, ni de la velocidad (s_s sería la entropía instantánea), el termino que contiene la derivada material no aparece,

$$D(m s_s) = \frac{\partial(m s_s)}{\partial t} + \vec{c} \cdot \nabla(m s_s) + \frac{\partial(m s_s)}{\partial \vec{c}} = 0.$$

Los dos primeros términos del lado derecho de la ecuación corresponden a la interacción de las partículas con el gas. En el primer término, aparece la fuerza de arrastre y en el segundo la temperatura del granular, la cual está relacionada con los tiempos de relajación de las partículas

$$\langle \vec{f} \cdot \frac{\partial(m s_s)}{\partial \vec{c}} \rangle, \quad \langle \vec{B} : \frac{\partial(m s_s)}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} \rangle.$$

Éstos términos no pueden ser despreciados, ya que estrictamente existe una relación entre la entropía y la velocidad instantánea de la misma, vía la temperatura granular.

Pero la entropía de la partícula cambia, en principio, después de que se da una colisión. Por lo que $\vec{\theta}$ toma la forma de

$$\vec{\theta}(m s_s) = -\frac{d^3}{2} \int m(s'_{s1} - s_{s1})(c_{12} \cdot k) k f^{(2)}(r - \frac{1}{2}dk, c_1, r + \frac{1}{2}dk, c_2, t) dk dc_1 dc_2,$$

que al igual que con el momento, considerando la parte promedio y fluctuante se

reduce a

$$\vec{\theta}(mS_s) = -\frac{d^3}{2} \int m(S'_{s1} - S_{s1})(c_{12} \cdot k)k f^{(2)}(r - \frac{1}{2}dk, c_1, r + \frac{1}{2}dk, c_2, t)dkdc_1dc_2.$$

El término χ quedaría no tiene una simplificación inmediata. La ecuación para la entropía de la fase granular se escribe entonces como

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_s \rho_s \bar{s}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \bar{s}_s) = & -\nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{C} S_s \rangle) + \langle \vec{f} \cdot \frac{\partial(ms_s)}{\partial \vec{c}} \rangle + \langle \vec{B} : \frac{\partial(ms_s)}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} \rangle \\ & + \nabla \cdot \vec{\theta}(mS_s) + \chi(ms) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Ecuaciones de transporte para la fase gaseosa

Para obtener las ecuaciones del aire, se sigue nuevamente el trabajo de Lun y Savage [22], salvo para la ecuación de transporte de la entropía. Para llegar a las ecuaciones de continuidad, momento y energía del aire, se usan las ecuaciones para la mezcla. Es decir que se consideran ambas fases al mismo tiempo. Estas ecuaciones vienen dadas por la teoría de mezclado y su forma general es conocida. Para la entropía se consideró sólo la fase gaseosa, y se desarrolló la ecuación de transporte completa con los términos promedios y fluctuantes. El desarrollo para ésta última se comparó con la ecuación presentada por Krammer-Bevan [18] en su trabajo de tesis.

4.1. Ecuaciones de la mezcla

Las ecuaciones de continuidad, momento y energía para la mezcla, se pueden consultar en los libros de Ishii [14] o Kolev [17], y los términos particulares para esfuerzo cortantes y contribuciones de colisiones se pueden consultar en el artículo de Lun [22]. Las ecuaciones instantáneas son

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f \vec{u}_f^* + \alpha_s \rho_s \vec{c}) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f^* + \alpha_s \rho_s \vec{c}) = 0, \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f \vec{u}_f^* + \alpha_s \rho_s \vec{c}) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f^* \vec{u}_f^* + \alpha_s \rho_s \vec{c} \vec{c}) \\ = (\alpha_f \rho_f + \alpha_s \rho_s \vec{g}) - \nabla \cdot (\alpha_f \vec{P}_f^*) - \Phi_c(m \vec{c}), \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f u_f^{*2} + \alpha_s \rho_s c^2) + \frac{1}{2} \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f u_f^{*2} \vec{u}_f^* + \alpha_s \rho_s c^2 \vec{c}) \\ = \alpha_f \rho_f \vec{g} \cdot \vec{c} - \nabla \cdot (\alpha_f \vec{u}_f^* \cdot \vec{P}_f^*) + \alpha_f \vec{P}_f^* : \nabla \vec{u}_f^* \\ + \Phi_c(\frac{1}{2} m c^2) + \alpha_s \rho_s \vec{f} \cdot (\vec{c} - \vec{u}_f^*) + \dot{E}_w \end{aligned} \quad (4.3)$$

En las ecuaciones anteriores anteriores, $\vec{P}_f^*$ es el esfuerzo molecular instantáneo en el fluido, Φ_c son las contribuciones instantáneas debidas a las colisiones entre partículas, y $\dot{E}_w$ es la producción de energía cinética debido a la presencia de partículas.

Las ecuaciones anteriores se les realiza un promediado temporal y de Boltzmann, obteniendo así

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f + \alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f + \alpha_s \rho_s \vec{u}_s) = 0, \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_f \rho_f \vec{u}_f + \alpha_s \rho_s \vec{u}_s) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f \vec{u}_f + \alpha_s \rho_s \vec{u}_s \vec{u}_s) \\ = (\alpha_f \rho_f + \alpha_s \rho_s) \vec{g} - \nabla \cdot (\alpha_f \vec{P}_f) - \nabla \cdot (\alpha_s \vec{\sigma}_f) - \nabla \cdot \vec{P}_f, \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_f \rho_f k + \frac{3}{2} \alpha_s \rho_s T \right) + \nabla \cdot \left(\alpha_f \rho_f \vec{u}_f k + \frac{3}{2} \alpha_s \rho_s \vec{u}_s T \right) \\
 &= -\alpha_f \vec{\sigma}_f : \nabla \vec{u}_f - \nabla \cdot (\alpha_f \vec{q}_f) - \overline{\vec{u}'_f \nabla \cdot (\alpha_f \vec{P}'_f)} - \vec{P}_s : \nabla \vec{u}_s - \nabla \cdot \vec{q}_s \\
 & \quad - \gamma_s + \alpha_s \rho_s \overline{\langle \vec{f}' \cdot (\vec{C} - \vec{u}'_f) \rangle} + \langle \vec{E}_w \rangle. \tag{4.6}
 \end{aligned}$$

La energía cinética turbulenta específica se define como $k = \overline{u_f'^2}/2$. Al sustituir las ecuaciones para la fase sólida (3.24), (3.25) y (3.27) en (4.4)-(4.6) respectivamente, se llegan a las ecuaciones solamente del aire

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f) = 0, \tag{4.7}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f \vec{u}_f) &= \alpha_f \rho_f \vec{g} - \alpha_s \rho_s \vec{f}_m - \nabla \cdot (\alpha_f \vec{P}_f) + \nabla \cdot (\alpha_f \vec{\sigma}_f), \\
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_f \rho_f k) + \nabla \cdot (\alpha_f \rho_f \vec{u}_f k) &= -\alpha_f \sigma_f : \nabla \vec{u}_f - \nabla \cdot (\alpha_f \vec{q}_f) - \overline{\vec{u}'_f \cdot \nabla \cdot (\alpha_f \vec{P}'_f)} \\
 & \quad - \frac{1}{2} \alpha_s \rho_s \langle \vec{B} : \vec{\delta} \rangle - \alpha_s \rho_s \overline{\langle \vec{f}' \cdot \vec{u}'_f \rangle} + \langle \vec{E}_w \rangle. \tag{4.9}
 \end{aligned}$$

En estas ecuaciones, aparece el tensor medio de esfuerzo molecular del fluido

$$\vec{P}_f = \rho_f \vec{\delta} - 2\mu_f \vec{S}_f, \tag{4.10}$$

donde $\vec{S}_f = (\vec{u}_{f,i,j} + \vec{u}_{f,j,i})/2$ es el tensor medio de presión. El tensor de esfuerzo turbulento de Reynolds se define como

$$\vec{\sigma}_f = \rho_f \overline{\vec{u}'_f \vec{u}'_f} = \frac{2}{3} k \vec{\delta} - 2\mu_T \vec{S}_f, \tag{4.11}$$

donde μ_T es la viscosidad del remolino para la fase gaseosa. El flujo de energía cinética turbulenta es $\vec{q}_f = \rho_f \overline{\vec{u}'_f^2 \vec{u}'_f}/2$.

4.2. Ecuación de entropía

Para la ecuación de transporte para la entropía del gas (continuo) se parte de la ecuación enunciada por Bird et al. [1]

$$\frac{\partial s \rho}{\partial t} + \frac{\partial (s v_j \rho)}{\partial x_j} - k \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) = \frac{T}{T^2} \left(\frac{\partial T}{\partial x_j} \right)^2 + \frac{1}{T} \tau_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j}. \quad (4.12)$$

Considerando que las propiedades están compuestas por una parte promedio y fluctuante ($\xi = \bar{\xi} + \xi'$, siendo ξ cualquier propiedad), realizando un promedio temporal y usando la ley de Fourier $q_j = -k \frac{\partial T}{\partial x_j}$, tenemos

$$\begin{aligned} -\frac{\overline{q_j}}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_j} + \overline{\tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} &= \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{s} + \overline{\rho' s'}) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{s} + \overline{\rho' u'_j s'} + \bar{u}_j \overline{\rho' s'} + \overline{s' u'_j \rho'} + \overline{\rho' u'_j s'}) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{q}_j \frac{1}{T} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{q'_j \frac{1}{T'}} \right). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Esta ecuación se puede simplificar bajo las reglas para el promediado que se detallaron en el capítulo 2.3.

Los primeros dos términos de lado izquierdo de la ecuación (4.13) se simplifican asumiendo que el flujo es incompresible y que no hay fluctuaciones en la densidad. Con esos supuestos se tiene que esos términos se reducen a

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \bar{s} + \overline{\rho' s'}) \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \bar{u}_j \bar{s} + \overline{\rho' u'_j s'} + \bar{u}_j \overline{\rho' s'} + \overline{s' u'_j \rho'} + \overline{\rho' u'_j s'}) = \bar{\rho} \frac{\partial \bar{s}}{\partial t} + \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{s} \bar{u}_j + \overline{s' u'_j}). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Para los términos restantes, nos remitimos a la tesis de Kramer [18], que obtiene expresiones simplificadas para las mismas.

La contribución a la producción de entropía por un gradiente térmico, está dada por

$$-\frac{\overline{q_j}}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_j}.$$

Haciendo las sustituciones

$$-q_j \rightarrow k \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad \text{y} \quad \frac{\partial \ln T}{\partial x_j} \rightarrow \frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_j},$$

antes de realizar el promediado temporal, se tiene

$$\begin{aligned} -\frac{\overline{q_j}}{T^2} \frac{\partial T}{\partial x_j} &= k \frac{\overline{\partial \ln T}}{\partial x_j} \frac{\partial \ln T}{\partial x_j} \\ &= k \frac{\overline{\partial \ln T}}{\partial x_j} \frac{\partial \ln T}{\partial x_j} + k \frac{\overline{\partial (\ln T)'}}{\partial x_j} \frac{\partial (\ln T)'}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

La producción de entropía por esfuerzos viscosos se simplifica como

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\tau_{ij} \partial u_i}}{\partial x_j} &= \mu \left[\overline{\left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}} + \overline{\left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + 2 \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \overline{\left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} \right. \\ &\quad + \overline{\left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + \overline{\left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i}} + \overline{\left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}} \\ &\quad + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \overline{\left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \overline{\left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} + \overline{\left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}} \\ &\quad \left. - \frac{2}{3} \left(\overline{\left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k}} + \overline{\left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} \frac{\partial u'_k}{\partial x_k}} + 2 \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \overline{\left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial u'_k}{\partial x_k}} + \overline{\left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} \frac{\partial u'_k}{\partial x_k}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Los términos de difusión se simplifican usando la ley de Fourier para transferencia

de calor por conducción y usando la regla 8:

$$\begin{aligned}
 +\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{q}_j \frac{1}{T} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(q'_j \frac{1}{T'} \right) &= \overline{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{q_i}{T} \right)} \\
 &= -k \frac{\partial}{\partial x_i} \overline{\ln \left[\bar{T} \left(1 + \frac{T'}{T} \right) \right]}. \quad (4.17)
 \end{aligned}$$

Los términos que se obtuvieron en las ecuaciones (4.14), (4.15), (4.16) y (4.17) se sustituyen en la ecuación promediada que se tenía originalmente (4.13), con lo que se llega a la ecuación de transporte promediada temporalmente para la

entropía de la fase gaseosa

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \bar{s} \bar{u}_j + \bar{\rho} \bar{s}' \bar{u}_j' - k \ln \left[\bar{T} \left(1 + \frac{T'}{T} \right) \right] \right) &= k \frac{\partial \ln T}{\partial x_j} \frac{\partial \ln T}{\partial x_j} + k \frac{\partial (\ln T)'}{\partial x_j} \frac{\partial (\ln T)'}{\partial x_j} \\
 &+ \mu \left[\left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_j} \right. \\
 &+ 2 \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_j} + \left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_j} \\
 &+ \left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_j'}{\partial x_i} \\
 &+ \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial \bar{u}_j'}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_j} \\
 &+ \left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_j'}{\partial x_i} \\
 &- \frac{2}{3} \left(\left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} + \left(\frac{1}{T} \right) \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{u}_k'}{\partial x_k} \right. \\
 &\left. \left. + 2 \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial \bar{u}_k'}{\partial x_k} + \left(\frac{1}{T} \right)' \frac{\partial \bar{u}_i'}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{u}_k'}{\partial x_k} \right) \right]. \tag{4.18}
 \end{aligned}$$

Con esta ecuación, en conjunto con la que se obtuvo en la sección anterior para la fase granular, se puede obtener una ecuación para la mezcla. Falta realizar un promedio de Boltzmann a (4.18).

Aplicación a un flujo experimental

Con el fin de probar la ecuación de entropía para el gas granular, se realizó una evaluación de la ecuación (3.28) utilizando datos experimentales. En el presente capítulo se describe brevemente el experimento del cual se obtuvieron dichos datos, así como la manera en que se manipularon las ecuaciones para ser evaluadas. Se termina con una discusión de los resultados.

5.1. Experimentos

El experimento del que produjo los datos utilizados para la evaluación de la entropía del gas granular fue realizado por Echeverria (2019) como parte de su investigación doctoral, y consiste en un tubo vertical de $5.7m$ de longitud con un diámetro de $24.8mm$ y un espesor de la pared de $3.5mm$, por el cual se hace pasar un flujo de aire al que después se le inyectan partículas de vidrio. A lo largo del tubo se tienen ubicados en cinco secciones, transductores de presión y cinco termopares expuestos tipo K para medir la temperatura. Un par de ellos está ubicado a la entrada del aire, antes de la cámara de partículas. El flujo base se caracterizó usando el factor de compresibilidad $Z(1 - 0.9996, = \frac{P}{\rho RT})$, así como la ley de gas ideal y la definición del número de Mach $M = \frac{\dot{m}}{PA} \sqrt{\frac{RT}{\sigma}}$.

En una sección del tubo, se tiene ubicada una cámara rápida, con la que, mediante la técnica Particle Shadowgraph Tracking Velocimetry (PSTV) [7] se obtienen las velocidades y tamaños de las partículas inyectadas. Las partículas se inyectan mediante un dispositivo con el que se tiene control del flujo másico de partículas.



Figura 5.1: Foto que muestra el montaje de la zona de grabación.

La técnica PSTV consiste en iluminar al flujo mediante una fuente localizada frente al conducto, en oposición a la lente de la cámara (figura 5.1). Lo que se visualiza y estudia son las sombras que producen las partículas al pasar la sección de estudio. A pesar de la curvatura del tubo, el tamaño de la sección de estudio y la ubicación de la cámara, son tales que, permiten que los rayos no sufran una desviación representativa. Lo importante para el análisis, es la ultra profundidad de campo (UDOF por sus siglas en inglés), que es la distancia en la cual las partículas están enfocadas (figura 5.2).

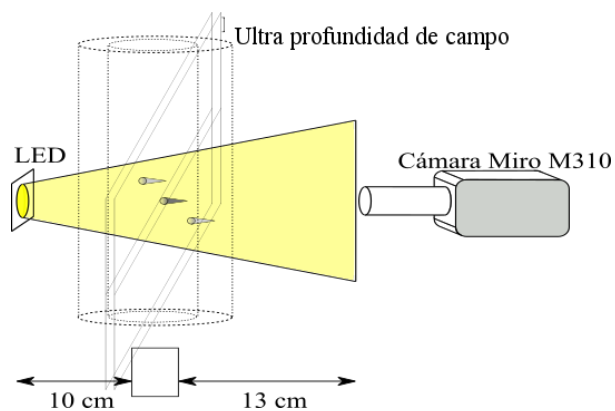


Figura 5.2: Esquema del PSTV

La profundidad de campo se determina moviendo partículas pegadas a una laminilla desde el plano focal de la cámara tanto para las partículas dentro del tubo como fuera del mismo. En el plano focal las partículas están en foco, pero a ciertas distancias antes y después de dicho plano, las partículas se pueden seguir viendo enfocadas. Para poder decir que partículas están en foco y cuales no lo están, se procesan las imagen digitalmente de forma tal que sólo se resalten ciertas partículas. Echeverría et. al. [7], propone dos criterios para el procesamiento de las imágenes: uno de mínima detección y otro de máxima. Se tienen entonces tres profundidades distintas, una para el caso base sin el tubo, y dos con el tubo usando los dos procesamientos diferentes. En el presente trabajo se usaron los datos obtenidos del método de la mínima detección.

En la figura 5.3 se presenta un cuadro de grabación del gas ya con partículas presentes, en la que se puede notar lo mencionado anteriormente, partículas enfocadas y fuera de foco.

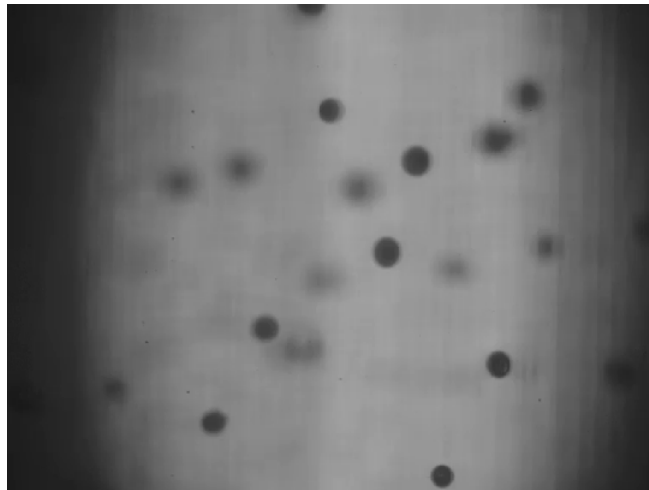


Figura 5.3: Instantánea del flujo. La imagen muestra a las partículas del medio granular mientras son arrastradas por el flujo de aire a gran velocidad.

En la figura 5.4 se muestra un esquema que ejemplifica el estado del gas granular en dos tiempos consecutivos en el experimento, lo cual corresponde a dos cuadros

del vídeo. El volumen de estudio está formado por la ultra profundidad de campo y el tamaño del área de grabación ($8.338mm \times 6.336mm \times 3.55mm$). Después de aplicarle los filtros al vídeo (lo mencionado anteriormente de mínima detección), se procede a realizar es comparación de tamaños para asegurar que sean las mismas partículas las que aparecen en ambos cuadros. De ser las mismas, se procede a determinar la velocidad con la que se desplazó cada partícula (de haber más de una) entre un caudro y otro. Lo anterior es posible ya que se conoce el tiempo transcurrido entre cuadros, dado por frecuencia de grabación de la cámara, y la distancia que se desplazó.

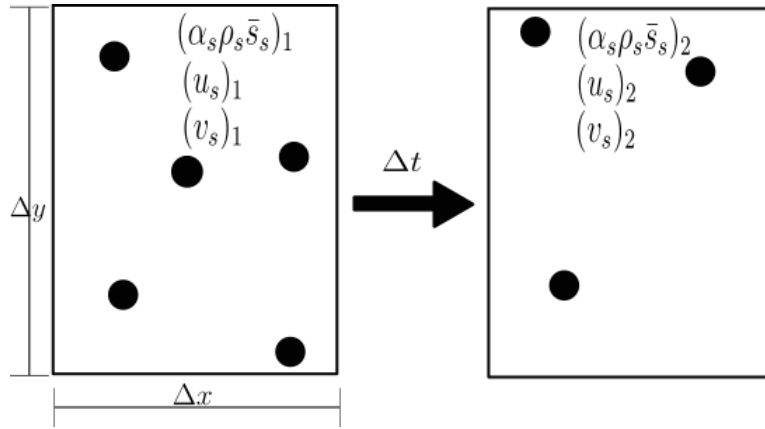


Figura 5.4: Diagrama de la evolución temporal de las posiciones de las partículas entre dos cuadros.

5.2. Discretización de la ecuación de transporte

Para evaluar la entropía del medio granular, es necesario restringir el volumen de evaluación a la sección de medición experimental señalada en la sección

anterior. La ecuación de transporte para la entropía que se obtuvo fue:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_s \rho_s \bar{s}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{u}_s \bar{s}_s) = & - \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{C} S_s \rangle) + \langle \vec{f} \cdot \frac{\partial(m s_s)}{\partial \vec{c}} \rangle + \langle \vec{B} : \frac{\partial(m s_s)}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} \rangle \\ & + \nabla \cdot \vec{\theta}(m S_s) + \chi(m s). \end{aligned}$$

Como se estableció anteriormente, los términos $\nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \langle \vec{C} S_s \rangle) + \langle \vec{f} \cdot \frac{\partial(m s_s)}{\partial \vec{c}} \rangle$ y $\langle \vec{B} : \frac{\partial(m s_s)}{\partial \vec{c} \partial \vec{c}} \rangle$ corresponden a la interacción partícula-gas, mientras que los términos $\nabla \cdot \vec{\theta}(m S_s)$ y $\chi(m s)$ son debidos a las colisiones entre partículas.

Dado que en el caso experimental se tiene un gas diluido, es posible asumir que las colisiones entre partículas no contribuyen de manera significativa al incremento de la entropía granular. Lo anterior nos permite, como primera aproximación, despreciar los dos términos debidos a colisiones.

Por lo tanto, sólo se consideran interacciones de las partículas con el fluido. Adicionalmente, puede considerarse que dicha interacción presenta una contribución mayor debido al arrastre. Para poder usar los datos del experimento en la evaluación de la ecuación, se condensan las contribuciones de la interacción gas-partículas en un solo término, al cual denominaremos F_{fd} .

Por otra parte, dado que del experimento únicamente se conocen velocidades en un plano, podemos reducir la ecuación de la siguiente forma

$$\frac{\partial \alpha_s \rho_s \bar{s}_s}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_s \rho_s u_s \bar{s}_s}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_s \rho_s v_s \bar{s}_s}{\partial y} = F_{fd}, \quad (5.1)$$

donde $\vec{u}_s = (u_s, v_s)$ respresenta los valores de la velocidad promedio en cada dirección y F_{fd} es el término que toma en cuenta las contribuciones debido a las interacciones gas-partícula.

El experimento nos arroja un número finito, lo que se puede interpretar como una discretización del problema, es decir, ya no se está trabajando en un continuo. De lo anterior, podemos tomar la ecuación (5.1) en su forma discreta, esto es:

$$\frac{\Delta\alpha_s\rho_s\bar{s}_s}{\Delta t} + \frac{\Delta\alpha_s\rho_s u_s\bar{s}_s}{\Delta x} + \frac{\Delta\alpha_s\rho_s v_s\bar{s}_s}{\Delta y} = F_{fd}. \quad (5.2)$$

Como se esquematiza en la figura 5.4, se puede obtener $\Delta\bar{s}_s$ entre dos tiempos del experimento, lo cual correspondería a dos cuadros del vídeo. El tiempo Δt se conoce por la frecuencia de la grabación y es una constante. Para el caso en que se considere una evolución temporal, la ecuación apropiada sería

$$\begin{aligned} \frac{(\alpha_s\rho_s\bar{s}_s)_2 - (\alpha_s\rho_s\bar{s}_s)_1}{\Delta t} + \frac{(\alpha_s\rho_s u_s\bar{s}_s)_2 - (\alpha_s\rho_s u_s\bar{s}_s)_1}{\Delta x} \\ + \frac{(\alpha_s\rho_s v_s\bar{s}_s)_2 - (\alpha_s\rho_s v_s\bar{s}_s)_1}{\Delta y} = \Delta F_{fd}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

La expresión para el término F_{fd} se obtuvo de realizar un análisis de dimensional de la ecuación (5.2). Para que la ecuación sea dimensionalmente correcta, las dimensiones que deber tener son $[F_{fd}] = [kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-3} \cdot K^{-1}]$. Tomando en cuenta las consideraciones hechas para el modelo y, por analogía a la expresión para el arrastre de un cuerpo inmerso en un fluido, se propuso la siguiente forma para F_{fd} :

$$F_{fd} = \frac{\rho_g}{T_g} \vec{f} \cdot \vec{u}_f, \quad (5.4)$$

donde ρ_g y T_g son la densidad y la temperatura de la fase gaseosa, $\vec{f}$ son las variaciones de la fuerza de arrastre en la ecuación (3.1) y $\vec{u}_f$ la velocidad de la fase gaseosa.

5.3. Estimación de la entropía granular

El vídeo con el que se trabajó tiene una duración de $0.007686s$ con una separación temporal entre cuadros de $400ns$, lo que da un total 19,215 cuadros. De ese total de cuadros, en 1,559 cuadros hay partículas presentes. Como se había mencionado con anterioridad, para poder calcular las velocidades de las partículas es necesario usar cuadros consecutivos donde aparecen las mismas partículas, se toman parejas de cuadros. Dichas parejas se tomaron de cuadros impares con pares consecutivos. De los 1559 cuadros donde hay partículas, los cuadros relacionados y donde hay velocidades diferentes de cero son 265 pares de cuadros.

Mediante el análisis de los cuadros consecutivos se obtienen las velocidades u_s para la velocidad en la dirección x y v_s en la dirección y (figura 5.4). También se conocen los tamaños de las partículas en cada cuadro. Para además poder determinar las fracciones volumétricas de ambas fases, se considera que el volumen compuesto por el área de grabación y la profundidad de campo de la cámara es el volumen representativo. Entonces, con el diámetro medido de las partículas y asumiendo que tienen una excentricidad uno (que son perfectamente esféricas), se se procede directamente a calcular el volumen de la fase sólida. Haciendo uso de la definición de fracción volumétrica, sigue que

$$\alpha_s = \frac{V_s}{V_r} \quad \text{y} \quad \alpha_g = 1 - \alpha_s, \quad (5.5)$$

donde V_s es el volumen de la, o las partículas, y V_r es el volumen representativo o de interés, las fracciones volumétricas de ambas fases quedan totalmente definidas.

Para trabajar con la ecuación (5.2) de forma completa, se tienen que tomar el total de cuadros del vídeo. El total de cuadros se divide en grupos de forma tal que se obtienen cantidades promedio para las velocidades y las fracciones vo-

lumétricas. La distancia temporal entre grupos promediados Δt , es un parámetro conocido. Las velocidades promedio u_s y v_s se calculan para cada grupo de cuadros de igual manera.

El problema que se encontró al querer hacer el análisis mencionado, fue la gran cantidad de cuadros sin partículas. Ello implica que hay un gran cantidad de pares de cuadros donde la velocidad de la fase granular es 0. Al hacer los promedios de los valores, dicha cantidad de ceros hacía que los valores promedio de las velocidades tuvieran una diferencia de hasta 2 ordenes de magnitud con las velocidades instantáneas. Al evaluar términos como el número de Reynolds de las partículas, se obtenían valores fuera de lo esperado para el fenómeno.

Se optó por considerar un caso “estacionario”, lo cual tiene validez si se considera la duración del experimento así como que el tiempo que toma el flujo en desarrollarse son pequeños. Los cuadros que se usaron para evaluar la ecuación fueron los 256 pares con presencia de partículas con velocidades distintas de cero. Bajo estas condiciones, removiendo el término local de la ecuación (5.2), queda

$$\frac{\Delta\alpha_s\rho_s u_s \bar{s}_s}{\Delta x} + \frac{\Delta\alpha_s\rho_s v_s \bar{s}_s}{\Delta y} = F_{fd}. \quad (5.6)$$

Esta ecuación se puede evaluar sin mayor dificultad, con los datos proporcionados por el experimento. Esto se debe a que se conocen las fracciones volumétricas, las velocidades promedio en ambas direcciones, los intervalos de longitud Δx y Δy son constantes, y la densidad de la fase sólida se considera constante durante todo el experimento.

El valor de F_{fd} queda bien determinado ya que, la velocidad y la temperatura de la fase gaseosa son conocidas. Además, con el objetivo de facilitar el cálculo, se considera el caso en que el gas es incompresible. El valor de $\vec{f}$, dado por (3.1),

se reduce a (3.16) cuando se realiza el promediado. La velocidad fluctuante del sólido se obtiene de la de la distribución estadística de velocidades medidas en el laboratorio. Como el número de partículas medidas en el régimen diluido es bajo, se utilizan las expresiones para pequeñas muestras de datos

$$\vec{c} = \vec{u} + \vec{C} = \vec{u} + \frac{z\sigma}{\sqrt{n_i}}, \quad (5.7)$$

donde z es el “factor de cobertura”, σ es la desviación estándar y n_i el número de datos.

Resultados

Para evaluar la ecuación se consideraron cuatro formas diferentes de evaluar los promedios: tomando el total de los datos se usaron $z\sigma$ (como caso límite) y $z\sigma/\sqrt{n_i}$ para evaluar, haciendo 2 grupos para promediar de 133 cada uno (la mitad del total), y dividiendo en 5 grupos, que era el mínimo divisor en que se usaban todos los datos; los dos últimos casos, usando $z\sigma/\sqrt{n_i}$.

El objetivo fue el de establecer la sensibilidad de la variación de los valores obtenidos para la entropía, así como para el número de Reynolds y los tiempos de relajación, con respecto al número de datos que se usaron al hacer el promedio. El valor de la velocidad fluctuante depende también de como se está realizando el promedio, y de si se considera la totalidad de la muestra o solamente una parte de ella. Nuevamente esto se ve reflejado en el uso de $z\sigma$ para toda la muestra, y de $z\sigma/\sqrt{n_i}$ para submuestras.

Mediante este procedimiento se obtuvieron los valores para el número de Reynolds, los tiempos de relajación viscoso y de arrastre, de la fuerza de arrastre (3.16), y del valor asociado al arrastre que se introdujo para cerrar la ecuación de la entropía (5.4). En las tablas 6.2-6.5 se muestran los valores mencionados anteriormente, junto con las velocidades en ambas componentes (u_s y v_s), las ve-

locidades fluctuantes y las desviaciones estándar que las generaron, las fracciones volumétricas de las partículas y el gas (α_s y α_g), y los diámetros promedio d .

Así mismo, en la tabla 6.1 se muestran los valores que se mantienen constantes durante el experimento: la velocidad promedio del gas, la viscosidad y densidad del aire (correspondientes a 273.15 K), la densidad de la fase granular, la temperatura medida durante el experimento del gas, y el volumen de la sección experimental que se tomó como el volumen representativo.

Tabla 6.1: Valores de las propiedades de los fluidos en la sección de medición. Estos valores se mantienen constantes en dicha sección.

$u_f^*(\text{m/s})$	$\mu(\text{Pa.s})$	$\rho_g(\text{kg/m}^3)$	$\rho_s(\text{kg/m}^3)$	T aire(K)	$V_r(m^3)$
132	1.71E-05	1.29	1509.33	293.90	1.87E-07

Como era de esperarse, la influencia que el número de datos disponibles o considerados tiene en las velocidades fluctuantes, es el más significativo. Los valores de las velocidades fluctuantes, salvo en el caso mencionado, son todos del mismo orden. Por la forma en que se estiman dichas velocidades, es de esperarse que crezca su valor al ser más pequeña la muestra.

En contraste las velocidades promedio no presentan variaciones considerables en la componente axial, a lo largo del eje x , lo cual indica que, los valores obtenidos en el experimento no son muy diferentes entre si. Lo anterior se puede constatar viendo los valores obtenidos para la desviación estándar. Las componentes transversales de la velocidad, a lo largo del eje y tienen desviaciones estándar más grandes por lo que hay variaciones más grandes entre los valores obtenidos. No obstante, todas las velocidades de la componente a lo largo del eje y son del mismo orden de magnitud.

Tabla 6.2: Valores obtenidos de promediar todos los datos y calcular las velocidades fluctuantes usando $z\sigma/\sqrt{n_i}$.

u_s (m/s)	σ_x	C_x (m/s)	v_s (m/s)	σ_y	C_y (m/s)	α_s	α_g	$d(m)$	Re	τ_v (s)	τ_v (s)
5.724	1.219	0.147	125.927	26.827	3.236	1.917E-5	0.9999808	1.9E4	1.22E2	1.57E-04	2.93E-5

Tabla 6.3: Valores obtenidos de promediar todos los datos y calcular las velocidades fluctuantes usando $z\sigma$.

u_s (m/s)	σ_x	C_x (m/s)	v_s (m/s)	σ_y	C_y (m/s)	α_s	α_g	$d(m)$	Re	τ_v (s)	τ_v (s)
5.724	1.219	2.39	125.927	26.827	52.58	1.917E-5	0.9999808	1.9E4	1.22E2	1.57E-04	2.93E-5

Tabla 6.4: Valores obtenidos de promediar dividiendo los datos en dos grupos.

u_s (m/s)	σ_x	C_x (m/s)	v_s (m/s)	σ_y	C_y (m/s)	α_s	α_g	$d(m)$	Re	τ_v (s)	τ_v (s)
5.942	4.887	0.222	130.27	28.618	4.882	2.0996E-5	0.999979	1.94E-4	8.9E1	1.58E-4	3.5E-5
5.506	1.099	0.188	121.126	24.186	4.882	2.083E-5	0.9999791	1.933E-4	1.78E2	1.57E-4	2.39E-5

Tabla 6.5: Valores obtenidos de promediar dividiendo los datos en cinco grupos.

u_s (m/s)	σ_x	C_x (m/s)	v_s (m/s)	σ_y	C_y (m/s)	α_s	α_g	$d(m)$	Re	τ_v (s)	τ_v (s)
6.243	1.255	0.338	137.348	27.604	7.431	2.133E-5	0.9999786	1.959E-4	1.21E2	1.61E-4	3.01E-5
5.811	1.508	0.406	127.846	33.176	8.932	2.079E-5	0.9999792	1.927E-4	1.04E2	1.56E-4	3.17E-5
5.718	0.937	0.252	125.805	20.614	5.55	2.132E-5	0.9999786	1.95E-4	1.24E2	1.59E-4	2.95E-5
5.407	0.918	0.247	118.961	20.198	5.438	2.126E-5	0.9999787	1.947E-4	2.07E+2	1.59E-4	2.23E-5
5.44	1.23	0.331	119.676	27.058	7.284	1.936E-5	0.9999803	1.895E-4	1.93E+2	1.50E-4	2.2E-5

Los valores que se obtienen para el número de Reynolds de las partículas, caen también dentro de los órdenes de magnitud esperados para el fenómeno. El único valor del número de Reynolds que tiene una diferencia considerable corresponde al caso en el que la velocidad de la partícula en y es muy cercana a la del gas. Esto concuerda con la expresión para el Re .

Es importante recalcar que los tiempos de relajación son todos del mismo orden de magnitud y tienen valores que no varían mucho entre sí. Lo anterior, es coherente con la forma en que los tiempos están dados. Por ejemplo, si se diera el caso límite en que todas las partículas fueran del mismo tamaño, el tiempo de relajación viscoso sería el mismo para todas ellas. Esto explica el porque al no haber grandes variaciones en el diámetro de las partículas no hay grandes variaciones del tiempo de relajación viscoso. Lo mismo sucede para el tiempo de relajación viscoso, el cual tiene una dependencia con el Reynolds de la partícula y este no varía mucho.

Los resultados obtenidos para la entropía de la fase granular se muestran en la tabla 6.6 junto con los valores para el término asociado al arrastre. Lo que podemos observar es que, al ser más grande la “fuerza” debida al arrastre, la entropía del medio granular se incrementa. El caso en que la velocidad fluctuante se obtiene usando el total de la muestra, arroja un valor bastante grande para el arrastre y para la entropía. Se concluye que, a mayor arrastre, mayor será el valor de la entropía. Cabe señalar que el arrastre depende de la velocidad fluctuante y del tiempo de relajación asociado. Una velocidad fluctuante grande, o un tiempo de relajación muy pequeño, dan como resultado un cambio mayor en la entropía.

Datos	F_{fd}	S
256	1.04E6	1745.116
256	6.39E4	107.404
132	8.09E4	119.549
132	1E5	161.012
53	1.43E5	198.121
53	1.63E5	249.243
53	1.09E5	164.817
53	1.41E5	226.932
53	1.92E5	331.889

Tabla 6.6: Valores obtenidos para el término asociado a la fuerza de arrastre propuesto, así como para la entropía. Cada bloque corresponde a un manejo de datos diferente.

Conclusiones

En esta tesis se desarrolló un sistema de ecuaciones de transporte apropiadas para estudiar flujos bifásicos, constituidos por fases gaseosas y medios granulares. El sistema considera las interacciones gas-partícula, así como colisiones inelásticas entre a lo más dos partículas de dicha fase. El resultado principal de dicho desarrollo es la formulación de una ecuación de transporte para la entropía del medio granular, con la que se busca obtener una ecuación para la mezcla junto con el medio gaseoso. La ecuación de entropía para el medio granular se evaluó usando datos experimentales, lo que permitió un primer análisis del fenómeno.

Del trabajo realizado, se tienen los siguientes resultados:

- Las ecuaciones de continuidad, momento, energía y entropía para las fases sólida y gaseosa.
- Las ecuaciones de continuidad, momento y energía para la mezcla, es decir, para el sistema combinado gas-partículas.
- Evaluación de la entropía de la fase granular haciendo uso de datos experimentales.

Es importante destacar que la ecuación de la entropía para la fase granular, no ha sido reportada en la literatura científica hasta donde se ha podido averiguar. Como parte del esquema general de análisis, también se recuperó la ecuación de

entropía para la fase gaseosa monofásica. Con la ecuación de la entropía para la fase granular en conjunto con la de la fase gaseosa monofásica, se puede obtener la de la mezcla con el mismo procedimiento usado por Lun para los casos de continuidad, momento y energía.

La forma en que se evaluó la ecuación de la entropía, a pesar de las simplificaciones realizadas, parece recuperar el fenómeno y dar un panorama entrópico adecuado del proceso. El término que se propuso para tomar en cuenta los efectos del arrastre, tiene el comportamiento esperado para el fenómeno físico: cuando los valores crecen la entropía también presenta un incremento. Lo anterior resulta coherente cuando se considera el arrastre como una “perdida” y por tanto existe un mayor cambio en la entropía.

Se debe hacer notar que la forma en que se manejan los datos experimentales para evaluar la entropía a partir de la ecuación, influye drásticamente en los resultados que se obtengan. Queda pendiente llevar a cabo más divisiones del grupo de muestra, así como variaciones al orden en que se toman los datos. Posteriormente, accediendo a un conjunto más amplio de datos experimentales, se podría realizar un tratamiento estadístico más completo, así como poder hacer uso de la ecuación que contempla una evolución temporal (5.2).

La mayor complicación que se presentó en la evaluación de la ecuación de transporte para la entropía, fue dar una expresión explícita a los términos relacionados con las colisiones. En este caso se hace necesaria una expresión para la entropía que dependa de la velocidad para poder integrar los términos χ y θ como establece la teoría. Con base en dicha dependencia, también se verían modificados los términos que dan cuenta de las interacciones con el gas. Aquí se plantea la posibilidad de que una expresión así podría obtenerse de las ecuaciones de estado.

Cabe resaltar la importancia de profundizar en la interpretación de los términos contenidos en las ecuaciones de transporte, así como en las implicaciones que tienen las diversas simplificaciones realizadas sobre ellos. También es necesario ampliar la discusión concerniente a las condiciones iniciales y de frontera. En particular, las condiciones iniciales representan un tema importante cuando se considera el caso general que depende del tiempo, es decir, cuando se quiere determinar la evaluación del campo de entropía del medio granular.

Finalmente, el valor de contar con una ecuación de transporte para la entropía (sea para el medio granular, para el gas, o para la mezcla) reside en el hecho de que, usualmente, el campo de entropía se calcula mediante un postproceso de los campos de temperatura y de velocidades. Investigaciones desarrolladas en otros contextos han establecido que tal forma de proceder conlleva errores significativos (p. ej. ver próxima publicación de A. Báez-Díaz et al., 2019). En este sentido, la formulación propuesta en este trabajo es lo suficientemente general como para abarcar diversos casos de estudio que pueden ser esencialmente distintos del proceso experimental considerado en esta tesis.

Bibliografía

- [1] Bird, R. B., Stewart, W. E., and Lightfoot, E. N. (2004). *Transport phenomena*. 2002. JohnWiley & Sons, New York.
- [2] Brilliantov, N. V., Poschel, T. (2004) *Kinetic Theory of Granular Gases*, Oxford University Press, United Kingdom, 1st ed.
- [3] Brennen, C. E. (2005) *Fundamentals of Multiphase Flow*, Cambridge U. Press.
- [4] Campbell, J. H. (2019). *Petrto Skills*. Online: <http://www.jmcampbell.com>.
- [5] Comisión Nal. Hidrocarburos (2012). *Dictamen del Proyecto de Explotación Lakach*. Gobierno Federal.
- [6] Di Lorenzo, M., Aman, Z. M., Kozielski, K., Norris, B. W. E., Johns, M. L., and May, E. F. (2018). *Modelling hydrate deposition and sloughing in gas-dominant pipelines*. Journal of Chemical Thermodynamics, 117, 81-90.
- [7] Echeverría C., Porta D., Guzmán J.E.V., Stern C. (2019). *Complexities of a High-Speed Particle-Laden Flow Uncovered by a Novel Particle Shadow Tracking Velocimetry Technique*, Powder Technology, Elsevier Editorial (submitted)
- [8] Editor (2019). *Offshore Technology*. Online: <http://www.offshore-technology.com>.

- [9] Fan, Liang-Shih, and Chao Zhu (2005). *Principles of gas-solid flows*. Cambridge University Press.
- [10] Gardiner, Crispin W. (1985). *Handbook of stochastic methods. Vol. 3*. Berlin: Springer.
- [11] Gidaspow, D. (1994) *Multiple Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*, Academic Press Inc., San Diego CA, 1st ed.
- [12] Hestroni, G. (1982) *Handbook of Multiphase Systems*, Hemisphere Publishing Corporation, McGraw-Hill Book Company, 1st ed.
- [13] Hirschfelder, J., Bird, R. B., and Curtiss, C. F. (1964). *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley.
- [14] Ishii, Mamoru, and Takashi Hibiki (2010). *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. Springer Science & Business Media.
- [15] Jackson, E. A. (2000). *Equilibrium statistical mechanics*. Courier Corporation.
- [16] Jenkins, J. T., and Savage, S. B. (1983). *A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles*. Journal of fluid mechanics, 130, 187-202.
- [17] Kolev, Nikolay Ivanov, and N. I. Kolev (2005). *Multiphase flow dynamics. Vol. 1*. New York, Heidelberg, Berlin: Springer.
- [18] Kramer-Bevan, Jeffrey Scott (1993). *A tool for analysing fluid flow losses*.
- [19] Laird, K. (2019). *Rigzone*. Online: <http://www.rigzone.com>.
- [20] Liboff, R. L. (2003). *Kinetic theory: classical, quantum, and relativistic descriptions*. Springer Science and Business Media.

- [21] Liu, H., Cao, W., Xu, J., Li, W., and Sun, Z. (2012). *Dispersion mode of granular jet in coaxial air jet*. Powder Technology, 217, 566-573.
- [22] Lun, C. K., and Savage, S. B. (2003). *Kinetic theory for inertia flows of dilute turbulent gas-solids mixtures*. In Granular gas dynamics (pp. 267-289). Springer, Berlin, Heidelberg.
- [23] Lun, C. K. K., Savage, S. B., Jeffrey, D. J., and Chepurniy, N. (1984). *Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield*. Journal of fluid mechanics, 140, 223-256.
- [24] Lundberg, J., and Halvorsen, B. M. (2008). *A review of some existing drag models describing the interaction between phases in a bubbling fluidized bed*. In Proc. 49th Scand. Conf. Simulation and Modeling, Oslo University College, Oslo, Norway (pp. 7-8).
- [25] Málek, Josef and Souček, Ondřej (2017). *Theory of Mixture: Course Lecture Notes*. Charles University, Prague.
- [26] Pita, J. A., and Sundaresan, S. (1991). *Gas-solid flow in vertical tubes*. AIChE Journal, 37(7), 1009-1018.
- [27] Reif, Frederick (2009). *Fundamentals of statistical and thermal physics*. Wiley and Press.
- [28] Rice, S. A., and Gray, P. (1965). *The statistical mechanics of simple liquids*. John Wiley, New York.
- [29] Savage, S. B., and Jeffrey, D. J. (1981). *The stress tensor in a granular flow at high shear rates*. Journal of Fluid Mechanics, 110, 255-272.
- [30] Schwarzkopf, John D., et al (2011). *Multiphase flows with droplets and particles*. CRC press.

- [31] Sinclair, J. L., and Jackson, R. (1989). *Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions*. AIChE journal, 35(9), 1473-1486.
- [32] Tennekes, H., and Lumley, J. L. (1972). *A first course in turbulence*. MIT press.
- [33] Wang, Z., Zhang, J., Chen, L., Zhao, Y., Fu, W., Yu, J., and Sun, B. (2018). *Modeling of hydrate layer growth in horizontal gas-dominated pipelines with free water*. Journal of Natural Gas Science and Engineering, 50, 364-373.
- [34] Woods, L. C. (1975). *The thermodynamics of fluid systems*. Clarendon Press, New York.