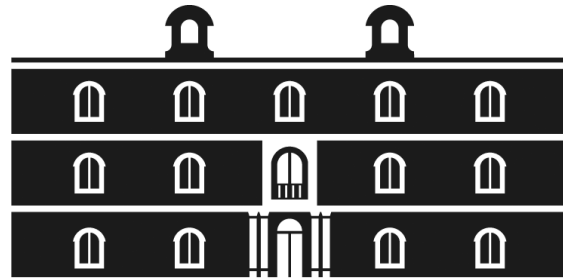




Universidad  
Politécnica  
de Cartagena



**industriales**  
etsii UPCT

# Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

**Titulación:** Ingeniería Industrial  
**Alumno/a:** María Zamora Pina  
**Director/a/s:** Juan Pedro Solano Fernández  
Ruth Herrero Martín

Cartagena, 25 de abril de 2016

# Índice

<b>Capítulo 1. Introducción y objetivos</b> .....	<b>7</b>
<b>1.1 Resumen del proyecto</b> .....	<b>8</b>
<b>1.2 Reactores de flujo oscilatorio</b> .....	<b>9</b>
1.2.1 Definición y terminología.....	9
1.2.2 Mecanismo de mezcla.....	12
1.2.3 Ventajas, limitaciones y algunas aplicaciones .....	14
<b>1.3 Definición del problema</b> .....	<b>16</b>
1.3.1 Geometrías estudiadas.....	16
1.3.2 Condiciones de operación.....	18
1.3.3 Números adimensionales.....	18
<b>Capítulo 2. Antecedentes teóricos</b> .....	<b>23</b>
<b>2.1 Trabajos previos</b> .....	<b>24</b>
2.1.1 Trabajos previos .....	24
<b>2.2 Reactores de mezcla multifásica</b> .....	<b>29</b>
2.2.1 Concepto y enfoque .....	29
2.2.2 Importancia de la hidrogenación.....	29
2.2.3 Tecnologías convencionales de hidrogenación.....	30
<b>2.3 Flujo multifásico</b> .....	<b>36</b>
2.3.1 Regímenes de flujo multifásico .....	36
2.3.2 Ejemplos de sistemas multifásicos.....	39
2.3.3 Modelos de flujo multifásico .....	40
2.3.4 Ecuaciones del movimiento .....	42
<b>2.4 Introducción a CFD</b> .....	<b>45</b>

## **Capítulo 3. Metodología de simulación numérica en Fluent .46**

<b>3.1</b>	<b>Esquemas numéricos</b> .....	<b>48</b>
3.1.1	Solver segregado.....	48
3.1.2	Solver acoplado .....	49
<b>3.2</b>	<b>Linealización: formulación implícita y explícita</b> .....	<b>51</b>
<b>3.3</b>	<b>Esquemas de interpolación y discretización</b> .....	<b>53</b>
3.3.1	Esquemas de discretización .....	54
3.3.2	Esquemas de interpolación en solver segregado .....	59
<b>3.4</b>	<b>Condiciones de contorno</b> .....	<b>66</b>
<b>3.5</b>	<b>Convergencia iterativa</b> .....	<b>68</b>
3.5.1	Residuos .....	68
3.5.2	Evaluación de las magnitudes fluidas durante el proceso de cálculo iterativo 70	
3.5.3	Criterios de convergencia .....	72

## **Capítulo 4. Flujos multifásicos. Metodología de simulación numérica en Fluent..... 73**

<b>4.1</b>	<b>Elección de un modelo multifásico</b> .....	<b>74</b>
4.1.1	Modelo Euler – Lagrange.....	74
4.1.2	Modelo Euler – Euler.....	74
<b>4.2</b>	<b>Modelo teórico Volume of Fluid (VOF)</b> .....	<b>78</b>
4.2.1	Cálculos estado estacionario y transitorio .....	78
4.2.2	Ecuación de la fracción volumétrica.....	79
4.2.3	Propiedades de los fluidos.....	84
4.2.4	Ecuación de momento .....	85
4.2.5	Ecuación de energía.....	85
4.2.6	Dependencia temporal .....	86

<b>4.3</b>	<b>Mixture model</b> .....	<b>87</b>
4.3.1	Resumen y limitaciones .....	87
4.3.2	Ecuaciones del modelo Mixture.....	88
<b>4.4</b>	<b>Eulerian model</b> .....	<b>91</b>
4.4.1	Resumen y limitaciones .....	91
4.4.2	Ecuaciones del modelo Eulerian .....	92
4.4.3	Ecuaciones del modelo Eulerian .....	94

## **Capítulo 5. Diseño y trayectoria de análisis en Fluent ..... 96**

<b>5.1</b>	<b>Diseño y configuración de un caso general en Fluent</b> .....	<b>97</b>
5.1.1	Carga de la geometría específica en Fluent.....	97
5.1.2	Definición del modelo.....	100
5.1.3	Definición de materiales.....	102
5.1.4	Condiciones de operación.....	104
5.1.5	Condiciones de contorno.....	105
5.1.6	Resolución y ajustes .....	108
<b>5.2</b>	<b>Trayectoria de análisis en Fluent</b> .....	<b>113</b>
5.2.1	Ascenso burbuja de aire en columna vertical.....	113
5.2.2	Columna vertical con inyección lateral de aire .....	114
5.2.3	Análisis con diferente mallado y diámetro de burbuja.....	119
5.2.4	Disminución factores de sub-relajación y modificación geométrica .....	121

## **Capítulo 6. Caso final. Presentación, análisis y resultados ..... 126**

<b>6.1</b>	<b>Preparación del caso final</b> .....	<b>127</b>
6.1.1	Inyección inferior de aire.....	127
6.1.2	Modificación del mallado y tanques .....	131
<b>6.2</b>	<b>Batería de simulaciones</b> .....	<b>134</b>

6.2.1	Casos a estudiar.....	134
6.2.2	Estrategia de resolución.....	137
<b>6.3</b>	<b>Vectores de velocidad de agua y aire .....</b>	<b>139</b>
6.3.1	Vectores de velocidad de agua.....	139
6.3.2	Vectores de velocidad de aire.....	146
<b>6.4</b>	<b>Análisis composición volumétrica aire .....</b>	<b>151</b>
6.4.1	Diagramas de fase aire .....	151
6.4.2	Análisis de resultados.....	166
<b>6.5</b>	<b>Análisis balance de masas.....</b>	<b>167</b>
6.5.1	Recogida de datos balances de masa.....	167
<b>6.6</b>	<b>Aumento temporal del análisis .....</b>	<b>171</b>
6.6.1	ReN10_St080_Re01954 .....	171
6.6.2	ReN35_St080_Re01954 .....	173
6.6.3	ReN100_St080_Re01954 .....	175
6.6.4	Análisis de los casos .....	177
<b>Capítulo 7. Conclusiones y trabajos futuros.....</b>		<b>178</b>
7.1	Conclusiones .....	179
7.2	Trabajos futuros.....	181
<b>Anexo 1. Códigos utilizados para la simulación en servidor Labmach .....</b>		<b>182</b>
A.1	Pbs .....	184
A.2	Jou .....	185
A.3	Entrada oscilatorio .....	186
A.4	Comandos necesarios .....	187
<b>Bibliografía .....</b>		<b>188</b>



# **Capítulo 1.**

## **Introducción y**

### **objetivos**

## **1.1 Resumen del proyecto**

Los reactores de flujo oscilatorio (OBR) son equipos tubulares aptos para el mezclado intensivo, en los que se superpone un flujo neto y un flujo oscilatorio. La velocidad del flujo neto que atraviesa el tubo es propia de un flujo laminar con muy bajo número de Reynolds, mientras que las velocidades superpuestas por la oscilación de tipo sinusoidal pueden ser de hasta tres órdenes de magnitud mayor. Los tubos contienen elementos insertados que promueven el mezclado radial -típicamente coronas circulares- y que proporcionan características de flujo pistón (plug flow) a la vez que se alcanzan tiempos de residencia muy altos.

En numerosas reacciones químicas se mezclan reactivos líquidos y gaseosos, junto con catalizadores sólidos, como es el caso de los procesos de hidrogenación. El mezclado del líquido y gas es fundamental para conseguir una reacción corta y sin productos secundarios.

En este proyecto se acomete la modelización del flujo líquido-gas en estas columnas, con el objetivo de poder evaluar las características de difusión y mezclado.



## 1.2 Reactores de flujo oscilatorio

### 1.2.1 Definición y terminología

Un **reactor de flujo oscilatorio** (OBR: Oscillatory Baffled Reactor) consiste en un conducto liso de sección transversal circular con deflectores insertados espaciados de manera equidistante.

La periodicidad geométrica que existe en dirección longitudinal del reactor permite definir lo que llamamos “paso” del reactor, como la región de longitud  $L$  encerrada entre dos deflectores consecutivos. Un OBR a escala industrial puede contener cientos de pasos.



Figura 1.1 OBR a escala industrial, formado por cientos de pasos.

El flujo que circula por el interior del reactor está compuesto por un **flujo neto**, caracterizado por una velocidad constante a lo largo del tiempo y un bajo número de Reynolds, sobre el que se superpone un **flujo oscilatorio**, cuya velocidad sigue una ley sinusoidal con el tiempo. En la práctica, la magnitud de la componente oscilatoria puede ser hasta tres órdenes de magnitud mayor a la componente neta:

$$u(t) = u_{net} + u_{osc} \quad (1.1)$$

$$u_{osc} = 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t) \quad (1.2)$$

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

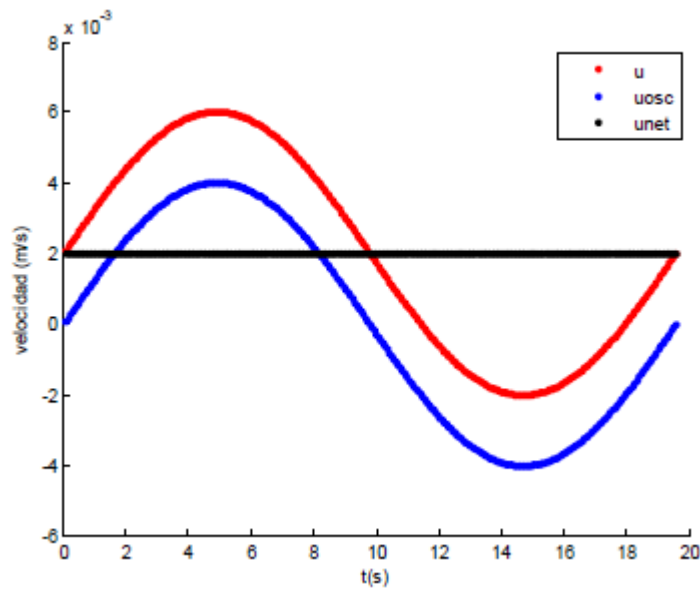


Figura 1.2 Composición de velocidades, flujo oscilatorio más neto

El movimiento oscilatorio sinusoidal puede venir dado por un **pistón** en uno de los extremos del reactor.

Otra forma de conseguir el flujo oscilatorio es mediante una estructura de deflectores que se mueven hacia arriba y abajo. Este tipo de reactor, conocido como **OBR-MB** (Moving Baffles), es utilizado más frecuentemente en vertical, mediante una columna corta con un número pequeño de pasos de reactor.

Una importante diferencia entre estos dos tipos de reactores es que los mayores esfuerzos cortantes existen en las esquinas de los deflectores en el **OBR-MB**, porque los deflectores mantienen el fluido en movimiento. En el OBR-MF (Moving Fluid), se forman zonas muertas cerca de las esquinas si no se forman torbellinos lo suficientemente fuertes. Se puede asumir que con fluidos más viscosos y laminares la diferencia entre OBR-MB y OBR-MF es más grande, pero se vuelve más pequeña con más turbulencia.

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

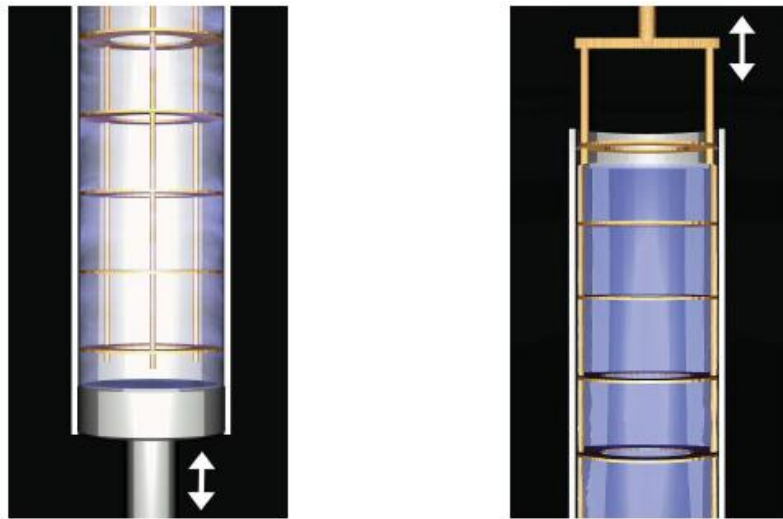


Figura 1.3 A la izquierda, OBR con deflectores fijos. A la derecha, OBR con deflectores móviles.

El objetivo de los deflectores, o elementos insertados, es favorecer un mejor mezclado en el interior del reactor con la estrangulación y relajación de la sección del tubo que genera vórtices en las proximidades de los deflectores. La geometría de los deflectores es muy variada.

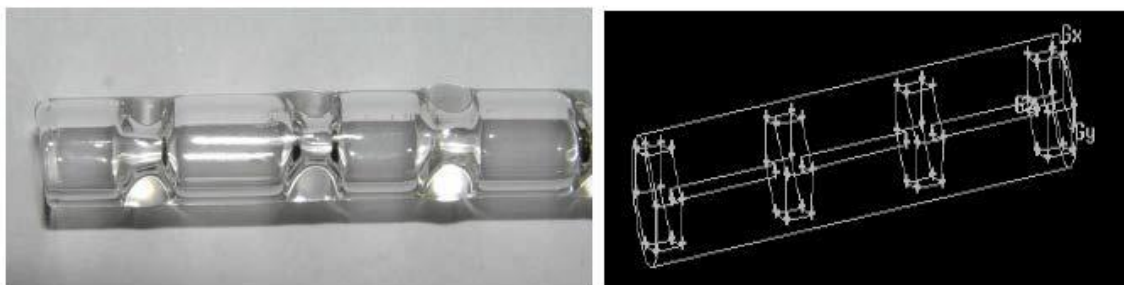
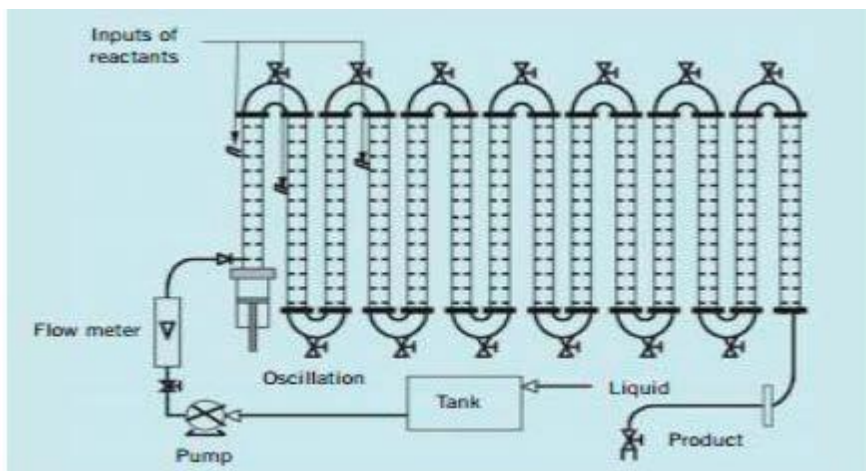


Figura 1.4 Ejemplos de deflectores

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

En la siguiente imagen podemos ver un OBR de flujo continuo. La bomba genera el flujo continuo, el pistón crea la componente oscilatoria y los deflectores equiespaciados crean la vorticidad que mejora el mezclado.



**Figura 1.5 Esquema de funcionamiento en un reactor de flujo continuo**

**1.2.2 Mecanismo de mezcla**

En un conducto circular sin deflectores, el mezclado axial es principalmente debido al gradiente de velocidades, mientras que el mezclado radial es resultado de la difusión molecular o autodifusión, entendida como el mezclado espontáneo de moléculas que se lleva a cabo en la ausencia de gradiente de concentración (o potencial químico).

El patrón de movimiento del flujo en el interior de un OBR es generado por el efecto combinado de la presencia de elementos insertados y la existencia de flujo oscilatorio superpuesto. El flujo se acelera y se desacelera según una ley sinusoidal para la velocidad en función del tiempo. Con cada aceleración del flujo se forman anillos de vorticidad aguas abajo de los deflectores. Cuando el flujo se desacelera se forman nuevos anillos de vorticidad en el lado opuesto de los deflectores que, a su vez, desplazan a los anillos formados durante la aceleración hacia la región entre los deflectores. El mezclado axial es debido al flujo oscilatorio y el mezclado radial es causado por los vórtices producidos por las interacciones entre el fluido y la presencia de deflectores.

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

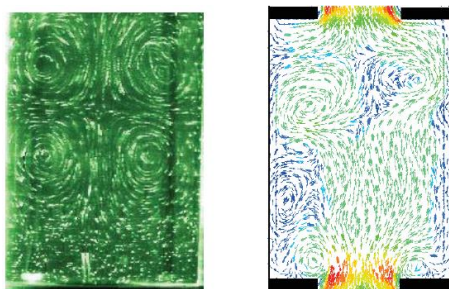


Figura 1.6. Caso real a la izquierda y simulación por CFD a la derecha

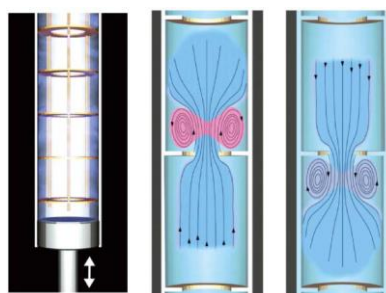


Figura 1.7. Vorticidades generadas por los deflectores con el flujo oscilatorio

La interacción entre los anillos de vorticidad creados durante la aceleración y desaceleración del flujo da lugar a complejas estructuras vorticales que intensifican el proceso de mezcla. En la Figura 1.8 se muestra esquemáticamente este mecanismo:

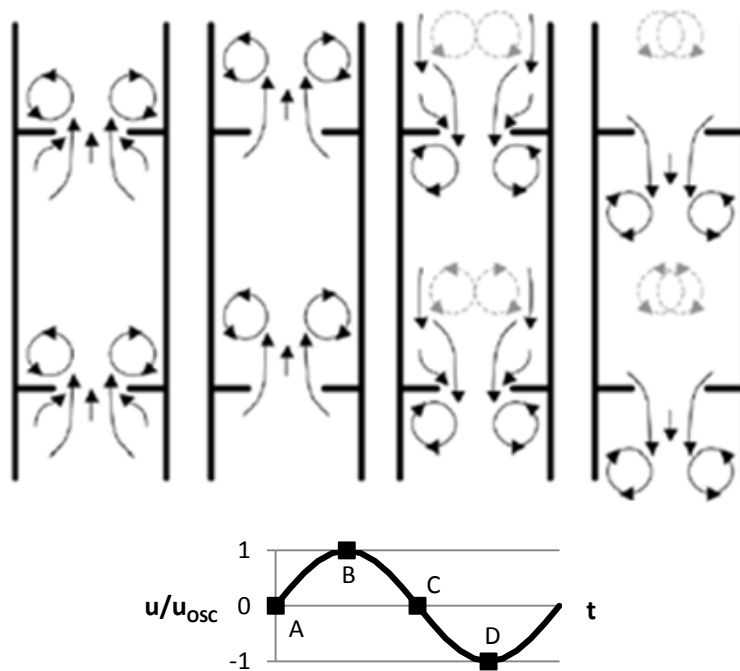


Figura 1.8. Esquema del mecanismo de mezcla en reactores de flujo oscilatorio

Con la repetición sucesiva de ciclos de formación de anillos de vorticidad, la elevada componente de velocidad radial que se alcanza genera una mezcla uniforme en cada región entre deflectores, que se acumula a lo largo de la longitud del reactor [9, 12, 13]. Este mecanismo de mezcla posee, por tanto, periodicidad espacial y periodicidad temporal, ya que las estructuras vorticales son las mismas en cada una de las regiones entre deflectores, y se

## Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

repiten con cada ciclo velocidad-tiempo. En la Figura 1.9 se muestra una visualización de este mecanismo de mezcla [52]:

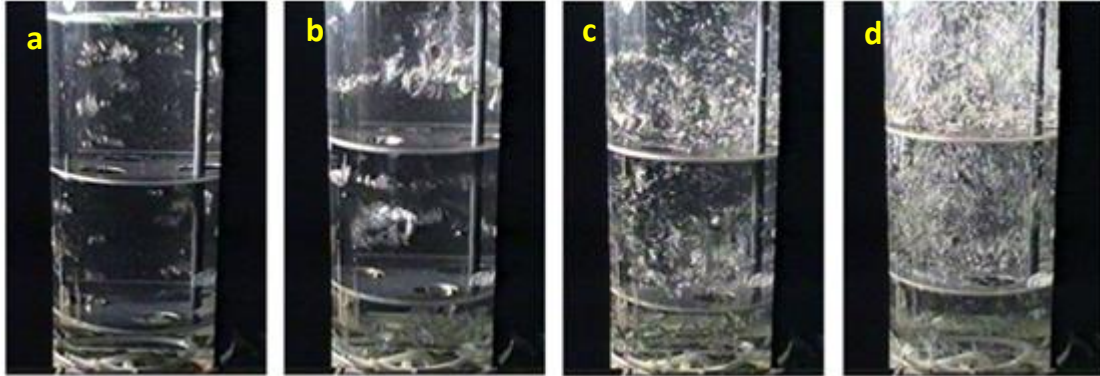


Figura 1.9. Visualización del mecanismo de mezcla. Sin oscilación (a). Comienzo de la oscilación (b). Tras un ciclo completo de oscilación (c). Tras varios ciclos completos de oscilación (d).

### 1.2.3 Ventajas, limitaciones y algunas aplicaciones

Los reactores de flujo oscilatorio presentan grandes **ventajas** en comparación con los reactores de agitación tradicionales:

- Tiempo de reacción más corto, debido a un mejor mezclado. Esto permite producir mayores volúmenes de producto en menor tiempo.
- Mejora la transferencia de calor.
- Reduce el consumo de energía y por tanto los costes de funcionamiento.
- Diseño compacto que reduce el espacio necesario para su instalación.
- Velocidades del flujo lentas, al contrario que las grandes velocidades superficiales que necesitan los reactores de agitadores convencionales para realizar el mezclado con eficacia.
- Mayor control de la reacción, modificando las condiciones del flujo oscilatorio y la geometría de los elementos insertados.

### Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

También hay que tener en cuenta ciertas **limitaciones**:

- Si en la reacción participa un gas, éste tendrá una capacidad límite en torno al 15% ya que los gases amortiguan la propagación de la oscilación perdiendo efectividad en la mezcla y la reacción.
- La viscosidad, a partir de ciertos valores, puede ser otro problema ya que reduce la eficiencia del mezclado. Una opción sería aumentar la temperatura de trabajo para reducir la viscosidad, aunque esto dependerá de las características de la reacción buscada.

Como **aplicaciones** estos sistemas se utilizan en las industrias química, farmacéutica y bioquímica. Algunas de estas aplicaciones son polimerización, fermentación, síntesis orgánica. Una importante aplicación es la fabricación de polímeros mediante la polimerización por suspensión. En este proceso se mezcla una fase acuosa, generalmente agua, con una cierta cantidad de monómero insoluble, dando lugar a la formación de gotas de monómero en la fase acuosa. El OFR permite obtener una distribución adecuada y uniforme del tamaño de las partículas de polímero a través de control óptimo de las condiciones de mezcla, especialmente de la temperatura, así como evitar la fusión de las gotas de monómero durante la reacción. Con la polimerización en suspensión se producen polímeros como el cloruro de polivinilo, el poliestireno o las resinas de intercambio de cationes y aniones, y más recientemente el metacrilato de metilo, la acrilamida y el estireno.

Una de las aplicaciones potenciales más atractivas para los reactores de flujo oscilatorio es la producción de biocarburantes. El empleo de reactores tipo tanque de agitación es una tecnología suficientemente conocida, y cuya eficiencia es ya difícilmente mejorable. Por ello se trabaja actualmente en el desarrollo de reactores intensificados: reactores estáticos, reactores con micro-canales, reactores con cavitación, reactores rotativos y reactores de flujo oscilatorio. Estos dispositivos están caracterizados por la miniaturización de los equipos tubulares, un mayor grado de conversión y una menor cantidad de catalizador, el uso de condiciones de proceso más suaves, la reducción de los costes energéticos asociados y el aumento de la capacidad de producción. En última instancia, estas nuevas tecnologías permitirán aumentar la competitividad de las instalaciones de producción de biodiesel.

Recientemente se ha demostrado la viabilidad del OFR para la producción mejorada de biodiesel a partir de semillas oleaginosas, como la *jatropha curcas*, y para la fermentación de bioalcoholes a partir de materias primas lignocelulósicas.

## 1.3 Definición del problema

El problema fluidodinámico que se plantea en este Proyecto Fin de Carrera es el estudio del proceso de mezclado en un reactor de flujo oscilatorio (Oscillatory Baffled Reactor, OBR) con deflectores fijos. El estudio se centra en el problema mecánico del flujo oscilatorio, sin abordar el problema térmico. El fluido es oscilado axialmente por acción directa del pistón, permaneciendo fijos los orificios deflectores.

### 1.3.1 Geometrías estudiadas

Para el estudio de nuestro problema hemos trabajado con dos geometrías diferentes, adaptando ésta para crear una situación de mezclado más favorable. Comenzamos abordándolo a partir de un conducto liso de sección transversal circular de diámetro  $D = 25\text{mm}$ , en el que se insertan una serie de deflectores con orificios de diámetro  $d = 10.5\text{mm}$  y espesor  $e = 1.5\text{ mm}$ , separados una distancia  $L = 3.5\text{mm}$ , de manera equidistante. Además, contaremos con unos conductos laterales de diámetro  $D' = 5\text{mm}$  por los que se producirá la inyección de aire.

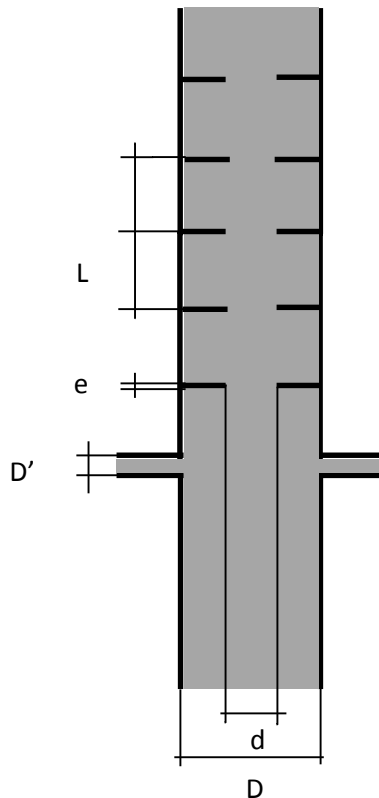


Figura 1.10. Primera geometría del reactor de flujo oscilatorio.



**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Tras los primeros resultados recopilados optamos por una variación de la geometría con el fin de obtener mejor mezclado entre fases, con una relación de  $L/D$  mayor (lo que se traduciría como una longitud mayor de nuestro conducto), mayor número de deflectores (diez, concretamente) y el aire inyectado por la parte inferior, sin conductos laterales. El conducto contará con una sección transversal circular de diámetro  $D = 25\text{mm}$ , en el que se insertan diez deflectores con orificios de diámetro  $d = 10.5\text{mm}$  y espesor  $e = 1.5\text{mm}$ , separados una distancia  $L = 3.5\text{mm}$ , de manera equidistante. El aire tendrá un diámetro en su sección de entrada de  $d' = 10.5\text{mm}$ .

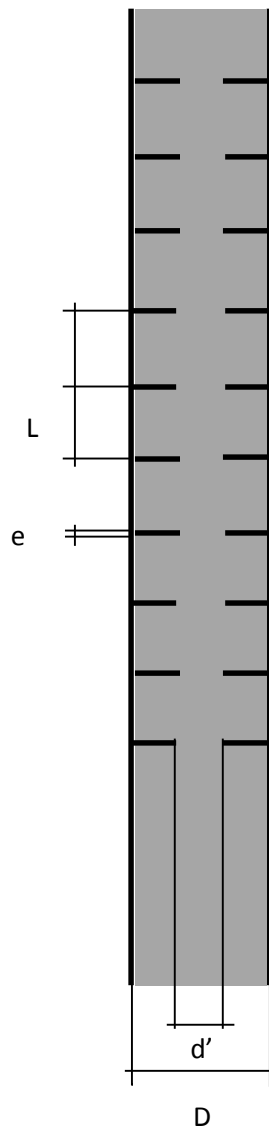


Figura 1.11 Geometría final del reactor de flujo oscilatorio.

### 1.3.2 Condiciones de operación

Los fluidos de trabajo utilizados para las simulaciones son:

- Agua, con propiedades, a 25 °C:
  - Densidad:  $\rho = 998,2 \text{ kg/m}^3$
  - Viscosidad dinámica:  $\mu = 0,001003 \text{ kg/ms}$
  - Viscosidad cinemática:  $\nu = 1,004809 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
  - Coeficiente de autodifusión:  $D_w^* = 2.299 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$
- Aire, con propiedades a 25 °C:
  - Densidad:  $\rho = 1.225 \text{ kg/m}^3$
  - Viscosidad dinámica:  $\mu = 1.789 \cdot 10^{-5} \text{ kg/ms}$
  - Viscosidad cinemática:  $\nu = 1.565 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

Los parámetros de funcionamiento del hipotético pistón, encargado de originar el movimiento oscilatorio son:

- Amplitud de oscilación ( $x_0$ ) (m)
- Frecuencia de oscilación ( $f$ ) (Hz)
- Velocidad de oscilación ( $u$ ) (m/s)

Entonces, el desplazamiento “peak-to-peak” ( $x_p$ ) y la velocidad ( $u_p$ ) del pistón vienen dados por:

$$x_p(t) = -x_0 \cos(2\pi ft)$$

$$u_p(t) = \frac{dx_p}{dt} = 2\pi x_0 \sin(2\pi ft)$$

### 1.3.3 Números adimensionales

La naturaleza dinámica de OFM puede actualmente ser caracterizada por unos pocos grupos adimensionales fundamentales, a saber: el número clásico Reynolds,  $Re_n$ , el número de Reynolds oscilatoria,  $Re_o$ , y el número Strouhal. Además, dos parámetros geométricos sin dimensiones contribuyen a describir la mecánica de fluidos dentro de OBR: el espaciamiento

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

entre deflectores definido como  $L / d_i$ , y la zona de libre deflector,  $\alpha$ , definidos como:  $d_0 / d_i$ . A continuación se presenta una breve definición de cada grupo adimensional.

○ **Net-flow Reynolds number,  $Re_n$**

En el flujo en las tuberías del número de Reynolds,  $Re_n$ , es el número adimensional que se utiliza como el indicador del tipo de flujo en cuestión y captura todos los parámetros que se muestran en la Figura 1.12.



Figura 1.12 El flujo neto en un tubo liso.

El número de Reynolds se define como sigue

$$Re_n = \frac{u \cdot d}{\nu} \tag{1.3}$$

donde  $d$  es el diámetro del tubo,  $\nu$  la viscosidad cinemática del fluido y  $u$  la velocidad media superficial de flujo.

○ **Oscillatory Reynolds number,  $Re_o$**

Cuando un movimiento oscilatorio se superpone sobre el flujo neto (Figura 1.) un grupo adimensional adicional es a menudo necesaria para caracterizar un movimiento, en conjunción con el anteriormente definido  $Re_n$ .



Figura 1.13 Movimiento oscilatorio superpuesto a un flujo neto.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

La caracterización de tal flujo oscilatorio puro (POF) puede ser retrotraído a la década de 1940. Desde entonces, el flujo oscilatorio fue estudiado por varios arreglos de tubo. En todos los trabajos publicados, la caracterización de POF se logró mediante el uso de un grupo adimensional llamado el número pulsante Reynolds,  $Re_p$ , definido como:

$$Re_p = \frac{u_p d}{\nu} \quad (1.4)$$

donde  $U_p$  es la velocidad de pulsación. En la mayoría de casos,  $U_p$  se tomó como el producto de  $x_0 \omega$  y  $Re_n$ ,  $Re_p$  describe el movimiento oscilatorio aplicado al sistema, da una medida del estado de flujo en cuestión. 20

( $= \pi f x_0 A_{piston} / A_{Tube}$ ), donde  $A_{piston}$  y  $A_{pipe}$  son las áreas de sección transversal del pistón y el tubo, respectivamente. No se dieron razones por qué se utilizó ' $\pi f$ ' en lugar de ' $2\pi f$ '. Sinada y Karim, utilizan un enfoque diferente: se sustituyen por  $u$  y  $d$  por el espesor de la capa, Stokes define como  $\delta' = (2\nu/\omega)$  en la ecuación anterior, cuando se trabaja con una aplicación especial, usando una longitud de carrera fija.

La situación es más compleja cuando se impone un movimiento oscilatorio en un flujo neto en presencia de deflectores (Figura 1.1).

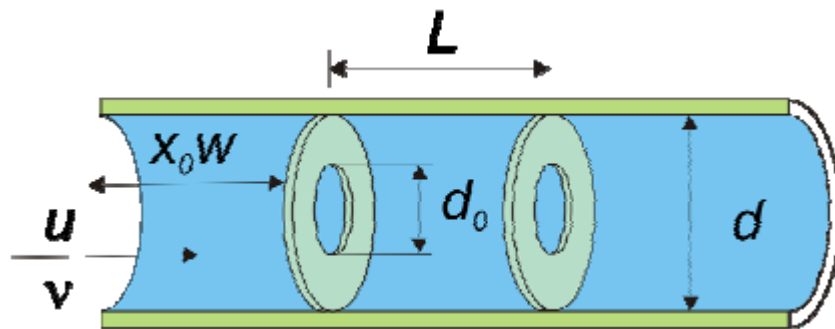


Figura 1.14 El flujo oscilatorio aleteado

Después de los estudios anteriores, Brunold definió el primero de los dos grupos adimensionales que controlan la mecánica de fluidos de OBR: el número de Reynolds oscilatoria,  $Re_0$ :

$$Re_0 = \frac{\omega x_0 d}{\nu} \quad (1.5)$$

$Re_p$  y  $Re_0$  tanto para POF y OBR son básicamente idénticos. Sin embargo, describen diferentes estados de flujo, ya que, en ciertas condiciones oscilatorias, la mecánica de fluidos en la Figura

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

1.3 predominantemente será axial, mientras que en la Figura 1.14 será compleja y caótica con magnitudes similares para ambos componentes axiales y radiales de velocidad.

Puesto que el oscilador funciona normalmente sinusoidalmente, las variaciones en el tiempo de desplazamiento,  $x$ , la velocidad,  $v$ , y la aceleración,  $a$ , toman las formas de:

$$x = x_0 \sin(\omega t) \quad (1.6)$$

$$v = x_0 \omega \cos(\omega t) \quad (1.7)$$

$$a = -x_0 \omega^2 \sin(\omega t) \quad (1.8)$$

donde  $\omega$  es la velocidad angular del pistón y  $x_0$  es la amplitud de oscilación, medida de centro-a pico. La velocidad máxima durante el ciclo de oscilación es ' $x_0 \omega$ ', como se ve en la ecuación anterior cuando ' $\cos(\omega t) = 1$ '. Se da un ejemplo en la Figura 1.15.

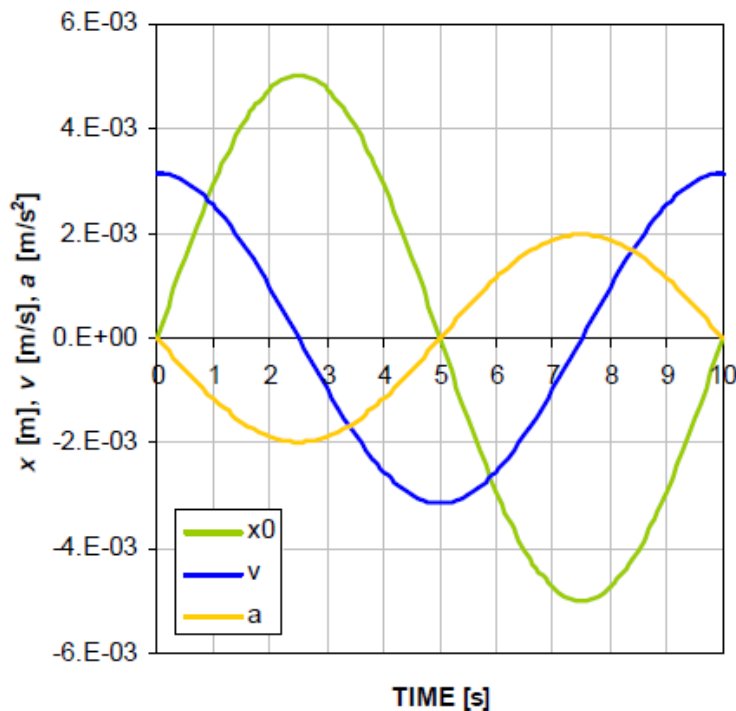


Figura 1.15 Ejemplificación del movimiento sinusoidal de un pistón (desplazamiento,  $x$ , la velocidad,  $v$ , y la aceleración,  $a$ ) para  $\omega = 0,62 \text{ rad / s}$  (es decir,  $0,1 \text{ Hz}$ ), y  $x_0 = 5 \text{ mm}$ .

A partir de estudios extensos, ahora existe una sólida comprensión de la naturaleza de mezcla en un OBR. A bajas  $Re_o$  de entre 100 a 300, los vórtices se generan axilsimétricamente dentro de cada cavidad aleteada (modo de flujo de pistón). Cuando  $Re_o$  aumenta aún más, la simetría

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

se rompe y el flujo se vuelve intensamente mixto y caótico; el flujo alcanza el modo de mezcla, tal como se define por  $Ni$ .

- **Strouhal number,  $St$**

La descripción de POF se desarrolla aún más cuando se incorporan inserciones de tubos o diferentes formas de tubo. Sobey (1980) introdujo otro número adimensional, aparte de  $Rep$ , cuando se trabaja en un flujo a través de un canal de fruncido para tener en cuenta los parámetros adicionales implicados. Este fue nombrado el número Strouhal,  $St_f$ :

$$St_f = \frac{f h}{u_{peak}} \quad (1.9)$$

donde  $h$  es la anchura del canal medio y  $u_{peak}$  la velocidad máxima a la anchura máxima del canal,  $H_{max}$ . El significado físico de dicho grupo adimensional solo fue dado en la obra posterior de Sobey como la relación de la escala de longitud de canal a la escala del desplazamiento de partículas de fluido. Desde entonces, la caracterización de diversas estructuras en los flujos oscilatorios ha seguido una línea similar (por ejemplo, Nishimura).

Al final de la década de 1980, Brunold et al. (1989) siguió ejemplos y definiciones de Sobey e informó del segundo grupo adimensional para definir la mecánica de fluidos en OFR de, en referencia a él como el número de Strouhal  $St$ : representa una medida de la propagación eficaz del remolino y se define como la relación del diámetro de la columna a la longitud de la carrera:

$$St = \frac{d}{4 \pi x_0} \quad (1.10)$$

Esta redefinición de  $St$  es en realidad la más utilizada. En una forma simplificada,  $St$  representa la relación del diámetro del orificio a la amplitud de oscilación.

# **Capítulo 2.**

## **Antecedentes**

### **teóricos**

## 2.1 Trabajos previos

### 2.1.1 Trabajos previos

#### 2.1.1.1 Principios de la década de los 90 hasta hoy

Si bien es cierto que es partir de los años 90 cuando crece el interés por el desarrollo tecnológico de los reactores de flujo oscilatorio, es relevante destacar la labor de aquellos investigadores que se adelantaron en el estudio del flujo oscilatorio. Por ejemplo, ya en el año 1983, Hwang y Dybbs se ocuparon de la transferencia de calor en este tipo de flujo, presentando datos para diferentes amplitudes de oscilación. También en 1983, Sobey analizó el tiempo de residencia en flujos oscilatorios.

Uno de los investigadores pioneros en el estudio del flujo oscilatorio en tubos con orificios deflectores insertados fue Howes, que en 1988 publicó un trabajo acerca de la dispersión en OBF, apoyado en simulaciones numéricas. En 1989 Brunold et al. presentaron uno de primeros modelos de flujo experimentales para OBF. Ese mismo año, Dickens et al. caracterizaron experimentalmente el comportamiento de la mezcla en reactores de flujo oscilatorio convencionales, a través de la evaluación de la distribución del tiempo de residencia mediante inyección de trazador. En 1990, Howes y Mackley continúan con el estudio de la dispersión en OBF. También en 1990, Mackley et al. publicaron datos de la transferencia de calor en un mezclador con los que demostraron que un flujo oscilatorio superpuesto proporciona un aumento significativo de la transferencia de calor con respecto al mismo gasto másico en un tubo liso. Pusieron de manifiesto que tanto la oscilación del flujo como los orificios deflectores tienen que estar presentes para producir este efecto.

A partir de entonces, el número de trabajos acerca del flujo oscilatorio en reactores químicos aumenta muy considerablemente. Las áreas de investigación científica han incluido, entre otras, modelos de flujo (Mackley y Ni, en 1991 y 1993), perfiles locales de velocidad y distribución de esfuerzo cortante (Ni et al., en 1995), distribución del tiempo de residencia (Mackley y Ni, en 1991 y 1993; Ni, en 1994), dispersión (Mackley y Ni, en 1991 y 1993; Ni, en 1995), transferencia de calor (Mackley y Stonestreet, en 1995), transferencia de masa (Hewgill et al., en 1993; Ni et al., en 1995; Ni y Gao, en 1996), mezcla y separación de partículas (Mackley et al., en 1993),



**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

perfiles de velocidad de partículas (Liu et al., en 1995), reacción (Ni y Mackley, en 1993), correlaciones de escalado (Ni y Gao, en 1996), deflectores oscilantes en flujo oscilatorio (Baird y Rama Rao, en 1995; Stonestreet, en 1995) o parámetros adimensionales de caracterización del flujo (Zhao y Cheng, en 1995).

Ante el elevado número de estudios existentes, diferentes autores efectúan una labor de revisión y compilación de la bibliografía. Por ejemplo, en el año 2002, Ni et al. realizaron una detallada descripción de los trabajos previos acerca de simulación numérica en reactores de flujo oscilatorio con orificios deflectores, publicados hasta mediados de 1990. En 2003, Ni et al. presentaron una completa revisión de las aplicaciones de la tecnología de flujo oscilatorio hasta la fecha. En este último trabajo además se llevó a cabo una de las primeras simulaciones numéricas 3D en CFD del flujo oscilatorio en una columna con deflectores.

En cuanto a los trabajos más recientes, cabe destacar la presentación, en 2005, de los perfiles de temperatura experimentales del flujo oscilante, en pared y fluido, en diferentes condiciones de oscilación, por parte de Bouvier et al. También en 2005, Jian y Ni publican un estudio numérico del comportamiento del escalado en las columnas oscilatorias con deflectores en modo por lotes, en el que se demuestra que el escalado de un OBC puede ser tratado como lineal.

En los últimos años, tiene una especial importancia el desarrollo de reactores de flujo oscilatorio con orificios deflectores en meso escala, para el análisis de procesos en laboratorio. Son dispositivos con volúmenes del orden de mililitros, normalmente en torno a 5 mm de diámetro , y con secciones transversales de diámetro , considerablemente menores que en los diseños convencionales de OFR. En 2005, Reis et al. presentaron un novedoso meso-reactor de flujo, compuesto por tubos lisos con constricciones periódicas, demostrando con estudios experimentales y numéricos que es posible alcanzar una buena mezcla con este tipo de dispositivos:

## Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

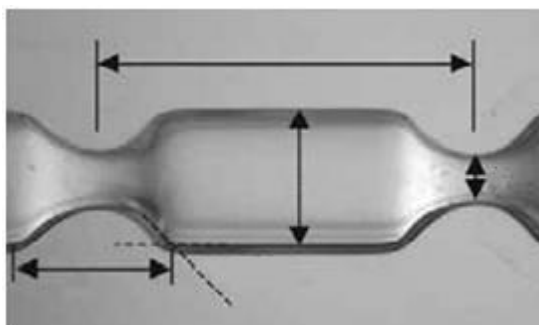


Figura 2.1. Meso-reactor de flujo oscilatorio.  $D=4.4$  mm,  $L=13$  mm,  $\delta=6$  mm,  $D_0=1.6$  mm

Como mostraron Harvey et al. en 2003 [40] y Reis et al. en 2006, estos meso-reactores pueden funcionar a velocidades de flujo más bajas que los reactores de flujo oscilatorio convencionales (desde l/min a ml/min), y permiten reducir la cantidad de materia prima requerida en el proceso y los materiales de desecho generados. Más recientemente, autores como Phan y Harvey, en 2010 y 2011, y Phan et al. en 2011, han puesto de manifiesto la viabilidad del escalado directo de estos sistemas, desde la escala de laboratorio hasta escala industrial, así como la posibilidad de utilizarlos como plataformas de producción a pequeña escala.

### 2.1.1.2 Columnas de flujo oscilatorio. Aportaciones de Xiong – Wei Ni

Como se desprende de la revisión de trabajos previos del apartado anterior, Xiong- Wei Ni y sus colaboradores han sido y son unos de los investigadores más prolíficos en cuanto a la publicación de estudios sobre flujo oscilatorio, siendo además los pioneros en la simulación numérica tridimensional. Debido a la estrecha relación de los objetivos del presente Proyecto con la línea de estudio de X. Ni, los trabajos publicados por éste han sido especialmente consultados durante la realización de este Proyecto.

A continuación se destacan algunos de dichos trabajos, que han servido como guía a la hora de definir el problema y establecer las hipótesis de simulación en este Proyecto.

En 2001, Ni y Pereira presentan una investigación experimental de la distribución del tamaño de gota en un reactor de flujo oscilatorio con orificios deflectores, operando en modo continuo, en la que reflejan la importancia de los parámetros de amplitud y frecuencia de oscilación en la mezcla. En este trabajo se evalúa el número mínimo de gotas necesarias para obtener una muestra representativa de la distribución del tamaño, y se establece la correspondencia de dicha distribución con una función gaussiana. Asimismo se pone de manifiesto que, para un tamaño

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

medio de gota dado, el modo de funcionamiento continuo requiere una menor potencia de entrada que el modo por lotes en la columna.

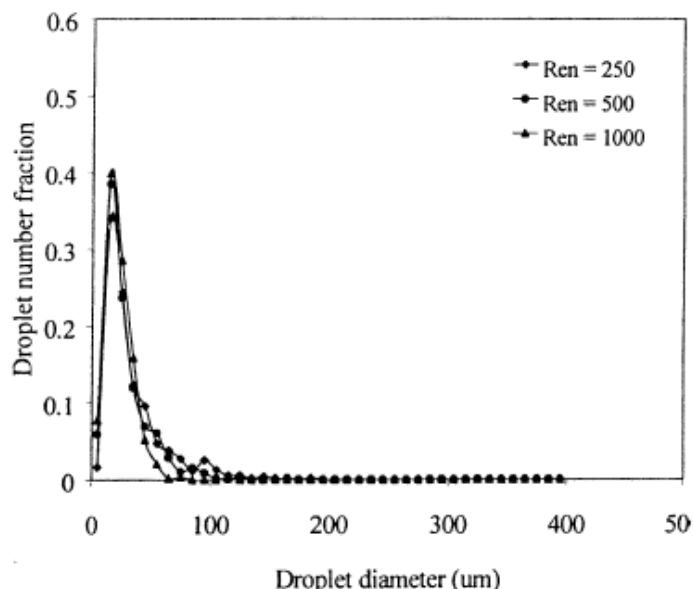


Figura 2.2. Típica forma gaussiana de la distribución del tamaño de gota en un reactor de flujo oscilatorio.

En 2002, Ni et al. analizan el efecto de la densidad en la dispersión axial en una columna de flujo oscilatorio con orificios deflectores funcionando en modo por lotes, midiendo experimentalmente los perfiles locales de concentración y determinando los coeficientes de dispersión axial. Si bien es cierto que entre los objetivos del Proyecto no se han considerado la obtención numérica de la distribución del tamaño de gota ni de los perfiles de concentración, sí pueden ser éstas líneas de investigación interesantes para futuros trabajos.

También en 2002, Ni et al. realizan la primera simulación numérica en 3D con CFD de los patrones de flujo en régimen asimétrico en una columna de flujo oscilatorio con orificios deflectores. Hasta este trabajo, todos los datos publicados se centraban en la región de formación de remolinos de manera simétrica a lo largo de la línea central de la OBC. En 2003, Ni et al. aplican, por primera vez de manera conjunta, la simulación numérica y la técnica de velocimetría digital de imágenes para cuantificar las propiedades turbulentas del flujo oscilatorio en una OBC: disipación de energía cinética turbulenta, tasa de energía cinética turbulenta, escala de longitud integral turbulenta y escala de tiempo de Kolmogorov.

En 2005, Jian y Ni publican un estudio numérico acerca del comportamiento del escalado en tres columnas oscilatorias con orificios deflectores, con diámetros de 50, 100 y 200 mm

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

respectivamente. Demuestran que el aumento de escala es lineal y que las condiciones mecánicas del fluido en términos de ratios de velocidad son independientes del factor de escala.

Ese mismo año, Ni participa en una investigación experimental y numérica sobre el efecto de la viscosidad de la mezcla en una OBC. Se revela que, tanto en fluidos newtonianos como no-newtonianos, a medida que la viscosidad aumenta, el flujo se vuelve más simétrico y centralizado en el orificio, empobreciendo el mezclado.

## 2.2 Reactores de mezcla multifásica

### 2.2.1 Concepto y enfoque

Al igual que con cualquier crisis, la reciente recesión económica presenta riesgos y oportunidades para las empresas. Esto es especialmente cierto para la industria química europea. Durante mucho tiempo un centro neurálgico de la economía mundial, la industria europea se enfrenta con la necesidad de tomar decisiones difíciles sobre su desarrollo y futuro papel de cara a la creciente competencia del exterior.

Actualmente la intensificación de procesos ha recibido una atención generalizada debido a su potencial para lograr una importante reducción en los costes de capital así como su capacidad para mejorar su rendimiento.

El uso de OBR para el desarrollo de reacciones químicas multifásicas supone un nuevo enfoque y cambio innovador de intensificación de procesos químicos. La mejora de la productividad a través de la reducción de costes operativos disminuyendo manera significativa el volumen del reactor (a baja presión, baja temperatura y menos energía) no es un asunto trivial. De hecho, el enfoque clásico de aumento de la productividad favorece el aumento de temperatura/presión para mejorar el rendimiento general del sistema. Este enfoque se realiza en detrimento de la reducción de costes operativos y de capital ya que los reactores convencionales de depósito agitados de alta presión son muy caros y muestran limitaciones de descomposición del producto, pérdida de selectividad, reacciones colaterales, transformación parcial (con la necesidad de reciclar) conduciendo a una pérdida de materia prima.

### 2.2.2 Importancia de la hidrogenación

La continua innovación en tecnología de hidrogenación es un testimonio de su creciente importancia en la fabricación de productos químicos finos. Las novedades en el equipo, intensificación de procesos y catálisis representan los principales temas que se han experimentado avances recientes. La hidrogenación catalítica heterogénea es muy importante en los procesos industriales. En los procesos petroquímicos, la hidrogenación se utiliza para saturar los alquenos y aromáticos, lo que hace que sean menos tóxicos y reactiva. Hidrogenación

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

también es importante en el tratamiento debido a que la mayoría de aceites vegetales que contengan ácidos grasos poli-insaturados. La hidrogenación parcial reduce la mayoría, pero no todos, los enlaces dobles de carbono-carbono, lo que es mejor para venta y consumo (cosmetología). La mayoría de los procesos de hidrogenación en petroquímica, industria química o farmacéutica son operados en ineficientes reactores “batch slurry” o en inflexibles reactores de lecho fijo continuo (alta demanda de energía, extracción y recarga catalizador...)

**2.2.3 Tecnologías convencionales de hidrogenación**

La catálisis heterogénea tiene el potencial de ofrecer un producto de destino con alta economía del átomo en condiciones de bajas temperaturas y presiones en comparación con otros procesos no catalíticos. La petroquímica, química fina, productos agroquímicos, productos cosméticos y farmacéuticos requieren catálisis heterogénea.

Los principales reactores comúnmente utilizados para procesar la hidrogenación en la industria se recogen la siguiente tabla.

Reactor	Batch slurry reactor	Reactor de circuito	Reactor de lecho fijo con flujo intermitente	Reactor oscilatorio con deflectores
Modo Funcionamiento	Bach	Semi-batch	Flujo continuo	Flujo continuo
Estrategia catalizador	Slurry	Slurry	Fijo	Slurry/fijo

Tabla 2.1 Características de los principales reactores utilizados para procesar la hidrogenación

○ **Batch slurry reactors (stirred tank)**

En reactores tanque agitado tradicional (Figura 2.3), El hidrógeno es alimentado a través de un tubo de aspersión por debajo de una turbina Rushton de punta plana; sin embargo, la eficacia de la mezcla y transferencia de masa se pierde capacidad en esta disposición el impulsor se inunda con gas y el poder de transferencia al líquido se reduce. Rociadores de hidrogeno subsuperficial, helicoidal y serpentines de enfriamiento helicoidales internos se utilizan a menudo para superar estas limitaciones. Por desgracia, actualmente el Good Manufacturing Process (GMP), serie de protocolos diseñados para reducir la contaminación cruzada entre los lotes puede restringir el uso de estos equipos. La hidrogenación consiste en tres fases: (a)

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

catalizador sólido las partículas deben ser suspendidos en una (b) fase líquida o una mezcla en la que (c) H<sub>2</sub> gas es introducido, transportado y disuelto en la fase líquida y reacciona en la interfaz de sólido-líquido-gas. Para procesos eficientes, el tamaño de burbuja debe ser pequeño, la intensa distribución de burbujas y tiempo de retención de fase de gas son objetivos clave que son rara vez alcanzable en reactores de tanque agitado tradicionales. En estos reactores convencionales la mezcla es alta cerca de la turbina, mientras que pobre lejos de la agitación; dando lugar a gradientes de mezcla dentro del recipiente. Para compensar la mezcla ineficiente y de transferencia de masa, se suministra a menudo exceso de H<sub>2</sub> (en cantidad y presión), con poco impacto, pero el H<sub>2</sub> redundante produce un riesgo operacional. Sin embargo, la hidrogenación en un reactor de suspensión de tres fases de proceso por lotes es una tecnología clásica y bien establecida y se usa en la fabricación de muchos productos de especialidad y de química fina, pero todos sufren las limitaciones antes mencionadas.

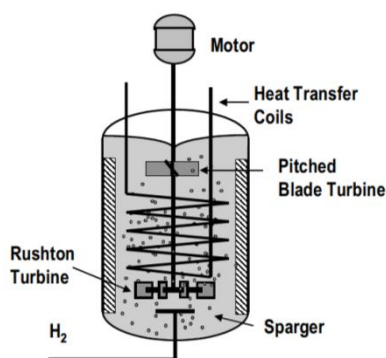


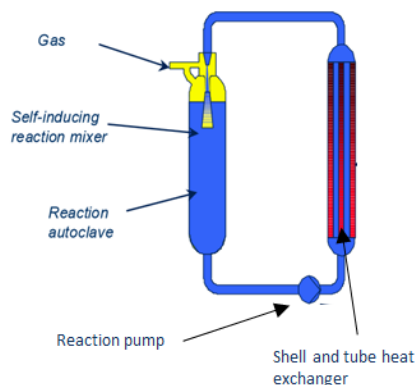
Figura 2.3. Conventional batch hydrogenation reactor system

○ **Reactor de bucle**

Una mejor transferencia de masa de H<sub>2</sub> es alcanzable en las configuraciones de reactores de bucle Buss (Figura 2.2.4), pero requiere un gran aporte de alta de energía para romper las burbujas de gas a la alta velocidad de los gases generados en las boquillas, se reduce en la mayoría de los casos la posibilidad de operar continuamente. Además, el calor de reacción en el circuito se elimina a través de un intercambiador de calor situado en el bucle y el catalizador slurry es transportada a traves de una anilla. El intercambio de calor es limitado y los catalizadores deben tener características mecánicas especiales, reduciendo las opciones posibles. De hecho, no hay las tecnologías actuales hasta la fecha que puedan realizar catálisis heterogénea eficiente en continuo con un catalizador en suspensión. La ineficiencia de mezcla tres fases convencionales en los reactores batch también puede dar lugar a gradientes térmicos, impactando en la selectividad y que llevó a un prolongado tiempo de reacción. Las reacciones

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

secundarias y los productos que se generan también exigen separación posterior/aislamiento de etapas para extraer el producto de destino, lo que conduciría a una reducción mayor eficiencia y costo de operación.



**Figura 2.4. Advanced BUSS Loop® reactor**

○ **Reactor de lecho fijo con flujo intermitente**

El lecho fijo es la tecnología más común cuando se trata de grandes volúmenes de reacción en el que el catalizador tiene una vida muy larga. Los ejemplos incluyen unidades de hidrotratamiento en refinerías, donde la vida del catalizador puede ser de varios años, con el fin de hidrogenación selectiva de C=C de enlaces dobles en las plantas petroquímicas. En estos reactores, la mala distribución del líquido es a menudo el principal problema ya que puede dar lugar a coque donde el líquido tiene un inusual largo tiempo de residencia, o la conversión incompleta debido al by-pass. Con el fin de dar cabida a largos tiempos de reacción, la altura del lecho se incrementa considerablemente, aumentando el CAPEX. Además, los reactores de lecho fijo sufren la reducción de superficie del catalizador, lo que requiere alrededor de tres veces más que la carga del catalizador de lecho en suspensión (alta OPEX). Los reactores de lecho fijo con flujo intermitente son conocidos por ser incapaces de disipar calor en grandes cantidades. Las reacciones exotérmicas impiden una mayor productividad. Además, una mala distribución del líquido dará lugar a la aparición de puntos calientes potenciales que pueden afectar negativamente a la vida y la eficacia del catalizador.



**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

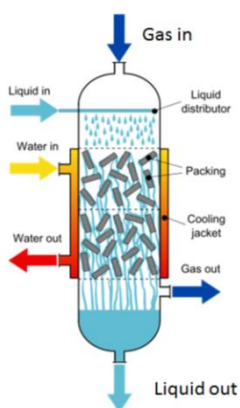


Figura 2.5. Fixed bed trickle flow reactors

○ **Reactor oscilatorio con deflectores**

El OBR es relativamente una nueva tecnología emergente que se puso recientemente a la luz debido a su capacidad para ayudar a la reducción de costes en procesos químicos. El OBR ha encontrado un mercado prometedor sobre todo en aplicaciones farmacéuticas a través de la cristalización.

El OBR es un reactor tubular que contiene anillos anulares (deflectores de orificio) a intervalos regulares superpuestos con oscilación de fluido (Figura 2.6). En OBR, el reactivo orgánico es alimentado en el reactor base con un burbujeo hidrogeno. La mezcla en el OBR se logra mediante la oscilación del fluido en la presencia de deflectores de orificio y es independiente del flujo neto para asegurar un largo tiempo de residencia suficiente de los reactivos líquidos. Cuando el líquido fluye a través de un orificio, se generan remolinos activos. Se producen movimientos a través de la generación y el cese de remolinos (Figura 2.6) en el que el componente velocidad axial es de un orden similar a la radial.

Cada celda con deflector actúa como un tanque de agitación continua (CSTR) y, con un total acumulado las células con deflector, plug-flow se puede lograr bajo condiciones de flujo laminar.

Cuando una fase de gas reactivo se introduce se produce una muy buena mezcla y dispersión del gas en el líquido se produce para dar un área de contacto superficial excepcionalmente alta y un aumento sustancial del tiempo de residencia del gas, permitiendo características de transporte de masa mejorada. La frecuencia de oscilación está en el orden de 1 a 5 Hz, amplitud de oscilación de 10-50 mm en la mayoría de operaciones, el OBR por lo tanto tiene una entrada de energía mucho más baja para alcanzar el tamaño de burbuja más pequeño en comparación con el reactor de bucle.

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

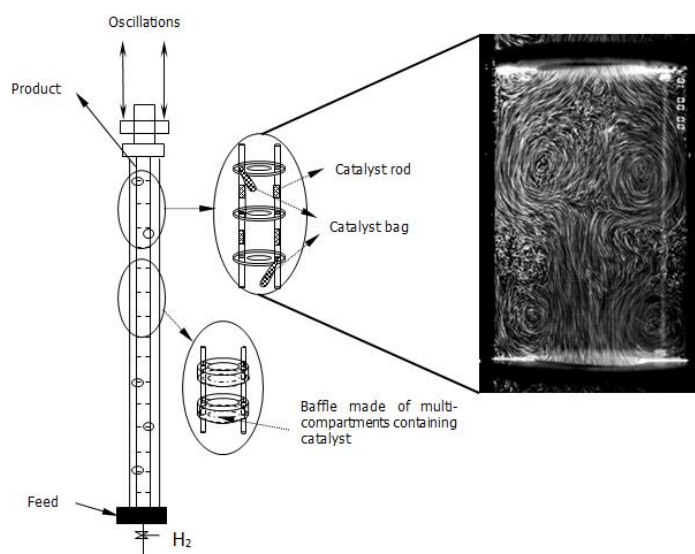
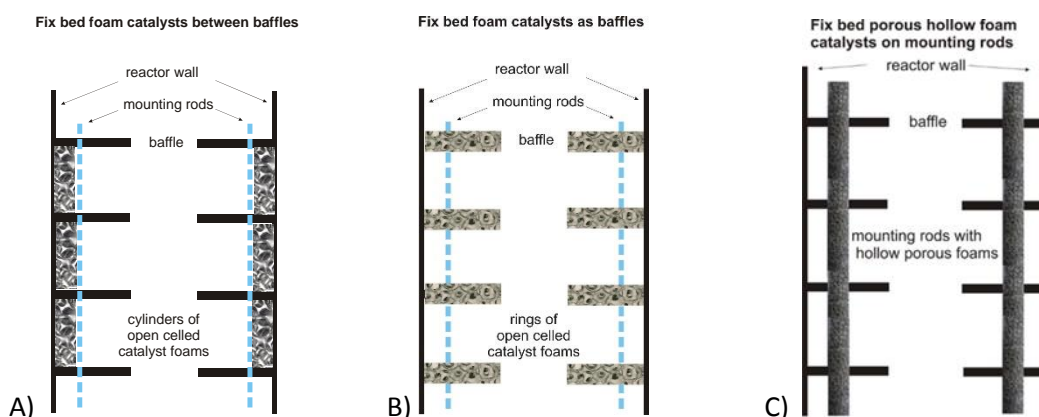


Figura 2.6. Esquema OBR y mezcla caótica presentada entre discos

Como la OBR proporciona la eficiencia de un alto número de CSTRs en una fracción del volumen, es posible lograr una alta eficiencia en la conversión a un coste reducido, lo que da lugar a los equipos de intensificación de procesos. Además, una tecnología de accionamiento magnético elimina los problemas de sellado y fugas a menudo asociados con la generación de las oscilaciones a través de medios hidráulicos, eléctricos o mecánicos, lo que permite que el reactor funcione a presiones elevadas en modo batch y continuo. Ha habido pruebas sustanciales de que el cambio de paso en OBRs ofrece ventajas sobre las convencionales en polimerización, cristalización y bioprocesamiento.

La presencia de deflectores con orificio es uno de los componentes esenciales para la generación de vórtices y mezcla efectiva. Los deflectores están conectados para apoyar los tubos y varillas. Este tipo de configuración ofrece una oportunidad única para la incorporación de material catalítico como un componente fijo de la OBR, en sustitución al catalizador móvil slurry. Podemos identificar por lo menos cinco enfoques para introducir el catalizador: (a) las espumas porosas recubiertas con catalizadores pueden insertarse entre deflectores con diferentes espesores (Figura 2. A); (b) los catalizadores porosos espumas pueden sustituir los deflectores (Figura 2. B); (c) las secciones de los tubos de malla se puede cubrir con espuma catalizadores porosos (Figura 2. C); (d) las secciones de las varillas de soporte puede ser remplazados por catalizador peletizado; (e) el catalizador puede estar recubierto en la superficie de los deflectores y las varillas.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**



**Figura 2.7. Diferentes enfoques para introducir el catalizador de la OBR bastidor oscilante**

Utilizando cualquiera de estos métodos, la etapa de separación de catalizador, que es un inconveniente asociado con la operación CSTR convencional, se elude. Creemos que la capacidad de proporcionar condiciones de flujo pistón, flujo laminar junto con los medios innovadores para aplicar catalizadores en OFR es innovador en el diseño de una nueva generación de reactores catalíticos de tres fases. La aplicación de OFR en la hidrogenación es intrínsecamente más seguro para las siguientes razones: (i) pequeña y estrecha distribución de tamaño de las burbujas H<sub>2</sub> conducen a una gran área superficial para la transferencia de masa que facilita tiempos de transferencia más cortos; (ii) sostener más el gas en el OFR retiene burbujas en períodos más largos para participar en la etapa de transferencia de masa; (iii) mejorar la tasa de transferencia de masa con tiempos de reacción más cortos resultado en una reducción apreciable en el volumen de hidrógeno necesario. El efecto neto es que el inventario de hidrógeno para la operación OFR se reduce sustancialmente, por ejemplo, una capacidad de 100t/a se podría producir usando un OFR de 5L (en comparación con los 2000L del reactor batch). Estas dimensiones ofrecen la oportunidad de cargar los contenedores de la unidad de procesamiento, por lo que es portátil y permite la fabricación distribuida.

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Puesto que en el presente proyecto vamos a tratar de resolver y analizar la evolución espacial y temporal de un flujo bifásico en el interior de una columna de líquido mediante el software necesario, parece imprescindible antes de abordar directamente el problema principal definir previamente unas ideas que vamos a tratar durante todo su desarrollo como son los conceptos de flujo multifásico y mecánica de fluidos computacional.

## **2.3 Flujo multifásico**

El término flujo multifásico se utiliza para referirse a cualquier flujo de fluido que consiste en más de una fase o componente (excluimos las circunstancias en las que los componentes se mezclan por encima del nivel molecular). En consecuencia, el flujo tendrá algún nivel de separación de fase o componente a una escala muy superior al nivel molecular. Esto todavía deja un enorme espectro de diferentes flujos multifásicos.

Estos elementos presentes en el flujo multifásico se clasifican en fases primarias o secundarias. La fase primaria se caracteriza como la fase continua o de envolvente de la fase secundaria. La fase secundaria la que se distribuye por toda la fase primaria. Cada fase presente en flujo multifásico puede ser laminar o turbulenta, lo que conduce a una variedad de regímenes de flujo potenciales para múltiples fases en el mismo canal (Bakker, Computational Fluid Dynamics Conferencias: Conferencia 14. flujo multifásico, 2008).

Las fases físicas de la materia son de gas, líquido y sólido, pero el concepto de fase en un sistema de flujo multifásico se aplica en un sentido más amplio. En el flujo múltiple, una fase se puede definir como una clase de material que tiene una respuesta inercial particular a la interacción con el flujo y el campo potencial en el que está inmerso. Por ejemplo, partículas sólidas de diferentes tamaños del mismo material pueden ser tratadas como diferentes fases, ya que cada conjunto de partículas con el mismo tamaño tendrá una respuesta dinámica similar a la del campo fluido.

### **2.3.1 Regímenes de flujo multifásico**

Aunque los flujos multifásicos podemos clasificarlos de formas muy diversas, la clasificación aquí escogida (por ser, a mi parecer, la más evidente) es en las siguientes cuatro categorías: flujos de gas-líquido o líquido-líquido, flujos de gas-sólido, flujos de líquido-sólido y los flujos trifásicos.

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

---

**2.3.1.1 Flujos gas – líquido o líquido - líquido**

---

Los siguientes regímenes son flujos gas-líquido o líquido-líquido:

- Flujo burbujeante: Este es el flujo de burbujas gaseosas o líquidas discretas en un fluido continuo.
- Flujo de gotas: Este es el flujo de gotas de fluido discreto en un gas continuo.
- Flujo de babosa: Este es el flujo de burbujas grandes en un fluido continuo.
- Flujo de superficie libre: Este es el flujo de fluidos inmiscibles separado por una interfaz claramente definida.

---

**2.3.1.2 Flujos gas – sólido**

---

Los siguientes regímenes son los flujos de gas-sólido:

- Flujo cargado de partículas: Este es el flujo de partículas discretas en un gas continuo.
- Transporte neumático: Este es un patrón de flujo que depende de factores tales como la carga sólida, números de Reynolds, y propiedades de las partículas. Patrones típicos son el flujo de dunas, flujo de lodo, y el flujo homogéneo.
- Lecho fluidizado: Este consiste en un cilindro vertical que contiene partículas, en el que se introduce un gas a través de un distribuidor. El gas ascendente a través del lecho suspende las partículas. Dependiendo de la velocidad de flujo de gas, aparecen burbujas y se elevan a través del lecho, la intensificando la mezcla dentro del lecho.

---

**2.3.1.3 Flujos líquido – sólido**

---

Los siguientes regímenes son los flujos de líquido-sólido:

- Flujo en suspensión: Este flujo corresponde al transporte de partículas en líquidos. El comportamiento fundamental de los flujos de líquido-sólido varía con las propiedades de las partículas sólidas con respecto a las del líquido. En estos flujos, el número de Stokes es normalmente menor que 1. Cuando el número de Stokes es mayor que 1, la característica del flujo es fluidización líquido-sólido.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

- Hidrotransporte: describe la distribución densa de partículas sólidas en un líquido continuo.
- Sedimentación: describe una alta columna que contiene inicialmente una mezcla uniforme de partículas dispersas. En la parte inferior, las partículas se ralentizarán y forman una capa de lodo. En la parte superior, aparecerá una interfaz clara, y en el centro existirá una zona de sedimentación constante.

Algunos regímenes de flujo común se pueden ver en la figura 2.8 a continuación:

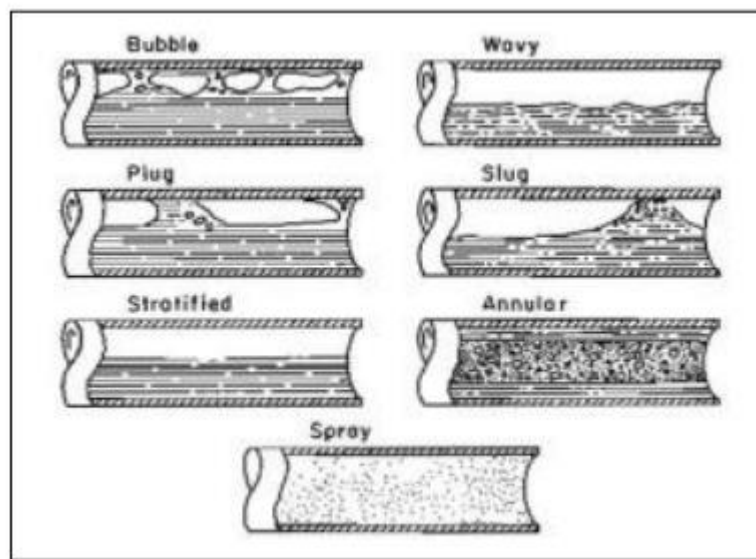


Figure 2.8. Patrones de flujo para diferentes regímenes de flujo multifásico (Denn & Russell, 1980)

Cada régimen de flujo representado arriba consta de combinaciones específicas de las fases primaria y secundaria. La descripción de cada régimen de flujo con respecto a su fase primaria y secundaria se resume en la siguiente tabla:

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Régimen de flujo	Fase primaria / fase secundaria
Burbuja / flujo pistón	Líquida / Burbujas discretas de gas
Flujo en gotas / disperso /en spray	Gas / Gotas de fluido (líquido o gas)
Flujo con partículas	Fluido (líquido o gas) / Partículas sólidas discretas
Flujo taponado	Líquido / Burbujas grandes de gas
Flujo anular	Líquido a lo largo de las paredes con fase gaseosa en su núcleo
Flujo estratificado, con olas y de superficie libre	Fluidos inmiscibles; fluidos con menor densidad encima de fluidos más densos con interfase definida entre ellos

Tabla 2.2. Resumen de regímenes de flujo multifásico (Bakker, Computational Fluid Dynamics Lectures: Lecture 14.

Multiphase flow, 2008) (Denn & Russell, 1980)

### 2.3.2 Ejemplos de sistemas multifásicos

También podríamos definirlos en términos de un tipo específico de flujo fluido y tratar con flujos en suspensión con bajo número de Reynolds, dinámica de gases particulados y así sucesivamente. Igualmente, podemos centrar la atención en una aplicación específica, como los flujos de lodos, flujos con cavitación, aerosoles, lechos fluidizados y así sucesivamente. Algunos ejemplos específicos se listan a continuación

- Ejemplos de flujo burbujeante incluyen amortiguadores, aireación, bombas de elevación de aire, cavitación, evaporadores, flotación y depuradores.
- Ejemplos de flujo de gotas incluyen amortiguadores, atomizadores, cámaras de combustión, bombeo criogénico, secadoras, evaporación, enfriamiento de gases y depuradores.
- Ejemplos de flujo babosa incluyen gran movimiento de burbujas en las tuberías o tanques.
- Ejemplos de superficie libre y flujo estratificado incluyen las salpicaduras en los dispositivos de separación en alta mar así como la ebullición y condensación en los reactores nucleares.
- Ejemplos de flujo cargado de partículas incluyen separadores ciclónicos, clasificadores de aire, colectores de polvo, y los caudales ecológicos cargados de polvo.
- Ejemplos de transporte neumático incluyen el transporte de polvos de cemento, granos, y metal.

---

### Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

- Ejemplos de lecho fluidizado incluyen reactores de lecho fluidizado circulante y lechos fluidizados.
- Ejemplos flujo en suspensión incluyen el transporte en suspensión y de procesamiento de minerales
- Ejemplos de hidrotransporte incluyen sistemas de fluidos biomédicos y sistemas fisicoquímicos de procesamiento de minerales
- Ejemplos de sedimentación incluyen el procesamiento de minerales.

Asimismo, es valioso reflexionar sobre las diversas y extendidas cuestiones de flujo multifásico. Virtualmente cada proceso tecnológico debe tratar con este tipo de flujo, desde bombas y turbinas de cavitación a procesos electrofotográficos o fabricación de papel. La cantidad de material granular, carbón, granos, minerales, etc. que se transporta cada año es enorme y, en muchas etapas, se requiere que el material fluya. Es evidente que la capacidad de predecir el comportamiento de flujo de fluido de estos procesos es fundamental para la eficiencia y la eficacia de ellos. Por ejemplo, el flujo efectivo de tóner es un factor importante en la calidad y velocidad de impresoras electrofotográficas. Los flujos multifásicos están también muy extendidos en el medio ambiente si se tiene en cuenta la lluvia, nieve, niebla, avalanchas, deslizamientos de tierra, transporte de sedimentos, flujos de escombros, y un sinnúmero de otros recursos naturales. En cuestiones biológicas y médicas también encontramos flujos multifásicos, desde el flujo de sangre, a litotricia, cirugía láser... Una sola lista no puede mostrar adecuadamente su diversidad y extensión; en consecuencia, cualquier intento de un enfoque completo de los flujos multifásicos es defectuoso a menos que se centre en fenómenos comunes y evite la tentación de divagar en observaciones.

Generalmente, se pueden identificar dos tipologías generales de flujo multifásico: *flujos dispersos* y *flujos separados*. Por *flujos dispersos* nos referimos a los que consisten en partículas finitas, gotas o burbujas (fase dispersa) distribuidos en un volumen conectado de la fase continua. Los *flujos separados* constan de dos o más corrientes continuas de diferentes fluidos separados por interfases.

---

#### 2.3.3 Modelos de flujo multifásico

---

Un tema constante en el estudio de flujos multifásicos es la necesidad de un modelo y predecir el comportamiento detallado de los flujos y los fenómenos que se manifiestan. Hay tres formas en las que se exploran estos modelos: experimentalmente, a través de modelos de tamaños



---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

adecuados a un laboratorio equipados con adecuada instrumentación, de manera teórica mediante el uso de ecuaciones matemáticas y modelos para el flujo, y computacionalmente, usando el poder y el tamaño de los ordenadores modernos para hacer frente a la complejidad del flujo. Es evidente que hay algunas aplicaciones en las que los modelos de laboratorio a escala real son posibles. Pero, En muchos casos, el modelo de laboratorio debe tener una escala muy diferente al prototipo y un modelo teórico o computacional fiable es esencial para la extrapolación fiable a la escala del prototipo, aunque también hay otros muchos casos en los que un modelo de laboratorio es imposible por una amplia variedad de razones.

En consecuencia, la capacidad predictiva y la comprensión física debe depender en gran medida de los modelos teóricos y / o computacionales y aquí la complejidad de la mayoría de los flujos multifásicos presenta un gran obstáculo. Podría ser posible que en el futuro se codificasen las ecuaciones de Navier-Stokes para cada una de las fases o componentes y computar todos los detalles de un flujo multifásico, el movimiento de todo el fluido alrededor y dentro de cada partícula o gota y la posición de cada interfaz, pero la potencia de los ordenadores y la velocidad necesaria para hacerlo está mucho más allá de la capacidad actual para la mayor parte de los flujos que son experimentados comúnmente. Cuando una o ambas de las fases se convierte turbulenta (como suele suceder) la magnitud del desafío se convierte en verdad astronómico. Por lo tanto, las simplificaciones son esenciales en los modelos reales de la mayoría de los flujos multifásicos.

En flujos dispersos hay dos tipos de modelos frecuentes, los modelos de *trayectoria* y modelos de *dos fluidos*. En *modelos de trayectoria*, el movimiento de la fase dispersa es evaluado siguiendo ya sea el movimiento de las partículas reales o el movimiento de las partículas más grandes y representativas. Los detalles del flujo alrededor de cada una de las partículas se incluyen en las fuerzas de arrastre, elevación y momento reaccionando y alterando la trayectoria de esas partículas. El recorrido térmico de las partículas también se puede rastrear si es apropiado hacerlo. Los modelos de trayectoria han sido de gran utilidad en los estudios de la reología de los flujos granulares, principalmente debido a que los efectos en el fluido intersticial son pequeños. Por otro lado, en el *modelo de dos fluidos*, la fase dispersa se trata como una fase secundaria continua entremezclada y que interactúa con la fase continua. Las ecuaciones de conservación (de masa, cantidad de movimiento y energía) se desarrollan para los dos flujos de fluidos. En ellas se incluyen interacciones en el modelado del intercambio de masa, cantidad de movimiento y energía entre los dos flujos. Estas ecuaciones se resuelven tanto teórica como computacionalmente. Por lo tanto, el modelo de *dos fluidos* descuidan la naturaleza discreta de

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

la fase dispersa y aproximan sus efectos a la fase continua. Inherente a este enfoque, son un promedio de los procesos necesarios para caracterizar las propiedades de la fase dispersa, que implican dificultades importantes. Las condiciones de contorno adecuadas en los modelos de dos fluidos también plantean cuestiones de modelado difíciles.

En contraste, los flujos separados presentan muchos menos problemas. En teoría uno debe resolver las ecuaciones de flujo de fluidos monofásicos en las dos corrientes, acoplándolos a través de condiciones cinemáticas y dinámicas apropiadas en la interfaz.

**2.3.4 Ecuaciones del movimiento**

A continuación, se exponen las ecuaciones (en forma conservativa) que gobiernan el comportamiento temporal de un flujo tridimensional y la transferencia de calor para un fluido Newtoniano.

- **Ecuación de continuidad**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \tag{2.1}$$

- **Ecuación de cantidad de movimiento**

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S_{Mx} \tag{2.2}$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S_{My} \tag{2.3}$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S_{Mz} \tag{2.4}$$

- **Ecuación de energía**

$$\rho \frac{Di}{Dt} = -p \nabla \cdot \vec{v} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + S_i \tag{2.5}$$

- **Ecuación de estado**

$$p = p(\rho, T) \quad \gamma \quad i = i(\rho, T) \tag{2.6}$$

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

El sistema de ecuaciones anterior, junto con la introducción del modelo de fluido Newtoniano, que expresa el esfuerzo viscoso en términos de las componentes del gradiente del vector velocidad, da lugar a un sistema de siete ecuaciones con siete incógnitas, que es un sistema determinado y puede ser resuelto empleando las condiciones de contorno adecuadas.

Si se observa la forma de dichas ecuaciones 2.1 a 2.5, se puede ver que tienen una estructura común. Introduciendo una variable genérica  $\phi$  en esas ecuaciones, se obtiene,

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\vec{u}) = \nabla \cdot (\Gamma \cdot \nabla \phi) + S_\phi \quad (2.7)$$

La ecuación (2.7) se denomina ecuación del transporte de la variable  $\phi$ . Ésta representa varios fenómenos de transporte: la variación con respecto al tiempo y el término convectivo en el lado izquierdo de la ecuación y el término de difusión ( $\Gamma$ =coeficiente de difusión) y el asociado a otros fenómenos en el lado de derecho. La ecuación (2.7) puede ser empleada para trabajar con la temperatura en la ecuación de la energía cambiando  $i$  por  $T$  a través de una ecuación de estado y viceversa.

La ecuación 2.7 se emplea como punto de partida para el método de los volúmenes finitos. Haciendo  $\phi$  igual a 1,  $u$ ,  $v$ ,  $w$  y  $i$  (ó  $T$ ) y seleccionando los valores adecuados para el coeficiente de difusión  $\Gamma$  y para  $S_\phi$ , se pueden obtener las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía expuestas en el apartado anterior. El método de los volúmenes finitos se desarrolla mediante la integración de la ecuación 2.7 sobre un volumen de control tridimensional  $V_c$ , obteniéndose,

$$\int_{V_c} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \int_{V_c} \nabla \cdot (\rho \phi \vec{u}) dV = \int_{V_c} \nabla \cdot (\Gamma \cdot \nabla \phi) dV + \int_{V_c} S_\phi dV \quad (2.8)$$

La integral de volumen del segundo término del lado izquierdo de la igualdad (término convectivo) y el primer término del lado derecho (término de difusión), se pueden transformar en integrales de superficie mediante el Teorema de Gauss (Teorema de la divergencia). Para un vector cualquiera  $a$ , este teorema establece que,

$$\int_{V_c} \nabla \cdot \vec{a} dV = \int_{S_c} \vec{n} \cdot \vec{a} dA \quad (2.9)$$

Aplicando el teorema de Gauss, la ecuación (2.8) se puede escribir como,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{V_c} \rho \phi dV \right) + \int_{S_c} \vec{n} \cdot (\rho \phi \vec{u}) dA = \int_{S_c} \vec{n} \cdot (\Gamma \cdot \nabla \phi) dA + \int_{V_c} S_\phi dV \quad (2.10)$$

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

El orden de integración y derivación y derivación del primer término de la izquierda se ha cambiado para mostrar su sentido físico. Este término representa la variación de la cantidad total de una variable fluida  $\phi$  en el volumen de control. El producto contenido en la segunda integral del lado izquierdo expresa la componente del flujo de  $\phi$  en dirección del vector normal, con lo que este término (término convectivo), representa la disminución en el elemento fluido debido a la convección.

El flujo de dispersión es positivo según la dirección opuesta al gradiente  $\phi$ . Así, el producto contenido en la primera integral del lado derecho expresa el aumento de en el elemento fluido debido a la difusión. El último término del lado derecho de la ecuación 2.10 representa el incremento de  $\phi$  debido a las fuentes asociadas a otros fenómenos.

La difusión anterior pone de manifiesto que la integración de la EDP del transporte establece la conservación de una propiedad fluida en un volumen de control finito (elemento macroscópico).

## 2.4 Introducción a CFD

La Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD) es el conjunto de conocimientos y herramientas mediante los cuales se resuelven los modelos matemáticos que gobiernan los fenómenos de la fluidodinámica utilizando software informático. De esta manera, se puede predecir y manipular la fluidodinámica de cualquier equipo de proceso industrial. Sin embargo, incluso utilizando ecuaciones simplificadas y ordenadores de altas prestaciones sólo se consiguen soluciones aproximadas.

Históricamente los métodos fueron desarrollados para resolver ecuaciones lineales. Más adelante, en los años 30, surgieron métodos para dos dimensiones y ya en los años 60 con el aumento de la potencia de cálculo de los ordenadores se desarrollaron métodos para tres dimensiones.

Actualmente CFD tiene dos funciones: diseño y aprendizaje. Mediante el aprendizaje se obtienen los conocimientos básicos del proceso a estudiar, mientras que el diseño se centra en la evaluación de nuevos conceptos aplicables a ese proceso.

En los dos siguientes capítulos desarrollaremos CFD centrándonos en el programa usado para realizar los ensayos de este proyecto: Fluent, tanto en los procedimientos para llevar a cabo las simulaciones como los distintos modelos a escoger para el movimiento del fluido.

**Capítulo 3.**  
**Metodología de**  
**simulación**  
**numérica en**  
**Fluent**

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

En este apartado se describen los esquemas y algoritmos de que dispone Fluent para discretizar, linealizar y resolver el sistema el sistema de ecuaciones de gobierno, una vez integradas según lo establecido en el apartado anterior, sobre el dominio computacional que se vaya a estudiar. También se incluye un análisis comentando los casos en los que es recomendable emplear unos u otros esquemas o algoritmos.

## 3.1 Esquemas numéricos

Fluent permite escoger entre dos tipos de métodos numéricos para resolver las ecuaciones obtenidas tras aplicar el método de los volúmenes finitos sobre las ecuaciones que gobiernan el movimiento. Estos son: *solver segregado* y *solver acoplado*.

En ambos la técnica de los volúmenes de control usada consiste en:

- Dividir el dominio computacional en volúmenes de control discretos según la malla empleada.
- Integrar las ecuaciones de gobierno sobre los volúmenes de control individuales para construir un sistema de ecuaciones algebraicas para las variables incógnita discretizadas (velocidad, presión, temperatura, etc.).
- Linealizar las ecuaciones discretizadas y resolver el sistema de ecuaciones linealizado resultante para obtener los valores de las variables incógnitas del problema.
- Los dos métodos numéricos emplean un proceso de discretización similar (volúmenes finitos), pero la aproximación empleada para linealizar y resolver las ecuaciones discretizadas es diferente.

### 3.1.1 Solver segregado

El *solver segregado* es un algoritmo que resuelve las ecuaciones de gobierno de forma secuencial. Dado que las ecuaciones de gobierno son no-lineales (y acopladas) se necesita de un proceso iterativo para que el código converja a la solución final. Cada iteración consta de los pasos que se muestran de manera esquemática en la Figura 3.1 y que se comenta a continuación,

- Actualización de las propiedades del fluido en base a la solución actual (para la primer iteración éstos valores coinciden con los iniciales).
- Resolución de las tres componentes de la ecuación de la cantidad de movimiento simultáneamente empleando los valores actualizados de la presión y los flujos máxicos en las caras de los volúmenes de control. De esta forma, actualiza el campo de velocidades.



**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

- Si los valores del campo de velocidades obtenidos en el paso anterior no satisfacen la ecuación de continuidad de modo local (para la cada volumen de control), se deriva una ecuación tipo Poisson para la corrección de la presión de la ecuación de continuidad y se linealiza la ecuación de la cantidad de movimiento. Esta corrección se resuelve para obtener los campos de velocidad y presión y los flujos másicos corregidos, hasta que se satisfaga la ecuación de continuidad.
- Para los casos que sea necesario, se resuelven ecuaciones escalares para magnitudes como la energía, turbulencia, especies químicas y radiación, empleándose los valores previamente obtenidos.
- Se hace un chequeo de la convergencia. Si el proceso ha convergido no se realizan más iteraciones y si no lo ha hecho, se sigue iterando hasta obtener la convergencia deseada. En general, se necesitan un gran número de iteraciones para conseguir un nivel aceptable de convergencia.

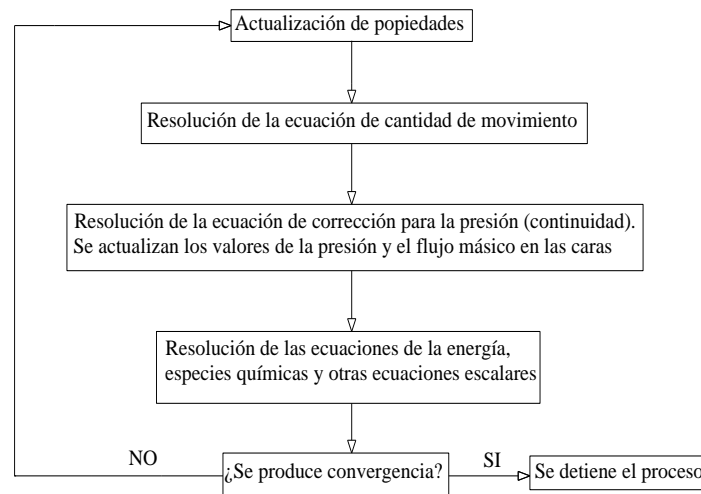


Figura 3.1 Proceso de cálculo del *solver segregado*

**3.1.2 Solver acoplado**

El *solver acoplado* es un algoritmo que resuelve las ecuaciones de gobierno de forma simultánea. Dado que las ecuaciones de gobierno son no-lineales (y acopladas) se necesita de un proceso iterativo para que el código converja a la solución final. Cada interacción consta de los pasos que se muestran de manera esquemática en la Figura 3.2 y que se comentan a continuación,

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

- Actualización de las propiedades del fluido en base a la solución actual (para la primera iteración éstos valores coinciden con los iniciales).
- Resolución simultánea de las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía y especies químicas en caso de ser necesario.
- Para los casos que sea necesario, se resuelven ecuaciones escalares para turbulencia y radiación, empleándose los valores previamente obtenidos.
- Se hace un chequeo de la convergencia. Si el proceso ha convergido no se realizan más iteraciones y si no lo ha hecho, se sigue iterando hasta obtener la convergencia deseada. En general, se necesitan un gran número de iteraciones para conseguir un nivel aceptable de convergencia.

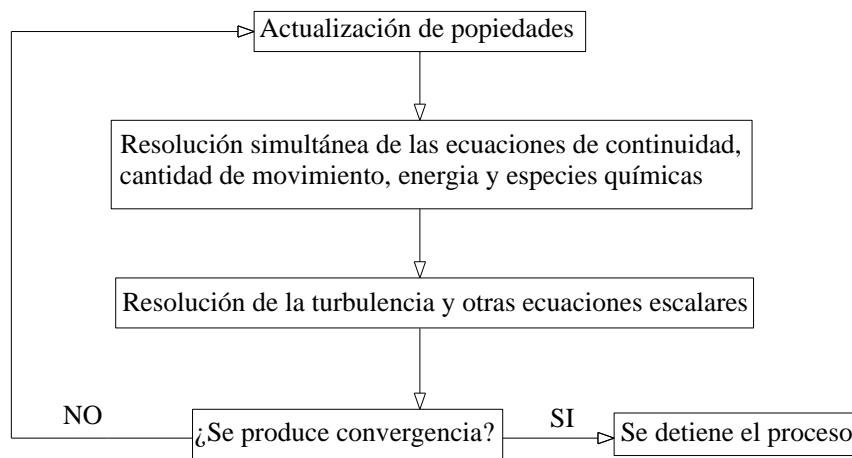


Figura 3.2 Proceso de cálculo del *solver acoplado*

## 3.2 Linealización: formulación implícita y explícita

Independientemente del método que se emplee para resolver las ecuaciones de gobierno discretizadas, estas deben ser linealizadas para obtener un sistema de ecuaciones para las variables dependientes en cada celda del dominio computacional. Entonces, el sistema de ecuaciones linealizadas es resuelto para obtener los valores de dichas variables dependientes.

Dependiendo de la forma en que se linealizen las ecuaciones, se puede obtener una formulación *implícita* o *explícita* del problema. Cuando se habla de estos términos se hace referencia a:

- **Formulación implícita:** Para una variable del problema, el valor desconocido de esta en cada celda es calculado usando una relación que incluye los valores conocidos de la variable en otras celdas (los cuales no son conocidos a priori). Por tanto, cada incógnita aparecerá en más de una ecuación del sistema, y esas ecuaciones deben ser resueltas simultáneamente para obtener el valor de todas las incógnitas.
- **Formulación explícita:** Para una variable de problema, el valor desconocido de esta en cada celda es calculado usando una relación que incluye solamente los valores conocidos de esa variable en otras celdas. Por tanto, cada incógnita aparecerá en una única ecuación del sistema, y esas ecuaciones pueden ser resueltas independientemente para cada una de las celdas.

El solver segregado linealiza las ecuaciones de gobierno discretizadas empleando una formulación implícita respecto a la variable dependiente de la ecuación. Esto da lugar a un sistema de ecuaciones lineal una ecuación para cada celda del dominio computacional. Al solo haber una ecuación para cada celda, el conjunto de ecuaciones obtenido se le denomina escalar de ecuaciones. Para resolver el sistema de ecuaciones resultante se emplea el método de Gauss-Seidel combinado con el método algebraico multibloque (AMG). Por ejemplo, la componente  $x$  de la ecuación de cantidad de movimiento se linealiza para obtener un sistema de ecuaciones en el que la componente  $u$  del vector velocidad es la variable incógnita. La resolución simultánea de este sistema de ecuaciones (empleando el método AMG) da lugar a la obtención del valor actualizado de la componente  $u$  del campo de velocidades.

En resumen, el solver segregado resuelve al mismo tiempo las incógnitas de todas las celdas para una única variable (por ejemplo: la presión). Entonces, resuelve la siguiente variable

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

considerando de nuevo todas las celdas al mismo tiempo de manera sucesiva hasta obtener la solución de todas las variables. El solver segregado no permite trabajar con la formulación explícita del problema.

El solver acoplado permite elegir entre ambas formas de linealización. Aunque esta elección sólo se aplica sobre las ecuaciones de gobierno, mientras que las ecuaciones adicionales para otros casos escalares (especies químicas, turbulencia, etc.) son linealizadas del mismo modo que con el solver segregado (es decir, de forma implícita).

Si se emplea la opción implícita del *solver acoplado*, cada ecuación del sistema de ecuaciones de gobierno acopladas se linealiza de forma implícita respecto al conjunto de variables dependientes. Obteniéndose un sistema de ecuaciones con N ecuaciones por celda, siendo N el número de ecuaciones acopladas. Este tipo de sistemas de ecuaciones resultante se emplea el método de Gauss-Seidel combinado con un método algebraico multimalla (AMG). Por ejemplo, la linealización del sistema de ecuaciones acoplado cuyas incógnitas son: la presión  $p$ , las componentes del vector velocidad ( $u$ ,  $v$  y  $w$ ) y la temperatura  $T$ . La resolución simultánea de este sistema de ecuaciones (empleando el método AMG) da lugar a la obtención del valor actualizado del campo de presión, velocidades y temperatura. En resumen, el solver acoplado con la linealización implícita de las ecuaciones, resuelve las variables  $p$ ,  $u$ ,  $v$ ,  $w$  y  $T$  en todas las celdas del dominio computacional al mismo tiempo.

Si se emplea la opción explícita del *solver acoplado*, cada ecuación del sistema de ecuaciones de gobierno acopladas se linealiza de forma explícita respecto al conjunto de variables dependientes. Al igual que para el método implícito, se obtiene un sistema de ecuaciones con N ecuaciones por celda, en el que también, todas las variables dependientes son calculadas a la vez. Sin embargo este sistema de ecuaciones es explícito respecto de las variables incógnitas. Por ejemplo, la componente  $x$  de la ecuación de cantidad de movimiento puede ponerse de forma que el valor de  $u$  a calcular sea función de los valores de las variables fluidas calculadas con anterioridad. Por este motivo, no es necesario emplear un solver de ecuaciones lineales. En cambio, se emplea un método multipaso (Runge-Kutta). En este punto, se puede escoger un método multimalla (FAS) para acelerar el proceso de cálculo del *solver multietapa*. En resumen, el *solver acoplado* con linealización explícita de las ecuaciones, resuelve las variables  $p$ ,  $u$ ,  $v$ ,  $w$  y  $T$  en cada celda.

### 3.3 Esquemas de interpolación y discretización

Fluent emplea el método de los volúmenes finitos para convertir las ecuaciones de gobierno de un fluido en ecuaciones algebraicas que pueden ser resueltas numéricamente. Este método consiste en integrar las ecuaciones de gobierno sobre cada volumen de control (celda), dando lugar a un sistema de ecuaciones discretas que representan la conservación de las magnitudes fluidas en cada volumen de control.

Si se discretiza la ecuación del transporte (ecuación 3.1) para el caso estacionario obtenida mediante el método de los volúmenes finitos, tomando como volumen de control una celda triangular (bidimensional) como la mostrada en la Figura se obtiene,

$$\sum_f^N \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^N \Gamma_\phi (\nabla \phi)_n \cdot \vec{A}_f + S_\phi V \quad (3.1)$$

siendo N el número de caras del contorno de la celda o volumen de control,  $\rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f$  el flujo de  $\phi$  a través de la cara f debido a la convención,  $\rho_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f$  el flujo másico a través de la cara f,  $\vec{A}_f$  es el área de la cara f,  $(\nabla \phi)_n$  es una magnitud del  $\nabla \phi$  en la dirección normal a la cara f y V es el volumen de a celda.

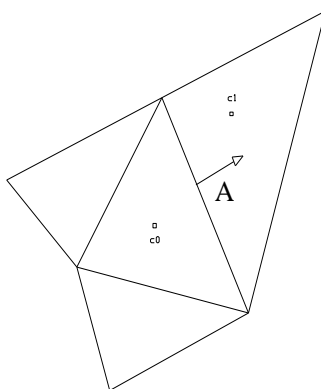


Figura 3.3 Volumen de control sobre el que se aplica el método de los volúmenes finitos

Por defecto, Fluent almacena los valores discretos de la variable  $\phi$  en los centros de las celdas (c0 y c1 de la Figura 3.3). Sin embargo, se necesitan los valores de  $\phi$ , de modo que estos se obtienen interpolando los valores de los centros de las celdas. Esto se consigue empleando un esquema *upwind*.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Un esquema *upwind* es aquel mediante el cual se obtiene el valor de  $\phi_f$  a partir de los valores de las celdas que se encuentran aguas arriba en la dirección del vector normal a la cara. Fluent implementa distintos tipos de esquemas *upwind*: *upwind* de primer orden, *upwind* de segundo orden, ley exponencial y QUICK.

**3.3.1 Esquemas de discretización**

Fluent permite seleccionar el esquema de discretización a emplear para los términos convectivos de cada una de las ecuaciones de gobierno (se emplea una precisión de segundo orden para los términos viscosos de modo automático). Cuando se emplea el *solver segregado*, se resuelven todas las ecuaciones empleando por defecto en esquema *upwind* de primer orden para discretizar los términos convectivos. Si se emplea el *solver acoplado*, se emplea por defecto un esquema de segundo orden para las ecuaciones del flujo, mientras que el resto de ecuaciones se resuelven empleado un esquema de primer orden (por defecto). En los siguientes subapartados se describe los esquemas de discretización antes mencionados.

○ **Esquemas *upwind* de primer orden**

Cuando se trabaja con una precisión de primer orden, los valores de las variables en las caras de las celdas se obtienen suponiendo que los valores del centro de la celda para todas las magnitudes fluidas representan el valor medio de la celda, es decir, los valores de las magnitudes en las caras de la celda  $\phi_f$  se toman iguales a los de la celda  $\phi$  que se encuentran aguas arriba de ella.

○ **Ley exponencial**

La ley exponencial es un esquema de discretización que interpola los valores de una variable  $\phi$  en una cara utilizando la solución exacta de la ecuación unidimensional de convección-difusión (ecuación 3.2),

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \tag{3.2}$$

donde  $\Gamma$  y  $\rho u$  son constantes sobre el intervalo  $\Delta x$ . La ecuación 3.2 puede ser integrada obteniéndose la siguiente solución, que expresa la variación de  $\phi$  en función de  $x$ ,

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

$$\frac{\phi(x) - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} = \frac{e^{\left(\frac{Pe \cdot x}{L}\right)} - 1}{e^{(Pe)} - 1} \quad (3.3)$$

Siendo  $\phi_0$  y  $\phi_L$  los valores de  $\phi$  para  $x=0$  y  $x=L$  respectivamente, y  $Pe$  el número adimensional de Péclet, definido como,

$$Pe = \frac{\rho u L}{\Gamma} \quad (3.4)$$

Para valores elevados del número de Péclet, el valor de  $\phi$  en  $x=L/2$  es, aproximadamente, igual al valor aguas arriba ( $\phi_L$ ). Cuando  $Pe=0$  (es decir, no hay flujo convectivo y, por tanto, el problema es de difusión pura) el valor de  $\phi$  puede ser interpolado usando un esquema lineal entre los valores de  $\phi$  en  $x=0$  y  $x=L$ . Si el número de Péclet tiene un valor intermedio, hay que aplicar la ley exponencial de la ecuación 3.3 para obtener el valor de  $\phi$  en  $x=L/2$ .

○ **Esquema upwind de segundo orden**

Cuando se trabaja con una precisión de segundo orden, los valores de las variables en las caras de las celdas se obtienen empleando una reconstrucción lineal multidimensional. Con esta aproximación, se consigue una precisión de orden elevado en los valores en las caras de las celdas a través de Taylor centrada en el centroide de la celda. De esta manera, cuando se emplea un esquema de segundo orden, el valor de  $\phi$  en la cara  $f$  se obtiene mediante,

$$\phi_f = \phi + \nabla \phi \cdot \Delta \vec{s} \quad (3.5)$$

donde  $\phi$  y  $\nabla \phi$  son el valor en el centro de la celda y su gradiente respecto de la celda situada aguas arriba, y  $\Delta \vec{s}$  es el vector desplazamiento del centroide de la celda aguas arriba al centroide de la cara. Esta formulación requiere determinar el gradiente de  $\phi$  en cada celda. Éste se obtiene a partir del teorema de la divergencia, que en forma discreta se expresa como,

$$\nabla \phi = \frac{1}{V} \sum \tilde{\phi}_f \vec{A} \quad (3.6)$$

siendo  $\tilde{\phi}_f$  calculado empleando el valor medio de  $\phi$  entre dos celdas adyacentes a la cara.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

○ **Esquema QUICK**

Para mallas formadas por elementos cuadrangulares y hexaédricos, Fluent dispone del esquema QUICK, que permite realizar un cálculo con precisión de orden elevado del valor de  $\phi$  en las caras de la celda. El esquema QUICK está basado en una media ponderada sobre un esquema *upwind* de segundo orden e interpolaciones sobre los valores centrales de las celdas. Para la cara e de la figura 3.5 si el flujo va de izquierda a derecha, el valor de  $\phi$  se obtiene según:

$$\phi_e = \theta \left[ \frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_P + \frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_E \right] + (1 - \theta) \left[ \frac{S_u + 2S_d}{S_u + S_d} \phi_P + \frac{S_c}{S_u + S_c} \phi_W \right] \quad (3.7)$$

Haciendo  $\theta=1$ , la ecuación 3.7 se transforma en un interpolación centrada de segundo orden, mientras que si se hace  $\theta=0$ , se obtiene una interpolación *upwind* de segundo orden. EL QUICK más comúnmente empleado es aquel que adopta el valor de  $\theta=1/8$ . El esquema QUICK, generalmente, es aquel que proporciona resultados más precisos si se tienen mallas estructuradas alineadas con la dirección del flujo,

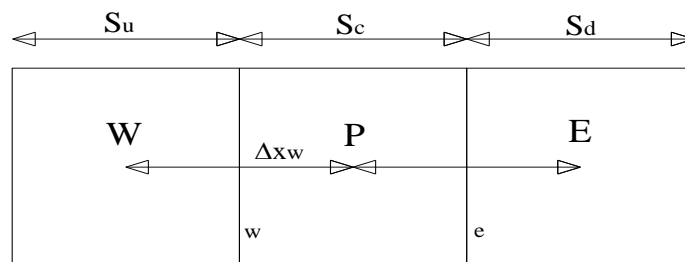


Figura 3.4 Volumen de control unidimensional

○ **Forma linealizada de las ecuaciones discretizadas**

La forma discretizada de la ecuación del transporte (ecuación 3.1) contiene la incógnita  $\phi$  en el centro de celda y celdas adyacentes, siendo esta ecuación, en general, no lineal respecto a dichas variables. La forma linealizada de la ecuación de la ecuación 3.1 puede escribirse como,

$$a_p \phi = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (3.8)$$

donde el subíndice *nb* hace referencia a las celdas adyacentes  $a_p$  y  $a_{nb}$  son los coeficientes de linealización de  $\phi$  y  $\phi_{nb}$ , respectivamente.



**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

El número de celdas adyacentes depende de la tipología de malla empleada, aunque en general, este número suele ser constante (caso de mallas estructuradas). Se pueden escribir ecuaciones semejantes para cada celda, lo que derivará en un sistema de ecuaciones algebraicas, que se resuelve empleando el método de Gauss-Seidel combinado con un método AMG.

○ **Factores de subrelajación**

Debido a la no-linealidad de las ecuaciones a resolver por Fluent, es necesario controlar como va cambiando el valor de  $\phi$  durante cada iteración. Este valor depende del valor de la magnitud en la iteración anterior y se define como,

$$\phi = \phi_{old} + \alpha \Delta \phi \quad (3.9)$$

siendo  $\phi_{old}$  el valor de  $\phi$  en la iteración anterior,  $\Delta \phi$  la variación que experimenta entre  $\phi$  dos iteraciones consecutivas y  $\alpha$  el factor de subrelajación.

○ **Evaluación de las derivadas**

El gradiente de  $\phi$  se emplea para discretizar los términos convectivos y de difusión que aparecen en las ecuaciones de gobierno. Éste se calcula empleando el Teorema de Gauss,

$$(\nabla \phi)_{c0} = \frac{1}{V} \sum_f \bar{\phi}_f \bar{A}_f \quad (3.10)$$

donde  $\bar{\phi}_f$  es el valor de  $\phi$  en el centroide de la cara  $f$  y el sumatorio está extendido a todas las caras que forman el conjunto de la celda.

En función de la forma de calcular el valor de  $\bar{\phi}_f$  se tienen las dos formulaciones siguientes,

○ **Formulación basada en la celda**

El valor  $\bar{\phi}_f$  se calcula realizando una media aritmética entre los valores de  $\phi$  en los centros de las celdas adyacentes,

$$\bar{\phi}_f = \frac{\bar{\phi}_{c0} + \bar{\phi}_{c1}}{2} \quad (3.11)$$

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

○ **Formulación basada en los nodos**

El valor de  $\bar{\phi}_f$  se calcula realizando una media aritmética entre los valores de  $\phi$  en los nodos que conforman la cara,

$$\bar{\phi}_f = \frac{1}{N_f} \sum_n^N \bar{\phi}_n \quad (3.12)$$

donde  $\bar{\phi}_n$  se obtiene realizando la media ponderada entre los valores de los nodos vecinos.

En el caso de mallas estructuradas la formulación basada en la celda proporciona mejores resultados, mientras que para mallas no-estructuradas o híbridas se recomienda emplear la formulación basada en nodos.

○ **Elección de los esquemas de discretización**

A continuación, se plantea una breve discusión sobre los distintos tipos de esquemas de discretización y en casos es conveniente emplear unos u otros.

✓ **Esquemas de primer orden vs. esquemas de de segundo orden**

Cuando el flujo se encuentra alineado con la malla, emplear una discretización de primer orden puede ser aceptable. Sin embargo, si esto no es así, una discretización de primer orden en los términos convectivos incrementa el error numérico de discretización. Para mallas triangulares y tetraédricas, dado que el flujo no se encuentra alineado con la malla, se obtendrán mejores resultados si se emplea una discretización de segundo orden. Para mallas cuadrangulares y hexaédricas, también se obtendrán resultados más precisos, especialmente, en casos de flujos complejos.

En resumen, los esquemas de primer orden obtienen una mejor convergencia que los de segundo orden, pero en general, los resultados son menos exactos.

✓ **Otros esquemas de discretización**

El esquema QUICK puede dar un resultado más preciso que un esquema de segundo orden para flujos con componente de giro o acimutal importantes en mallas estructuradas compuestas por elementos cuadrilaterales o hexaédricos. En general, sin embargo, un esquema QUICK no proporciona resultados significativamente más precisos.

### 3.3.2 Esquemas de interpolación en solver segregado

En este apartado se comentan los esquemas de interpolación que implementa Fluent en la discretización de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento para el solver segregado. Estos esquemas se pueden entender más fácilmente si se toma como referencia las ecuaciones de continuidad (ecuación 3.13) y cantidad de movimiento (ecuación 3.14) en su forma integral y estacionaria,

$$\oint \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = 0 \quad (3.13)$$

$$\oint \rho \vec{v} \vec{v} \cdot d\vec{A} = -\oint p \mathbf{I} \cdot d\vec{A} + \oint \vec{\tau} \cdot d\vec{A} + \int_V \vec{F} dV \quad (3.14)$$

siendo  $\mathbf{I}$  la matriz identidad,  $\vec{\tau}$  el tensor de esfuerzos viscosos y  $\vec{F}$  el vector de fuerzas.

- **Discretización de la ecuación de cantidad de movimiento**

Aplicando el mismo procedimiento que se aplicó anteriormente para discretizar la ecuación del transporte 3.1 se obtiene la forma discretizada de la ecuación de cantidad de movimiento, que para su componente x viene dada por,

$$a_p u = \sum a_{nb} u_{nb} + \sum p_f A \hat{i} + S \quad (3.15)$$

Si el campo de presiones y los flujos másicos a través de las caras fueran conocidos, la ecuación 3.15 podría ser resuelta de la forma expuesta en 3.1.3, obteniéndose como solución el campo de velocidades. Sin embargo, el campo de presiones y los flujos másicos a través de las caras no son conocidos a priori y deben ser obtenidos como parte de la solución. Además, los valores del campo de presiones a almacenar así como la discretización del gradiente de presiones son aspectos de gran importancia, los cuales se comentarán a continuación.

Fluent emplea un proceso mediante el cual se almacenan los valores de la presión y la velocidad en el centro de las celdas. Sin embargo, la ecuación 3.15 necesita el valor de la presión en la cara que está entre las celdas c0 y c1 mostrada en la Figura 3.3. Por lo tanto, es necesario emplear un esquema de interpolación que permita obtener los valores de la presión en las caras a partir de los valores del centro de las celdas.

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

○ **Esquemas de interpolación de la presión**

Por defecto, Fluent interpola los valores de la presión en las caras utilizando los coeficientes de la ecuación de cantidad de movimiento. Este método funciona correctamente cuando la variación de la presión entre los centros de las celdas contiguas es pequeña. En caso de existir grandes gradientes en el perfil de presiones, no se puede emplear este esquema de interpolación y en el caso de emplearse, aparecerán discrepancias entre los valores de la velocidad en las celdas.

Los flujos en los que no se podrá emplear este esquema son: flujos que ejercen grandes fuerzas sobre cuerpos, flujos con movimiento ciclónico o elevada vorticidad (swirl) y flujos con elevado número de Rayleigh en convección natural. En estos casos, es necesario refinar la malla en las zonas donde aparezcan gradientes importantes, de modo que el salto de presión entre las mismas sea lo más suave posible.

Otra fuente de error es que Fluent asume que el gradiente de presiones normal a la pared es cero. Esto es válido en la capa límite, pero no en flujos con grandes fuerzas sobre las superficies ni en geometrías curvas.

Por lo anterior, Fluent implementa una serie de esquemas de interpolación alternativos al estándar (o esquema por defecto), a emplear cuando este último carece de validez:

- Esquema lineal: calcula el valor de la presión en la cara como media de la presión en las celdas adyacentes.
- Esquema de segundo orden: calcula el valor de la presión en la cara de la misma forma que en un esquema *upwind* de segundo orden. Este esquema suele ofrecer mejores resultados que los esquemas estándar y lineal, pero podría dar problemas si se emplea desde el principio y/o con una malla de mala calidad. El esquema de segundo orden no es aplicable en flujos con gradientes de presión discontinuos impuestos como consecuencia de un medio poroso en el dominio computacional.
- Esquema *body-force-weighted*: calcula el valor de la presión en la cara asumiendo que el gradiente de la diferencia entre presión y la fuerza ejercida sobre el cuerpo es constante. Esto es cierto cuando se conocen a priori las fuerzas sobre el cuerpo en la ecuación de cantidad de movimiento (por ejemplo, flujos con flotación, o flujo con torbellino axilsimétrico).
- Esquema PRESTO (*pressure staggering option*).

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

○ **Discretización de la ecuación de continuidad**

La ecuación 4.2 puede ser discretizada sobre el volumen de control de la figura 3.3, obteniéndose la siguiente ecuación,

$$\sum_f^N J_f A_f = 0 \quad (3.16)$$

donde  $J_f$  es el flujo másico a través de la cara  $f$  ( $v_n$ ).

Como ya se comentó anteriormente, el solver segregado resuelve las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento secuencialmente. En este proceso secuencial, la ecuación de continuidad se usa como medio para obtener el valor de la presión. Sin embargo, la presión no aparece explícitamente en la ecuación 3.16 para flujos incompresibles, ya que la densidad no está directamente relacionada con la presión. Existen algoritmos, como la familia de algoritmos SIMPLE (Semi-Implicit Method for pressure-Linked Ecuations), que sirven para introducir el término de la presión dentro de la ecuación de continuidad.

Para poder trabajar con la ecuación 3.16 es necesario obtener los valores de la velocidad en la cara a partir de los valores del centro de la celda almacenados. Si se emplea una interpolación lineal con los valores de los centros de las celdas para obtener los valores en las caras, aparecen valores que no se corresponden con la física del problema para el campo de presiones. Para evitar este fenómeno, Fluent emplea un promediado ponderado sobre la ecuación de cantidad de movimiento, utilizando los coeficientes  $a_p$  de la ecuación (3.15). Aplicando el procedimiento anterior, el flujo a través de una cara se obtiene como,

$$J_f = \hat{J}_f + d_f (p_{c0} - p_{c1}) \quad (3.17)$$

siendo  $p_{c0}$  y  $p_{c1}$  los valores de la presión en cada una de las celdas que se encuentran en contacto con la cara en cuestión y  $\hat{J}_f$  representa la influencia de la velocidades en esas celdas. El término  $d_f$  es función de  $\bar{a}_p$  (valor medio de los coeficientes  $a_p$  de de la ecuación de cantidad de movimiento en las celdas en contacto con la cara  $f$ ).

○ **Esquema de interpolación de la densidad**

Para casos de flujos compresibles, Fluent aplica una interpolación tipo upwind para obtener la densidad en las caras (para flujos incompresibles se emplea una media aritmética). Esta

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

interpolación se puede realizar mediante tres esquemas: upwind de primer orden, upwind de segundo orden y QUICK.

- El esquema upwind de primer orden asigna el valor de la densidad en la celda aguas arriba al valor de la densidad en la cara. Este esquema propicia la estabilidad de la discretización de la ecuación de corrección de la presión y ofrece buenos resultados para muchas clases de flujos. Es el esquema que se implementa por defecto en flujos compresibles.
- El esquema upwind de segundo orden propicia estabilidad en flujos supersónicos y capta los efectos de las ondas de choque mejor que el esquema de primer orden.
- El esquema QUICK empleado para la densidad es similar al empleado en otras variables.
- **Acoplamiento presión velocidad**

El acoplamiento presión-velocidad se consigue usando la ecuación 3.17 para obtener una ecuación para la presión a partir de la ecuación de continuidad discretizada (ecuación 3.16). Fluent permite escoger entre tres tipos de algoritmos de acoplamiento presión-velocidad: SIMPLE, SIMPLEC y PISO.

✓ **SIMPLE**

El algoritmo SIMPLE emplea una relación entre la velocidad y la correlación de la presión para hacer que se cumpla la conservación de la masa y obtener el campo de presiones. Si la ecuación de cantidad de movimiento se resuelve empleando un campo de presiones ficticio  $p^*$ , el flujo en la cara resultante  $J_f^*$  se obtiene según.

$$J_f^* = \hat{J}_f^* + d_f(p_{c0}^* - p_{c1}^*) \quad (3.18)$$

La ecuación 3.18 no satisface la ecuación de continuidad, por lo que hay que añadir una corrección al flujo a través de la cara para que se satisfaga dicha ecuación.

$$J_f^* = \hat{J}_f^* + J_f' \quad (3.19)$$

El algoritmo SIMPLE emplea la siguiente ecuación para la corrección anterior,

$$J_f' = d_f(p'_{c0} - p'_{c1}) \quad (3.20)$$

donde  $p'$  es el valor corregido de la presión en la celda.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

El algoritmo SIMPLE sustituye las ecuaciones corregidas 3.19 y 3.20 en la ecuación de continuidad discretizada (ecuación 3.16) para obtener una ecuación discreta para el valor de la presión corregida en cada celda,

$$a_p p' = \sum_{nb} a_{nb} p'_{nb} + b \quad (3.21)$$

donde b representa al flujo entrante en la celda y viene dado por,

$$b = \sum_f^N J_f^* A_f \quad (3.22)$$

La ecuación (3.21) de la presión corregida puede resolverse empleando el método algebraico multimalla (AMG). Una vez obtenida la solución, la presión en las celdas y el flujo a través de las caras se corrigen utilizando la siguiente expresión,

$$p = p^* + \alpha_p p' \quad (3.23)$$

$$J_f = J_f^* + d_f (p_{c0} - p_{c1}) \quad (3.24)$$

siendo  $\alpha_p$  el factor de subrelajación para la presión. El valor corregido del flujo a través de las caras  $J_f$  satisface la ecuación de continuidad discreta en cada iteración.

✓ **SIMPLEC**

Sobre algoritmos SIMPLE se han realizado una serie de variaciones para obtener nuevos algoritmos. Además del SIMPLE, Fluent ofrece una variante de éste, el algoritmo SIMPLEC (SIMPLE-Consistent).

Ambos algoritmos son muy parecidos. La única diferencia entre ambos radica en la forma de la expresión empleada para el flujo corregido. Al igual que para el algoritmo SIMPLE, la ecuación del flujo corregido viene dada por la ecuación (3.24) pero en el caso del algoritmo SIMPLEC el factor  $d_f$  no es función del valor medio de los coeficientes  $a_p$  de la ecuación de cantidad de movimiento en las celdas en contacto con la cara f, sino que es función del siguiente término:

$$\overline{a_p - \sum_{nb} a_{nb}} \quad (3.25)$$

Esta modificación produce una aceleración en la convergencia en problemas en los que el acoplamiento presión-velocidad es el principal obstáculo para obtener la solución.

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

✓ **PISO**

El algoritmo PISO (*Pressure-Implicit Splitting Operators*) está basado en una aproximación de alta precisión de la relación entre las correcciones de presión y velocidad. Una de las limitaciones que presentan los algoritmos SIMPLE y SIMPLEC es que las nuevas velocidades que se van obteniendo en el proceso de iteración y sus correspondientes flujos no cumplan la ecuación de cantidad de movimiento después de resolver la corrección para la presión, lo que implica repetir el cálculo hasta que se cumpla dicho balance. El algoritmo PISO mediante dos variantes: *neighbor correction* y *skewness correction* reduce este tipo de efectos.

○ **Elección de los esquemas de interpolación en el solver segregado**

✓ **Esquema de interpolación de presiones**

Como ya se ha expuesto existen una serie de esquemas de interpolación de la presión disponibles cuando se trabaja con el *solver segregado*. Para muchos casos, el esquema estándar es aceptable, pero en ciertos casos es recomendable emplear uno de los otros esquemas disponibles:

- En flujos que implican fuerzas elevadas sobre cuerpos, se recomienda el esquema *body-force-weighted*.
- En flujos con elevadas tasas de movimiento ciclónico, alto número de Rayleigh en convección natural, elevada velocidad en flujos con rotación, superficies porosas y en flujos con alta curvatura en las líneas de corriente, se aconseja el esquema PRESTO.
- En flujos compresibles se recomienda emplear un esquema de segundo orden.

✓ **Esquema de interpolación de densidades**

Como ya se trató, existen tres esquemas de interpolación para densidad cuando se trabaja con el *solver segregado*.

El esquema de primer orden (esquema que Fluent emplea por defecto) hace que la ecuación discretizada de la presión corregida se comporte de forma estable y ofrece buenos resultados para muchas clases de flujos. Pero, si se está trabajando con flujos compresibles, un esquema de segundo orden o un esquema tipo QUICK ofrecen resultados más precisos.

✓ **Acoplamiento presión-velocidad**

En Fluent, se encuentran disponibles los algoritmos SIMPLE, SIMPLEC y PISO. El algoritmo SIMPLE es el que se aplica por defecto, pero en algunos problemas, es preferible emplear el



### Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

algoritmo SIMPLEC, particularmente cuando se puede aplicar factores de subrelajación de mayor magnitud, como se describe a continuación.

Para flujos relativamente no muy complejos (flujos laminares), en los que la convergencia está limitada por el acoplamiento entre la presión y la velocidad. Con el algoritmo SIMPLEC, se suele fijar el factor de subrelajación para la presión en la unidad, lo cual ayuda a la mayor velocidad en la convergencia. Sin embargo, en algunos problemas, el incrementar el valor de este factor de subrelajación puede acarrear problemas de inestabilidades en la convergencia. En estos casos es necesario el empleo de un valor menor para el factor de relajación asociado o emplear el algoritmo SIMPLE.

En flujos complejos que implican turbulencia y otros modelos físicos, el esquema SIMPLEC acelerará la convergencia siempre y cuando ésta se encuentre limitada por el acoplamiento entre la presión y la velocidad. Con bastante frecuencia, son otros modelos físicos los que imponen mayores restricciones en la convergencia; en estos casos, se observará que da lo mismo el uso de uno u otro algoritmo, SIMPLE o SIMPLEC.

El algoritmo PISO con *neighbor correction* es muy recomendable para todo tipo de flujos no estacionarios, especialmente, cuando se quiere usar un alto time step. En problemas en los que se use el modelo de turbulencia LES, que normalmente requiere bajos time step, el empleo del esquema PISO podría provocar un incremento del coste computacional, por lo que resultarían más adecuados los esquemas SIMPLE o SIMPLEC. El esquema PISO puede mantener el proceso de convergencia más estable aun usando elevados time steps y un factor de subrelajación para la presión y la cantidad de movimiento de la unidad. Sin embargo, en problemas estacionarios, el esquema PISO con *neighbor correction* no aporta ventajas sobre el uso de los esquemas SIMPLE o SIMPLEC con factores de subrelajación óptimos.

El esquema PISO con *skewness correction* es recomendable tanto en flujo estacionario como no estacionario en problemas que tengan una elevada distorsión en la malla. Cuando se emplea esta corrección, resulta de gran utilidad fijar todos los factores de subrelajación en la unidad para todas las ecuaciones. Si se está usando solamente el esquema PISO con *skewness correction* porque la malla que se emplea se encuentra muy distorsionada, entonces solo se habrá de fijar el valor de los factores de subrelajación de las ecuaciones de la presión y cantidad de movimiento de modo que su suma sea la unidad.

## 3.4 Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno son condiciones aplicadas en los límites o frontera del dominio computacional, son necesarias para poder cerrar el sistema de ecuaciones de gobierno y resolver el problema en cuestión.

En este apartado se realiza una revisión de las diferentes condiciones de contorno que se pueden implementar con Fluent, distinguiendo entre aquellas que se aplican en zonas de entrada o salida del flujo y aquellas en las que no hay entrada o salida de flujo.

Fluent permite seleccionar entre 10 condiciones de contorno distintas para las zonas de entrada o salida de flujo: *velocity inlet*, *pressure inlet*, *mass flow inlet*, *pressure outlet*, *pressure far-field*, *outflow*, *inlet vent*, *intake fan*, *outlet vent* y *exhaust fan*. A continuación, se describen sin entrar en detalle el significado físico de cada una de estas condiciones de contorno.

- *Velocity inlet*: se emplea para definir la velocidad y otras propiedades escalares en las zonas de entrada de flujo.
- *Pressure inlet*: se emplea para definir la presión total y otras propiedades escalares en las zonas de entrada de flujo.
- *Mass flow inlet*: se emplea en flujos compresibles para fijar un gasto másico a la entrada. No es necesario emplear esta condición para flujos incompresibles, ya que la densidad permanece constante, y la condición de *velocity inlet* fija automáticamente el valor del gasto másico.
- *Pressure far-field*: se emplea para modelizar un chorro libre especificando el número Mach y otras propiedades escalares. Esta condición de contorno solo se puede aplicar para flujos compresibles.
- *Outflow*: se emplea para modelizar la salida del flujo cuando no se conocen a priori los valores de velocidad y presión a la salida. Esta condición es apropiada cuando el flujo se encuentra totalmente desarrollado a la salida, asumiendo que la componente normal del gradiente del resto de propiedades excepto la presión es nulo. No es apropiada para flujos compresibles.
- *Intake vent*: se emplea para definir coeficientes de pérdidas, dirección de flujo, temperatura y presión ambiente a la entrada del flujo.
- *Intake fan*: es similar a la condición *inlet vent* sólo que para casos de flujos externos.

### Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

- Outlet vent: se emplea para definir coeficientes de pérdidas, dirección del flujo, temperatura y presión ambiente a la salida del flujo.
- Exhaust fan: se emplea para establecer las condiciones fluidas, térmicas y de presión, en las que ha de producirse la salida del flujo.

Para aquellas condiciones asociadas a zonas donde no existe entrada ni salida de flujo, Fluent permite implementar 4 tipos de condiciones de contorno: *wall*, *simmetry*, *periodic* y *axis*. A continuación, se describe brevemente el significado físico de cada una de estas condiciones de contorno.

- Wall: se emplea para introducir la condición de contorno asociada a una superficie sólida o pared. En ella se pueden especificar propiedades como la transmisión de calor, la rugosidad, etc.
- Symmetry: se emplea en situaciones en las que la geometría a estudiar y el comportamiento esperado del flujo dinámico/térmico presentan algún plano de simetría.
- Periodic: se emplea en situaciones en las que la geometría a estudiar y el comportamiento esperado del flujo dinámico/térmico presentan una naturaleza de repetición periódica.
- Axis: se emplea para definir el eje de una geometría donde el flujo es axilimétrico, de modo que sólo es necesario simular la mitad del dominio computacional.

Las condiciones de contorno que se han utilizado en las simulaciones son: *velocity inlet* (en la entrada del conducto o intercambiador), *pressure outlet* (salida del conducto), *wall* (para las superficies sólidas) y *symmetry* (para las superficies que constituyen planos de simetría).

Además de las condiciones de contorno, hay que definir las características o comportamiento del fluido (densidad, calor específico, viscosidad, conductividad térmica, etc.), ya sea constante o dependiente de la temperatura. Más adelante se explican con detalle estos aspectos.

## 3.5 Convergencia iterativa

Como ya se comentó anteriormente, para resolver las ecuaciones de gobierno del flujo hay que realizar un proceso de cálculo iterativo. Durante el proceso de iteración para obtener la solución del problema, es necesario controlar que el algoritmo de cálculo converge hacia la solución final (es decir, obtiene cada vez soluciones más aproximadas a la solución final cuando se incrementa el número de iteraciones), ya que el código puede no converger, y por tanto, no estabilizarse en ningún valor aunque continúe iterando de forma infinita.

### 3.5.1 Residuos

Los residuos son una de las herramientas más importantes a la hora de controlar la convergencia durante el proceso iterativo. Éstos, de modo general, representan la diferencia entre los valores de las variables a resolver entre dos iteraciones. Si un código converge, estas diferencias tienden a reducirse hasta alcanzar un valor muy pequeño en el que se estabilizan. En un caso ideal, debería hacerse cero, pero los ordenadores tienen precisión finita, por lo que se puede conseguir que los residuos se estabilicen en torno a seis órdenes de magnitud respecto a los valores iniciales  $10^{-6}$  (precisión simple) o incluso valores próximos a los doce órdenes de magnitud  $10^{-12}$  (precisión doble), pero nunca se conseguirán que se hagan cero.

En función del solver que se emplee, los residuos se definen de diferente forma. A continuación se describen los residuos que Fluent emplea para el *solver segregado* y el *solver acoplado*.

#### 3.5.1.1 Definición de los residuos para solver segregado

Después del proceso de discretización de las ecuaciones, la ecuación del transporte linealizada y particularizada para cada celda P queda de la siguiente forma,

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (3.26)$$

donde  $a_p$  es el coeficiente central de la celda P,  $a_{nb}$  son los coeficientes de las celdas vecinas y b es la contribución constante del término de la fuente

$$S_C (S = S_C + S_P \phi).$$

Por lo tanto, la ecuación (3.26) puede ponerse como,

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

$$a_p = \sum_{nb} a_{nb} - S_p \quad (3.27)$$

El residuo  $R^\phi$  calculado por Fluent en el *solver segregado* es la suma de las diferencias entre los términos de la ecuación (3.26) para todas las celdas P del dominio computacional, como se muestra en la ecuación (3.28). A este valor de los residuos se le conoce como residuos no escalados,

$$R^\phi = \sum_{celdas} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_p \right| \quad (3.28)$$

En general, es difícil evaluar la convergencia basándose en los resultados obtenidos para los residuos definidos según la ecuación (3.28), ya que es difícil saber a priori, cual puede ser un valor aceptable de estos residuos para considerar que el código ha convergido.

Para solucionar este problema, se emplean los residuos escalados, definidos como,

$$R^\phi = \frac{\sum_{celdas} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_p \right|}{\sum_{celdas} a_p \phi_p} \quad (3.29)$$

donde el valor de  $\phi_p$  que aparece en el denominador se sustituye por  $v_p$  para poder obtener los residuos de la ecuación de cantidad de movimiento.

Para la ecuación de continuidad los residuos no escalados se definen como,

$$R^\phi = \sum_{celdas} \text{ |Ratio de generación de masa en la celda P|} \quad (3.30)$$

mientras que los residuos escalados se obtienen mediante,

$$\frac{R_{iteración,N}^C}{R_{iteración,5}^C} \quad (3.31)$$

siendo el denominador el mayor de los residuos d continuidad en valor absoluto obtenidos durante las cinco primeras iteraciones.

### 3.5.1.2 Definición de los residuos para solver acoplado

Los residuos par el solver acoplado se definen como la variación con el tiempo de una magnitud a conservar (W). El valor RMS de los residuos es la raíz cuadrada de la media de los cuadrados de los valores de los residuos en cada celda del domino, es decir,

$$R_{W,RMS} = \sqrt{\sum \left( \frac{\partial W}{\partial t} \right)^2} \quad (3.32)$$

donde la variación de W con el tiempo hace referencia a la evolución de la magnitud a conservar con el número de iteraciones. La ecuación (3.32) es la expresión de los residuos no escalados para el *solver acoplado*.

Los valores de los residuos para las ecuaciones que el *solver segregado* resuelve de forma secuencial (turbulencia y radiación) son los mismos que los descritos anteriormente para el solver segregado.

En general, igual que ocurría en el *solver segregado*, es difícil evaluar la convergencia basándose en los valores de los residuos obtenidos mediante la ecuación (3.32) Por ello, se emplean también, los residuos escalados, que vienen dados por,

$$\frac{R_{W,iteración,N}}{R_{W,iteración,5}} \quad (3.33)$$

siendo el denominador el mayor de los residuos en valor absoluto obtenidos durante las cinco primeras iteraciones.

### 3.5.2 Evaluación de las magnitudes fluidas durante el proceso de cálculo iterativo

Después de cada iteración o paso temporal, se pueden calcular y monitorizar por pantalla los valores de las magnitudes fluidas sobre un plano o punto del dominio computacional, de modelo que se pueda observar la evolución de estas durante el proceso iterativo. Para obtener valores de dichas magnitudes se pueden emplear distintas técnicas de cálculo (*Report Type*):

- Area: calcula el valor del área asociada a la superficie a evaluar.
- Integral: integra el valor de la magnitud seleccionada sobre una superficie.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

- Area-Weighted Average: calcula la media de la magnitud ponderándola con el área de las distintas celdas que constituyen la superficie.
- Flow Rate: calcula el flujo de la magnitud a través de la superficie.
- Mass Flow Rate: calcula el flujo másico de la magnitud a través de la superficie.
- Mass-Weighted Average: calcula la media de la magnitud a través de la superficie.
- Sum: calcula la suma de los valores de una magnitud sobre una superficie.
- Facet Average: calcula el valor medio de los valores de la magnitud en las celdas que conforman la superficie.
- Facet Minimum: calcula el mínimo valor de los valores de la magnitud en las celdas de la superficie.
- Vertex Average: calcula el valor medio de los valores de la magnitud en los nodos que conforman la superficie.
- Vertex Maximum: calcula el máximo valor de los valores de la magnitud en los nodos de la superficie.

La monitorización dinámica de una magnitud fluida determinada empleando alguno de los promediados anteriores es una herramienta que se puede emplear como criterio adicional (además de los residuos) para comprobar la convergencia iterativa. Cuando el proceso es convergente, los valores de las magnitudes convergen, y por tanto, a parte de la reducción de los residuos, debe producirse la estabilización y convergencia de las magnitudes monitorizadas.

Otra forma de comprobar la convergencia es la realización de balances de masa y de energía globales sobre el dominio computacional durante el proceso de cálculo. Para ello se emplea el comando *Flux Reports* seleccionando la opción *Mass Flow Rate* para el caso de balance de masa (calcula el producto de la densidad, el vector velocidad y el área de la celda en cuestión sobre las superficies, en kg/s) y *Total Heat Transfer Rate* para el balance de energía (calcula la suma de los calores de convección y radiación sobre todas las superficies en W). Previamente se deben haber creado las superficies necesarias que conforman el contorno de la geometría, para poder seleccionarlas y aplicar sobre éstas uno de los balances, el cual, debe tender a reducirse hasta unos valores muy próximos a cero, que vendrán condicionados por la precisión de cálculo y el refinamiento de la malla empleados.

### 3.5.3 Criterios de convergencia

No existe un criterio universal para evaluar la convergencia de un código de CFD. Por ello, para evaluar la convergencia durante el proceso iterativo de cálculo, se empleará una combinación de los resultados obtenidos para los residuos escalados, la convergencia de alguna magnitud de interés en un plano o un punto determinado y los balances de masa y energía globales sobre el dominio computacional, de modo que los resultados obtenidos sean suficientemente completos y fiables. A continuación, se describen de manera general premisas o condiciones que deben cumplir los parámetros anteriores para que se pueda asegurar la convergencia del código:

- Residuos escalados: deben ir decreciendo con el número de iteraciones hasta alcanzar valores del orden de  $10^{-12}$  para continuidad y  $10^{-16}$  para las tres componentes del vector velocidad y la energía.
- Magnitudes fluidas: debe observarse la estabilización y convergencia de todas las magnitudes fluidas monitorizadas durante el proceso de cálculo.
- Balace de masa global: debe cumplirse con un error del orden de  $10^{-16}$  kg/s al final del proceso iterativo.
- Balace de energía global: debe cumplirse con un error del orden de  $10^{-4}$  W para el problema térmico (valor suficientemente pequeño respecto a los valores de los flujos de calor y energías que aparecen en este problema) y un error del orden de  $10^{-8}$  W para el problema fluidodinámico.



**Capítulo 4.**

**Flujos multifásicos.**

**Metodología de**

**simulación**

**numérica en Fluent**

## 4.1 Elección de un modelo multifásico

El primer paso en la solución de cualquier problema multifásico es determinar cuál de los regímenes se aproxima lo máximo posible para la determinación de modelos adecuados para cada régimen.

Los avances en la mecánica de fluidos computacional han proporcionado la base para una mayor comprensión de la dinámica de flujos multifásicos. Actualmente hay dos enfoques para el cálculo numérico de flujos multifásicos:

- El enfoque de Euler-Lagrange
- El enfoque de Euler-Euler.

### 4.1.1 Modelo Euler - Lagrange

El modelo de fase discreta de Lagrange en FLUENT sigue el enfoque de Euler-Lagrange. La fase fluida se trata como un continuo mediante la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas en el tiempo, mientras que la fase dispersa se resuelve mediante el seguimiento de un gran número de partículas, burbujas, o gotitas a través del campo de flujo calculado. La fase dispersa puede intercambiar impulso, masa y energía con la fase fluida.

Un supuesto fundamental realizado en este modelo es que la fase secundaria dispersa ocupa una fracción de volumen bajo, a pesar de una alta carga masiva ( $m_{\text{partículas}} \geq m_{\text{líquido}}$ ) es aceptable. Las trayectorias de las partículas o gotitas son computadas de forma individual a intervalos determinados durante el cálculo de la fase fluida. Esto hace que el modelo apropiado para el modelado de secado de sprays, combustión de carbón y combustibles líquidos, y algunos flujos de partículas cargadas, pero inapropiado para el modelado de mezclas de líquido-líquido, lechos fluidizados, o cualquier aplicación en la que la fracción de volumen de la segunda fase no es despreciable.

### 4.1.2 Modelo Euler - Euler

En el enfoque de Euler-Euler, las diferentes fases se tratan matemáticamente como interpenetrating continua. Dado que el volumen de una fase no puede ser ocupado por las otras fases, se introduce el concepto de fracción de volumen fásico. Estas fracciones de volumen se supone que son funciones continuas de espacio y tiempo y su suma es igual a uno. Las

### **Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

ecuaciones de conservación para cada fase se derivan para obtener un conjunto de ecuaciones, que tienen una estructura similar para todas las fases. Estas ecuaciones están cerradas, proporcionando relaciones constitutivas que se obtienen a partir de información empírica, o, en el caso de flujos granulares, por aplicación de la teoría cinética.

En FLUENT, tenemos tres modelos multifase Euler-Euler diferentes:

- El modelo Volumen of Fluid (VOF),
- El modelo Mixture,
- El modelo Eulerian.

#### ✓ **Modelo VOF**

El modelo VOF es una técnica de seguimiento de superficie aplicada a un malla euleriana fija. Está diseñado para dos o más fluidos inmiscibles donde la posición de la interfaz entre los fluidos es de interés. En el modelo VOF, un único conjunto de ecuaciones de momento es compartida por los fluidos, se realiza un seguimiento en todo el dominio de la fracción de volumen de cada uno de los fluidos en cada celda computacional. Aplicaciones del modelo VOF incluyen flujos estratificados, flujos de superficie libre, llenado, chapoteando, el movimiento de grandes burbujas en un líquido, el movimiento del líquido después de una rotura de presas, predicción de rotura de chorros y el seguimiento constante o transitoria de cualquier interfaz líquido-gas.

#### ✓ **Modelo Mixture**

El modelo Mixture está diseñado para dos o más fases fluidas (o partículas). Como en el modelo Eulerian, las fases se tratan como interpenetrating continua. El modelo de mezcla resuelve la ecuación de momentum de mezcla y prescribe velocidades relativas para describir las fases dispersas. Aplicaciones del modelo de mezcla incluyen flujos de partículas cargadas de baja carga, los flujos burbujeantes, sedimentación y separadores ciclónicos. El modelo de mezcla también se puede utilizar sin las velocidades relativas de las fases dispersas para modelar flujo multifásico homogéneo.

#### ✓ **Modelo Eulerian**

El modelo Eulerian es el más complejo de los modelos multifase en FLUENT. Soluciona un conjunto de  $n$  ecuaciones de momentum y continuidad de para cada fase. El acoplamiento se logra a través de los coeficientes de intercambio de presión y de interfase. La forma en que este

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

acoplamiento se maneja depende del tipo de las fases que intervienen; los flujos granulares (sólido-fluido) se manejan de manera diferente que los no granulares (fluido-fluido) flujos. Para flujos granulares, las propiedades se obtienen de la aplicación de la teoría cinética. El intercambio de momentum entre las fases depende también del tipo de mezcla que se está modelando. Las UDFs definidas por el usuario de Fluent le permiten personalizar el cálculo del cambio de impulso. Aplicaciones del modelo multifase Eulerian incluyen columnas de burbujas, tubos verticales, suspensión de partículas y lechos fluidizados.

✓ **Comparación de modelos**

En general, una vez que haya determinado el régimen de flujo que representa mejor su sistema de múltiples fases, puede seleccionar el modelo apropiado basándose en las siguientes directrices:

- Para flujo burbujeante, flujos por goteo, y los flujos cargados de partículas en el que las fases se mezclan y / o fracciones de volumen de la fase dispersa superan el 10%, se debe utilizar el modelo de Mixture o el modelo Eulerian.
- Para flujos babosa, debe utilizarse el modelo VOF.
- Para flujos estratificados y de superficie libre debe utilizarse el modelo VOF.
- Para el transporte neumático, debe utilizarse el modelo Mixture para el caso de flujo homogéneo o el modelo Eulerian para caso de flujo granular.
- Para lechos fluidizados, debe utilizarse el modelo Eulerian para el flujo granular.
- Para flujos de lodos y el hidrot transporte, debe utilizarse el modelo Mixture o el modelo Eulerian.
- Para el caso de sedimentación deberá utilizarse el modelo Eulerian.

En general, para flujos multifásicos complejos que involucran a múltiples regímenes de flujo, se debe seleccionar el aspecto del flujo que es de mayor interés, y elegir el modelo que sea más adecuado para ese aspecto del flujo. Hay que tener en cuenta que la precisión de los resultados no será tan buena como para flujos que involucran sólo un régimen de flujo, ya que el modelo se estará utilizando tendrá validez sólo para una parte de la corriente que se está modelando.

Tal y como se ha discutido en esta sección, el modelo VOF es apropiado para los flujos estratificados o de superficie libre, y la mezcla y los modelos de Euler son apropiados para los flujos en el que las fases se mezclan o se separan y / o fracciones de volumen de la fase dispersa

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

superan el 10%. (Flujos en el que las fracciones en volumen de la fase dispersa son menores o iguales al 10% puede ser modelado utilizando el modelo de fase discreta (DFM))

Para elegir entre el modelo Mixture y el modelo Eulerian, debe considerarse los siguientes aspectos:

- Si hay una amplia distribución de las fases dispersas (es decir, si las partículas varían en tamaño y las partículas más grandes no se separan del campo de flujo primario), el modelo Mixture puede ser preferible (es decir, menos caro computacionalmente). Si las fases dispersas se concentran solo en porciones del dominio, debe utilizar el modelo Eulerian.
- Si las leyes de arrastre en la interfase que son aplicables al sistema analizado están disponibles (ya sea dentro de FLUENT o por medio de una función definida por el usuario (udf)), el modelo Eulerian generalmente puede proporcionar resultados más precisos que el modelo de Mixture. A pesar de que se pueden aplicar las mismas leyes de arrastre para el modelo Mixture, tal y como también es válido para una simulación Eulerian no granular, si no se conocen las leyes de arrastre en interfase o su aplicabilidad al sistema estudiado es cuestionable, el modelo de Mixture puede ser una mejor opción. Para la mayoría de los casos con partículas esféricas, entonces la ley Schiller-Naumann es más que adecuada. Para los casos con partículas no esféricas, se puede definir una UDF.
- Para resolver un problema más sencillo, que requiere menos esfuerzo computacional, el modelo de Mixture puede ser una mejor opción, ya que resuelve un menor número de ecuaciones que el modelo Eulerian. Si la precisión es más importante que el esfuerzo computacional, el modelo Eulerian es una mejor opción. Sin embargo, hay que tener en cuenta que la complejidad del modelo Eulerian puede hacer que sea menos computacionalmente estable que el modelo de mezcla.

## 4.2 Modelo teórico Volume of Fluid (VOF)

### ✓ Resumen

El modelo VOF puede modelar dos o más líquidos inmiscibles por la solución de un único conjunto de ecuaciones de momento y el seguimiento de la fracción de volumen de cada uno de los fluidos en todo el dominio. Las aplicaciones típicas incluyen la predicción de ruptura de chorros, el movimiento de grandes burbujas en un líquido, el movimiento del líquido después de una rotura de presas, y el seguimiento constante o transitorio de cualquier interfaz líquido-gas.

### ✓ Limitaciones

Las siguientes restricciones se aplican al modelo VOF en FLUENT:

- Debe utilizar el solver pressured-based. El modelo VOF no está disponible con el solver density-based.
- Todos los volúmenes de control deben llenarse con ya sea una sola fase fluida o una combinación de fases. El modelo VOF no permite regiones vacías sin ningún tipo de fluido en ellas.
- Sólo una de las fases se puede definir como un gas ideal compresible. No hay ninguna limitación sobre el uso de líquidos compresibles utilizando funciones definidas por el usuario UDFs.
- Streamwise periodic flow (ya sea especificando la ratio de flujo de masa o caída de presión) no puede ser modelado cuando se utiliza el modelo VOF.
- La formulación second-order implicit time-stepping no se puede utilizar con el esquema explícito VOF.
- Cuando se rastrean partículas en paralelo, el modelo de DPM no se puede utilizar con el modelo VOF si la opción de memoria compartida está habilitada.

### 4.2.1 Cálculos estado estacionario y transitorio

La formulación VOF en FLUENT se utiliza generalmente para calcular una solución en función del tiempo, aunque también es posible realizar un cálculo en estado estacionario. Un cálculo VOF en estado estacionario es sensato sólo cuando la solución es independiente de las condiciones iniciales y cuando hay condiciones de contorno de entrada de flujo de diferentes para cada una

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

de las fases. Por ejemplo, de la superficie libre en el interior de una taza en rotación depende del nivel inicial del fluido, tal problema debe ser resuelto usando la formulación dependiente del tiempo. Por otro lado, el flujo de agua en un canal con una región de aire en la parte superior y una entrada de aire separada se puede resolver con la formulación de estado estacionario.

Dicha formulación se basa en el hecho de que dos o más fluidos (o fases) no son interpenetrantes. Para cada fase adicional que se agrega al modelo, se introduce una nueva variable: la fracción de volumen de la fase en la celda computacional. En cada volumen de control, las fracciones en volumen de todas las fases suman la unidad. Los campos para todas las variables y las propiedades son compartidos por las fases y representan valores de volumen promediado, siempre y cuando la fracción de volumen de cada una de las fases que sea conocido en cada ubicación. Por lo tanto las variables y propiedades en cualquier celda dada son o bien puramente representativo de una de las fases, o el representante de una mezcla de las fases, dependiendo de los valores de fracción de volumen. En otras palabras, si la fracción de volumen del fluido  $q^{th}$  en la celda se denota como  $\alpha_q$ , entonces las tres condiciones siguientes son posibles:

$\alpha_q = 0$  ; la celda está vacía del fluido  $q^{th}$ .

$\alpha_q = 1$  ; la celda está llena del fluido  $q^{th}$ .

$0 < \alpha_q < 1$  ; la celda contiene la interfaz entre el fluido  $q^{th}$  y el resto de fluidos.

En función del valor local de  $\alpha_q$  las propiedades y valores apropiados serán asignados a cada volumen de control dentro del dominio.

**4.2.2 Ecuación de la fracción volumétrica**

El seguimiento de la interfaz (s) entre las fases se lleva a cabo por la solución de una ecuación de continuidad para la fracción de volumen de una (o más) de las fases. Para la fase de  $q^{th}$  esta ecuación tiene la siguiente forma:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla * (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\sigma_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (4.1)$$

donde  $\dot{m}_{qp}$  es la masa transferida desde la fase q a la fase p y  $\dot{m}_{pq}$  es la masa transferida desde la fase p a la fase q.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Por defecto el término  $S_{\sigma_q}$  en la ecuación (4.1) es cero pero se puede definir una constante o introducir una función definida por el usuario

La ecuación de la fracción de volumen no se resolverá para la fase primaria; la fracción de volumen de la fase primaria se calcula en base a la siguiente restricción:

$$\sum_{q=1}^n \sigma_q = 1 \quad (4.2)$$

La fracción ecuación de volumen puede ser resuelto, ya sea a través de discretización implícito o explícito tiempo.

✓ **Esquema Implicit**

Cuando se utiliza el esquema Implicit para una discretización temporal, Fluent utiliza esquemas estándar de interpolación de diferencias finitas, QUICK, Second Order Upwind y First Order Upwind, y Modified HRIC para obtener los flujos de cara para todas las células, incluidas las que cerca de la interfaz.

$$\frac{\alpha_q^{n+1} \rho_q^{n+1} - \alpha_q^n \rho_q^n}{\Delta t} V + \sum_f (\rho_q^{n+1} U_f^{n+1} \alpha_{q,f}^{n+1}) = \left[ S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \right] V \quad (4.3)$$

Dado que esta ecuación requiere los valores de fracción de volumen en el paso de tiempo actual (en lugar de en el paso anterior, como para el esquema explícito), se resuelve iterativamente una ecuación de transporte escalar estándar para cada una de las fracciones de volumen de la fase secundaria en cada paso de tiempo.

El esquema implícito se puede utilizar para ambos cálculos dependientes del tiempo y de estado estacionario.

✓ **Esquema Explicit**

En el enfoque Explicit, FLUENT usa esquemas de interpolación de diferencias finitas estándar que se aplican a los valores de fracción de volumen que se calcularon en el paso de tiempo anterior.



**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

$$\frac{\alpha_q^{n+1} \rho_q^{n+1} - \alpha_q^n \rho_q^n}{\Delta t} V + \sum_f (\rho_q U_f^n \alpha_{q,f}^n) = \left[ \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_{\alpha_q} \right] V \quad (4.4)$$

donde:

$n+1$  = Índice de nuevo paso de tiempo (actual)

$n$  = Índice paso de tiempo anterior

$\alpha_{q,f}$  = valor nominal de la fracción de volumen  $q^{\text{th}}$ , calculado a partir de los esquemas first o second-order upwind, QUICK, modified HRIC, o CICSAM.

$V$  = volumen de la celda.

$U_f$  = volumen de flujo a través de la cara, basado en la velocidad normal

Esta formulación no requiere solución iterativa de la ecuación de transporte durante cada paso de tiempo, como es necesario para el esquema Implicit.

Importante: Cuando se utiliza el esquema Explicit, debe ser calculada una solución dependiente del tiempo.

Cuando se utiliza el esquema Explicit para discretización temporal, los flujos-cara puede ser interpolados, ya sea usando la reconstrucción de la interfaz o usando un esquema de discretización volumen finito. Los esquemas de reconstrucción disponibles en FLUENT son Geo-Reconstruct y Donor-Acceptor. Los esquemas de discretización disponibles con el esquema Explicit para VOF son First Order Upwind, Second Order Upwind, CICSAM, Modified HRIC, y QUICK.

✓ **Interpolación en las proximidades de la interfaz**

La Formulación de control-volumen utilizada por FLUENT requiere que la convección y difusión flujos a través de las caras de volumen de control sean computadas y equilibrada con términos fuente dentro del volumen de control en sí.

En los esquemas de Geo-reconstruct y Donor-acceptor, FLUENT se aplica un tratamiento de interpolación especial a las celdas que se encuentran cerca de la interfase entre dos fases. La figura siguiente muestra una forma de la interfaz real, junto con las interfaces asumidas durante el cálculo por estos dos métodos.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

El esquema Explicit y el esquema Implicit tratan estas celdas con la misma interpolación que las celdas que están completamente llenas de una fase o de la otra (es decir, utilizando el estándar contra el viento (esquemas Standard Upwind, Second-Order Upwind, QUICK, modified HRIC o CICSAM) en vez de aplicar un tratamiento especial.

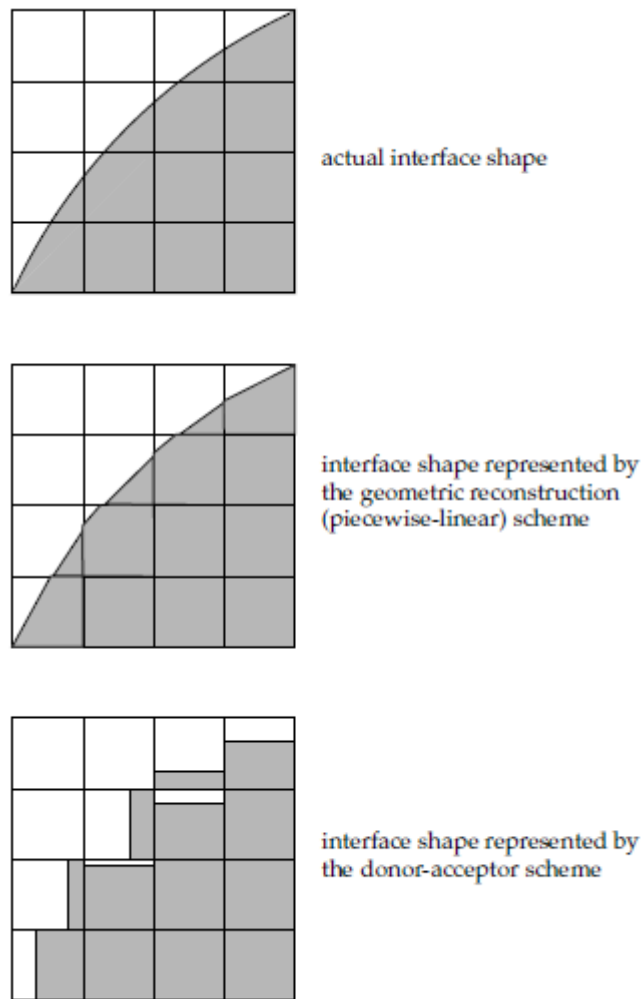


Figura 0.1 Interpolaciones en la interfaz

✓ **Esquema Geometric Reconstruction**

En el enfoque de Geometric Reconstruction, los esquemas de interpolación estándar que se utilizan en FLUENT se utilizan para obtener los flujos cara cada vez que una celda se llena completamente con una fase u otra. Cuando la celda está cerca de la interfase entre dos fases, se utiliza el esquema Geo-Reconstruct.

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

El esquema de Geo-Reconstruct representa la interfaz entre fluidos utilizando un enfoque lineal a tramos. En FLUENT este esquema es el más preciso y es aplicable para mallas no estructuradas generales. El esquema de Geo-Reconstruct se generaliza para mallas no estructuradas a partir de la obra de Youngs. Se asume que la interfaz entre dos fluidos tiene una pendiente lineal dentro de cada célula, y utiliza esta forma lineal para el cálculo de la advección de fluido a través de las caras de células.

El primer paso en este esquema de reconstrucción es el cálculo de la posición de la interfaz lineal con respecto al centro de cada célula parcialmente llena, en base a información sobre la fracción de volumen y sus derivadas en la célula. El segundo paso es el cálculo de la cantidad advección de fluido a través de cada cara usando la representación computarizada de la interfaz lineal y la información acerca de la distribución normal y tangencial de velocidad en la cara. El tercer paso es el cálculo de la fracción de volumen en cada celda utilizando el balance de los flujos calculados durante el paso anterior.

Importante: Cuando se utiliza el esquema de Geometric Reconstruct, debe ser calculada una solución dependiente del tiempo. Además, si se está utilizando una malla de conformación (es decir, si los lugares de nodos de malla son idénticos en los límites donde dos subdominios confluyen), debe asegurarse de que no existen (de espesor cero) muros a dos caras dentro del dominio. Si los hay, tendrán que ser cortadas.

✓ **Esquema Donor-Acceptor**

En el enfoque de Donor-Acceptor, los esquemas de interpolación estándar que se utilizan en FLUENT se utilizan para obtener los flujos cara vez que una celda se llena completamente con una fase u otra. Cuando la celda está cerca de la interfase entre dos fases, un esquema de "donor-acceptor" se utiliza para determinar la cantidad de fluido adveccionado a través de la cara. Este esquema identifica una celda como donante de una cantidad de fluido de una fase y otra (vecino) celda como el aceptadora de la misma cantidad de líquido, y se utiliza para evitar la difusión numérica en la interfase. La cantidad de líquido de una fase que puede ser trasladada por convección a través de un límite de la celda está limitada por un mínimo de dos valores: el volumen de llenado en la célula donante o el volumen libre en la célula aceptadora.

La orientación de la interfaz también se utiliza en la determinación de los flujos de la cara. La orientación interfaz es horizontal o vertical, dependiendo de la dirección del gradiente de la fracción de volumen de la fase  $q^{\text{th}}$  dentro de la celda, y la de la celda vecina que comparte la

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

cara en cuestión. Dependiendo de la orientación de la interfaz, así como su movimiento, los valores de flujo se obtienen por devanado puro, arrollamiento puro, o alguna combinación de los dos.

Cuando se utiliza el esquema donor-aceptor, debe ser calculada una solución dependiente del tiempo. Además, el esquema de donor-aceptor sólo puede utilizarse con mallas de cuadriláteros o hexaedros. Además, si se está usando una malla de conformación (es decir, si los lugares de nodos de malla son idénticos en los límites donde dos subdominios cumplen), debe asegurarse de que no existen (de espesor cero) muros a dos caras dentro del dominio.

✓ **Esquema Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes (CICSAM)**

El esquema Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes (CICSAM), es un esquema de diferenciación de alta resolución. El esquema CICSAM es particularmente adecuada para flujos con altos ratios de viscosidades entre las fases. CICSAM se implementa en FLUENT como un esquema explícito y ofrece la ventaja de producir una interfaz que es casi tan fuerte como el esquema de Geo-Reconstruct.

**4.2.3 Propiedades de los fluidos**

Las propiedades que aparecen en las ecuaciones de transporte se determinan por la presencia componentes de las fases en cada volumen de control. En un sistema de dos fases, por ejemplo, si las fases están representados por los subíndices 1 y 2, y si está siendo rastreado la fracción de volumen de la segunda de ellas, la densidad en cada celda está dada por

$$\rho = \alpha_2 \rho_2 + (1 - \alpha_2) \rho_1 \tag{4.5}$$

En general, para un sistema de n-fases, la fracción de volumen promediada toma la siguiente forma:

$$\rho = \sum \alpha_q \rho_q \tag{4.6}$$

Todas las demás propiedades (por ejemplo, viscosidad) se calculan de esta manera.

#### 4.2.4 Ecuación de momento

Una sola ecuación de Momentum se resuelve en todo el dominio, y el campo de velocidad resultante se comparte entre las fases. La ecuación, se muestra a continuación, es dependiente de las fracciones en volumen de todas las fases a través de las propiedades  $\rho$  y  $\mu$ .

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (4.7)$$

Una limitación es que en los casos en los que existen grandes diferencias de velocidad entre las fases, la exactitud de las velocidades calculadas cerca de la interfaz puede verse afectada negativamente.

Hay que tener en cuenta que si el ratio de la viscosidad es más de 1000, esto puede llevar a dificultades de convergencia. El esquema de la captura de interfaz de compresión para mallas arbitrarias (CICSAM) es adecuado para flujos con altas proporciones de viscosidades entre las fases, resolviendo así el problema de la mala convergencia.

#### 4.2.5 Ecuación de energía

La ecuación de la energía, también compartida entre las fases, es

$$\frac{\partial}{\partial t}(\vec{v}(\rho E + p)) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) + S_h \quad (4.8)$$

El modelo VOF trata de energía, E, y la temperatura, T, como variables de masa promediada:

$$E = \frac{\sum_{q=1}^n \alpha_q \rho_q E_q}{\sum_{q=1}^n \alpha_q \rho_q} \quad (4.9)$$

donde  $E_q$  para cada fase se basa en el calor específico de esa fase y la temperatura compartida.

Las propiedades  $\rho$  y  $k_{\text{eff}}$  (conductividad térmica efectiva) son compartidas por las fases. El término,  $S_h$ , contiene las contribuciones de la radiación, así como cualesquiera otras fuentes de calor volumétricas.

Al igual que con el campo de velocidades, la exactitud de la temperatura cerca de la interfaz se limita en los casos en los que existen grandes diferencias de temperatura entre las fases. Estos problemas también surgen en los casos en que las propiedades varían en varios órdenes de magnitud. Por ejemplo, si un modelo incluye metal líquido en combinación con aire, las conductividades de los materiales pueden diferir.

### **4.2.6 Dependencia temporal**

---

Para los cálculos VOF dependientes del tiempo, la ecuación de fracción volumétrica se resuelve usando un esquema timemarching explícito. FLUENT refina automáticamente el paso de tiempo para la integración de la ecuación de la fracción de volumen, pero puede influir en este cálculo mediante la modificación del número de Courant.

## 4.3 Mixture model

### 4.3.1 Resumen y limitaciones

#### ✓ Resumen

El modelo de Mixture es un modelo simplificado de fases múltiples que se puede utilizar de diferentes maneras. Puede ser utilizado para modelar los flujos multifase donde las fases se mueven a diferentes velocidades, pero asumir equilibrio local sobre escalas espaciales de longitud corta. Puede ser utilizado para modelar flujos multifásicos homogéneos con acoplamiento fuerte y las fases se mueve a la misma velocidad y, por último, se utiliza el modelo Mixture para calcular la viscosidad no newtoniana.

Se pueden modelar  $n$  fases (líquido o particulado) resolviendo el impulso, la continuidad y ecuaciones de energía para la mezcla, las ecuaciones de la fracción de volumen de las fases secundarias y expresiones algebraicas para las velocidades relativas. Las aplicaciones típicas incluyen la sedimentación, separadores ciclónicos, los flujos de partículas cargadas de baja carga, y los flujos burbujeantes, donde la fracción de volumen de gas sigue siendo baja.

Es un buen sustituto para el modelo multifase Eulerian en muchos casos. Un modelo multifase completo puede no ser factible cuando existe una amplia distribución de la fase particulada o cuando las leyes en la interfase son desconocidos o su fiabilidad puede ser cuestionada. Un modelo más simple como el modelo de Mixture se puede realizar, así como un modelo de múltiples fases completo, cuando se resuelven un menor número de variables que el modelo multifase completo

Permite seleccionar fases granulares y calcula todas las propiedades de las fases granulares. Esto es aplicable para los flujos de líquido-sólido.

#### ✓ Limitaciones

Las siguientes limitaciones se aplican al modelo de Mixture en FLUENT:

- Debe utilizarse el solver pressure-based. El modelo de Mixture no está disponible con el solver density-based.

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

- Sólo una de las fases se puede definir como un gas ideal compresible. No hay ninguna limitación sobre el uso de líquidos compresibles utilizando funciones definidas por el usuario.
- Cuando se usa el modelo de Mixture, no se debe modelar de flujo periódico en sentido de la corriente especificando la tasa de flujo de masa.
- No se puede modelar solidificación y fusión con el modelo de Mixture.
- El modelo de cavitación (disponible con el modelo de mezcla) no es compatible con el modelo de turbulencia LES.
- No debe utilizarse la formulación relativa en combinación con el MRF y modelo Mixture).
- El modelo Mixture no permite flujos no viscosos.
- El modelo de conducción de shell para las paredes no se permite con el modelo de Mixture.
- Cuando se realiza el seguimiento de partículas en paralelo, no debe utilizarse el modelo DPM con el modelo de Mixture si la opción de memoria compartida está habilitada.
- El modelo Mixture, al igual que el modelo VOF, utiliza un enfoque de un solo fluido. Se diferencia del modelo VOF en dos aspectos:
  - El modelo de mezcla permite que las fases se interpenetren. La fracción de volumen  $\alpha_q$  y  $\alpha_p$  para un volumen de control pueden por lo tanto tomar un valor 0 y 1, dependiendo del espacio ocupado por q fase y fase p.
  - El modelo Mixture permite que las fases se muevan a diferentes velocidades, utilizando el concepto de velocidad de deslizamiento. (Hay que tener en cuenta que las fases pueden suponer moverse a la misma velocidad si así se especifica, y el modelo de Mixture se reduce entonces a un modelo multifásico de fases homogénea.)
  - El modelo Mixture resuelve la ecuación de continuidad para la mezcla, la ecuación de momento para la mezcla, la ecuación de energía para la mezcla, y la ecuación de fracción de volumen para las fases secundarias, así como expresiones algebraicas para las velocidades relativas (si las fases se están moviendo a diferentes velocidades).

---

### 4.3.2 Ecuaciones del modelo Mixture

---

El modelo de mezcla igual que el modelo VOF sólo usa un conjunto de ecuaciones. Se diferencia del modelo VOF en tres aspectos:



**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

- El modelo de mezcla permite a las fases ser interpenetrantes. La fracción de volumen  $\alpha_q$  y  $\alpha_p$  para un volumen de control pueden ser igual a cualquier valor entre 0 y 1, dependiendo del espacio ocupado por la fase q y la fase p.
- El modelo de mezcla permite a las fases moverse a diferentes velocidades.
- El modelo de mezcla resuelve la ecuación de conservación de masa para la mezcla, la ecuación del balance de cantidad de movimiento para la mezcla, la ecuación de la energía para la mezcla y la ecuación de la fracción de volumen para las fases secundarias, además de expresiones algebraicas para las velocidades relativas (si las fases se mueven a velocidades diferentes).

✓ **Ecuación de conservación de masa para la mezcla**

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{U}_m) = 0 \quad (4.10)$$

donde:

$$\vec{U}_m = \frac{\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \vec{U}_k}{\rho_m} \quad (4.11)$$

y

$$\rho_m = \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \quad (4.12)$$

$\alpha_k$  es la fracción de volumen de la fase k.

✓ **Ecuación del balance de cantidad de movimiento para la mezcla**

La ecuación del balance de cantidad de movimiento para la mezcla puede obtenerse por suma de las ecuaciones individuales de todas las fases. Se expresa:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \vec{U}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{U}_m \vec{U}_m) \\ & = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu_m (\nabla \vec{U}_m + \nabla \vec{U}_m^T)] + \rho_m \vec{g} + \vec{F} + \nabla \\ & \cdot \left( \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \vec{U}_{dr,k} \vec{U}_{dr,k} \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

donde n es el número de fases,  $\vec{F}$  es la fuerza, y  $\mu_m$  es la viscosidad de la mezcla.

$\vec{U}_{dr,k}$  es la velocidad relativa de la fase secundaria k:

$$\vec{U}_{dr,k} = \vec{U}_k - \vec{U}_m \quad (4.14)$$

✓ **Ecuación de conservación de la energía para la mezcla**

La ecuación se define como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{k=1}^n (\alpha_k \rho_k E_k) + \nabla \cdot \sum_{k=1}^n (\alpha_k \vec{U}_k (\rho_k E_k + p)) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_E \quad (4.15)$$

donde  $k_{eff}$  es la conductividad efectiva,  $\sum(\alpha_k(k_k + k_t))$  donde  $k_t$  es la conductividad turbulenta, definida de acuerdo al modelo turbulento utilizado. El primer término en el lado derecho de la ecuación representa la transferencia de energía debida a la conducción.  $S_E$  incluye otras fuentes volumétricas de calor.

$$E_h = h_k - \frac{p}{\rho_k} + \frac{U_k^2}{2} \quad (4.16)$$

para fases compresibles,  $E_k = h_k$  y para fases incompresibles, donde  $h_k$  es la entalpía de la fase k.

## 4.4 Eulerian model

### 4.4.1 Resumen y limitaciones

#### ✓ Resumen

El modelo multifase Eulerian en FLUENT permite la modelización de múltiples fases, pero que interactúan entre sí. Las fases pueden ser líquidos, gases o sólidos en casi cualquier combinación. Un tratamiento Eulerian se utiliza para cada fase, en contraste con el tratamiento Eulerian-Lagrange que se utiliza para el modelo Discrete Phase.

El número de fases secundarias sólo está limitado por los requisitos de memoria y comportamiento de convergencia. Se puede modelar cualquier número de fases secundarias, a condición de que haya suficiente memoria disponible. Para flujos multifásicos complejos, sin embargo, es posible que su solución está limitada por el comportamiento de la convergencia.

No distingue entre flujos multifásicos líquido-líquido y fluido-sólido (granular). Un flujo granular implica al menos una fase que ha sido designada como una fase granular.

La solución FLUENT se basa en lo siguiente:

- Una única presión es compartida por todas las fases.
- Las ecuaciones de momento y continuidad se resuelven para cada fase.
- Los siguientes parámetros están disponibles para las fases granulares:
- La temperatura granular se puede calcular para cada fase sólida. Puede seleccionar una formulación algebraica, una constante, una función definida por el usuario, o una ecuación diferencial parcial.
- La cizalla en fase sólida y las viscosidades a granel se obtienen mediante la aplicación de la teoría cinética de los flujos granulares. La viscosidad de rozamiento para el flujo modelado granular también está disponible. Se pueden seleccionar modelos apropiados y funciones definidas por el usuario para todas las propiedades.
- Están disponibles varias funciones de coeficiente de arrastre de la interfase, que son adecuadas para diversos tipos de regímenes multifásicos.

---

### Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

- Está disponible todo el modelo de turbulencia k- $\epsilon$ , y se pueden aplicar a todas las fases de la mezcla.

#### ✓ Limitaciones

Todas las funciones disponibles en FLUENT se pueden utilizar en conjunción con el modelo multifase Eulerian, a excepción de las siguientes limitaciones:

- El modelo de turbulencia Reynolds Stress no está disponible..
- No puede ser modelado el flujo periódico especificando el ratio de masa de flujo de flujo cuando se utiliza el modelo euleriano (se permite al usuario especificar una caída de presión).
- No se permite el flujo no viscoso.
- No se permite la fusión y solidificación.
- Cuando se realiza el seguimiento de partículas en paralelo, el modelo de DPM no se puede utilizar con el modelo multifase Eulerian si la opción de memoria compartida está habilitada

Para cambiar de un modelo de una sola fase, donde se resuelve un único conjunto de ecuaciones de conservación de momentum, continuidad y (opcionalmente) de energía, a un modelo de fases múltiples, se deben introducir juegos adicionales de ecuaciones de conservación. En el proceso de introducción de éstos conjuntos adicionales de ecuaciones de conservación, el conjunto original también debe ser modificado. Las modificaciones implican, entre otras cosas, la introducción de las fracciones en volumen de las múltiples fases, así como mecanismos para el intercambio de cantidad de movimiento, calor y masa entre las fases.

---

#### 4.4.2 Ecuaciones del modelo Eulerian

Este modelo, mediante la descripción del flujo multifásico como continuo interpenetrante, incorpora el concepto de fracciones de volumen de fase, denominadas como  $\alpha_q$ . Las fracciones de volumen representan el espacio ocupado por cada fase, y las leyes de conservación de masa y de momento se cumplen para cada fase individualmente.

El volumen de la fase q,  $V_q$ , se define como

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

$$V_q = \int_V \alpha_q dV \quad (4.17)$$

donde

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (4.18)$$

✓ **Ecuación de conservación de masa**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q \quad (4.19)$$

donde  $\vec{U}_q$  es la velocidad de la fase q,  $\dot{m}_{pq}$  se refiere a la transferencia de masa desde la fase p a la fase q y  $\dot{m}_{qp}$  a la transferencia de masa desde la fase q a la fase p.

✓ **Ecuación de balance de cantidad de movimiento**

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q \vec{U}_q) \\ &= -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{U}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{U}_{qp}) \quad (4.20) \\ &+ (\vec{F}_q + \vec{F}_{\text{lift},q} + \vec{F}_{\text{vm},q}) \end{aligned}$$

Donde  $\bar{\tau}_q$  es el tensor tensiones de la fase q,  $\vec{F}_q$  corresponde a las fuerzas externas al sistema,  $\vec{F}_{\text{lift},q}$  es la fuerza de sustentación,  $\vec{F}_{\text{vm},q}$  es la fuerza de masa virtual y  $\vec{R}_{pq}$  es la fuerza de interacción entre las fases. Se debe cumplir que  $\vec{R}_{pq} = -\vec{R}_{qp}$  y  $\vec{R}_{qq} = 0$

La fuerza de sustentación se define como:

$$\vec{F}_{\text{lift}} = -0.5 \rho_q \alpha_q (\vec{U}_q - \vec{U}_p) \times (\nabla \times \vec{U}_q) \quad (4.21)$$

La fuerza de masa virtual, que ocurre cuando una fase secundaria p tiene una aceleración respecto a la fase primaria q, se define como:

$$\vec{F}_{\text{vm}} = 0.5 \alpha_p \rho_q \left( \frac{d_q \vec{U}_q}{dt} - \frac{d_p \vec{U}_p}{dt} \right) \quad (4.22)$$

✓ **Ecuación de conservación de energía**

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q h_q) + \nabla(\alpha_q \rho_q \vec{U}_q h_q) \\ = -\alpha_q \frac{\partial p_q}{\partial t} + \bar{\tau}_q : \nabla \vec{U}_q - \nabla \vec{U}_q - \nabla \vec{q}_q + S_q \\ + \sum_{p=1}^n (\vec{Q}_{pq} + \dot{m}_{qp} h_{qp}) \end{aligned} \quad (4.23)$$

Donde  $h_q$  es la entalpía específica de la fase  $q$ ,  $\vec{q}_q$  es el flujo de calor,  $S_q$  es el término fuente,  $\vec{Q}_{pq}$  es la intensidad del intercambio de calor entre la fase  $p$  y  $q$ , y  $h_{pq}$  es la entalpía de la interfase. El calor intercambiado entre fases debe cumplir con las siguientes condiciones:  $\vec{Q}_{pq} = -\vec{Q}_{qp}$  y  $\vec{Q}_{qq} = 0$

### 4.4.3 Ecuaciones del modelo Eulerian

Para los cálculos multifásicos de Euler, FLUENT utiliza el algoritmo *fase de acoplamiento* SIMPLE (PC-SIMPLE) para el acoplamiento de presión-velocidad. PC-SIMPLE es una extensión del algoritmo SIMPLE para flujos multifásicos. Las velocidades se resuelven acoplados por fases, pero de modo segregado. El esquema de bloques algebraico *multigrid* utilizado por el solver segregado se utiliza para resolver una ecuación vectorial formada por los componentes de la velocidad de todas las fases de forma simultánea. Entonces, se construye una ecuación de corrección de presión basada la continuidad del volumen total antes que en la continuidad de masas. La presión y las velocidades a continuación, se corrigen de manera que se satisface la restricción de continuidad.

✓ **Ecuación de corrección de presión**

Para flujos multifásicos incompresibles, la ecuación de corrección de presión toma la forma:

$$\sum_{k=1}^n \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k + \nabla \cdot \alpha_k \vec{v}_k + \nabla \cdot \alpha_k \vec{v}_k^* - \frac{1}{\rho_k} \sum_{l=1}^n \dot{m}_{lk} \right\} = 0 \quad (4.24)$$

donde  $v_k$  es la corrección de la velocidad para la fase  $k$ -ésima y  $v_k^*$  es el valor de  $v_k$  en la iteración actual. Las correcciones de velocidad son en sí mismos expresadas como funciones de las correcciones de presión.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

✓ **Fracciones volumétricas**

Las fracciones volumétricas se obtienen de las ecuaciones de continuidad de fase. En discreto, la ecuación de la k-ésima fracción volumétrica es:

$$a_{p,k}\alpha_k = \sum_{nb} (a_{nb,k}\alpha_{nb,k}) + b_k = R_k \quad (4.25)$$

Con el fin de satisfacer la condición de que todas las fracciones en volumen suman uno,

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k = 1 \quad (4.26)$$

# **Capítulo 5.**

## **Diseño y**

### **trayectoria de**

#### **análisis en Fluent**



## 5.1 Diseño y configuración de un caso general en Fluent

A continuación se desarrollará la forma de configurar el programa Ansys Fluent para la cual se quiere resolver el flujo en el interior del tubo liso vertical con deflectores fijos en su interior.

### 5.1.1 Carga de la geometría específica en Fluent

En primer lugar se carga en Fluent el archivo con el paso del muelle para ello:

- ✚ Se inicia fluent en modo 2ddp (2 dimensiones y doble precisión).
- ✚ Se carga el archivo guardado .msh de Gambit correspondiente a la geometría con la que queremos trabajar la simulación.

1. File/read/case...
2. Se busca el archivo en el directorio donde se guardó.
3. Se selecciona y click en Abrir.

Se mostrará en pantalla la siguiente información.

```
> Reading "C:\Users\Consuelo\Desktop\PFC\Proyecto\Soluciones\columna_9.msh"...
3002 nodes.
  10 mixed velocity-inlet faces, zone 3.
  14 mixed wall faces, zone 4.
  14 mixed wall faces, zone 5.
  14 mixed wall faces, zone 6.
  14 mixed wall faces, zone 7.
  14 mixed wall faces, zone 8.
  157 mixed symmetry faces, zone 9.
  147 mixed wall faces, zone 10.
  18 mixed pressure-outlet faces, zone 11.
  18 mixed velocity-inlet faces, zone 12.
  8233 mixed interior faces, zone 14.
  5652 triangular cells, zone 2.

Building...
grid,
materials,
interface,
domains,
zones,
  default-interior
  entrada
  salida
  paredes
  simetria
  disco1
  disco2
  disco3
  disco4
  disco5
  gizq
  fluid
  creating disco5-shadow
  creating disco4-shadow
  creating disco3-shadow
  creating disco2-shadow
  creating disco1-shadow
shell conduction zones,
Done.
```

Figura 5.1. Ventana de comandos de Fluent

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Donde se puede apreciar que el archivo fue cargado con éxito sin ningún tipo de error. A continuación se debe recordar que la malla fue creada en mm. Fluent dispone de una herramienta para escalar esta malla como sigue:

- ✚ Grid/Check.
- ✚ Grid/Scale. Se despliega la ventana siguiente:

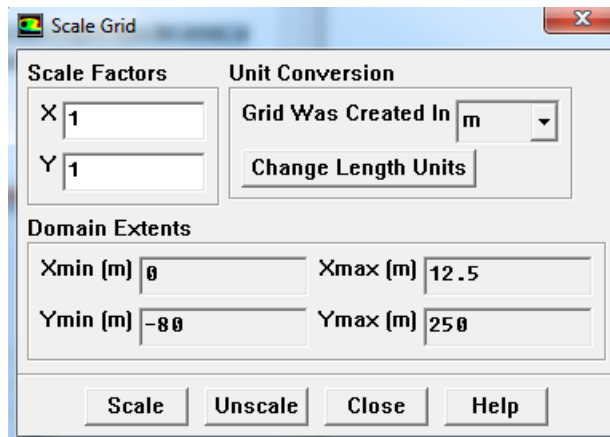


Figura 5.2. Menú escalado de malla

- ✚ Unit Conversion -> Grid was created in “mm”
- ✚ Click en Scale

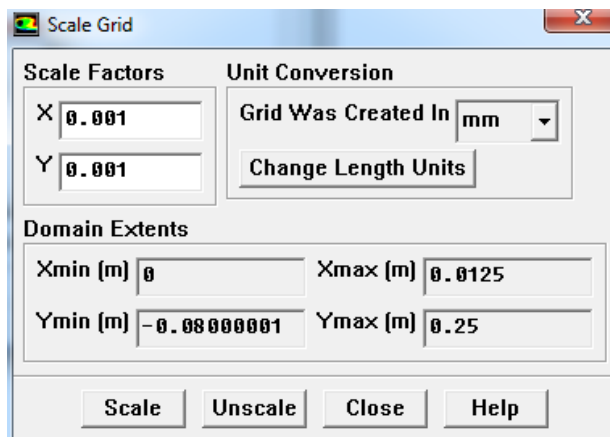


Figura 5.3. Malla escalada

Donde se puede ver como  $Y_{min}$ ,  $Y_{max}$ ,  $X_{max}$  han sido multiplicados por el factor 0.001 obteniendo el valor real en metros.

Posteriormente se puede observar la malla creada mediante la herramienta:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

Display/Grid... despliega la ventana siguiente.

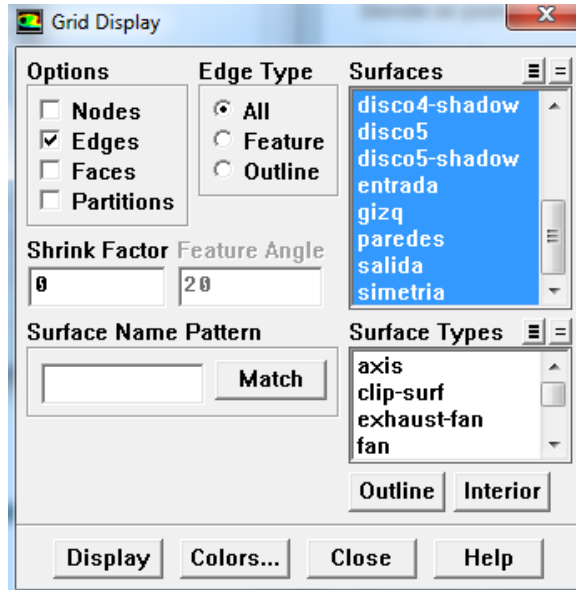


Figura 5.4. Menú display de malla

Se pueden seleccionar diferentes superficies, como se aprecia en Surfaces: aparecen los nombres definidos en Gambit, entrada, salida, paredes, etc.

Haciendo click en "Display":

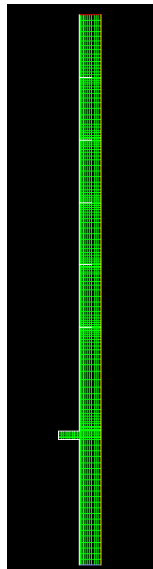


Figura 5.5. Menú display de malla

## Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

A continuación pasaremos a definir cada uno de los parámetros que a seleccionar a la hora de realizar una simulación de un caso en Fluent, sin entrar en discusiones de cuál podría ser más apropiado para cada caso, lo cual ha quedado definido anteriormente y se explicará para cada caso particular desarrollado en este proyecto más adelante.

### 5.1.2 Definición del modelo

#### ✓ Método de cálculo

Comenzaremos definiendo las propiedades del *solver* elegido:

✚ Click en *Define/Models/Solver*, nos aparecerá la siguiente ventana:

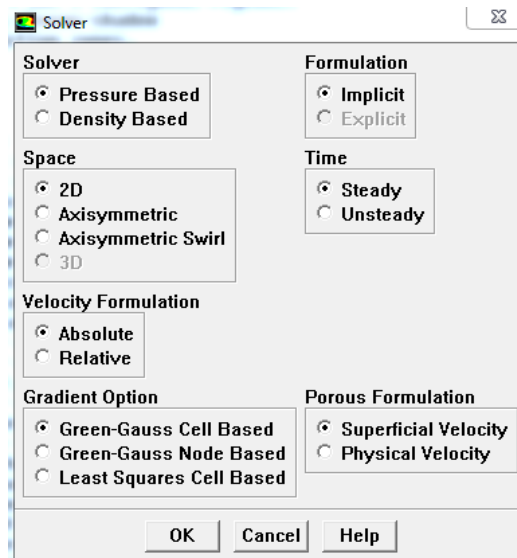


Figura 5.6 Menú solver

✚ En el apartado *solver*, seleccionaremos el método de cálculo más conveniente:

1. *Pressure Based* se utiliza para modelado de flujos con bajas velocidades e incompresibles.
2. *Density Based* se utiliza para modelado de flujos con altas velocidades y compresibles.

En nuestro caso usaremos siempre el *solver* basado en presión.

✚ Dentro de *Space*, especificamos la geometría en dos o tres dimensiones y la simetría axial. Para nuestro estudio trabajaremos con geometrías 2D.

## Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

- ✚ En cuanto a velocidades y gradientes, usaremos velocidades absolutas y el método de Green-Gauss, resolviendo las ecuaciones tomando la media de los valores de las celdas circundantes.
- ✚ Para el *tiempo*, según el caso a estudiar utilizaremos *steady* (estacionario) o *unsteady* (transitorio).

### ✓ **Modelo monofásico/multifásico**

Elegimos ahora si es problema que estamos planteando se trata de un flujo monofásico o por el contrario trataremos con multifases.

- ✚ Click en *Define/Models/Multiphase*, nos aparecerá la siguiente ventana:

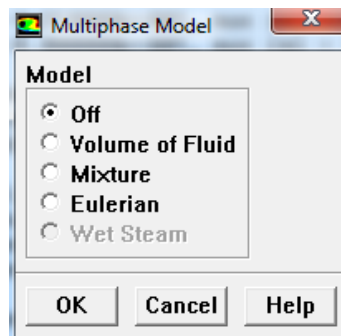


Figura 5.6 Menú multiphase

- ✚ En ella, seleccionaremos *off* si se trata de un flujo monofásico, o uno de los tres modelos, según el caso a estudiar.

### ✓ **Ecuación de la energía**

Para el caso que nos ocupa consideramos la transmisión de calor despreciable.

### ✓ **Viscosidad**

- ✚ Click en *Define/Models/Viscous*, nos aparecerá la siguiente ventana:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

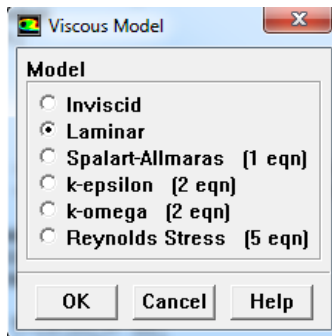


Figura 5.7 Menú multiphase

- Seleccionaremos la opción de flujo laminar, ya que se trata de un caso con un bajo número de Reynolds.

### 5.1.3 Definición de materiales

El siguiente paso es la definición de los materiales de trabajo, así como cuál será el principal y cuál secundario. Para nuestro caso, tendremos agua como flujo primario y aire como flujo secundario.

- **Define/Materials...** abrirá la ventana siguiente:

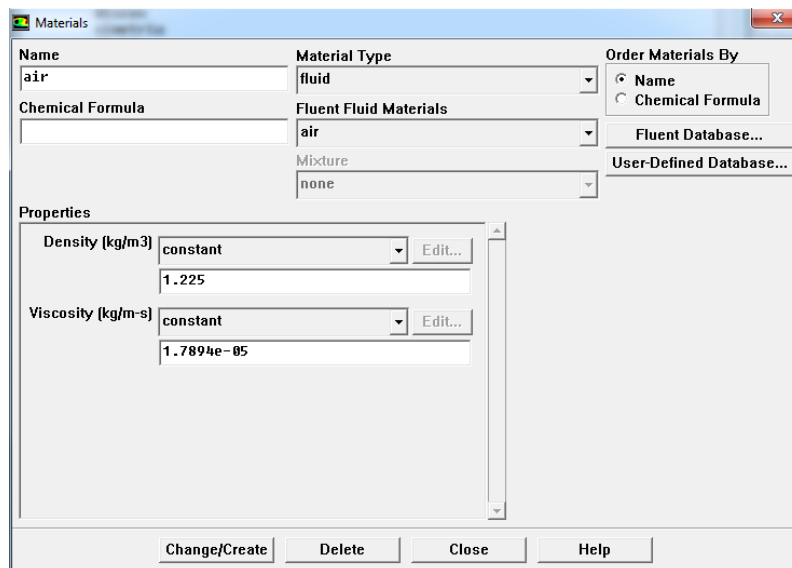


Figura 5.8 Menú creación materiales (aire)

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

- ✚ Optaremos por dejar los valores de densidad y viscosidad de defecto.
- ✚ Para usar también agua hacemos click en *Fluent Database*.

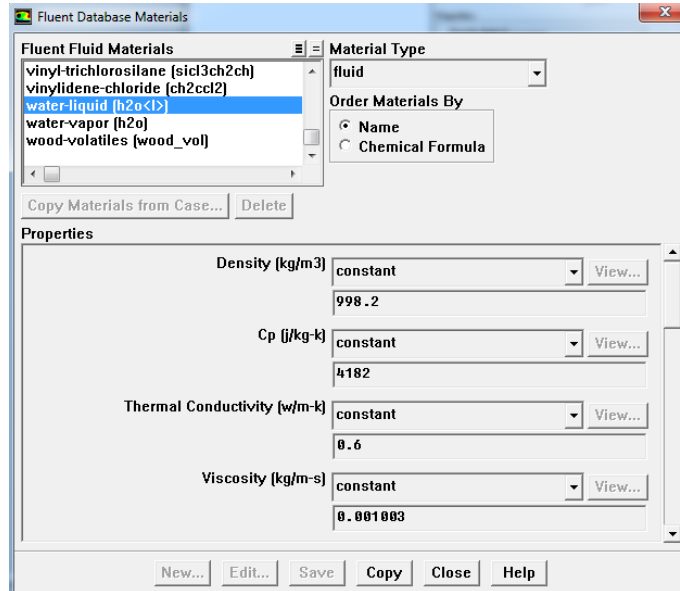


Figura 5.9 Menú creación materiales (agua)

- ✚ Igualmente, dejamos las opciones de propiedades por defecto. *Copy -> Create*
- ✚ Para definir las fases, click en *Define/Phases*:

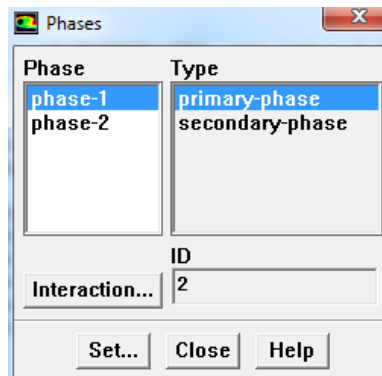


Figura 5.10 Menú selección de fases en los materiales

- ✚ Tras hacer click en *set*, seleccionamos *wáter-liquid* como *primary-phase*.
- ✚ Repetimos la operación para *secondary-phase*, seleccionando *air*.

### 5.1.4 Condiciones de operación

✚ **Define/Operating Conditions...** abrirá la ventana siguiente:

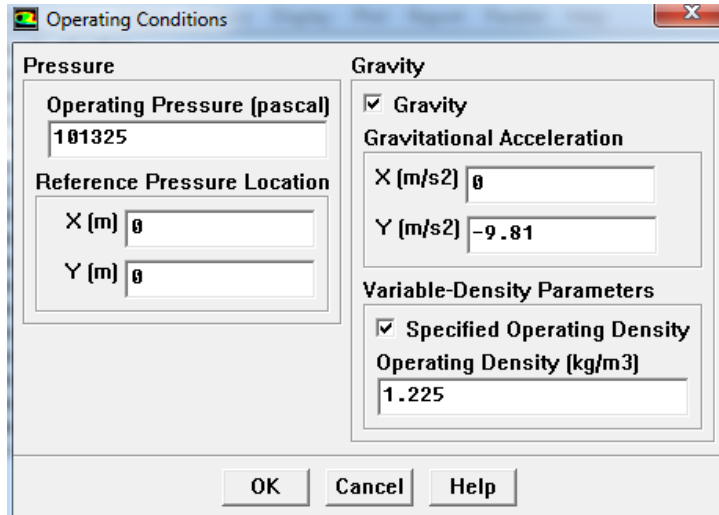


Figura 5.11 Menú de condiciones de operación

- ✚ Por tratarse del ascenso de dos fluidos en una columna vertical, el papel de la gravedad será importante y por tanto lo activaremos y definiremos este valor de gravedad negativo por ser una fuerza de en sentido contrario al del flujo.
- ✚ Activaremos también la densidad de operación específica pues se trata de fluidos incompresibles y de gran diferencia de densidad. Especificaremos ésta como la menor de los dos (en este caso el aire).



### 5.1.5 Condiciones de contorno

✚ **Define/Boundary Conditions...** abrirá la ventana siguiente:

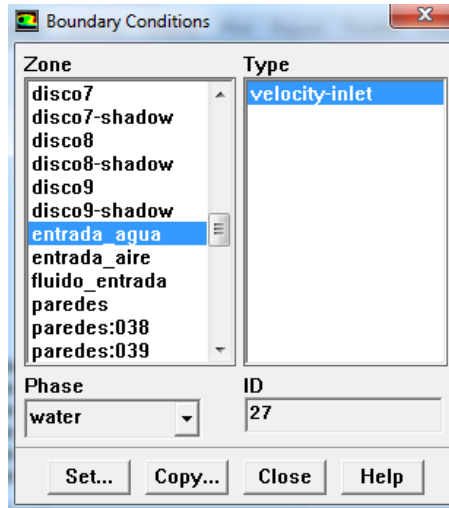


Figura 5.12 Menú condiciones de contorno

En los casos que vamos a estudiar, estableceremos condiciones de contorno para la presión en la salida, y velocidades de entrada de aire en los conductos y agua en la entrada inferior.

✚ Click *Salida->Pressure-outlet->Set*. Saldrá la siguiente ventana. Click *ok*.

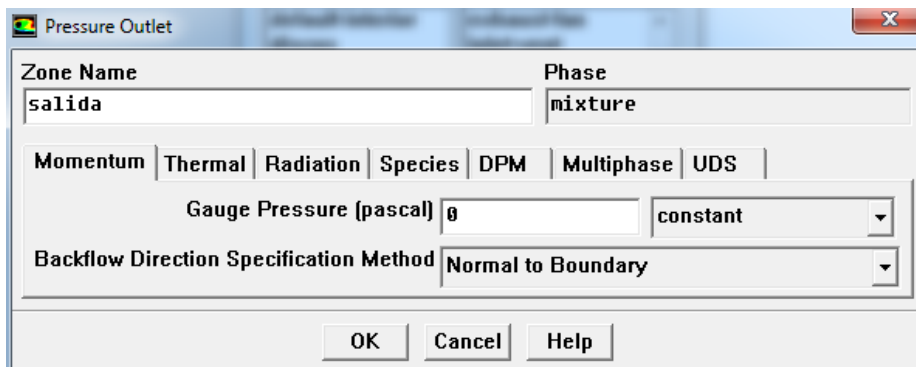


Figura 5.13 Menú condiciones de contorno salida de fluido

✚ Click *Entrada->velocity-inlet->water->Set*. Saldrá la siguiente ventana. En el caso que la velocidad del flujo sea constante, introducimos la velocidad de agua a la entrada del conducto. Click *ok*. –Para flujo oscilatorio, explicado en el siguiente apartado–

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

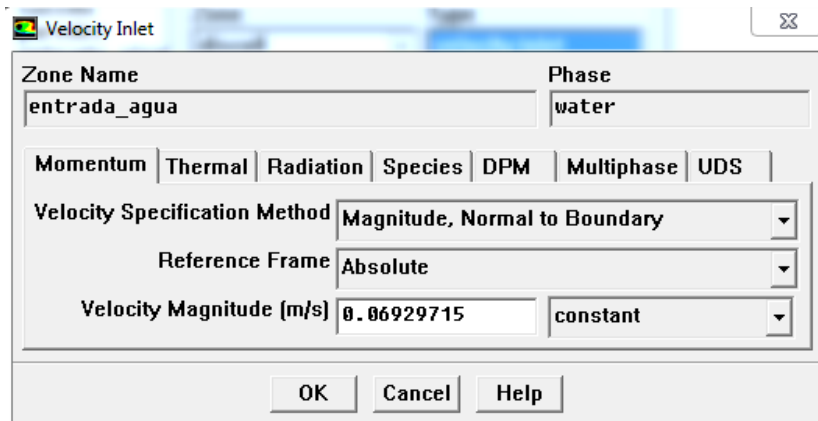


Figura 5.14 Menú condiciones de contorno entrada de agua

- Click *Entrada\_aire->velocity-inlet->water->Set*. Saldrá la siguiente ventana. Introducimos la velocidad de agua a la entrada del conducto. Click *ok*.

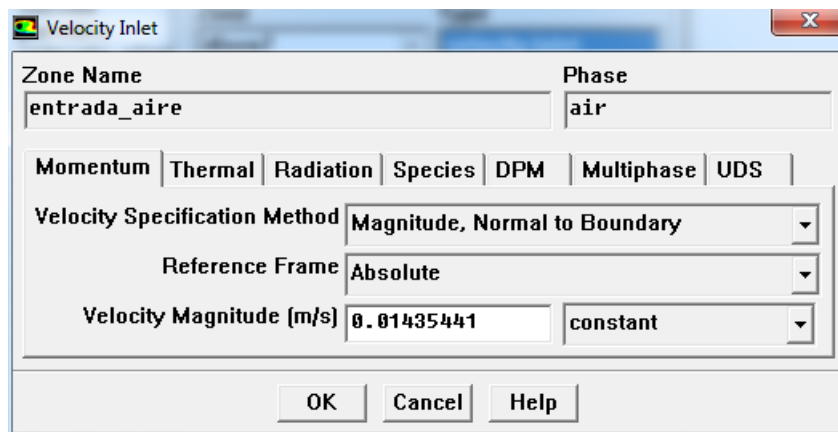


Figura 5.15 Menú condiciones de contorno entrada de aire

➤ **Condiciones de contorno con velocidad oscilatoria**

Para la inserción de la velocidad oscilatoria, tendremos que seguir otros pasos diferentes:

- En primer lugar, tendremos que crear un fichero de código con la definición de esta ecuación para poder llevarlo a Fluent. Un ejemplo de código es:

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

```
#include "udf.h"
DEFINE_PROFILE(q2f1x4, thread, position)
{
    face_t f;
    real t = CURRENT_TIME;
    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_PROFILE(f, thread, position) = 0.000666667+0.11780972*sin
        (6.2831853072*t);
    }
    end_f_loop(f, thread)
}
```

Figura 5.16 Líneas de código creación ecuación oscilatorio

- Para incluirla en Fluent: *Define/User-Defined/Functions/Interpreted*. Aparecerá la siguiente ventana, introducimos la ruta del archivo de código y pulsamos *Interpret*.

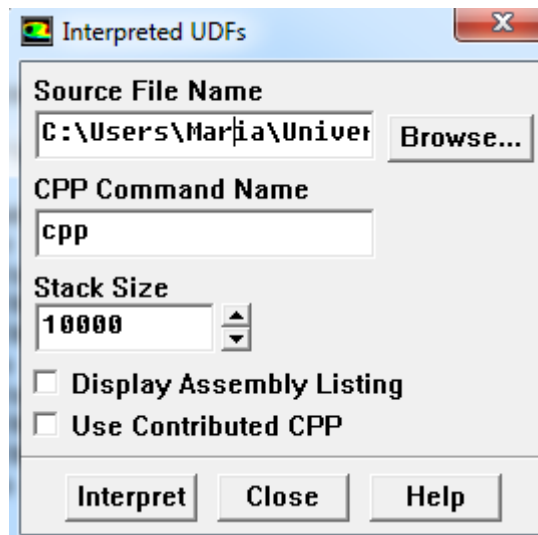


Figura 5.17 Menú Interpreted UDFs

- En el menú anterior de condiciones de contorno de entrada de agua, seleccionamos el nombre de la ecuación que hemos cargado. Click *ok*.

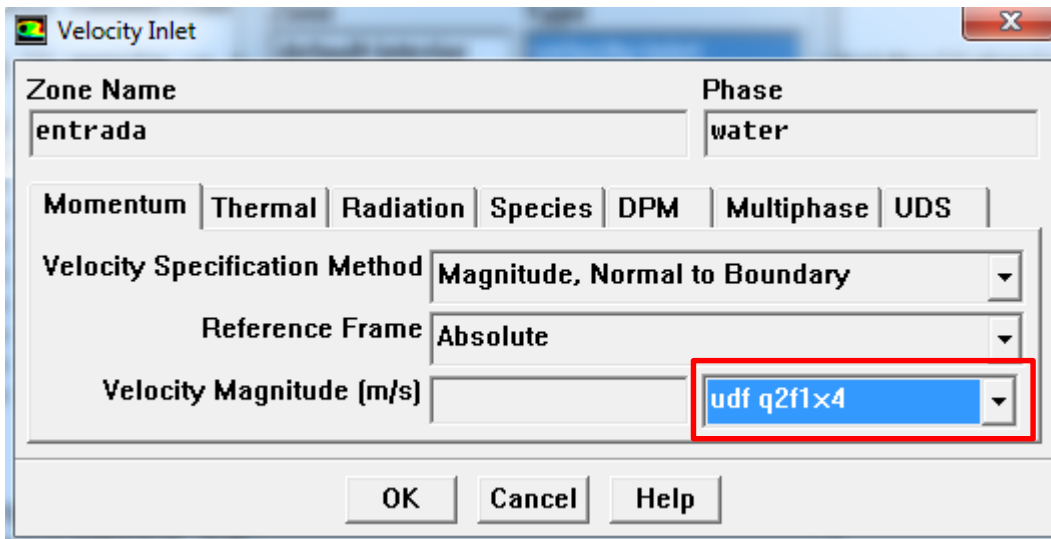


Figura 5.18 Selección UDF en velocidad de entrada de agua

## 5.1.6 Resolución y ajustes

### 5.1.6.1 Under-relaxation factors

Los parámetros por defecto de factores de subrelajación para todas las variables se ajustan a valores que son óptimas para el mayor número posible de casos. Estos valores son adecuados para muchos problemas, pero para algunos de ellos no lineales en particular es prudente reducir los factores de subrelajación inicialmente.

Es una buena práctica para comenzar un cálculo utilizando los factores de subrelajación por defecto. Si los residuos siguen aumentando después de los primeros 4 o 5 iteraciones, se debe reducir dichos factores.

En ocasiones, hacer cambios en los factores de subrelajación y tras comenzar el cálculo, encontrar que los residuos empiezan a aumentar. Esto a menudo resulta del aumento de los factores de subrelajación demasiado. Un enfoque prudente es guardar un archivo de datos antes de hacer cualquier cambio en estos factores, y hacer algunas iteraciones con el nuevo ajuste de parámetros. Típicamente, un aumento en los factores de subrelajación produce un ligero aumento en los residuos, pero estos incrementos suelen desaparecer a medida que la

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

solución progresiva. Si los residuos saltan en unos pocos órdenes de magnitud, se debe considerar detener el cálculo y volver al último archivo de datos guardado.

Para la mayoría de los flujos, los factores subrelajación por defecto por lo general no requieren modificación. Si se observa un comportamiento inestable o divergente, sin embargo, es necesario reducir los factores de subrelajación de la presión, el impulso,  $k$  y  $\epsilon$  de sus valores por defecto a aproximadamente 0,2, 0,5, 0,5, y 0,5. (Por lo general, no es necesario reducir la presión bajo-relajación para SIMPLEC.)

Para cambiar estos factores:

Click en *Solve->Controls->Solution*:

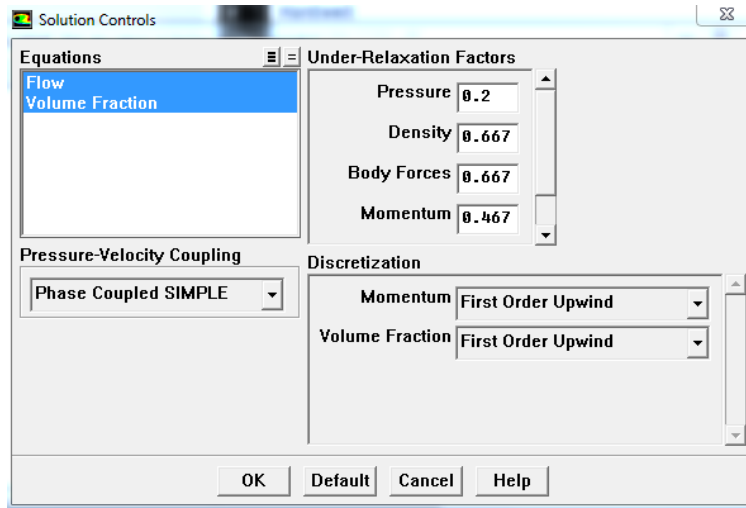


Figura 5.19 Menú ajuste under-relaxation factors

### 5.1.6.2 Inicialización

- Para inicializar el proceso abrimos la siguiente ventana haciendo click en *Solve->Initialize->Initialize*:

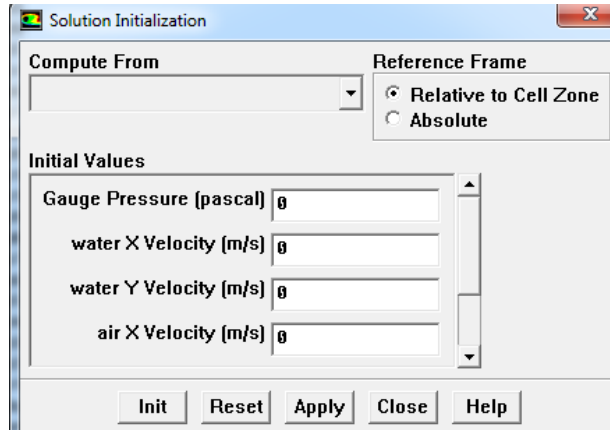


Figura 5.20 Menú inicialización

- Si queremos comenzar la iteración a partir de un valor concreto lo indicaremos en la casilla correspondiente, de lo contrario pulsaremos *Init*.

### 5.1.6.3 Monitorización de residuos

La mayoría de las ocasiones nos interesa observar cómo avanza el cálculo de los residuos con nuestras iteraciones. Para ello:

- Click en *Solve->Monitors->Residual*:

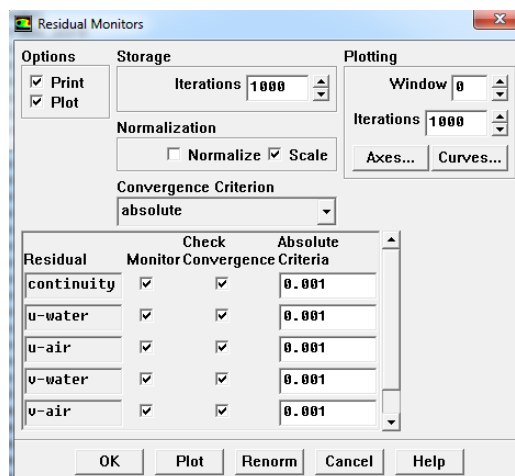


Figura 5.21 Menú ajuste de monitores de residuos

## Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

- ✚ En esta ventana, nos aseguramos que esté marcada la casilla *Plot*.
- ✚ Si queremos ajustar el criterio de convergencia y no dejar el que viene por defecto, lo haremos en la casilla correspondiente debajo de *Absolute Criteria*.
- ✚ Click *ok*.

### 5.1.6.4 Iteraciones

En este caso el procedimiento será diferente si estamos en estacionario o transitorio.

#### ✓ Estacionario

- ✚ Haciendo click en *Solve->Iterate*

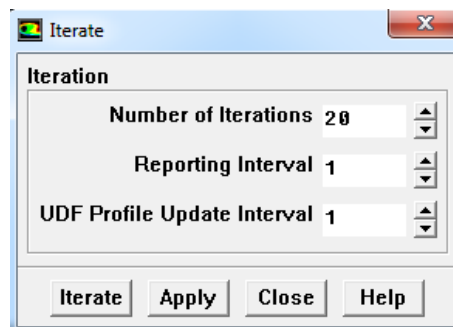


Figura 5.22 Menú iteración para estacionario

Ajustaremos aquí dos parámetros:

- ✚ *Number of iterations*. Cantidad de iteraciones de cálculos que queremos que realice Fluent (en función del reporte de residuos comprobaremos la fiabilidad del estacionario).
- ✚ *Reporting Interval*. Cada cuántas iteraciones devuelve un valor de cálculo.

#### ✓ Transitorio

- ✚ Haciendo click en *Solve->Iterate*

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

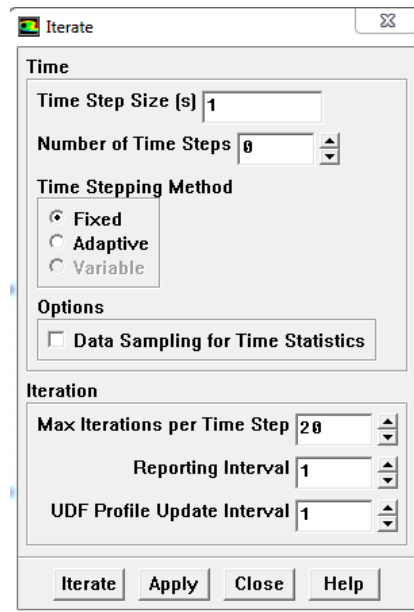


Figura 5.23 Menú iteración para transitorio

Aquí ajustaremos tres parámetros:

- ✚ *Time Step Size*. Paso de tiempo seleccionado para el cuál Fluent reporta el cálculo hecho.
- ✚ *Number of Time Steps*. Cantidad de pasos de tiempo que ordenamos a Fluent que calcule. Del producto de estos dos primeros parámetros resulta el tiempo total que ha calculado para la simulación.
- ✚ *Max Iterations per Time Step*. Iteraciones de cálculo que realiza por cada paso de tiempo.



## 5.2 Trayectoria de análisis en Fluent

### 5.2.1 Ascenso burbuja de aire en columna vertical

Comenzamos los análisis partiendo de un caso básico de ascensión de una burbuja de aire en el interior de una columna lisa vertical de agua. Todos estos casos los trataremos como transitorios, laminares y utilizando el método Volume of Fluid para la resolución. Recreamos, por tanto, diferentes escenas y evaluamos la evolución de nuestra burbuja para el mismo espacio de tiempo:

- Nos encontramos con una burbuja de aire aislada en el interior de nuestra columna de agua en la que no tenemos entrada de ningún fluido.
- En este caso, tendremos una entrada por la parte inferior de nuestra columna de aire y agua a partes iguales con una velocidad de 0.05m/s.
- En este caso, tendremos una entrada por la parte inferior de nuestra columna de aire y agua a partes iguales con una velocidad de 0.2m/s.
- Para este último caso refinamos la malla un 200% más para ver el efecto en la burbuja con las mismas condiciones del caso anterior: entrada por la parte inferior de la columna de aire y agua a partes iguales con una velocidad de 0.2m/s.

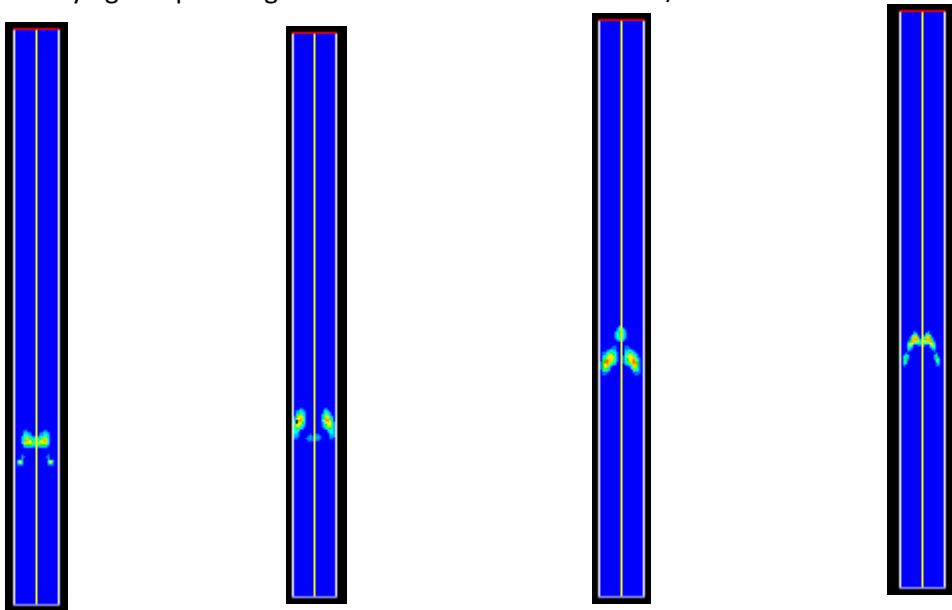


Figura 5.24 Distribución de las fases en ascenso de una burbuja de aire en columna de agua ( $t = 0.2s$ ). De izquierda a derecha: casos a, b, c y d.

## Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

Como vemos, los resultados obtenidos son acorde a los esperados: conforme aumentamos la velocidad del fluido en la entrada, más rápido ascenderá nuestra burbuja.

Si ahora estudiamos la evolución en el tiempo de estos mismos casos:

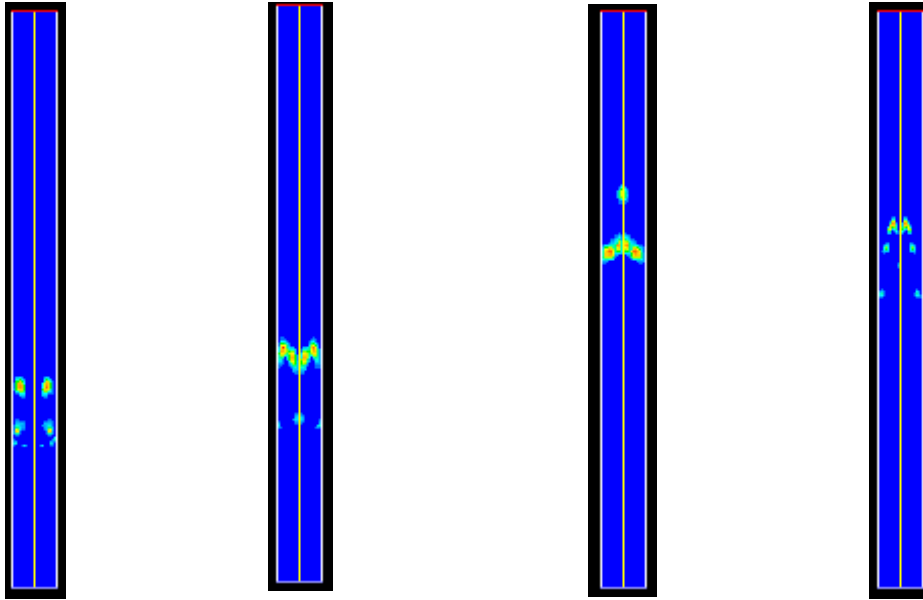


Figura 5.25 Distribución de las fases en ascenso de una burbuja de aire en columna de agua ( $t = 0.4s$ ). De izquierda a derecha: casos a, b, c y d.

Lo que también se adapta a nuestras suposiciones iniciales, puesto que la dispersión de la burbuja inicial de aire y el número de estas a medida que pasa el tiempo será mayor.

Respecto al cambio en el mallado para las mismas condiciones de simulación, podemos observar que la diferencia es considerable, por lo que concluimos que la malla elegida para los primeros casos es demasiado gruesa y para los siguientes será necesario realizar una más fina para poder obtener unos resultados más precisos.

## 5.2.2 Columna vertical con inyección lateral de aire

### 5.2.2.1 Presentación del caso

Pasadas las primeras simulaciones sencillas, continuamos evolucionando enfocándonos en el caso final de simulación del reactor: una columna vertical dotada con deflectores y agua en su interior y a la cuál le proporcionamos una entrada de aire y otra de agua. Además, y con el objetivo de obtener un mejor mezclado de ambas fases, buscaremos realizar las simulaciones con un flujo de agua oscilatorio.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

La primera geometría utilizada para la resolución del problema (Figura 5.26) constaba de dos entradas de aire laterales de diámetro 5 mm, y una entrada de agua en la sección inferior del tubo de diámetro 25mm.

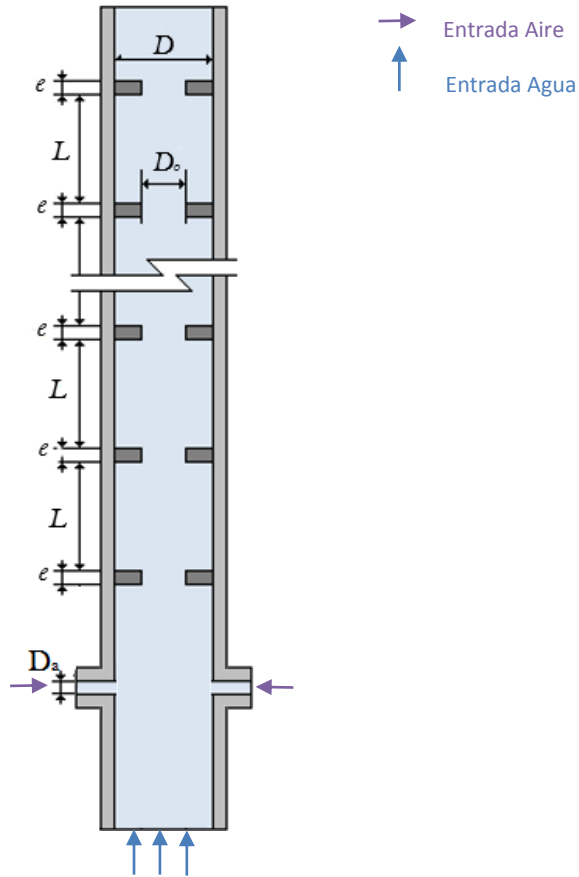
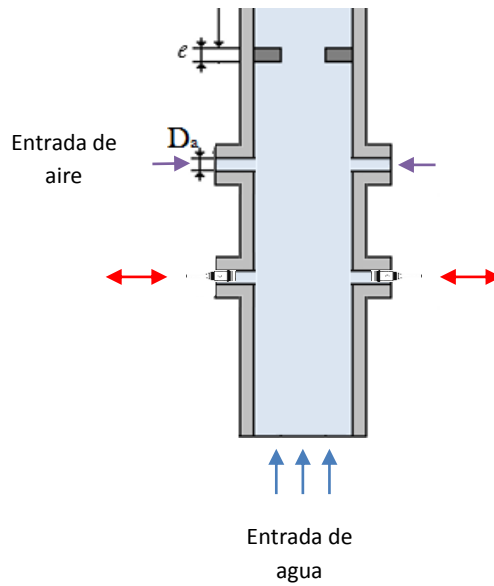


Figura 5.26 Primera geometría utilizada

➤ **Movimiento oscilatorio**

Para la elección del movimiento oscilatorio del flujo quisimos que se asemejara al efecto que podríamos tener con la subida y bajada de un pistón en la parte inferior, de manera que, cíclicamente, tuviéramos un sentido ascendente de inserción de flujo y otro descendente de retracción, intentando conseguir que al realizar esos avances y retrocesos tuviéramos un mejor mezclado. Para introducir esto en el programa, suponemos que el reactor está dotado de una entrada inferior de agua de caudal constante y unos pistones en los laterales con los que conseguiríamos una onda periódica senoidal a partir de su movimiento (figura 5.27).

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**



**Figura 5.27 Ejemplificación de movimiento oscilatorio**

Dicho movimiento sigue la ecuación:

$$V_{\text{agua}} = V_n + 2\pi f x_0 \text{sen}(2\pi f t) \quad (5.1)$$

En la entrada inferior de agua le asignamos un caudal de 1l/min y el caso lateral de aire constará del 15% del asignado para el agua (para cada abertura). Con esto, las velocidades de entrada de ambos fluidos quedarían:

- Velocidad entrada de agua:  $V_{n,\text{agua}} = 6.67 \cdot 10^{-4}$  m/s
- Velocidad entrada de aire:  $V_{\text{aire}} = 6.67 \cdot 10^{-4}$  m/s
  - $F = 1\text{Hz}$
  - $X_0 = 3D / 4 = 0.01875$

$$V_{\text{agua}} = 0.0006667 + 0.1178 \cdot \text{sen}(6.2832t)$$

(5.2)

**5.2.2.2 Método de resolución**

Siguiendo las instrucciones para la preparación de un caso explicadas anteriormente, configuramos el análisis con las siguientes características:

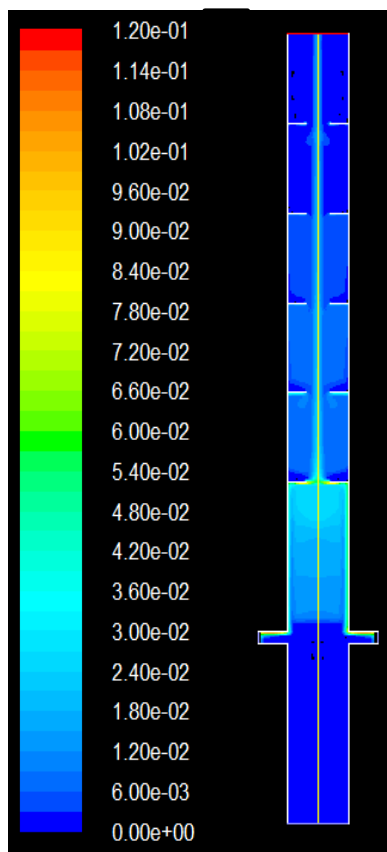
### Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

- **Solver:** *Pressure Based*, ya que nuestra simulación cuenta de velocidades de flujo muy bajas y ambos son incompresibles.
- **Space:** geometría preparada en 2D.
- **Tiempo:** *Steady*.
- **Modelo:** *Eulerian*, ya que tratamos flujo burbujeante en el que las fases se mezclan.
- **Viscosidad:** *Laminar*, debido al bajo número de Reynolds.
- **Diámetro de burbuja:** 0.0001

El resto de modelado es el descrito anteriormente.

#### 5.2.2.3 Resultados y problemas

✚ Comenzamos analizando la **distribución de las fases**, representada en la figura 5.28:



- > Podemos observar que el aire entra por los conductos laterales y asciende, en su mayoría, por la pared, no encontrando un mezclado óptimo.
- > Además, salta a la vista que la fracción de aire se concentra en el primer tanque antes de superar el primer deflector, siendo cada vez menor la distribución aunque nos encontremos en el caso estacionario. Esto nos lleva a analizar el balance de masas.

**Figura 5.28** Distribución de fases en columna vertical con inyección lateral de aire

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

✚ El **balance de masas** arroja el siguiente resultado:

water		(kg/s)
Mass Flow Rate		
entrada	0.0083224932	
gas_izq	-0	
salida	-0.0083026889	
<b>Net</b>	<b>1.9804235e-05</b>	
air		(kg/s)
Mass Flow Rate		
entrada	-0	
gas_izq	3.0625003e-06	
salida	-3.0652211e-06	
<b>Net</b>	<b>-2.7208183e-09</b>	

Figura 5.29 Balance de masas en columna vertical con inyección inferior de aire

- > Aunque no obtengamos una diferencia neta nula que sería el caso óptimo, para el agua obtendríamos un error del 0.24% y el aire de 0.089%.
- > Para el caso del aire, que es el que estábamos estudiando, vemos que aunque se quede en su gran mayoría en el primer tanque, la razón por la que no se distribuye en el resto no es que se quede estancado, si no que pasados los primeros deflectores asciende entre estos sin mezclado entre los tanques.

✚ **Vectores de velocidad de aire:**

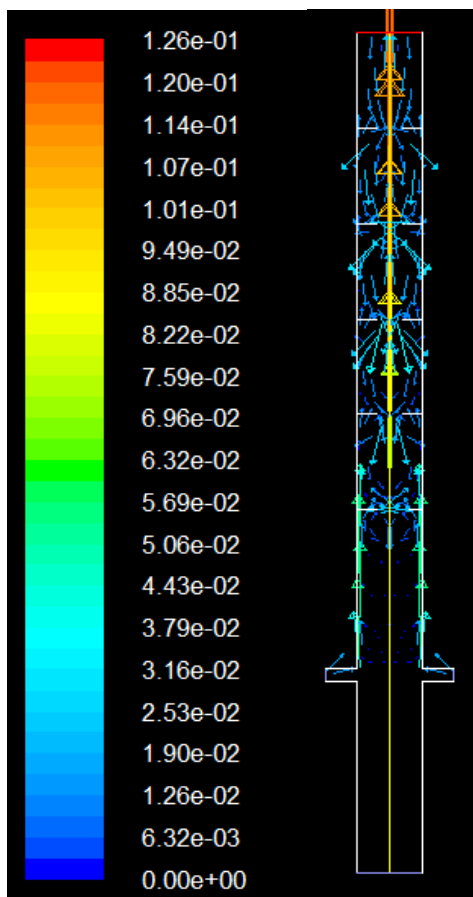


Figura 5.30 Vectores de velocidad de aire en columna vertical con inyección lateral de aire

- > Inicialmente, corroboramos lo que ya vimos analizando la distribución de fases: tras la inserción de aire, este asciende por las paredes hasta el primer par de deflectores y a partir de ahí asciende por la parte central en su gran mayoría, obteniendo una menor recirculación.
- > Comprobamos también, que las recirculaciones son en sentido descendente pero, acorde con los resultados anteriores, son de velocidad baja y poca fracción volumétrica de aire, obteniendo un mezclado bajo.

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Ante estos resultados, nos proponemos probar con otras estrategias de resolución hasta dar con la solución óptima, modificando parámetros, geometrías e iteraciones.

**5.2.3 Análisis con diferente mallado y diámetro de burbuja**

La primera modificación propuesta es probar con un mallado aún más fino que el anterior con el objetivo de comprobar si la acumulación de fracción de aire en los deflectores se debe a un tamaño de malla excesivo. El nuevo mallado también viene elegido por los resultados anteriores: al comprobar que teníamos más densidad de flujo de aire en los conductos laterales y las paredes y por tanto donde más nos interesa la precisión del análisis, dividiremos estas celdas para una mejor resolución. Así, el cambio de malla es el siguiente:

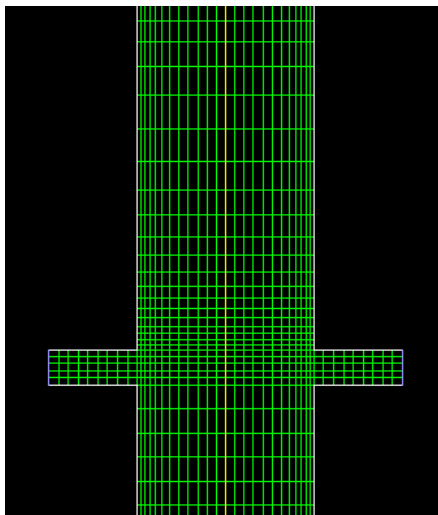


Figura 5.31 Mallado inicial, en columna vertical con inyección de aire lateral

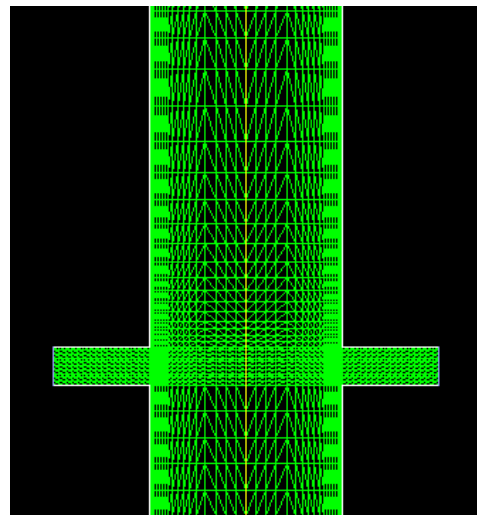
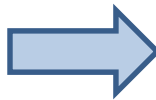


Figura 5.32 Mallado modificado, en columna vertical con inyección de aire lateral

Además, considerando que los diámetros serían más grandes realmente, decidimos simular el caso con un diámetro de 0.001m.

**5.2.3.1 Resultados y problemas**

Los resultados de esta simulación no eran los esperados, pues como podemos observar en las figura 5.33 el agua se queda completamente estancada en los conductos laterales de entrada de aire. Además, observando el balance de masas (figura 5.34), no tenemos salida de aire y la de agua obtenemos un resultado negativo.

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

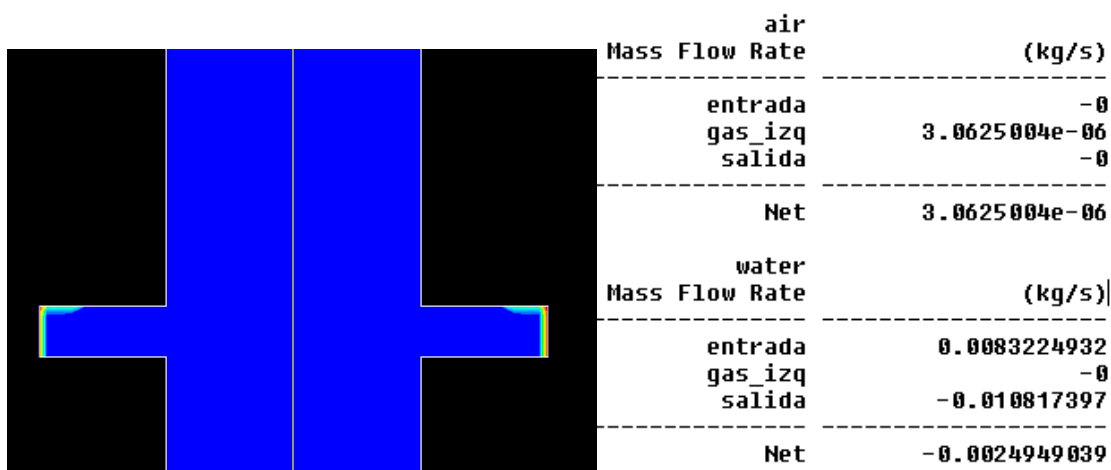


Figura 5.33 Representación de la fracción volumétrica de aire para menor diámetro de burbuja y mallado más fino

Figura 5.34 Balance de masas de aire y agua para menor diámetro de burbuja y mallado más fino

Clasificamos esta simulación como inviable y seguimos modelando los casos. No obstante, la malla más refinada y un diámetro de burbuja de 1 milímetro lo consideramos apto para nuestro problema aunque los resultados no sean los esperados, así pues los adoptamos para las siguientes simulaciones.

➤ **Modificaciones**

El propósito siguiente es descubrir qué ocasiona que los resultados no sean correctos y para ello simplificaremos el problema al máximo y desglosaremos cada una para simularlas por separado:

- Anulamos todas las entradas de flujo, dejando solamente la inferior de agua. La simulación es correcta.
- Probamos la opción anterior introduciendo agua por el conducto lateral. Simulación correcta.
- Si cambiamos a modelo monofásico y simulamos con aire los dos casos anteriores volvemos a obtener los perfiles parabólicos y recirculaciones esperados.
- Sabiendo que el modelo monofásico es apto tanto para agua como aire, el siguiente paso es recrear una situación parecida a la que queremos obtener: comenzamos simulando con agua y cuando alcanzamos perfil estacionario introducimos aire por el conducto lateral, pero el resultado diverge.
  - Una malla más gruesa ayuda a la convergencia, pero los resultados pierden precisión. Reproducimos el problema con la malla primera más gruesa y las



### Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

mismas condiciones (diámetro de burbuja 0.001m., Eulerian, transitorio, laminar) y la solución converge. El cambio de malla a una más fina no es apto para el programa, por lo que descartamos esta idea por resultar más conveniente la malla fina.

- El uso del modelo *Mixture*, que a pesar de ser un poco menos preciso que *Eulerian*, también es apto para este tipo de flujos y tiene una mejor convergencia, con el objetivo de una vez obtenida volver a simular con *Eulerian*, pero a pesar de tardar más tiempo en alcanzarla, la solución diverge.
- Optamos por realizar las siguientes simulaciones con unos factores de subrelajación más bajos.

#### 5.2.4 Disminución factores de sub-relajación y modificación geométrica

---

Uno de los problemas más comunes que hemos observado en las anteriores simulaciones era que el aire se quedaba estancado en los conductos de entrada laterales y, o bien el tiempo de residencia en estos conductos hasta que empezaba a circular el flujo por la columna vertical era muy alto, o bien aun así teníamos un porcentaje muy alto de aire en ellos, siendo poca esta circulación por la columna.

Es por ello por lo que el siguiente paso probamos una nueva modificación de la geometría en la cual inyectaremos el aire directamente a la columna vertical, sin tener los conductos laterales mediando entre ambos:

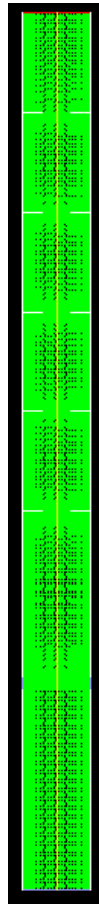


Figura 5.35 Representación de la fracción volumétrica de aire para menor diámetro de burbuja y mallado más fino

#### 5.2.4.1 Configuraciones y resultados

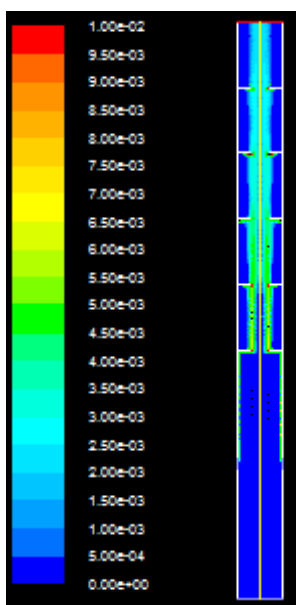
##### ➤ Exclusiva modificación de la geometría

Para esta primera simulación, probaremos como como hemos modelado los casos anteriores pero con la geometría explicada en el apartado anterior.

Al realizar esta simulación en tiempo estacionario no llegamos a ninguna solución pues obtenemos divergencia en los resultados, así que optamos por realizarla en transitorio con un tiempo lo suficiente elevado para encontrar una solución lo más estacionaria posible (dentro de nuestras limitaciones de procesamiento de datos en el ordenador). Preparamos esta simulación, por tanto, para un máximo de 35 segundos y paso de tiempo 0.01.

La distribución de la fase aire que nos encontramos es la siguiente:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio



> El resultado que encontramos es un flujo de aire pegado a la pared por completo hasta llegar al primer diafragma.

Figura 5.36 Representación diagrama de fases con modificación de geometría

El balance de masas arroja el siguiente resultado:

mixture	
Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada	0.0083224931
gizq	3.0625003e-06
salida	-0.0094919969
Net	-0.0011664413
-----	
water	
Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada	0.0083224931
gizq	-0
salida	-0.0094903681
Net	-0.001167875
-----	
air	
Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada	-0
gizq	3.0625003e-06
salida	-1.6288251e-06
Net	1.4336752e-06

> El error que obtenemos es bastante alto, de la misma orden de magnitud que el flujo de paso en la entrada y salida.

> Vamos a probar bajando los factores de sub-relajación para ver si conseguimos una mejor aproximación del resultado.

Figura 5.37 Balance de masas de fases con modificación de geometría

➤ **Modificación de geometría y factores de sub-relajación**

Para este caso, realizaremos la simulación bajando a 2/3 de su valor inicial predeterminado los factores de sub-relajación. Quedarían como sigue:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

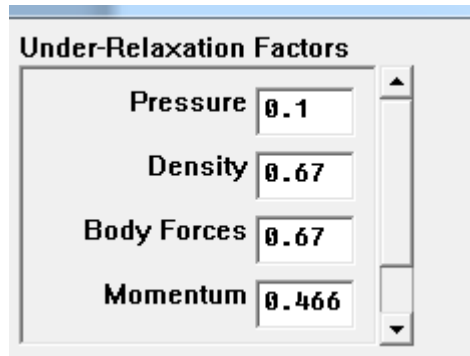


Figura 5.38 Factores de sub-relajación más bajos para simulación con modificación geométrica

Inicialmente probaremos a realizar la simulación en *modo estacionario* con el fin de comprobar si disminuyendo estos factores, conseguimos encontrar así solución.

La distribución de la fase aire y el balance de masas que nos encontramos son los siguientes:

mixture		
Mass Flow Rate		(kg/s)
entrada	0.0083224931	
gizq	3.0625003e-06	
salida	-0.010825398	
Net	-0.0024998428	
water		
Mass Flow Rate		(kg/s)
entrada	0.0083224931	
gizq	-0	
salida	-0.010825398	
Net	-0.0025029053	
air		
Mass Flow Rate		(kg/s)
entrada	-0	
gizq	3.0625003e-06	
salida	-0	
Net	3.0625003e-06	

Figura 5.39 Balance de masas y representación de fase aire en modo estacionario con modificación de geometría

- > Como podemos comprobar, el aire ni siquiera pasa del primer tanque y los errores son inasumibles, por lo que probamos con modo transitorio.

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

Para el *modo transitorio* obtenemos los siguientes resultados:

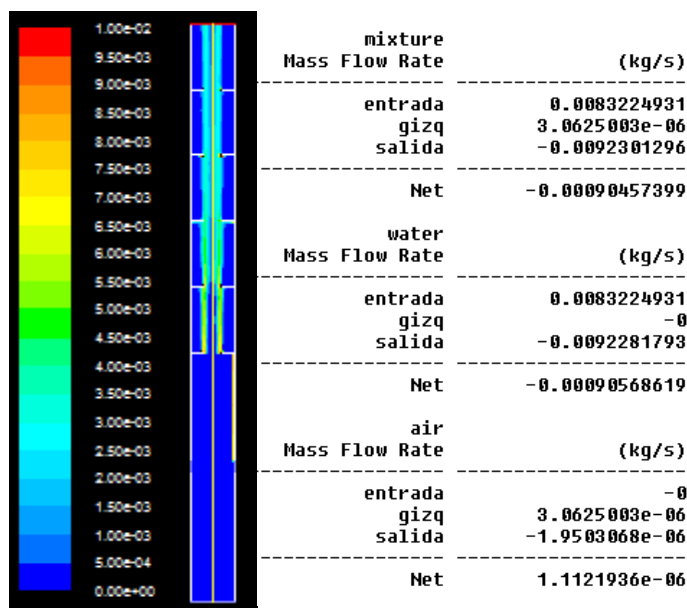


Figura 5.40 Balance de masas y representación de fase aire en modo transitorio con modificación de geometría

En este caso volvemos a encontrar una solución similar a la anterior transitoria, con la salvedad que esta vez el error flujos entrada-salida de agua es menor.

### 5.2.4.2 Conclusiones

Como conclusión del estudio de estos casos obtenemos que será más conveniente realizar la simulación en modo transitorio con un tiempo suficientemente alto para que la solución sea estable en el tiempo y que, para estos casos, unos factores de sub-relajación más bajos significan una mejor obtención de convergencia y, por tanto, resultados más exactos. Las siguientes simulaciones irán encaminadas en buscar una solución que evite que el aire circule por la pared tras ser insertado en la columna.

# **Capítulo 6.**

**Caso final.**

**Presentación,**

**análisis y**

**resultados**

## 6.1 Preparación del caso final

### 6.1.1 Inyección inferior de aire

La siguiente propuesta para conseguir una mejor distribución de las fases es variar la entrada de aire: vamos a probar introduciendo este flujo por la zona inferior de la columna vertical de tal manera que tengamos dos zonas de entrada de flujo de manera concéntrica: por la zona exterior circulará agua y por la interior, aire. La entrada de aire, entonces, tendrá un paso de 10.5mm y la de agua, en total, 14.5mm.

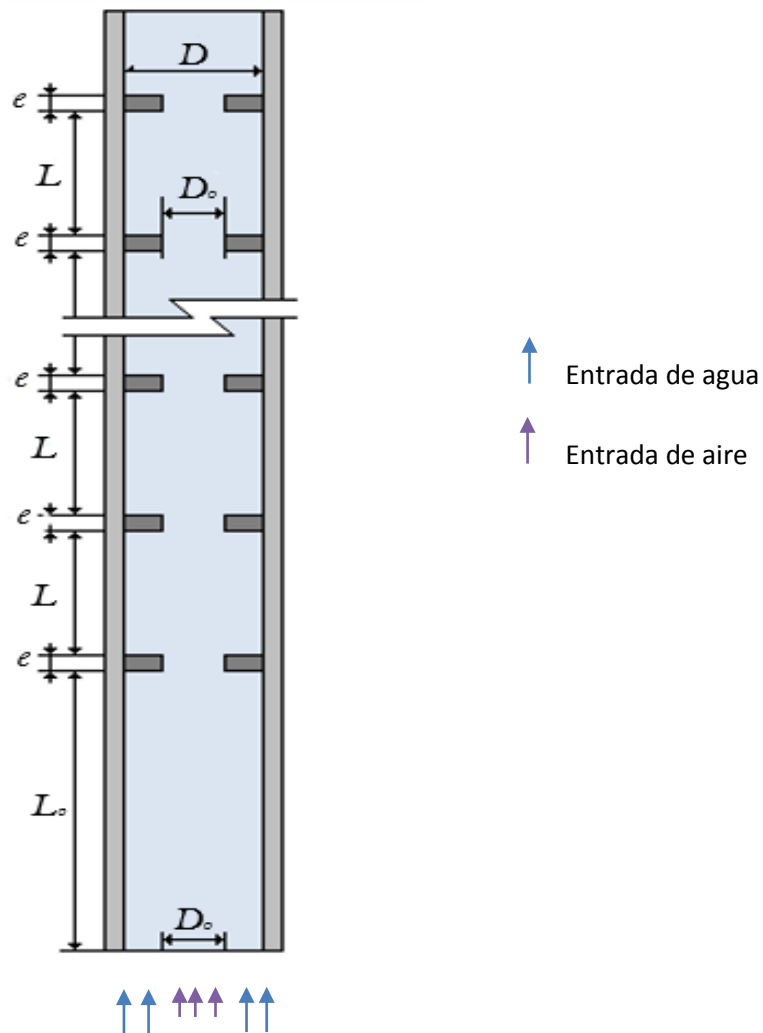


Figura 6.1 Nueva columna con modificación geometría final

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

➤ **Movimiento oscilatorio**

Puesto que el paso del flujo de aire y agua es diferente, también cambiará la ecuación del movimiento oscilatorio correspondiente a este caso.

Dicho movimiento sigue la ecuación:

$$V_{\text{agua}} = V_n + 2\pi f x_0 \text{sen}(2\pi f t) \quad (6.1)$$

En la entrada inferior de agua le asignamos un caudal de 1l/min y el caso lateral de aire constará del 15% del asignado para el agua (para cada abertura). Con esto, las velocidades de entrada de ambos fluidos quedarían:

- Velocidad entrada de agua:  $V_{n,\text{agua}} = 0.001149 \text{ m/s}$
- Velocidad entrada de aire:  $V_{\text{aire}} = 0.000238 \text{ m/s}$ 
  - $F = 1\text{Hz}$
  - $X_0 = 3D / 4 = 0.010875$

$$V_{\text{agua}} = 0.001149 + 0.06833 * \text{sen}(6.2832t) \quad (6.2)$$

**6.1.1.1 Método de resolución**

Siguiendo las instrucciones para la preparación de un caso explicadas anteriormente, configuramos el análisis con las siguientes características:

- **Solver:** *Pressure Based*, ya que nuestra simulación cuenta de velocidades de flujo muy bajas y ambos son incompresibles.
- **Space:** geometría preparada en 2D.
- **Tiempo:** *Unsteady*, puesto que resolviendo con estacionario hemos comprobado que la solución diverge.
- **Modelo:** *Eulerian*, ya que tratamos flujo burbujeante en el que las fases se mezclan.
- **Viscosidad:** *Laminar*, debido al bajo número de Reynolds.
- **Diámetro de burbuja:** 0.001m



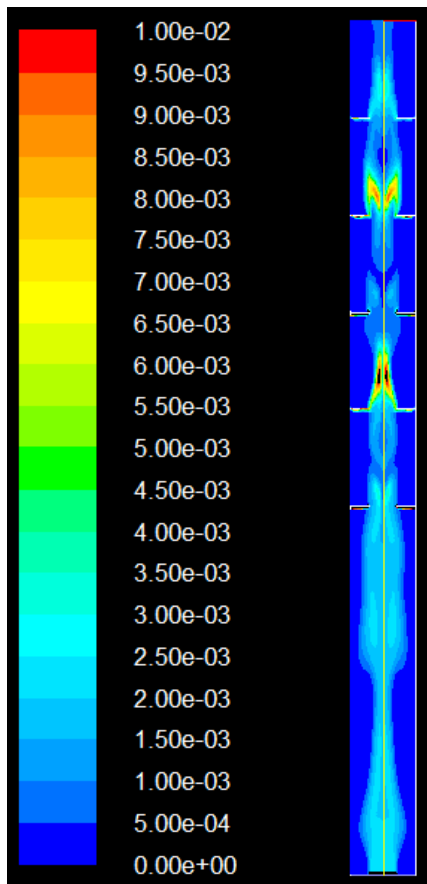
### Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

- Para la resolución, realizaremos primero una simulación de los 100 primeros segundos con velocidad constante de aire y agua para conseguir estabilidad en la columna y, posteriormente, introduciremos el movimiento oscilatorio del agua.

El resto de modelado es el descrito en el capítulo anterior.

#### 6.1.1.2 Resultados

✚ Comenzamos analizando la **distribución de las fases**, representada en la figura 6.2:



- > Podemos comprobar la diferencia entre esta distribución de fases y la anterior, solucionando los problemas que teníamos anteriormente.
- > Aquí, la fase aire se distribuye por toda la columna: no se queda estancada en el primer tanque ni circula por la pared en su mayoría.
- > Además, por no tener los conductos laterales, tampoco tendremos la residencia y acumulación de aire que encontrábamos anteriormente.
- > Vemos que hay un estancamiento de aire en los deflectores.

Figura 6.2 Análisis de fase aire en columna vertical con inyección inferior de aire

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

✚ El **balance de masas** arroja el siguiente resultado:

agua		(kg/s)
Mass Flow Rate		
entrada_agua	0.0083278445	
entrada_aire	-0	
salida	-0.0089174669	
Net	-0.00058962238	

aire		(kg/s)
Mass Flow Rate		
entrada_agua	-0	
entrada_aire	1.5312807e-06	
salida	-8.1824066e-07	
Net	7.1304e-07	

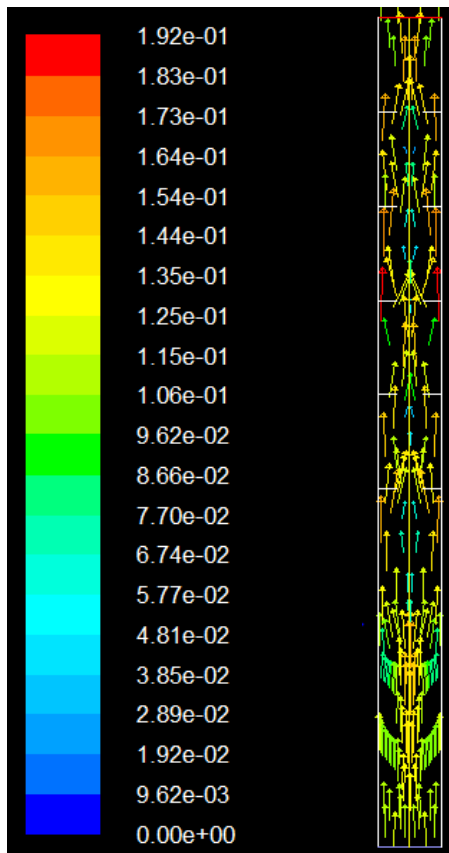
  

mixture		(kg/s)
Mass Flow Rate		
entrada_agua	0.0083278445	
entrada_aire	1.5312807e-06	
salida	-0.0089182851	
Net	-0.00058890934	

> Tenemos un error total entre los dos fluidos del 7%. No es un resultado óptimo y consideraremos realizar modificaciones en la simulación.

Figura 6.3 Balance de masas en columna vertical con inyección inferior de aire

✚ **Vectores de velocidad de aire y agua:**

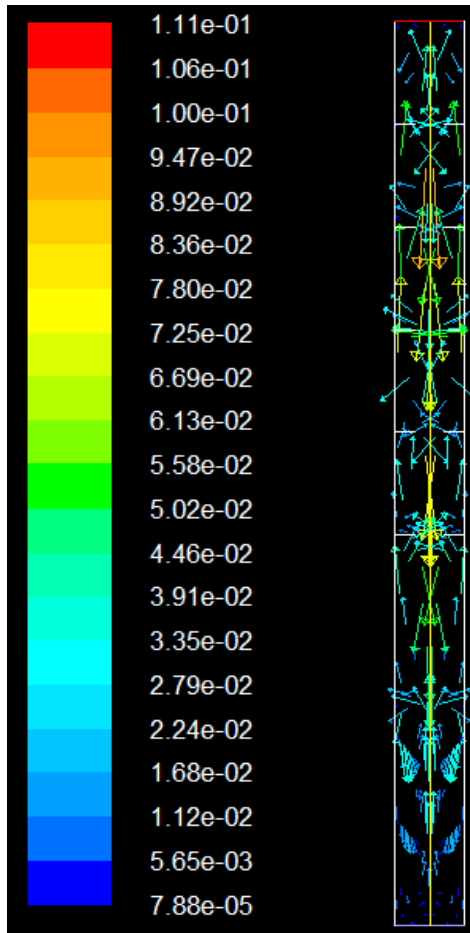


> Corroborando lo obtenido en el diagrama de fases, observamos una distribución más homogénea de la fase aire.

> El incremento de velocidad a medida que nos alejamos de la zona central se debe al ascenso del agua por la zona concéntrica con una velocidad mayor.

Figura 6.4 Vectores de velocidad de aire en vertical con inyección inferior de aire

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**



> El análisis del caso se realiza para tiempo 110s, con los últimos 10s con velocidad de agua oscilatoria. Para 10s, la velocidad del oscilatorio será nula, por lo que solamente tendremos la componente de la velocidad neta.

> En la figura podemos observar que el agua asciende por la parte central junto al aire, mientras que por los laterales existe una recirculación propia de este tipo de flujos oscilatorios.

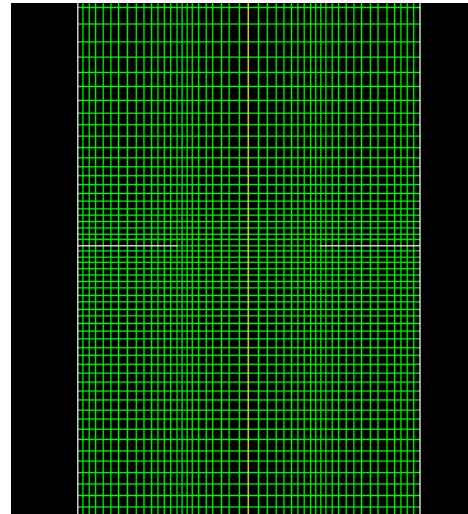
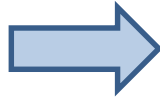
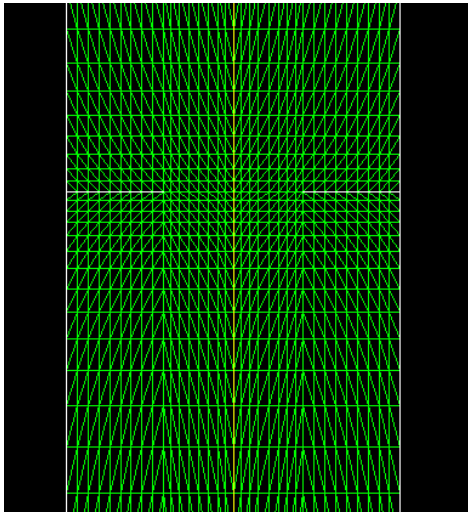
Figura 6.5 Vectores de velocidad de agua en vertical con inyección inferior de aire

Ante estos resultados y con objeto de mejorar el error en el balance de masas y comprobar si el estancamiento de aire en los deflectores viene dado por una malla demasiado gruesa, realizaremos el siguiente caso con un mallado más fino.

### 6.1.2 Modificación del mallado y tanques

Para esta nueva simulación, el caso se analizará de la misma manera y usando la misma metodología, pero preparando un mallado aún más fino con el objetivo de mejorar la precisión de los resultados finales. Así pues, el cambio de malla es el siguiente:

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**



**Figura 6.6** Malla inicial, en columna vertical con inyección inferior de aire

**Figura 6.7** Malla modificado, en columna vertical con inyección inferior de aire

Además, añadiremos un mayor número de tanques, lo que nos ayudará a que los fluidos y la solución se estandaricen y no obtengamos un estado transitorio. El número de tanques, por tanto, ascenderá a 10.

La simulación tendrá la misma metodología que la anterior, y la realizaremos para un tiempo de 100s con velocidad constante y posteriormente añadiremos movimiento oscilatorio al agua.

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

6.1.2.1 Resultados

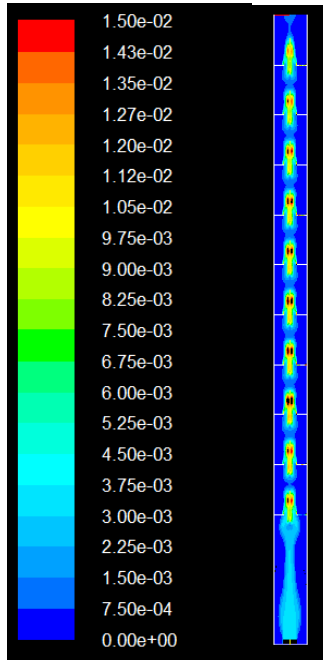


Figura 6.8 Representación de la fracción volumétrica de aire para mallado más fino y mayor nº de tanques

mixture	
Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada_agua	0.0083270663
entrada_aire	1.5312486e-06
salida	-0.0089747634
Net	-0.00064616586
water	
Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada_agua	0.0083270663
entrada_aire	-0
salida	-0.0089740203
Net	-0.00064695397
air	
Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada_agua	-0
entrada_aire	1.5312486e-06
salida	-7.4313616e-07
Net	7.8811241e-07

Figura 6.9 Balance de masas de aire y agua para mallado más fino y mayor nº de tanques

- > Para el caso de la fracción de aire, vemos un patrón mucho más repetido que antes y con un mezclado muy parecido. Además, ha desaparecido el estancamiento tan acusado en los deflectores, lo que indica que, aunque siga habiendo un aumento de la concentración de aire en esta zona, el grosor anterior de la malla acusaba este hecho por tener menos precisión en los resultados.
- > Del balance de masas, volvemos a obtener un error total del fluido de un 7%. Durante las siguientes simulaciones iremos comprobando si varía con los diferentes parámetros o si se mantiene.

## 6.2 Batería de simulaciones

### 6.2.1 Casos a estudiar

Tanto el número de Strouhal como el Reynolds oscilatorio dependen de la amplitud de la oscilación producida y este último también de su frecuencia. De esta manera, definiendo los números  $Re_n$ ,  $Re_o$  y  $St$  quedarían definidas las condiciones de operación del reactor. Pero también al contrario: si fijamos  $Re_n$ ,  $x_o$  y  $f$  quedarán definidos los otros dos números adimensionales  $Re_o$  y  $St$ . Esta última opción es con la que trabajaremos en nuestras simulaciones. Concretamente, de entre todas las combinaciones posibles hemos elegido tres números de Reynolds netos y a partir de ahí desarrollamos diferentes simulaciones cambiando las condiciones de operación del reactor ( $x_o$  y  $f$ ).

La ecuación de la velocidad que regirá nuestro movimiento oscilatorio será:

$$v = v_{entrada} + 2\pi x_o \text{sen}(2\pi ft)$$

Para la realización de nuestro ensayo, partimos de tres situaciones con tres números de Reynolds netos diferentes y que nos permitirán obtener velocidades de entrada de agua distintas, si consideramos las simulaciones realizadas en dos dimensiones, como se indica:

$$V_n = \frac{R_n \mu}{\rho D} \quad Q_{neta} = V_n * D \quad V_{entrada} = \frac{Q_{entrada}}{D_{agua}}$$

Por continuidad,  $Q_{neta} = Q_{entrada}$

Entonces,  $V_{entrada} = \frac{R_n \mu}{\rho D_{agua}}$

donde  $D_{agua}$  (diámetro paso entrada de agua) = 0.0145m y  $D$  (diámetro total reactor) = 0.025m.

Además, el caudal de aire definido en las condiciones del problema es el 15% del caudal de agua.

$$Q_{aire} = 0.15 Q_{entrada} \quad Q_{aire} = 0.15 * \frac{R_n \mu}{\rho}$$

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Entonces, 
$$V_{aire} = 0.15 * \frac{R_n \mu}{\rho D_0}$$

Donde  $D_0 = 0.0105\text{m}$  (diámetro de paso de aire)

Para cada uno de estos casos obtendremos, entonces, las siguientes magnitudes:

<b>Re<sub>neto</sub></b>	10	35	100
<b>v<sub>neta</sub> (m/s)</b>	0,00040192	0,00140673	0,00401923
<b>Q<sub>entrada</sub> (m<sup>3</sup>/s)</b>	1,0048E-05	3,5168E-05	0,00010048
<b>V<sub>entrada</sub> (m/s)</b>	0,00069297	0,0024254	0,00692971
<b>V<sub>aire</sub> (m/s)</b>	0,00014354	0,0005024	0,00143544

Tabla 6.1 Caudales y velocidades de entrada de las distintas simulaciones

Teniendo en cuenta que el diámetro de nuestro conducto era  $D = 25\text{mm}$ , probaremos con tres amplitudes de oscilación diferentes, a los que le corresponderá un número de Strouhal

			<b>Strouhal</b>
<b>x<sub>1</sub> (mm)</b>	D/3	8,33	0,2387
<b>x<sub>2</sub> (mm)</b>	2D/3	16,67	0,1194
<b>x<sub>3</sub> (mm)</b>	D	25	0,0796

Tabla 6.2 Combinaciones de amplitudes de oscilación y números de Strouhal resultantes

Y para cada uno de estos valores, probaremos con tres frecuencias distintas: 0.5Hz, 1Hz y 2Hz.

		<b>Re<sub>osc</sub></b>		
<b>x<sub>0</sub> (mm)</b>	<b>F (Hz)</b>	<b>0,5</b>	<b>1</b>	<b>2</b>
<b>8,33</b>		651,37	1302,73	2605,47
<b>16,67</b>		1302,73	2605,47	5210,93
<b>25</b>		1954,10	3908,20	7816,40

Tabla 6.3 Combinaciones de frecuencias y amplitudes de oscilación y números de Reynolds oscilatorios resultantes

Todos estos valores y las funciones de velocidad finalmente adoptadas quedan resumidos en la siguiente tabla:

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Re <sub>n</sub>	x <sub>0</sub>	St	f	Re <sub>osc</sub>	Funciones de velocidad
10	8,33	0,23873241	0,5	651,366273	$v_n = 0,0006929715 + 0,0261799387799149 \cdot \text{sen}(3,14159265t)$
			1	1302,73255	$v_n = 0,0006929715 + 0,0523598775598299 \cdot \text{sen}(6,28318531t)$
			2	2605,46509	$v_n = 0,0006929715 + 0,10471975511966 \cdot \text{sen}(12,5663706t)$
	16,67	0,119	0,5	1302,73255	$v_n = 0,0006929715 + 0,0523598775598299 \cdot \text{sen}(3,14159265t)$
			1	2605,46509	$v_n = 0,0006929715 + 0,10471975511966 \cdot \text{sen}(6,28318531t)$
			2	5210,93019	$v_n = 0,0006929715 + 0,20943951023932 \cdot \text{sen}(12,5663706t)$
	25	0,08	0,5	1954,09882	$v_n = 0,0006929715 + 0,0785398163397448 \cdot \text{sen}(3,14159265t)$
			1	3908,19764	$v_n = 0,0006929715 + 0,15707963267949 \cdot \text{sen}(6,28318531t)$
			2	7816,39528	$v_n = 0,0006929715 + 0,314159265358979 \cdot \text{sen}(12,5663706t)$
35	8,33	0,23873241	0,5	651,366273	$v_n = 0,0024254002 + 0,0261799387799149 \cdot \text{sen}(3,14159265t)$
			1	1302,73255	$v_n = 0,0024254002 + 0,0523598776 \cdot \text{sen}(6,28318531t)$
			2	2605,46509	$v_n = 0,0024254002 + 0,10471975511966 \cdot \text{sen}(12,5663706t)$
	16,67	0,119	0,5	1302,73255	$v_n = 0,0024254002 + 0,0523598775598299 \cdot \text{sen}(3,14159265t)$
			1	2605,46509	$v_n = 0,0024254002 + 0,10471975511966 \cdot \text{sen}(6,28318531t)$
			2	5210,93019	$v_n = 0,0024254002 + 0,20943951023932 \cdot \text{sen}(12,5663706t)$
	25	0,08	0,5	1954,09882	$v_n = 0,0024254002 + 0,0785398163397448 \cdot \text{sen}(3,14159265t)$
			1	3908,19764	$v_n = 0,0024254002 + 0,157079633 \cdot \text{sen}(6,28318531t)$
			2	7816,39528	$v_n = 0,0024254002 + 0,314159265358979 \cdot \text{sen}(12,5663706t)$
100	8,33	0,23873241	0,5	651,366273	$v_n = 0,00692971487 + 0,0261799387799149 \cdot \text{sen}(3,14159265t)$
			1	1302,73255	$v_n = 0,00692971487 + 0,0523598776 \cdot \text{sen}(6,28318531t)$
			2	2605,46509	$v_n = 0,00692971487 + 0,10471975511966 \cdot \text{sen}(12,5663706t)$
	16,67	0,11936621	0,5	1302,73255	$v_n = 0,00692971487 + 0,0523598775598299 \cdot \text{sen}(3,14159265t)$
			1	2605,46509	$v_n = 0,00692971487 + 0,104719755 \cdot \text{sen}(6,28318531t)$
			2	5210,93019	$v_n = 0,00692971487 + 0,20943951023932 \cdot \text{sen}(12,5663706t)$



**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

25	0,07957747	0,5	1954,09882	$v_n = 0,00692971487 + 0,0785398163397448*\text{sen}(3,14159265t)$
		1	3908,19764	$v_n = 0,00692971487 + 0,157079633*\text{sen}(6,28318531t)$
		2	7816,39528	$v_n = 0,00692971487 + 0,314159265358979*\text{sen}(12,5663706t)$

**Tabla 6.4** Combinaciones de Reynolds neto, frecuencias y amplitudes de oscilación y los resultantes números de Reynolds oscilatorio, Strouhal y ecuaciones

### 6.2.2 Estrategia de resolución

A partir de la geometría y el mallado que habíamos decidido en el apartado anterior, vamos a realizar el primer conjunto de simulaciones. De acuerdo con la trayectoria de los casos anteriores, las condiciones serán las siguientes:

- **Solver:** *Pressure Based*, ya que nuestra simulación cuenta de velocidades de flujo muy bajas y ambos son incompresibles.
- **Space:** geometría preparada en 2D.
- **Tiempo:** *Unsteady*, por la estabilidad, convergencia y precisión de las soluciones.
- **Modelo:** *Eulerian*, ya que tratamos flujo burbujeante en el que las fases se mezclan.
- **Viscosidad:** *Laminar*, debido al bajo número de Reynolds.
- **Diámetro de burbuja:** 0.001m

A la hora de comenzar a resolver el caso, nos planteamos cuál es la mejor estrategia de resolución para la mayor estabilidad de la solución. Como en las anteriores simulaciones nos ha dado un buen resultado, decidimos realizarlas de manera que los en los 100 primeros segundos consigamos un caso lo más estacionario posible dentro de las limitaciones de procesado de datos, y con unas velocidades de agua y aire constantes para estabilizar la solución antes de introducir movimiento oscilatorio. Como hemos explicado unas líneas más arriba, esas velocidades netas constantes dependen del número de Reynolds neto.

Estas simulaciones con movimiento oscilatorio las analizaremos en el tercer ciclo de oscilación con el objetivo de conseguir una estabilización de la solución. Dado que tenemos diferentes frecuencias y por tanto periodos, el tiempo de simulación se ajustará a estos datos:

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Frecuencia (Hz)	Periodo (s)	Simulación
0,5	2	6s
1	1	3s
2	0,5	1,5s

**Tabla 6.5 Tiempos de simulación en función de las frecuencias adoptadas**

Además, todas ellas se realizarán con un paso de tiempo de 0.001 y 100 iteraciones por cada paso.

## 6.3 Vectores de velocidad de agua y aire

Como primer análisis de la batería de simulaciones, estimamos oportuno realizar los de la velocidad de agua y aire que además nos servirán como comprobación de que corresponden a los que hemos introducido en las condiciones de contorno.

Para la realización de este estudio, hemos de tener en cuenta los puntos más representativos a analizar y dado que contamos con un movimiento oscilatorio, no nos valdrá el análisis a un tiempo determinado, si no que intentaremos recrear una película de los diferentes estados de la oscilación. Hemos de tener en cuenta, por tanto, la magnitud y sentido de esta velocidad.

Aunque el alcance óptimo sería estudiar los 27 casos que hemos realizado las simulaciones para una correcta comparativa y establecimiento de una tendencia (si la hubiera), por extensión nos limitaremos al análisis de unos pocos, que serán los siguientes:

- Comparativa entre casos con diferente número de Reynolds oscilatorio. Para ello, fijaremos el mismo número de Reynolds neto y Strouhal y modificaremos el oscilatorio. Para esta ocasión hemos elegido ReN10\_St080\_ReO1954 y ReN10\_St080\_ReO3908.
- Comparativa entre casos con diferente número de Strouhal. Para ello, fijaremos el mismo número de Reynolds neto y frecuencia (Reynolds oscilatorio no es el mismo pues depende de  $x_0$  a su vez, como Strouhal) y modificaremos el Strouhal. Para esta ocasión hemos elegido ReN10\_St080\_ReO1954 y ReN10\_St119\_ReO1302.
- Comparativa entre casos con diferente número de Reynolds neto. Para ello, fijaremos el mismo número de Reynolds oscilatorio y Strouhal y modificaremos el neto. Para esta ocasión hemos elegido ReN10\_St080\_ReO1954 y ReN35\_St080\_ReO1954.

### 6.3.1 Vectores de velocidad de agua

#### 6.3.1.1 Comparativa con distinto Reynolds oscilatorio

##### ReN10\_St080\_ReO1954

Para este caso, la ecuación de velocidad de agua que sigue el flujo es la siguiente:

$$v_n = 0,0006929715 + 0,0785398163397448 * \text{sen}(3,14159265t) \quad (6.3)$$

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

Y la representación del movimiento oscilatorio:

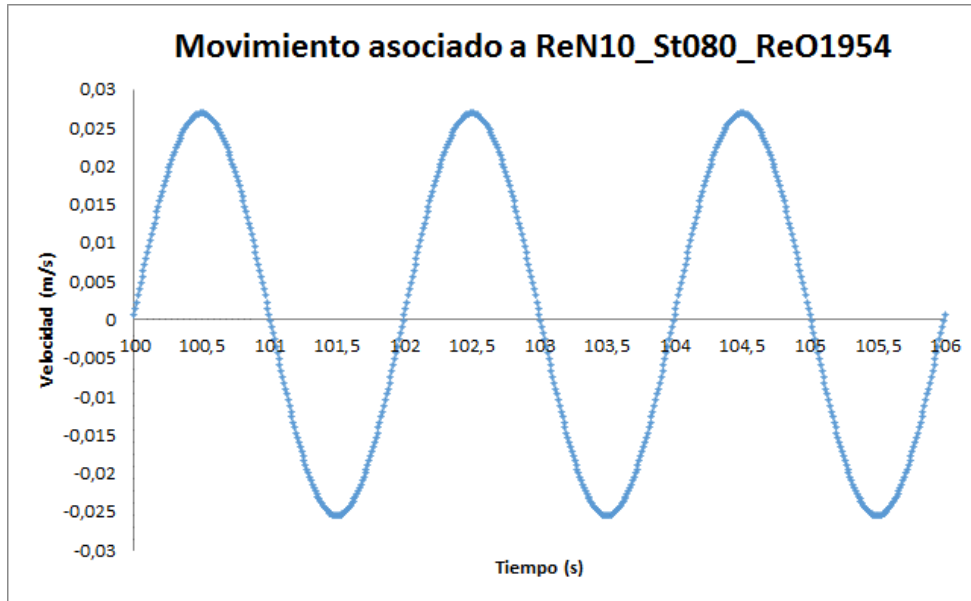
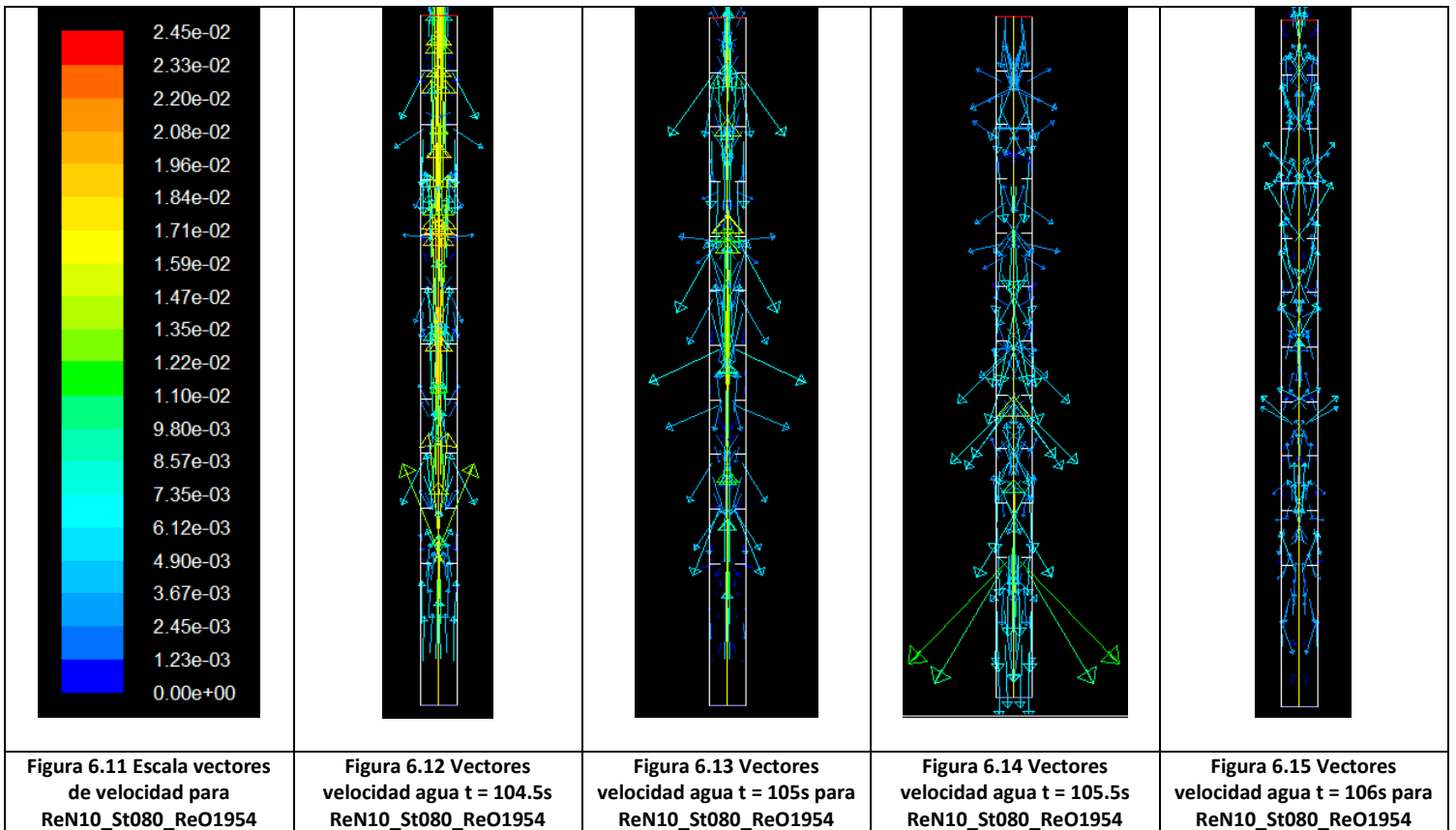


Figura 6.10 Movimiento oscilatorio asociado a ReN10\_St080\_ReO1954

Los diagramas de vectores de velocidad para los momentos de máxima velocidad oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:



Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

✚ ReN10\_St080\_ReO3908

Para este caso, la ecuación de velocidad de agua que sigue el flujo es la siguiente:

$$v_n = 0,0006929715 + 0,0523598775598299 * \text{sen}(6,28318531t) \quad (6.4)$$

Y la representación del movimiento oscilatorio:

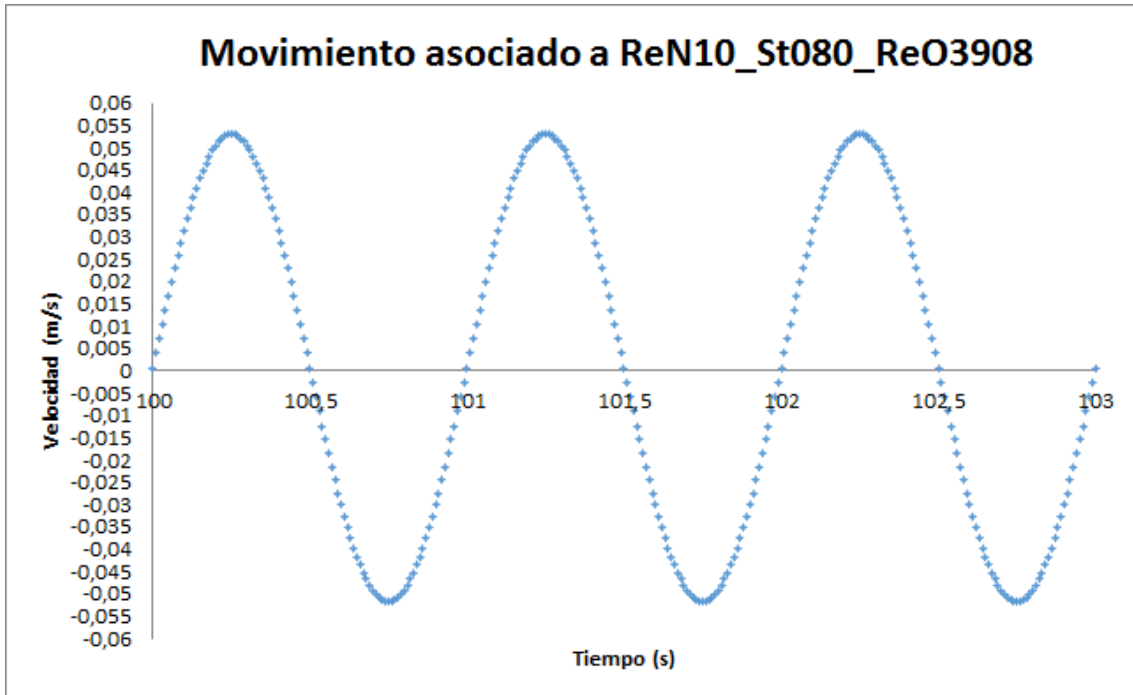
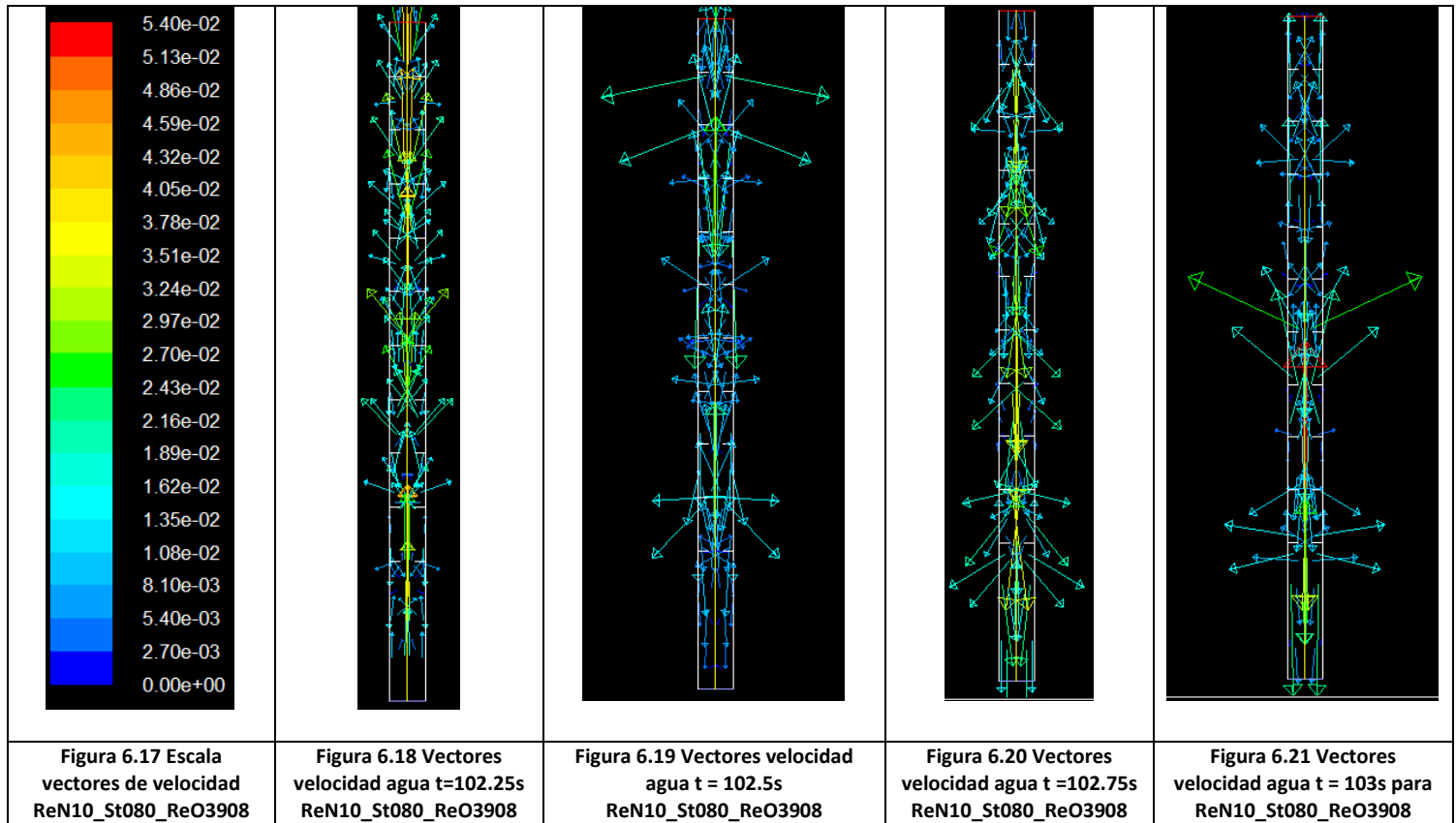


Figura 6.16 Movimiento oscilatorio asociado a ReN10\_St080\_ReO3908

Los diagramas de vectores de velocidad para los momentos de máxima velocidad oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio



Para el la primera opción de tiempo de oscilación  $\pi/2$ , podemos apreciar en ambos casos un sentido ascendente del agua, con ligeras recirculaciones laterales. Para el caso de tiempo  $3\pi/2$ , la en este caso vemos un sentido descendente de la velocidad, de mayor magnitud que el primer caso ya que se le suman las recirculaciones existentes. Para los casos en los que la componente de la velocidad oscilatoria es nula, se aprecia mucho mejor esta recirculación de agua, viendo un claro sentido descendente por los laterales y un flujo central ascendente de mayor magnitud (que además viene acompañado de aire).

Vemos que para todos los tiempos la magnitud es mayor para el caso de oscilatorio mayor, lo que concuerda con lo obtenido en la fórmula de velocidad introducida.

### 6.3.1.2 Comparativa con distinto Strouhal

#### ReN10\_St080\_ReO1954

Ya analizado en el apartado anterior

#### ReN10\_St119\_ReO1302

Para este caso, la ecuación de velocidad de agua que sigue el flujo es la siguiente:

$$v_n = 0,0006929715 + 0,0523598775598299 * \text{sen}(3,14159265t) \quad (6.5)$$

Y la representación del movimiento oscilatorio:

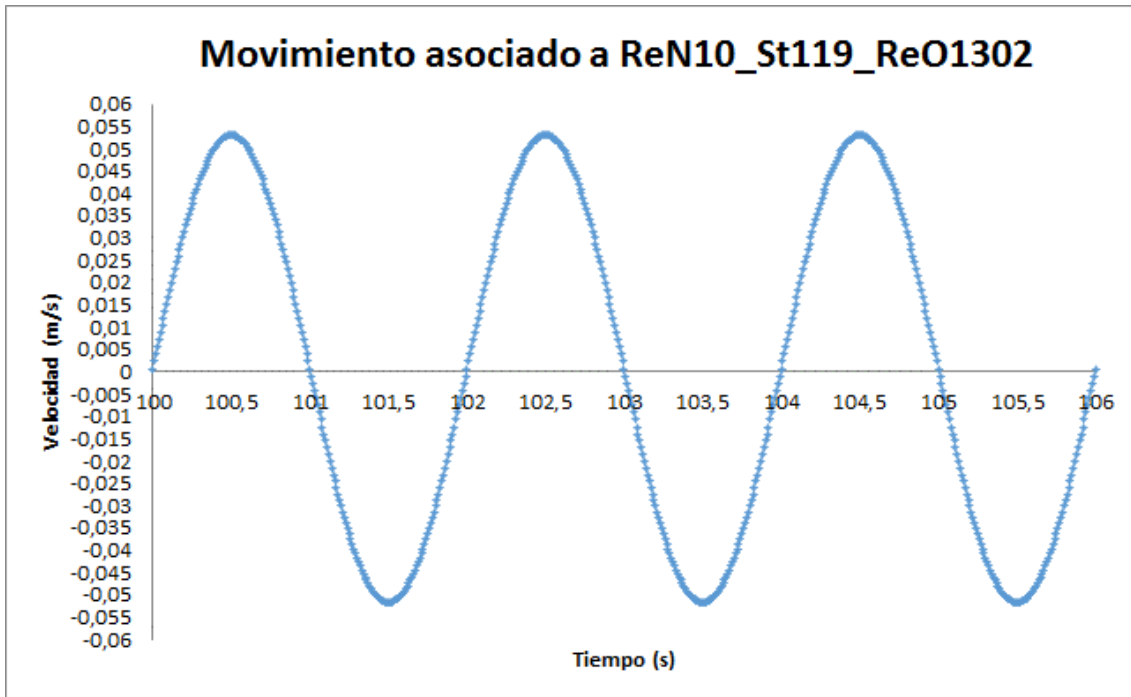
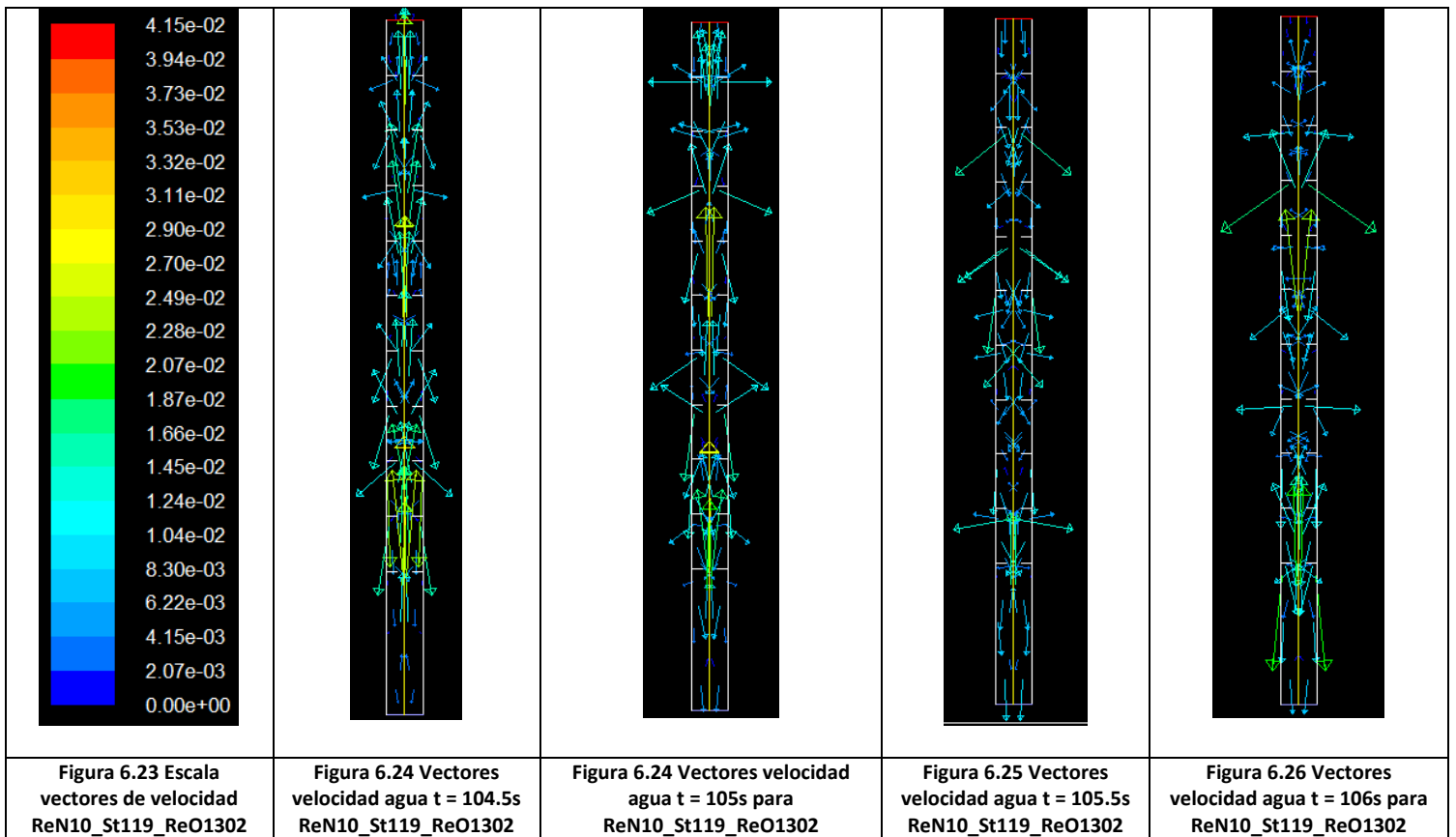


Figura 6.22 Movimiento oscilatorio asociado a ReN10\_St119\_ReO1302

Los diagramas de vectores de velocidad para los momentos de máxima velocidad oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio



Para la situación con número de Strouhal diferente, vemos que el patrón se repite pero con ligeras diferencias en las magnitudes pues la velocidad de entrada de agua es menor. Esta vez, para la primera opción de tiempo de oscilación  $\pi/2$ , podemos apreciar una recirculación de agua mucho más marcada (por ser menor la velocidad de ascenso), con mayor magnitud de velocidad descendiente por los laterales, independiente de la central ascendiente. Para el caso de tiempo  $3\pi/2$ , el descenso de agua ya no es tan acusado como antes y de la misma manera ocurre con las figuras XXX, donde la dimensión de la velocidad descendiente es también menor.

Vuelven a coincidir las magnitudes de la fórmula y las obtenidas en los diagramas para ambos casos.



### 6.3.1.3 Comparativa con distinto Reynolds neto

#### ReN10\_St080\_ReO1954

Ya analizado en el apartado anterior

#### ReN100\_St080\_ReO1954

Para este caso, la ecuación de velocidad de agua que sigue el flujo es la siguiente:

$$v_n = 0,00692971487 + 0,0785398163397448 * \text{sen}(3,14159265t) \quad (6.6)$$

Y la representación del movimiento oscilatorio:

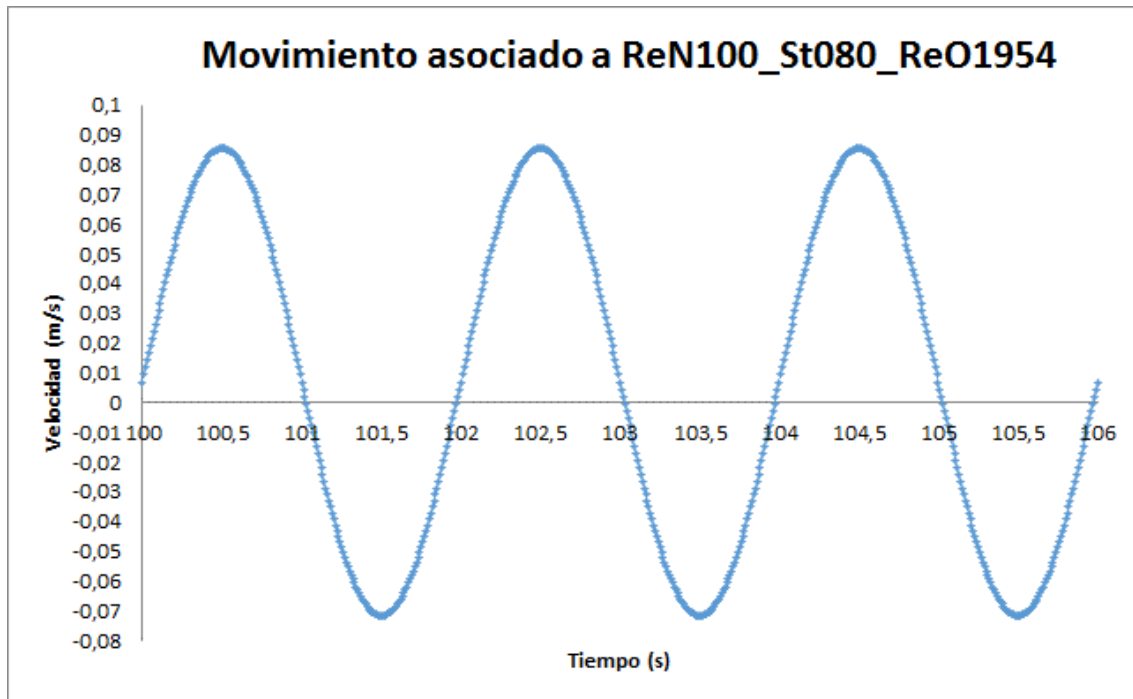
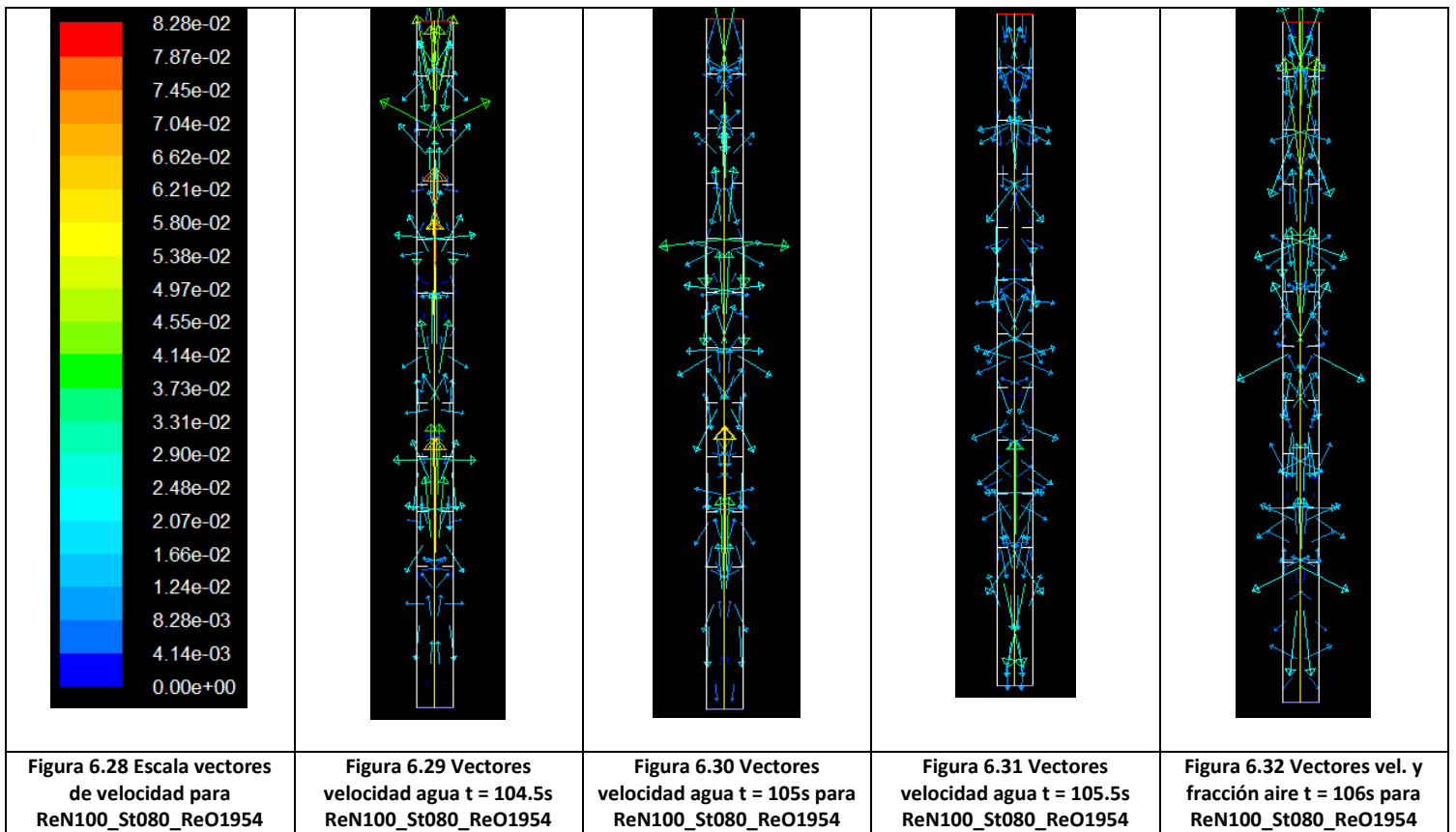


Figura 6.27 Movimiento oscilatorio asociado a ReN100\_St080\_ReO1954

Los diagramas de vectores de velocidad para los momentos de máxima velocidad oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio



Con el aumento de número de Reynolds neto, la velocidad de agua que crece es la neta también, por lo que la diferencia con respecto a la simulación de ReN10, es la velocidad central de ascenso más pronunciada. Seguimos encontrándonos con las recirculaciones en los laterales y la velocidad descendente en el caso de tiempo  $3\pi/2$ .

Vuelven a coincidir las magnitudes de la fórmula y las obtenidas en los diagramas para ambos casos.

### 6.3.2 Vectores de velocidad de aire

El objetivo de estudio de los vectores de velocidad de aire es, además, ver cómo afecta a este flujo las distinta magnitud y sentido de la velocidad del agua. Es por ello que para cada caso analizaremos también este parámetro para diferentes tiempos. Para el análisis, mantenemos la misma dinámica que para los vectores de velocidad de agua, siendo la velocidad de ésta, además, la misma.

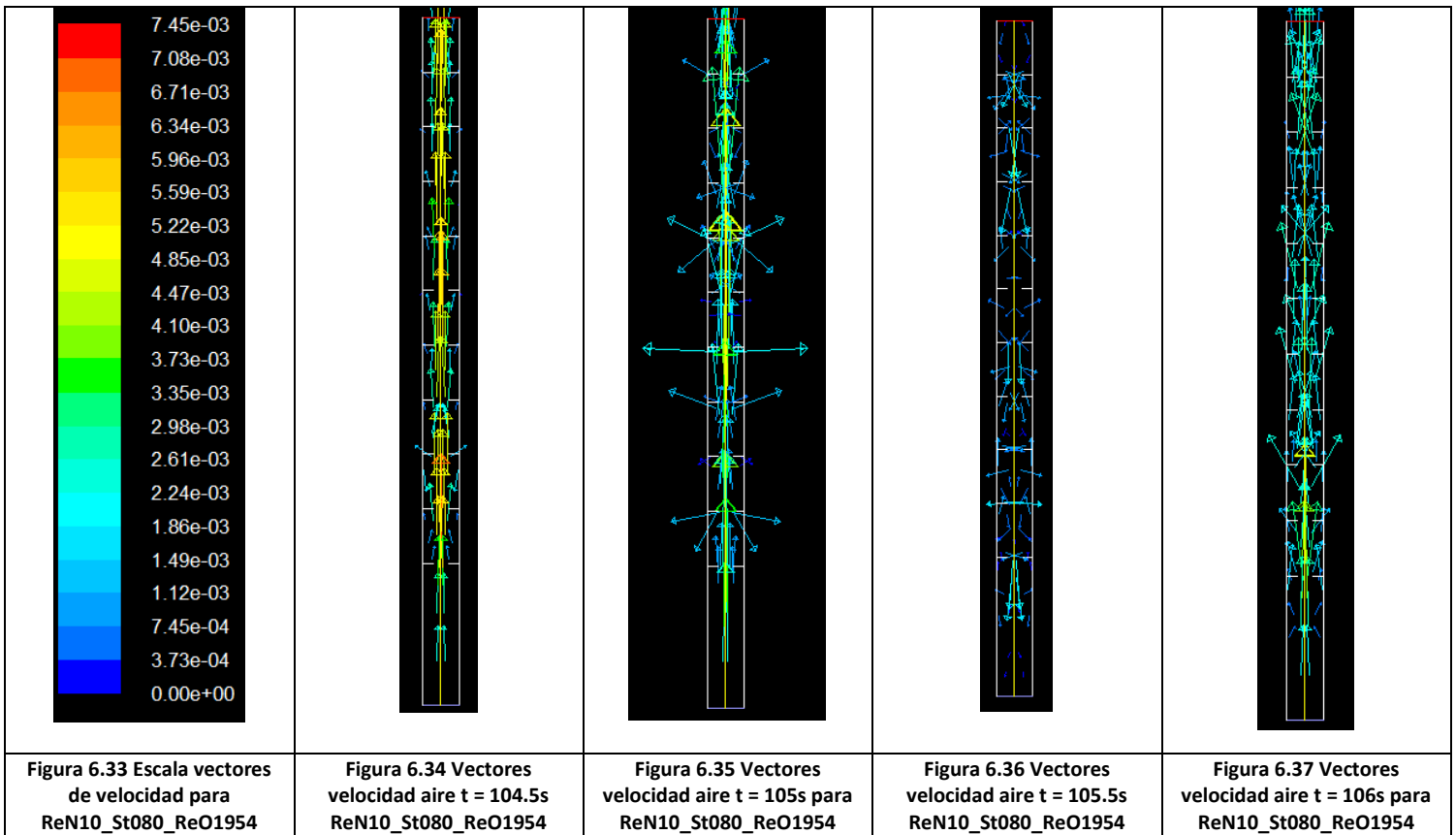
**6.3.2.1 Comparativa con distinto Reynolds oscilatorio**

**ReN10\_St080\_ReO1954**

Para este caso, la velocidad del aire es la siguiente:

$$V_{\text{aire}} = 0.000143544 \text{ m/s}$$

Los diagramas de vectores de velocidad para los momentos de máxima velocidad de agua oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:



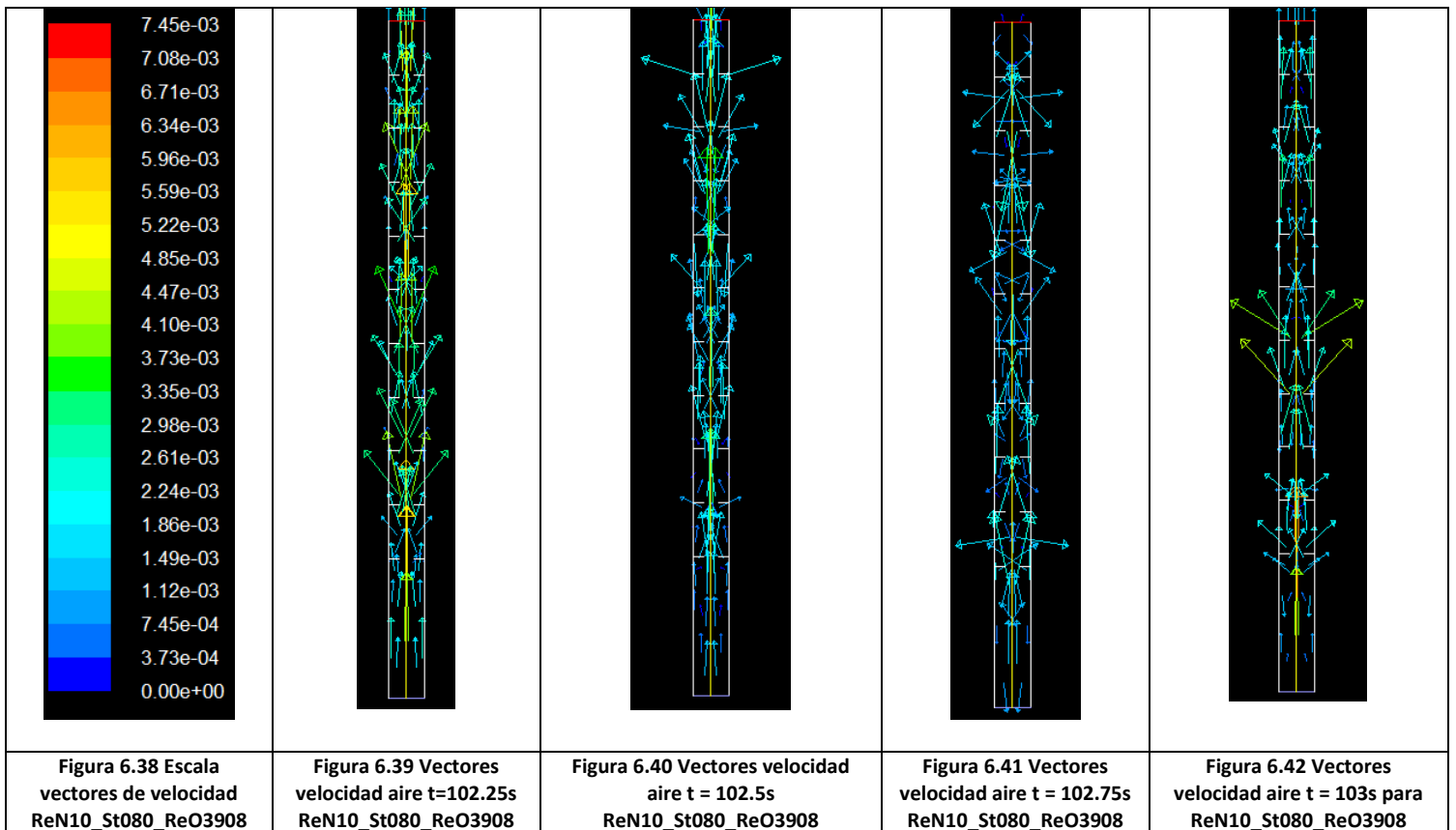
**ReN10\_St080\_ReO3908**

Para este caso, la ecuación de velocidad de agua que sigue el flujo es la siguiente:

$$V_{\text{aire}} = 0.000143544 \text{ m/s}$$

Los diagramas de vectores de velocidad para los momentos de máxima velocidad oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio



Para esta ocasión y dado que la velocidad del aire no es oscilatoria sino ascendente y constante, observamos velocidades ascendentes para el caso de oscilatorio más pequeño excepto en el tiempo  $3\pi/2$ , donde el agua tiene velocidad negativa. En este último en el que el oscilatorio ya es más notable sí tenemos pequeñas recirculaciones en sentido descendente en los casos de velocidad oscilatoria de agua nula. Las magnitudes son muy parecidas ya que la velocidad neta del aire no varía (aunque sí lo haga la del fluido en contacto, lo que provoca las diferencias).

6.3.2.2 Comparativa con distinto Strouhal

✚ ReN10\_St080\_ReO1954

Ya analizado en el apartado anterior

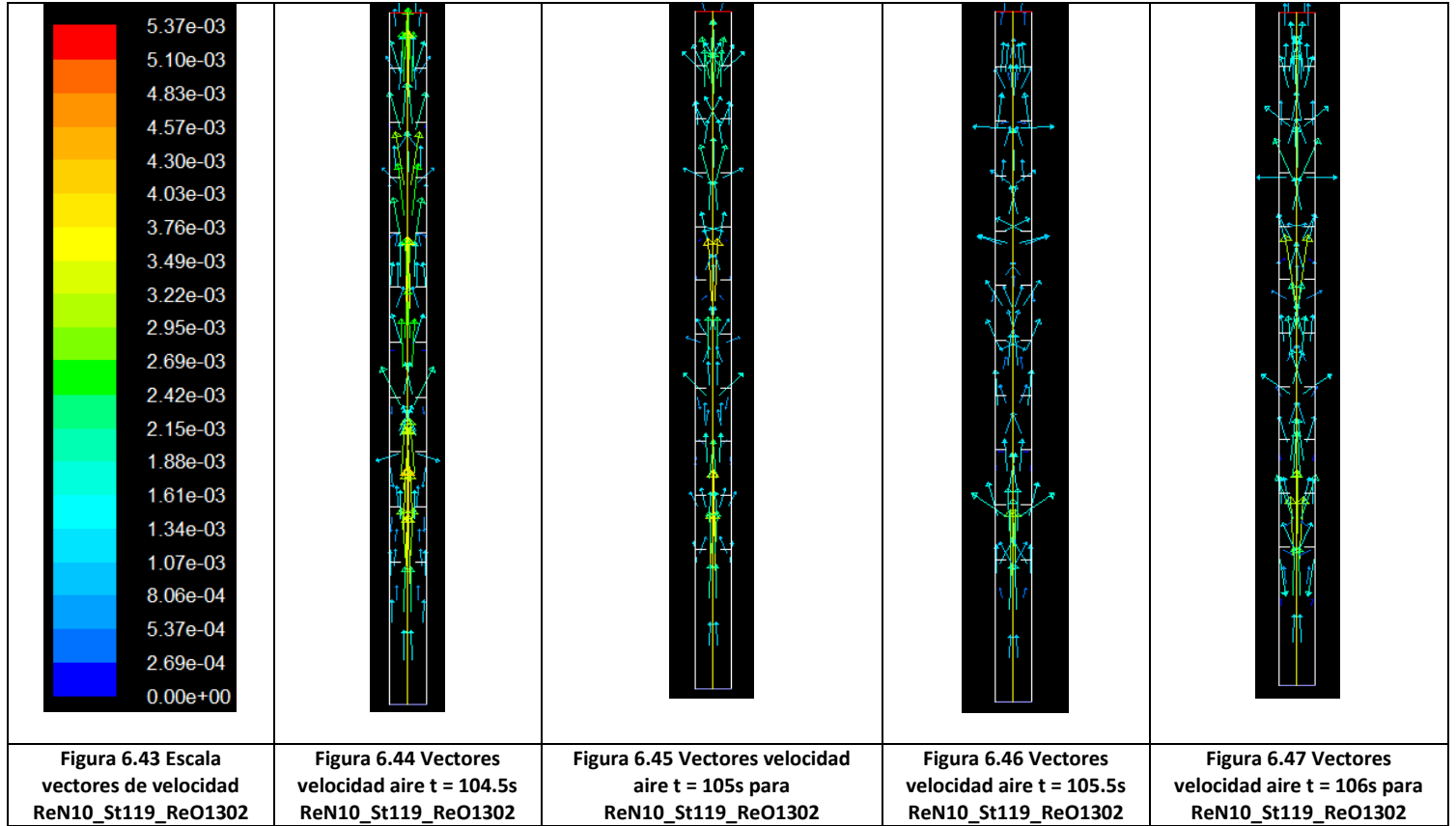
✚ ReN10\_St119\_ReO1302

Para este caso, la velocidad del aire es la siguiente:

$$V_{\text{aire}} = 0.000143544 \text{ m/s}$$

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

Los diagramas de vectores de velocidad para los momentos de máxima velocidad de agua oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:



Esta comparación de simulaciones nos arroja un resultado muy parecido entre ambas: velocidades ascendentes excepto en el tiempo  $3\pi/2$ , donde el agua tiene velocidad negativa.

**6.3.2.3 Comparativa con distinto Reynolds neto**

**ReN10\_St080\_ReO1954**

Ya analizado en el apartado anterior

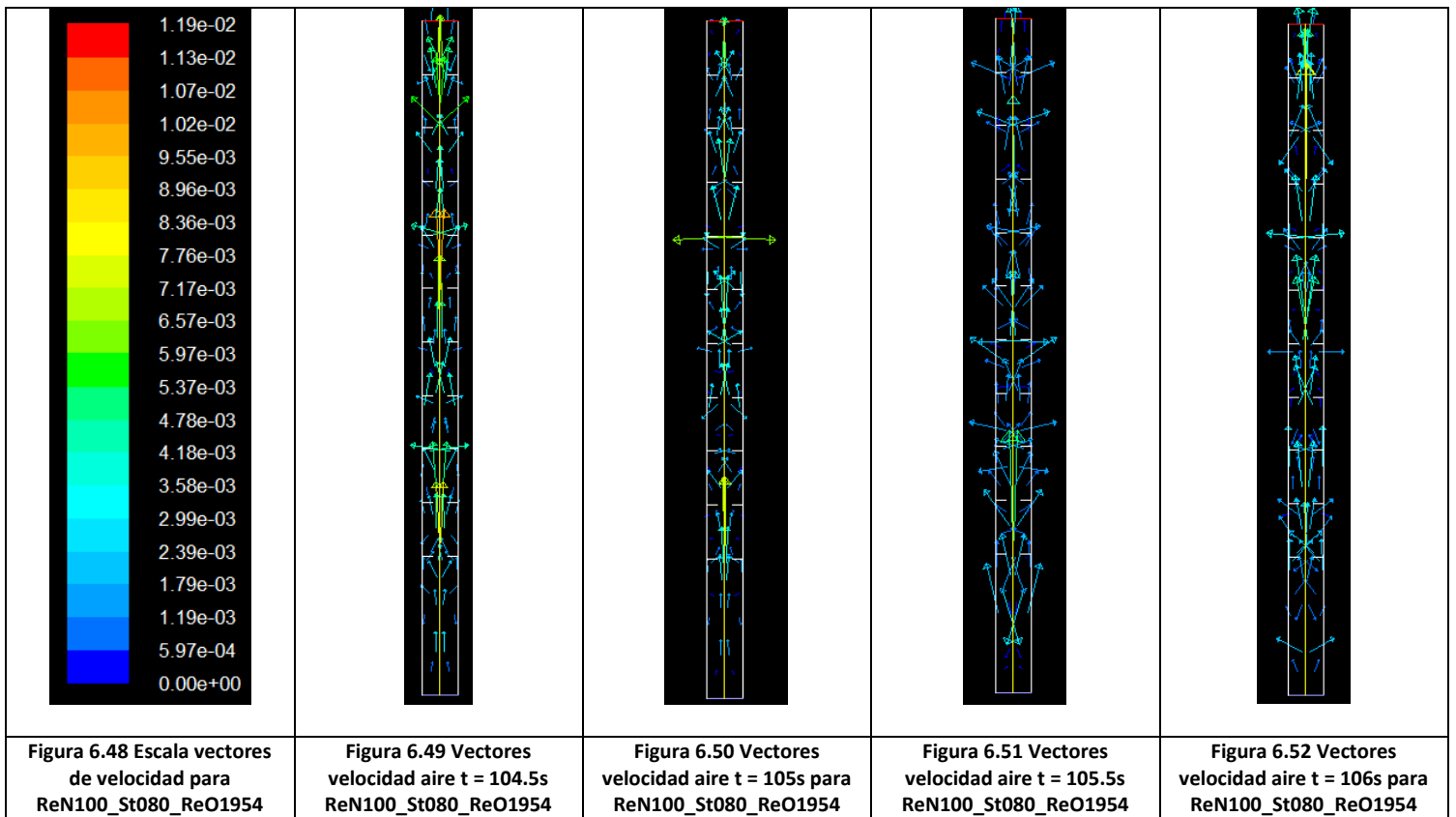
**ReN100\_St080\_ReO1954**

Para este caso, la velocidad del aire es la siguiente:

$$V_{\text{aire}} = 0.00143544 \text{ m/s}$$

Los diagramas de vectores de velocidad para los momentos de máxima velocidad de agua oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio



El resultado respecto a la simulación difiere solamente en la magnitud de la velocidad de aire, sin interferir en el sentido de esta, vemos que para ambos casos los vectores de velocidad son muy parecidos.

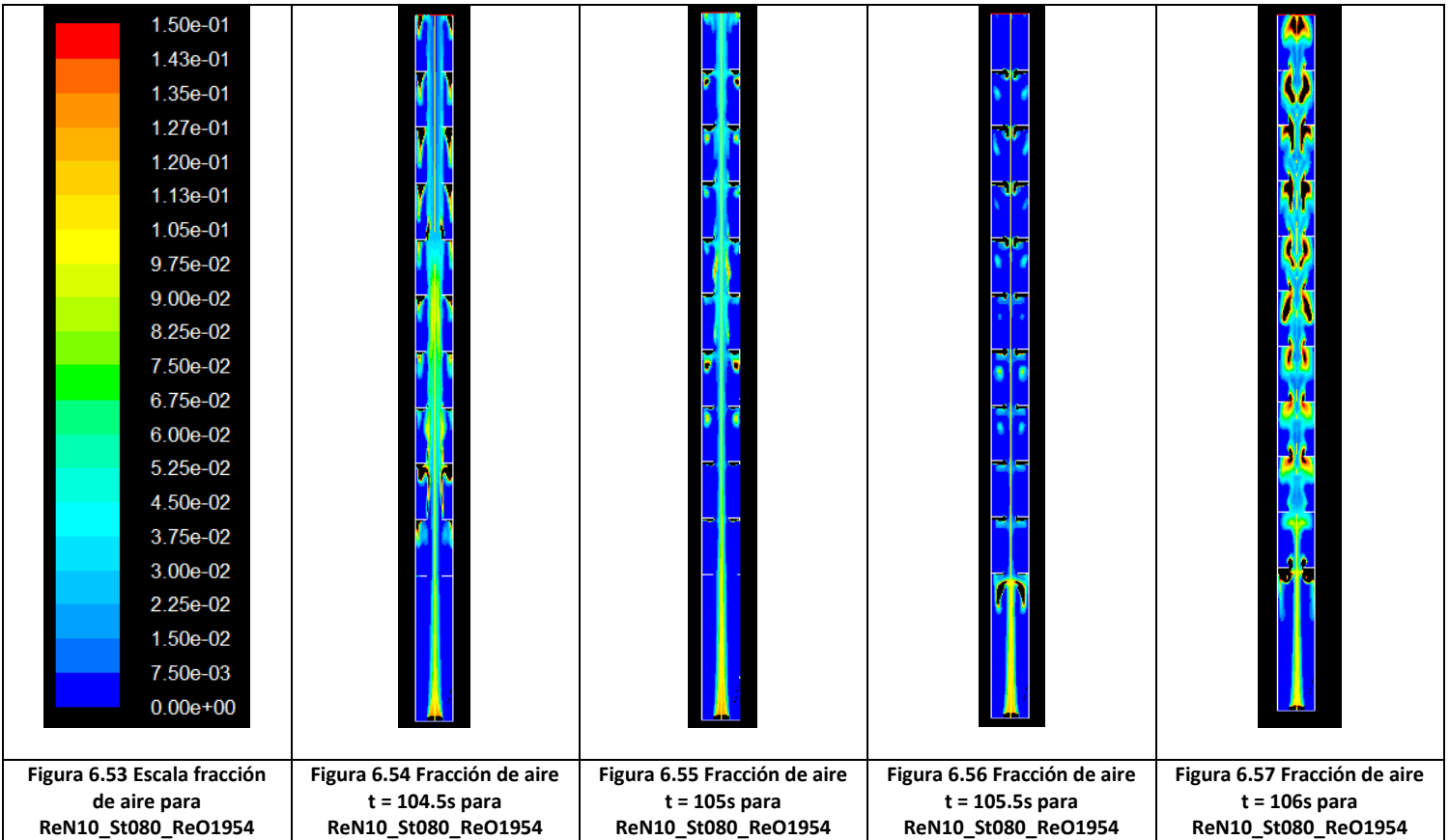
## 6.4 Análisis composición volumétrica aire

Dado que el objetivo de este proyecto es el análisis del mezclado entre ambas fases aire y agua y la búsqueda de unas condiciones óptimas para ello, estimamos oportuno que para este apartado sí que analicemos caso por caso, en los 27 realizados y a distintos tiempos de simulación la evolución de la fase aire en el interior de la columna de líquido. Volverá a influir en esto y será muy importante en el análisis, el movimiento oscilatorio que estemos introduciendo, su sentido y magnitud.

### 6.4.1 Diagramas de fase aire

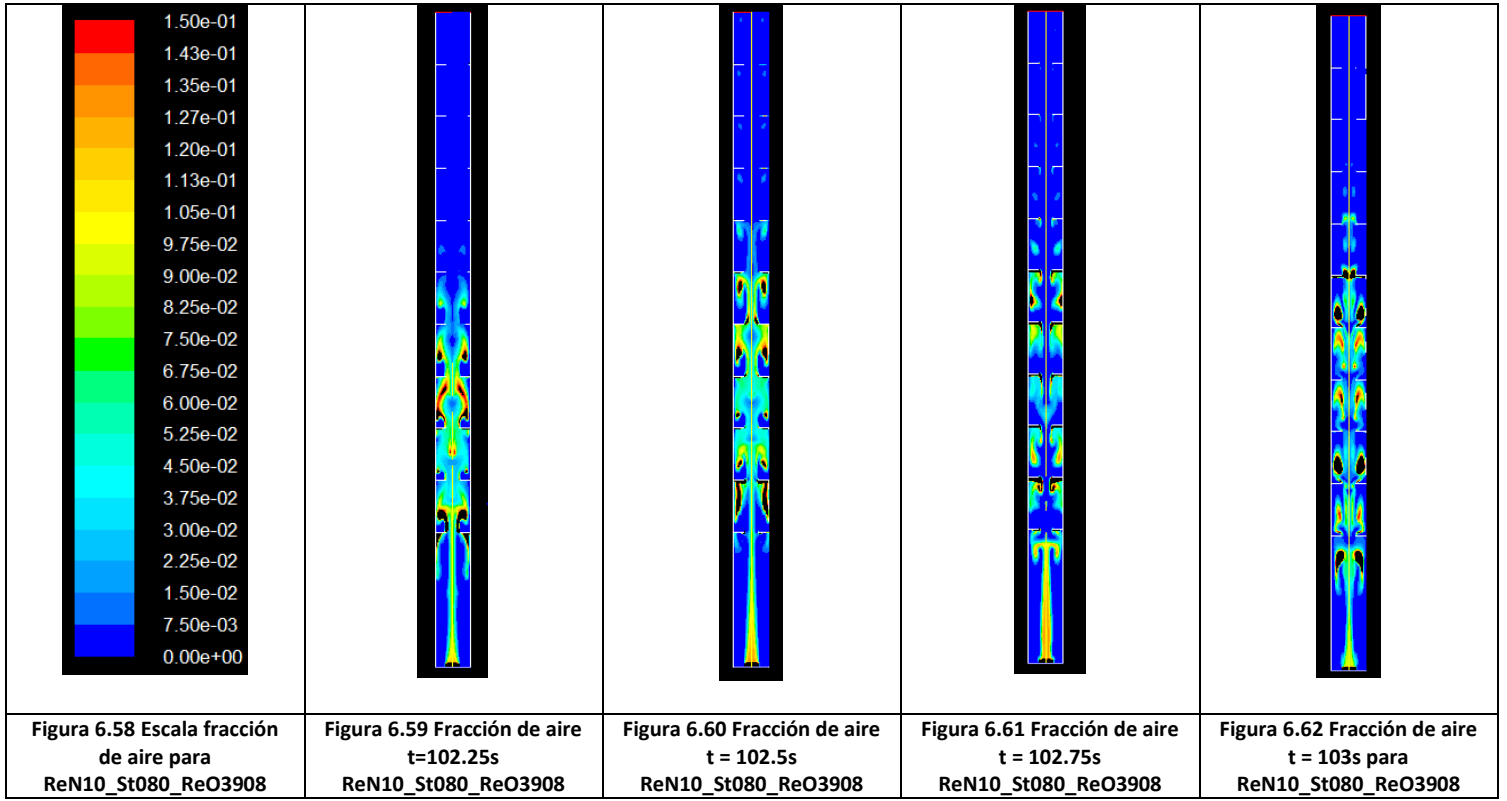
#### 6.4.1.1 ReN10

ReN10\_St080\_ReO1954

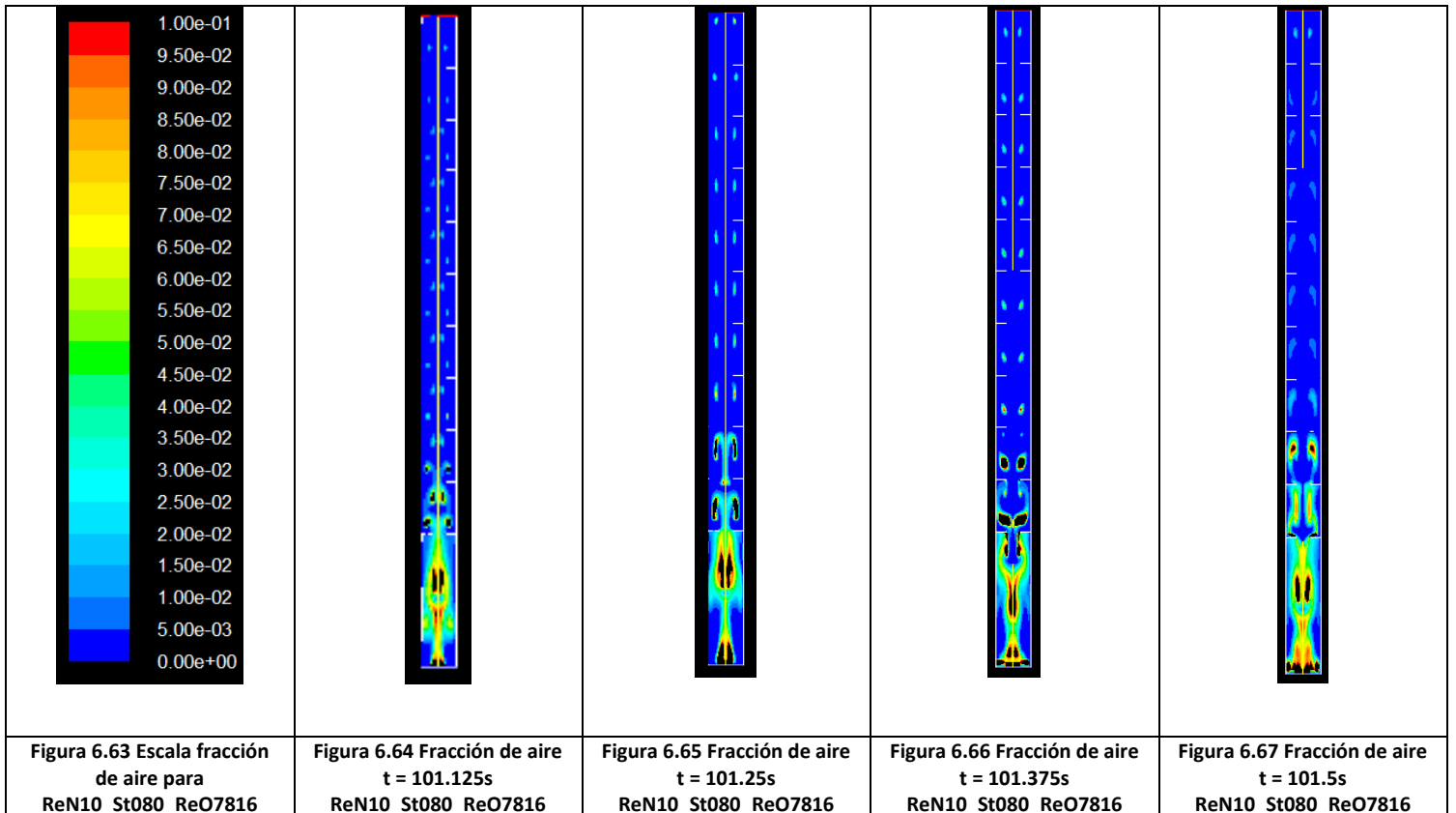


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN10\_St080\_ReO3908



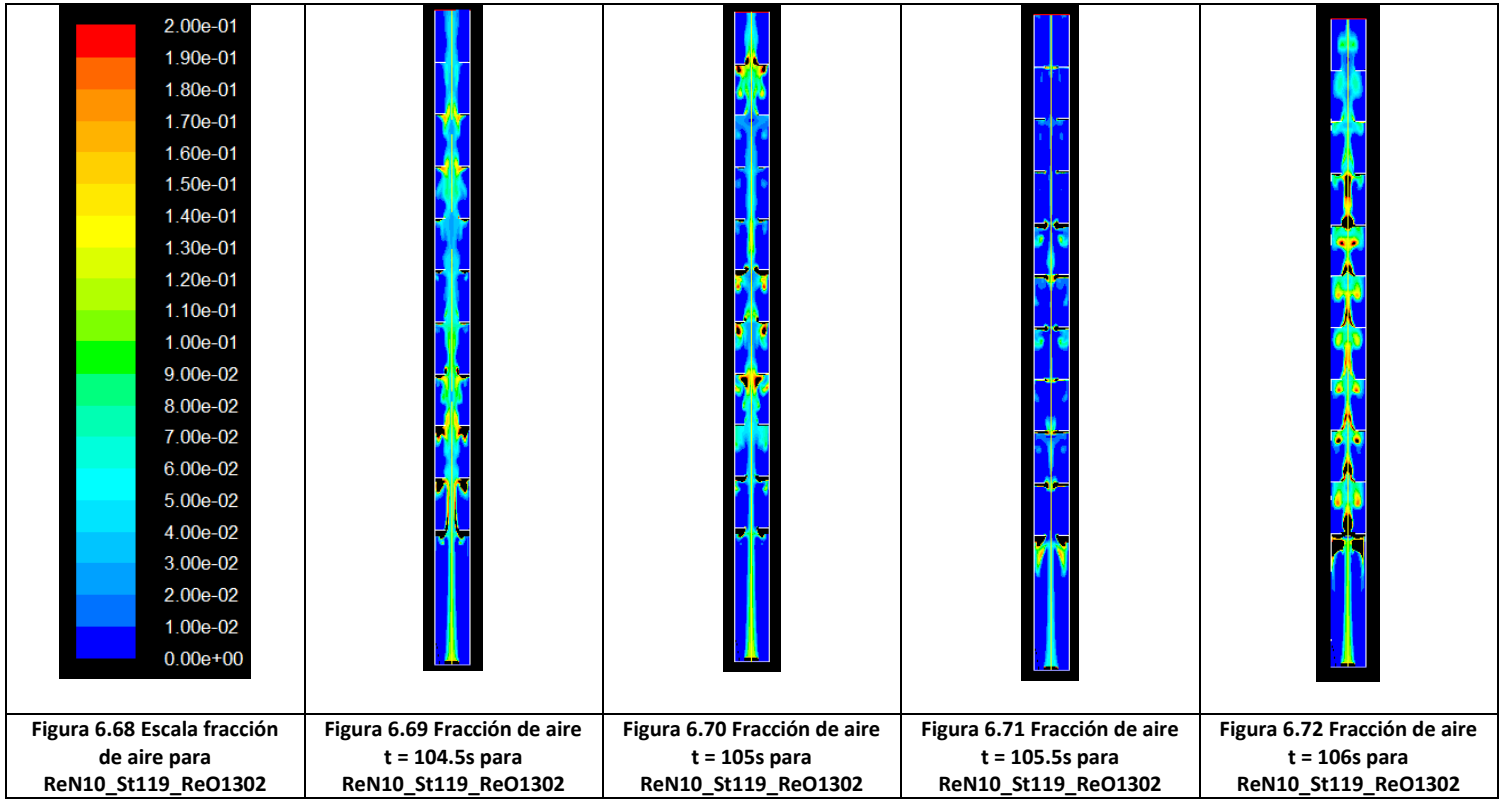
ReN10\_St080\_ReO7816



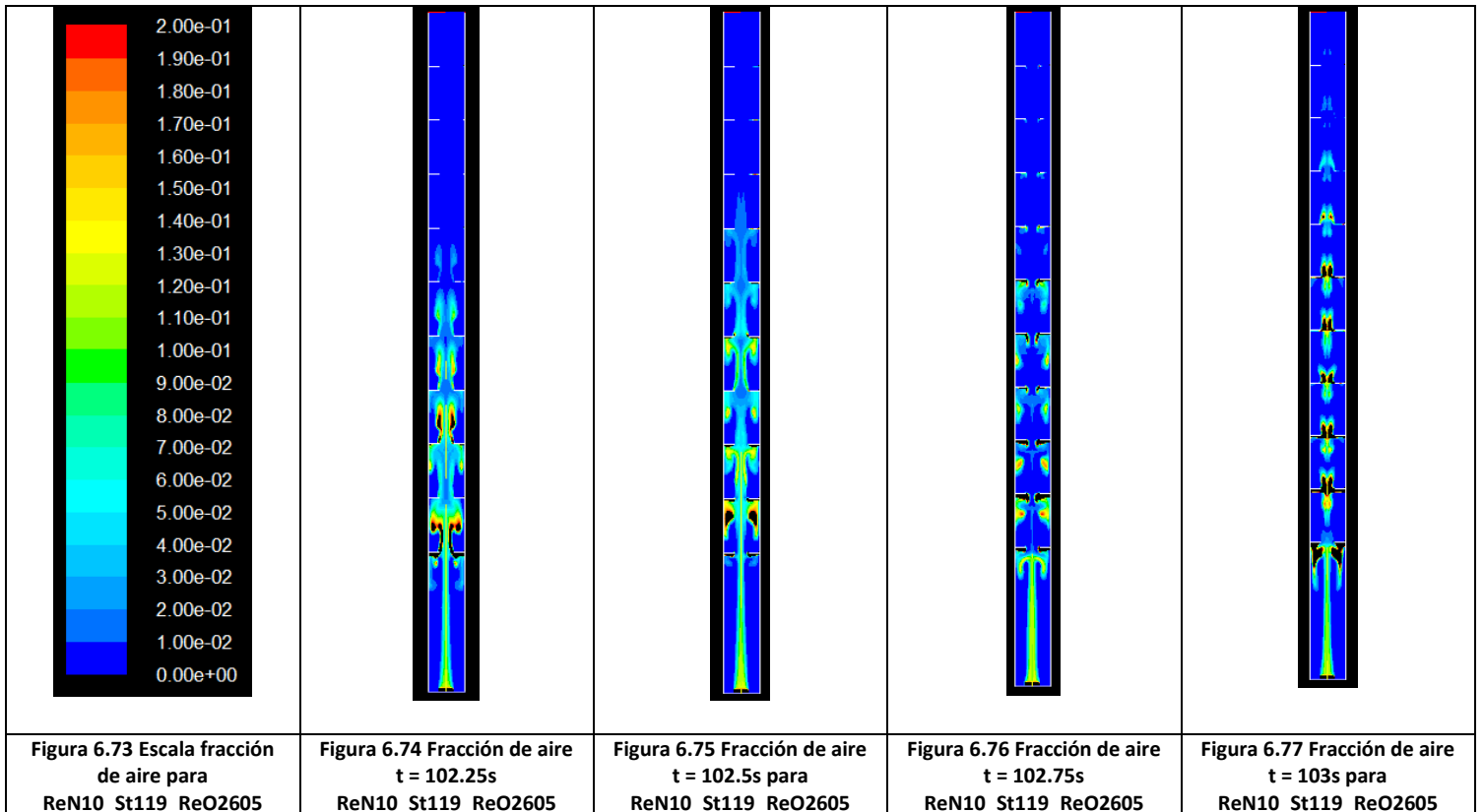


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

✚ ReN10\_St119\_ReO1302

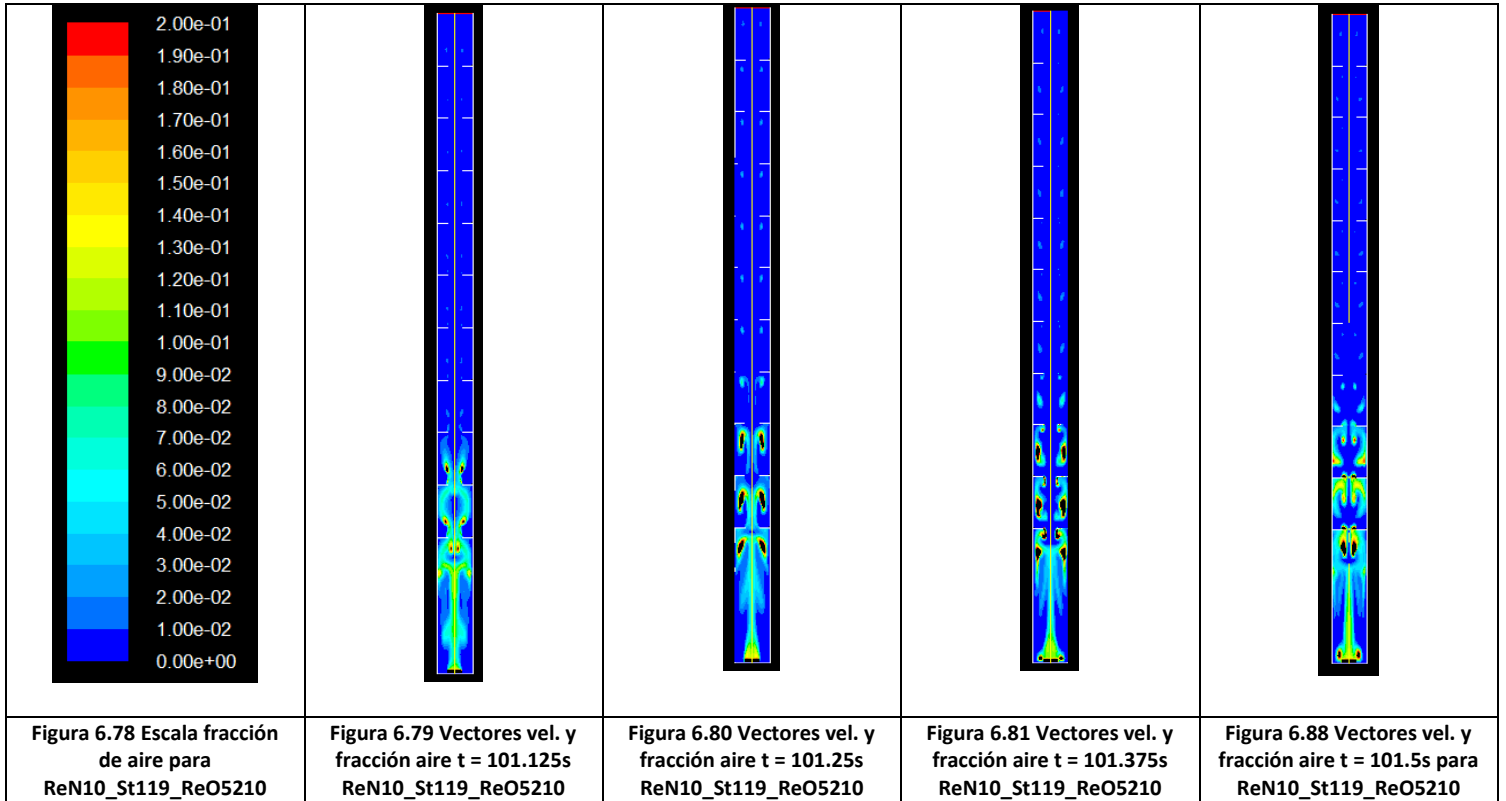


✚ ReN10\_St119\_ReO2605

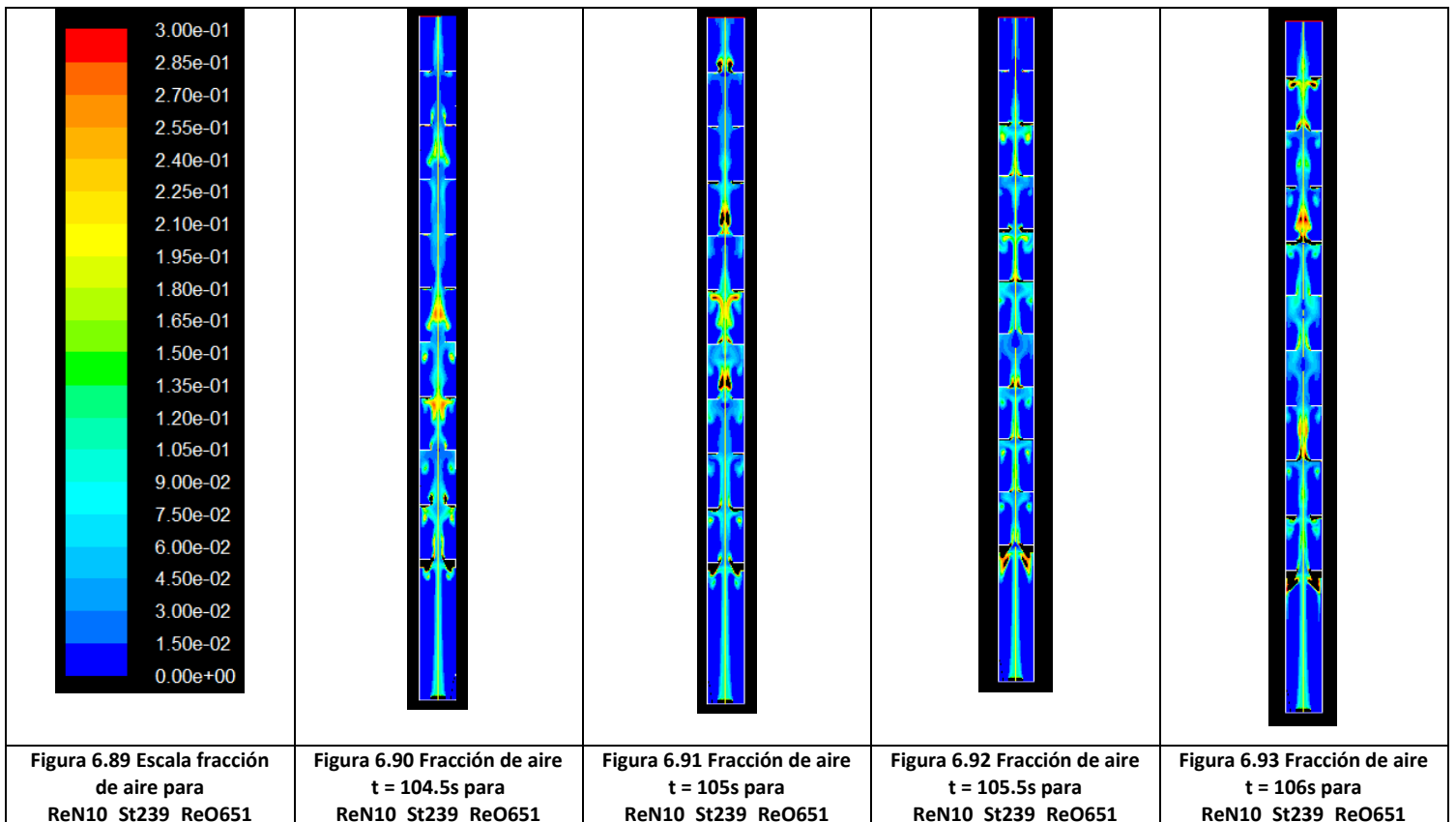


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN10\_St119\_ReO5210

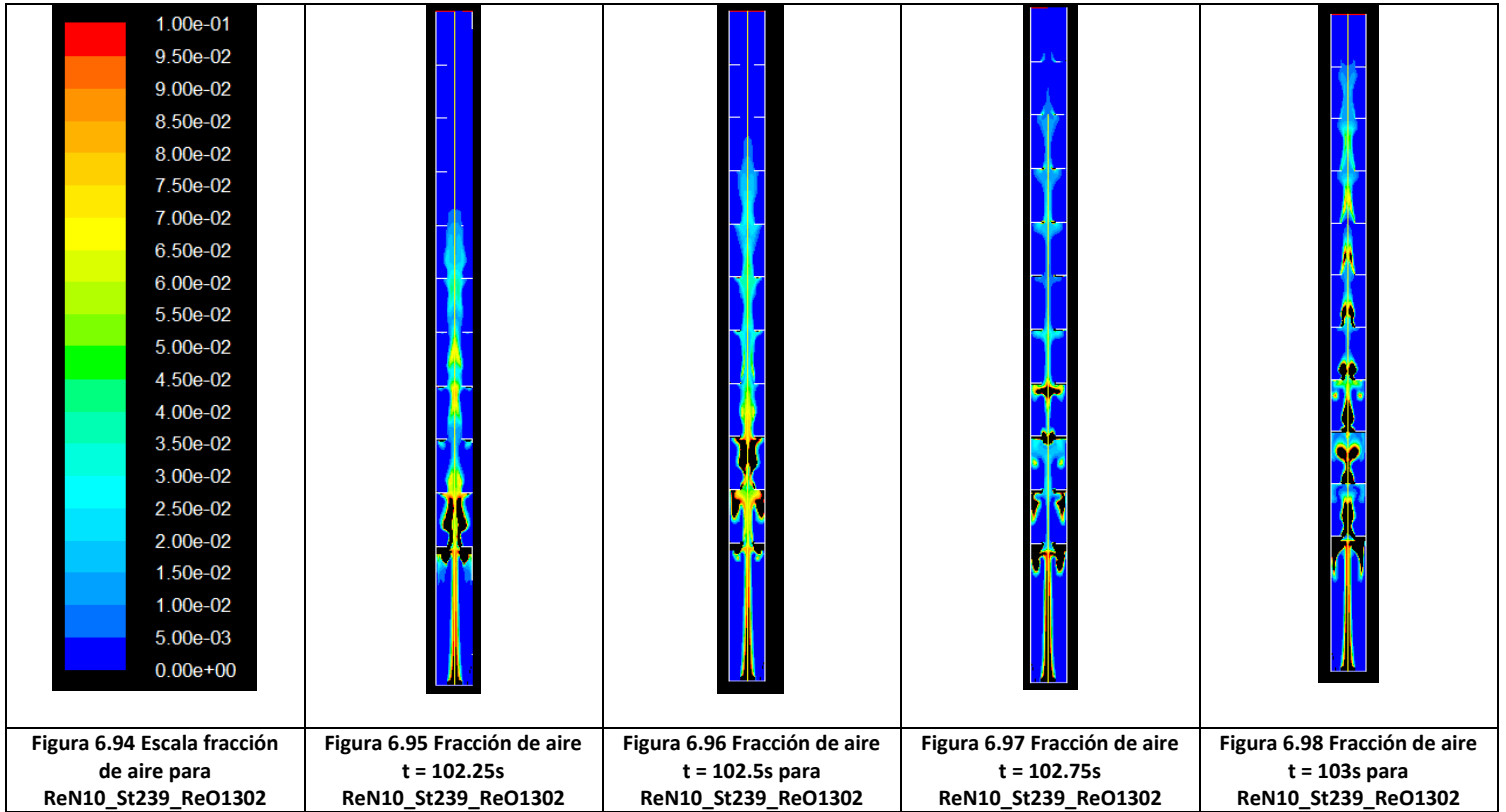


ReN10\_St239\_ReO651

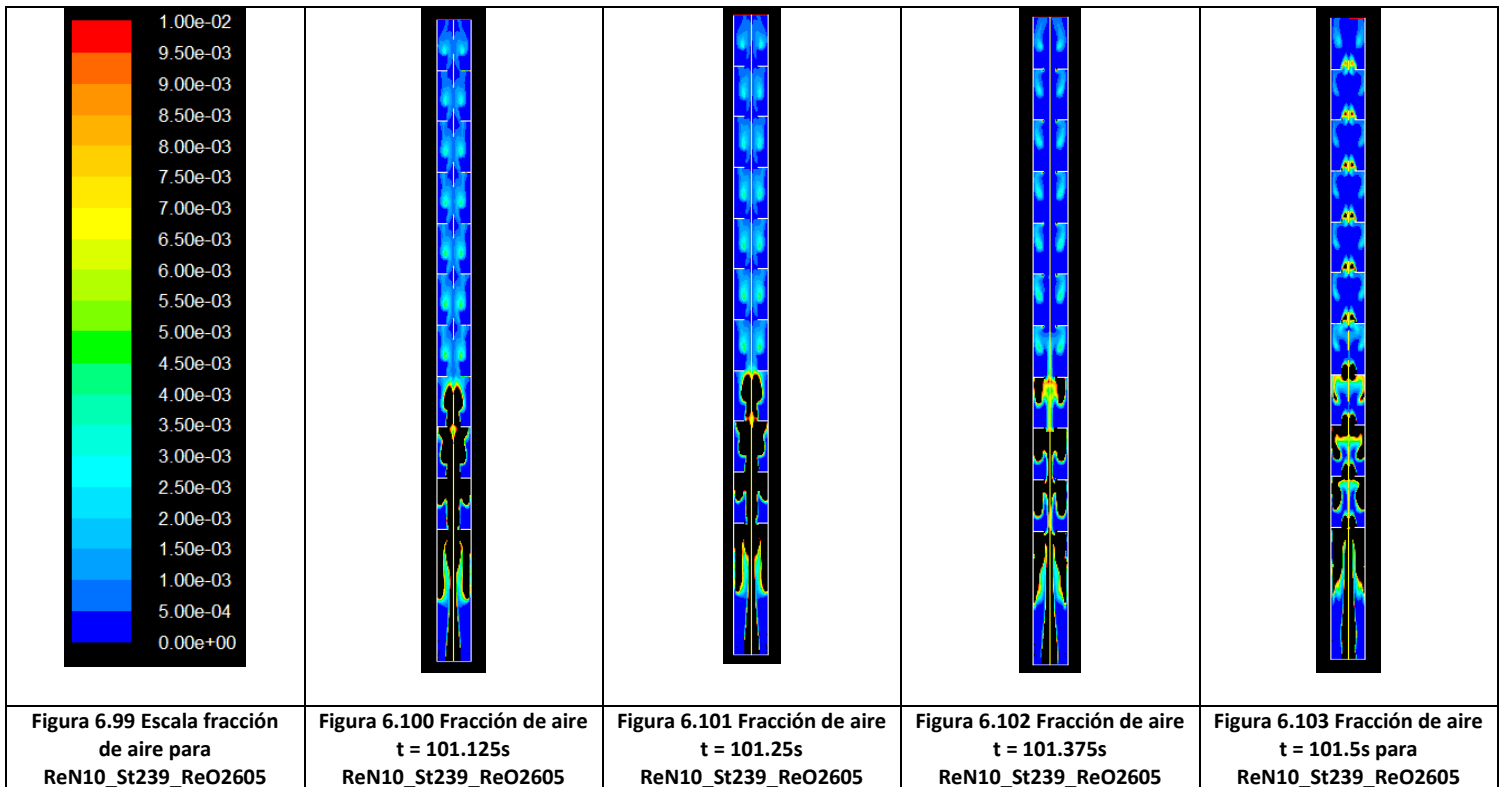


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN10\_St239\_ReO1302



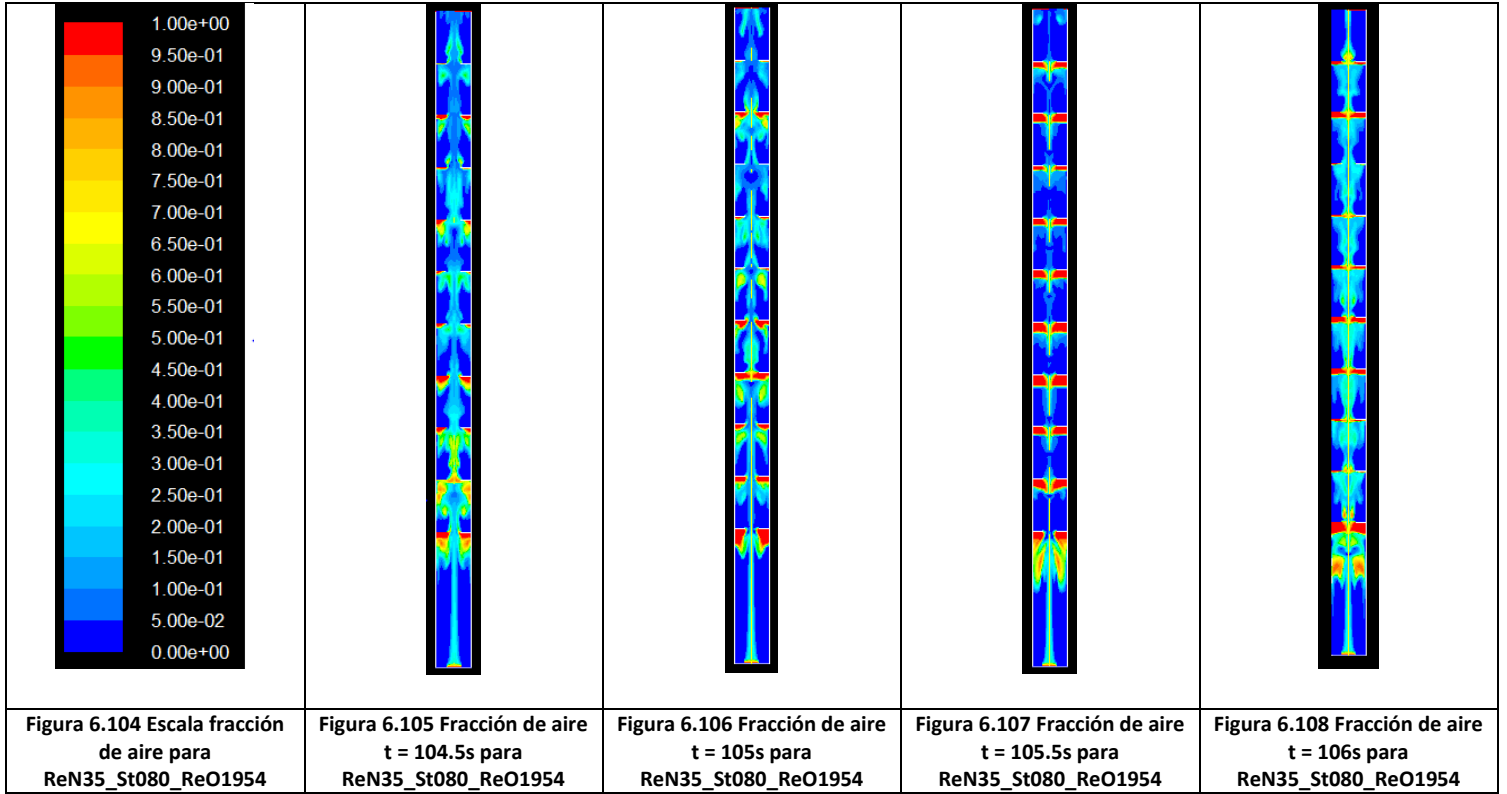
ReN10\_St239\_ReO2605



Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

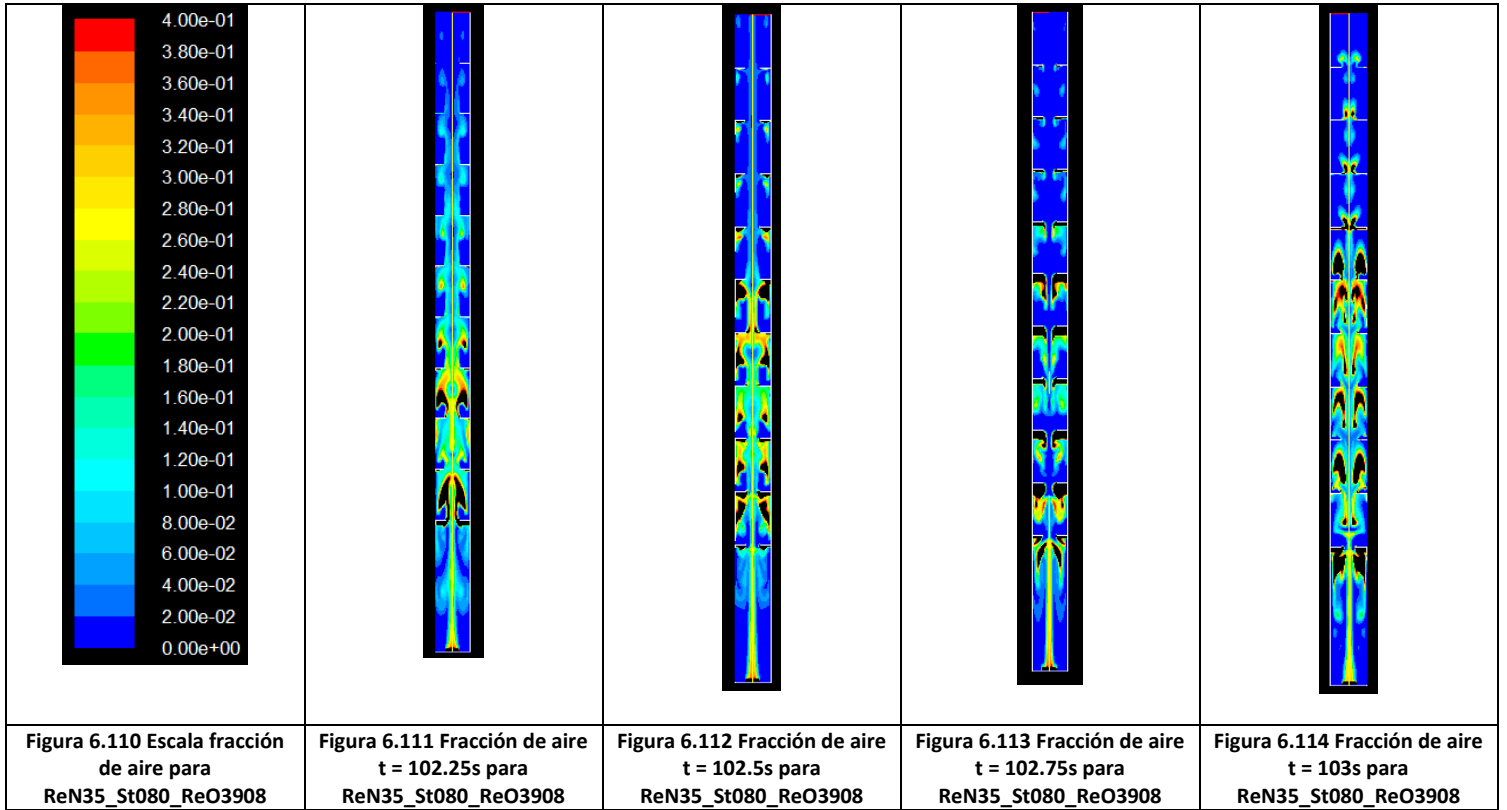
6.4.1.2 ReN35

ReN35\_St080\_ReO1954

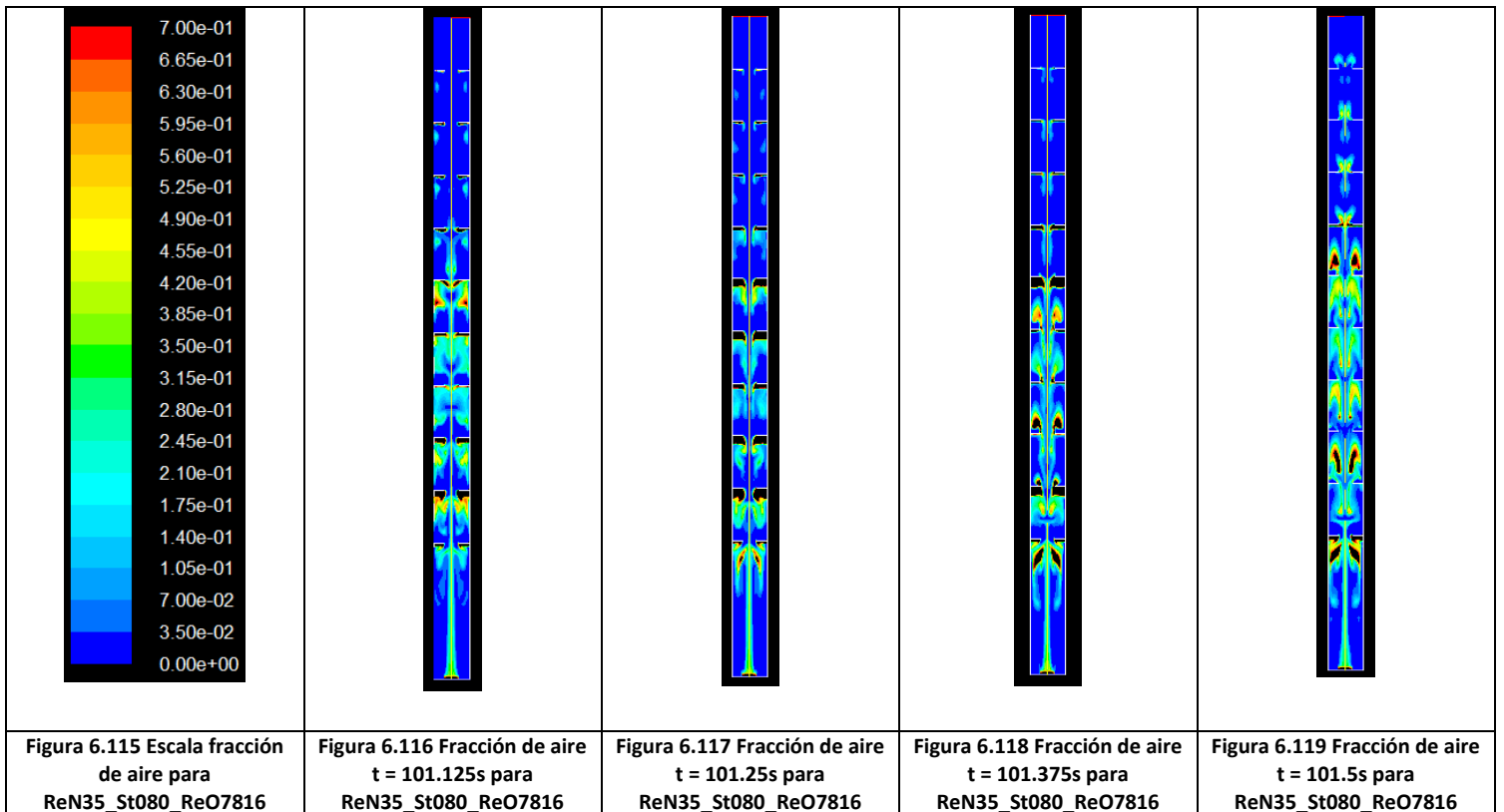


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN35\_St080\_ReO3908

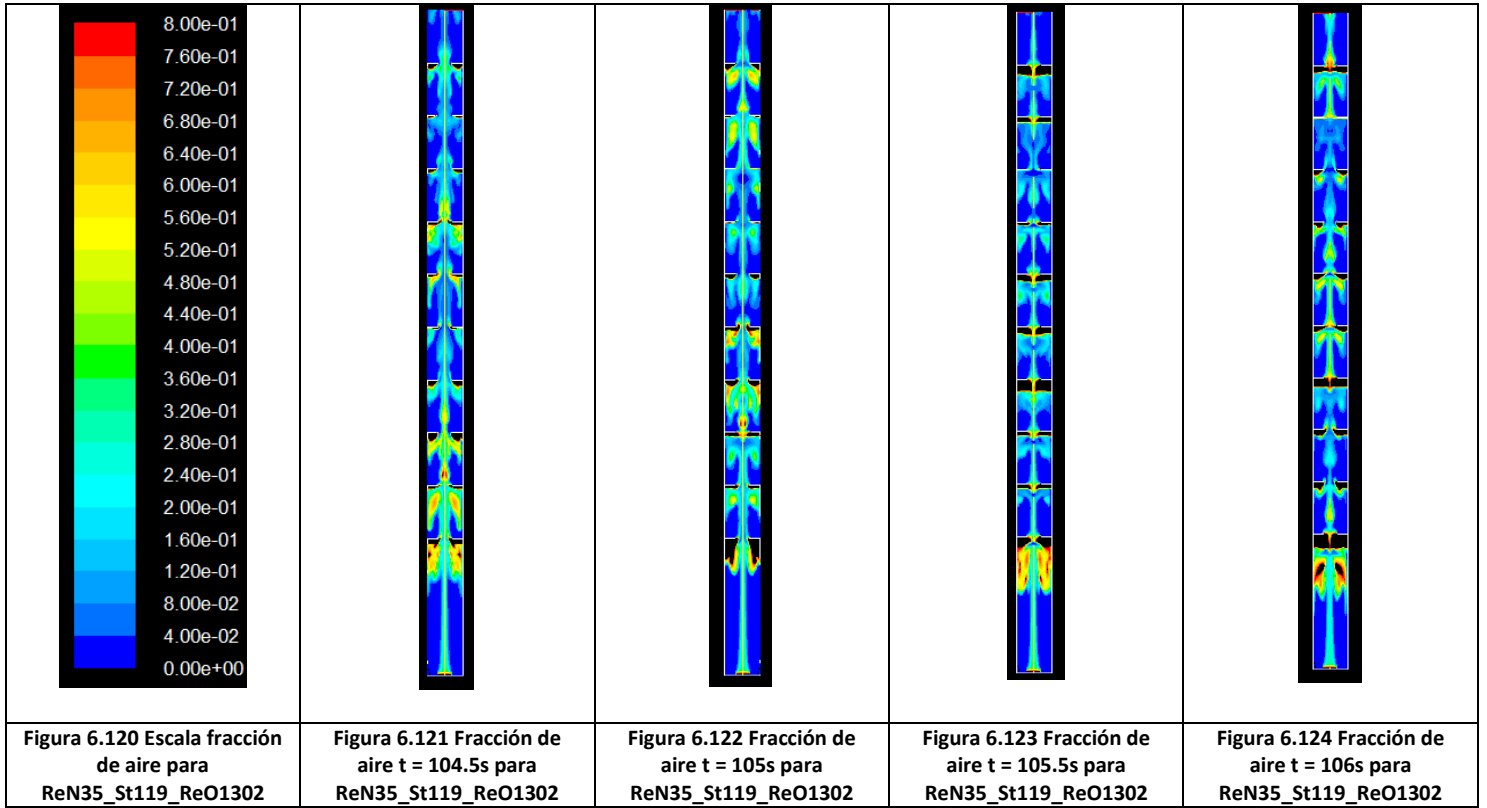


ReN35\_St080\_ReO7816

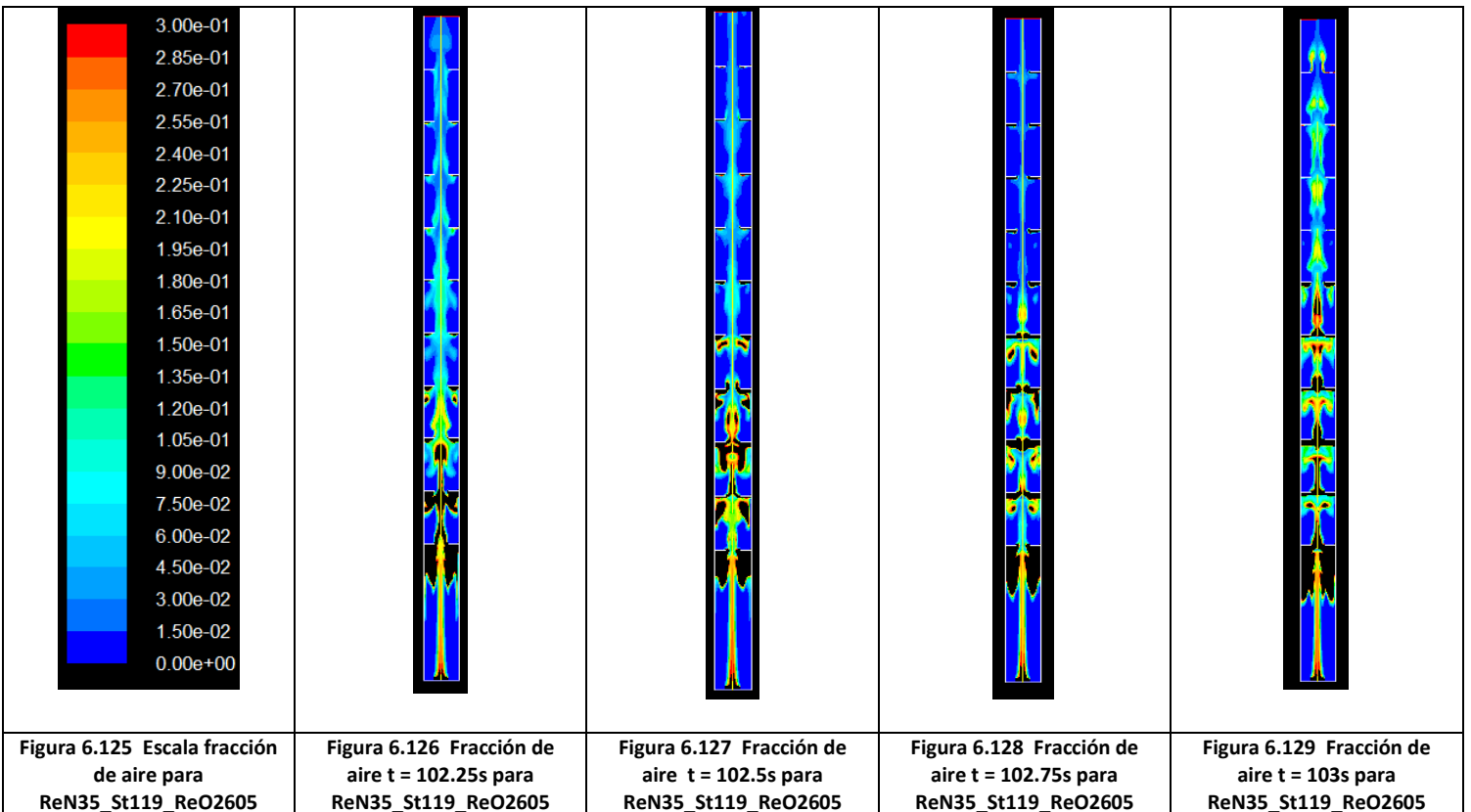


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN35\_St119\_ReO1302

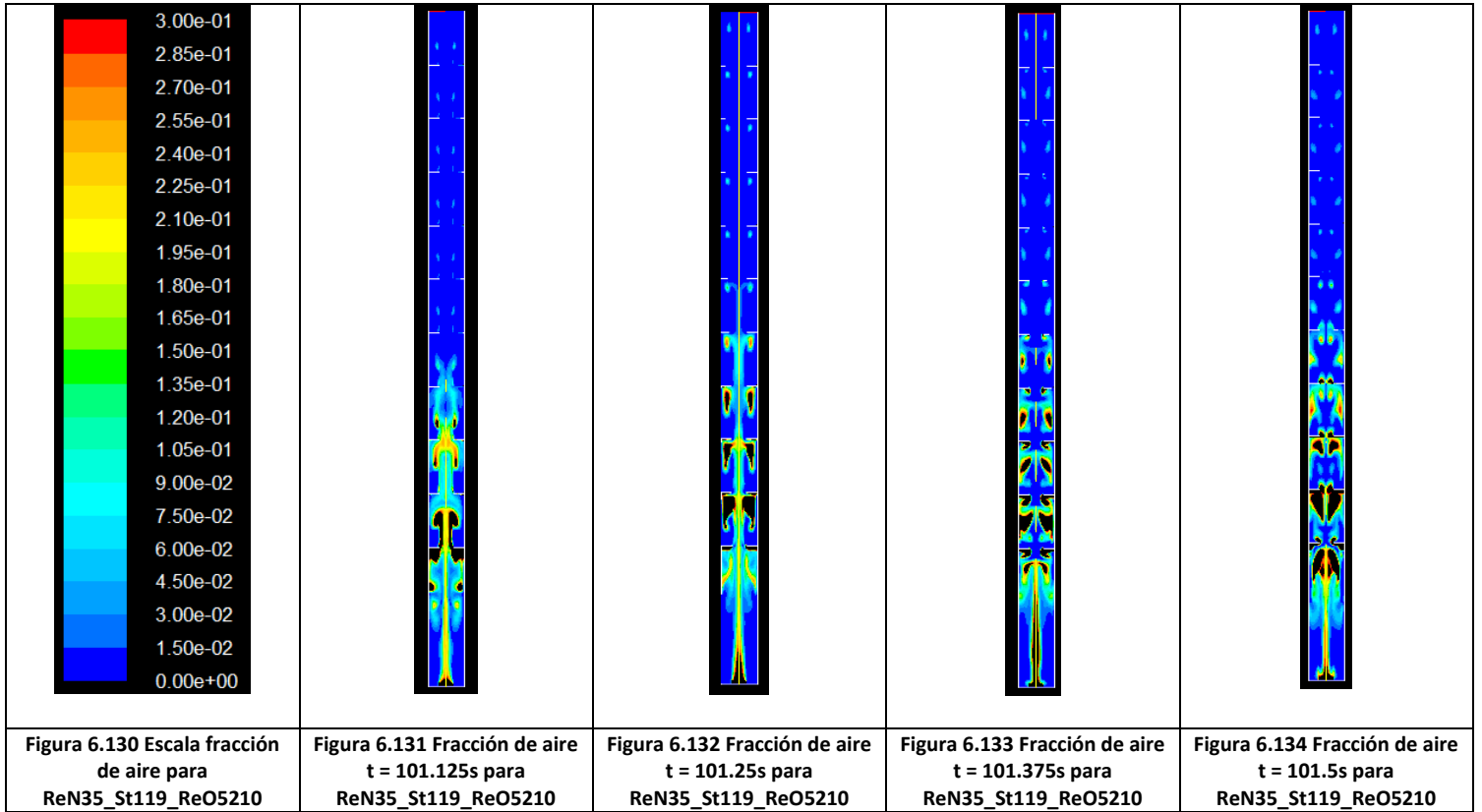


ReN35\_St119\_ReO2605

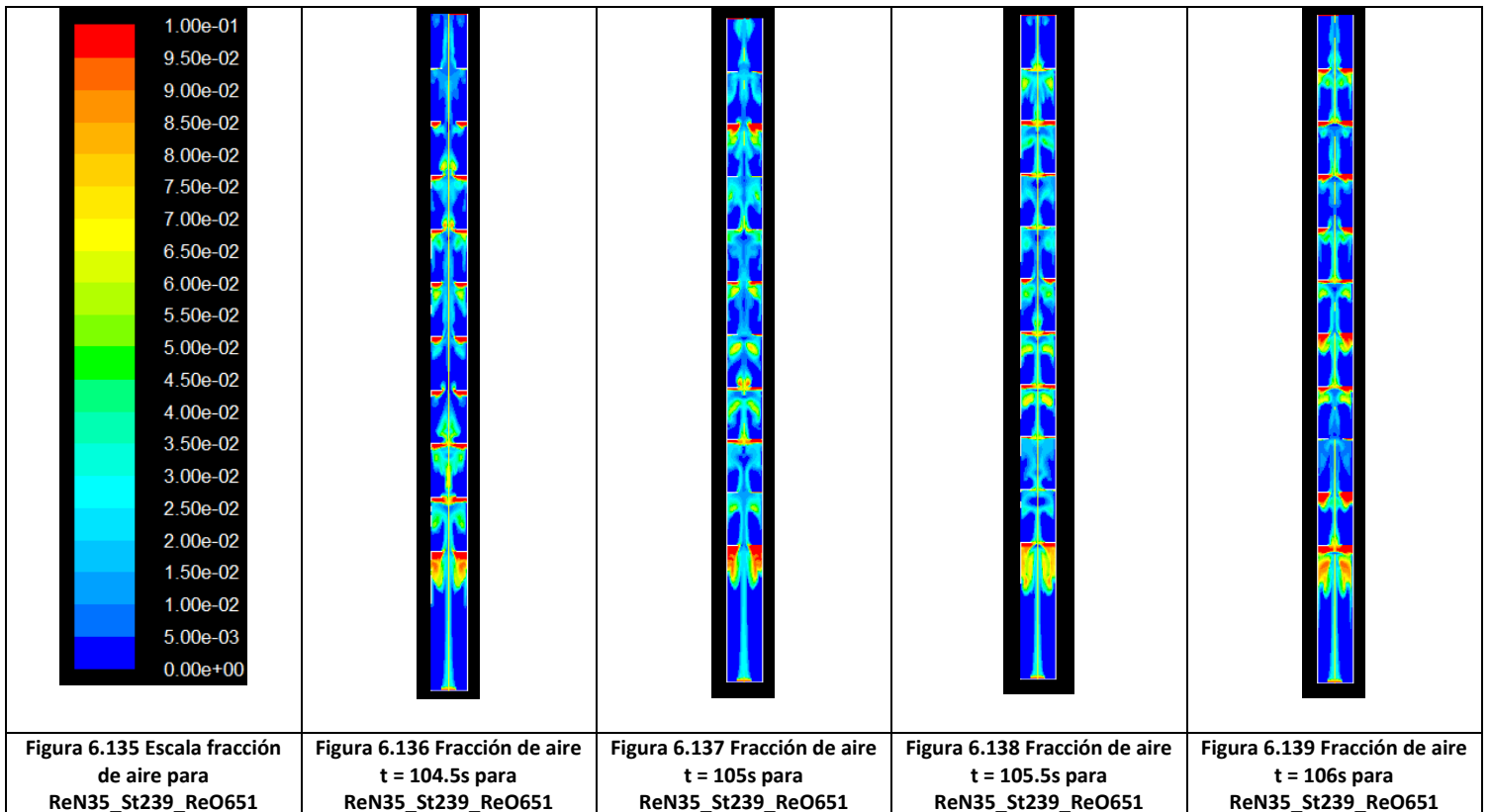


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN35\_St119\_ReO5210

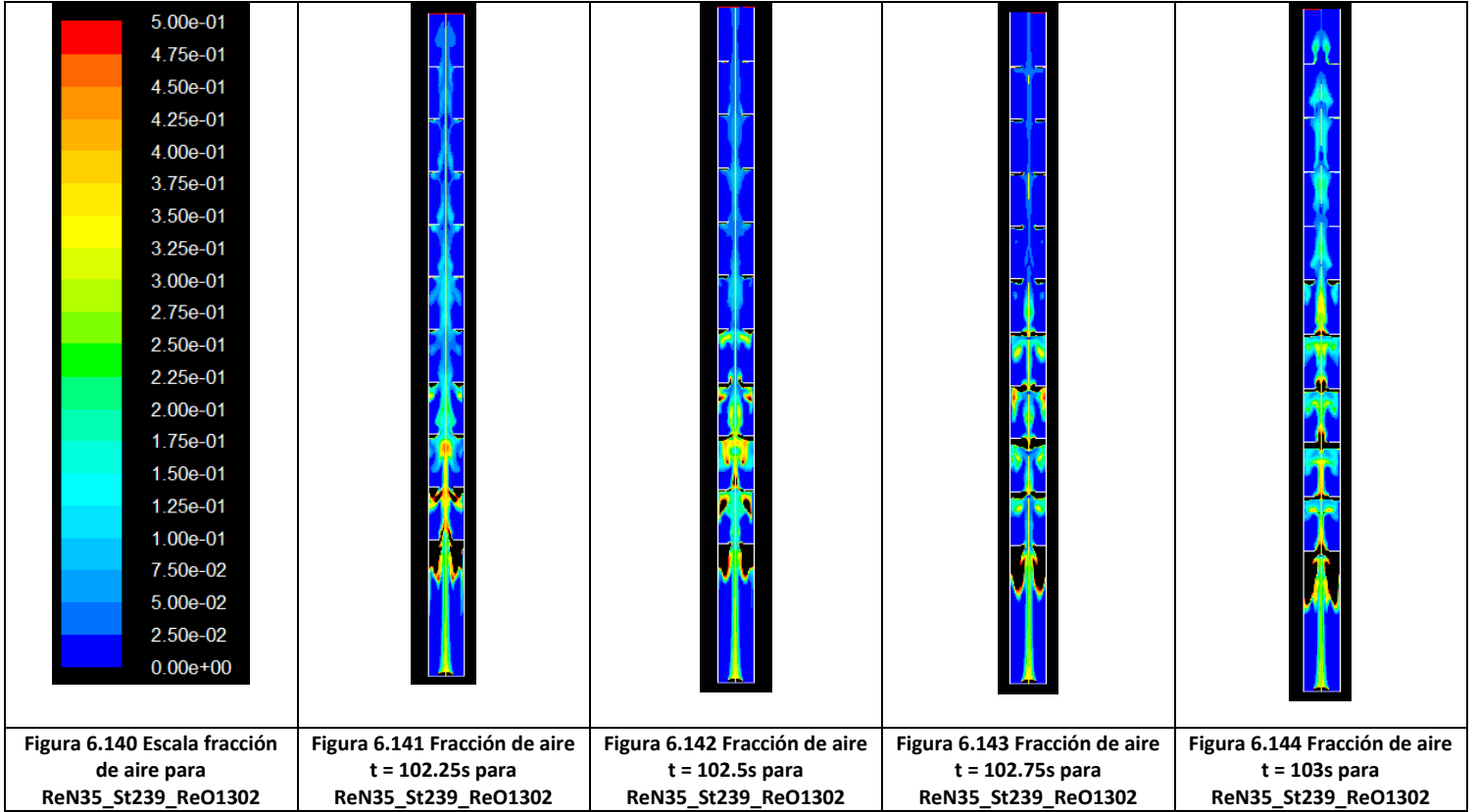


ReN35\_St239\_ReO651

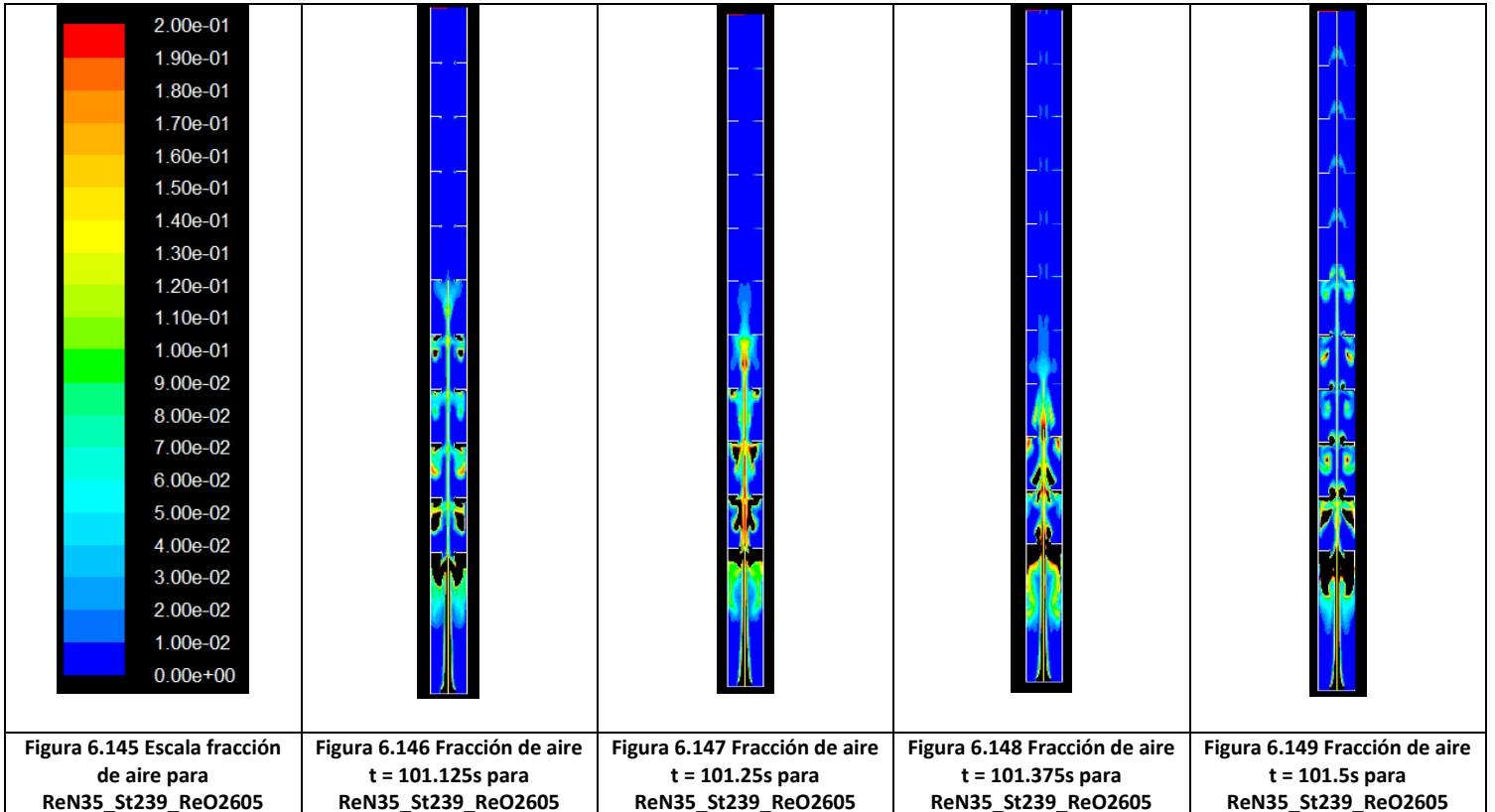


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN35\_St239\_ReO1302



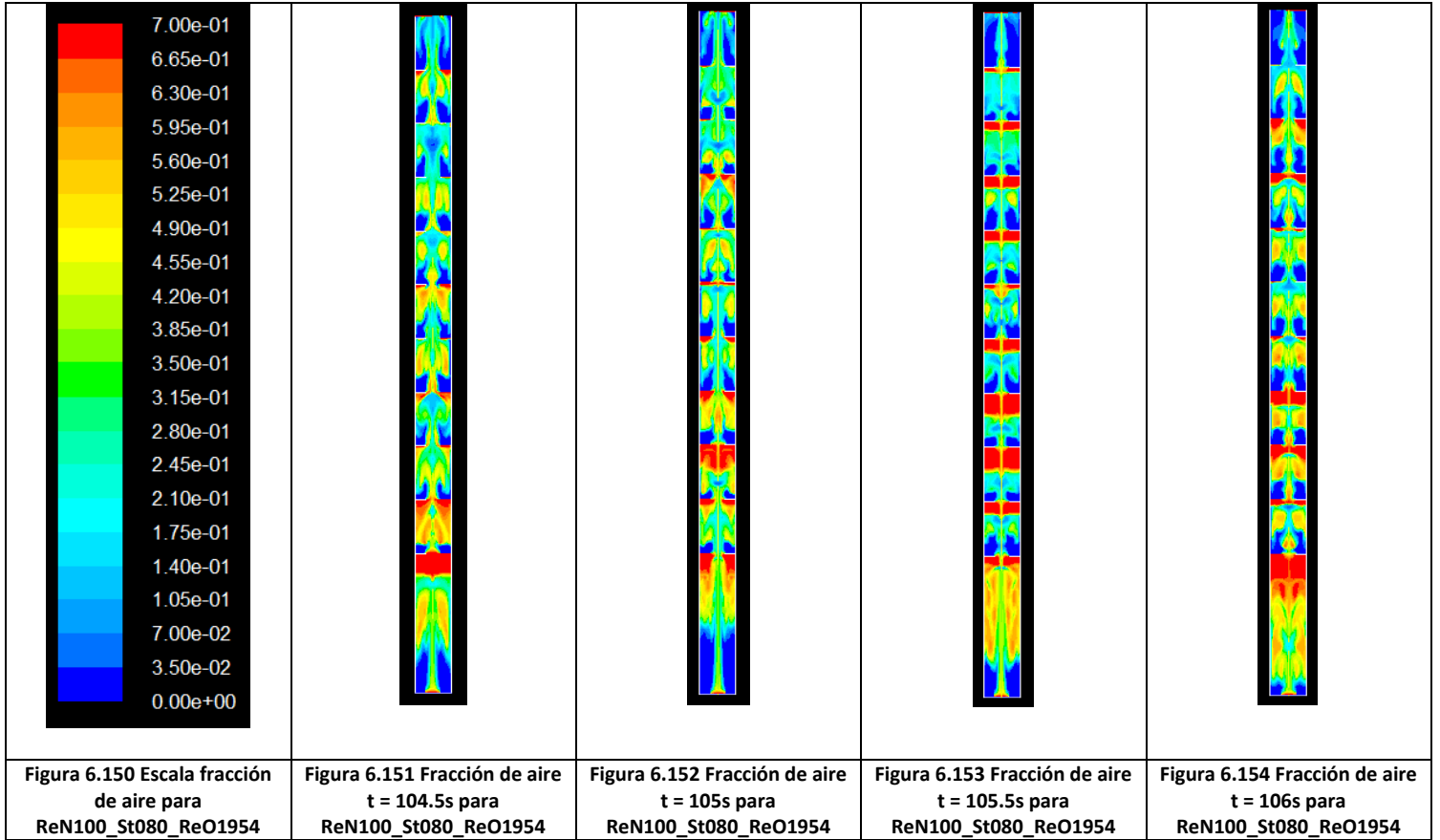
ReN35\_St239\_ReO2605





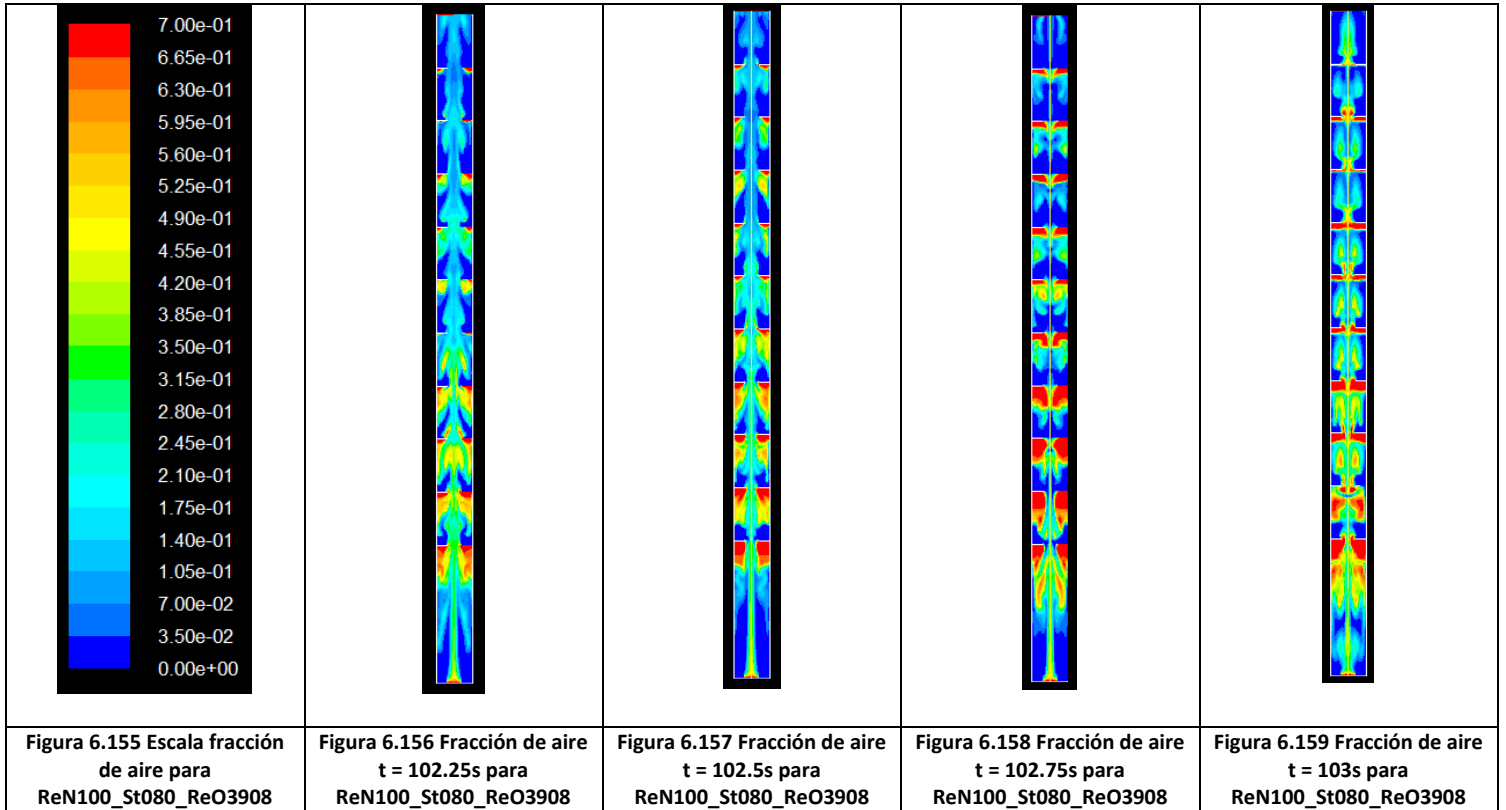
6.4.1.3 ReN100

ReN100\_St080\_ReO1954

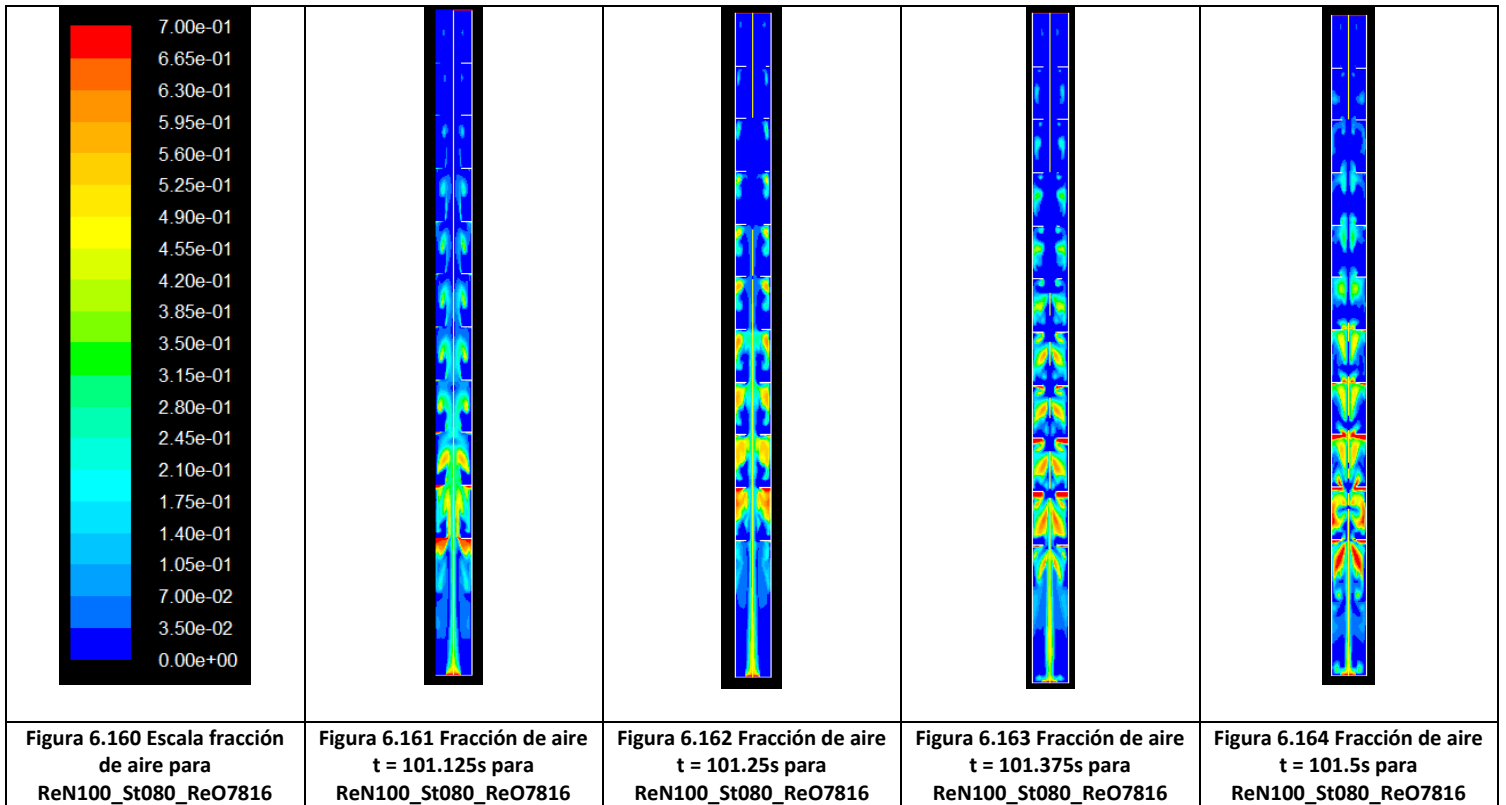


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN100\_St080\_ReO3908

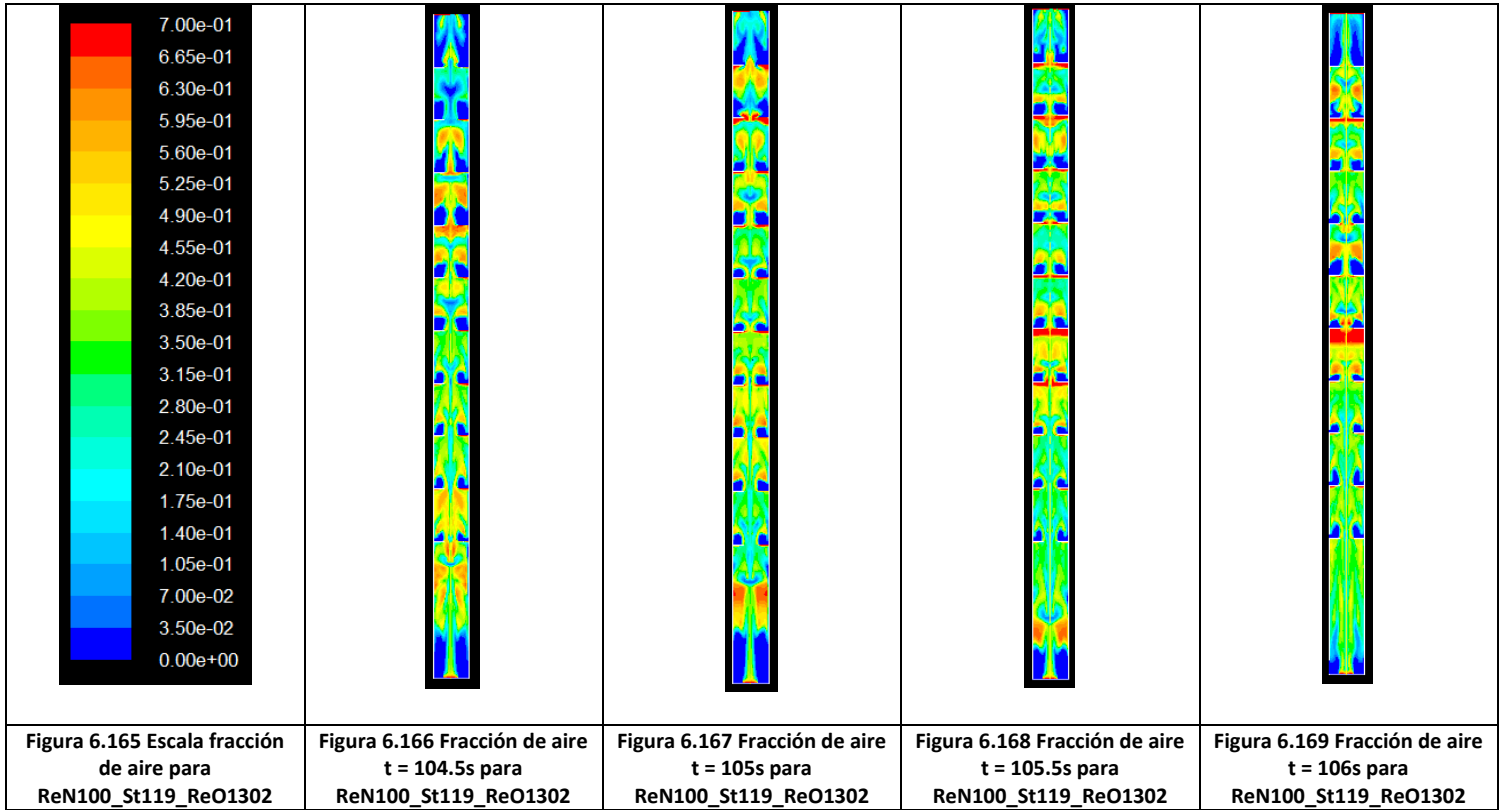


ReN100\_St080\_ReO7816

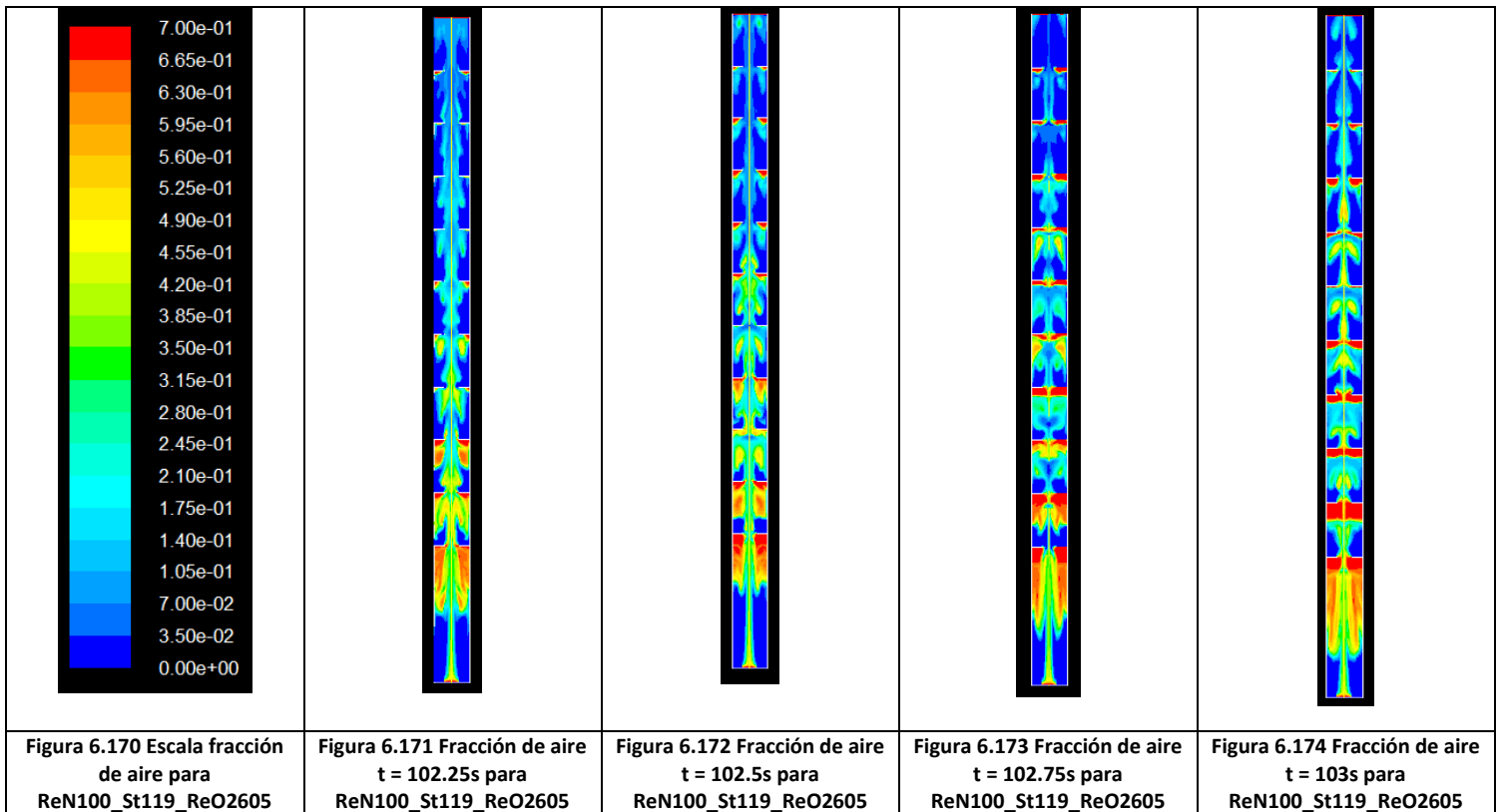


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN100\_St119\_ReO1302

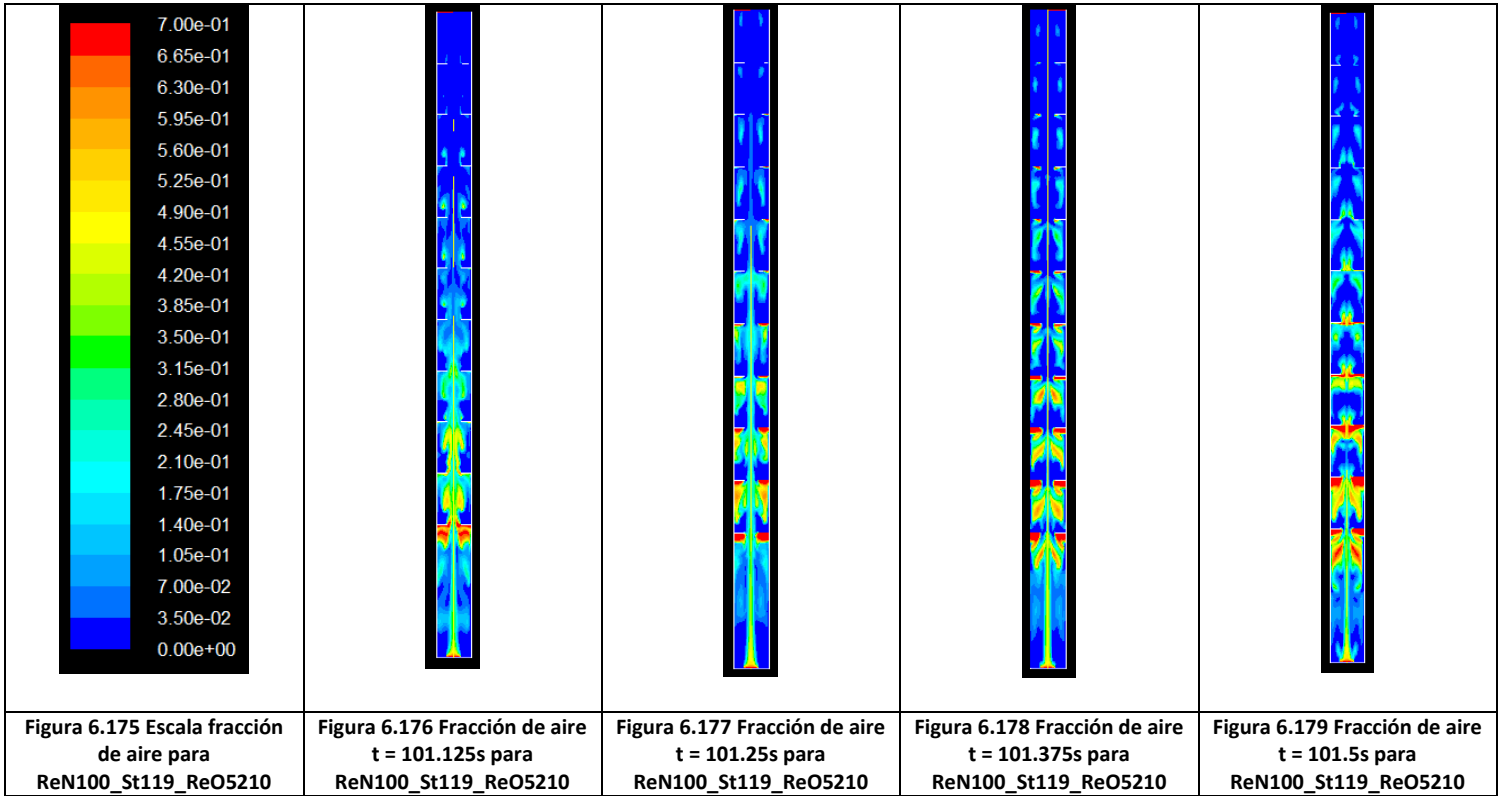


ReN100\_St119\_ReO2605

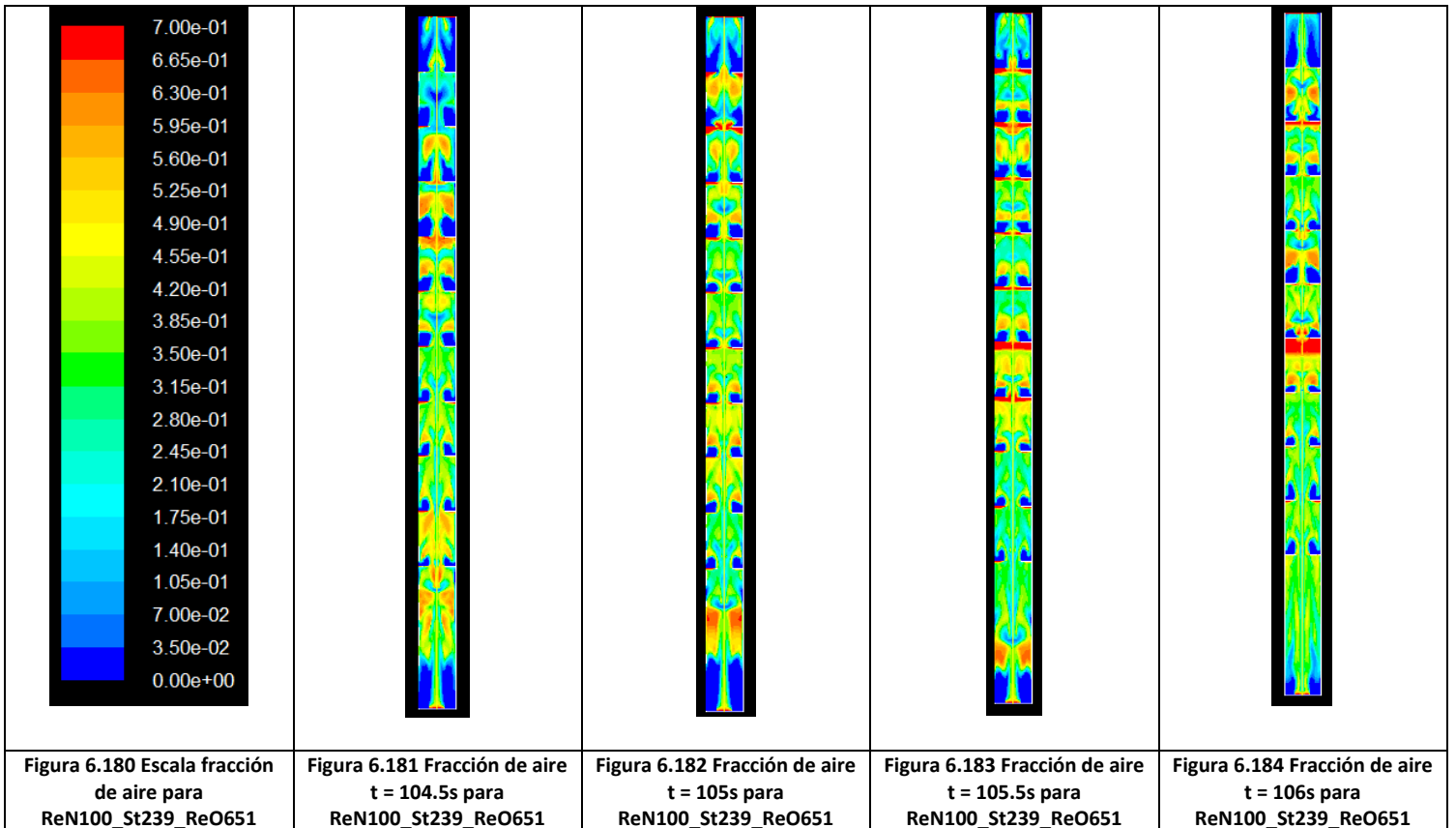


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN100\_St119\_ReO5210

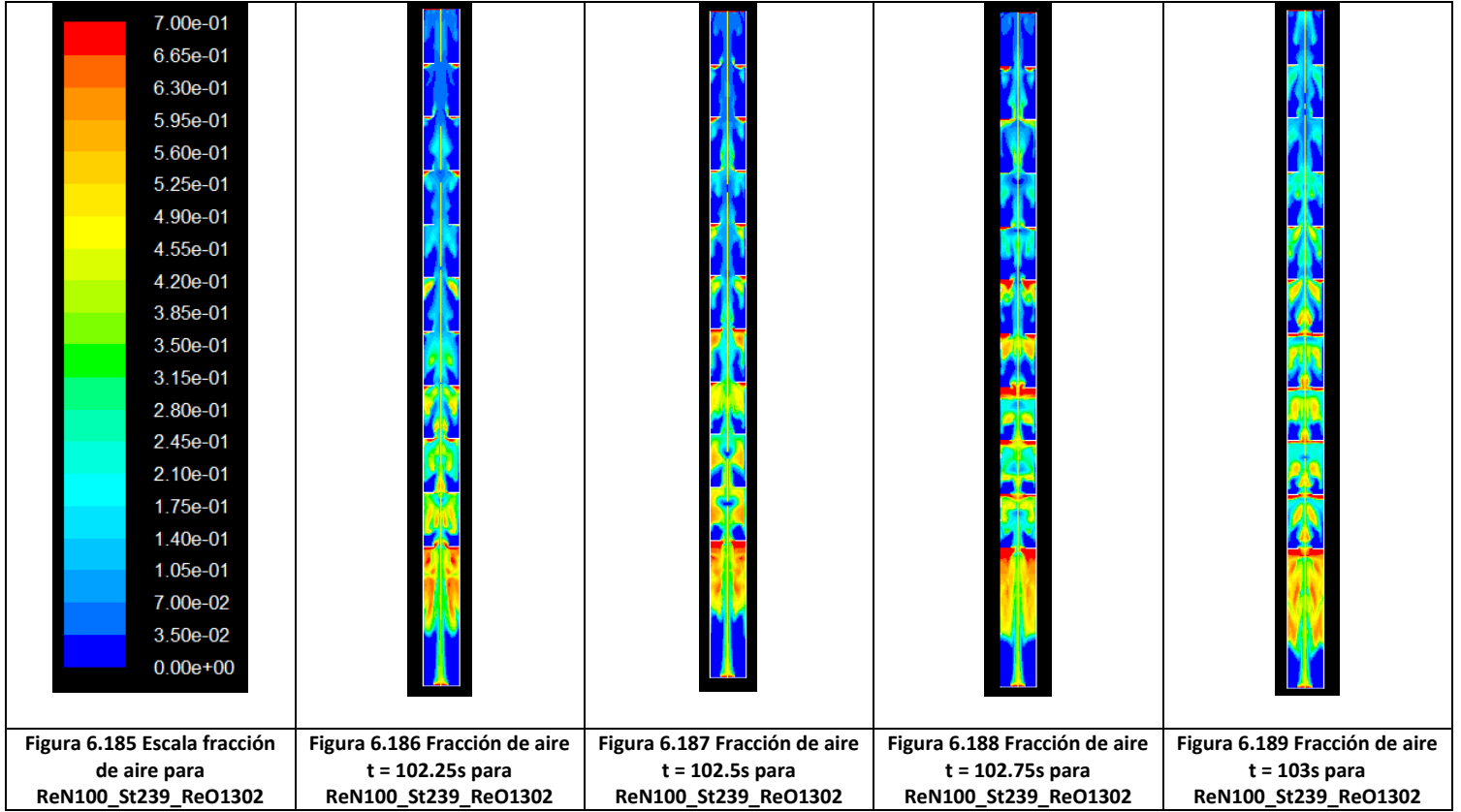


ReN100\_St239\_ReO651

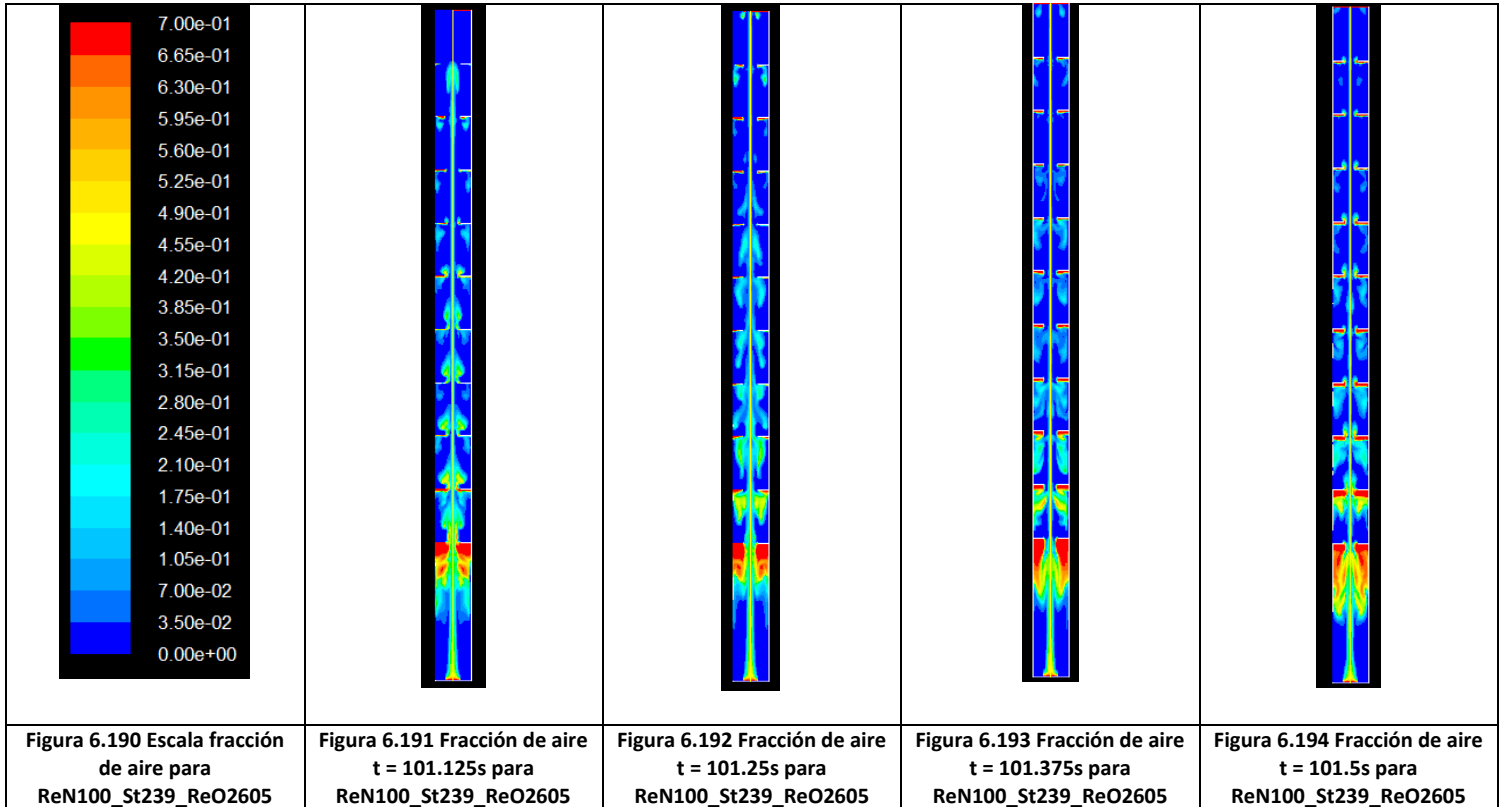


Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

✚ ReN100\_St239\_ReO1302



✚ ReN100\_St239\_ReO2605



## **6.4.2 Análisis de resultados**

Cabe destacar al comienzo de este análisis la gran diferencia en la distribución del aire a lo largo de la columna según el tiempo del oscilatorio en el que nos encontremos: para el caso en que la velocidad es máxima y positiva se consigue una mejor distribución de la fracción de aire pero cuando es negativa (tiempo de oscilación  $3\pi/2$ ) el aire se concentra en la parte inferior de la columna dejando los tanques superiores con una cantidad menor. Este hecho se acusa a mayor número de Reynolds oscilatorio, aunque es común para todos los casos.

Como podemos comprobar, para todos los casos de las simulaciones realizadas a medida que

### **6.4.2.1 Evolución de Reynolds Oscilatorio**

hemos aumentado el Reynolds oscilatorio la magnitud de la componente oscilatoria de la velocidad del agua es mayor y menos uniforme es la distribución de aire en la columna. Este hecho se acusa cuanto más relevancia tenga la componente oscilatoria, por lo que a menor velocidad neta (Reynolds neto), mayor será esta descompensación en la distribución de aire en la columna. (Figura 6.66)

### **6.4.2.2 Evolución de Strouhal**

La diferencia que salta a simple vista cuando variamos este número adimensional no tiene que ver en este caso con la distribución de aire de manera general, si no que nos podemos dar cuenta que a medida que aumenta este número adimensional el estancamiento de aire en los deflectores es menor.

### **6.4.2.3 Evolución de Reynolds neto**

De la misma manera que un mayor número de Reynolds oscilatorio provocaba una descompensación en la distribución de aire por tener mayor peso de la componente oscilatoria de la velocidad, si de la manera contraria, damos más peso a la componente neta, la distribución será más uniforme. Igualmente, cuanto menor sea el número de Reynolds oscilatorio mayor estabilidad tendremos (Figuras 6.181 a 6.184).

Concluimos por tanto, que de todas las simulaciones realizadas, en cuanto a análisis de distribución de aire se refiere, encontramos la solución óptima para mayor número de Reynolds neto, mayor número de Strouhal y menos número de Reynolds oscilatorio: ReN100\_St239\_ReO651 (Figuras 6.181 a 6.184).

## 6.5 Análisis balance de masas

Por último, vamos a realizar un pequeño estudio de los reportes del balance de masas como manera eficaz de comprobar los errores y la precisión asociada a las simulaciones realizadas.

Igual que ocurría en los anteriores apartados, habría que tener en cuenta los puntos más representativos a analizar y dado que contamos con un movimiento oscilatorio, no nos valdrá el análisis a un tiempo determinado, si no que habría que contar con los diferentes estados de la oscilación. Hemos de tener en cuenta, por tanto, la magnitud y sentido de esta velocidad para ver cómo afectan en el flujo neto resultado del balance.

Para ello, vamos a seguir la misma dinámica que para el análisis de los vectores de velocidad de agua y aire: aunque el alcance óptimo sería estudiar los 27 casos que hemos realizado las simulaciones para una correcta comparativa y establecimiento de una tendencia (si la hubiera), por extensión nos limitaremos al análisis de unos pocos, que serán los siguientes:

- Comparativa entre casos con diferente número de Reynolds oscilatorio. Para ello, fijaremos el mismo número de Reynolds neto y Strouhal y modificaremos el oscilatorio. Para esta ocasión hemos elegido ReN10\_St080\_ReO1954 y ReN10\_St080\_ReO3908.
- Comparativa entre casos con diferente número de Strouhal. Para ello, fijaremos el mismo número de Reynolds neto y frecuencia (Reynolds oscilatorio no es el mismo pues depende de  $x_0$  a su vez, como Strouhal) y modificaremos el Strouhal. Para esta ocasión hemos elegido ReN10\_St080\_ReO1954 y ReN10\_St119\_ReO1302.
- Comparativa entre casos con diferente número de Reynolds neto. Para ello, fijaremos el mismo número de Reynolds oscilatorio y Strouhal y modificaremos el neto. Para esta ocasión hemos elegido ReN10\_St080\_ReO1954 y ReN35\_St080\_ReO1954.

### 6.5.1 Recogida de datos balances de masa

Los balances para los momentos de máxima velocidad oscilatoria, mínima y nula, son los siguientes:

Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

6.5.1.1 Comparativa con distinto Reynolds oscilatorio

ReN10\_St080\_ReO1954

<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>1.6382776</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-1.6144334</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>0.023844965</td> </tr> </tbody> </table>	mixture Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	1.6382776	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-1.6144334	Net	0.023844965	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.5014896</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.51228987</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.010707946</td> </tr> </tbody> </table>	mixture Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	0.5014896	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-0.51228987	Net	-0.010707946	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0.63527751</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>0.56357724</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.071607951</td> </tr> </tbody> </table>	mixture Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0.63527751	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	0.56357724	Net	-0.071607951	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.50151057</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.45047564</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>0.051127249</td> </tr> </tbody> </table>	mixture Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	0.50151057	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-0.45047564	Net	0.051127249
mixture Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	1.6382776																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-1.6144334																																										
Net	0.023844965																																										
mixture Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	0.5014896																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-0.51228987																																										
Net	-0.010707946																																										
mixture Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0.63527751																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	0.56357724																																										
Net	-0.071607951																																										
mixture Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	0.50151057																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-0.45047564																																										
Net	0.051127249																																										
<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">water Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>1.6382776</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-1.6144334</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>0.023844226</td> </tr> </tbody> </table>	water Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	1.6382776	entrada_aire	-0	salida	-1.6144334	Net	0.023844226	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">water Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.5014896</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.51221071</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.010721103</td> </tr> </tbody> </table>	water Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	0.5014896	entrada_aire	-0	salida	-0.51221071	Net	-0.010721103	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">water Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0.63527751</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>0.56358157</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.071695937</td> </tr> </tbody> </table>	water Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0.63527751	entrada_aire	-0	salida	0.56358157	Net	-0.071695937	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">water Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.50151057</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.4503205</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>0.051190074</td> </tr> </tbody> </table>	water Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	0.50151057	entrada_aire	-0	salida	-0.4503205	Net	0.051190074
water Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	1.6382776																																										
entrada_aire	-0																																										
salida	-1.6144334																																										
Net	0.023844226																																										
water Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	0.5014896																																										
entrada_aire	-0																																										
salida	-0.51221071																																										
Net	-0.010721103																																										
water Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0.63527751																																										
entrada_aire	-0																																										
salida	0.56358157																																										
Net	-0.071695937																																										
water Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	0.50151057																																										
entrada_aire	-0																																										
salida	-0.4503205																																										
Net	0.051190074																																										
<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">air Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.00012157815</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-2.9261343e-05</td> </tr> </tbody> </table>	air Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-0.00012157815	Net	-2.9261343e-05	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">air Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-7.9159615e-05</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>1.315719e-05</td> </tr> </tbody> </table>	air Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-7.9159615e-05	Net	1.315719e-05	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">air Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-4.3308756e-06</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>8.798593e-05</td> </tr> </tbody> </table>	air Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-4.3308756e-06	Net	8.798593e-05	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">air Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.00015514171</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-6.2824904e-05</td> </tr> </tbody> </table>	air Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-0.00015514171	Net	-6.2824904e-05
air Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-0.00012157815																																										
Net	-2.9261343e-05																																										
air Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-7.9159615e-05																																										
Net	1.315719e-05																																										
air Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-4.3308756e-06																																										
Net	8.798593e-05																																										
air Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-0.00015514171																																										
Net	-6.2824904e-05																																										
<p>Figura 6.195 Balance de masas t=104.5s ReN10_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.196 Balance de masas t=105s para ReN10_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.197 Balance de masas t=105.5s ReN10_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.198 Balance de masas t=106s para ReN10_St080_ReO1954</p>																																								

ReN10\_St080\_ReO3908

<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>1.1417925</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-1.2155864</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.073701488</td> </tr> </tbody> </table>	mixture Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	1.1417925	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-1.2155864	Net	-0.073701488	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.0049946276</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.079738898</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.074651953</td> </tr> </tbody> </table>	mixture Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	0.0049946276	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-0.079738898	Net	-0.074651953	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-1.1317625</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>1.0565782</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.075092025</td> </tr> </tbody> </table>	mixture Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-1.1317625	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	1.0565782	Net	-0.075092025	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.0050354728</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.079660169</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.074532379</td> </tr> </tbody> </table>	mixture Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	0.0050354728	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-0.079660169	Net	-0.074532379
mixture Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	1.1417925																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-1.2155864																																										
Net	-0.073701488																																										
mixture Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	0.0049946276																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-0.079738898																																										
Net	-0.074651953																																										
mixture Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-1.1317625																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	1.0565782																																										
Net	-0.075092025																																										
mixture Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	0.0050354728																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-0.079660169																																										
Net	-0.074532379																																										
<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">water Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>1.1417925</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-1.2155846</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.073792046</td> </tr> </tbody> </table>	water Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	1.1417925	entrada_aire	-0	salida	-1.2155846	Net	-0.073792046	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">water Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.0049946276</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.079738307</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.074743679</td> </tr> </tbody> </table>	water Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	0.0049946276	entrada_aire	-0	salida	-0.079738307	Net	-0.074743679	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">water Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-1.1317625</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>1.0565783</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.075184292</td> </tr> </tbody> </table>	water Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-1.1317625	entrada_aire	-0	salida	1.0565783	Net	-0.075184292	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">water Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.0050354728</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.079659431</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.074623958</td> </tr> </tbody> </table>	water Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	0.0050354728	entrada_aire	-0	salida	-0.079659431	Net	-0.074623958
water Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	1.1417925																																										
entrada_aire	-0																																										
salida	-1.2155846																																										
Net	-0.073792046																																										
water Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	0.0049946276																																										
entrada_aire	-0																																										
salida	-0.079738307																																										
Net	-0.074743679																																										
water Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-1.1317625																																										
entrada_aire	-0																																										
salida	1.0565783																																										
Net	-0.075184292																																										
water Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	0.0050354728																																										
entrada_aire	-0																																										
salida	-0.079659431																																										
Net	-0.074623958																																										
<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">air Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-1.7585481e-06</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>9.0558257e-05</td> </tr> </tbody> </table>	air Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-1.7585481e-06	Net	9.0558257e-05	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">air Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-5.9061176e-07</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>9.1726194e-05</td> </tr> </tbody> </table>	air Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-5.9061176e-07	Net	9.1726194e-05	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">air Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-4.9962814e-08</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>9.2266843e-05</td> </tr> </tbody> </table>	air Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-4.9962814e-08	Net	9.2266843e-05	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">air Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-7.3761312e-07</td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>9.1579192e-05</td> </tr> </tbody> </table>	air Mass Flow Rate (kg/s)		entrada_agua	-0	entrada_aire	9.2316805e-05	salida	-7.3761312e-07	Net	9.1579192e-05
air Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-1.7585481e-06																																										
Net	9.0558257e-05																																										
air Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-5.9061176e-07																																										
Net	9.1726194e-05																																										
air Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-4.9962814e-08																																										
Net	9.2266843e-05																																										
air Mass Flow Rate (kg/s)																																											
entrada_agua	-0																																										
entrada_aire	9.2316805e-05																																										
salida	-7.3761312e-07																																										
Net	9.1579192e-05																																										
<p>Figura 6.199 Balance de masas t=102.25s ReN10_St080_ReO3908</p>	<p>Figura 6.200 Balance de masas t=102.5s ReN10_St080_ReO3908</p>	<p>Figura 6.201 Balance de masas t=102.75s ReN10_St080_ReO3908</p>	<p>Figura 6.202 Balance de masas t=103s para ReN10_St080_ReO3908</p>																																								

6.5.1.2 Comparativa con distinto Strouhal

ReN10\_St080\_ReO1954

Ya analizado en el apartado anterior



Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

ReN10\_St119\_ReO1302

<p>mixture Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.38394085 entrada_aire 9.2316805e-05 salida -0.42476251</p> <p>Net -0.040729348</p> <p>water Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.38394085 entrada_aire 0 salida -0.42476251</p> <p>Net -0.040729348</p> <p>air Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0 entrada_aire 9.2316805e-05 salida -4.227204e-05</p> <p>Net 5.0044766e-05</p>	<p>mixture Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.0050115222 entrada_aire 9.2316805e-05 salida -0.041318347</p> <p>Net -0.036214508</p> <p>water Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.0050115222 entrada_aire -0 salida -0.041270528</p> <p>Net -0.036259085</p> <p>air Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0 entrada_aire 9.2316805e-05 salida -4.7819048e-05</p> <p>Net 4.4497758e-05</p>	<p>mixture Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0.37391085 entrada_aire 9.2316805e-05 salida 0.33097196</p> <p>Net -0.042846576</p> <p>water Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0.37391085 entrada_aire -0 salida 0.33101163</p> <p>Net -0.042899222</p> <p>air Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0 entrada_aire 9.2316805e-05 salida -3.9670468e-05</p> <p>Net 5.2646338e-05</p>	<p>mixture Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.005018512 entrada_aire 9.2316805e-05 salida -0.064810234</p> <p>Net -0.059699406</p> <p>water Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.005018512 entrada_aire -0 salida -0.064791271</p> <p>Net -0.059772759</p> <p>air Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0 entrada_aire 9.2316805e-05 salida -1.8963346e-05</p> <p>Net 7.3353459e-05</p>
<p>Figura 6.203 Balance de masas t = 104.5s ReN10_St119_ReO1302</p>	<p>Figura 6.204 Balance de masas t = 105s para ReN10_St119_ReO1302</p>	<p>Figura 6.205 Balance de masas t=105.5s ReN10_St119_ReO1302</p>	<p>Figura 6.206 Balance de masas t=106s para ReN10_St119_ReO1302</p>

6.5.1.3 Comparativa con distinto Reynolds neto

ReN10\_St080\_ReO1954

Ya analizado en el apartado anterior

ReN100\_St080\_ReO1954

<p>mixture Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.61849535 entrada_aire 0.00092316799 salida -0.69365104</p> <p>Net -0.074232517</p> <p>water Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.61849535 entrada_aire -0 salida -0.69282077</p> <p>Net -0.074325413</p> <p>air Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0 entrada_aire 0.00092316799 salida -0.00083027239</p> <p>Net 9.2895603e-05</p>	<p>mixture Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.050102853 entrada_aire 0.00092316799 salida -0.07004128</p> <p>Net -0.019018107</p> <p>water Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.050102853 entrada_aire -0 salida -0.069172732</p> <p>Net -0.019069879</p> <p>air Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0 entrada_aire 0.00092316799 salida -0.0008713965</p> <p>Net 5.1771489e-05</p>	<p>mixture Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0.51828219 entrada_aire 0.00092316799 salida 0.15266123</p> <p>Net -0.3646978</p> <p>water Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0.51828219 entrada_aire -0 salida 0.15316169</p> <p>Net -0.36512051</p> <p>air Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0 entrada_aire 0.00092316799 salida -0.00050046047</p> <p>Net 0.00042270752</p>	<p>mixture Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.050110356 entrada_aire 0.00092316799 salida -0.19543332</p> <p>Net -0.1443998</p> <p>water Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua 0.050110356 entrada_aire -0 salida -0.19468758</p> <p>Net -0.14457723</p> <p>air Mass Flow Rate (kg/s)</p> <p>entrada_agua -0 entrada_aire 0.00092316799 salida -0.00074574165</p> <p>Net 0.00017742634</p>
<p>Figura 6.207 Balance de masas t = 104.5s ReN100_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.208 Balance de masas t = 105s para ReN100_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.209 Balance de masas t = 105.5s ReN100_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.210 Balance de masas t = 106s para ReN100_St080_ReO1954</p>

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

**6.5.1.4 Análisis balance de masas**

Para los anteriores datos, los porcentajes de error de los fluidos respecto a la entrada del caso más desfavorable (para tiempo de oscilación  $2\pi$ ), son:

	ReN10_St080_ReO1954	ReN10_St080_ReO3908	ReN10_St119_ReO1302	ReN100_St080_1954
Error aire	68,05%	99,20%	79,46%	19,22%
Error agua	10,21%	6,75%	91,93%	34,66%
Error total	10,19%	6,88%	8,56%	5,65%

**Tabla 6.6 Porcentajes de error de balance de masas por simulaciones representativas realizadas**

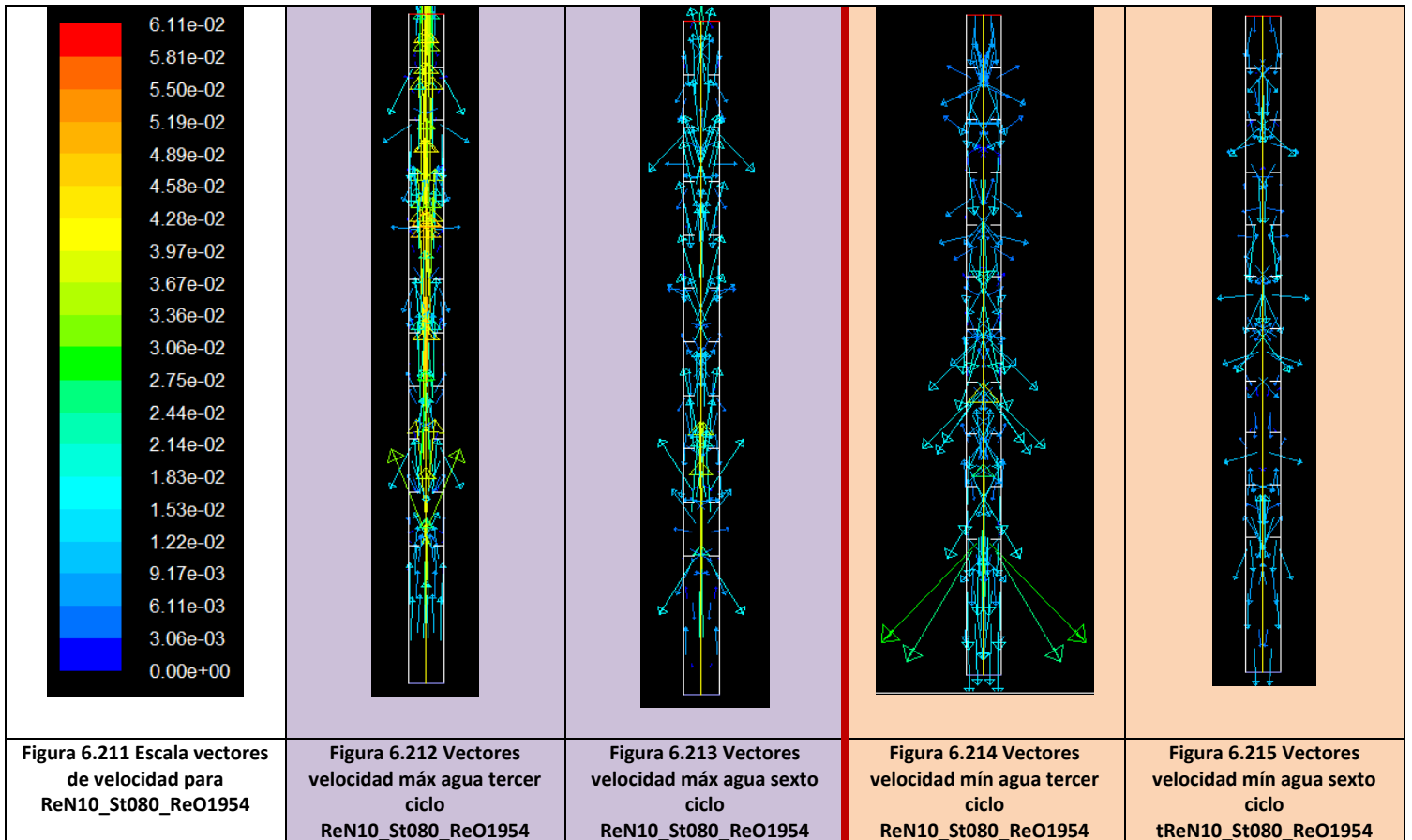
Como podemos comprobar los porcentajes de error son bastante altos y es mucho más acusado para el caso del aire. Con estos datos de las simulaciones no podemos establecer ninguna tendencia y tendríamos que seguir analizando resultados además de nuevas simulaciones para ajustar el error obtenido.

## 6.6 Aumento temporal del análisis

Como último objetivo, nos proponemos comprobar si, aunque hayamos realizado los análisis para el tercer ciclo de oscilación (independientemente del movimiento) debido a la falta de capacidad de procesamiento de los equipos disponibles, habríamos conseguido unos resultados diferentes para ciclos más largos, de manera que la solución se estabilice aún más. Para comprobarlo, hemos realizado las simulaciones en tres de los casos con doble tiempo de simulación, con lo cual los siguientes estudios están realizados para el ciclo 6 de cada caso.

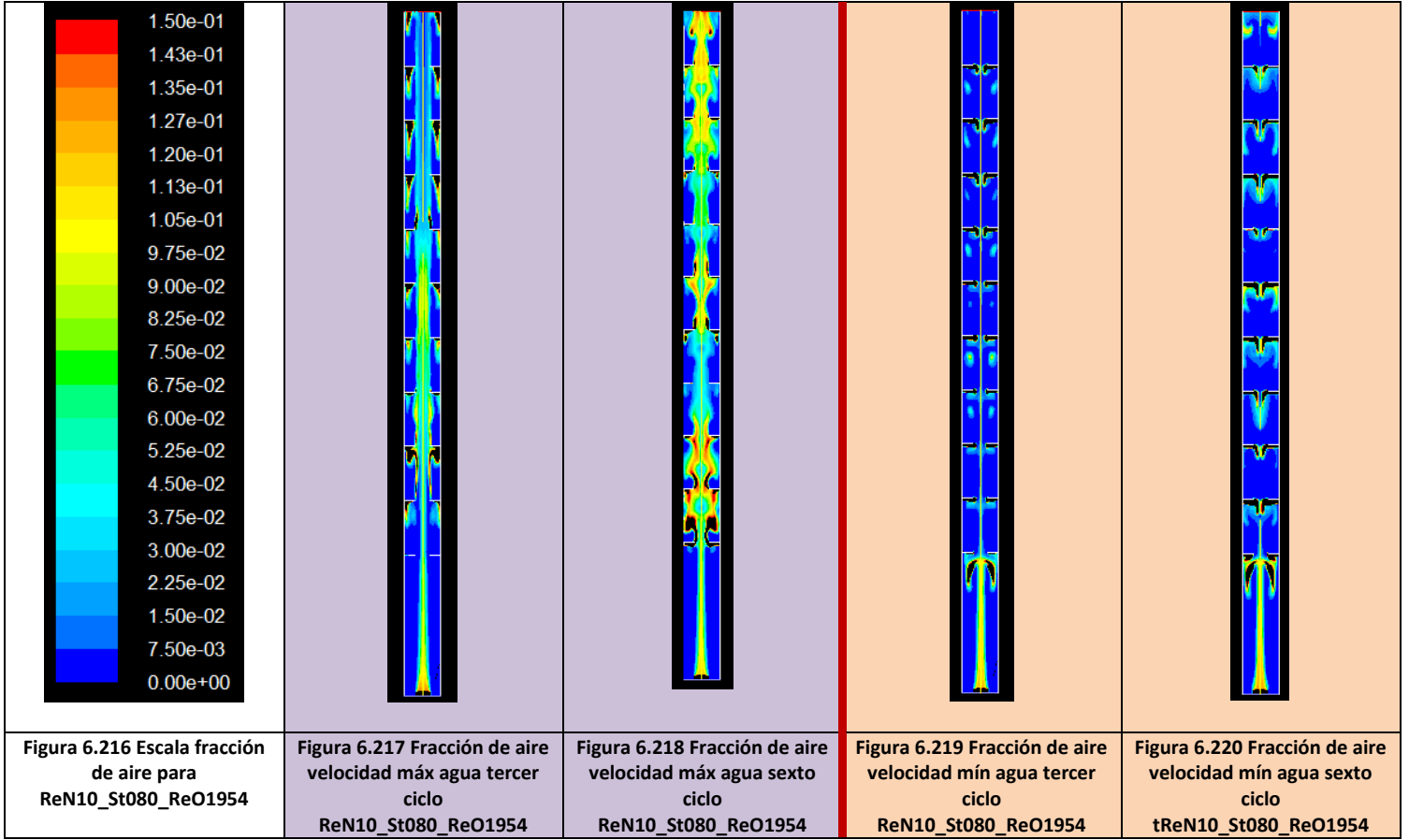
### 6.6.1 ReN10\_St080\_Re01954

#### Comparativa entre vectores de velocidad de agua



Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

Comparativa entre fracción volumétrica de aire

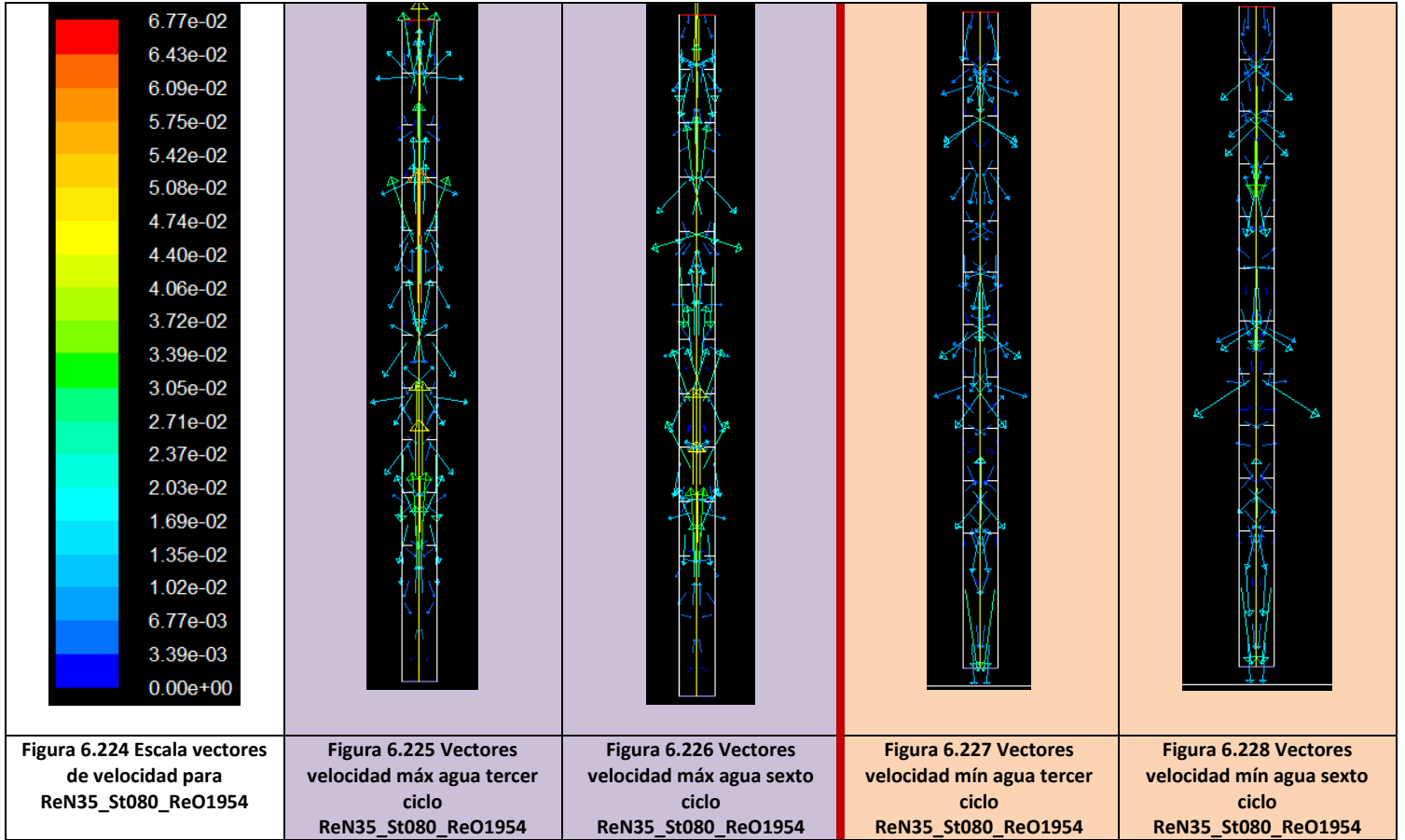


Comparativa entre balance de masas

<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>1.6382776</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-1.6144334</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>0.023814965</td> <td></td> </tr> <tr> <th colspan="2">water</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>1.6382776</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-1.6144334</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>0.023844226</td> <td></td> </tr> <tr> <th colspan="2">air</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.00012157815</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-2.9261343e-05</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	mixture		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	1.6382776		entrada_aire	9.2316805e-05		salida	-1.6144334		Net	0.023814965		water		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	1.6382776		entrada_aire	-0		salida	-1.6144334		Net	0.023844226		air		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	-0		entrada_aire	9.2316805e-05		salida	-0.00012157815		Net	-2.9261343e-05		<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.57340377</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.43924611</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>0.13424998</td> <td></td> </tr> <tr> <th colspan="2">water</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>0.57340377</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.43898884</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>0.13441494</td> <td></td> </tr> <tr> <th colspan="2">air</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-0.00025726909</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.00016495229</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	mixture		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	0.57340377		entrada_aire	9.2316805e-05		salida	-0.43924611		Net	0.13424998		water		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	0.57340377		entrada_aire	-0		salida	-0.43898884		Net	0.13441494		air		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	-0		entrada_aire	9.2316805e-05		salida	-0.00025726909		Net	-0.00016495229		<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0.63527751</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>0.56357724</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.071607951</td> <td></td> </tr> <tr> <th colspan="2">water</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0.63527751</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>0.56358157</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.071695937</td> <td></td> </tr> <tr> <th colspan="2">air</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-4.3308756e-06</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>8.798593e-05</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	mixture		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	-0.63527751		entrada_aire	9.2316805e-05		salida	0.56357724		Net	-0.071607951		water		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	-0.63527751		entrada_aire	-0		salida	0.56358157		Net	-0.071695937		air		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	-0		entrada_aire	9.2316805e-05		salida	-4.3308756e-06		Net	8.798593e-05		<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="2">mixture</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0.56337377</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>0.50976512</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.053516333</td> <td></td> </tr> <tr> <th colspan="2">water</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0.56337377</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>-0</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>0.50979168</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>-0.053582091</td> <td></td> </tr> <tr> <th colspan="2">air</th> <th>Mass Flow Rate (kg/s)</th> </tr> <tr> <td>entrada_agua</td> <td>-0</td> <td></td> </tr> <tr> <td>entrada_aire</td> <td>9.2316805e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>salida</td> <td>-2.6559272e-05</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Net</td> <td>6.5757533e-05</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	mixture		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	-0.56337377		entrada_aire	9.2316805e-05		salida	0.50976512		Net	-0.053516333		water		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	-0.56337377		entrada_aire	-0		salida	0.50979168		Net	-0.053582091		air		Mass Flow Rate (kg/s)	entrada_agua	-0		entrada_aire	9.2316805e-05		salida	-2.6559272e-05		Net	6.5757533e-05	
mixture		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	1.6382776																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	9.2316805e-05																																																																																																																																																																																						
salida	-1.6144334																																																																																																																																																																																						
Net	0.023814965																																																																																																																																																																																						
water		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	1.6382776																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	-0																																																																																																																																																																																						
salida	-1.6144334																																																																																																																																																																																						
Net	0.023844226																																																																																																																																																																																						
air		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	-0																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	9.2316805e-05																																																																																																																																																																																						
salida	-0.00012157815																																																																																																																																																																																						
Net	-2.9261343e-05																																																																																																																																																																																						
mixture		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	0.57340377																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	9.2316805e-05																																																																																																																																																																																						
salida	-0.43924611																																																																																																																																																																																						
Net	0.13424998																																																																																																																																																																																						
water		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	0.57340377																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	-0																																																																																																																																																																																						
salida	-0.43898884																																																																																																																																																																																						
Net	0.13441494																																																																																																																																																																																						
air		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	-0																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	9.2316805e-05																																																																																																																																																																																						
salida	-0.00025726909																																																																																																																																																																																						
Net	-0.00016495229																																																																																																																																																																																						
mixture		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	-0.63527751																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	9.2316805e-05																																																																																																																																																																																						
salida	0.56357724																																																																																																																																																																																						
Net	-0.071607951																																																																																																																																																																																						
water		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	-0.63527751																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	-0																																																																																																																																																																																						
salida	0.56358157																																																																																																																																																																																						
Net	-0.071695937																																																																																																																																																																																						
air		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	-0																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	9.2316805e-05																																																																																																																																																																																						
salida	-4.3308756e-06																																																																																																																																																																																						
Net	8.798593e-05																																																																																																																																																																																						
mixture		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	-0.56337377																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	9.2316805e-05																																																																																																																																																																																						
salida	0.50976512																																																																																																																																																																																						
Net	-0.053516333																																																																																																																																																																																						
water		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	-0.56337377																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	-0																																																																																																																																																																																						
salida	0.50979168																																																																																																																																																																																						
Net	-0.053582091																																																																																																																																																																																						
air		Mass Flow Rate (kg/s)																																																																																																																																																																																					
entrada_agua	-0																																																																																																																																																																																						
entrada_aire	9.2316805e-05																																																																																																																																																																																						
salida	-2.6559272e-05																																																																																																																																																																																						
Net	6.5757533e-05																																																																																																																																																																																						
<p>Figura 6.221 Balance de masas velocidad máx agua tercer ciclo ReN10_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.221 Balance de masas velocidad máx agua sexto ciclo ReN10_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.222 Balance de masas velocidad mín agua tercer ciclo ReN10_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.223 Balance de masas velocidad mín agua sexto ciclo tReN10_St080_ReO1954</p>																																																																																																																																																																																				

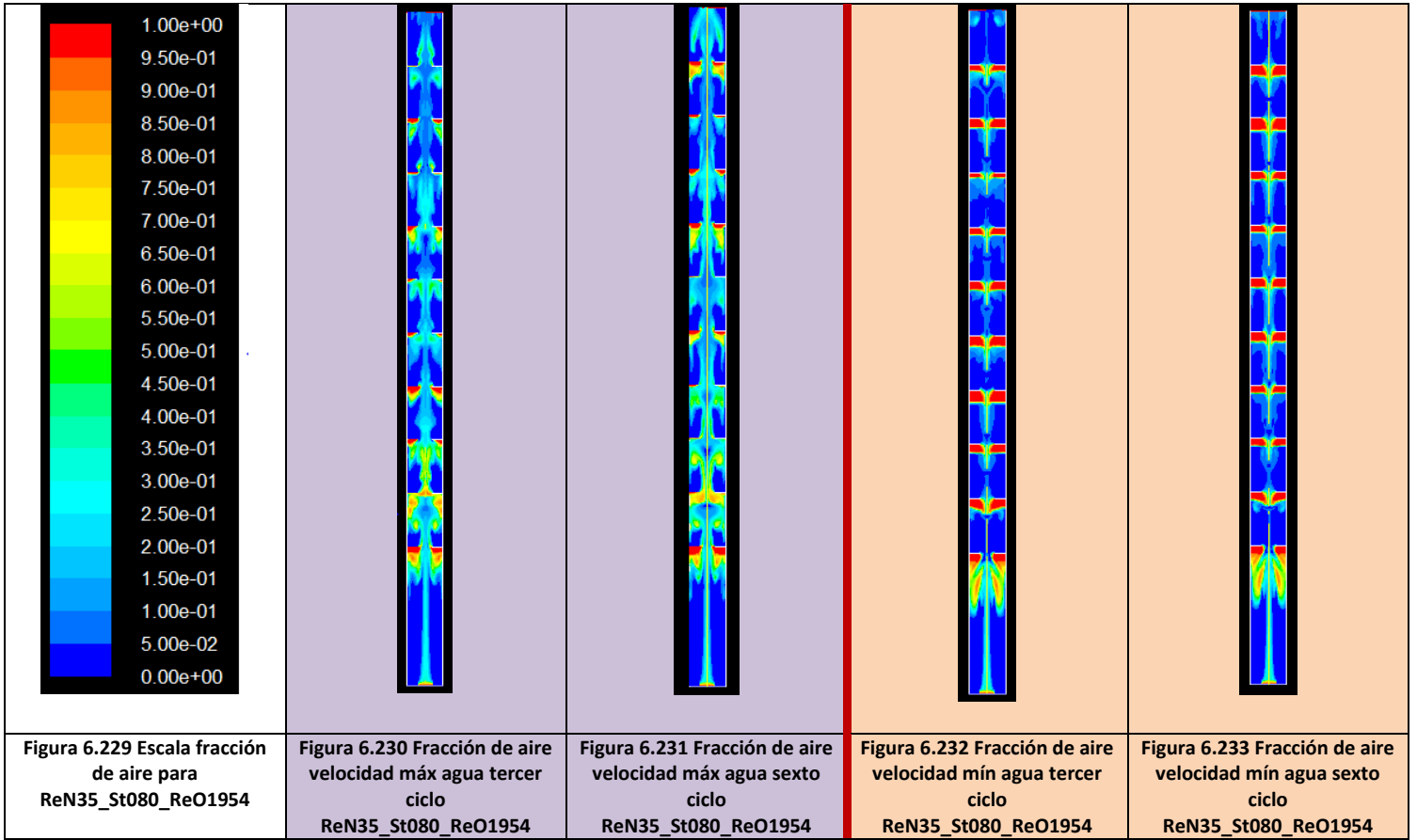
6.6.2 ReN35\_St080\_Re01954

Comparativa entre vectores de velocidad de agua



Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

Comparativa entre fracción volumétrica de aire

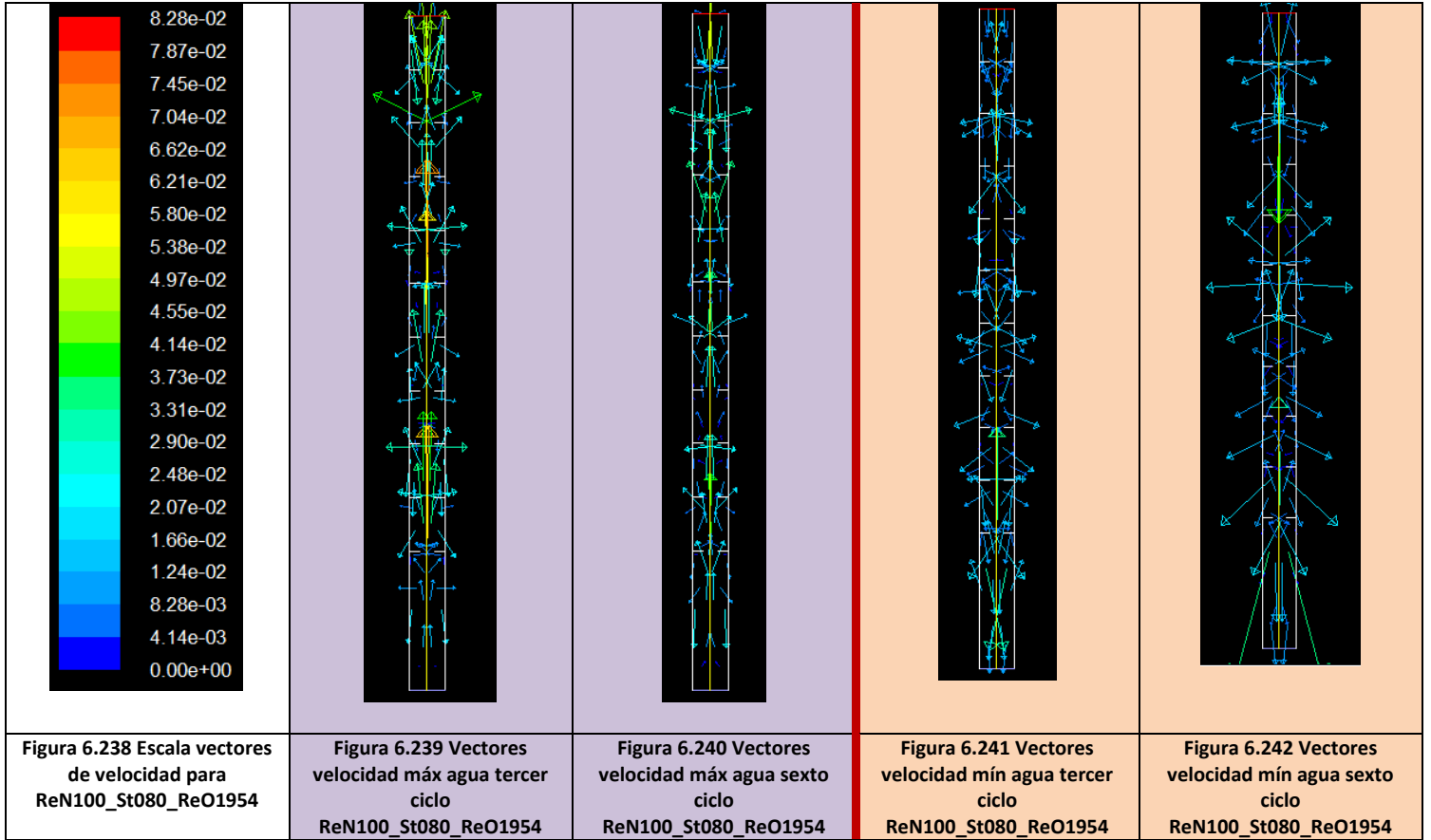


Comparativa entre balance de masas

Figura 6.234 Balance de masas velocidad máx agua tercer ciclo ReN35_St080_ReO1954	Figura 6.235 Balance de masas velocidad máx agua sexto ciclo ReN35_St080_ReO1954	Figura 6.236 Balance de masas velocidad mín agua tercer ciclo ReN35_St080_ReO1954	Figura 6.237 Balance de masas velocidad mín agua sexto ciclo ReN35_St080_ReO1954																																																																																																																																																																								
<table border="1"> <tr><td colspan="2">mixture</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>0.58594128</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>0.00032310879</td></tr> <tr><td>salida</td><td>-0.66459225</td></tr> <tr><td>Net</td><td>-0.078327866</td></tr> <tr><td colspan="2">water</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>0.58594128</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>-0</td></tr> <tr><td>salida</td><td>-0.66436538</td></tr> <tr><td>Net</td><td>-0.078424109</td></tr> <tr><td colspan="2">air</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>-0</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>0.00032310879</td></tr> <tr><td>salida</td><td>-0.00022686603</td></tr> <tr><td>Net</td><td>9.6242768e-05</td></tr> </table>	mixture		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	0.58594128	entrada_aire	0.00032310879	salida	-0.66459225	Net	-0.078327866	water		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	0.58594128	entrada_aire	-0	salida	-0.66436538	Net	-0.078424109	air		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	-0	entrada_aire	0.00032310879	salida	-0.00022686603	Net	9.6242768e-05	<table border="1"> <tr><td colspan="2">mixture</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>0.58594128</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>0.00032310879</td></tr> <tr><td>salida</td><td>-0.3857979</td></tr> <tr><td>Net</td><td>0.20046648</td></tr> <tr><td colspan="2">water</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>0.58594128</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>-0</td></tr> <tr><td>salida</td><td>-0.38522848</td></tr> <tr><td>Net</td><td>0.2007128</td></tr> <tr><td colspan="2">air</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>-0</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>0.00032310879</td></tr> <tr><td>salida</td><td>-0.00056942482</td></tr> <tr><td>Net</td><td>-0.00024631603</td></tr> </table>	mixture		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	0.58594128	entrada_aire	0.00032310879	salida	-0.3857979	Net	0.20046648	water		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	0.58594128	entrada_aire	-0	salida	-0.38522848	Net	0.2007128	air		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	-0	entrada_aire	0.00032310879	salida	-0.00056942482	Net	-0.00024631603	<table border="1"> <tr><td colspan="2">mixture</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>-0.55083627</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>0.00032310879</td></tr> <tr><td>salida</td><td>0.34308441</td></tr> <tr><td>Net</td><td>-0.20742876</td></tr> <tr><td colspan="2">water</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>-0.55083627</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>-0</td></tr> <tr><td>salida</td><td>0.34315264</td></tr> <tr><td>Net</td><td>-0.20768363</td></tr> <tr><td colspan="2">air</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>-0</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>0.00032310879</td></tr> <tr><td>salida</td><td>-6.823754e-05</td></tr> <tr><td>Net</td><td>0.00025487125</td></tr> </table>	mixture		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	-0.55083627	entrada_aire	0.00032310879	salida	0.34308441	Net	-0.20742876	water		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	-0.55083627	entrada_aire	-0	salida	0.34315264	Net	-0.20768363	air		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	-0	entrada_aire	0.00032310879	salida	-6.823754e-05	Net	0.00025487125	<table border="1"> <tr><td colspan="2">mixture</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>-0.55083627</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>0.00032310879</td></tr> <tr><td>salida</td><td>0.37194316</td></tr> <tr><td>Net</td><td>-0.17857</td></tr> <tr><td colspan="2">water</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>-0.55083627</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>-0</td></tr> <tr><td>salida</td><td>0.37204686</td></tr> <tr><td>Net</td><td>-0.17878942</td></tr> <tr><td colspan="2">air</td></tr> <tr><td>Mass Flow Rate</td><td>(kg/s)</td></tr> <tr><td>-----</td><td>-----</td></tr> <tr><td>entrada_agua</td><td>-0</td></tr> <tr><td>entrada_aire</td><td>0.00032310879</td></tr> <tr><td>salida</td><td>-0.00010369669</td></tr> <tr><td>Net</td><td>0.0002194121</td></tr> </table>	mixture		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	-0.55083627	entrada_aire	0.00032310879	salida	0.37194316	Net	-0.17857	water		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	-0.55083627	entrada_aire	-0	salida	0.37204686	Net	-0.17878942	air		Mass Flow Rate	(kg/s)	-----	-----	entrada_agua	-0	entrada_aire	0.00032310879	salida	-0.00010369669	Net	0.0002194121
mixture																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	0.58594128																																																																																																																																																																										
entrada_aire	0.00032310879																																																																																																																																																																										
salida	-0.66459225																																																																																																																																																																										
Net	-0.078327866																																																																																																																																																																										
water																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	0.58594128																																																																																																																																																																										
entrada_aire	-0																																																																																																																																																																										
salida	-0.66436538																																																																																																																																																																										
Net	-0.078424109																																																																																																																																																																										
air																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	-0																																																																																																																																																																										
entrada_aire	0.00032310879																																																																																																																																																																										
salida	-0.00022686603																																																																																																																																																																										
Net	9.6242768e-05																																																																																																																																																																										
mixture																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	0.58594128																																																																																																																																																																										
entrada_aire	0.00032310879																																																																																																																																																																										
salida	-0.3857979																																																																																																																																																																										
Net	0.20046648																																																																																																																																																																										
water																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	0.58594128																																																																																																																																																																										
entrada_aire	-0																																																																																																																																																																										
salida	-0.38522848																																																																																																																																																																										
Net	0.2007128																																																																																																																																																																										
air																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	-0																																																																																																																																																																										
entrada_aire	0.00032310879																																																																																																																																																																										
salida	-0.00056942482																																																																																																																																																																										
Net	-0.00024631603																																																																																																																																																																										
mixture																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	-0.55083627																																																																																																																																																																										
entrada_aire	0.00032310879																																																																																																																																																																										
salida	0.34308441																																																																																																																																																																										
Net	-0.20742876																																																																																																																																																																										
water																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	-0.55083627																																																																																																																																																																										
entrada_aire	-0																																																																																																																																																																										
salida	0.34315264																																																																																																																																																																										
Net	-0.20768363																																																																																																																																																																										
air																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	-0																																																																																																																																																																										
entrada_aire	0.00032310879																																																																																																																																																																										
salida	-6.823754e-05																																																																																																																																																																										
Net	0.00025487125																																																																																																																																																																										
mixture																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	-0.55083627																																																																																																																																																																										
entrada_aire	0.00032310879																																																																																																																																																																										
salida	0.37194316																																																																																																																																																																										
Net	-0.17857																																																																																																																																																																										
water																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	-0.55083627																																																																																																																																																																										
entrada_aire	-0																																																																																																																																																																										
salida	0.37204686																																																																																																																																																																										
Net	-0.17878942																																																																																																																																																																										
air																																																																																																																																																																											
Mass Flow Rate	(kg/s)																																																																																																																																																																										
-----	-----																																																																																																																																																																										
entrada_agua	-0																																																																																																																																																																										
entrada_aire	0.00032310879																																																																																																																																																																										
salida	-0.00010369669																																																																																																																																																																										
Net	0.0002194121																																																																																																																																																																										

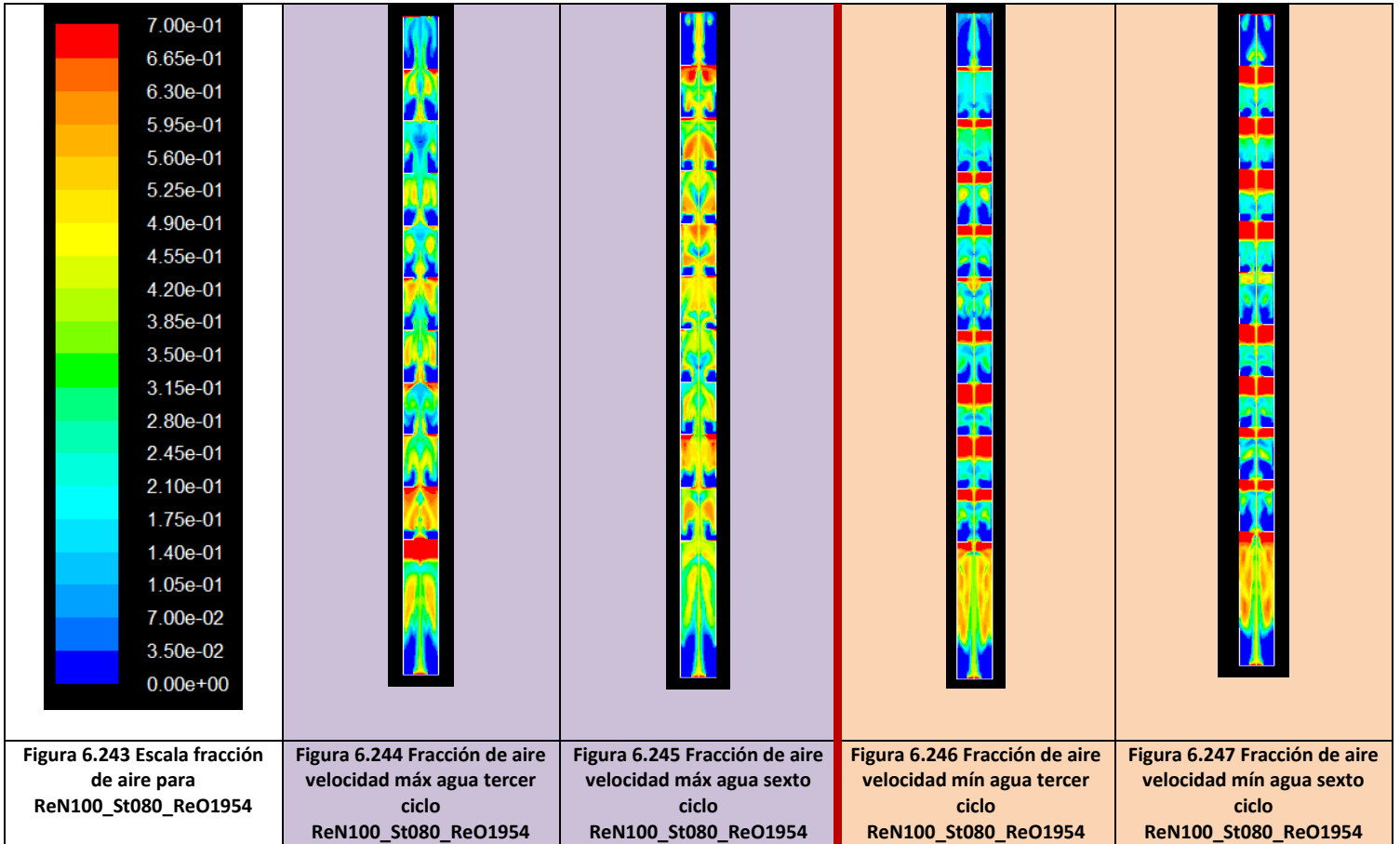
6.6.3 ReN100\_St080\_ReO1954

Comparativa entre vectores de velocidad de agua



Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio

Comparativa entre fracción volumétrica de aire



Comparativa entre balance de masas

mixture		mixture		mixture		mixture	
Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada_agua	0.61849535	entrada_agua	0.61849535	entrada_agua	-0.51828219	entrada_agua	-0.51828219
entrada_aire	0.00092316799	entrada_aire	0.00092316799	entrada_aire	0.00092316799	entrada_aire	0.00092316799
salida	-0.69365104	salida	-0.21362823	salida	0.15266123	salida	-0.13062337
Net	-0.074232517	Net	0.40579029	Net	-0.3646978	Net	-0.6479824
water		water		water		water	
Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada_agua	0.61849535	entrada_agua	0.61849535	entrada_agua	-0.51828219	entrada_agua	-0.51828219
entrada_aire	-0	entrada_aire	-0	entrada_aire	-0	entrada_aire	-0
salida	-0.69282077	salida	-0.21221481	salida	0.15316169	salida	-0.13049639
Net	-0.074325413	Net	0.40628055	Net	-0.36512051	Net	-0.64877859
air		air		air		air	
Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)	Mass Flow Rate	(kg/s)
entrada_agua	-0	entrada_agua	-0	entrada_agua	-0	entrada_agua	-0
entrada_aire	0.00092316799	entrada_aire	0.00092316799	entrada_aire	0.00092316799	entrada_aire	0.00092316799
salida	-0.00083027239	salida	-0.0014134201	salida	-0.00050046047	salida	-0.00012698105
Net	9.2895603e-05	Net	-0.00049025208	Net	0.00042270752	Net	0.00079618694

<p>Figura 6.248 Balance de masas velocidad máx agua tercer ciclo ReN100_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.249 Balance de masas velocidad máx agua sexto ciclo ReN100_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.250 Balance de masas velocidad mín agua tercer ciclo ReN100_St080_ReO1954</p>	<p>Figura 6.251 Balance de masas velocidad mín agua sexto ciclo ReN100_St080_ReO1954</p>
---	--	---	--



#### **6.6.4 Análisis de los casos**

---

Podemos comprobar para todos los casos una similitud entre uno y otro (tanto en diagramas de vectores de velocidad de agua, como diagrama de fracción volumétrica de aire, como balance de masas) entre los analizados en el tercer ciclo y los del sexto, exceptuando el primer caso para velocidad máxima oscilatoria de Reynolds neto 10, en los que tras iterar 6s más, encontramos una velocidad de ascenso del agua menor y, por el contrario, una distribución de fases más homogénea y con mayor concentración de aire.

Tendríamos que evaluar este caso aislado y comprobar si aumentando los ciclos iterados conseguiríamos estabilidad en la solución.

# **Capítulo 7.**

## **Conclusiones y trabajos futuros**

## 7.1 Conclusiones

Durante toda la realización de las simulaciones, cabe destacar la dificultad al definir el modelo multifásico correcto debido a la multitud de opciones entre parámetros y modelizados y es por eso por lo que ha habido gran variedad de casos a simular y una trayectoria extensa de pruebas hasta conseguir dar con un modelo que arrojara unos resultados adecuados, aunque esto no signifique que sean definitivos y constituirán solo una base para el comienzo del estudio de inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio.

Tras realizar un periodo de aprendizaje del software comercial FLUENT se ha conseguido la modelización de OBR multifásico partiendo de las siguientes hipótesis: flujo laminar, geometría 2D, simetría. Debido a estas hipótesis planteadas y los cortos periodos de tiempo es por lo que aconsejamos que las simulaciones obtenidas deban utilizarse de manera orientativa para futuros trabajos.

En relación con esto mismo, cabe decir que para la realización de las simulaciones y obtención de convergencia ha sido necesario imponer un paso temporal menor que el deseado aun así nos ha supuesto un coste computacional muy alto, limitando de esta manera las simulaciones obtenidas. También ha influido en el alto coste computacional la malla tan fina escogida con el objetivo de obtener la máxima precisión.

Nuestro estudio de la columna de flujo ha tenido una extensa trayectoria en la que han surgido numerosas modificaciones que han ido rectificando el caso hasta llegar a la representación final y han servido para estudiar la influencia de cada una de ellas en el estudio. Lo primero que acertamos a corregir se trató del diámetro de la burbuja, pasando del dado por defecto por el programa a un valor cien veces mayor. Como consecuencia, los resultados evolucionaron de una situación de distribución de aire mayormente en el primer tanque a otra en la que ese flujo no conseguía emerger de los conductos laterales (resto de condiciones de simulación iguales). La modificación del mallado a uno más fino vino impulsado por el estancamiento de aire en la zona de los deflectores y a partir de esto se consiguió divergencia en los análisis. Ayudando a este flujo de aire a penetrar en la columna se decide una inyección lateral directa, obviando los conductos laterales intermedios, pero obtuvimos como resultado la circulación del flujo por la pared lateral de ella. Como último caso, probamos a introducir el aire inferiormente con el agua a modo concéntrico y empezamos a obtener resultados adecuados, por lo que se lanza

---

**Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

movimiento oscilatorio y simulaciones finales con estudio de diferentes parámetros: caudal, frecuencia y amplitud de oscilación.

Como resultados finales de este estudio, cabe destacar las recirculaciones encontradas por la zona exterior de la columna y que hacen aún más acusado el flujo descendente en el movimiento oscilatorio. Con el aumento del número de Strouhal –disminución de la amplitud de oscilación-, estas recirculaciones ganan peso, al igual que pasa con el Reynolds oscilatorio –aumento de caudal-: la magnitud de la velocidad de recirculación también es mayor. En cuanto a la distribución de la fase aire, encontramos más descompensación a medida que gana peso la componente oscilatoria de la velocidad del agua. Es decir, la situación óptima de distribución la hemos encontrado con una disminución del Reynolds oscilatorio y aumento del Reynolds neto, o lo que es lo mismo, disminución de la frecuencia y la amplitud de oscilación y aumento de caudal. Pero también hemos observado que a mayor número de Strouhal (mayor amplitud de oscilación) menor es el estancamiento del aire en los deflectores. Sería necesario, pues, la combinación óptima entre estos números. El aumento temporal de alguno de los casos arroja similitud en los resultados a excepción de uno de ellos que habría que estudiar con más profundidad para corroborar esta tendencia y buscar una explicación de esta diferencia de resultados.

Según los análisis realizados y las conclusiones obtenidas, podemos decir en relación con este estudio que variando los parámetros de simulación de caudal –tanto en magnitud como relación entre ambos fluidos-, amplitud del oscilatorio y frecuencia y obteniendo la combinación más adecuada entre ellos, podremos conseguir un mezclado homogéneo y óptimo, para lo cual habrá que seguir adelante con este estudio con las bases que han quedado reflejadas en este proyecto.

## 7.2 Trabajos futuros

En este apartado tratamos de describir el trabajo interesante a realizar en línea con este proyecto. Puesto que trata de un estudio de aproximación de un método para la simulación de una columna de líquido al que se le introduce aire, hemos de tener en cuenta la larga trayectoria a realizar a partir de este comienzo y los ensayos posteriores a realizar hasta lograr un buen procedimiento de simulación, donde consigamos minimizar los errores, buscar una estabilidad en la solución y establecer una tendencia entre parámetros y estas soluciones obtenidas.

Por cuestiones de limitación de tiempo, extensión del estudio y capacidad de procesamiento de datos, hemos dejado muchos puntos a desarrollar en trabajos futuros. Los temas a extender a partir de este estudio serían, pues, los siguientes:

- Realizar las siguientes simulaciones con un número de tanques mayor, con el objetivo de comprobar si encontramos un patrón repetitivo y estabilidad geométrica.
- Escoger un mallado más refinado e incluso probar con otros tipos geométricos de mallado, debido a que, sobre todo en la zona cercana a los deflectores donde hay más concentración de aire, podríamos obtener una solución más precisa.
- Estudio detallado de la distribución de la fase aire en la columna en cada uno de los casos, mediante la elección de un tanque representativo y análisis de dispersión.
- Respecto a las primeras tendencias obtenidas en las simulaciones, habría que corroborar con mayor número de casuísticas en cuanto a parámetros y números adimensionales, si esta tendencia se mantiene o si por el contrario encontramos un punto de inflexión.
- Aunque hemos realizado iteraciones con mayor tiempo de simulación, sería necesario comprobar con todos los casos, y centrándonos en aquellos que hemos visto una distribución de aire más homogénea, que si analizamos los resultados pasados más ciclos hay una repetición temporal de los mismos y estos no varían con el tiempo.
- Por último y para comprobar que las simulaciones sean correctas, tendríamos que contrastar los modelos computados con los teóricos.

**Anexo 1.**

**Códigos utilizados  
para la simulación  
en servidor  
Labmach**

### **Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio**

En este apéndice se detalla, a modo de guía práctica, como lanzar un caso al servidor. Para ejecutar un caso debe haber como mínimo los siguientes ficheros:

- Nombredelcaso.pbs
- Nombredelcaso.jou
- Nombredelcaso.cas
- Nombredeldata.dat (no necesario, hay que inicializarlo)

**Importante:** Los ficheros se arrastran con el icono ASCII activado si son de archivo de texto.

## A.1 Pbs

```
#!/bin/bash
#PBS -lnodes=2:ppn=8                                (*) (**)
#PBS -m e
#PBS -M correo@electronico.com                      (***)
cd $PBS_O_WORKDIR
NB=`wc -l $PBS_NODEFILE | awk '{print $1}'`
ulimit -l unlimited
# echo "Numero de procesos: $NB"
# echo "En los nodos:"
# cat $PBS_NODEFILE
cd $PBS_O_WORKDIR
/share/apps/Fluent.Inc/bin/fluent 2ddp -t${NB} -ssh -pethernet -
cnf=${PBS_NODEFILE} -g -i Nombredelcaso.jou > Nombredelcaso-
${NB}-procs.out                                    (****)
```

(\*) Número de nodos. Se recomienda utilizar 2 nodos ya que el uso de tres nodos ralentiza el proceso por el intercambio de datos que deben transferirse entre ellos.

(\*\*) Número de núcleos. Se recomienda utilizar los 8 núcleos de cada nodo.

(\*\*\*) Correo electrónico. Se trata del correo al que se mandará la información al término de la simulación.

(\*\*\*\*) Nombre del archivo. Nombre del archivo .jou que queremos lanzar.



## A.2 Jou

Este archivo es propio de FLUENT podríamos configurar el caso directamente desde el inicio. En este caso hemos elegido configurar un caso general y configurar las características diferentes para cada caso.

```
rc Nombredelcaso.cas.gz (*)
rd Nombredeldata.dat.gz (**)
/define/user-defined/interpreted-functions "nombrefuncion.dat"
"cpp" 10000 no (***)
/define/boundary-conditions/velocity-inlet (****)
entrada_agua
mixture
no
no
yes
yes
yes
yes
"udf"
"nombrefuncion"
file/auto-save/data-frequency (*****)
100
file/auto-save/r "nombredatos.dat.gz"
/solve/set/time-step 0.000025 (*****)
/solve/dual-time-iterate 40000 1000 (*****)
exit
yes
```

(\*)Leer caso

(\*\*) Leer datos

(\*\*\*) Cargar udf

(\*\*\*\*) Definir entrada

(\*\*\*\*\*) Guardar datos

(\*\*\*\*\*) Paso de tiempo

(\*\*\*\*\*) Número pasos de tiempo e iteraciones por paso de tiempo

### A.3 Entrada oscilatorio

Este archivo es necesario para introducir el movimiento oscilatorio del flujo. Creamos la función sinusoidal para cada una de las entradas de 1, 2 y 4Hz.

$$v = u_{net} + 2\pi x_0 \text{sen}(2\pi ft) \quad (\text{A.1})$$

```
#include "udf.h"
DEFINE_PROFILE(nombrefuncion, thread, position)
{
    face_t f;
    real t = CURRENT_TIME;
    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_PROFILE(f, thread, position) =
        u_net+2*pi*x_0*sin(2*pi*f *t);
    }
    end_f_loop(f, thread)
}
```

## **A.4 Comandos necesarios**

Los siguientes comandos son los utilizados a lo largo de las simulaciones en el servidor.

qstat		→ ver los nodos en los que se está trabajando
qsub	nombrecaso.pbs	→ lanzar caso .pbs
qdel	númerodelcaso	→ eliminar caso lanzado
cd	nombre carpeta	→ abrir carpeta
df -h		→ información espacio disponible en servidor
du		→ información espacio ocupado por cada carpeta

Los pasos a seguir para lanzar un caso:

Crear carpeta

Subir archivos (ojo si hay que activar ASCII)

Abrir carpeta mediante el comando cd

Ejecutar el comando qsub nombrecaso.pbs

**Bibliografía**

- [1] O. Levenspiel. Chemical Reaction Engineering (1999). John Wiley and sons.
- [2] Terminal Velocity of a Bubble Rise in a Liquid Column. Mário A. R. Talaia
- [3] Rise characteristics of gas bubbles in a 2D rectangular column: VOF simulations vs experiments. Krishna, and Baten
- [4] O. Levenspiel, Chemical Reaction Engineering (1999), John Wiley and sons
- [5] Evaluation of axial dispersion and mixing performance in oscillatory baffled reactors using CFD. Mikko Manninen, Elena Gorshkova, Kirsi Immonena and Xiong-Wei Ni
- [6] Development and evaluation of novel designs of continuous mesoscale oscillatory baffled reactors. Anh N. Phan and Adam Harvey
- [7] PFC: Avances en la simulación numérica de reactores de flujo oscilatorio. Héctor Martínez Rodríguez.
- [8] PCF: Estudio numérico del flujo bifásico aire-agua en reactores de flujo oscilatorio. Daniel Gómez Nadal.
- [9] Fluent Multiphase tutorials
- [10] Fluent Multiphase User's guide
- [11] Bakker, Computational Fluid Dynamics Lectures: Lecture 14. Multiphase flow, 2008) (Denn & Russell, 1980)
- [12] *Fundamentals of Multiphase Flows*. Christopher E. Brennen (2005).