

Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

Generación de burbujas y análisis del mezclado en columnas de flujo oscilatorio

Titulación: Ingeniero Industrial
Alumno: Jose Antonio Meroño Nieto
Director: Juan Pedro Solano Fernández
Codirector: Ruth Herrero Martín

Cartagena, 27 de Octubre de 2015

Resumen

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.

Palabras clave: OBR, flujo oscilatorio, multifásico, CFD, FLUENT.

Índice

Capítulo 1. Introducción. Descripción del problema	1
1.1. Introducción. Reactor de flujo oscilatorio.	1
1.2. Mecanismo de mezcla de flujo oscilatorio.....	4
1.3. Parámetros que gobiernan un OFM.....	5
1.4. Definición del problema	9
Capítulo 2. Reactores de mezcla multifásica. Estudios previos	13
2.1. Reactores de mezcla multifásica	13
2.1.1. Concepto y enfoque	13
2.1.2. Importancia hidrogenación	14
2.1.3. Tecnologías convencionales de hidrogenación	14
2.2. Estudios previos.....	21
2.2.1. Principios de la década de los 90 hasta hoy.....	21
2.2.2. Columnas de flujo oscilatorio. Aportaciones de Xiong – Wei Ni.....	23
Capítulo 3. Metodología de simulación numérica en fluent	27
3.1. Modelo Matemático del Problema	27
3.2. Hipótesis de simulación.	29
3.2.1. Esquemas numéricos.....	30
3.2.2. Esquemas de interpolación y discretización	34
3.3. Condiciones de contorno	49
3.4. Convergencia iterativa	51
3.4.1. Residuos	52
3.4.2. Evaluación de las magnitudes fluidas durante el proceso de cálculo iterativo	54
3.4.3. Criterios de convergencia.....	56

Capítulo 4. Simulación numérica de flujos multifásicos en FLUENT	57
4.1. Introducción	57
4.1.1. Regímenes de Flujo Multifásico.....	57
4.1.2. Ejemplos Sistemas Multifásicos	60
4.2. Elección de un modelo multifásico	60
4.2.1. Simulaciones modelos multifásicos	61
4.3. Modelo teórico Volume of Fluid (VOF).....	64
4.3.1. Resumen y limitaciones del modelo VOF	64
4.3.2. Ecuación de la fracción volumétrica	66
4.3.3. Propiedades de los fluidos	71
4.3.4. Ecuación de Momentum.....	72
4.3.5. Ecuación de Energía	72
4.4. Teoría Mixture Model	73
4.4.1. Resumen y limitaciones de modelo Mixture	73
4.4.2. Ecuaciones del modelo Mixture.....	75
4.5. Modelo Eulerian.....	77
4.5.1. Resumen y limitaciones de modelo Eulerian.	77
4.5.2. Ecuaciones del modelo Eulerian	79
Capítulo 5. Procesado en FLUENT	83
5.1. Introducción	83
5.2. Pasos realizados.....	83
5.2.1. Ascenso burbuja de aire en columna lisa vertical	83
5.2.2. Inyección lateral aire en columna con deflectores	85
5.2.3. Inyección aire parte central de la entrada en columna con deflectores.....	87
5.2.4. Solución inicial propuesta.....	88
5.3. Preparación caso final paso a paso	89

Capítulo 6. Simulaciones	107
6.1. Introducción	107
6.2. Ascenso burbuja de aire en columna lisa vertical	107
6.3. Llenado columna con deflectores velocidades constantes	109
6.4. Aplicación flujo oscilatorio a solución inicial propuesta	112
6.4.1. Frecuencia 1Hz a partir solución inicial propuesta.....	113
6.4.2. Frecuencia 2Hz a partir solución inicial propuesta.....	116
6.4.3. Frecuencia 4 Hz a partir solución inicial propuesta.....	118
Capítulo 7. Conclusiones y trabajo futuro	121
7.1. Conclusiones	121
7.2. Trabajos futuros.....	123
Apéndice A. Códigos utilizados para la simulación en servidor labmach.....	125
A.1. Pbs	125
A.2. Jou.....	126
A.3. Entrada oscilatorio.....	127
A.4. Comandos necesarios.....	127
Apéndice B. Tratamiento de datos mediante software Tecplot	129
B.1. Cargar datos.....	129
B.2. Formato visualización.....	131
B.3. Animación.....	132
B.3.1. Animar un solo frame.....	132
B.3.2. Animar varios frames	134
B.4. Limitaciones y solución final	134
B.5. Macros.....	135

B.5.1. Macro creación un frame para visualización en tecplot	135
B.5.2. Macro crear un video con varios frames simultáneos en TECPLOT	137
B.5.3. Macro añadir contador a videos	138
Apéndice C. Edición de videos mediante software sony vegas pro	139
C.1. Importar	139
C.2. Colocación columnas	140
C.3. Renderizar	141
Bibliografía.....	143

Índice de figuras

Figura 1.1 Reactor de flujo oscilatorio con diafragmas insertados.	1
Figura 1.2 Ejemplos de elementos insertados en OBR. Disco con un único orificio (a), disco con múltiples orificios (b), muelle helicoidal (c), lámina alabeada (d), mallado de alambre HiTran (e).	2
Figura 1.3 A la izquierda OBR con deflectores fijos, a la derecha OBR con deflectores móviles	2
Figura 1.4 OBR a escala industrial, formado por cientos de pasos.	3
Figura 1.5 Parámetros de caracterización del flujo oscilatorio. Izquierda, flujo oscilatorio puro (POF). Derecha, flujo oscilatorio con orificios deflectores (OBF).	3
Figura 1.6 Flujo neto y flujo oscilatorio superpuesto.	3
Figura 1.7 Esquema del mecanismo de mezcla en reactores de flujo oscilatorio.	4
Figura 1.8 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).	5
Figura 1.9 El flujo neto en un tubo liso.	6
Figura 1.10 Movimiento oscilatorio superpuesto a un flujo neto.	6
Figura 1.11 El flujo oscilatorio aleteado.	7
Figura 1.12 Ejemplificación del movimiento sinusoidal de un pistón (desplazamiento, x , la velocidad, v , y la aceleración, a) para $w = 0,62 \text{ rad / s}$ (es decir, 0,1 Hz), y $x_0 = 5 \text{ mm}$	8
Figura 1.13 Geometría del reactor de flujo oscilatorio.	10
Figura 1.14 Velocidad de entrada de agua $f = 1 \text{ Hz}$	11
Figura 1.15 Velocidad de entrada de agua $f = 2 \text{ Hz}$	12
Figura 1.16 Velocidad de entrada de agua $f = 4 \text{ Hz}$	12
Figura 2.1 Conventional batch hydrogenation reactor system	16

Figura 2.2 Advanced BUSS Loop® reactor	17
Figura 2.3 Fixed bed trickle flow reactors	18
Figura 2.4 Esquema OBR y mezcla caótica presentada entre discos.....	19
Figura 2.5 Diferentes enfoques para introducir el catalizador de la OBR bastidor oscilante	20
Figura 2.6 Meso-reactor de flujo oscilatorio. $D=4.4$ mm, $L=13$ mm, $\delta=6$ mm, $D_0=1.6$ mm	23
Figura 2.7 Típica forma gaussiana de la distribución del tamaño de gota en un reactor de flujo oscilatorio.	24
Figura 3.1 Proceso de cálculo del solver segregado.....	31
Figura 3.2 Proceso de cálculo del solver acoplado	33
Figura 3.3 Volumen de control sobre el que se aplica el método de los volúmenes finitos.....	35
Figura 3.4 Volumen de control unidimensional.....	38
Figura 4.1 Tipos de flujos bifásicos	59
Figura 4.2 Interpolaciones en la interfaz	69
Figura 5.1 Mallado ascenso burbuja de aire	84
Figura 5.2 Cambios de geometría en el ascenso de la burbuja	85
Figura 5.3 Primera geometría utilizada	85
Figura 5.4 Mallado primera geometría utilizada	86
Figura 5.5 Geometría final utilizada y solución inicial propuesta	88
Figura 5.6 Mallado triangular columna final en GAMBIT	89
Figura 5.7 Chequeado de la malla en FLUENT.....	90
Figura 5.8 Tamaño de la malla en FLUENT	90
Figura 5.9 Escalar malla.....	91
Figura 5.10 Plano de simetría	91
Figura 5.11 Visualización de superficies	92

Figura 5.12 Visualización de la malla en Fluent	92
Figura 5.13 Definición del solver	93
Figura 5.14 Definición de propiedades.....	93
Figura 5.15 Configuración modelo multifasico.....	94
Figura 5.16 Definición de fases 1	95
Figura 5.17 Definición de fases 2	95
Figura 5.18 Definición interacción entre fases.....	96
Figura 5.19 Definición condiciones de operación	96
Figura 5.20 Selección del modelo de turbulencia.....	97
Figura 5.21 Especificación de las condiciones de contorno	97
Figura 5.22 Condiciones de contorno para la mezcla	98
Figura 5.23 Fracción de volumen aire a la entrada	98
Figura 5.24 Retorno de fase aire a la salida.....	99
Figura 5.25 Condiciones de contorno pared.....	99
Figura 5.26 Copiar condiciones de contorno	100
Figura 5.27 Control de la solución.....	100
Figura 5.28 Control multigrad	101
Figura 5.29 Inicialización de la solución	102
Figura 5.30 Creación regiones de adaptación.....	102
Figura 5.31 Patch de la fase aire.....	103
Figura 5.32 Interpolar datos	104
Figura 5.33 Visualización solución inicial	104
Figura 5.34 Criterios de convergencia.....	105
Figura 6.1 Ascenso burbuja 8mm.....	108
Figura 6.2 Ascenso burbuja 4 mm.....	108
Figura 6.3 Contornos de fase aire llenado columna con deflectores $v=cte$	110

Figura 6.4 Contornos de fase aire llenado columna con deflectores $v=cte$	111
Figura 6.5 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 1Hz.....	113
Figura 6.6 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 1Hz.....	114
Figura 6.7 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 1Hz.....	115
Figura 6.7 Contornos de fase aire en el tercer ciclo a frecuencia 2Hz	116
Figura 6.9 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 2Hz.....	117
Figura 6.5 Contornos de fase aire del primer ciclo a frecuencia 4Hz	118
Figura 6.9 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 4Hz.....	119
Figura B.1 Cargar ficheros	130
Figura B.2 Cargar datos	130
Figura B.3 Editar dimensiones Frame	131
Figura B.4 Editar Ejes	131
Figura B.5 Dibujar discos	132
Figura B.6 Ventana de trabajo TECPLOT	132
Figura B.7 Elección tiempo y formato de salida	133
Figura B.8 Elección pixeles y velocidad	133
Figura B.9 Ventana creación de un macro	134
Figura B.10 Ventana creación de un macro	135

Índice de tablas

Tabla 1.1 Condiciones de operación del reactor de flujo oscilatorio. Amplitud de oscilación y frecuencia de oscilación	11
Tabla 1.2 Condiciones de operación. Números adimensionales característicos.	12
Tabla 2.1 Características de los principales reactores utilizados para procesar la hidrogenación.....	15
Tabla 5.1 Velocidad de ascenso burbuja	84
Tabla 6.1 Condiciones de operación del reactor de flujo oscilatorio.....	112
Tabla 6.2 Números adimensionales característicos	112
Tabla 6.3 Tiempos de paso, guardado y simulado.....	112

Capítulo 1. Introducción. Descripción del problema

1.1. Introducción. Reactor de flujo oscilatorio.

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.

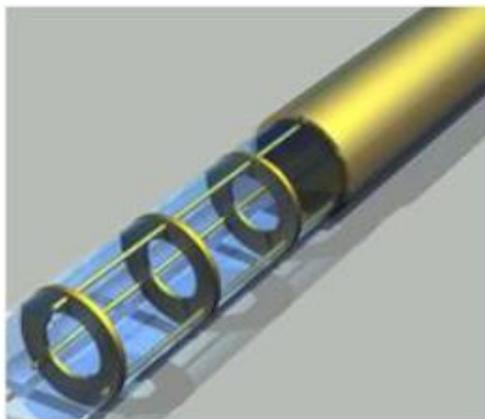


Figura 1.1 Reactor de flujo oscilatorio con diafragmas insertados.

En la figura anterior se muestra la forma típica de un OBR donde los elementos insertados son diafragmas con un único orificio. Son muchos otros elementos los que se pueden emplear, en la Figura 1.2 se muestran algunos ejemplos.

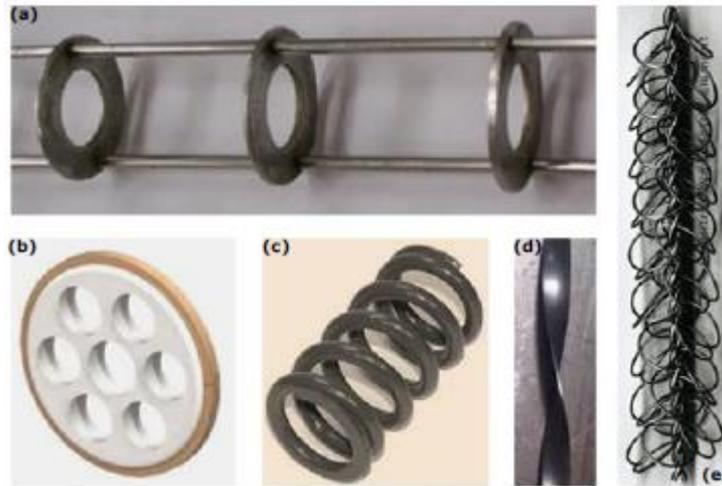


Figura 1.2 Ejemplos de elementos insertados en OBR. Disco con un único orificio (a), disco con múltiples orificios (b), muelle helicoidal (c), lámina alabeada (d), mallado de alambre HiTran (e).

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.

Existen dos variantes de OBR en función de cómo se consigue el flujo oscilatorio. Por un lado están los OBR-MB (Moving Baffles) donde es la estructura de deflectores insertados es la que oscila, provocando el movimiento del fluido. Por otro lado, los OBR-MF (Moving Fluid), donde se impone directamente al fluido un movimiento oscilatorio mediante, por ejemplo, un pistón en uno de los extremos del conducto.

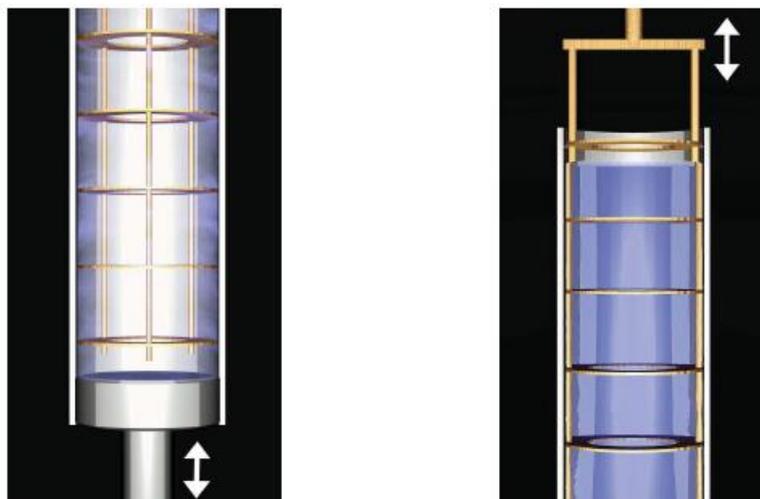


Figura 1.3 A la izquierda OBR con deflectores fijos, a la derecha OBR con deflectores móviles

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 1.4 OBR a escala industrial, formado por cientos de pasos.

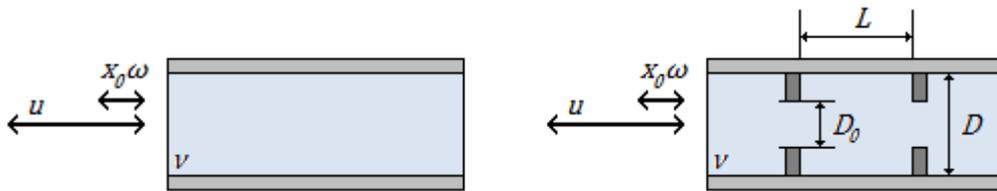


Figura 1.5 Parámetros de caracterización del flujo oscilatorio. Izquierda, flujo oscilatorio puro (POF). Derecha, flujo oscilatorio con orificios deflectores (OBF).

En el caso de un OBR con flujo oscilatorio, el flujo que circula por el interior del reactor está compuesto por un flujo neto, caracterizado por una velocidad u_{net} constante a lo largo del tiempo, sobre el que se superpone un flujo oscilatorio, cuya velocidad u_{osc} sigue una ley sinusoidal con el tiempo.

$$u_{osc} = 2\pi f x_0 \text{seno}(2\pi f t) \quad (1.1)$$

$$u(t) = u_{net} + u_{osc} \quad (1.2)$$

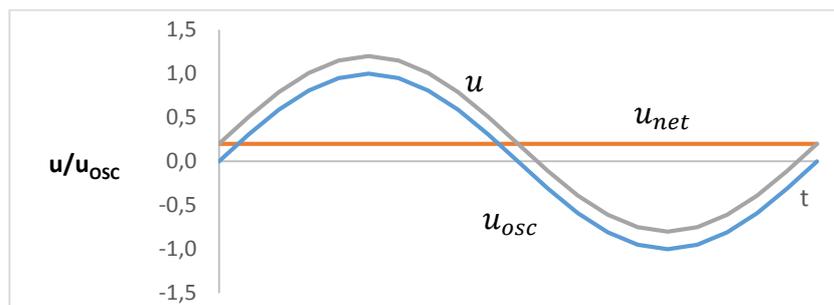


Figura 1.6 Flujo neto y flujo oscilatorio superpuesto.

1.2. Mecanismo de mezcla de flujo oscilatorio

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 mecanismo de mezcla de flujo oscilatorio (OFM) 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.

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 1.7 se muestra esquemáticamente este mecanismo:

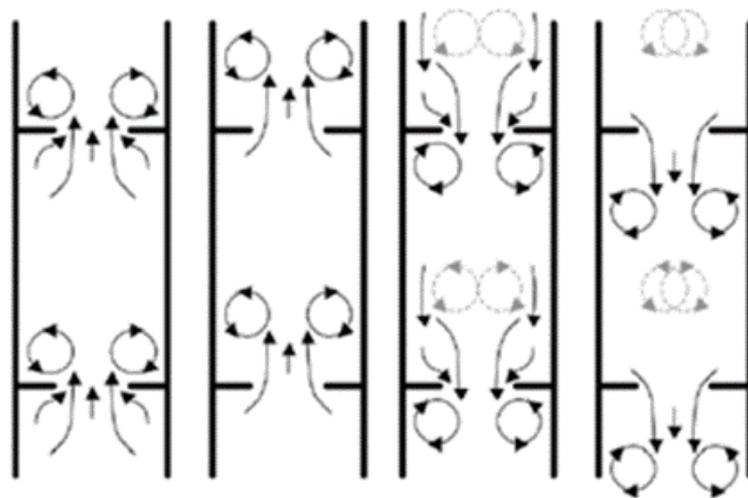


Figura 1.7 Esquema del mecanismo de mezcla en reactores de flujo oscilatorio.

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. 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 repiten con cada ciclo velocidad-tiempo. En la Figura 1.8 se muestra una visualización de este mecanismo de mezcla.

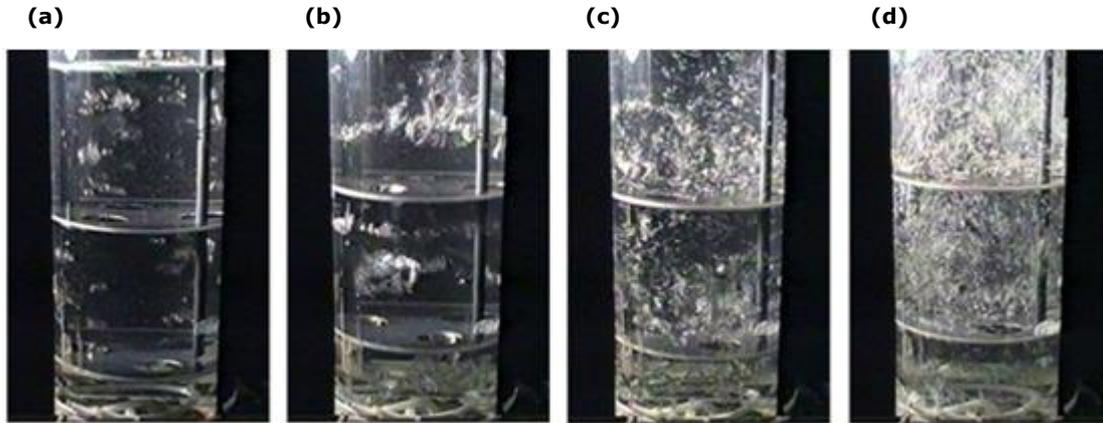


Figura 1.8 Visualización del mecanismo de mezcla. Sin oscilación (a). Comienzo de la oscilación (b). Tras un ciclo completo de oscilación (c). Tras varios ciclos completos de oscilación (d).

1.3. Parámetros que gobiernan un OFM

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 entre deflectores definido como L / d_i , y la zona de libre deflector, α , definidos como: d_o / 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 1.9.



Figura 1.9 El flujo neto en un tubo liso.

El número de Reynolds se define como sigue

$$Re_n = \frac{u \cdot d}{\nu} \quad (1.3)$$

donde d es el diámetro del tubo, ν 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 1.10) un grupo adimensional adicional es a menudo necesaria para caracterizar un movimiento, en conjunción con el anteriormente definido Re_n .



Figura 1.10 Movimiento oscilatorio superpuesto a un flujo neto.

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. Sin embargo, otros autores utilizan diferentes definiciones para U_p . Sarpkaya (1966), por ejemplo, la definió como la amplitud de la componente periódica de la velocidad media de la sección transversal ($= \pi f x_0 A_{piston} / A_{Tube}$), 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 ' πf ' '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 $\delta' = (2u/\omega)$ 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 1.11).

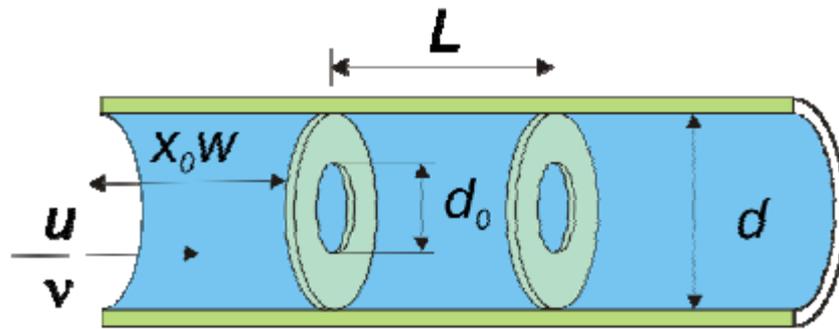


Figura 1.11 El flujo oscilatorio aleteado

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_o :

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

Re_p y Re_o 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 1.10 predominantemente será axial, mientras que en la Figura 1.11 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 ω 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 1.12.

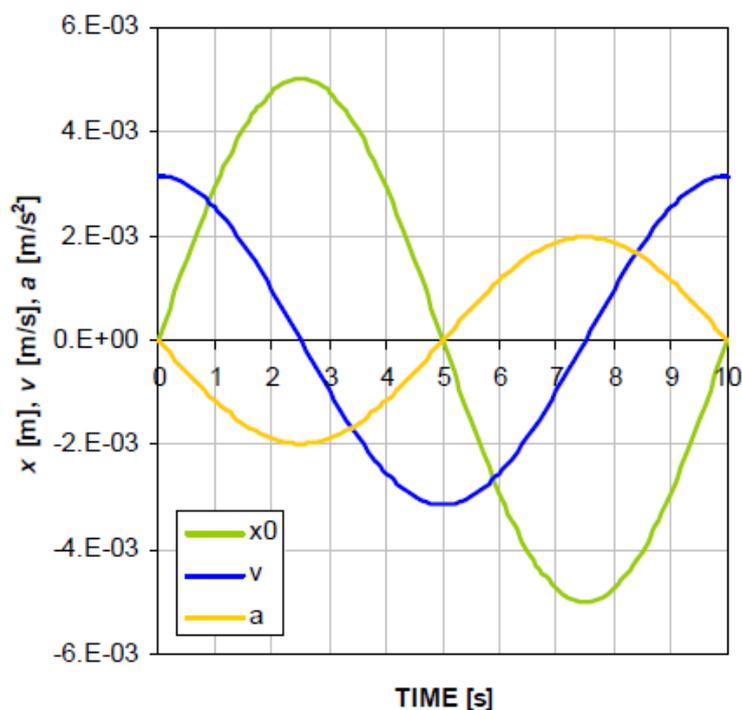


Figura 1.12 Ejemplificación del movimiento sinusoidal de un pistón (desplazamiento, x , la velocidad, v , y la aceleración, a) para $\omega = 0,62 \text{ rad / s}$ (es decir, $0,1 \text{ Hz}$), y $x_0 = 5 \text{ mm}$.

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

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

El 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.

1.4. Definición del problema

El problema fluidodinámico que se plantea en este Proyecto Fin de Carrera es la resolución de un problema de mezcla multifase en el cual están presentes dos fases inmiscibles (aire y agua).

Se realiza un estudio de la mezcla de ambas fases con el programa comercial Fluent realizando un estudio de las distintas opciones de las que dispone el programa, buscando cuál de ellas es de aplicación para nuestro caso.

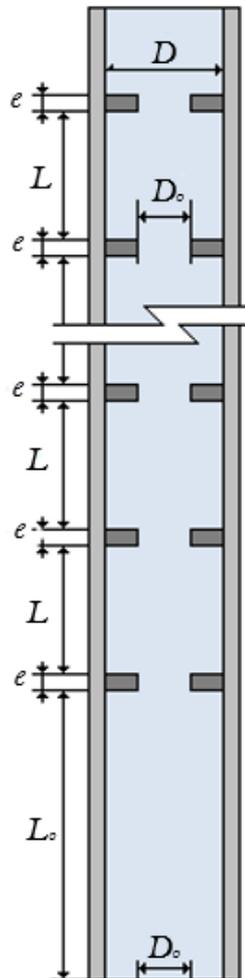


Figura 1.13 Geometría del reactor de flujo oscilatorio.

El estudio se realiza para un OBR vertical con deflectores fijos formado por un conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25$ mm, en el que se insertan separados una distancia $L = 37,5$ mm, diez discos con orificio, de diámetro interior $D_0 = 10,5$ mm y espesor infinitesimal. Dispone de una región de entrada con una distancia hasta el primer disco $L_0 = 97,5$ mm. En la sección inferior de la denominada región de entrada se sitúa una entrada de aire en la parte central con diámetro D_0 y se sitúa la entrada de agua.

Los fluidos de trabajo son agua de densidad $\rho_{\text{agua}} = 998,2$ kg/m³, viscosidad dinámica $\mu_{\text{agua}} = 1,003 \cdot 10^{-3}$ kg/m·s y aire de densidad $\rho_{\text{aire}} = 1,225$ kg/m³, viscosidad dinámica $\mu_{\text{aire}} = 1,789 \cdot 10^{-5}$ kg/m·s. Las condiciones de operación

simuladas vienen definidas por los parámetros de funcionamiento del pistón, por el caudal de entrada de agua y de aire. Parámetros de funcionamiento del pistón: amplitud de oscilación x_0 , en nuestro caso $x_0 = 3D_0/4$ y frecuencia de oscilación f , siendo la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$. El caudal de entrada de agua simulado ha sido de $1 \text{ m}^3/\text{s}$ siendo $u_{net} = Q/(D - D_0)$ ya que las simulaciones realizadas son en dos dimensiones. Por último el caudal de aire definido en las condiciones del problema es el 15% del caudal de agua, siendo la velocidad de entrada de agua $u_{aire} = 2,381 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$.

Condiciones de operación	x_0 (mm)	f (Hz)
1	10,875	1
2	10,875	2
3	10,875	4

Tabla 1.1 Condiciones de operación del reactor de flujo oscilatorio. Amplitud de oscilación y frecuencia de oscilación

La velocidad del agua para las diferentes condiciones de operación quedarían definidas por las siguientes funciones y representadas en las figuras posteriores.

$$v = u_{net} + 2\pi x_0 \text{sen}(2\pi f t) \quad (1.11)$$

$$u(1\text{Hz}) = 0,001149425 + 0,06832964 \text{sen}(6,283185307 t) \quad (1.12)$$

$$u(2\text{Hz}) = 0,001149425 + 0,13665928 \text{sen}(12,56637061 t) \quad (1.13)$$

$$u(4\text{Hz}) = 0,001149425 + 0,273318561 \text{sen}(25,13274123 t) \quad (1.14)$$

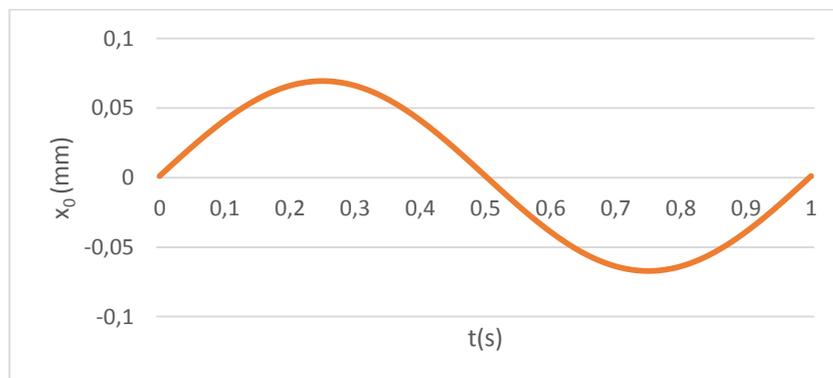


Figura 1.14 Velocidad de entrada de agua f = 1Hz

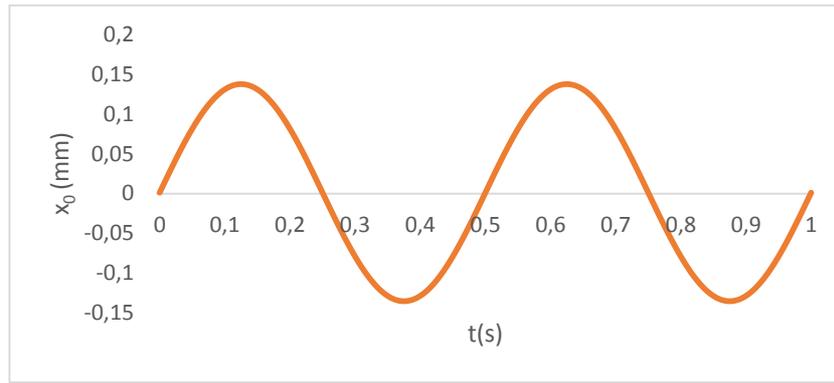


Figura 1.15 Velocidad de entrada de agua $f = 2\text{Hz}$

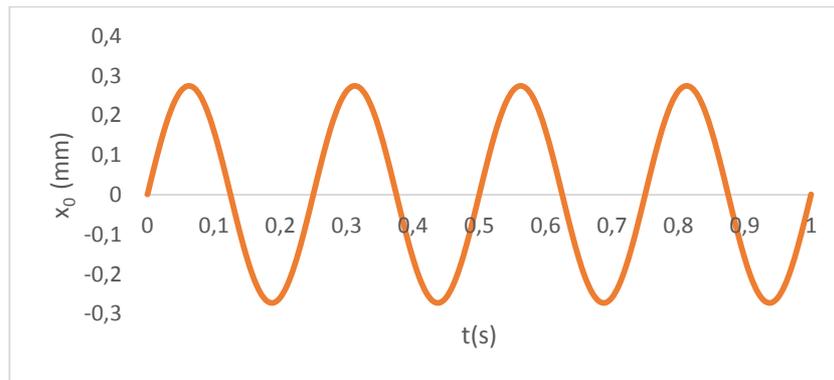


Figura 1.16 Velocidad de entrada de agua $f = 4\text{Hz}$

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).

Condiciones de operación	$Re_o = \frac{Dx_o\rho\omega}{\mu}$	$St = \frac{D}{4\pi x_o}$
1	986	0,1829
2	1972	0,1829
3	3944	0,1829

Tabla 1.2 Condiciones de operación. Números adimensionales característicos.

Capítulo 2. Reactores de mezcla multifásica.

Estudios previos

2.1. Reactores de mezcla multifásica

2.1.1. 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.

2.1.2. Importancia 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 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...)

2.1.3. 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 2.1), El hidrógeno es alimentado a través de un tubo de aspersion 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) catalizador sólido las partículas deben ser suspendidos en una (b) fase líquida o una mezcla en la que (c) H₂ 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 H₂ (en cantidad y presión), con poco impacto, pero el H₂ 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.

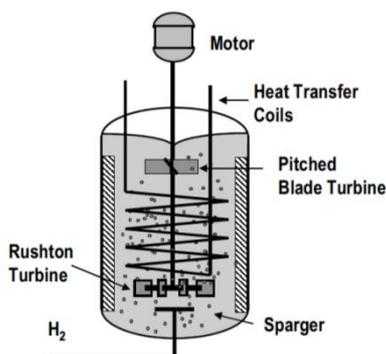


Figura 2.1 Conventional batch hydrogenation reactor system

Reactor de bucle

Una mejor transferencia de masa de H_2 es alcanzable en las configuraciones de reactores de bucle Buss (Figura 2.2), 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 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.

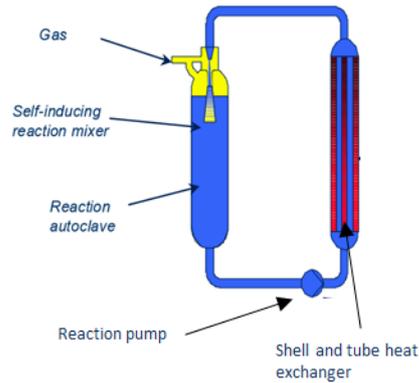


Figura 2.2 Advanced BUSS Loop® reactor

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.

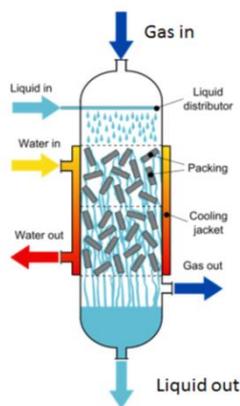


Figura 2.3 Fixed bed trickle flow reactors

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 2.4). En OBR, el reactivo orgánico es alimentado en el reactor base con un burbujeo de 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 2.4) 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.

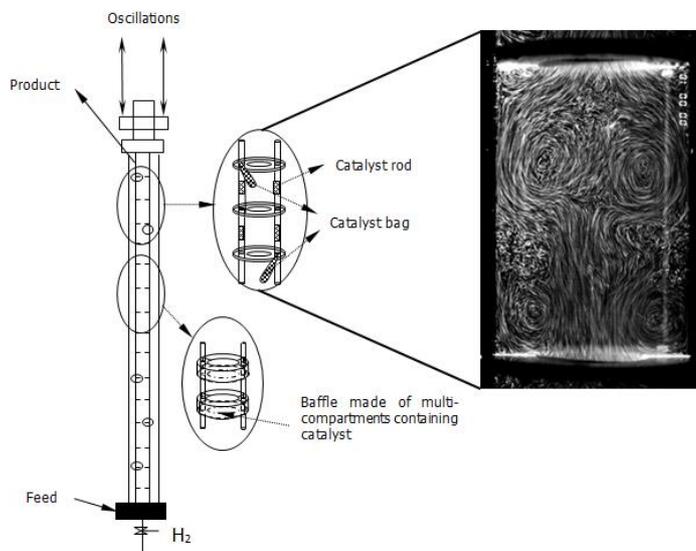


Figura 2.4 Esquema OBR y mezcla caótica presentada entre discos

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 2.5 A); (b) los catalizadores porosos espumas pueden sustituir los deflectores (Figura 2.5 B); (c) las secciones de los tubos de malla se puede cubrir con espuma catalizadores porosos (Figura 2.5

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.

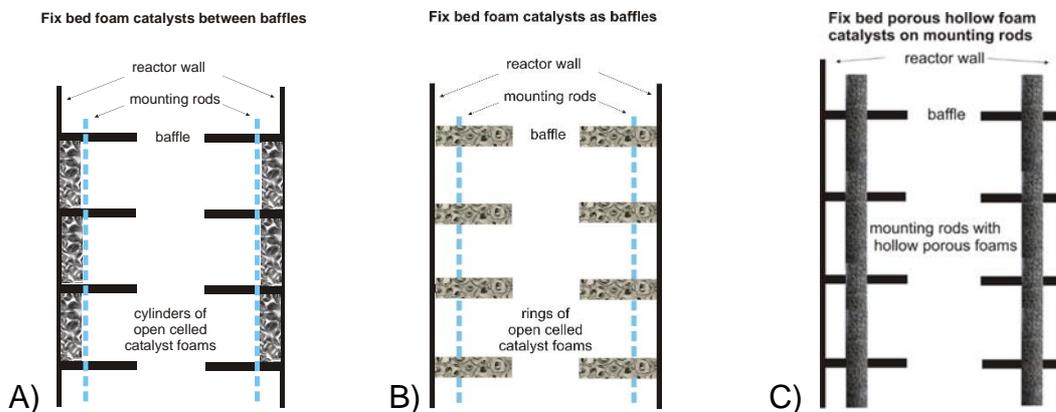


Figura 2.5 Diferentes enfoques para introducir el catalizador de la OBR bastidor oscilante

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 OBR es innovador en el diseño de una nueva generación de reactores catalíticos de tres fases. La aplicación de OBR en la hidrogenación es intrínsecamente más seguro para las siguientes razones: (i) pequeña y estrecha distribución de tamaño de las burbujas H₂ 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 OBR 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 OBR se reduce sustancialmente, por ejemplo, una capacidad de 100t/a se podría producir usando un OBR 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.

2.2. Estudios previos

2.2.1. 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), 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:

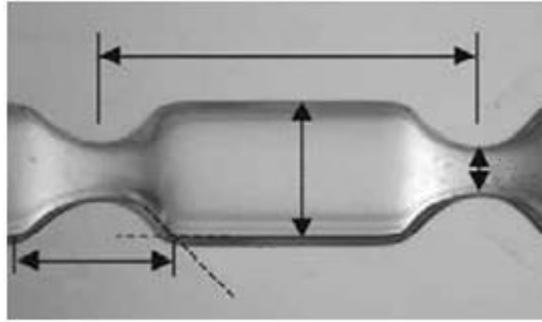


Figura 2.6 Meso-reactor de flujo oscilatorio. $D=4.4$ mm, $L=13$ mm, $\delta=6$ mm, $D_0=1.6$ mm

Como mostraron Harvey et al. en 2003 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.

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

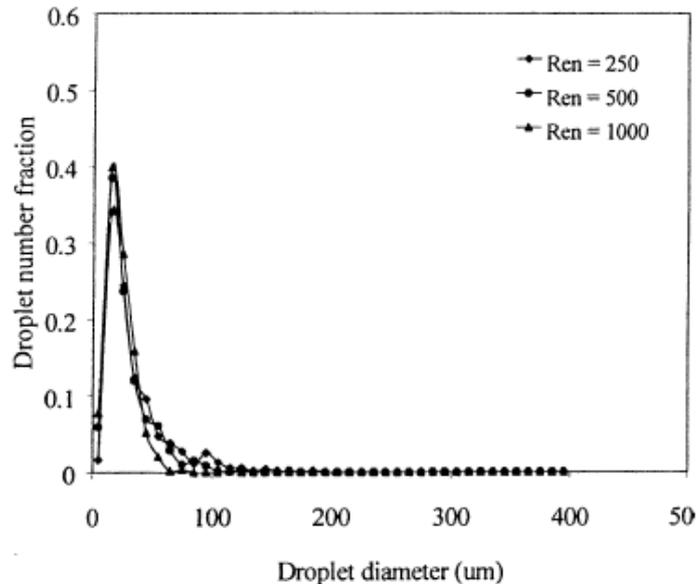


Figura 2.7 Típica forma gaussiana de la distribución del tamaño de gota en un reactor de flujo oscilatorio.

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 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.

Capítulo 3. Metodología de simulación numérica en fluent

3.1. Modelo Matemático del Problema

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.1)$$

Ecuación de cantidad de movimiento

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S_{Mx} \quad (3.2)$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S_{My} \quad (3.3)$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S_{Mz} \quad (3.4)$$

Ecuación de energía

$$\rho \frac{Di}{Dt} = -p \nabla \cdot \vec{v} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \Phi + S_i \quad (3.5)$$

Ecuación de estado

$$p = p(\rho, T) \quad y \quad i = i(\rho, T) \quad (3.6)$$

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 3.1 a 3.5, se puede ver que tienen una estructura común. Introduciendo una variable genérica ϕ en esas ecuaciones, se obtiene,

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\vec{v}) = \nabla \cdot (\Gamma \cdot \nabla \phi) + S_\phi \quad (3.7)$$

La ecuación (3.7) se denomina ecuación del transporte de la variable ϕ . 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 (Γ =coeficiente de difusión) y el asociado a otros fenómenos en el lado de derecho. La ecuación (3.7) 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 3.7 se emplea como punto de partida para el método de los volúmenes finitos. Haciendo ϕ igual a 1, u , v , w y i (ó T) y seleccionando los valores adecuados para el coeficiente de difusión Γ y para S_ϕ , 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 3.7 sobre un volumen de control tridimensional V_c , obteniéndose,

$$\int_{V_c} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \int_{V_c} \nabla \cdot (\rho \phi \vec{u}) dV = \int_{V_c} \nabla \cdot (\Gamma \cdot \nabla \phi) dV + \int_{V_c} S_\phi dV \quad (3.8)$$

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,

$$\int_{V_c} \nabla \cdot \vec{a} dV = \int_{S_c} \vec{n} \cdot \vec{a} dA \quad (3.9)$$

Aplicando el teorema de Gauss, la ecuación (3.8) se puede escribir como,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{V_c} \rho \phi dV \right) + \int_{S_c} \vec{n} \cdot (\rho \phi \vec{u}) dA = \int_{S_c} \vec{n} \cdot (\Gamma \cdot \nabla \phi) dA + \int_{V_c} S_\phi dV \quad (3.10)$$

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 ϕ en el volumen de control. El producto contenido en la segunda integral del lado izquierdo expresa la componente del flujo de ϕ 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 ϕ . Así, el producto contenido en la primera integral del lado derecho expresa el aumento de ϕ en el elemento fluido debido a la difusión. El último término del lado derecho de la ecuación 3.10 representa el incremento de ϕ 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).

3.2. Hipótesis de simulación.

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.

3.2.1. 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 del apartado 3.1. Estos son: el *solver segregado* y el *solver acoplado*.

En ambos *solver* 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.

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.

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 máscicos 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.

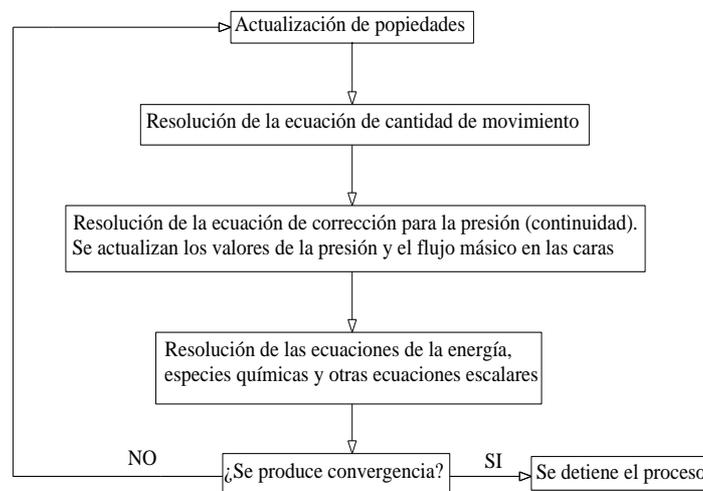


Figura 3.1 Proceso de cálculo del solver segregado

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,

Actualización de las propiedades del fluido en base a la solución actual (para la primera iteración éstos valores coinciden con los iniciales).

Resolución simultanea de las ecuaciones de continuidad, cantidad de moviendo 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.

Llinealización: 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 las ecuaciones, se puede obtener una formulación *implícita* o *explícita* del problema. Cuando de habla de estos términos se hace referencia a:

Formulación implícita: Para una variable del problema, el valor desconocido de esta en cada 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 casa una de las celdas.

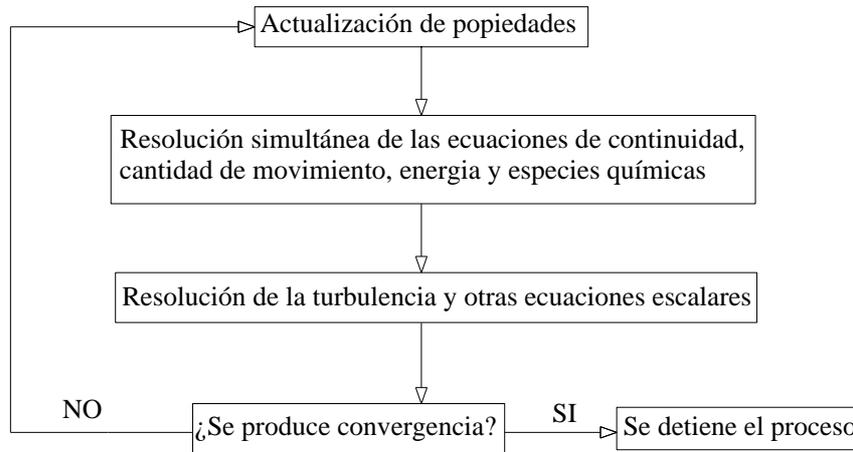


Figura 3.2 Proceso de cálculo del solver acoplado

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 multimalla (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 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.

3.2.2. 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 3.10) 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 3.3 se obtiene,

$$\sum_f^N \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^N \Gamma_\phi (\nabla \phi)_n \cdot \vec{A}_f + S_\phi V \quad (3.11)$$

siendo N el número de caras del contorno de la celda o volumen de control, ϕ_f el flujo de ϕ 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.

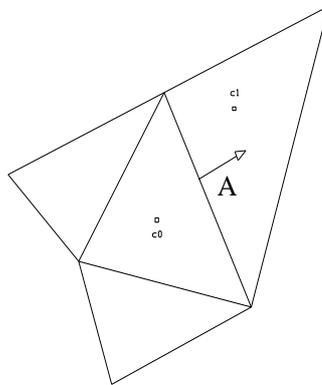


Figura 3.3 Volumen de control sobre el que se aplica el método de los volúmenes finitos

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

Un esquema *upwind* es aquel mediante el cual se obtiene el valor de ϕ_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.

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 ϕ_f se toman iguales a los de la celda ϕ_c que se encuentra aguas arriba de ella.

Ley exponencial

La ley exponencial es un esquema de discretización que interpola los valores de una variable ϕ en una cara utilizando la solución exacta de la ecuación unidimensional de convección-difusión (ecuación 3.12),

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.12)$$

donde Γ y ρu son constantes sobre el intervalo Δx . La ecuación 3.12 puede ser integrada obteniéndose la siguiente solución, que expresa la variación de ϕ en función de x ,

$$\frac{\phi(x) - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} = \frac{e^{\left(\frac{Pe \cdot x}{L}\right)} - 1}{e^{(Pe)} - 1} \quad (3.13)$$

Siendo ϕ_0 y ϕ_L los valores de ϕ para $x=0$ y $x=L$ respectivamente, y Pe el número adimensional de Péclet, definido como,

$$Pe = \frac{\rho u L}{\Gamma} \quad (3.14)$$

Para valores elevados del número de Péclet, el valor de ϕ en $x=L/2$ es, aproximadamente, igual al valor aguas arriba (ϕ_L). Cuando $Pe=0$ (es decir, no hay flujo convectivo y, por tanto, el problema es de difusión pura) el valor de ϕ puede ser interpolado usando un esquema lineal entre los valores de ϕ en $x=0$ y $x=L$. Si el número de Péclet tiene un valor intermedio, hay que aplicar la ley exponencial de la ecuación 3.13 para obtener el valor de ϕ 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 ϕ en la cara f se obtiene mediante,

$$\phi_f = \phi + \nabla \phi \cdot \Delta \vec{s} \quad (3.15)$$

donde ϕ 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 ϕ en cada celda. Éste se obtiene a partir del teorema de la divergencia, que en forma discreta se expresa como,

$$\nabla \phi = \frac{1}{V} \sum \tilde{\phi}_f \vec{A} \quad (3.16)$$

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

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 ϕ 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 ϕ se obtiene según:

$$\phi_e = \theta \left[\frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_P + \frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_E \right] + (1 - \theta) \left[\frac{S_u + 2S_d}{S_u + S_d} \phi_P + \frac{S_c}{S_u + S_c} \phi_W \right] \quad (3.17)$$

Haciendo $\theta=1$, la ecuación 3.17 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,

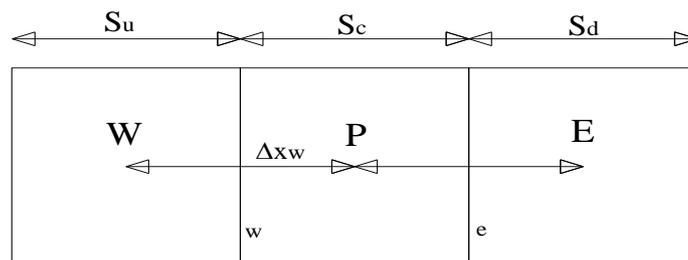


Figura 3.4 Volumen de control unidimensional

Forma linealizada de las ecuaciones discretizadas

La forma discretizada de la ecuación del transporte (ecuación 3.11) contiene la incógnita ϕ 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 3.11 puede escribirse como,

$$a_p \phi = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (3.18)$$

donde el subíndice nb hace referencia a las celdas adyacentes a_p y a_{nb} son los coeficientes de linealización de ϕ y ϕ_{nb} , respectivamente.

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 ϕ durante cada iteración. Este valor depende del valor de la magnitud en la iteración anterior y se define como,

$$\phi = \phi_{old} + \alpha \Delta \phi \quad (3.19)$$

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

Evaluación de las derivadas

El gradiente de ϕ 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,

$$(\nabla \phi)_{c0} = \frac{1}{V} \sum_f \bar{\phi}_f \bar{A}_f \quad (3.20)$$

donde $\bar{\phi}_f$ es el valor de ϕ 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 ϕ en los centros de las celdas adyacentes,

$$\bar{\phi}_f = \frac{\bar{\phi}_{c0} + \bar{\phi}_{c1}}{2} \quad (3.21)$$

Formulación basada en los nodos

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

$$\bar{\phi}_f = \frac{1}{N_f} \sum_n^N \bar{\phi}_n \quad (3.22)$$

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.

Esquemas de interpolación en el 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 3.23) y cantidad de movimiento (ecuación 3.24) en su forma integral y estacionaria,

$$\oint \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = 0 \quad (3.23)$$

$$\oint \rho \vec{v} \vec{v} \cdot d\vec{A} = -\oint p I \cdot d\vec{A} + \oint \overline{\tau} \cdot d\vec{A} + \int_V \vec{F} dV \quad (3.24)$$

siendo I la matriz identidad, $\overline{\tau}$ 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 3.11 se obtiene la forma discretizada de la ecuación de cantidad de movimiento, que para su componente x viene dada por,

$$a_p u = \sum a_{nb} u_{nb} + \sum p_f A \hat{i} + S \quad (3.25)$$

Si el campo de presiones y los flujos máscicos a través de las caras fueran conocidos, la ecuación 3.25 podría ser resuelta de la forma expuesta en 3.2.2, obteniéndose como solución el campo de velocidades. Sin embargo, el campo de presiones y los flujos máscicos 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 3.25 necesita el valor de la presión en la cara que está entre las celdas c_0 y c_1 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.

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).

Discretización de la ecuación de continuidad

La ecuación 3.2 puede ser discretizada sobre el volumen de control de la figura 4.6, obteniéndose la siguiente ecuación,

$$\sum_f^N J_f A_f = 0 \quad (3.26)$$

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 3.26 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 3.26 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 (3.25). Aplicando el procedimiento anterior, el flujo a través de una cara se obtiene como,

$$J_f = \hat{J}_f + d_f(p_{c0} - p_{c1}) \quad (3.27)$$

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 las velocidades en esas celdas. El término d_f es función de \bar{a}_p (valor medio de los coeficientes a_p 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 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 3.27 para obtener una ecuación para la presión a partir de la ecuación de continuidad discretizada (ecuación 3.26). 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.

$$J_f^* = \hat{J}_f^* + d_f(p_{c0}^* - p_{c1}^*) \quad (3.28)$$

La ecuación 3.28 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.

$$J_f^* = \hat{J}_f^* + J_f' \quad (3.29)$$

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

$$J_f' = d_f(p'_{c0} - p'_{c1}) \quad (3.30)$$

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

El algoritmo SIMPLE sustituye las ecuaciones corregidas 3.29 y 3.30 en la ecuación de continuidad discretizada (ecuación 3.26) para obtener una ecuación discreta para el valor de la presión corregida en cada celda,

$$a_p p' = \sum_{nb} a_{nb} p'_{nb} + b \quad (3.31)$$

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

$$b = \sum_f^N J_f^* A_f \quad (3.32)$$

La ecuación (3.31) 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,

$$p = p^* + \alpha_p p' \quad (3.33)$$

$$J_f = J_f^* + d_f(p'_{c0} - p'_{c1}) \quad (3.34)$$

siendo α_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-Consisten*).

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 (3.34) 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:

$$\overline{a_p - \sum_{nb} a_{nb}} \quad (3.35)$$

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.

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 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.

3.3. 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.

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 axilsimétrico, 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 solidas) 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

3.4. 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.

3.4.1. 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.

Definición de los residuos para el 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,

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (3.36)$$

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 (3.36) puede ponerse como,

$$a_p = \sum_{nb} a_{nb} - S_p \quad (3.37)$$

El residuo R^ϕ calculado por Fluent en el solver segregado es la suma de las diferencias entre los términos de la ecuación (3.36) para todas las celdas P del dominio computacional, como se muestra en la ecuación (3.38). A este valor de los residuos se le conoce como residuos no escalados,

$$R^\phi = \sum_{\text{celdas}} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_p \right| \quad (3.38)$$

En general, es difícil evaluar la convergencia basándose en los resultados obtenidos para los residuos definidos según la ecuación (3.38), 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,

$$R^\phi = \frac{\sum_{\text{celdas}} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_p \right|}{\sum_{\text{celdas}} a_p \phi_p} \quad (3.39)$$

donde el valor de ϕ_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,

$$R^\phi = \sum_{\text{celdas}} |\text{Ratio de generación de masa en la celda } P| \quad (3.40)$$

mientras que los residuos escalados se obtienen mediante,

$$\frac{R_{\text{iteración},N}^C}{R_{\text{iteración},5}^C} \quad (3.41)$$

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

Definición de los residuos para el solver acoplado

Los residuos para 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 dominio, es decir,

$$R_{W,RMS} = \sqrt{\sum \left(\frac{\partial W}{\partial t} \right)^2} \quad (3.42)$$

donde la variación de W con el tiempo hace referencia a la evolución de la magnitud a conservar con el numero de iteraciones. La ecuación (3.42) 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 (3.42) Por ello, se emplean también, los residuos escalados, que vienen dados por,

$$\frac{R_{W,iteración,N}}{R_{W,iteración,5}} \quad (3.43)$$

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

3.4.2. 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 fluids 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.

Area-Weighed Average: calcula la media de la magnitud ponderándola con el aresa 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 Maximun: 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.

3.4.3. 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.

Balance de masa global: debe cumplirse con un error del orden de 10^{-16} kg/s al final del proceso iterativo.

Balance 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. Simulación numérica de flujos multifásicos en FLUENT

4.1. Introducción

Un gran número de flujos encontrados en la naturaleza y la tecnología son una mezcla de fases. Fases físicas de la materia son de gas, líquido y sólido, pero el concepto de fase en un sistema de flujo multifase 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.

4.1.1. Regímenes de Flujo Multifásico

Los regímenes de flujo multifase se pueden agrupar en cuatro categorías: los flujos de gas-líquido o líquido-líquido; flujos de gas-sólido; flujos de líquido-sólido; y los flujos trifásicos.

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.

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.

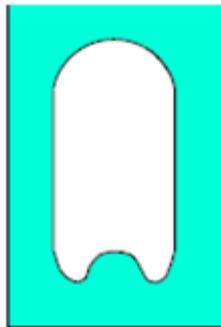
Flujos Líquido-Sólido

Los siguientes regímenes son los flujos de líquido-sólido:

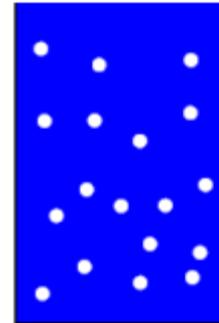
Flujo en suspensión: Este flujo corresponde al transporte de partículas en líquidos. El comportamiento fundamental de los flujos de líquido-sólido varía con las propiedades de las partículas sólidas con respecto a las del líquido. En estos flujos, el número de Stokes es normalmente menor que 1. Cuando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

Hidrotransporte: describe la distribución densa de partículas sólidas en un líquido continuo.

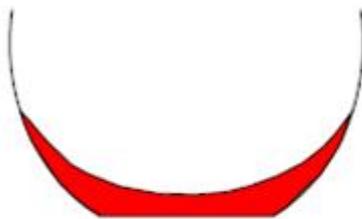
Sedimentación: escribe una alta columna que contiene inicialmente una mezcla uniforme de partículas dispersas. En la parte inferior, las partículas se ralentizará y forman una capa de lodo. En la parte superior, aparecerá una interfaz clara, y en el centro existirá una zona de sedimentación constante.



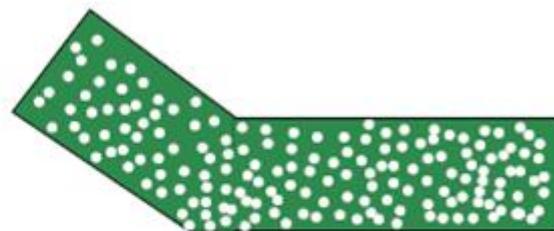
slug flow



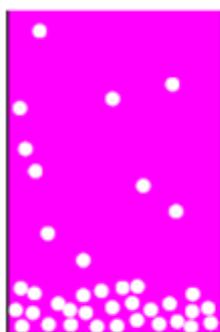
bubbly, droplet, or
particle-laden flow



stratified/free-surface flow



pneumatic transport,
hydrotransport, or slurry flow



sedimentation



fluidized bed

Figura 4.1 Tipos de flujos bifásicos

4.1.2. Ejemplos Sistemas Multifásicos

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.

Ejemplos de lecho fluidizado incluyen reactores de lecho fluidizado circulante y lechos fluidizados.

Ejemplos flujo de la 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.

4.2. 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.

4.2.1. Simulaciones modelos multifásicos

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.

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 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 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 hidrotransporte, 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 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.

4.3. Modelo teórico Volume of Fluid (VOF)

4.3.1. Resumen y limitaciones del modelo 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*.

Stremwise 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.

Cálculos estado estacionario y transitorio en VOF

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 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.

La formulación VOF 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 α_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 α_q las propiedades y valores apropiadas serán asignadas a cada volumen de control dentro del dominio.

4.3.2. 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:

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

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 .

Por defecto el término S_{σ_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.

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

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.

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

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^{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.

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.

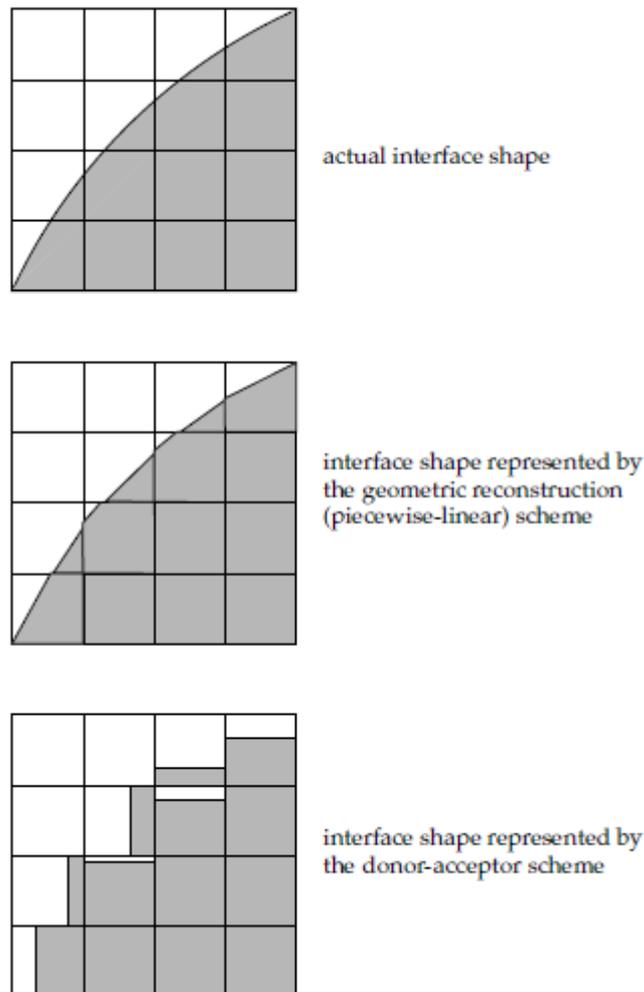


Figura 4.2 Interpolaciones en la interfaz

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.

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 advectado 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^{th} dentro de la celda, y la de la celda vecina que comparte la 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-acceptor, debe ser calculada una solución dependiente del tiempo. Además, el esquema de donor-acceptor 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.

4.3.3. 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

$$\rho = \alpha_2 \rho_2 + (1 - \alpha_2) \rho_1 \quad (4.5)$$

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

$$\rho = \sum \alpha_q \rho_q \quad (4.6)$$

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

4.3.4. Ecuación de Momentum

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 ρ y μ .

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

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.

4.3.5. Ecuación de Energía

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

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

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

Las propiedades ρ y k_{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.

4.3.7 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.

4.4. Teoría Mixture Model

4.4.1. Resumen y limitaciones de modelo Mixture

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.

El modelo Mixture puede 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.

El modelo de mezcla 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

El modelo Mixture 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.

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 α_q y α_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 Momentum para la mezcla, la ecuación de energía para la mezcla, y la ecuación fracción de volumen para las fases secundarias, así como expresiones algebraicas para las velocidades relativas (si las fases se están moviendo a diferentes velocidades).

4.4.2. 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 dos aspectos:

El modelo de mezcla permite a las fases ser interpenetrantes. La fracción de volumen α_q y α_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

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

α_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:

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

donde n es el número de fases, \vec{F} es la fuerza, y μ_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 .

4.5. Modelo Eulerian

4.5.1. Resumen y limitaciones de modelo Eulerian.

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.

Con el modelo de múltiples fases Eulerian, el número de fases secundarias sólo está limitado por los requisitos de memoria y comportamiento de convergencia. Se pueden 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.

El modelo multifase Eulerian de FLUENT no distingue entre flujos multifásicos líquido-líquido y fluido-sólido (granular). Un flujo granular es simplemente uno que 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 Momentum 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.

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.

El Seguimiento Particular (utilizando el modelo de fase dispersa de Lagrange) interactúa sólo con la fase primaria.

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.

4.5.2. 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 α_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

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

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

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

Donde $\bar{\tau}_q$ es el tensor tensiones de la fase q, \vec{F}_q corresponde a las fuerzas externas al sistema, $\vec{F}_{lift,q}$, es la fuerza de sustentación, $\vec{F}_{vm,q}$, 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:

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

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

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

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_{qp} es la entalpía de la interfase. El calor intercambiado entre fases debe cumplir con las siguientes condiciones: $\vec{Q}_{pq} = -\vec{Q}_{qp}$ y $\vec{Q}_{qq} = 0$.

Capítulo 5. Procesado en FLUENT

5.1. Introducción

En este capítulo se va a proceder a la descripción de los pasos realizados para la resolución del problema planteado y la configuración de un caso en el programa comercial FLUENT.

5.2. Pasos realizados

5.2.1. Ascenso burbuja de aire en columna lisa vertical

Para familiarizarnos con la resolución en FLUENT de casos bifásicos aire-agua partimos de un problema básico simulando el ascenso de una burbuja de aire en el interior de una columna.

Para la resolución de este problema proponemos la malla de la Figura 5.1. En la que existe una zona de la superficie donde colocamos la burbuja.

Este caso ha sido resuelto para diferentes diámetros de burbuja. Los diámetros de burbuja elegidos han sido 8 y 4mm. Para conseguir los diferentes diámetros de burbuja partiendo de la malla inicial de la burbuja de 8mm creada hemos escalado x0,5.

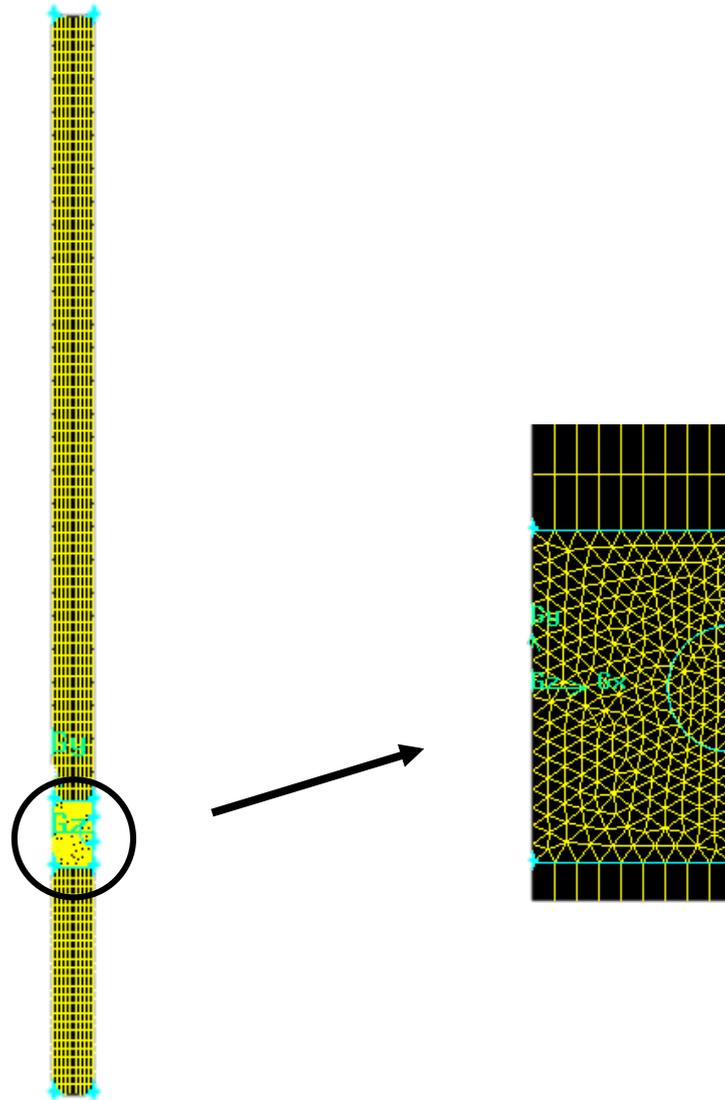


Figura 5.1 Mallado ascenso burbuja de aire

Velocidades de ascenso

La velocidad de ascenso en las simulaciones concuerda con la fórmula de Davies y Taylor correspondiente a grandes burbujas aisladas donde los efectos de la tensión superficial y la viscosidad son despreciables.

$$U_{\infty} = 0.707\sqrt{gd_e} \quad (5.1)$$

Diámetro(mm)	$U_{\text{simulación}}$ (m/s)	U_{∞} (m/s)
8	0,175	0,188
4	0,126	0,133

Tabla 5.1 Velocidad de ascenso burbuja

Las velocidades de ascenso de la burbuja varían a lo largo de la ascensión de la burbuja debido a que esta cambia de geometría.

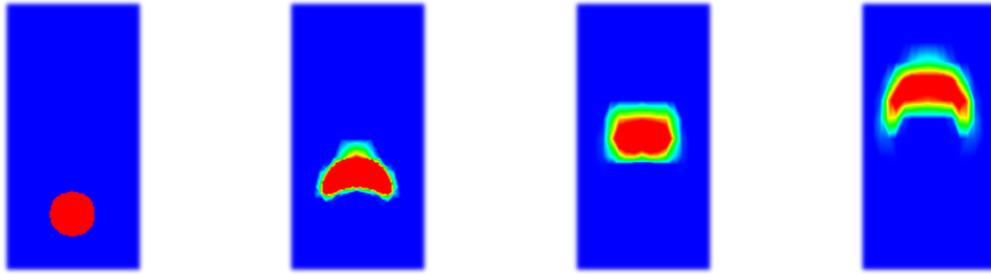


Figura 5.2 Cambios de geometría en el ascenso de la burbuja

5.2.2. Inyección lateral aire en columna con deflectores

Una vez conseguida la simulación del caso anterior se procedió a la búsqueda de la geometría adecuada para la correcta simulación del reactor. La primera geometría utilizada para la resolución del problema (Figura 5.3) 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.

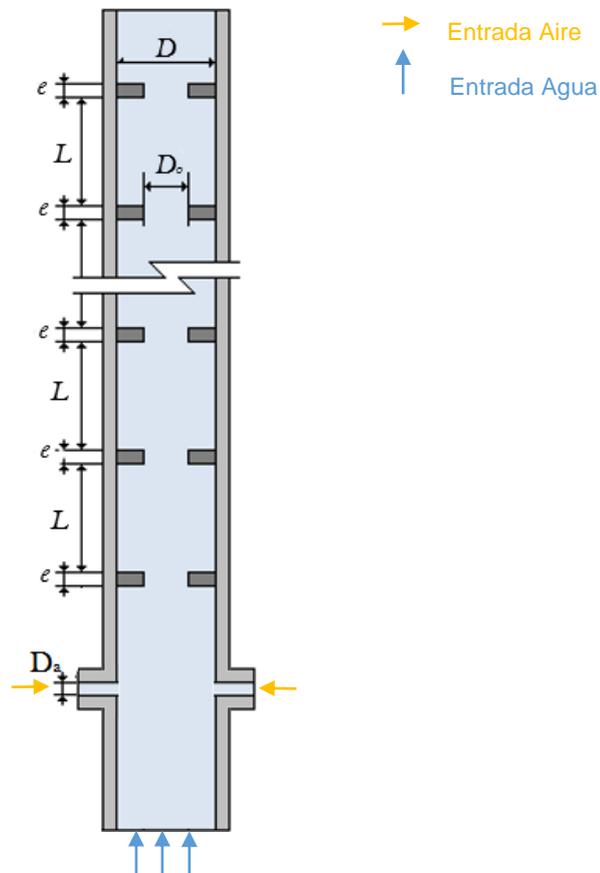


Figura 5.3 Primera geometría utilizada

La resolución de la columna anterior presentó diferentes problemas.

- a) El aire no se desprende de las entradas laterales cuando inyectamos a bajas velocidades quedando estancado. Esto imposibilita la introducción de aire en las condiciones impuestas para la resolución del problema.
- b) Al aumentar la velocidad de entrada las burbujas ascienden adheridas a la pared hasta el primer disco consiguiendo un mezclado deficiente.

Tras los primeros resultados recopilados optamos por una variación de la geometría con el fin de obtener mejor mezclado entre fases. Aumentamos el número de deflectores y el aire es inyectado por la parte inferior, sin conductos laterales.

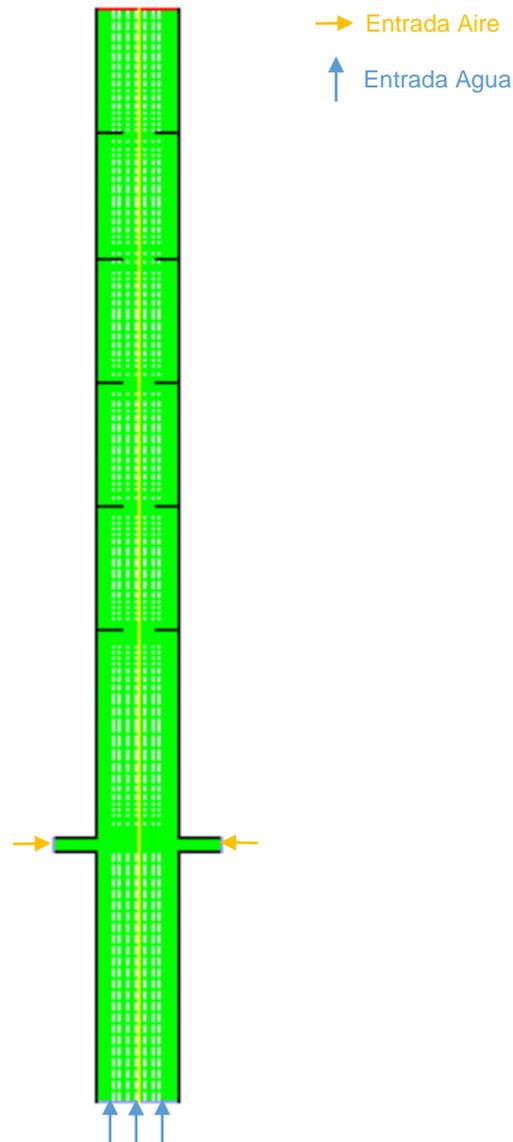


Figura 5.4 Mallado primera geometría utilizada

5.2.3. Inyección aire parte central de la entrada en columna con deflectores

En la Figura 5.5 izquierda podemos ver la geometría final utilizada. Al no tener las entradas laterales de aire resolvemos los problemas que nos planteaba la columna anterior.

Características columna

Conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25$ mm, en el que se insertan separados una distancia $L = 37,5$ mm, diez discos con orificio, de diámetro interior $D_0 = 10,5$ mm y espesor infinitesimal. Dispone de una región de entrada con una distancia hasta el primer disco $L_0 = 97,5$ mm. En la sección inferior de la denominada región de entrada se sitúa una entrada de aire en la parte central con diámetro D_0 y se sitúa la entrada de agua.

Estrategia de resolución

Partimos de la columna llena de agua. Inyectamos por la parte inferior un caudal de $1\text{m}^3/\text{s}$ de agua a 20°C y el 15% de aire. El objetivo es llenar nuestra columna de aire hasta llegar a una solución cuasi estacionaria. Una vez obtenida esta solución se introduce el flujo oscilatorio. Con estas condiciones de operación se observa que se desprende una gota de diámetro D_0 cada 12,5 segundos. Este tiempo necesario es provocado por el conjunto de fuerzas que debe vencer la burbuja presión y tensión superficial. Estos tiempos de llenado son extremadamente grandes. Por lo que tras 90 segundos de simulación observando la inercia de llenado de la columna proponemos la solución inicial presentada en el apartado siguiente.

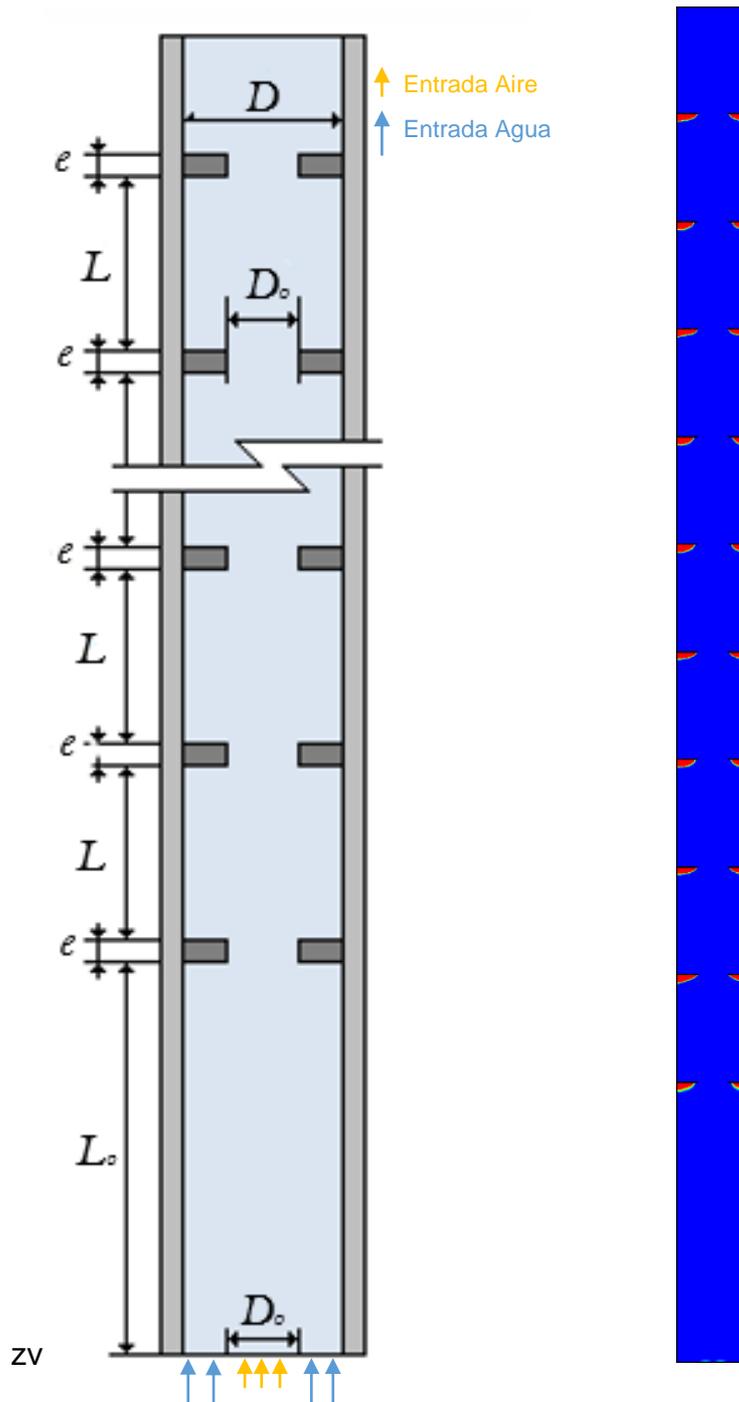


Figura 5.5 Geometría final utilizada y solución inicial propuesta

5.2.4. Solución inicial propuesta

La solución inicial propuesta Figura 5.5 derecha corresponde a una situación inicial ideal en la que el aire se queda estancado bajo los discos insertados. Esta solución podría darse tras un largo periodo de tiempo inyectando aire desde la zona inferior o al llenar la columna de agua.

5.3. Preparación caso final paso a paso

Ejecutar el programa Fluent

Start > Programs > Fluent Inc > FLUENT o bien ejecute el icono que debe aparecer en el escritorio del PC. Seleccione la opción 2ddp dentro de la lista de opciones y luego haga clic en Run.

La opción 2ddp se utiliza para seleccionar el *solver* bidimensional de doble precisión. En el *solver* de doble-precisión, cada número decimal está representado por 64 bits, en vez de los 32 bits que se emplean en el *solver* de precisión sencilla. La opción de doble precisión no aumenta sólo la precisión sino también el rango máximo y mínimo que pueden alcanzar las magnitudes que se van a representar. Obviamente, esta opción requiere de más memoria de cálculo.

Importar malla

File>Read>Case... Utilizando el explorador que nos aparece para acceder a su directorio de trabajo y seleccionar el fichero *columna_burbuja.msh*. El archivo *.msh* ha sido creado con el programa GAMBIT cargando la malla de la Figura 5.6. E

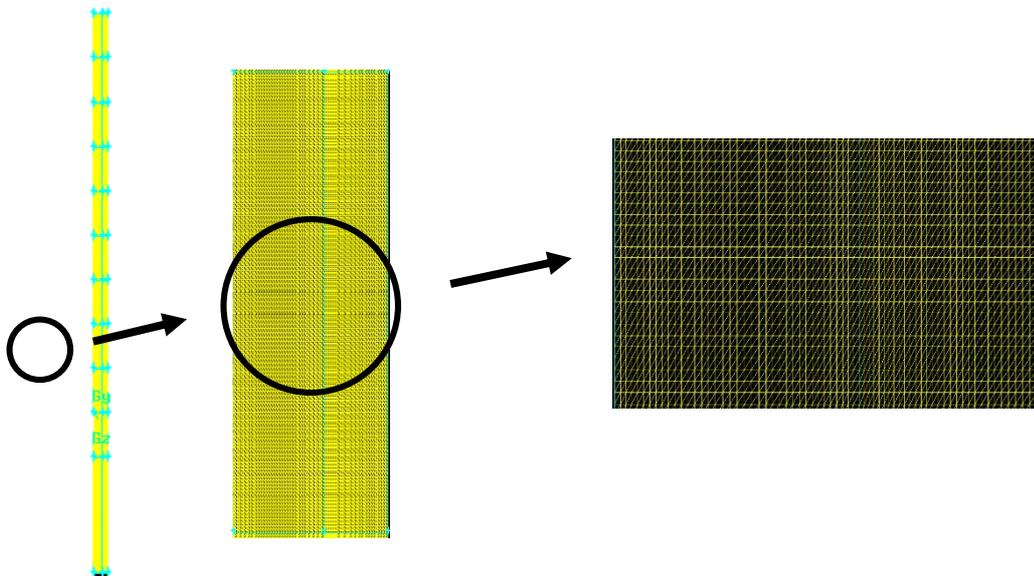


Figura 5.6 Mallado triangular columna final en GAMBIT

Validar y escalar malla

En primer lugar, hemos de chequear el mallado para asegurarnos que no ha habido errores ni en la generación, ni en la exportación ni en la importación. Para ello utilizamos el comando *Grid>Check...*

```

Grid Check

Domain Extents:
  x-coordinate: min (m) = 0.000000e+000, max (m) = 1.250000e+001
  y-coordinate: min (m) = -1.100000e+002, max (m) = 3.625000e+002
Volume statistics:
  minimum volume (m3): 1.916101e-002
  maximum volume (m3): 8.854592e-002
  total volume (m3): 5.906250e+003
Face area statistics:
  minimum face area (m2): 1.398557e-001
  maximum face area (m2): 8.430234e-001
Checking number of nodes per cell.
Checking number of faces per cell.
Checking thread pointers.
Checking number of cells per face.
Checking face cells.
Checking bridge faces.
Checking right-handed cells.
Checking face handedness.
Checking face node order.
Checking element type consistency.
Checking boundary types:
Checking face pairs.
Checking periodic boundaries.
Checking node count.
Checking nosolve cell count.
Checking nosolve face count.
Checking face children.
Checking cell children.
Checking storage.
Done.
    
```

Figura 5.7 Chequeo de la malla en FLUENT

En caso de que hubiese algún error, debería ser detectado por FLUENT en esta operación. Compruebe el resultado del chequeo. Si todo está correcto, proceda a comprobar el tamaño del mallado mediante el comando *Grid>Info>Size*

```

Grid Size

Level   Cells   Faces   Nodes   Partitions
  0     179792  271458  91657   1

11 cell zones, 66 face zones.
    
```

Figura 5.8 Tamaño de la malla en FLUENT

A continuación procedemos a escalar la malla mediante el comando *Grid>Scale...* Seleccionamos mm y el botón Scale para que las unidades de resolución sean las que hemos propuesto.

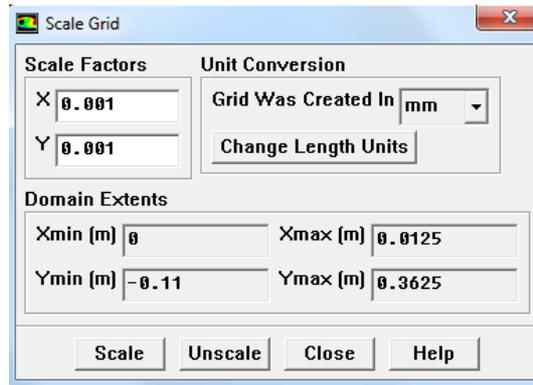


Figura 5.9 Escalar malla

Visualización malla

Para la correcta visualización de la malla en FLUENT debemos realizar la simetría. Mediante el comando *Display>Views...* seleccionamos el eje de simetría y el botón Apply.

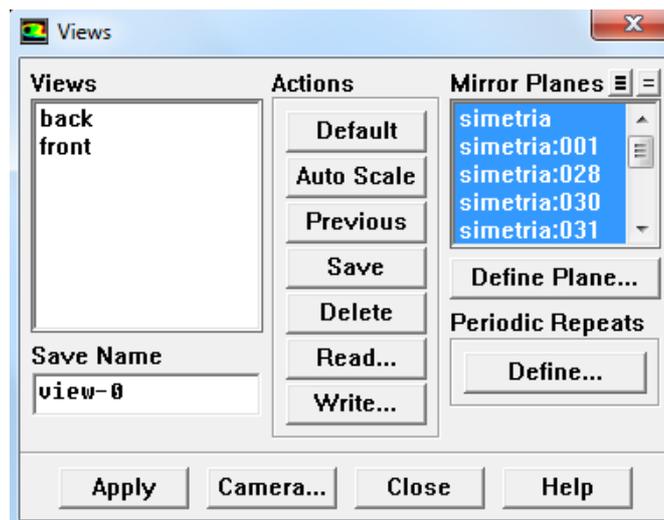


Figura 5.10 Plano de simetría

Ahora si procedemos a la visualización de la malla en fluent mediante el comando *Display>Grid...* Debemos asegurarnos que los todos objetos que aparecen bajo el epígrafe *Surfaces* están seleccionados. A continuación haga clic en *Display*. Una ventana gráfica se abre y la malla aparece dibujada en ella. Ya puede hacer clic en el botón *Close* de la ventana *Grid Display* para ganar espacio en el escritorio. Como puede comprobar, la ventana gráfica no se cierra y permanece visible.

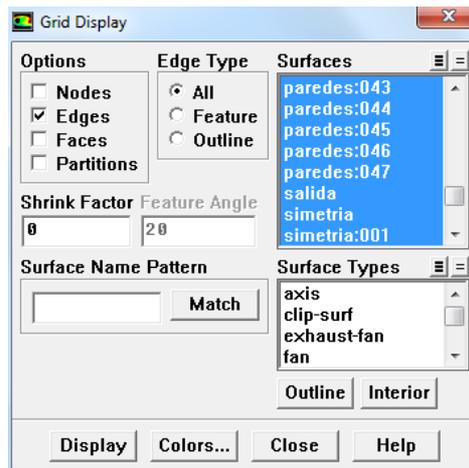


Figura 5.11 Visualización de superficies

Las operaciones más importantes que se pueden hacer dentro de la ventana gráfica se resumen a continuación

Traslación. El mallado se puede mover en cualquier dirección (centrar el dibujo completo o solo una zona determinada) si se mantiene pulsado el botón izquierdo del ratón y a la vez se mueve el ratón en la dirección que se quiera.

Zoom In. Mantenga pulsado el botón central del ratón y arrastre una ventana desde la esquina superior izquierda a la esquina inferior derecha de la zona que quiere observar. Luego suelte y se ejecutará el zoom de esa zona, ajustándolo al tamaño máximo de la ventana gráfica.

Zoom Out. Mantenga pulsado el botón central del ratón y arrastre una ventana en cualquier lado desde la esquina inferior derecha a la esquina superior izquierda (inverso al anterior). Luego suelte.

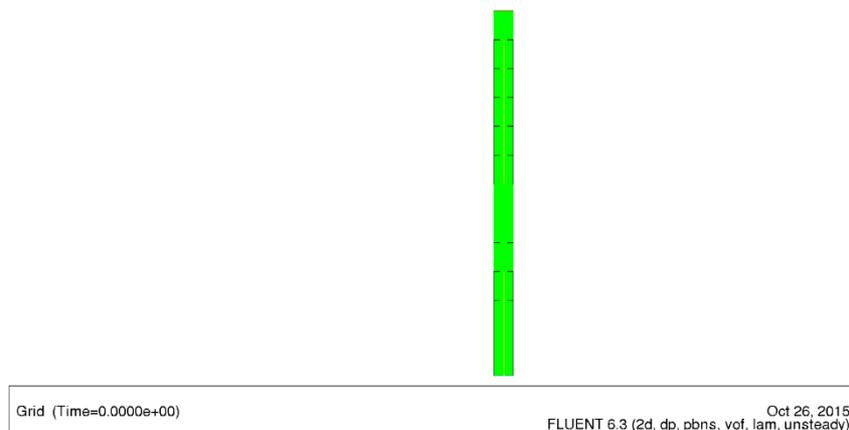


Figura 5.12 Visualización de la malla en Fluent

Definición del Solver

Define>Models>Solver en el panel elegimos la opción *unsteady* ya que las simulaciones que el estado en el que trabajamos es transitorio. EL resto de las opciones las dejamos con la configuración por defecto.

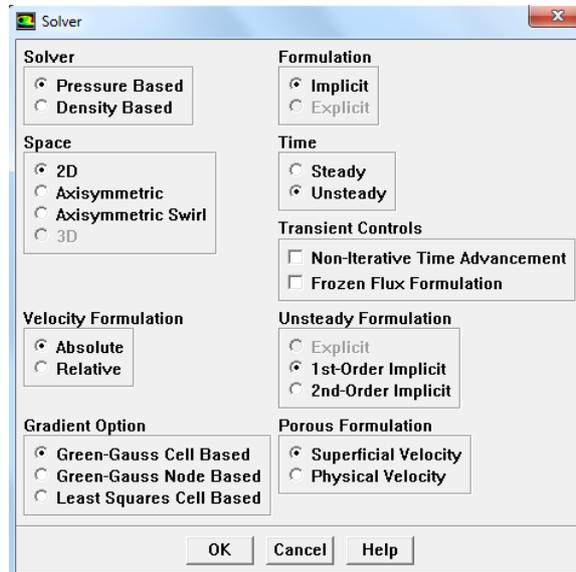


Figura 5.13 Definición del solver

Definición de las propiedades de los fluidos y las fases

Main Menu > Define > Materials... Necesitamos cargar el material “air” (aire) y el material “water-liquid” (agua). El aire siempre está cargado por defecto. Para añadir el agua, hacemos clic en *FLUENT Database...* En la ventana desplegable que obtenemos, buscamos el material *water liquid*, lo seleccionamos y damos a Copy.

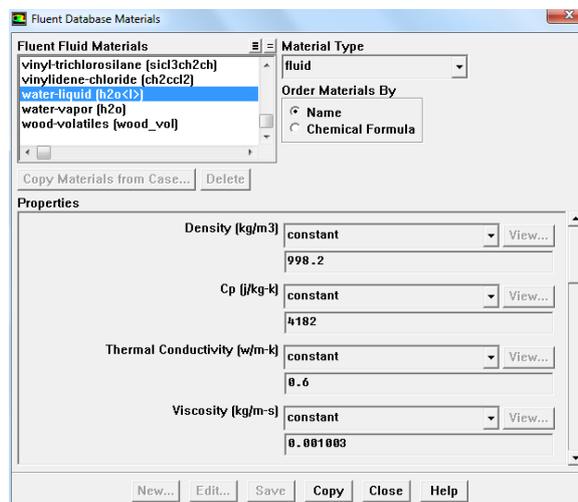


Figura 5.14 Definición de propiedades

En la ventana de *Materials* comprobamos que se ha cargado y que tenemos tanto el aire como el agua accesibles, pulsando la persiana desplegable en *Fluent Fluid Materials*. Si está todo correcto, salga haciendo clic en Close.

Configuración modelo multifase

Main Menu > Define > Models > Multiphase... Seleccionamos la segunda opción, *Volume of Fluid*. Al hacer clic, se expande la ventana dejando accesibles nuevos parámetros. En *VOF Scheme*, seleccionamos la primera opción que vayamos a utilizar en nuestro caso utilizaremos la opción *Explicit-Geo-Reconstruct* que es la más computacionalmente de todas pero que representa la interfaz entre las fases con mayor exactitud tal y como se había comentado en capítulos anteriores.

Finalmente, activamos la opción *Implicit Body Force* dentro del apartado *Body Force Formulation*. Por supuesto, dejamos por defecto el número de fases en 2.

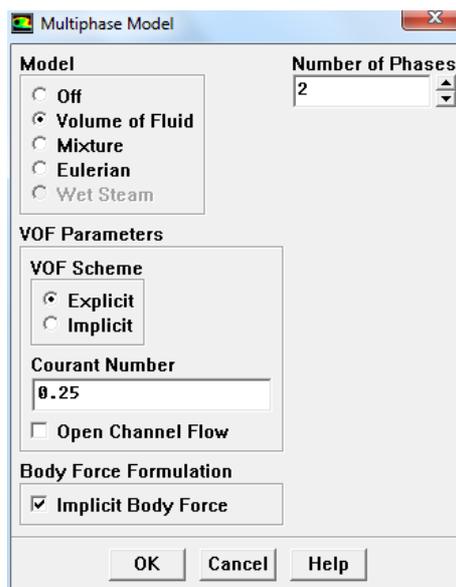


Figura 5.15 Configuración modelo multifasico

Definición de fases

Define>Phases... a continuación vamos a definir los fluidos que corresponden a cada fase. Al abrir esta ventana, nos aparecen dos fases: *phase-1* y *phase-2*. Seleccionamos la primera y damos a *Set...* La nueva ventana desplegable nos permite elegir el fluido de esa fase y darle nombre. Seleccionamos *water-liquid*

y le damos como nombre *agua*. Hacemos clic en *Ok* y a continuación repetimos el proceso para el aire.

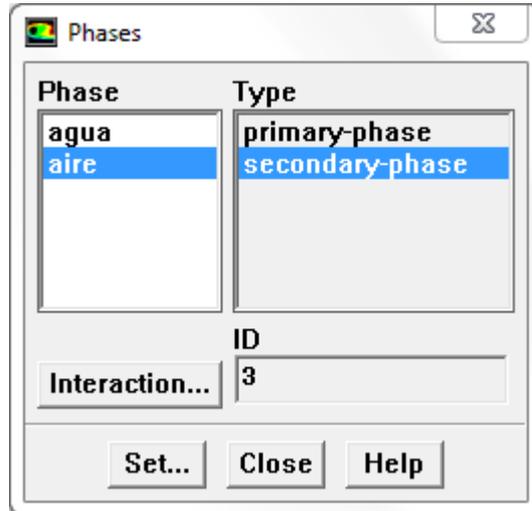


Figura 5.16 Definición de fases 1

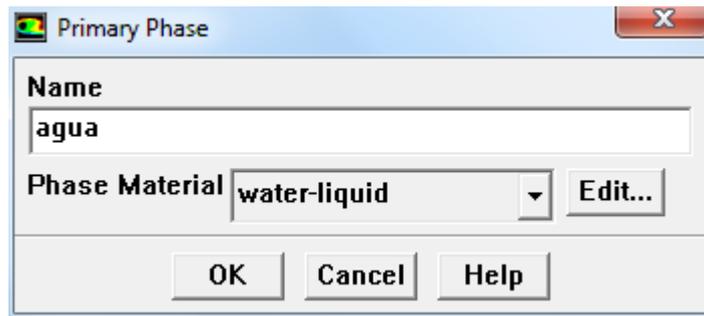


Figura 5.17 Definición de fases 2

En la ventana de la Figura 5.16 para configurar la interacción entre las fases hacemos clic en *Interaction...* donde podemos configurar el coeficiente de tensión entre agua y aire. En nuestro caso será de 0.072 N/m. En esta ventana podemos elegir si queremos que tenga efecto el ángulo de adhesión a la pared marcando la casilla *Wall* adhesión.

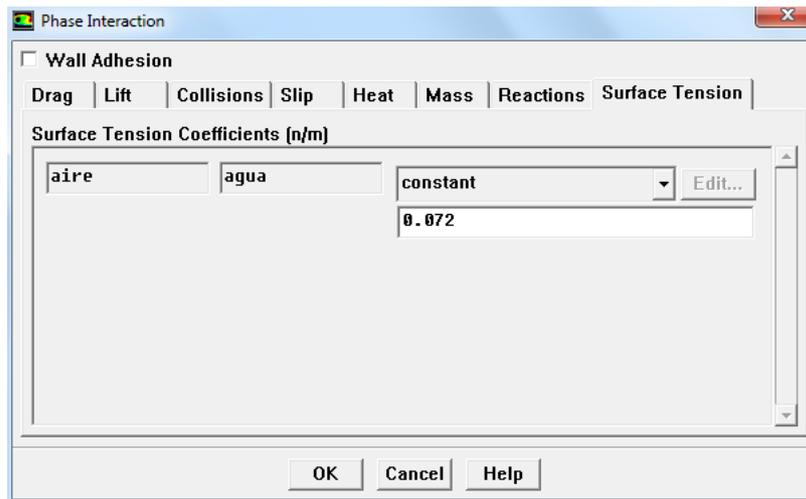


Figura 5.18 Definición interacción entre fases

Definición de condiciones de operación

Define > Operating Conditions... Para todo tipo de flujos, FLUENT utiliza internamente presión manométrica (relativa a la atmosférica). De todos modos, este modo de proceder exige que en algún momento se fije el valor absoluto de la presión a la cual quedan referidos todos los cálculos a partir de ese momento. Se empleará el valor por defecto de 1 atm (101325 Pa) como *Operating Pressure*. Además, esa presión de referencia es válida para el aire, así que para mejorar la convergencia es bueno que asociarla a un punto del dominio donde siempre vaya a haber aire, sin embargo en nuestro caso esto no será posible ya que al final se producirá una mezcla de ambas fases.

Puesto que es un flujo con superficie libre, el número de Froude cobra gran relevancia. Es necesario por tanto definir la gravedad. Hacemos clic en *Gravity* y fijamos el valor de -9.81 en la casilla de Y dentro de *Gravitational Acceleration*.

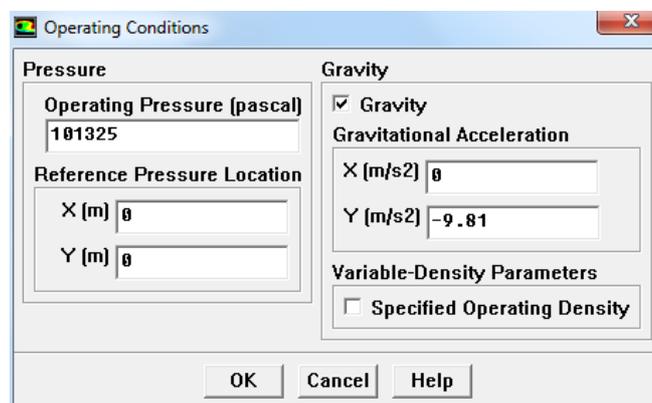


Figura 5.19 Definición condiciones de operación

Algunos autores recomiendan para reducir el efecto de errores numéricos especificar cuando la gravedad está activa una densidad de referencia igual a la densidad del fluido menos denso. En nuestra simulación no lo he utilizado pues no disponía de esta información.

Definición régimen laminar o turbulento

Define > Models > Viscous... El caso que estamos planteando transcurre bajo la hipótesis de flujo laminar.

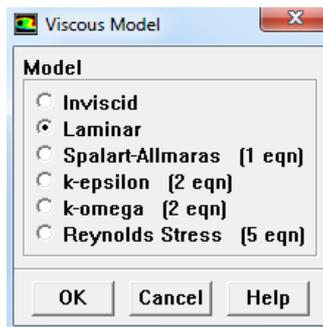


Figura 5.20 Selección del modelo de turbulencia

Definición de Condiciones de Contorno

A continuación se fijarán los valores de velocidad a la entrada y presión a la salida.

Define > Boundary Conditions... Obsérvese que en este panel aparecen condiciones de contorno que definimos en GAMBIT como zonas en la izquierda de la ventana de *boundary conditions*.

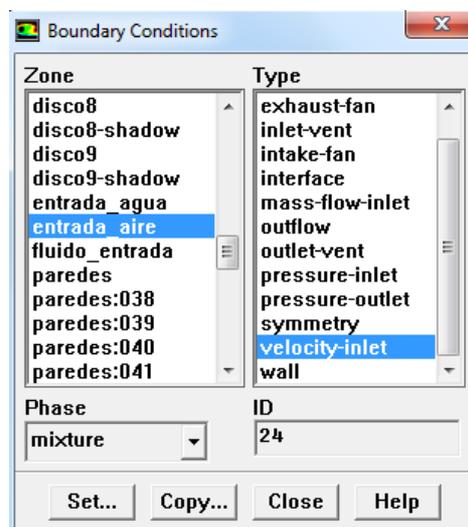


Figura 5.21 Especificación de las condiciones de contorno

En *mixture*, es donde damos el valor numérico de la condición de contorno. Seleccionamos *mixture* y a continuación hacemos clic en *Set...* Nos encontramos con una ventana donde fijamos el valor de la velocidad del flujo a la entrada. En el Apéndice A se indica como asignar una udf por medio de un archivo .jou

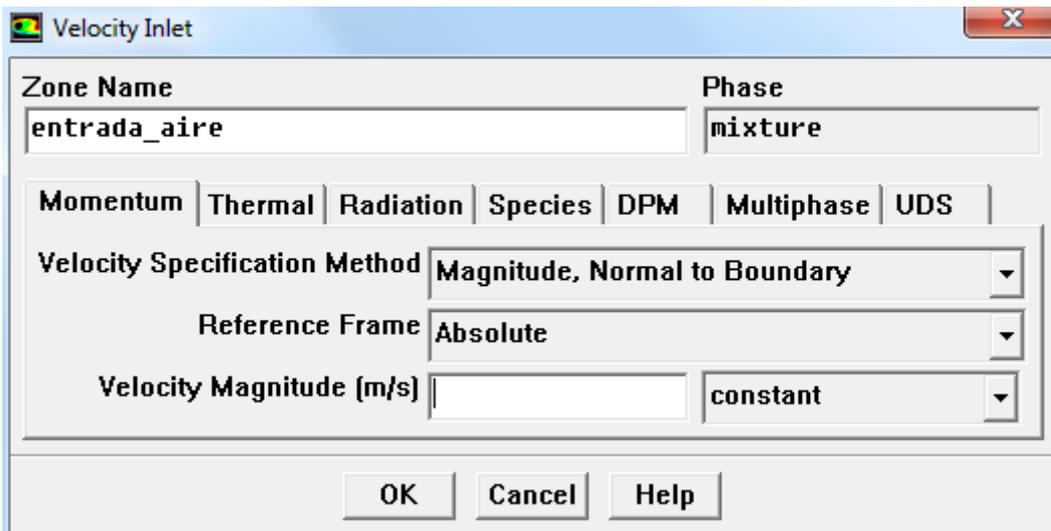


Figura 5.22 Condiciones de contorno para la mezcla

Para terminar es preciso indicarle al modelo si entra agua o aire, así que en la ventana anterior, en la opción de *Phase*, elija *aire* y luego haga clic en *Set...* en *Volume Fraction* se seleccionará 0 para la entrada de agua y 1 para la de aire.

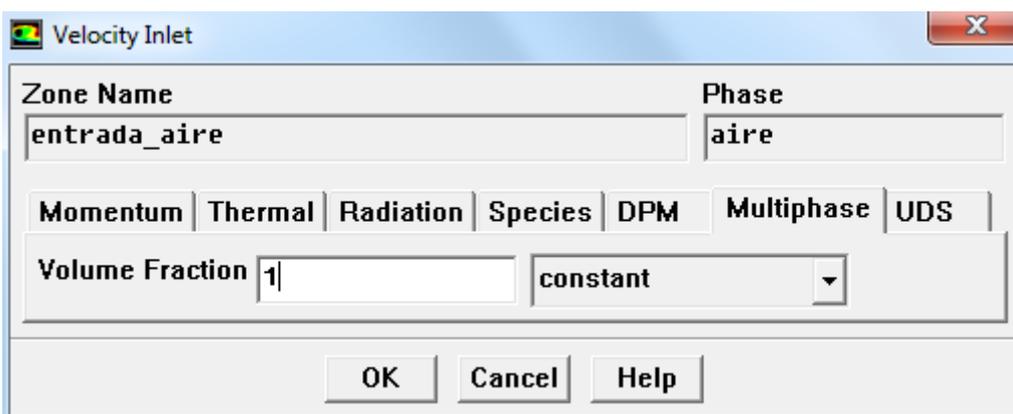


Figura 5.23 Fracción de volumen aire a la entrada

Para la condición de contorno de presión a la salida, hay que indicarle que es presión atmosférica para el aire. Puesto que la presión de operación se ha dejado fijada en 1 atmósfera, la presión manométrica a la salida (*outlet gauge pressure*)

ha de ser cero. Seleccione *outlet* bajo el campo *Zone*. El *Type* de esta condición de contorno es *pressure-outlet*. Con la opción de *mixture* dentro del campo *Phase*, haga clic en *Set...* para fijar el valor. Por defecto ya está en 0, así que lo dejamos y damos a *Cancel* para salir. Es necesario decirle que por ahí puede entrar agua (sí salir, pero no entrar), así que seleccionamos dentro de *Phase* la opción *aire* y damos a *Set*. Acto seguido, le especificamos en la nueva ventana que *Backflow Volume Fraction* para el aire es 0 (luego será uno para el agua, la cual podrá retornar al dominio ya que el problema planteado tiene un carácter oscilatorio).

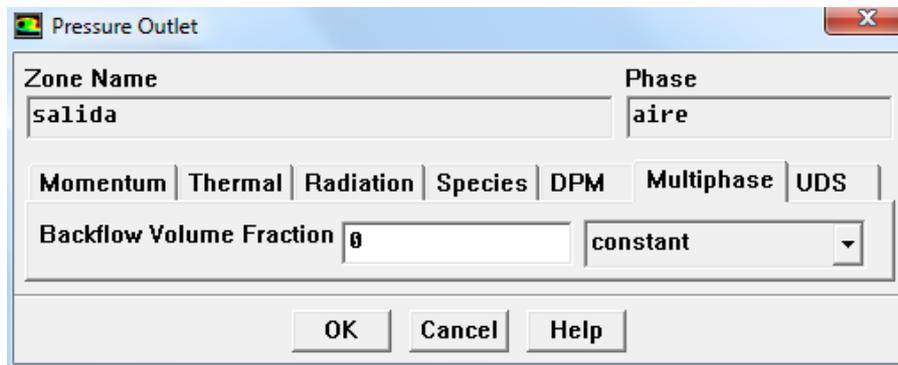


Figura 5.24 Retorno de fase aire a la salida

Si activamos la adhesión a pared debemos de configurar el grado de adhesión a la pared. El valor de este ángulo de contacto puede variar desde 0 a 180° siendo 0 la condición de mojado total y 180 el de no mojado.

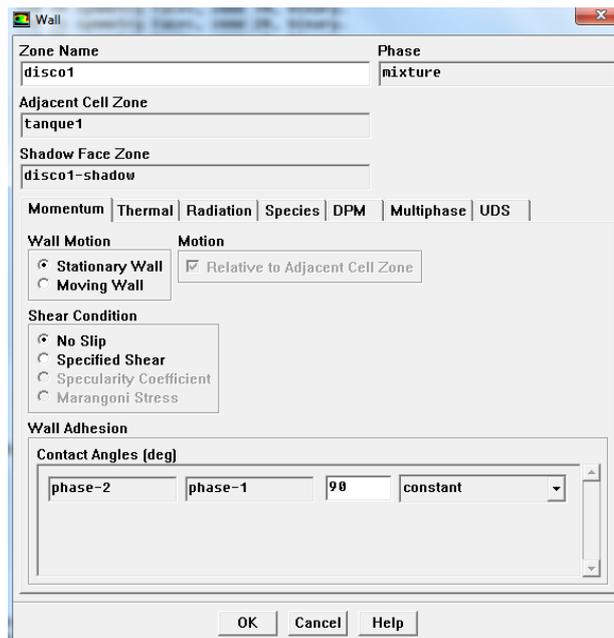


Figura 5.25 Condiciones de contorno pared

Para trasladar las condiciones a las demás paredes utilizamos el comando *copy*

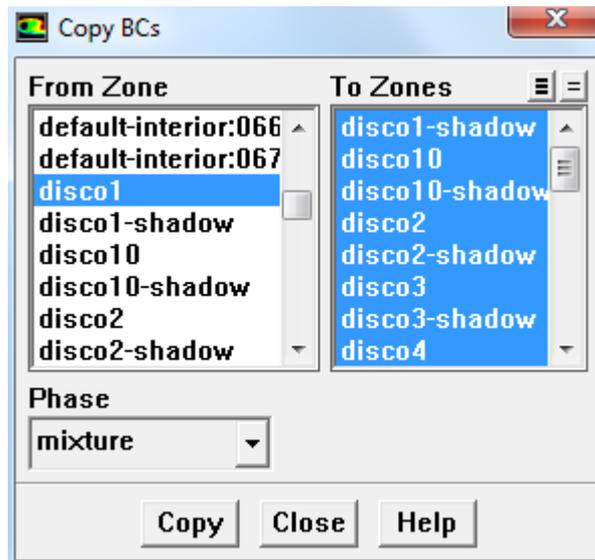


Figura 5.26 Copiar condiciones de contorno

Condiciones resolución

Solve > Controls > Solution... Seleccione Pressure>Body Force Weighted Momentum> Second Order Upwind, Volume Fraction> Geo-Reconstruct, Pressure-Velocity Coupling>PISO

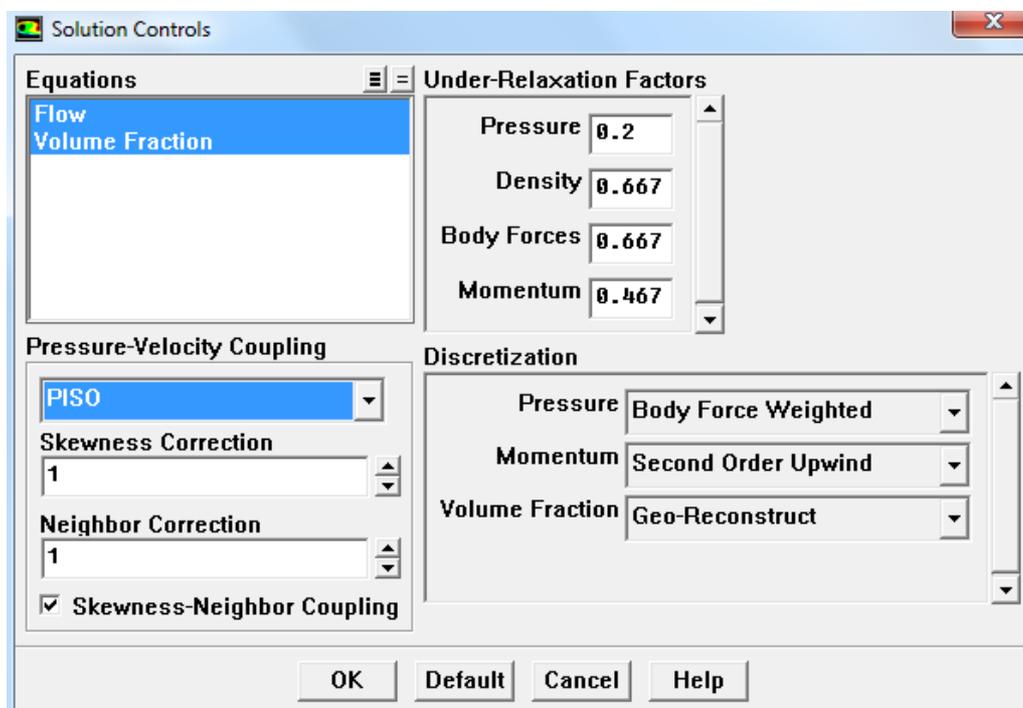


Figura 5.27 Control de la solución

Para reducir los efectos de los errores numéricos se recomienda incrementar todos los under-relaxation factors hasta valores próximos a 1.

Para asegurar una buena conservación del volumen: resolver la ecuación de corrección de presión con alta precisión (criterios de terminación de 0,001 para solucionador multigrad).

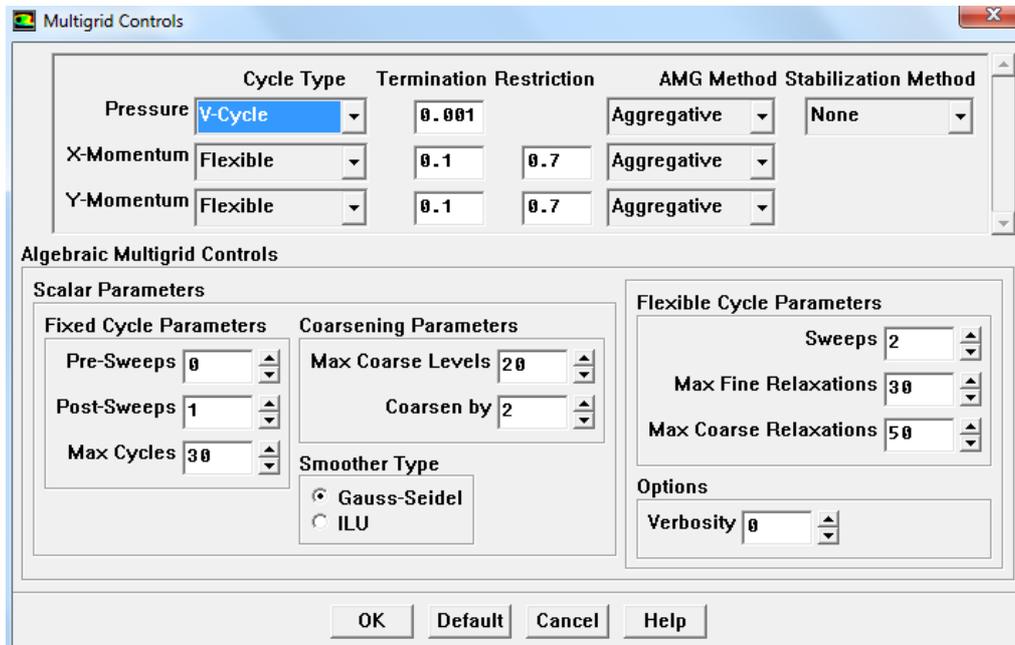


Figura 5.28 Control multigrad

Inicialización de la solución

Hay que inicializar el campo de velocidades y presiones para llevar a cabo el método iterativo de resolución.

En nuestro caso hemos realizado diferentes procesos de inicialización de la solución. En este apartado expongo la metodología para conseguir la solución inicial propuesta en la Figura 5.5 izquierda que engloba todos los procedimientos necesarios para conseguir las demás soluciones iniciales.

El primer paso mediante el comando *Solve>Initialize>Initialize...* Se fija la presión relativa en 0. Las componentes del campo de velocidades serán nulas y la columna estará llena de agua en un principio por ello *Aire volume fraction* será 0. Finalmente hacemos clic en *init*.

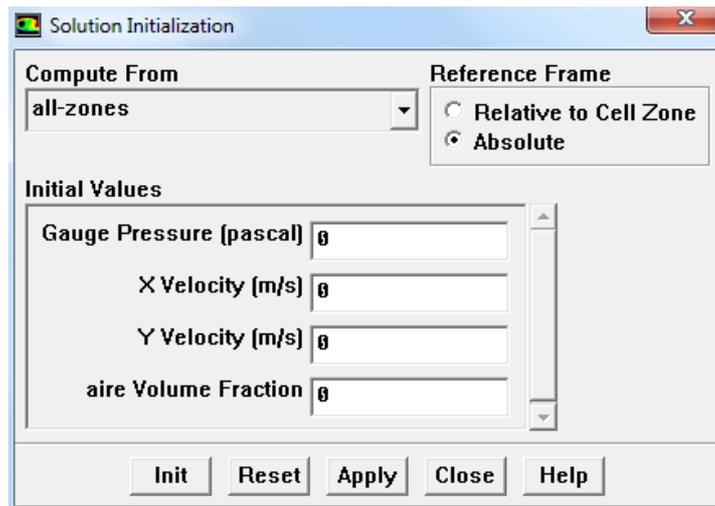


Figura 5.29 Inicialización de la solución

Ahora hay que colocar el aire debajo de cada uno de los discos. Para ello, definimos cada una de las zonas en FLUENT y a continuación “parcheamos” la inicialización anterior. Para definir esa zona utilizamos el comando *Adapt>Region...* Le especificamos la extensión del dominio en nuestro caso con las coordenadas obtenidas en Gambit para cada uno de los discos y con un grosor de 2mm colocamos un rectángulo debajo de cada uno de los discos.

MUY IMPORTANTE: A continuación se hace clic en Mark para “marcar” (=definir) esa zona. Si por error pulsa en Adapt, FLUENT refinará la malla de esa zona, incrementando el coste de cálculo del proceso iterativo sin que ello sea necesario. Antes de refinar, le preguntará Ok to Adapt grid? ... a lo cual debe responder no. Utilice únicamente la opción Mark. Finalice haciendo clic en Close.

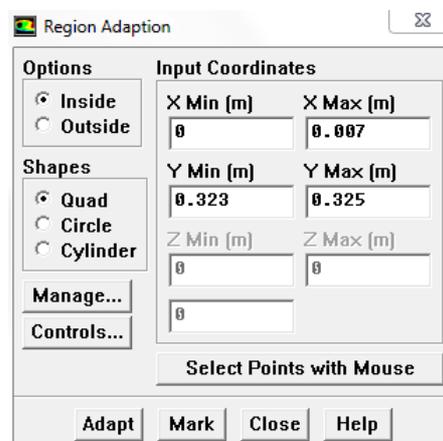


Figura 5.30 Creación regiones de adaptación

Una vez generadas todas las zonas de adaptación procedemos a parchearlas mediante el comando *Solve>Intialize>Patch...* elegimos las regiones creadas seleccionamos en *Phase* aire en *Variable Volume fraction* y *Value* 1.

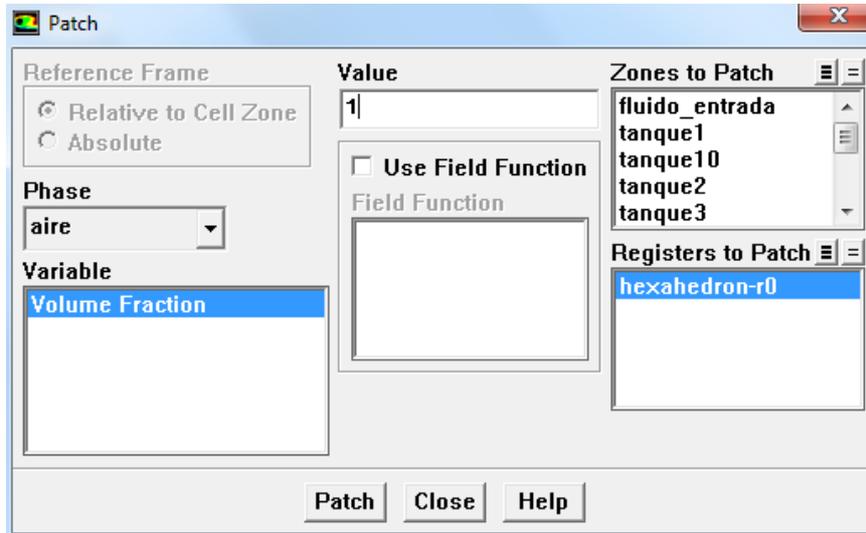


Figura 5.31 Patch de la fase aire

En nuestro caso para conseguir una solución inicial más real iteramos con bajo paso de tiempo un número suficiente de iteraciones para que el rectángulo de aire que hemos introducido forme una burbuja.

Una vez obtenida esta solución inicial. Para inicializar el tiempo debemos de interpolar la solución y cargarla en otro caso con las mismas características.

La interpolación se realiza mediante el comando *File/Interpolate...* donde elegimos todas las *Cell Zones* y *Fields*. Seleccionamos *Write data* y hacemos clic en *Write...* Para cargar la solución en un caso nuevo seguimos el mismo procedimiento pero seleccionado *Read and Interpolate*. Este comando también se puede utilizar para pasar los datos de un tipo de malla a otro.

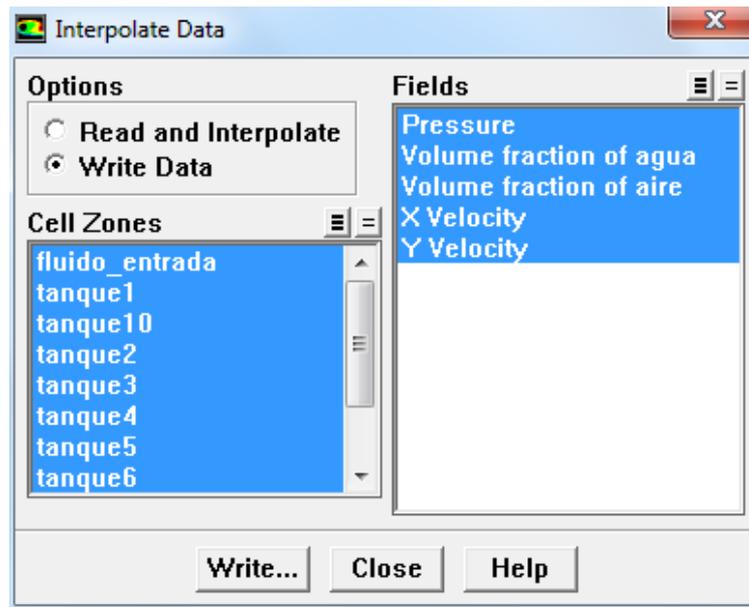


Figura 5.32 Interpolación de datos

Para comprobar que efectivamente hemos parcheado bien el modelo, vamos a hacer una representación de las fases de agua y aire. En principio, gracias a las operaciones que se han realizado, el modelo debería estar repleto de agua (fracción de volumen de agua=1 (100%)) excepto en la zona bajo los discos que tendrá gotas de aire (fracción de volumen de agua=0 (0%)). Vamos a comprobarlo:

Main Menu > Display > Contours... En la categoría de *Contours of* elija la opción *Phases*. En la subcategoría, sólo admite una opción: *Volume Fraction*. Después en el campo *Phase* elija *aire*. Haga clic en *Filled* y luego en *Display*.

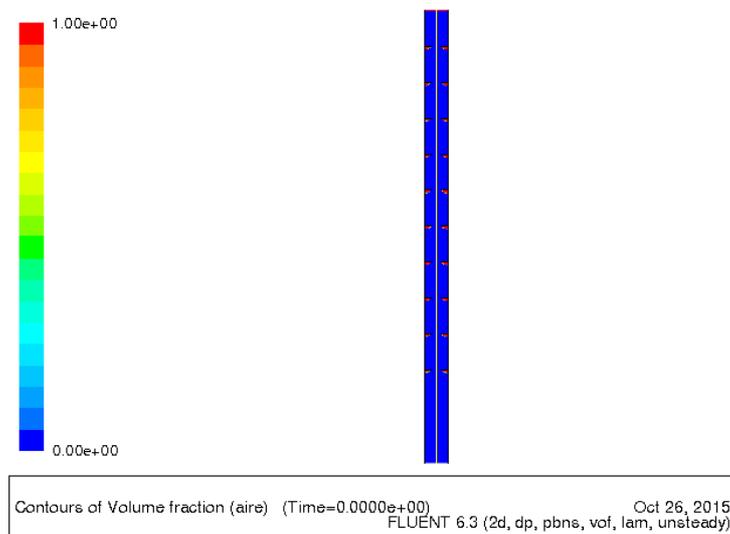


Figura 5.33 Visualización de la solución inicial

Criterios de convergencia

Mientras resuelve las ecuaciones de forma iterativa, FLUENT va mostrando en pantalla un valor de residuo asociado a cada ecuación de gobierno del flujo. El residuo es una medida de lo bien que la solución actual cumple las ecuaciones de gobierno discretizadas. En nuestro caso, vamos a iterar la solución hasta que los valores del residuo se sitúen por debajo del valor umbral de 10^{-5} .

Solve > Monitors > Residual... Cambie el valor de residuo bajo el campo *Convergence Criterion* al valor $1e-05$ para la ecuación de continuidad (**continuity**). El resto puede dejarlas en el valor $1e-03$ por defecto. Además, bajo el cuadro **Options**, seleccione la opción **Plot**. Con esto, conseguirá que FLUENT muestre los residuos en pantalla mientras va resolviendo el modelo. Mantenga también activa la opción **Print** (irá escribiendo los valores en pantalla).

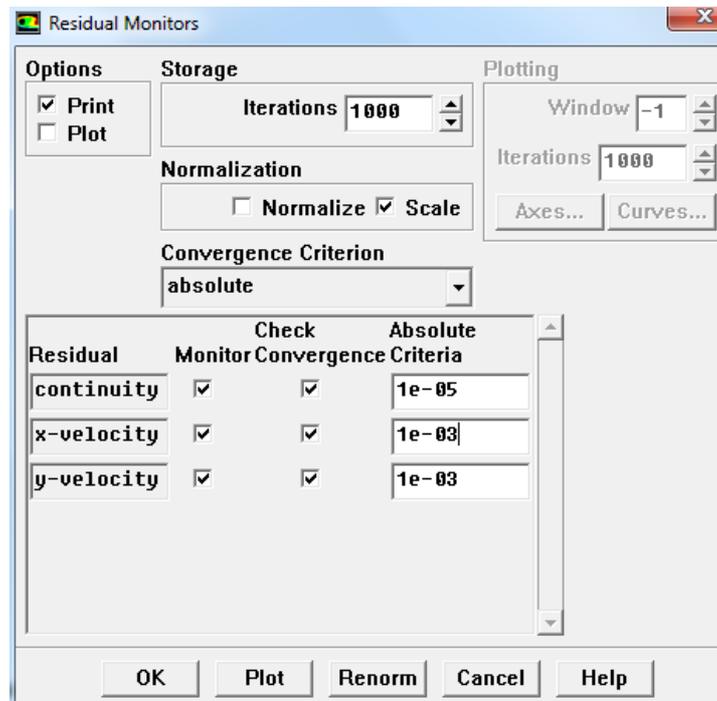


Figura 5.34 Criterios de convergencia

Resolución e iteraciones

El tiempo de paso, el número de iteraciones por paso, el número de pasos y la forma en la que queremos obtener los datos será descrita en el Apéndice A.

Capítulo 6. Simulaciones

6.1. Introducción

En el presente capítulo se presentan las simulaciones realizadas a lo largo del proceso de resolución del problema inicial planteadas en el Capítulo 5.

6.2. Ascenso burbuja de aire en columna lisa vertical

En la Figura 6.1 se muestran los contornos de fase aire de la simulación realizada para una burbuja de aire de 8 mm. Así mismo en la Figura 6.2 se muestran los de una burbuja de aire de 4 mm proporcionalmente a la figura anterior.

Los datos necesarios para completar esta simulación son el número de iteraciones y el tiempo de paso. El tiempo de paso para ambas simulaciones ha sido $\Delta t = 0.001$ s. El número de iteraciones necesarias para que la burbuja salga en cada caso ha sido de 2990 en el caso de 8 mm y 1670 para el caso de la burbuja de 4 mm de diámetro.

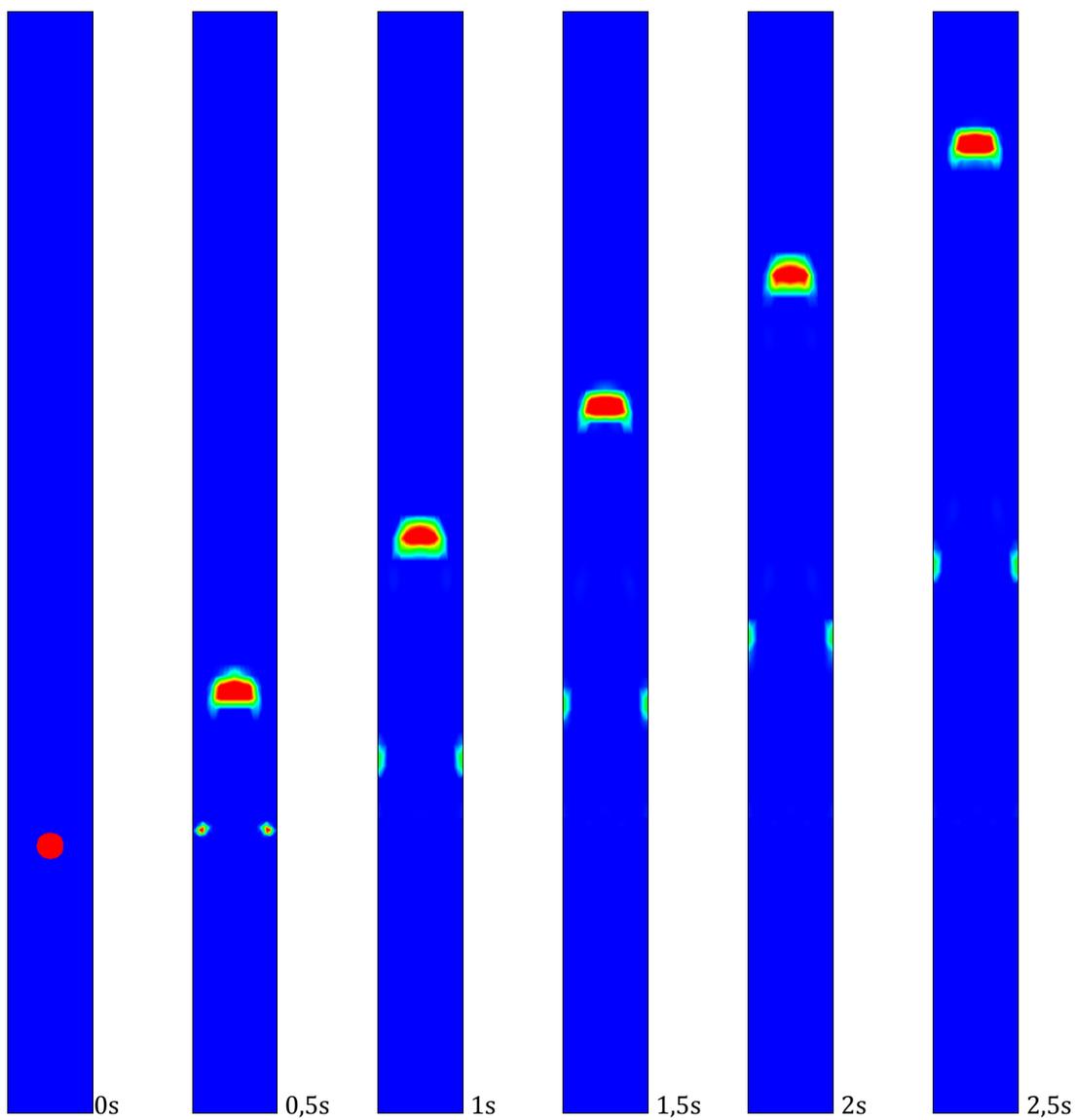


Figura 6.1 Ascenso burbuja 8mm

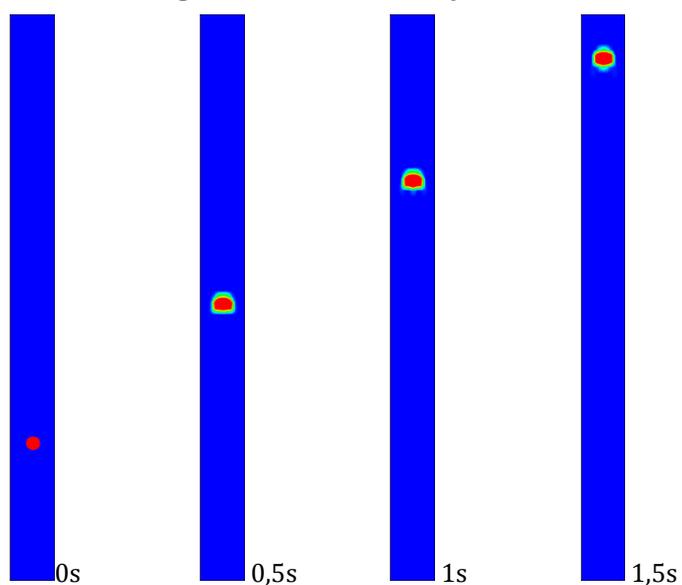


Figura 6.2 Ascenso burbuja 4 mm

6.3. Llenado columna con deflectores velocidades constantes

En este apartado se presentan las soluciones de la simulación en la columna final para velocidades constantes. Esta simulación se realizó bajo las condiciones expuestas en la página 87. La velocidad de entrada del aire será por tanto igual a $2,380 \cdot 10^{-4}$ m/s y la del agua será $1,149 \cdot 10^{-3}$ m/s.

El tiempo de paso utilizado para la simulación de este caso se ha tenido que reducir hasta 10^{-4} s ya que la malla elegida es muy fina. El número de iteraciones por paso se fijó en 1000. Por último la periodicidad de guardado de datos fue de cada segundo puesto que buscamos una solución inicial para aplicar a este estado “cuasiestacionario” diferentes frecuencias de entrada de agua.

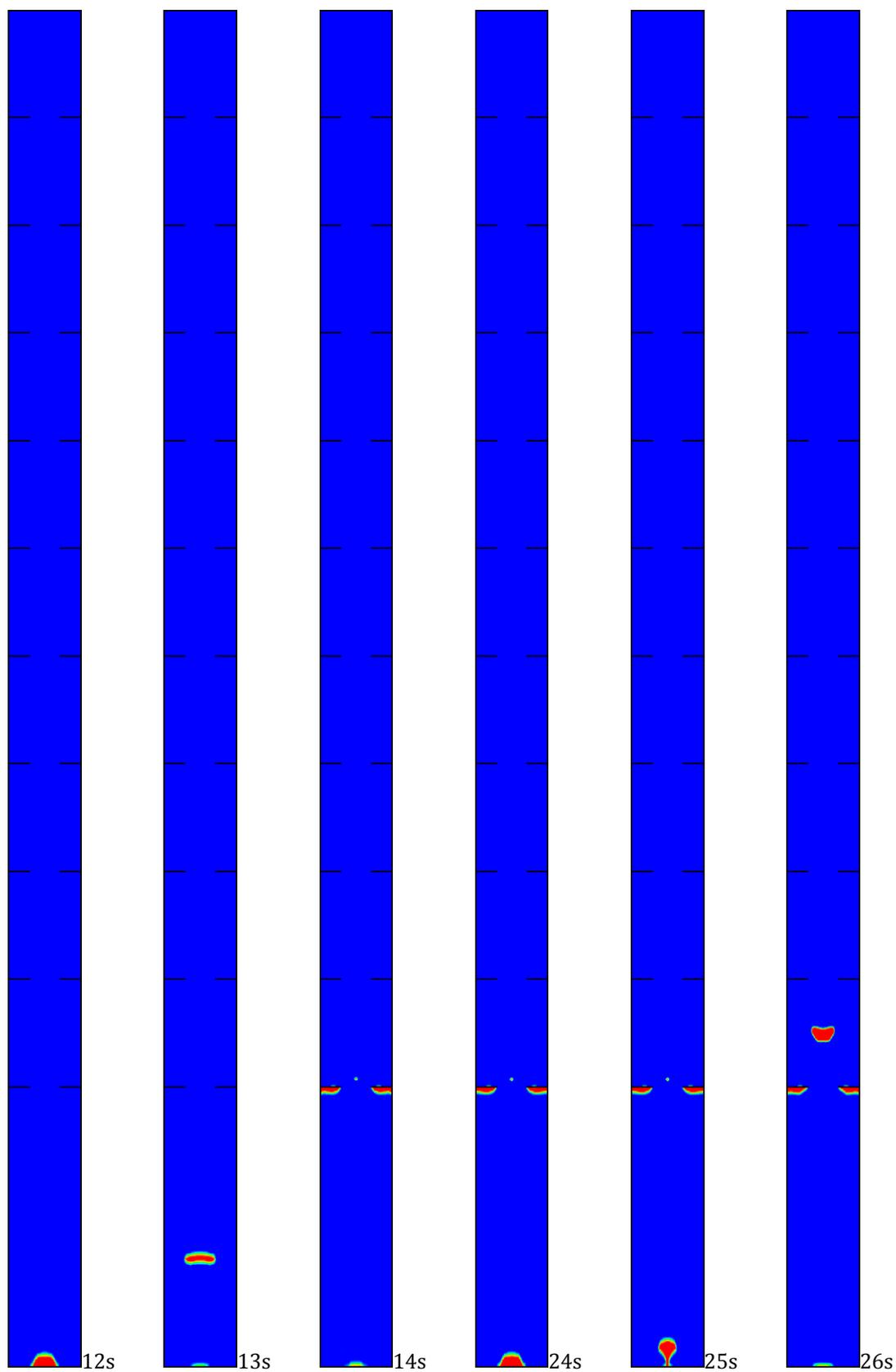


Figura 6.3 Contornos de fase aire llenado columna con deflectores $v=cte$

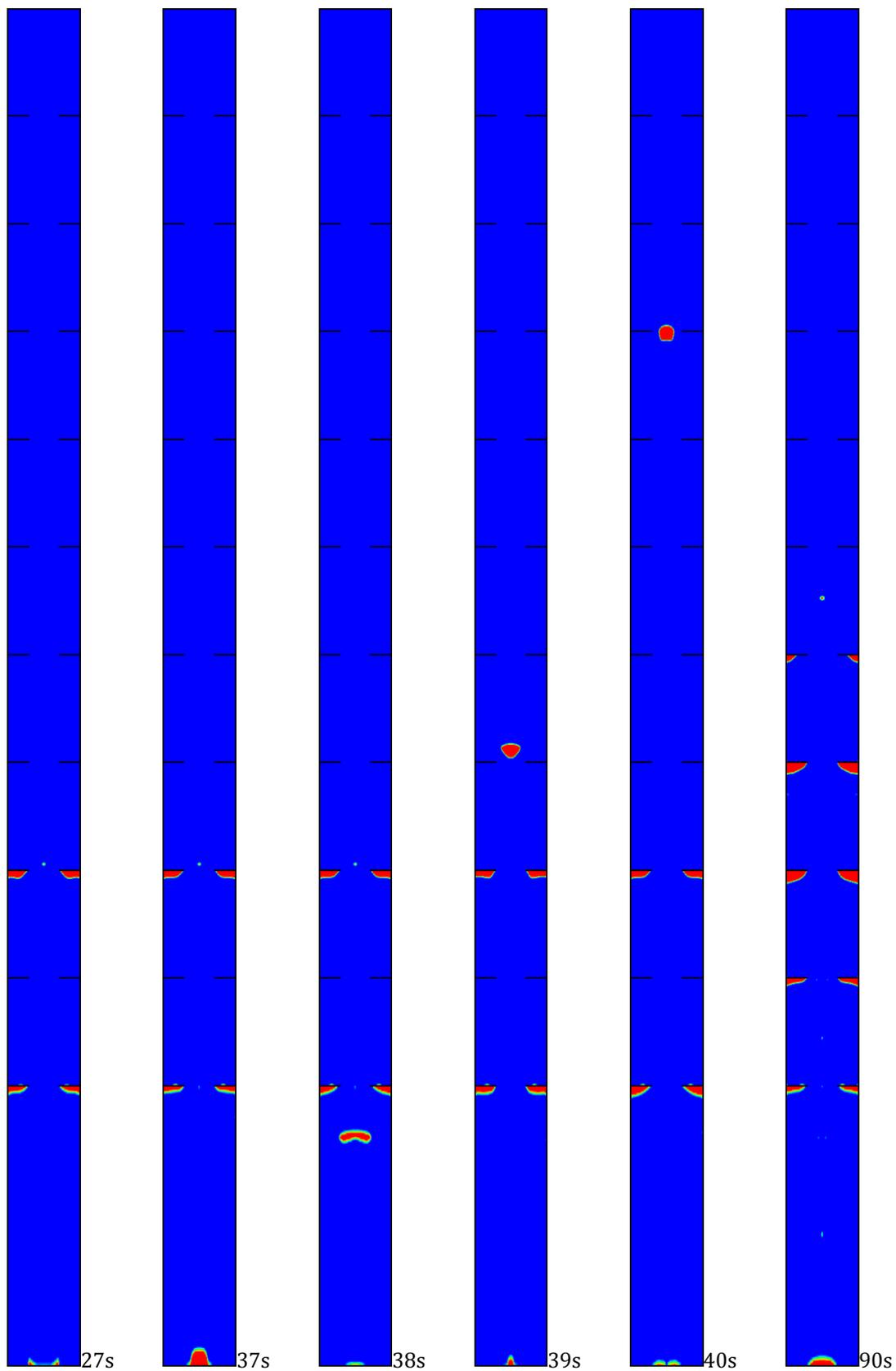


Figura 6.4 Contornos de fase aire llenado columna con deflectores $v=cte$

6.4. Aplicación flujo oscilatorio a solución inicial propuesta

En este apartado se presentan los resultados obtenidos para la resolución del problema planteado en el apartado 1.4. Se han elegido los ciclos de oscilación más característicos para cada una de las frecuencias.

Las condiciones de operación simuladas y los números adimensionales característicos están presentadas en las tablas 6.1 y 6.2 respectivamente.

Condiciones de operación	x_0 (mm)	f (Hz)
1	10,875	1
2	10,875	2
3	10,875	4

Tabla 6.1 Condiciones de operación del reactor de flujo oscilatorio

Condiciones de operación	$Re_0 = \frac{Dx_0\rho\omega}{\mu}$	$St = \frac{D}{4\pi x_0}$
1	986	0,1829
2	1972	0,1829
3	3944	0,1829

Tabla 6.2 Números adimensionales característicos

Se adjuntan al presente documento los videos de las simulaciones realizadas. Debido a las limitaciones de cálculo no se ha podido simular cada una de ellas el mismo tiempo. En la siguiente tabla se presenta el tiempo simulado y el paso de tiempo utilizado para cada una de las simulaciones.

Condiciones de operación	Tiempo de paso (s)	Tiempo de guardado (s)	Tiempo simulado (s)
1	0,0001-0,0005	0,01	16
2	0,0005-0,00025	0,005	8
3	0,00025-0,000125	0,005	7

Tabla 6.3 Tiempos de paso, guardado y simulado.

6.4.1. Frecuencia 1Hz a partir solución inicial propuesta

$$u = 0,001149425 + 0,06832964 \operatorname{sen}(6,283185307 t) \quad (6.1)$$

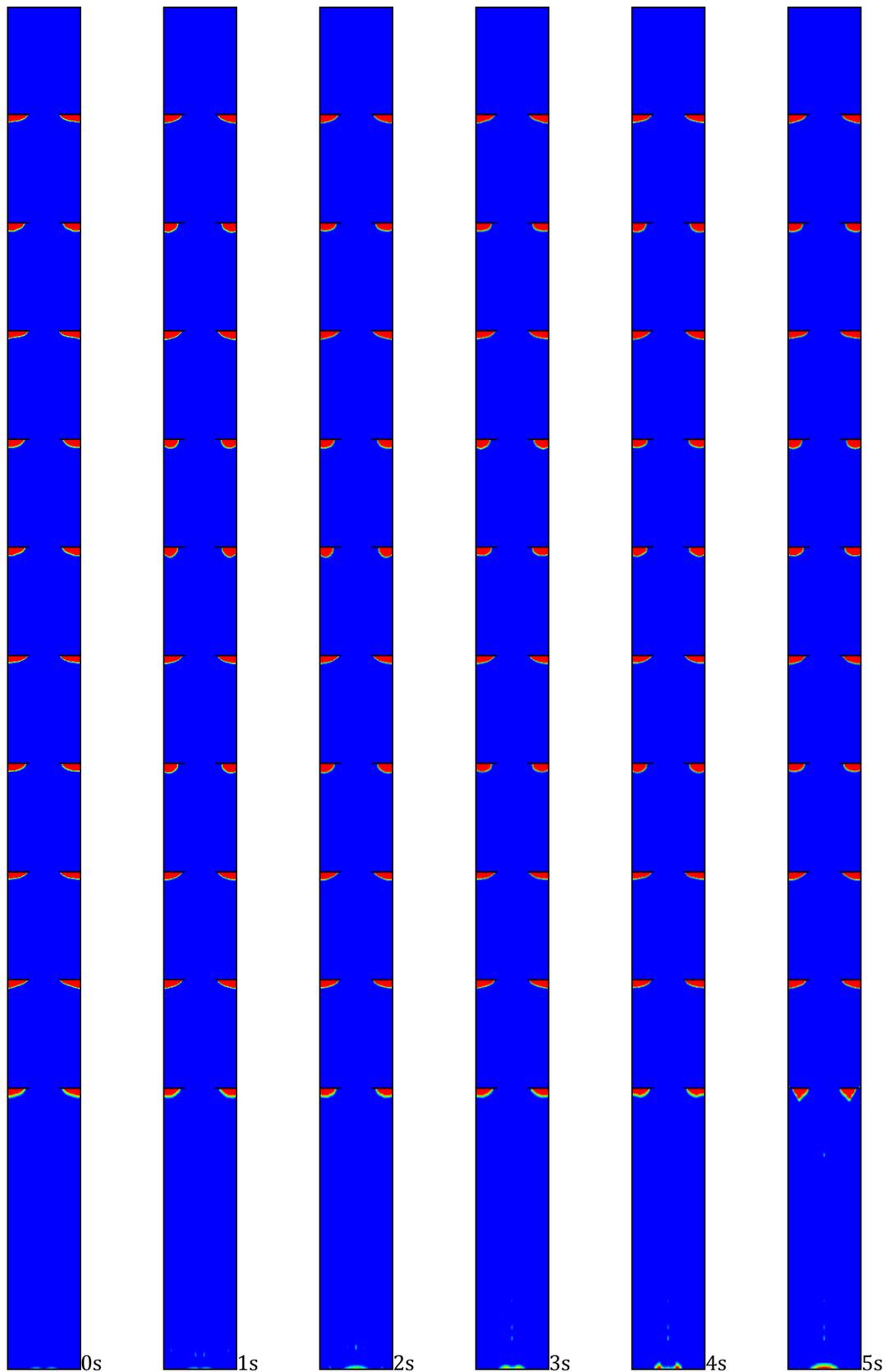


Figura 6.5 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 1Hz

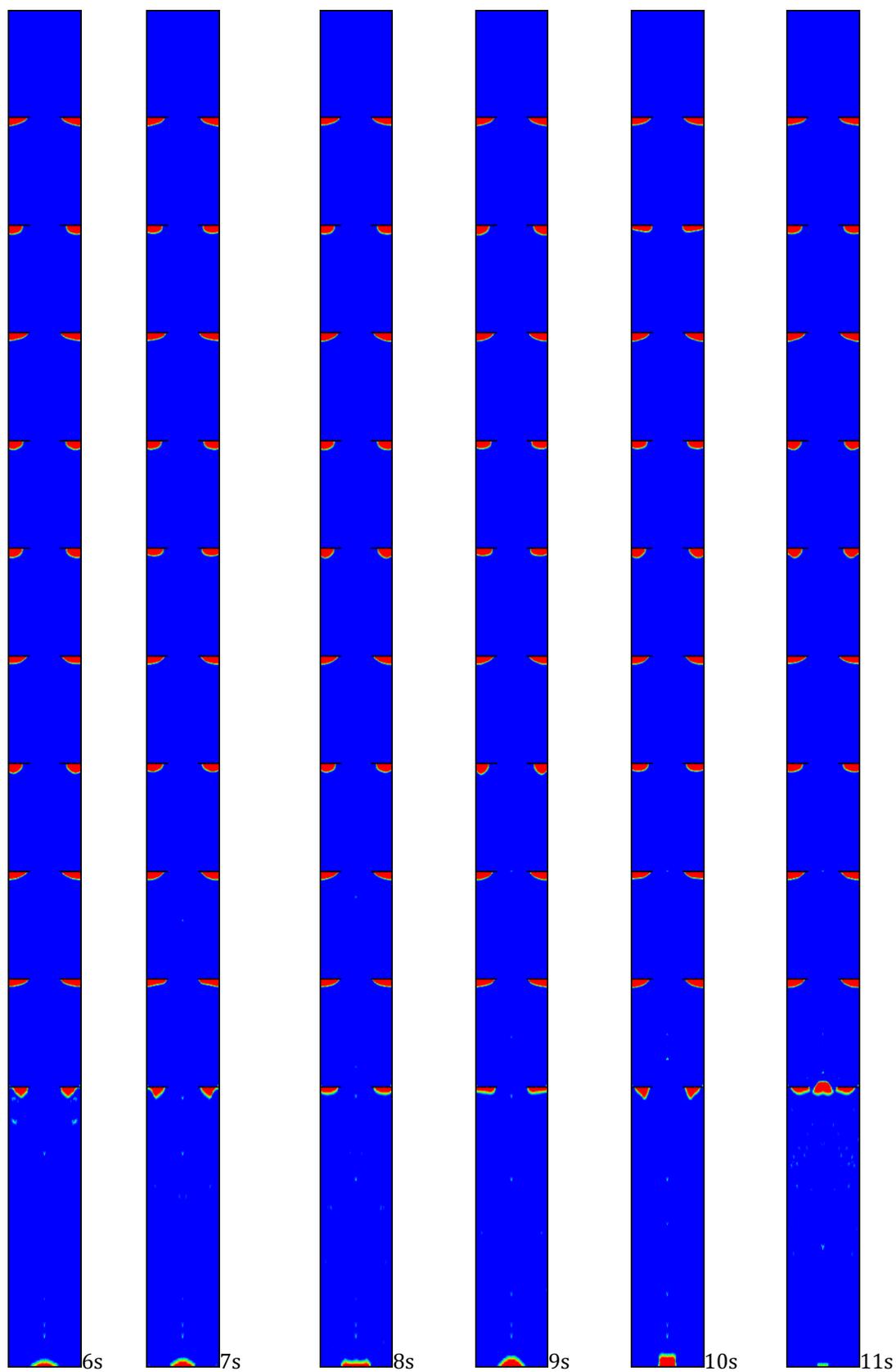


Figura 6.6 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 1Hz

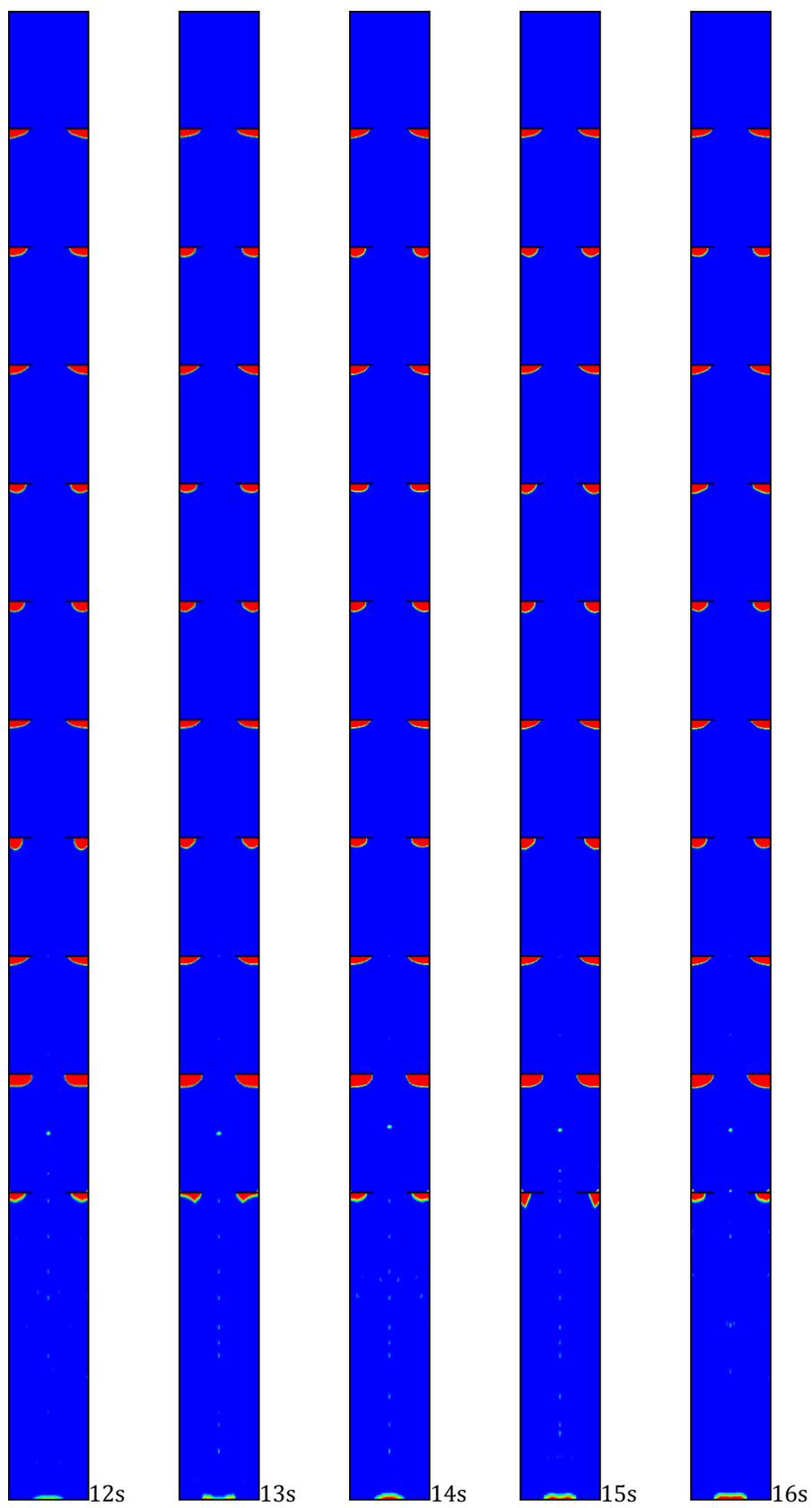


Figura 6.7 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 1Hz

6.4.2. Frecuencia 2Hz a partir solución inicial propuesta

$$u = 0,001149425 + 0,13665928 \operatorname{sen}(12,56637061 t) \quad (6.2)$$

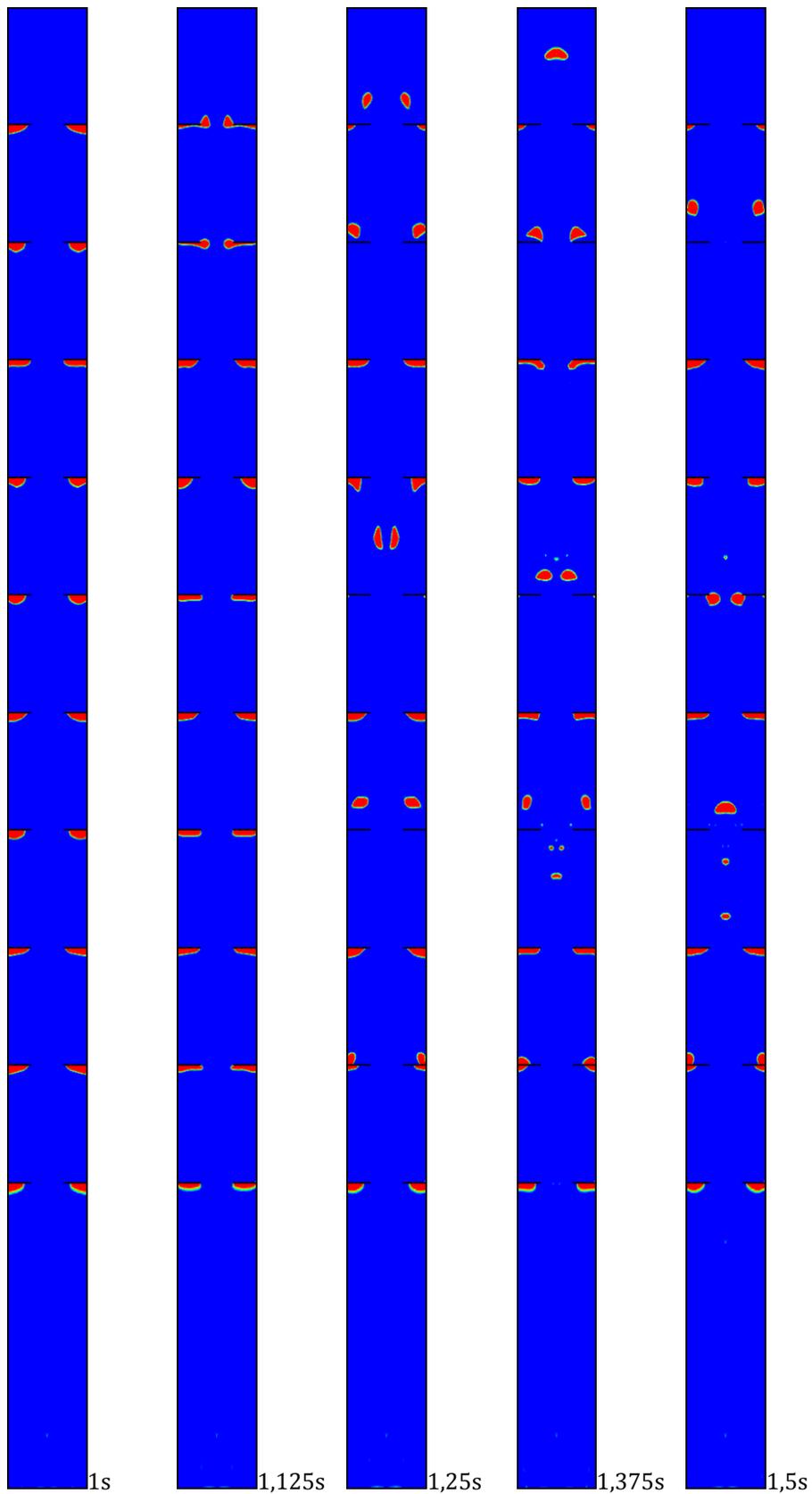


Figura 6.8 Contornos de fase aire en el tercer ciclo a frecuencia 2Hz

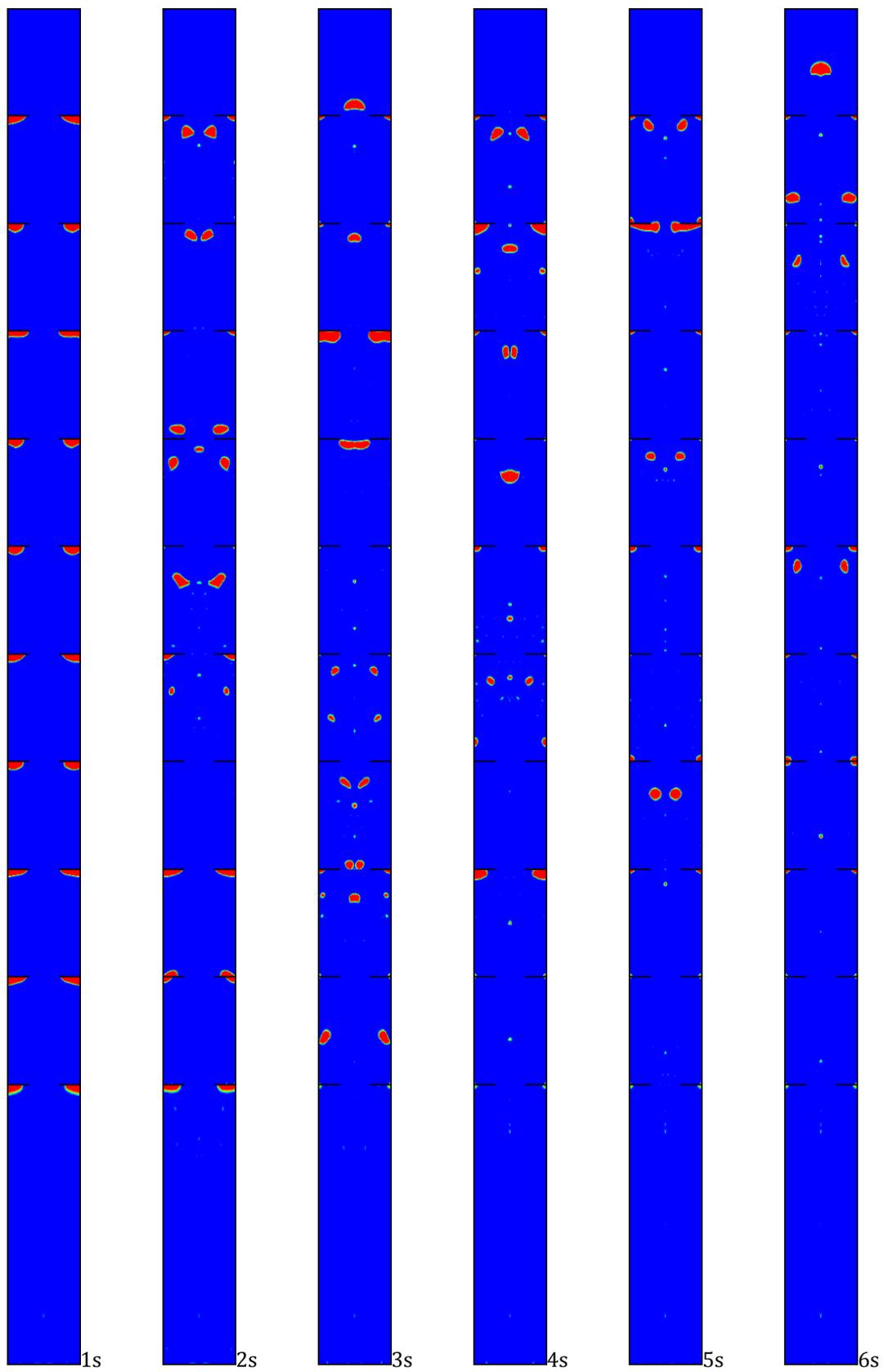


Figura 6.9 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 2Hz

6.4.3. Frecuencia 4 Hz a partir solución inicial propuesta

$$u = 0,001149425 + 0,273318561 \operatorname{sen}(25,13274123 t) \quad (6.3)$$

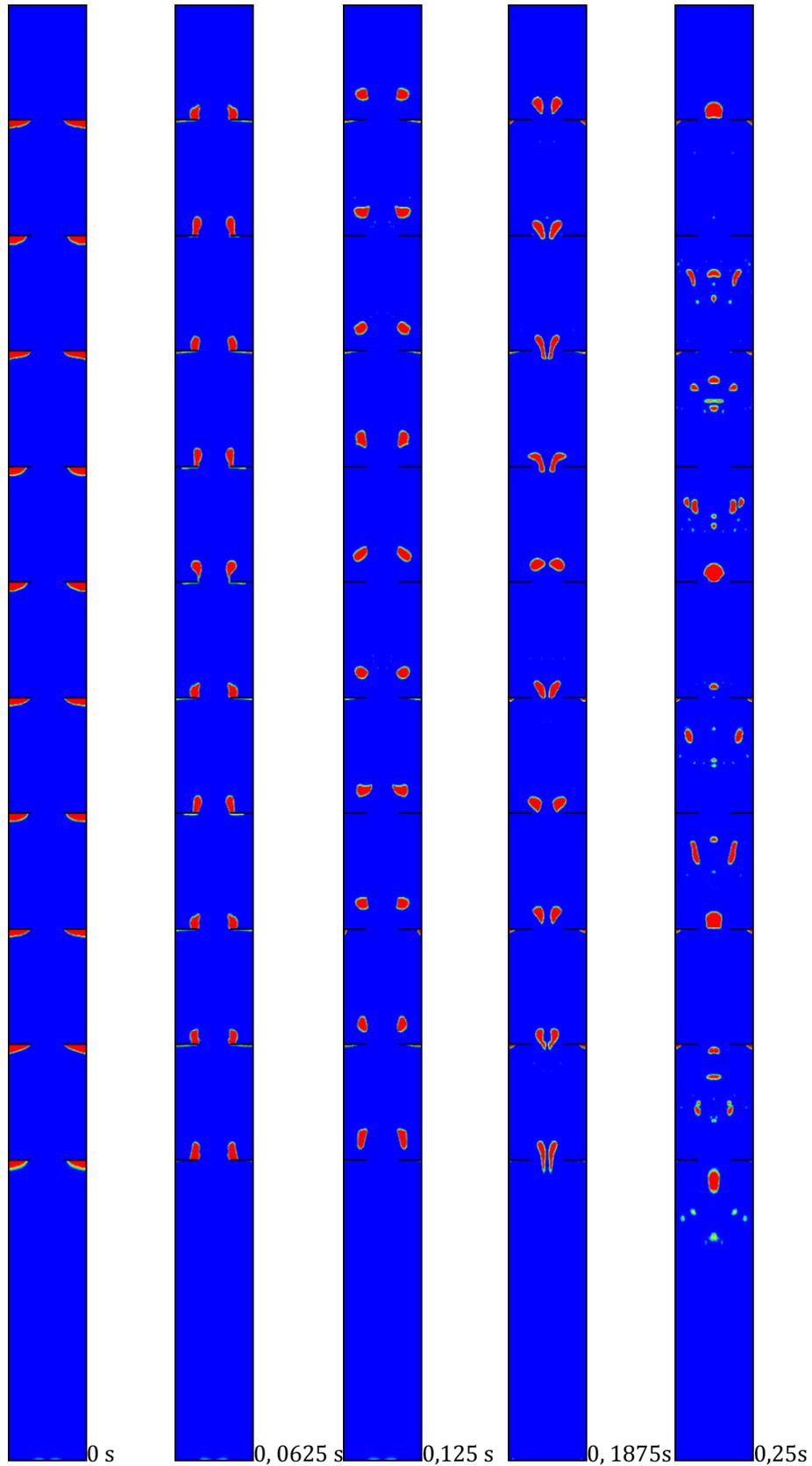


Figura 6.10 Contornos de fase aire del primer ciclo a frecuencia 4Hz

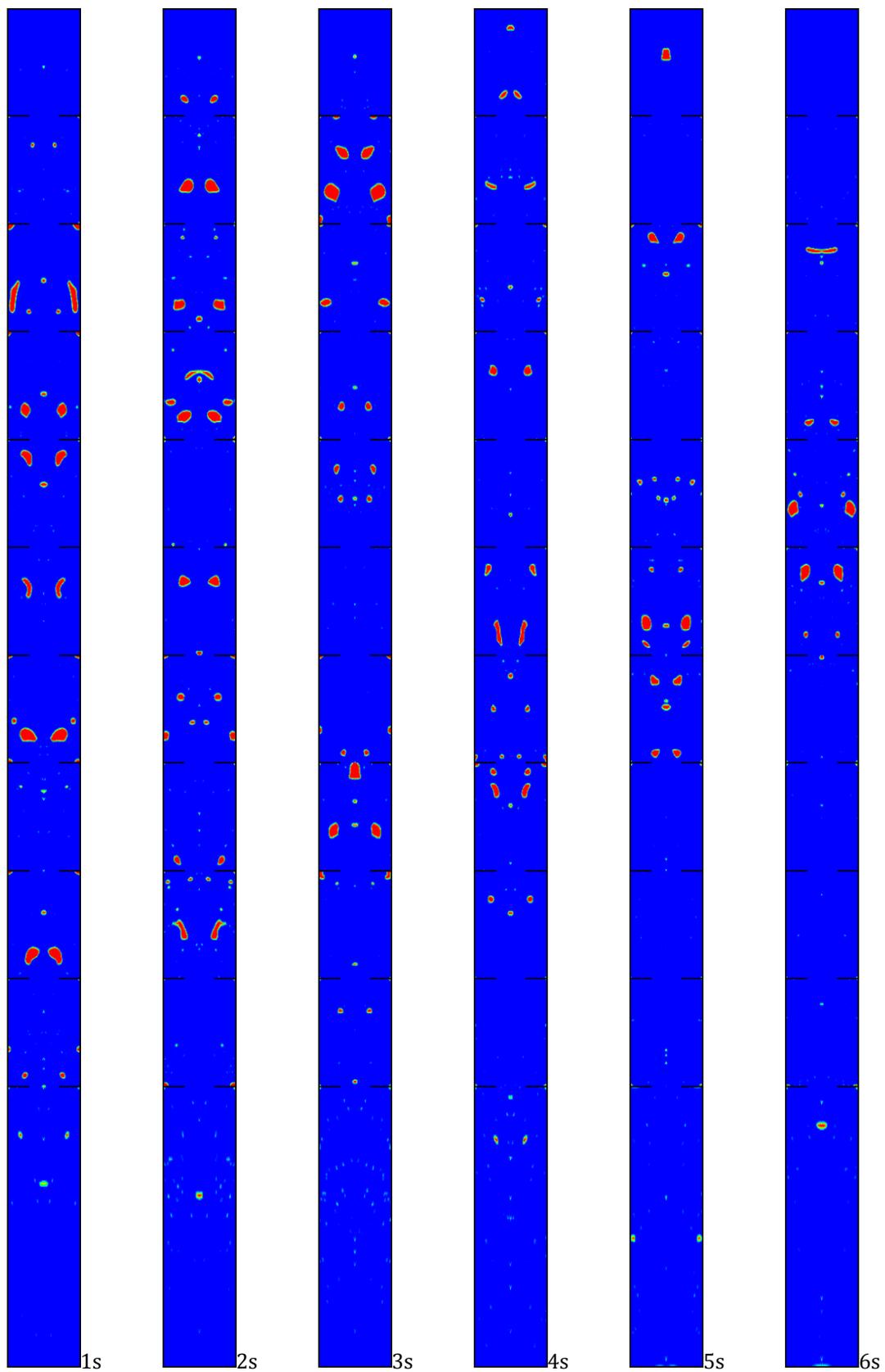


Figura 6.11 Contornos de fase aire en cada segundo a frecuencia 4Hz

Capítulo 7. Conclusiones y trabajo futuro

7.1. Conclusiones

En primer lugar hay que comentar que se tuvieron muchos problemas a la hora de definir el sistema como multifásico debido a la multitud de parámetros y opciones a configurar dentro del software. También añadir la dificultad que presenta el programa a la hora de obtener resultados mediante el postprocesado de datos, debido a que hay que programar todos los datos que se quieran obtener antes de comenzar la simulación ya que es un escenario transitorio y por tanto sólo queda en memoria los resultados del último paso de tiempo.

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 las hipótesis planteadas y cortos periodos de tiempo las simulaciones obtenidas se pueden utilizar de manera orientativa para futuros trabajos.

Para la realización de las simulaciones y obtención de convergencia ha sido necesario imponer un paso temporal muy pequeño. Este paso de tiempo ha sido reducido como se ha expuesto para cada frecuencia. Esto ha derivado en un coste computacional muy alto. Limitando de esta manera las simulaciones obtenidas.

La malla escogida nos ofrece una precisión bastante alta pudiendo captar burbujas de unas dimensiones mínimas. La utilización una malla tan fina supone un coste computacional mayor. Escogimos esta malla con el fin de obtener unas simulaciones donde poder captar la coalescencia de las burbujas de pequeño

tamaño. Podemos determinar que en estos casos no se conseguirá independencia de malla pues podremos captar las burbujas del tamaño de una celda según las propiedades definidas por el modelo multifásico utilizado.

La malla utilizada en un principio fue cuadrada debido a que nuestro conocimiento del tratamiento de datos era muy limitado creíamos que solo podríamos cargar los datos de esta manera en TECPLOT si teníamos una malla triangular. Tras el transcurso del procesado de datos obtuvimos la solución a esto como se detalla en el Apéndice B. Esto ha aumentado el coste tanto computacional como de tratamiento de datos.

En la resolución de ascenso de la burbuja podemos determinar comparando las velocidades de ascenso proporcionadas por la simulación, la fórmula de Davies y Taylor y otros estudios sobre ascenso de burbujas mencionados en la bibliografía que los parámetros utilizados para la resolución de este caso son los correctos.

En la simulación realizada con el objetivo de llenar la columna de aire a velocidad constante podemos explicar el desprendimiento de la burbuja cada 12,5 segundos. Este tiempo necesario es provocado por el conjunto de fuerzas que debe vencer la burbuja. Estas fuerzas son la presión que ejerce la columna de agua sobre la sección de entrada y la tensión superficial. El tiempo de salida de la burbuja se puede disminuir por tanto de dos formas. Aumentando la velocidad de entrada de la burbuja. Esta opción nos haría aumentar la velocidad de entrada de agua si queremos mantener constante la relación de caudales. Disminuyendo la el diámetro de la sección de entrada consiguiendo la entrada de burbujas de menor diámetro.

En cuanto al estudio del proceso de entrada oscilatorio podemos sacar dos conclusiones según la frecuencia utilizada.

En referencia al proceso de mezclado. Para la frecuencia de 1Hz el mezclado es insuficiente ya que el flujo oscilatorio no consigue vencer la fuerza de la gravedad y adhesión a las paredes de los discos. Para la frecuencia de 2Hz se observa que el flujo consigue despegar de las paredes de los discos pero sin conseguir que el tiempo de residencia sea alto. Por último, para la frecuencia de 4Hz observamos que como era de esperar consigue vencer las fuerzas de adhesión y de la gravedad despegando las burbujas de las paredes de los discos y aumenta el tiempo de residencia de las burbujas.

Si nos fijamos en la entrada de aire podemos observar que para las diferentes frecuencias se desprenden burbujas de tamaño mínimo. Este desprendimiento lo debemos relacionar con la entrada de flujo oscilatorio que ayuda al desprendimiento de estas burbujas de la sección de entrada. Este desprendimiento aumenta gradualmente con el aumento de la frecuencia. Para la frecuencia de 1Hz podemos observar como la primera burbuja adelanta su desprendimiento. Para las demás frecuencias no podemos comprobar que ocurra lo mismo debido a que no llegamos a los mismos tiempos de simulación. A pesar de esto podemos intuir que ocurrirá un proceso semejante y la burbuja adelantará su desprendimiento al aumentar la frecuencia.

Según las conclusiones realizadas sobre el proceso de entrada oscilatorio. Podemos afirmar que variando tanto el diámetro de entrada de agua como el caudal, amplitud y frecuencia de oscilación podemos llegar a la situación más propicia para el mezclado.

Por último, destacar los esfuerzos realizados para el tratamiento de datos con más de 120 Gb almacenados. Las dificultades presentadas por las limitaciones de los medios utilizados para el tratamiento y obtención de estos datos.

7.2. Trabajos futuros

En este proyecto este apartado cobra mucha importancia ya que se ha intentado dar un carácter didáctico de aproximación a la simulación de casos multifásicos. Algunas de las posibles líneas a seguir pueden ser las siguientes

Modificar la malla utilizando una malla cuadrada u otro tipo de malla que mejore la convergencia.

Modificar el diámetro de entrada y amplitud de la entrada oscilatoria.

Utilizar régimen turbulento y eliminar la simetría.

Buscar la forma de cuantificar el número de burbujas en cada instante de tiempo y el volumen que ocupa cada una.

Apéndice A. Códigos utilizados para la simulación en servidor labmach

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

Apéndice B. Tratamiento de datos mediante software Tecplot

TECPLOT 360 es un software de visualización que facilita la labor de post-procesado de los datos obtenidos mediante simulación numérica. En el presente trabajo se utiliza la versión 2006 de este programa, con la que se obtienen los contornos de las fracciones de volumen de aire. La principal utilidad que ofrece TECPLOT es la posibilidad de animar dichos contornos, permitiendo visualizar en un vídeo su evolución temporal.

En este apéndice se detalla, a modo de guía práctica, la creación de vídeos con TECPLOT 360, 2006.

B.1. Cargar datos

Cada uno de los videos se ha creado a partir de 100 casos por ciclo de oscilación. Para cada segundo de simulación tendremos 400 fotogramas para la frecuencia de 4Hz, 200 para la de 2Hz y por último 100 para la de 1Hz. Este número de fotogramas por ciclo se puede reducir aumentando así la discontinuidad en el video.

Para cada caso se cargan los datos mediante el comando File>Load Data *File(s)>Fluent Data Loader...* Para utilizar este comando tanto los casos como los datos deben de estar descomprimidos y usar una malla triangular (si utilizamos otro tipo de malla este procedimiento no será posible si no triangulamos antes).

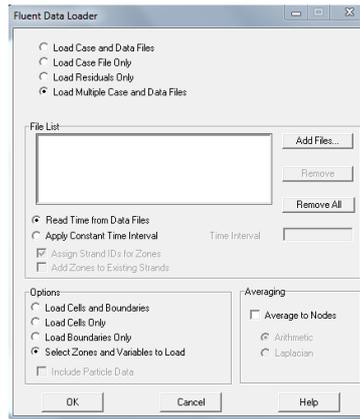


Figura B.1 Cargar ficheros

Mediante el comando *Add Files...* seleccionamos tanto el caso como los datos a cargar. En la siguiente figura se eligen las superficies y los datos que queremos cargar. En nuestro caso cargamos todas las superficies y el contorno de volumen de fracción de aire.

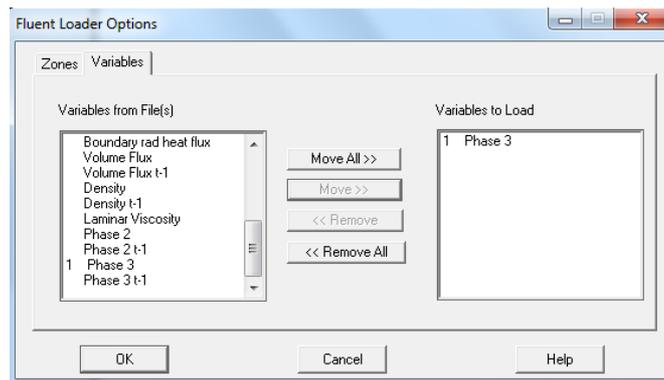


Figura B.2 Cargar datos

Cabe destacar que para poder cargar los datos de esta forma en TECPLOT necesitamos guardar tanto el caso como los datos descomprimidos. Para ello he creado un .jou en el que en el propio ordenador tras descargar los datos comprimidos del servidor para evitar tiempos de espera mayores guarde tanto el cas como los datos descomprimidos.

```
rc nombrecaso.cas.gz
wc nombrecaso.cas

(do ((x 100 (+ x 100))) (> x 900))
  (Ti-menu-load-string (format #f "rd
nombreachivo~a.dat.gz" x))
(Ti-menu-load-string (format #f "wd nombreachivo~a.dat" x))
)
```

B.2. Formato visualización

Una vez cargados los datos procedemos a dar formato para una correcta visualización. Para visualizar los contornos cargados utilizamos el comando Contour... En nuestro caso debemos de utilizar el comando Data>Create Zone>Mirror eje y trasladando antes el eje utilizando el comando Data>Alter Specify equations> $\{X\}=\{X\}-0.0125$. En el siguiente paso realizamos la colocación y dimensionamiento del frame (proporcional a nuestra columna) mediante el comando Frame>Edit Current Frame...

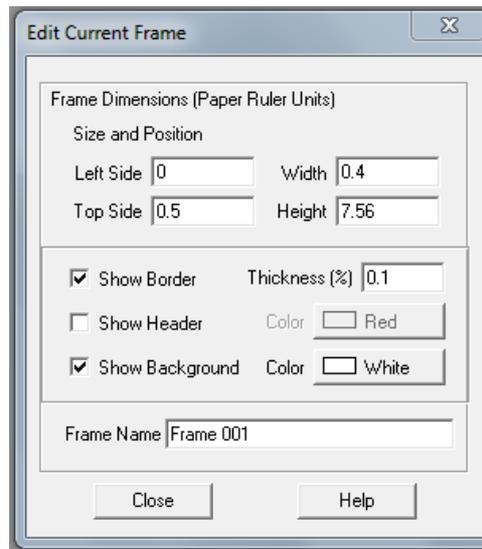


Figura B.3 Editar dimensiones Frame

El siguiente paso será ajustar el eje a los bordes de nuestro frame mediante el comando Plot>Axis Details...

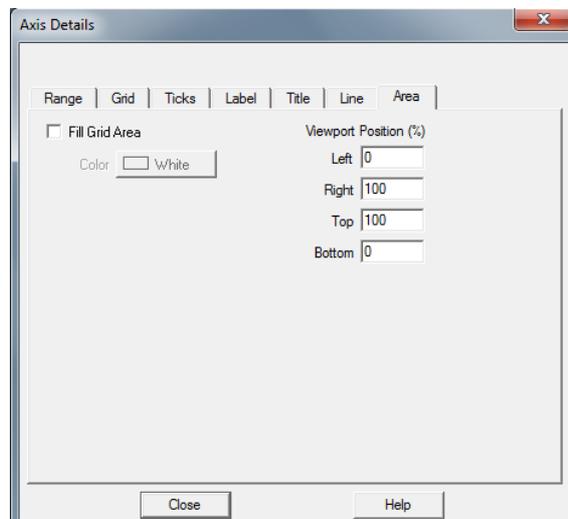


Figura B.4 Editar Ejes

Por último dibujamos cada uno de los discos mediante el comando *Insert>Rectangle...*

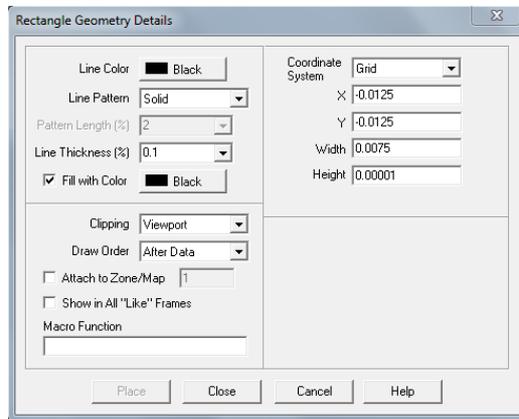


Figura B.5 Dibujar discos

B.3. Animación

Existen dos formas de animar en este apartado exponemos ambas.

B.3.1. Animar un solo frame

Primero cargamos los datos. Aplicamos la macro para un frame. Tras estos dos pasos obtenemos en pantalla la Figura B.6.

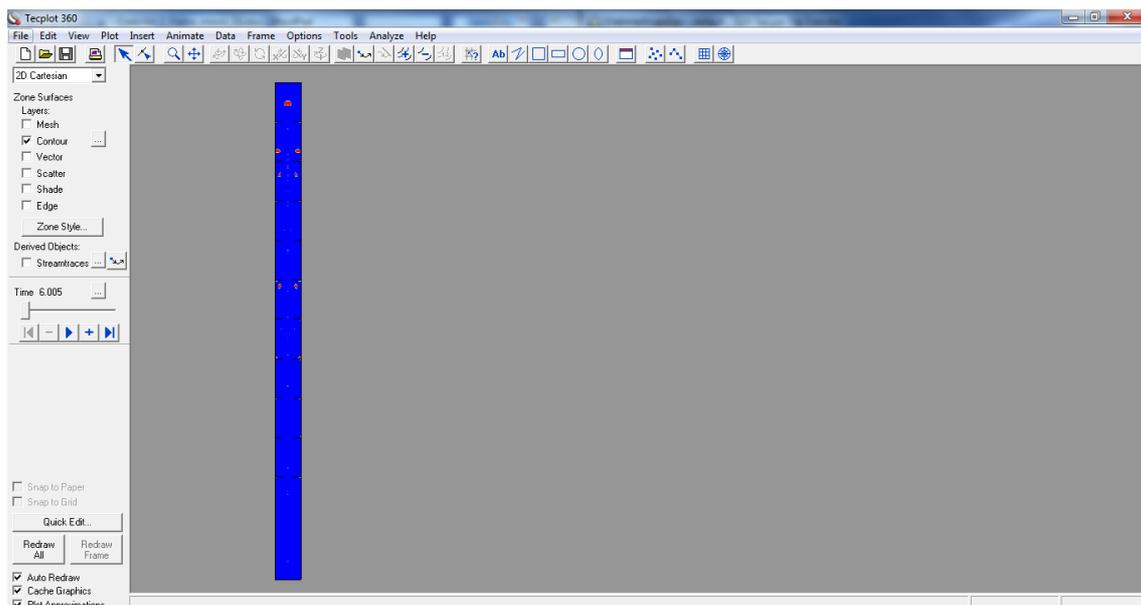


Figura B.6 Ventana de trabajo TECPLOT

Pasamos a animar la imagen mediante el comando *Animate>Time...*

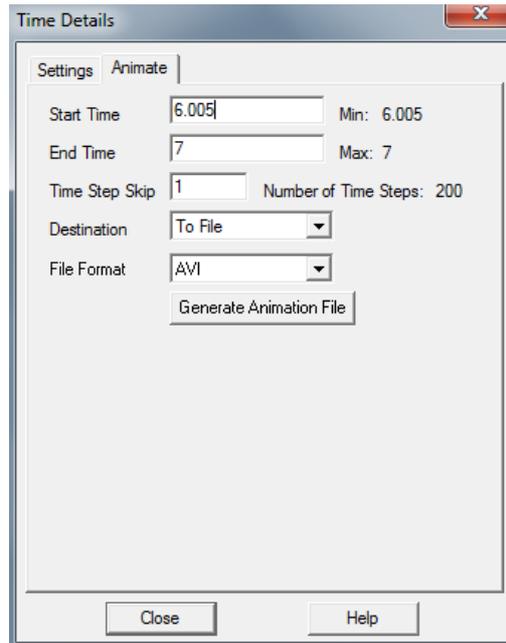


Figura B.7 Elección tiempo y formato de salida

Hacemos clic en *Generate Animation File...* Elegimos los pixeles que queremos de ancho y la velocidad de animación de los datos. En nuestro caso hemos elegido 200 velocidad real y 50 para ralentizarlo. TECPLOT comenzará a animar el frame una vez hacemos clic en OK obteniendo un video con el formato .avi elegido.

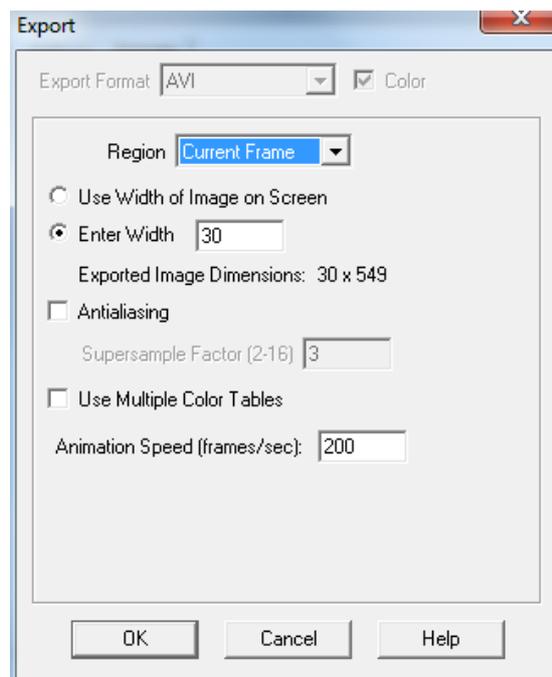


Figura B.8 Elección pixeles y velocidad

B.3.2. Animar varios frames

La animación de varios frames es algo muy costoso pues mediante TECPLOT deberíamos para cada instante de tiempo avanzar las tres columnas una a una.

Para ello se adjunta en el apartado B.5.2. una macro correspondiente a la animación de dos frames para añadir otro solo tendremos que introducir dentro del while la posición de este.

En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** se muestra la forma deal de crear el video con TECPLOT si nuestro ordenador tuviera la suficiente memoria.

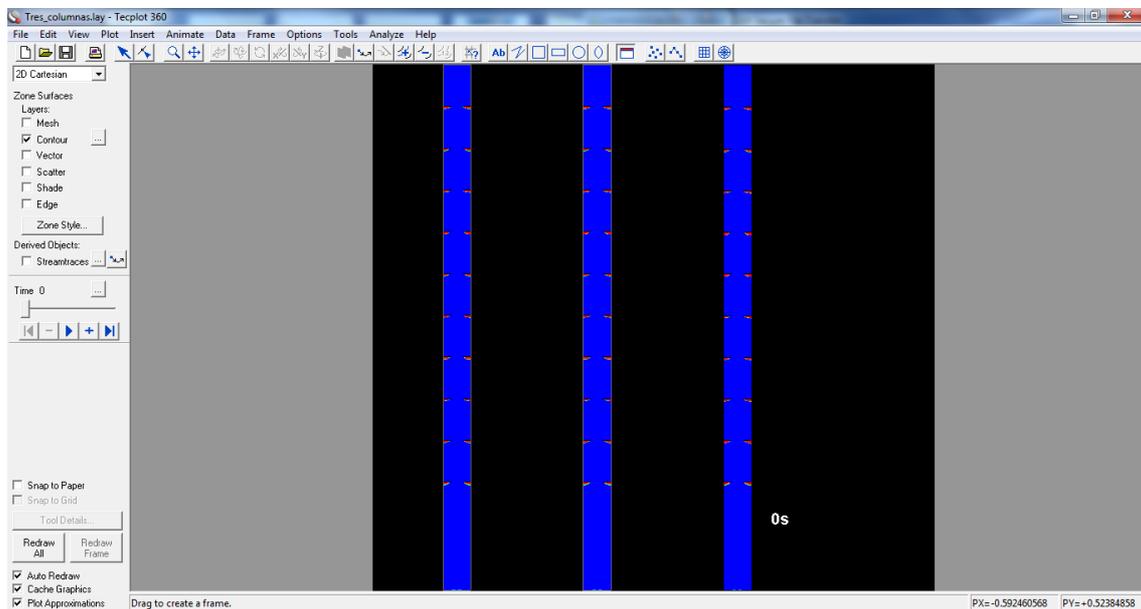


Figura B.9 Ventana creación de un macro

B.4. Limitaciones y solución final

Debido a las limitaciones del ordenador utilizado para la realización de los videos no podemos realizar animaciones mayores de un frame y 1 segundo por animación que corresponde a 200 archivos .dat cargados.

La solución final adoptada ha sido configurar una macro donde se configuran el formato de visualización del apartado B.2. para un frame. Animar este frame mediante el método expuesto en el apartado B.3.1. Por último editar como se expone en el Apéndice C los videos mediante el software Sony Vegas Pro.

B.5. Macros

La creación de macros en TECPLOT es una herramienta muy útil. Nos permite tratar diferentes datos de una misma forma repetidas veces sin necesidad de configurar el formato de visualización para cada uno de estos datos.

Para guardar una macro utilizamos el comando *File>Macro>Record...* elegimos el lugar donde queremos guardarla y procedemos a la realización de los pasos expuestos en el apartado B.2.

Para darle un carácter didáctico a nuestra macro hemos utilizado el comando Insert "Pause" de la Figura B.1 para exponer que se está realizando en cada momento. Cuando terminamos la macro hacemos clic en Stop Recording y la macro quedará guardada.

Para utilizarla cargamos los datos y utilizamos el comando *File>Macro>Play...*

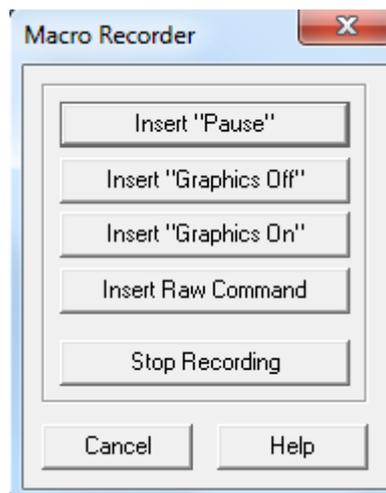


Figura B.10 Ventana creación de un macro

B.5.1. Macro creación un frame para visualización en tecplot

```
#!MC 1100
$!VarSet      |MFBD|      =      'C:\Program      Files
(x86)\Tecplot\Tec360\demo'
$!PAUSE 'Macro para la creación de un Frame '
$!PAUSE 'Ver Contour vof air'
$!FIELDLAYERS SHOWMESH = NO
$!FIELDLAYERS SHOWEDGE = NO
$!FIELDLAYERS SHOWCONTOUR = YES
$!PICK ADD
  X = 3.25
  Y = 6.63953488372
```

```

    CONSIDERSTYLE = YES
$!REDRAW
$!PAUSE 'Trasladar '
$!ALTERDATA
    EQUATION = '{X}={X}-0.0125'
$!GLOBALCONTOUR 1 VAR = 3
$!CONTOURLEVELS RESETTONE
    CONTOURGROUP = 1
    APPROXNUMVALUES = 15
$!PICK ADD
    X = 3.25
    Y = 6.63953488372
    CONSIDERSTYLE = YES
$!REDRAW
$!PAUSE 'Crear mirror'
$!CREATEMIRRORZONES
    SOURCEZONES = [1-22456]
    MIRRORVAR = 'X'
$!PICK ADD
    X = 3.25
    Y = 6.63953488372
    CONSIDERSTYLE = YES
$!REDRAW
$!PAUSE 'Dimensiones Frame'
$!FRAMELAYOUT XYPOS{X = 0}
$!FRAMELAYOUT XYPOS{Y = 0.5}
$!FRAMELAYOUT WIDTH = 0.4
$!FRAMELAYOUT HEIGHT = 7.56
$!FRAMELAYOUT ISTRANSSPARENT = YES
$!PICK ADD
    X = 3.45930232558
    Y = 6.29069767442
    CONSIDERSTYLE = YES
$!REDRAW
$!PAUSE 'Características ejes'
$!TWOAXIS XDETAIL{SHOWAXIS = NO}
$!TWOAXIS YDETAIL{SHOWAXIS = NO}
$!TWOAXIS VIEWPORTPOSITION{X1 = 0}
$!TWOAXIS VIEWPORTPOSITION{X2 = 100}
$!TWOAXIS VIEWPORTPOSITION{Y2 = 100}
$!TWOAXIS VIEWPORTPOSITION{Y1 = 0}
$!TWOAXIS XDETAIL{RANGEMIN = -0.0125}
$!TWOAXIS XDETAIL{RANGEMAX = 0.0125}
$!PICK ADD
    X = 0.269716088328
    Y = 0.843059936909
    CONSIDERSTYLE = YES
$!REDRAW
$!PAUSE 'Dibujar discos (solo se muestra 1 cambiar coordenadas para los demás'
$!ATTACHGEOM

```

```

GEOMTYPE = RECTANGLE
ANCHORPOS
{
  X = -0.0125
  Y = -0.0125
}
RAWDATA
0.00725 9.99999974738E-006
$!PICK SETMOUSEMODE
MOUSEMODE = SELECT
$!ATTACHGEOM
GEOMTYPE = RECTANGLE
ANCHORPOS
{

```

B.5.2. Macro crear un video con varios frames simultáneos en TECPLOT

```

|MFBD|#!MC 1100
$!VarSet |MFBD| = 'Directorio'
$!VarSet |t| = 0
$!EXPORTSETUP EXPORTFORMAT = AVI
$!EXPORTSETUP EXPORTREGION = CURRENTFRAME
$!EXPORTSETUP IMAGEWIDTH = 300
$!EXPORTSETUP ANIMATIONSPEED = 200
$!EXPORTSETUP EXPORTFNAME = 'Directorio'
$!EXPORTSTART
  EXPORTREGION = CURRENTFRAME
$!while |t| <= 1
  $!EXPORTNEXTFRAME
$!FRAMECONTROL POPATPOSITION
  X = 0.2
  Y = 1
  $!PICK ADD
  X = 0.2
  Y = 1
  CONSIDERSTYLE = YES
$!GLOBALTIME SOLUTIONTIME = |t|
$!FRAMECONTROL POPATPOSITION
  X = 2.2
  Y = 1
  $!PICK ADD
  X = 2.2
  Y = 1
  CONSIDERSTYLE = YES
  $!GLOBALTIME SOLUTIONTIME = |t|

$!VarSet |t| = (|t| + 0.0025)
$!EndWhile
$!EXPORTFINISH
$!RemoveVar |MFBD|

```

B.5.3. Macro añadir contador a videos

```
$!PAUSE 'Texto'  
$!ATTACHTEXT  
  POSITIONCOORDSYS = GRID  
  ANCHORPOS  
  {  
    X = 0.03  
    Y = -0.05  
  }  
  COLOR = WHITE  
  TEXTSHAPE  
  {  
    SIZEUNITS = FRAME  
    HEIGHT = 3  
  }  
  SCOPE = GLOBAL  
  MACROFUNCTIONCOMMAND = '&(SOLUTIONTIME) '  
  TEXT = '&(SOLUTIONTIME) s '
```

Apéndice C. Edición de videos mediante software sony vegas pro

En este apéndice se detalla, a modo de guía práctica, la edición de vídeos con Sony Vegas Pro 13.

Los videos adjuntos al proyecto son los siguientes

Frecuencia 1Hz 15s velocidad real

Frecuencia 1Hz 15s velocidad x0,25

Frecuencia 2Hz 8s velocidad real

Frecuencia 2Hz 8s velocidad x0,25

Frecuencia 4Hz 7s velocidad real

Frecuencia 4Hz 7s velocidad x0,25

Frecuencia 1, 2 y 4Hz 7s velocidad real

Frecuencia 1, 2 y 4Hz 7s velocidad x0,25

C.1. Importar

Abrimos el programa y mediante el comando *Archivo>Propiedades...* configuramos las características de nuestro proyecto. Paso muy importante para no perder calidad en la posterior renderización de los videos. Elegimos los pixeles que queremos de ancho (en nuestro caso 40 para videos de una columna y 300 para videos de tres columnas) y de alto debemos elegir el mismo número de pixeles con los que hemos animado nuestro video en TECPLOT.

La velocidad de los fotogramas elegimos la máxima y deseccionamos la casilla Ajustar medios de origen para que coincidan con la configuración del proyecto o renderización.

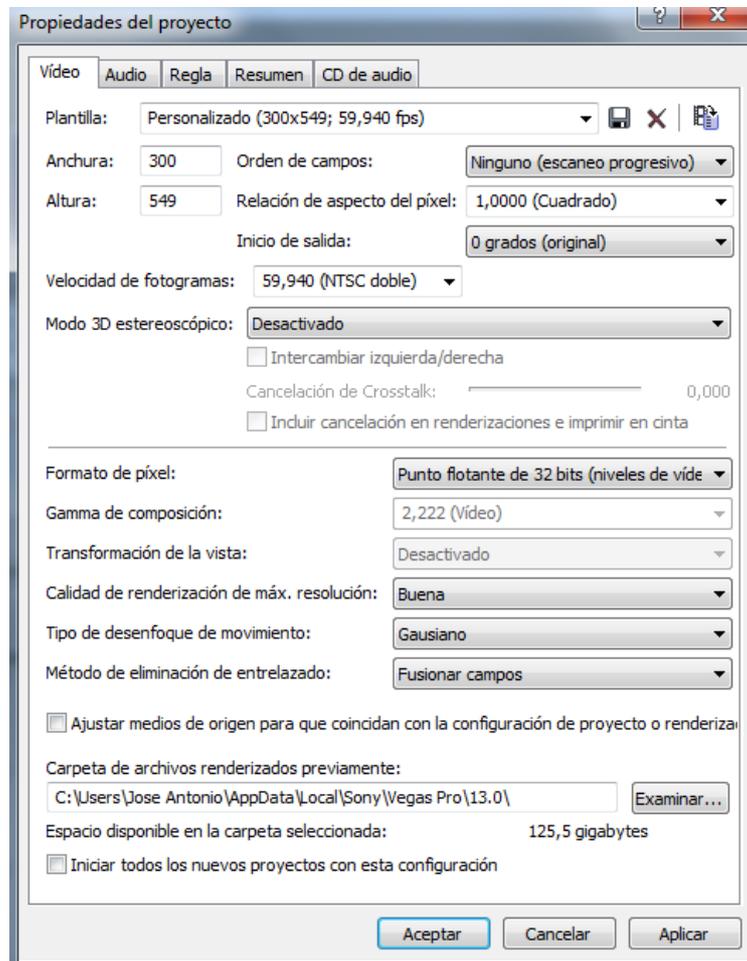


Figura C.1. Propiedades del proyecto para tres columnas

Una vez realizado este paso mediante el comando *Archivo>Importar>Medios...* elegimos los videos que queremos unir y los arrastramos hasta la pista.

C.2. Colocación columnas

Para los casos de una columna no es necesario este apartado. Haciendo clic en el botón  en la pista podremos elegir la posición de cada una de nuestras columnas.

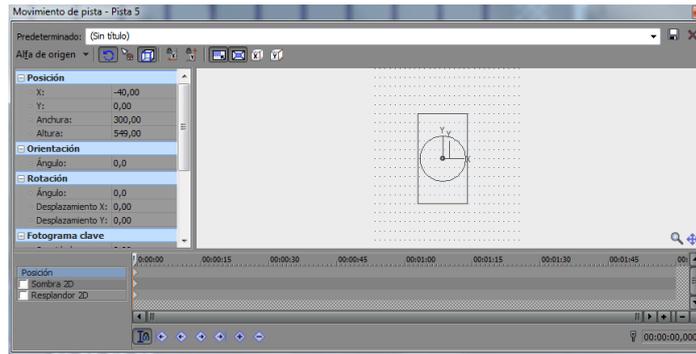


Figura C.2. Propiedades del proyecto para tres columnas

Otras opciones como los textos colocados y el contador se pueden añadir haciendo uso de los tutoriales que hay en la red sobre este programa. Quedando la animación del siguiente modo.

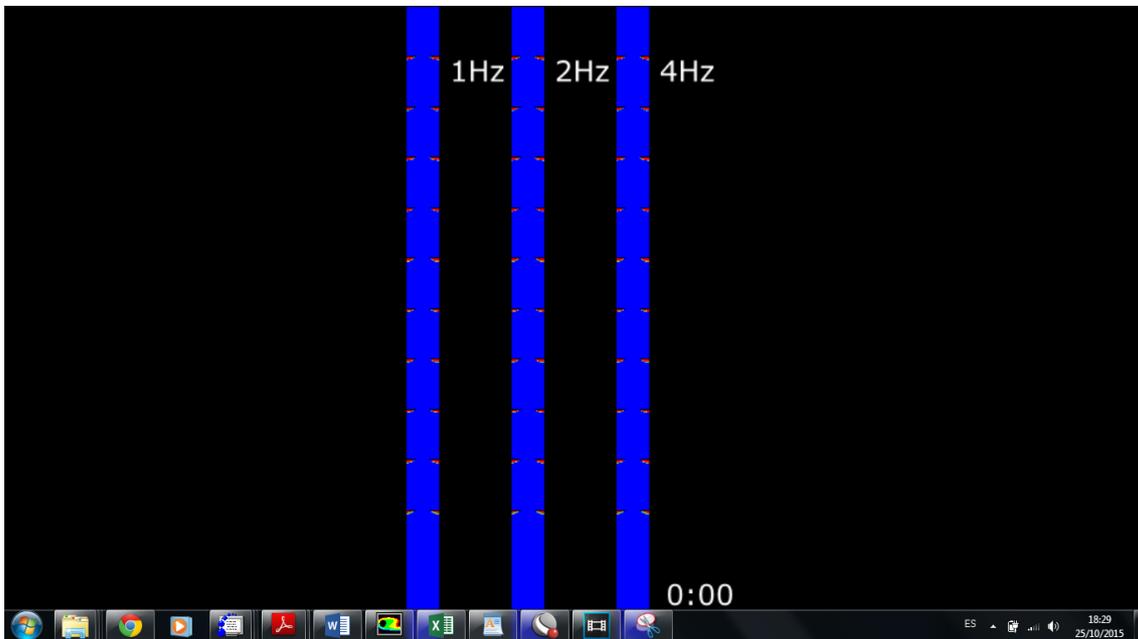


Figura C.3. Visualización para tres columnas

C.3. Renderizar

Por último y paso más importante para no perder calidad en la animación debemos elegir un formato que sea compatible con nuestro tamaño y que no ocupe excesivo espacio. Para renderizar utilizamos el comando Archivo>Renderizar como... Personalizamos las propiedades del formato NTSC SD YUV de manera que queden como en la imagen siguiente.

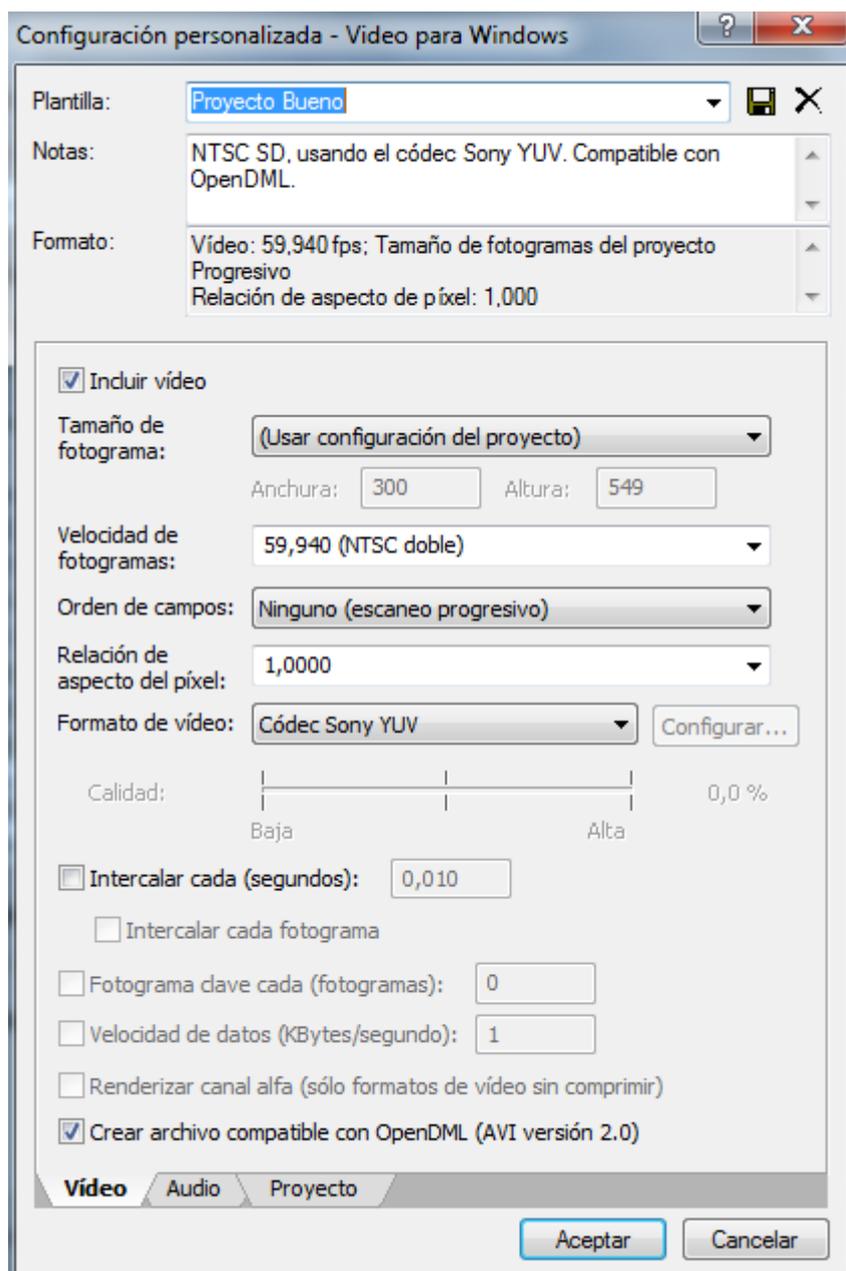


Figura C.4. Propiedades renderización

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] Tecplot 360 User's Manual

