



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

Evaluación del mezclado mediante transporte de trazadores en reactores de flujo oscilatorio utilizando CFD

Titulación: Ingeniería Industrial

Alumno: José Antonio Cano Asís

Director: Juan Pedro Solano Fernández

Cartagena, Mayo de 2014

ÍNDICE

ÍNDICE DE FIGURAS.....	IV
ÍNDICE DE GRÁFICOS	VI
ÍNDICE DE TABLAS	VII
NOTACIÓN	VIII
CAPÍTULO 1 - INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Objetivos	2
1.2. Reactores de flujo oscilatorio	2
1.2.1. Mecanismo de mezcla.....	5
1.2.2. Ventajas, limitaciones y algunas aplicaciones.....	6
1.3. Métodos para estudiar la bondad del mezclado	7
1.6.1. Proporción de velocidad axial a transversal.....	7
1.6.2. Stretching and Rotation rate.....	8
1.6.3. Dispersión axial (D).....	9
1.6.4. Distribución de tiempos de residencia (RTD)	10
1.4. Definición del problema	16
1.6.5. Geometrías estudiadas.....	16
1.6.6. Condiciones de operación.....	17
1.6.7. Números adimensionales.....	18
1.6.8. Casos a estudiar	21
1.6.9. Casos fuera del rango de trabajo	22
CAPITULO 2 - MODELIZACIÓN CON GAMBIT	24
2.1. Introducción a CFD	25
2.2. Metodología	25
2.3. Generación de la geometría y mallado con Gambit	26
2.3.1. Deflector con 1 orificio.....	26
2.3.2. Deflector con 3 orificios	33
2.3.3. Deflector con 7 orificios	35
CAPITULO 3 – PROCESADO EN FLUENT	37
3.1. Importación a Fluent y creación del reactor.....	38
3.2. Perfil oscilatorio	40

3.3. Procesado en Fluent	43
3.2.1. Archivos Journal	43
3.2.2. Materiales y transporte de especies	44
3.2.3. Modelos	46
3.2.4. Residuos	46
3.2.5. Evaluación de magnitudes fluidas	47
3.2.6. Paso de tiempo.....	50
3.2.7. Condiciones de contorno	53
3.2.8. Discretización	55
3.2.9. Factores de subrelajación	56
3.2.10. Plano transversal.....	57
CAPÍTULO 4 – INYECCIÓN DEL TRAZADOR Y ÚLTIMOS AJUSTES.....	58
4.1. Introducción	59
4.2. Distancia de seguridad para inyectar el trazador	59
4.3.1. Planteamiento analítico	60
4.3.2. Método de las secciones	62
4.3. Inyección del trazador	68
4.4. Disposición final de los reactores simulados.....	69
4.4.1. Reactor con deflector de 1 orificio.....	69
4.4.2. Reactor con deflector de 3 orificios	69
4.4.3. Reactor con deflector de 7 orificios	70
4.5. Tiempo de simulación.....	71
CAPÍTULO 5 – RESULTADOS.....	72
5.1. Cantidad de trazador que se escapa por la sección de entrada en cada simulación	73
5.2. Curvas RTD adimensionales	75
5.3. Resultados dentro del rango de trabajo de cada reactor	76
5.3.1. Deflector 1 orificio.....	76
5.3.2. Deflector 3 orificios	78
5.3.3. Deflector 7 orificios	81
5.3.4. Comparación de los 3 reactores.....	83
5.4. Resultados en el rango total	84
5.4.1. Deflector 1 orificio	84
5.4.2. Deflector 3 orificios	85
5.4.3. Deflector 7 orificios	85
5.4.4. Comparación de los 3 reactores.....	86

CAPITULO 6 – CONCLUSIONES.....	90
6.1. Conclusiones.....	91
6.2. Futuros trabajos	92
ANEXOS.....	93
ANEXO 1 - Perfil UDF	94
ANEXO 2 - Código Journal y PBS para la generación de perfiles de velocidad oscilatorios.....	95
ANEXO 3 - Código Journal y PBS para la simulación del transporte de trazador en un OBR.....	101
ANEXO 4 - Videos con TECPLOT 360.....	122
BIBLIOGRAFÍA	123

ÍNDICE DE FIGURAS

<i>Figura 1. Composición de velocidades, flujo oscilatorio más neto</i>	3
<i>Figura 2. A la izquierda OBR con deflectores fijos, a la derecha OBR con deflectores móviles</i>	4
<i>Figura 3. Ejemplos de deflectores</i>	4
<i>Figura 4. Esquema de funcionamiento en un reactor de flujo continuo</i>	5
<i>Figura 5. Vorticidades generadas por los deflectores con el flujo oscilatorio</i>	5
<i>Figura 6. Caso real a la izquierda y simulación por CFD a la derecha</i>	5
<i>Figura 7. Visualización del mecanismo de mezcla. Sin oscilación (1ª). Comienzo de la oscilación (2ª). Tras un ciclo completo de oscilación (3ª). Tras varios ciclos completos de oscilación (4ª)</i>	6
<i>Figura 8. Disposición inicial de las partículas. Stretching and Rotation rate</i>	8
<i>Figura 9. Posición inicial y final del segmento</i>	8
<i>Figura 10. Diseminación del trazador a lo largo del reactor en dos instantes de tiempo distintos [2]</i>	10
<i>Figura 11. Ejemplos de la distribución axial de la concentración del trazador para dos instantes de tiempo [2]</i>	10
<i>Figura 12. Ejemplo de RTD de un reactor</i>	10
<i>Figura 13. RTD con una entrada impulso</i>	13
<i>Figura 14. RTD con una entrada escalón</i>	14
<i>Figura 15. Modelo de reactor con la localización del trazador empleado por M. Manninen y X. Ni [2]</i>	16
<i>Figura 16. Geometría del reactor de flujo oscilatorio</i>	16
<i>Figura 17. Creación de puntos de referencia</i>	26
<i>Figura 18. Creación de circunferencia</i>	26
<i>Figura 19. Split Face</i>	27
<i>Figura 20. Superficies circulares para definir el reactor</i>	27
<i>Figura 21. Creación de cara</i>	27
<i>Figura 22. Características capa límite</i>	27
<i>Figura 23. Relaciones del mallado de capa límite a definir en Fluent</i>	27
<i>Figura 24. Mallado de capa límite en el reactor</i>	28
<i>Figura 25. Densidad de mallado en circunferencia</i>	28
<i>Figura 26. Especificación de la densidad de mallado en bordes</i>	28
<i>Figura 27. Mallado de cara</i>	29
<i>Figura 28. Creación de puntos para extrusionar</i>	29
<i>Figura 29. Mallado de capa límite en la pared del deflector</i>	30
<i>Figura 30. Mallado de líneas de referencia</i>	30
<i>Figura 31. Ventana para configurar el extrusionado</i>	30
<i>Figura 32. Malla computacional de un paso – MH1</i>	31
<i>Figura 33. Malla computacional en perspectiva – MH1</i>	31
<i>Figura 34. Ventana condición de contorno</i>	31
<i>Figura 35. Paso de reactor MH1</i>	31

<i>Figura 36. Mallado de paso donde se indica la localización del trazador</i>	32
<i>Figura 37. Ventana de exportación de malla</i>	32
<i>Figura 38. Superficies circulares para definir el reactor</i>	33
<i>Figura 39. Mallado de capa límite en el reactor</i>	33
<i>Figura 40. Mallado de cara MH3</i>	34
<i>Figura 41. Malla computacional de un paso MH3</i>	34
<i>Figura 42. Paso de reactor MH3</i>	34
<i>Figura 43. Superficies circulares para definir el reactor MH7</i>	35
<i>Figura 44. Mallado de capa límite en el reactor MH7</i>	35
<i>Figura 45. Mallado de bordes MH7</i>	36
<i>Figura 46. Malla computacional de un paso MH7</i>	36
<i>Figura 47. Paso de reactor MH7</i>	36
<i>Figura 48. Ventana con la que se traslada la malla</i>	38
<i>Figura 49. Unión de dos caras coincidentes</i>	39
<i>Figura 50. Aplicación de la escala adecuada</i>	39
<i>Figura 51. Panel para cargar el perfil UDF</i>	40
<i>Figura 52. Selección del perfil UDF como condición de contorno</i>	41
<i>Figura 53. Reactor de cuatro pasos con flujo oscilatorio producido con UDF</i>	41
<i>Figura 54. Reactor de 4 pasos utilizado para la obtención del perfil oscilatorio</i>	42
<i>Figura 55. Reactor donde se muestra la sección de la que extraemos el perfil de velocidades oscilatorio</i>	42
<i>Figura 56. Configuración del material agua</i>	44
<i>Figura 57. Activación del modelo de transporte de especies</i>	45
<i>Figura 58. Configuración del material trazador</i>	45
<i>Figura 59. Selección de modelo laminar</i>	46
<i>Figura 60. Configuración de los residuos</i>	47
<i>Figura 61. Disposición de las secciones de monitorización a lo largo del reactor</i>	48
<i>Figura 62. Definición de superficies a monitorizar</i>	48
<i>Figura 63. Configuración de las características a monitorizar</i>	49
<i>Figura 64. Ventana donde se indica el paso de tiempo y el número de pasos de tiempo</i>	50
<i>Figura 65. Ventana para cargar un perfil</i>	54
<i>Figura 66. Discretización de un volumen de control</i>	55
<i>Figura 67. Creación de plano para visualizar los fenómenos</i>	57
<i>Figura 68. Velocidad en la dirección Y para un instante de tiempo sobre el plano transversal</i>	57
<i>Figura 69. Zona de inyección del trazador (en azul) en un paso</i>	59
<i>Figura 70. Reactor MH1 donde se muestran las secciones de control y el punto de inyección del trazador</i>	63
<i>Figura 71. Reactor donde se muestran las secciones de control y el punto de inyección del trazador seleccionado</i> .	68
<i>Figura 72. Configuración de la inyección del trazador</i>	68
<i>Figura 73. Disposición final de los reactores. MH1, MH3 y MH7 de arriba a abajo</i>	70

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1. Rango de trabajo según el número de orificios en el deflector	21
Gráfico 2. Casos totales de estudio según el número de orificios y número de Strouhal.....	23
Gráfico 3. Puntos donde se guardan los perfiles en el tercer ciclo	43
Gráfico 4. Discretización de un ciclo.....	51
Gráfico 5. Velocidad (negro) y posición (rojo) de una partícula que sigue una trayectoria sobre una línea recta a lo largo del eje del reactor	61
Gráfico 6. Flujo másico de trazador por la sección de salida (rojo) y la de entrada (azul).....	64
Gráfico 7. Detalle del flujo másico de trazador por la sección de entrada (azul).....	64
Gráfico 8. Cantidad de trazador que ha escapado por la sección de entrada (azul) y la sección de salida (rojo) en función del tiempo. Cantidad de trazador total al iniciar la simulación (verde)	65
Gráfico 9. Flujo másico de trazador a través de la sección 4	65
Gráfico 10. Flujo másico de trazador a través de la sección 4 en dirección a la entrada.....	66
Gráfico 11. Resultados de plantear el método de cálculo de la distancia de seguridad. Cantidad de trazador que escapa por la entrada en función del tiempo.....	67
Gráfico 12. Cantidad de trazador que escapa por la sección de entrada en función del número de Strouhal	74
Gráfico 13. Curvas de distribución casos MH1.....	76
Gráfico 14. Curvas de distribución adimensionalizadas casos MH1	76
Gráfico 15. Varianza en función del número de número de Strouhal casos MH1.....	77
Gráfico 16. Tiempo medio de residencia en función del número de Strouhal casos MH1	77
Gráfico 17. Curvas de distribución casos MH3.....	78
Gráfico 18. Curvas de distribución adimensionalizadas casos MH3	79
Gráfico 19. Varianza en función del número de Strouhal casos MH3.....	79
Gráfico 20. Tiempo medio de residencia en función del número de Strouhal casos MH1	80
Gráfico 21. Curvas de distribución casos MH7.....	81
Gráfico 22. Curvas adimensionalizadas de distribución casos MH7	81
Gráfico 23. Varianza en función del número de Strouhal casos MH7.....	82
Gráfico 24. Tiempo medio de residencia en función del número de Strouhal casos MH7	82
Gráfico 25. Varianza en función del número de Strouhal para los tres reactores.....	83
Gráfico 26. Tiempo de residencia en función del número de Strouhal para los tres reactores.....	83
Gráfico 27. Curvas adimensionales para todos los casos del reactor MH1.....	84
Gráfico 28. Curvas adimensionales para todos los casos del reactor MH3.....	85
Gráfico 29. Curvas adimensionales para todos los casos del reactor MH1.....	85
Gráfico 30. Varianza en función del número de Strouhal para todos los casos simulados.....	86
Gráfico 31. Tiempo de residencia en función del número de Strouhal para todos los casos simulados	87
Gráfico 32. Curvas adimensionales para $St = 0.420$ en los tres reactores.....	88
Gráfico 33. Curvas adimensionales para $St = 0.0796$ en los tres reactores.....	88

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Condiciones geométricas de los reactores	17
Tabla 2. Condiciones de operación MH1	21
Tabla 3. Condiciones de operación MH3	21
Tabla 4. Condiciones de operación MH7	21
Tabla 5. Condiciones geométricas MH3	33
Tabla 6. Condiciones geométricas MH7	35
Tabla 7. Cantidad de trazador (en %) que escapa por cada una de las secciones	67
Tabla 8. Tiempo de simulación según tiempo hidráulico de residencia para MH1	71
Tabla 9. Cantidad de trazador que escapa por la sección de salida en las simulaciones del reactor MH1	73
Tabla 10. Cantidad de trazador que escapa por la sección de salida en las simulaciones del reactor MH3	73
Tabla 11. Cantidad de trazador que escapa por la sección de salida en las simulaciones del reactor MH7	73
Tabla 12. Varianza en función de número de Strouhal. MH1	77
Tabla 13. Tiempo medio de residencia en función de número de Strouhal. MH1	77
Tabla 14. Varianza en función de número de Strouhal. MH3	79
Tabla 15. Tiempo medio de residencia en función de número de Strouhal. MH3	80
Tabla 16. Varianza en función de número de Strouhal. MH7	82
Tabla 17. Tiempo medio de residencia en función de número de Strouhal. MH7	82
Tabla 18. Cantidad de trazador que escapa por la sección de entrada para los tres reactores con $St = 0.0796$	89
Tabla 19. Denominación de los videos de las simulaciones	122

Notación

u	Velocidad (ms^{-1})
u_{net}	Velocidad neta (ms^{-1})
u_{osc}	Velocidad oscilatoria (ms^{-1})
f	Frecuencia de oscilación (Hz)
x_0	Amplitud de oscilación (m)
t	Tiempo (s)
R_v	Proporción de velocidad axial a transversal (—)
$u_{i,axial}$	Velocidad axial de una celda computacional (ms^{-1})
$u_{i,transveral}$	Velocidad transversal de una celda computacional (ms^{-1})
V_i	Volumen de una celda computacional (m^3)
x	Coordenada axial (m)
D_c	Coefficiente de dispersión (m^2s^{-1})
E	Distribución de tiempos de salida (s^{-1})
τ	Tiempo medio de residencia (s)
τ_h	Tiempo hidráulico de residencia (s)
V	Volumen del reactor (m^3)
Q	Caudal de entrada del fluido (m^3s^{-1})
σ^2	Varianza (m^2)
C	Concentración del trazador (kgm^{-3})
F	Distribución de tiempos de salida en el experimento escalón
C_0	Concentración del trazador a la entrada en el experimento escalón (kgm^{-3})
D	Diámetro interior del reactor (m)
d	Diámetro de los orificios del reactor (m)
L	Separación entre deflectores (m)
e	Espesor del deflector (m)
A	Superficie ocupada por los orificios del deflector (m^2)
ρ	Densidad (kgm^{-3})
μ	Viscosidad dinámica ($kgm^{-1}s^{-1}$)
x_p	Desplazamiento del pistón (m)
u_p	Velocidad del pistón (ms^{-1})
D_w^*	Coefficiente de autodifusión del agua (m^2s^{-1})
Re	Número de Reynolds (—)

Re_o	Número de Reynolds oscilatorio (—)
St	Número de Strouhal (—)
n	Número de orificios en cada deflector
T	Periodo de oscilación (s)
P	Número de pasos de tiempo por ciclo
\emptyset	Fracción másica (o escalar) (—)
m_{traz}	Masa del trazador (kg)
t_s	Tiempo de simulación (s)
m_{tot}	Masa total del fluido del reactor (kg)
u_{max}	Velocidad máxima (ms^{-1})
u_{med}	Velocidad intermedia (ms^{-1})
C_t	Número de Courant (—)
S_D	Superficie de la sección del conducto del reactor (m^2)
\vec{v}	Vector velocidad de una celda (ms^{-1})
$d\vec{A}$	Vector superficie de una celda (m^2)
α	Factor de subrelajación (—)
L_{MH1}	Longitud del paso del reactor con deflectores de 1 orificio (m)
L_{t-MH1}	Longitud que recorre el trazador en el reactor con deflectores de 1 orificio (m)
L_{MH3}	Longitud del paso del reactor con deflectores de 3 orificio (m)
L_{t-MH3}	Longitud que recorre el trazador en el reactor con deflectores de 3 orificio (m)
L_{MH7}	Longitud del paso del reactor con deflectores de 7 orificio (m)
L_{t-MH7}	Longitud que recorre el trazador en el reactor con deflectores de 7 orificio (m)
N_t	Número de pasos que hay entre la inyección del trazador y la medida de la RTD

ABREVIATURAS

OBR	Oscillatory Baffled Reactor: Reactor de flujo oscilatorio
OBR-MF	Oscillatory Baffled Reactor – Moving Fluid
OBR-MB	Oscillatory Baffled Reactor – Moving Baffles
RTD	Residence Time Distribution: Distribución de tiempos de residencia
MH1	Multi Hole 1: Reactor con deflectores con 1 orificio
MH3	Multi Hole 3: Reactor con deflectores con 3 orificios
MH7	Multi Hole 7: Reactor con deflectores con 7 orificios

CAPÍTULO 1 - INTRODUCCIÓN

1.1. Objetivos

El objetivo general del Proyecto Final de Carrera es desarrollar una simulación numérica que permita estudiar el proceso de mezclado en un reactor de flujo oscilatorio (Oscillatory Baffled Reactor, OBR), sin necesidad de desarrollar un prototipo y probarlo en banco de ensayos. El estudio se centra en el problema fluidomecánico del flujo oscilatorio, sin abordar el problema térmico.

La metodología de simulación consistirá en:

- Desarrollo y mallado de las geometrías a simular con Gambit. Se desarrollarán diversas geometrías.
- Estudio sobre el método de inyección de especies y definición de las condiciones de contorno y propiedades de los fluidos.
- Implementación en Fluent de cada caso.
- Análisis de resultados.

1.2. Reactores 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.

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.

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

$$u(t) = u_{net} + u_{osc} \quad (1)$$

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

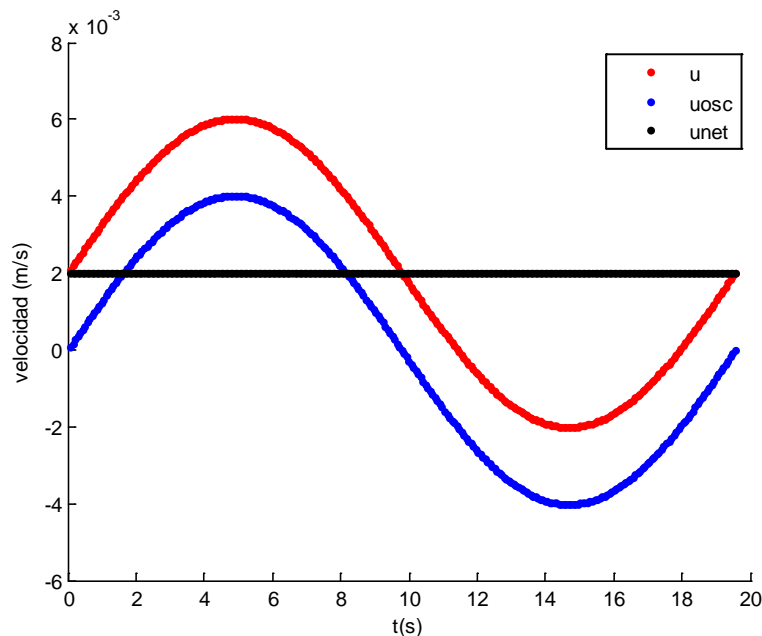


Figura 1. Composición de velocidades, flujo oscilatorio más neto

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

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

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

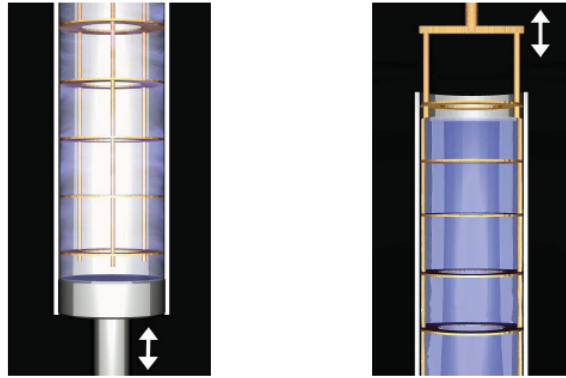


Figura 2. A la izquierda OBR con deflectores fijos, a la derecha OBR con deflectores móviles

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



Figura 3. Ejemplos de deflectores

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

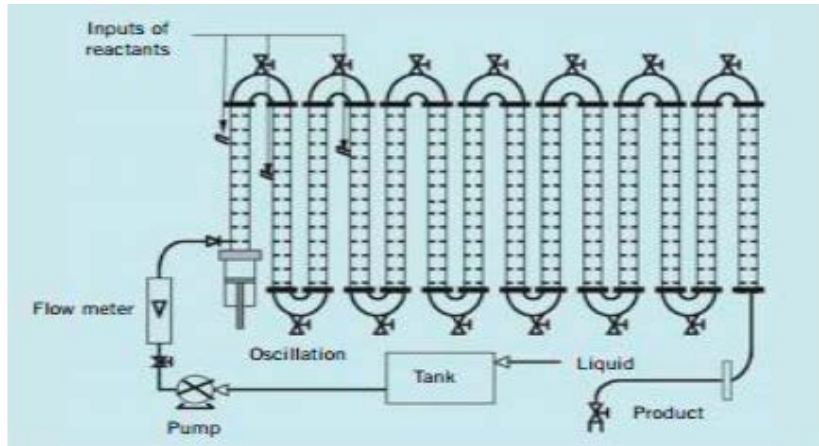


Figura 4. Esquema de funcionamiento en un reactor de flujo continuo.

1.2.1. Mecanismo de mezcla

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

En los OBR, el mezclado axial es debido al flujo oscilatorio y el mezclado radial es causado por los vórtices producidos por las interacciones entre el fluido y la presencia de deflectores.

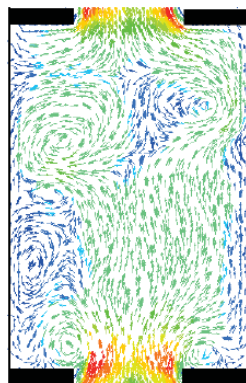
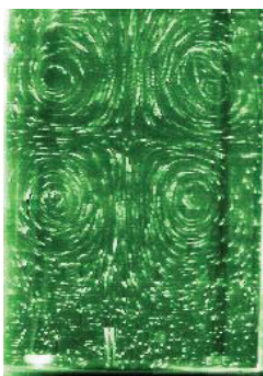


Figura 6. Caso real a la izquierda y simulación por CFD a la derecha

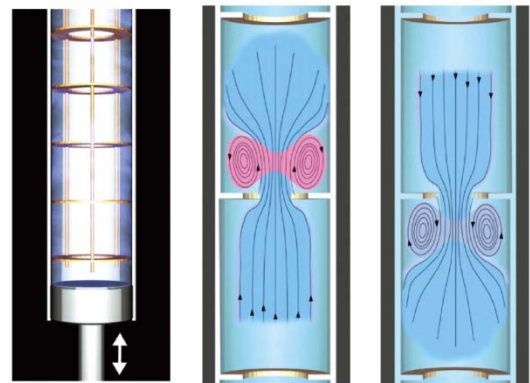


Figura 5. Vorticidades generadas por los deflectores con el flujo oscilatorio

Se puede observar los diferentes vórtices de velocidad que se genera al cambiar de sentido la dirección del flujo. Estos vórtices se van generando de forma repetitiva en cada ciclo y paso de tiempo.

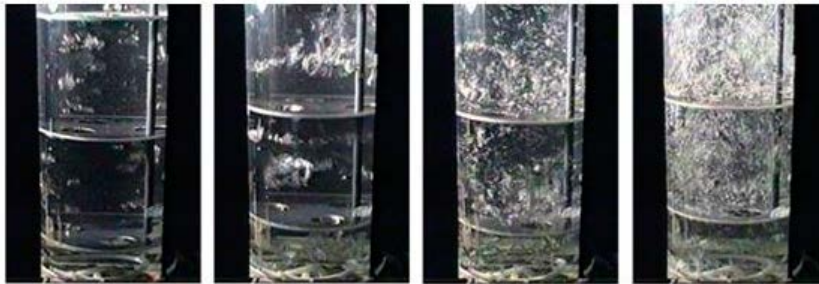


Figura 7. Visualización del mecanismo de mezcla. Sin oscilación (1ª). Comienzo de la oscilación (2ª). Tras un ciclo completo de oscilación (3ª). Tras varios ciclos completos de oscilación (4ª).

1.2.2. Ventajas, limitaciones y algunas aplicaciones.

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

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

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

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

En cuanto a las **aplicaciones** encontramos que estos reactores se utilizan en las industrias química, farmacéutica y bioquímica. Algunas de estas aplicaciones son polimerización, fermentación, síntesis orgánica.

Una importante aplicación es la fabricación de polímeros mediante la **polimerización por suspensión**. En este proceso se mezcla una fase acuosa, generalmente agua, con una cierta cantidad de monómero insoluble, dando lugar a la formación de gotas de monómero en la fase acuosa. El *OBR* permite obtener una distribución adecuada y uniforme del tamaño de las partículas de polímero a través del control de las condiciones de mezcla, especialmente de la temperatura, así como evitar la fusión de las gotas de monómero durante la reacción. Con esta técnica se producen polímeros como el cloruro de polivinilo o el poliestireno.

Una de las aplicaciones más atractivas para los reactores de flujo oscilatorio es la **producción de biocarburantes**. El empleo de reactores tipo tanque de agitación es una tecnología suficientemente conocida, y cuya eficiencia es ya difícilmente mejorable. Por ello se trabaja actualmente en el desarrollo de reactores intensificados: reactores estáticos, reactores con micro-canales, reactores con cavitación, reactores rotativos y reactores de flujo oscilatorio. Estas nuevas tecnologías permitirán aumentar la competitividad de las instalaciones de producción de biodiesel.

1.3. Métodos para estudiar la bondad del mezclado

Examinando la bibliografía encontramos diferentes métodos para estudiar los procesos de mezclado en este tipo de reactores:

1.6.1. Proporción de velocidad axial a transversal

Autores como **Mikko Manninen y Xiong-Wei Ni** [2] han trabajado con éste método.

Para bajos números de Reynolds, el patrón de flujo en el reactor es ordenado y la velocidad transversal tiene solo componente radial. Sin embargo cuando comienza el comportamiento turbulento, se forman torbellinos irregulares y aparece una significativa componente tangencial.

Esta proporción, R_v , viene definida como:

$$R_v(t) = \frac{\sum_i |u_{i,axial}| V_i}{\sum_i |u_{i,transveral}| V_i} \quad (3)$$

donde V_i es el volumen de una celda computacional (m^3) y la velocidad transversal queda definida como $u_{i,transveral} = \sqrt{u_y^2 + u_z^2}$.

La cantidad $R_v(t)$ es dependiente del tiempo, por lo tanto los valores numéricos obtenidos tienen que ser promediados en el tiempo. Se puede observar que el valor instantáneo de R_v puede ser muy alto, por ejemplo cuando la velocidad en el orificio es alta. Sin embargo, el mezclado puede ser generalmente bueno, ya que R_v tiene valores bajos en otros instantes de tiempo.

1.6.2. Stretching and Rotation rate

Autores como **M.R. Mackley** [3] han trabajado con éste método. Para aplicarlo se parte de una disposición inicial de las partículas como las de que se indican en la siguiente figura.

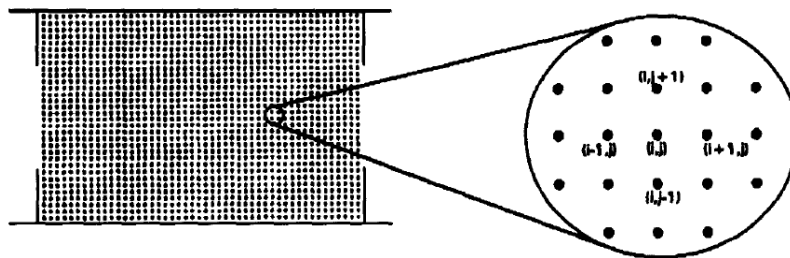


Figura 8. Disposición inicial de las partículas. Stretching and Rotation rate.

Si se define un segmento con una longitud y una orientación iniciales, con este método se pretende estudiar el alargamiento y el giro al que se ve afectado este segmento debido al campo de velocidades:

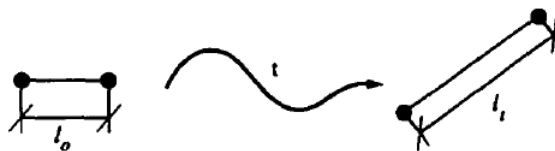


Figura 9. Posición inicial y final del segmento

Para ello se resuelven las siguientes ecuaciones de velocidad de alargamiento y velocidad de rotación respectivamente:

$$\frac{d(\ln l)}{dt} = \sin^2\theta \frac{\partial v}{\partial y} + \sin\theta\cos\theta \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \cos^2\theta \frac{\partial u}{\partial x} \quad (4)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \cos^2\theta \frac{\partial v}{\partial x} + \sin\theta\cos\theta \left(\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \sin^2\theta \frac{\partial u}{\partial y} \quad (5)$$

1.6.3. Dispersión axial (D)

Autores como **Mikko Manninen y Xiong-Wei Ni** [2] han trabajado utilizando este concepto. Trabajan con un reactor al que se le inyecta un trazador en el centro del mismo y estudian la dispersión del éste a lo largo del reactor. Estos autores buscan una distribución Gaussiana con respecto a la coordenada axial, para un instante de tiempo dado.

Para ello se trabaja con las ecuaciones de la dispersión axial. El modelo unidimensional convectivo-difusivo para la concentración de especies, C, en un conducto es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_c \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_{net} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (6)$$

Donde x es la coordenada axial y u_{net} es la velocidad axial media en el conducto. El coeficiente de dispersión, D_c , es una medida del grado de mezclado axial que se lleva a cabo.

En un OBR, D_c depende de la frecuencia de oscilación, amplitud y geometría del reactor (localización del deflector, sección de paso del deflector) y de las propiedades del fluido. En procesos continuos D_c describe la variación del tiempo de residencia dependiendo del reactor.

De las simulaciones en CFD, el valor de D_c puede ser determinado a partir de la diseminación de un trazador. Sin velocidad neta ($u_{net} = 0$), la ecuación de la difusión toma la forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_c \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (7)$$

La solución a esta ecuación es la función de probabilidad normal.

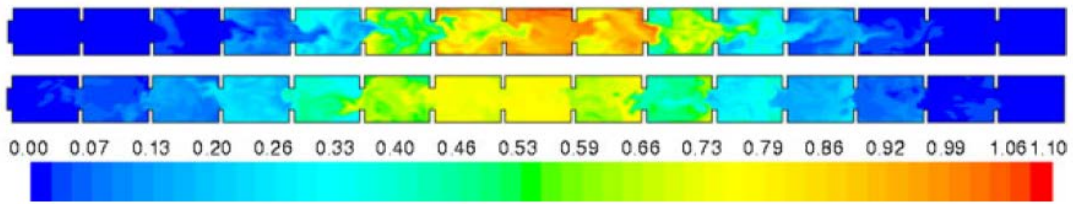


Figura 10. Diseminación del trazador a lo largo del reactor en dos instantes de tiempo distintos [2]

En la graficas siguientes se observa los resultados simulados de la distribución del trazador a lo largo del reactor para dos instantes de tiempo diferentes. Si se ajusta esta curva (Fitted pdf) se ve que en efecto, se tiene una distribución Gaussiana.

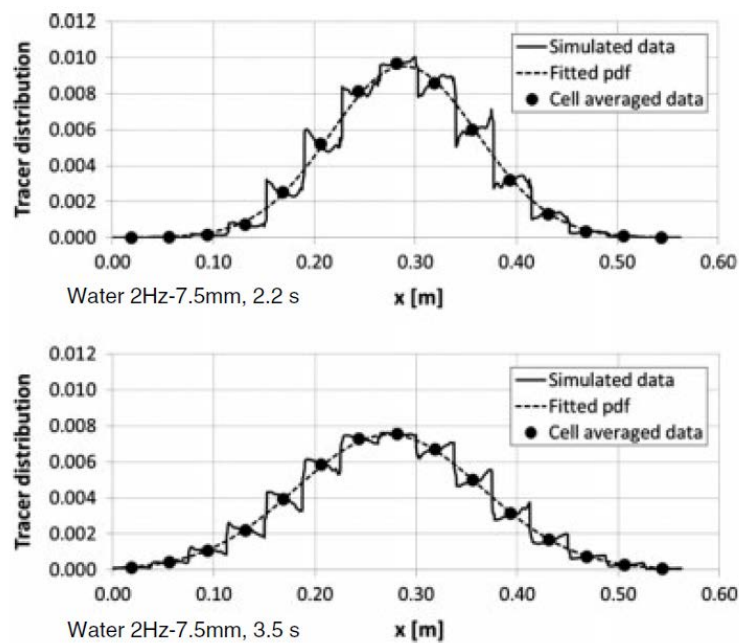


Figura 11. Ejemplos de la distribución axial de la concentración del trazador para dos instantes de tiempo [2]

Con estos resultados y las ecuaciones planteadas se pueden obtener valores del coeficiente de dispersión axial, D , y se puede obtener un parámetro característico para comparar el mezclado según diferentes casos.

1.6.4. Distribución de tiempos de residencia (RTD)

Autores como **Anh N. Phan** y **Adam P. Harvey** [6] han trabajado con éste método. En este proyecto será el método utilizado para estudiar la bondad del mezclado.

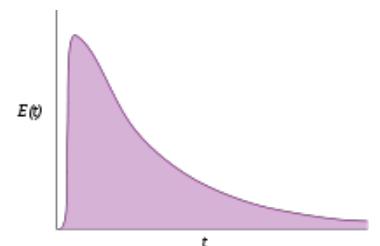


Figura 12. Ejemplo de RTD de un reactor

La distribución de tiempos de residencia (RTD: Residence Time Distribution) de un reactor químico en un fluido, es una distribución de probabilidad que describe la cantidad de tiempo que un elemento diferencial de un fluido puede pasar dentro de un reactor. La RTD se utiliza para caracterizar el mezclado y flujo dentro de un reactor. Esto es útil, no solo en la solución de problemas y detección de corto-circuitos en reactores existentes, también es útil para estimar la eficiencias de las reacciones involucradas y en el diseño de futuros reactores.

El concepto fue propuesto por MacMullin y Weber en 1935, pero no fue usado intensivamente hasta que **P.V. Danckwerts** [7] analizó un número importante de RTDs en 1953. Danckwerts introduce el concepto de “elemento fluido” como un pequeño volumen de fluido donde ciertas propiedades, como la concentración, pueden ser definidas.

La distribución de tiempos de residencia viene representada por una distribución de edad de salida, $E(t)$, que mide el tiempo que las diferentes fracciones de “elemento fluido” permanecen dentro del reactor (macromixing). Esta distribución no da información sobre el mezclado a nivel molecular (micromixing).

Teoría

La teoría de las distribuciones de tiempos de residencia comienza con tres suposiciones:

1. No existe flujo transitorio.
2. El transporte a la entrada y a la salida tiene lugar sólo por advección.
3. El fluido es incompresible.

Realmente, la suposición de incompresibilidad no es requerida, pero los flujos compresibles son más difíciles de estudiar. Un mayor nivel de complejidad es requerido para reactores multifásicos, donde una curva de distribución de tiempos de residencia describirá el flujo de cada fase, por ejemplo aire a través de un líquido.

La función de edad de salida, $E(t)$, está normalizada y se define matemáticamente:

$$\int_0^{\infty} E(t)dt = 1 \quad (8)$$

El tiempo de residencia promedio se calcula con la siguiente ecuación:

$$\tau = \int_0^{\infty} t \cdot E(t)dt \quad (9)$$

Si no hay zonas muertas dentro del reactor, entonces τ será igual al tiempo hidráulico de residencia τ_h , que se obtiene de dividir el volumen del reactor (V) entre el caudal de entrada del fluido (Q).

$$\tau_h = \frac{V}{Q} \quad (10)$$

Otros estadísticos descriptivos pueden proveer información sobre la conducta de la función $E(t)$. Por ejemplo, el segundo momento central, la varianza (σ^2), indica el grado de dispersión respecto de la media.

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 \cdot E(t) dt \quad (11)$$

El tercer momento central indica el grado de asimetría de la distribución $E(t)$ y el cuarto momento central indica el grado de curtosis presente.

Determinación Experimental del RTD

La curva RTD es medida introduciendo un trazador no reactivo dentro del sistema a la entrada. La concentración del trazador va cambiando a lo largo del reactor y su respuesta se encuentra con la medición de la concentración del trazador a la salida. La introducción del trazador no debe modificar las condiciones hidrodinámicas.

Dependiendo del proceso, se pueden utilizar trazadores cuya propiedad a medir es la conductividad, la absorción de la luz, la concentración de un determinado catión, o la radioactividad. Por esto, dependiendo del trazador utilizado, se utilizan diferentes técnicas experimentales. Entre los factores que deben ser considerados para la selección del trazador para una determinada aplicación se puede mencionar:

- Disponibilidad del trazador
- Equipo de detección
- Límite de detección a baja concentración
- Propiedades físicas similares a las del material que se transporta (densidad, viscosidad)
- No debe reaccionar químicamente
- No debe absorberse en las paredes del reactor o en las partículas

En general, la inyección del trazador se hace mediante una función pulso o una función escalón. Es posible usar otras funciones pero se requiere más cálculos para dar sentido a los resultados que da la curva RTD.

Experimento en pulso

Este método requiere la introducción de un volumen muy pequeño de trazador en el interior del reactor, tal que su función se aproxime a la función Delta de Dirac.

Debido a que una función infinitamente corta no puede ser producida, esta suele ser producida de tal modo que sea mucho más pequeña que el tiempo de residencia del recipiente. Si una masa del trazador, M , es introducida dentro del recipiente de volumen V y tiene un tiempo de residencia esperado τ , la función de edad de salida, $E(t)$, toma la forma:

$$E(t) = \frac{C(t)}{\int_0^{\infty} C(t)dt} \quad (12)$$

Donde $C(t)$ se define como la concentración de trazador medida a la salida del reactor con un tiempo de residencia t .

De este modo, para la inyección en pulso, las ecuaciones antes planteadas quedan como:

$$\tau = \int_0^{\infty} t \cdot E(t)dt = \frac{\int_0^{\infty} tC(t)dt}{\int_0^{\infty} C(t)dt} \quad (13)$$

$$\sigma^2 = \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 \cdot E(t)dt = \frac{\int_0^{\infty} (t - \tau)^2 C(t)dt}{\int_0^{\infty} C(t)dt} \quad (14)$$

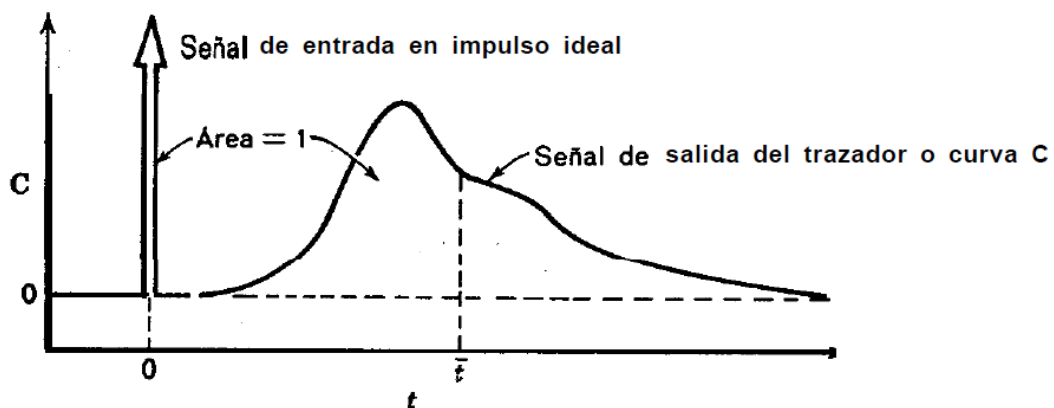


Figura 13. RTD con una entrada impulso

Experimento en escalón

En un experimento en escalón la concentración del trazador a la entrada cambia abruptamente en un tiempo dado t desde 0 a C_0 . La concentración del trazador a la salida se mide y normaliza a la concentración C_0 para obtener la curva adimensional $F(t)$ cuyos valores rondan entre 0 a 1:

$$F(t) = \frac{C(t)}{C_0}$$

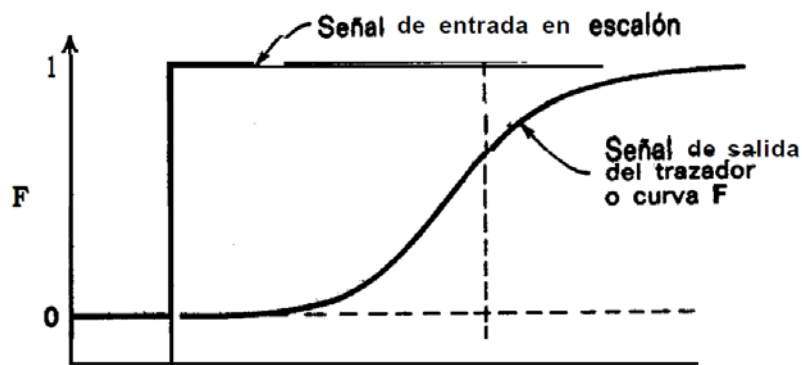


Figura 14. RTD con una entrada escalón

Las respuestas de salida de la función escalón y función pulso de un reactor se relacionan matemáticamente:

$$F(t) = \int_0^t E(t) dt \quad (15)$$

$$E(t) = \frac{dF(t)}{dt} \quad (16)$$

El valor del tiempo de residencia medio y la varianza también pueden ser deducidos de la función $F(t)$:

$$\tau = \int_0^{\infty} tE(t) dt = \int_0^1 t dF(t) = - \int_0^1 t d(1 - F(t)) = \int_0^{\infty} (1 - F(t)) dt \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \int_0^{\infty} (t - \tau)^2 E(t) dt = \int_0^1 (t - \tau)^2 dF(t) = \int_0^1 t^2 dF(t) - \tau^2 = \\ &= 2 \int_0^{\infty} t(1 - F(t)) dt - \tau^2 \end{aligned} \quad (18)$$

Un experimento en escalón frecuentemente es más sencillo de realizar que un experimento en pulso, pero tiende a difuminar algunos de los detalles que una entrada en pulso suele mostrar. Es fácil integrar numéricamente un experimento en pulso y suele obtenerse un estimado de alta calidad, lo contrario ocurre si se quiere obtener una función inversa mediante diferenciación debido a que cualquier ruido en la medición de la concentración se amplifica por la diferenciación numérica.

Un modelo de Distribución de tiempos de residencia posee 2 extremos, definidos por el tipo de flujo que se presenta en el reactor:

- **Flujo pistón** (plug flow), cuando la salida súbita de todo el material trazado después de un tiempo promedio de residencia, lo que implica que no se produce una mezcla hacia adelante o hacia atrás del material mientras se mueve a través del reactor.
- **Mezcla perfecta**, cuando todo el material marcado se mezcla instantáneamente en el seno de la carga y la concentración del material marcado, en el reactor y en el material que deja el reactor, es igual y disminuye exponencialmente con el tiempo.

Cuando no es posible representar satisfactoriamente las desviaciones del flujo ideal en flujo pistón o en mezcla perfecta se emplean unos modelos propuestos por **O. Levenspiel** [8]. Son modelos de flujo que suponen que el reactor real está constituido por una combinación de varios elementos, como flujo en mezcla perfecta, flujo pistón, zonas muertas, flujo con recirculación cruzado, todos los anteriores interconectados entre sí. En cada combinación pueden estar presentes dos o más elementos, con una distribución de tiempos de residencia $E(t)$ distinta para cada caso.

La curva de tiempos de residencia (RTD) juega un papel importante en la caracterización de un reactor, ya que refleja las condiciones de mezclado dentro de él.

Las curvas RTD pueden variar desde distribuciones muy estrechas y simétricas donde hay una considerable mezcla en sentido radial (flujo pistón), hasta, en el otro extremo, curvas anchas y asimétricas con largas colas, donde el mezclado radial es pobre.

Una curva estrecha será normalmente preferible para reactores de flujo oscilatorio y por lo tanto una menor varianza será la deseada.

El conocimiento del comportamiento del fluido dentro del reactor es muy importante, porque uno de los factores no controlables al momento de hacer el **escalamiento** de un diseño es la no idealidad del flujo, por tanto el desconocimiento del **patrón de flujo** puede conducir a grandes errores.

Sin embargo, un completo estudio acerca del flujo sería demasiado complejo. En muchos casos, no es necesario tener tanta información, tan solo es necesario conocer cuánto tiempo permanece cada molécula dentro del recipiente, o lo que es lo mismo, la distribución de tiempos de residencia del fluido.

1.4. Definición del problema

El problema fluidodinámico que se plantea en este Proyecto Fin de Carrera es el estudio del proceso de mezclado en un **reactor de flujo oscilatorio** (Oscillatory Baffled Reactor, OBR) con deflectores fijos. El estudio se centra en el problema mecánico del flujo oscilatorio, sin abordar el problema térmico.

El proceso de mezclado se estudiará mediante la inyección de un pequeño volumen de **trazador** en el interior del reactor. La distribución de trazador será analizada como una función del tiempo en una localización axial determinada, como es utilizado a menudo en análisis experimentales (experimento en pulso). El fluido del trazador tendrá las mismas propiedades que el del resto del reactor.

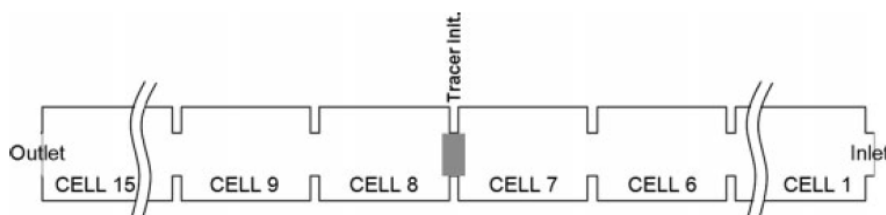


Figura 15. Modelo de reactor con la localización del trazador empleado por M. Manninen y X. Ni [2]

1.6.5. Geometrías estudiadas.

La geometría del reactor está formada por un conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25$ mm, en el que se insertan, una serie de deflectores con orificios de diámetro “ d ” y espesor $e = 1.5$ mm, separados una distancia $L = 3d$, de manera equidistante.

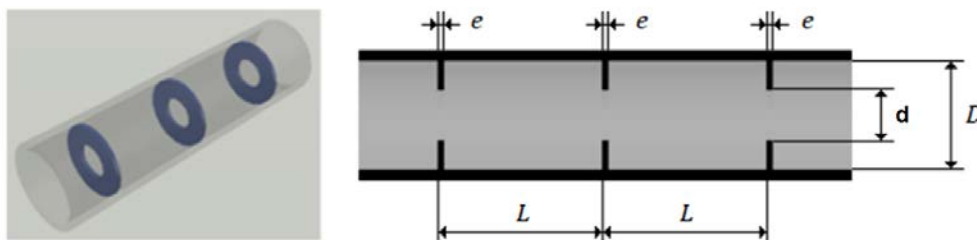


Figura 16. Geometría del reactor de flujo oscilatorio

Capítulo 1 – Introducción

Se estudiarán diferentes casos en los que deflectores tienen diferente número (n) de orificio. El diámetro de los orificios (d) y la distancia de separación (L) vendrán dados por el número de estos orificios (n).

El diámetro de los orificios se toma de tal manera que la sección de paso del flujo en cada disco sea la misma independientemente del número de orificios del mismo. De este modo, si para el caso de deflector con un solo orificio se toma que $d = D/2 = 12.5$ mm, esta superficie será igual a $A = 122,7 \text{ mm}^2$.

Al ser la distancia de separación entre deflectores tres veces al diámetro de los orificios, a mayor número de orificios, menor será la distancia de separación entre ellos. Esta consideración geométrica se tiene en cuenta para una correcta propagación de los vórtices.

Las geometrías estudiadas en este proyecto son por tanto:

Número de Orificios	D (mm)	d (mm)	L=3xd (mm)
1	25	12.5	37.5
3	25	$\sqrt{\frac{4A}{3\pi}} = 7.2$	21.6
7	25	$\sqrt{\frac{4A}{7\pi}} = 4.7$	14.1

Tabla 1. Condiciones geométricas de los reactores

1.6.6. Condiciones de operación.

El fluido de trabajo utilizado para las simulaciones es **agua**, con propiedades, a 25 °C:

- Densidad: $\rho = 998,2 \text{ kg/m}^3$
- Viscosidad dinámica: $\mu = 0,001003 \text{ kg/ms}$
- Viscosidad cinemática: $\nu = 1,004809 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$
- Coeficiente de autodifusión: $D_w^* = 2.299 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$

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

Capítulo 1 – Introducción

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

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

$$x_p(t) = -x_0 \cos(2\pi ft) \quad (19)$$

$$u_p(t) = \frac{dx_p}{dt} = 2\pi x_0 \sin(2\pi ft) \quad (20)$$

En el presente proyecto la amplitud de oscilación y la frecuencia quedarán definidas a partir de unos números adimensionales que se muestran en el siguiente apartado.

1.6.7. Números adimensionales

Los flujos utilizados en nuestro problema queda definido por tres números adimensionales: número de **Reynolds** (Re), número de **Reynolds oscilatorio** (Re_o) y número de **Strouhal** (St).

$$Re = \frac{u_{net} \rho D}{\mu} \quad (21)$$

$$Re_o = \frac{2\pi f x_0 \rho D}{\mu} \quad (22)$$

$$St = \frac{D}{4\pi x_0} \quad (23)$$

Siendo:

- u_{net} : velocidad neta (m/s)
- ρ : densidad del fluido (kg/m^3).
- D : diámetro del reactor (m)
- μ : viscosidad dinámica (Ns/m^2)

A partir del número de Reynolds, y una vez definida el agua como fluido de estudio, se tiene la velocidad neta del fluido a través del reactor.

$$u_{net} = \frac{\mu Re}{\rho D} \quad (24)$$

Capítulo 1 – Introducción

Aquí cabe destacar como en algunos estudios llevados a cabo por otros autores (M. Manninen y X. Ni - Estudio de la dispersión axial [2]) se desprecia este flujo neto ya que el flujo oscilatorio es mucho mayor y es el que realmente desean estudiar. De este modo se simplifican los cálculos de su planteamiento. Sin embargo en el presente estudio sí se tendrá en cuenta la velocidad neta.

El número de Reynolds oscilatorio describe la intensidad de mezclado aplicada al reactor.

Por otro lado, el número de Strouhal mide la propagación efectiva de vórtices.

A partir del Reynolds oscilatorio y del Strouhal se pueden fijar las condiciones de operación oscilatorias (x_0 , f) como se observa a continuación:

$$x_0 = \frac{D}{4\pi St} \quad (25)$$

$$f = \frac{Re_o \mu}{2\pi x_0 \rho D} \quad (26)$$

De este modo, definiendo los números de Re , Re_o y St , queda definidas las condiciones de operación del reactor.

La posibilidad de flujos a simular es muy grande, teniendo en cuenta todas las combinaciones posibles entre Re , Re_o y St . En este proyecto nos centraremos en los siguientes casos:

Número de Reynolds

Re = 50, que nos fija la velocidad neta en el reactor.

Número de Reynolds oscilatorio

Reo = 100, que en función de los diferentes números de Strouhal nos fijará una frecuencia y amplitud de oscilación determinadas.

Número de Strouhal

Quedará definido en función de la amplitud de oscilación (x_0).

Durante la búsqueda de información bibliográfica se contactó con el **profesor Xiong-Wei Ni**, que, para el caso de deflector con un orificio, nos indicó los valores de amplitud de oscilación que se utilizan en la actualidad, para conseguir un mezclado radial adecuado, según la geometría del mismo:

$$x_0 \geq D/2 \quad (27)$$

Para delimitar un rango de estudio, como límite superior de amplitud de oscilación tomaremos el siguiente valor, también utilizado por otros autores en sus estudios [6]:

$$x_0 = D \quad (28)$$

A partir de estas indicaciones se planteará una extrapolación para establecer cuál es la amplitud recomendada para el caso de deflectores con varios orificios.

Tenemos que la longitud de un paso del reactor es igual a $L = 3d$, teniendo “d” en función del número de orificios (n) como ya habíamos establecido. Sabemos además que para el caso de deflector con un orificio se cumple: $D = 2d$.

Sustituyendo en las ecuaciones anteriores, encontramos entonces que la relación entre el número de orificios y la amplitud del pistón es igual a:

$$x_0(n) \geq D/2 = 2d/2 = L/3 \quad (29)$$

$$x_0(n) \leq D = 2d = 2L/3 \quad (30)$$

De este modo, el número de Strouhal en función del número de orificios (n) será:

$$St(n) = \frac{D}{4\pi x_0(n)} \quad (31)$$

Así podemos encontrar el número de Strouhal máximo y mínimo con el que realizaremos las simulaciones.

Además estudiaremos un valor más de número de Strouhal, que viene de tomar la amplitud ($x_0(n)$) media entre las dos anteriores, es decir:

$$x_0(n) = \frac{L/3 + 2L/3}{2} = L/2 \quad (32)$$

1.6.8. Casos a estudiar

Para cada reactor se tiene que los casos a simular serán:

Deflectores 1 orificio

	Condición	x_0 (m)	St
St_max	$x = L/3$	0.0125	0.159
St_interm	$X = L/2$	0.0188	0.106
St_min	$x = (2/3)L$	0.025	0.0796

Tabla 2. Condiciones de operación MH1

Deflectores 3 orificios

	Condición	x_0 (m)	St
St_max	$x = L/3$	0.0072	0.276
St_interm	$X = L/2$	0.0108	0.184
St_min	$x = (2/3)L$	0.0144	0.138

Tabla 3. Condiciones de operación MH3

Deflectores 7 orificios

	Condición	x_0 (m)	St
St_max	$x = L/3$	0.0047	0.420
St_interm	$X = L/2$	0.0071	0.280
St_min	$x = (2/3)L$	0.0095	0.210

Tabla 4. Condiciones de operación MH7

Se observa que cada reactor tiene un “rango” de trabajo distinto, determinado por el número de Strouhal.

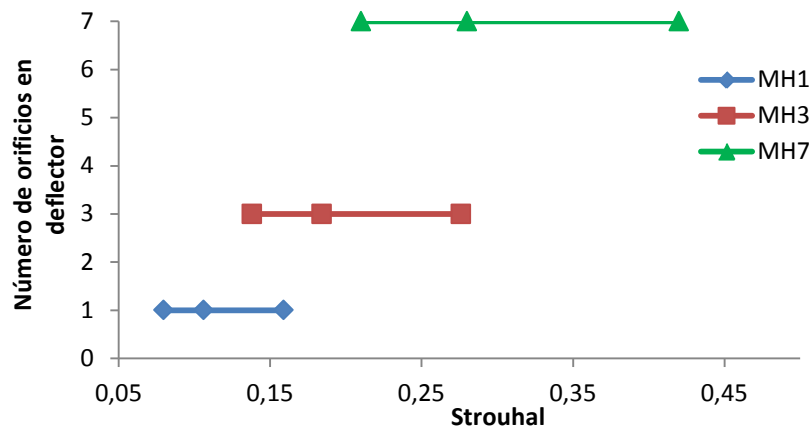


Gráfico 1. Rango de trabajo según el número de orificios en el deflector

Cabe destacar como haciendo la elección de $Re = 50$ y $Re_o = 100$ constantes para todos los casos, la velocidad máxima será la misma para toda la variedad de números de Strouhal. Esto ocurre ya que el St nos define x_0 y el $Re_o \sim f x_0 = cte$. Además, como tenemos que $Re = cte$ la u_{net} también lo será, y por tanto la velocidad máxima que alcanza el flujo será:

$$u_{max} = u_{net} + 2\pi f x_0 = cte \quad (33)$$

Serán los parámetros de amplitud de oscilación (x_0) y de frecuencia (f) los que irán cambiando según varíe el número de Strouhal, y serán los que afecten al mezclado en el interior del reactor.

1.6.9. Casos fuera del rango de trabajo

Como se indicaba en el apartado anterior, a la hora de seleccionar las condiciones del flujo, se ha seguido una recomendación dada por el profesor Xiong-Wei Ni sobre la amplitud de oscilación mínima en el caso de deflectores con un orificio (Ecuación 27). Nosotros, a partir de esa condición obteníamos el número de Strouhal.

Además, se hizo una extrapolación de esta recomendación a los casos con más de un orificio, obteniendo un número de Strouhal en función del número de orificios (n) (Ecuación 28). Obteniendo:

De esta conclusión se tenía que cada tipo de reactor trabajaba mejor dentro de diferentes rangos de número de Strouhal.

Por último se realizarán **4 simulaciones adicionales** con el fin de estudiar que ocurre cuando se trabaja con los anteriores reactores fuera de su “rango” de trabajo. De este modo podremos determinar si se tiene un comportamiento no deseado, comprobando el porqué de la recomendación del profesor Xiong-Wei Ni y si la extrapolación realizada para deflectores con más de un orificio es válida.

Las simulaciones adicionales serán por tanto:

- MH1, $St = 0.420$
- MH3, $St = 0.0796$
- MH3, $St = 0.420$
- MH7, $St = 0.0796$

Capítulo 1 – Introducción

De este modo, finalmente, se tendrán resultados de simulaciones dentro del mismo rango para todos los reactores, quedando:

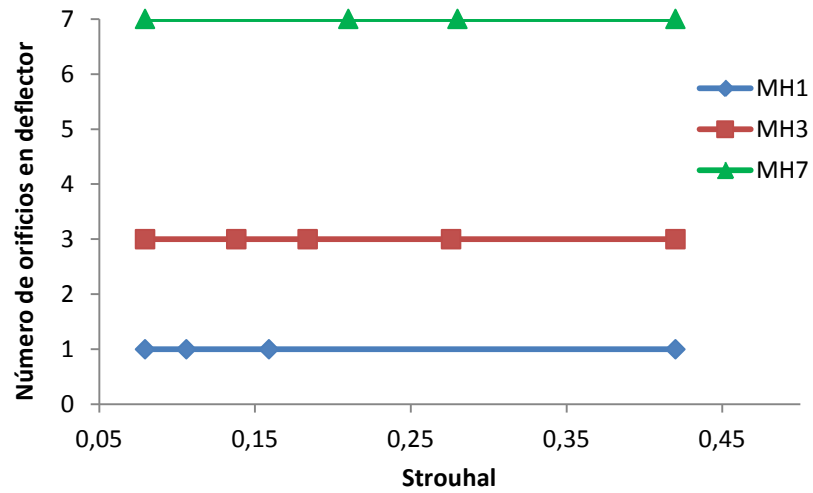


Gráfico 2. Casos totales de estudio según el número de orificios y número de Strouhal

CAPITULO 2 - MODELIZACIÓN CON GAMBIT

2.1. Introducción a CFD

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

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

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

2.2. Metodología

En todos los procesos de CFD se sigue un mismo esquema básico de metodología.

En primer lugar está el **preproceso**. En este paso se define la geometría del problema. El volumen ocupado por el fluido se discretiza en celdas, dando lugar a un mallado. También se define el modelo matemático a utilizar y se especifican las condiciones de contorno y las condiciones iniciales.

El segundo paso es la **simulación**. Una vez definido completamente el sistema a estudiar las ecuaciones se resuelven mediante iteraciones.

El último paso es el **postproceso**. Aquí se visualiza y analiza la solución obtenida.

Los softwares utilizados en este proyecto han sido GAMBIT (para el modelado geométrico y mallado), FLUENT (solver matemático), MATLAB (procesado de datos y representación gráfica) y TECPLOT (representación gráfica).

2.3. Generación de la geometría y mallado con Gambit

El primer paso para realizar las simulaciones es crear un modelo de la estructura física que se desea estudiar. El software utilizado ha sido GAMBIT, que permite modelar la geometría y realizar el mallado.

Con Gambit modelaremos y mallaremos un solo paso del reactor. Posteriormente, con ayuda de Fluent estableceremos una sucesión del mismo para conformar el reactor que estudiaremos.

Por tanto, la finalidad de este paso es crear el volumen que ocupa el fluido que se quiere estudiar, es decir, el interior de un paso del reactor.

2.3.1. Deflector con 1 orificio

A continuación se desarrolla el proceso seguido para crear el paso de reactor que contiene un deflector con 1 orificio:

1. Creamos superficies circulares

Creamos dos circunferencias de diámetro D y d, con centro en el origen de coordenadas. A partir de ellas se crean las superficies circulares correspondientes. Mediante la operación Split Face, restamos la superficie interior a la exterior, quedando una superficie circular interior y una corona circular exterior.

Posteriormente estas superficies se extrusionarán para conseguir la geometría de un paso del reactor.

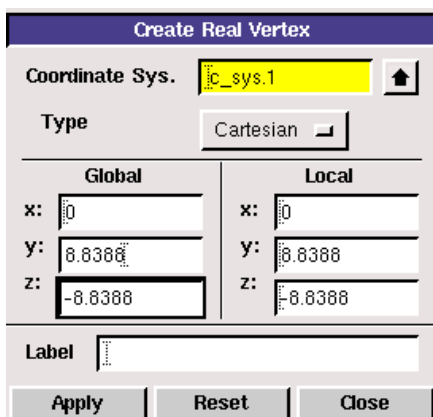


Figura 18. Creación de circunferencia

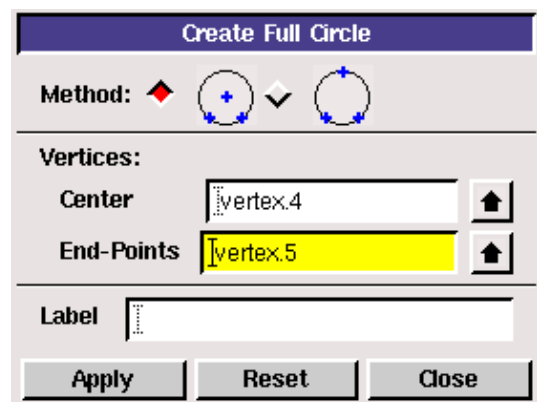


Figura 17. Creación de puntos de referencia

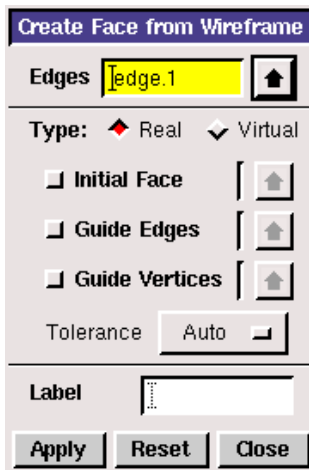


Figura 21. Creación de cara

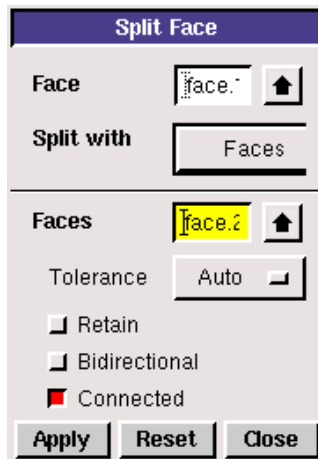


Figura 19. Split Face

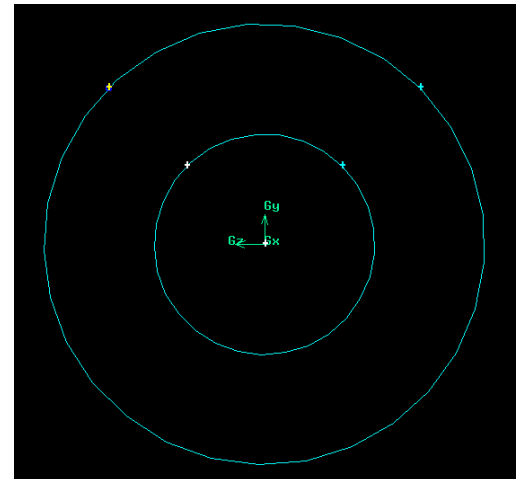


Figura 20. Superficies circulares para definir el reactor

2. Mallamos las superficies

-Mallado de capa límite (Mesh boundary-layer)

Para tener en cuenta la capa límite se crea un mallado especial por el interior de las circunferencias exterior y exterior.

Una malla de capa límite es una malla con una densa distribución de elementos en la dirección normal de los contornos. Esta malla se usa para tener en cuenta la delgada capa límite, aportando más nodos en esa zona, y por lo tanto menor error.

Las características del mallado de capa límite son:

- Tamaño de la primera hilera (a) : 0.2
- Factor de crecimiento (b/a=c/b): 1.2
- Número de hileras: 4
- Profundidad del mallado (D): 1.0736

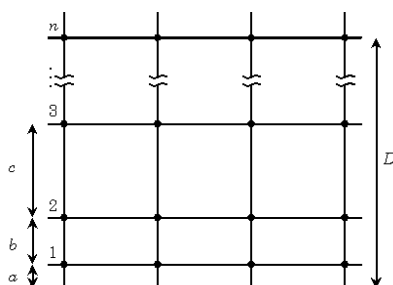


Figura 23. Relaciones del mallado de capa límite a definir en Fluent

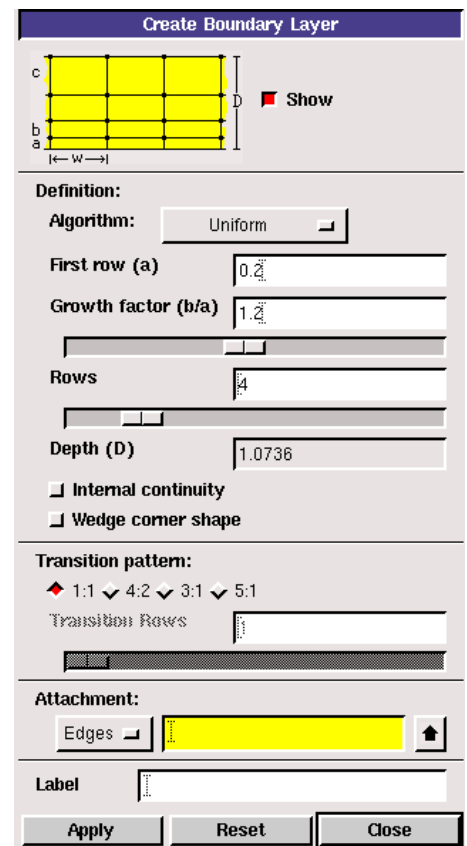


Figura 22. Características capa límite

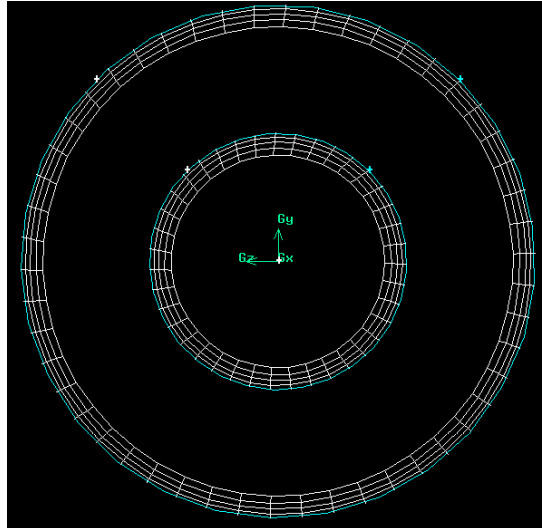


Figura 24. Mallado de capa límite en el reactor

-Mallado de bordes.(Mesh Edges)

Se especifica la densidad de mallado a lo largo de cada circunferencia. Se ha tomado una separación entre nodos equidistante (Ratio = 1). Para cada caso se tiene:

- Circunferencia exterior: 60 espaciados
- Circunferencia interior: 30 espaciados

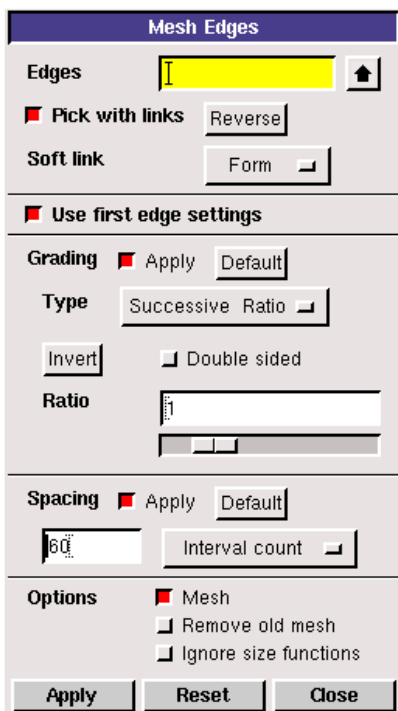


Figura 25. Densidad de mallado en circunferencia

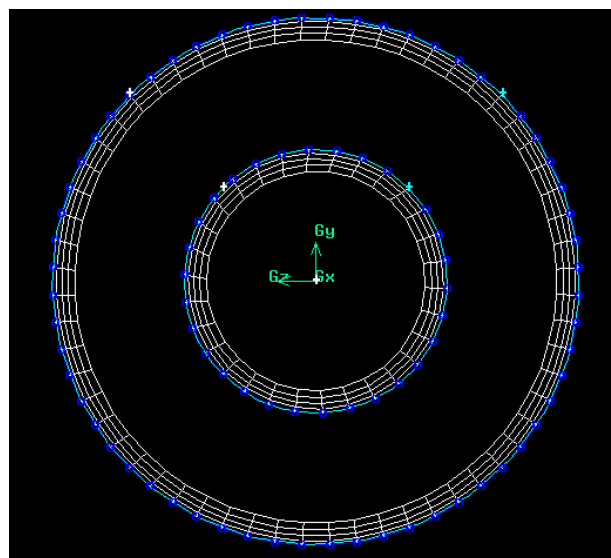


Figura 26. Especificación de la densidad de mallado en bordes

Capítulo 2 – Modelización con Gambit

Se ha tomado esta distribución de nodos de manera que, cuando se malle, quede un mallado lo más uniforme posible, buscando que no haya mucha diferencia entre el mallado del círculo interior y la corona circular exterior.

-Mallado de caras (Mesh faces)

Se ha optado por utilizar elementos cuadriláteros. El tipo de esquema de mallado es Pave, que crea una malla no estructurada.

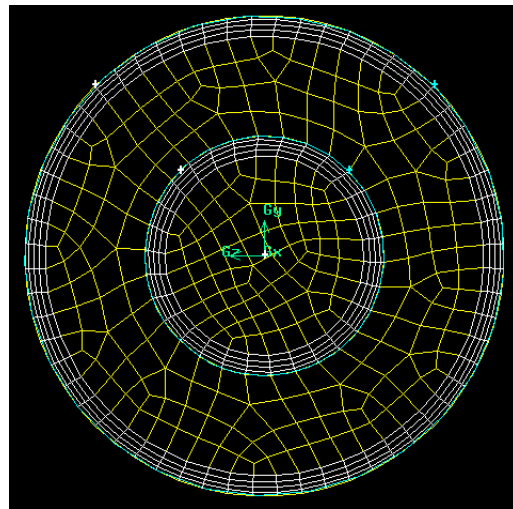
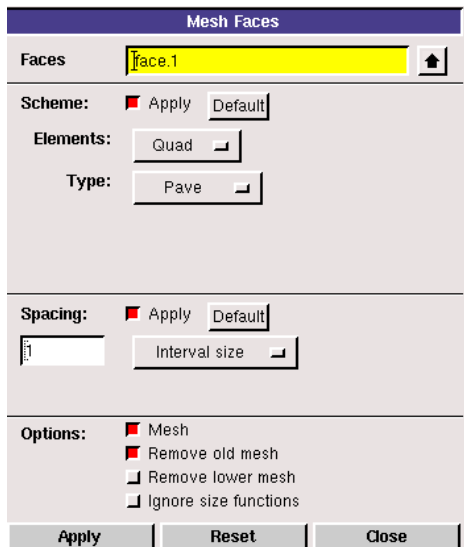


Figura 27. Mallado de cara

3 – Creamos puntos de referencia para extrusionar

Creamos puntos de referencia que nos valdrán para extrusionar la cara ya creada y definir la geometría definitiva del paso del reactor. Además introducimos dos puntos más para definir el mallado de capa límite en sentido paralelo al deflector. Unimos los puntos con aristas.

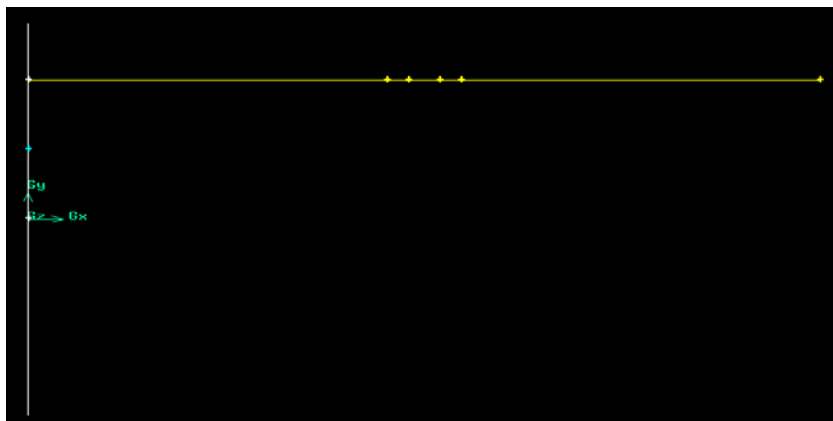


Figura 28. Creación de puntos para extrusionar

4 – Mallamos las líneas de referencia

Aquí la capa límite la haremos de manera diferente a como la hicimos anteriormente. Mallaremos la zona definida para capa límite (1 mm) con un Ratio = 1.2 y un Espaciado = 4, consiguiendo un mallado semejante al de antes.

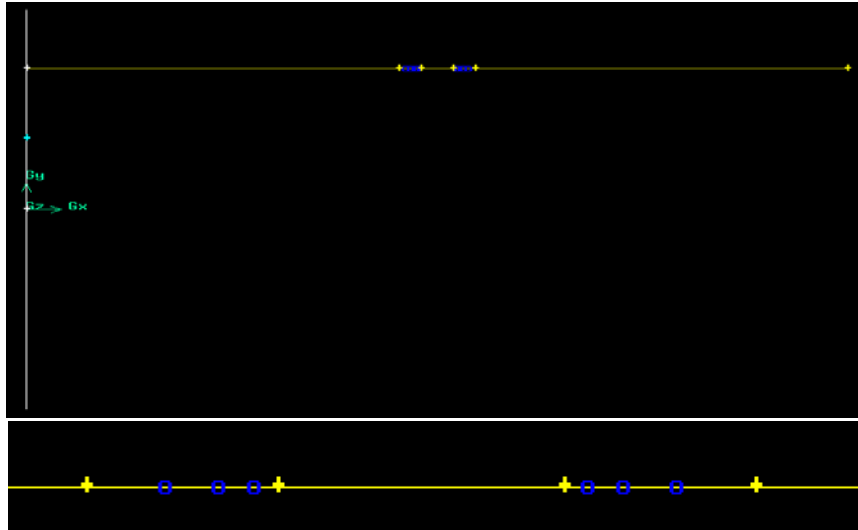


Figura 29. Mallado de capa limite en la pared del deflector

Para la parte central, la correspondiente al deflector (1.5 mm), se toma Ratio: 1, Espaciado: 4

Para las dos líneas de los extremos se toma Ratio: 1, Espaciado: 12

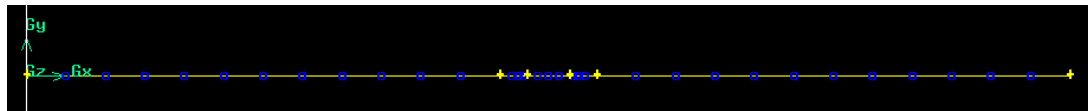


Figura 30. Mallado de líneas de referencia

5 – Extrusionamos

Geometry → Volume → Sweep faces (with mesh)

Quitamos la malla en opciones para aclararnos.

Vamos extrusionando hasta cada uno de los puntos auxiliares que creamos (5 veces en total).

(Nota: para seleccionar una superficie/volumen/aristas en concreto, cuando pinchamos sobre la entidad deseada, si no es la que queremos del conjunto, pinchar con el botón central del ratón hasta que aparezca la nuestra seleccionada.)

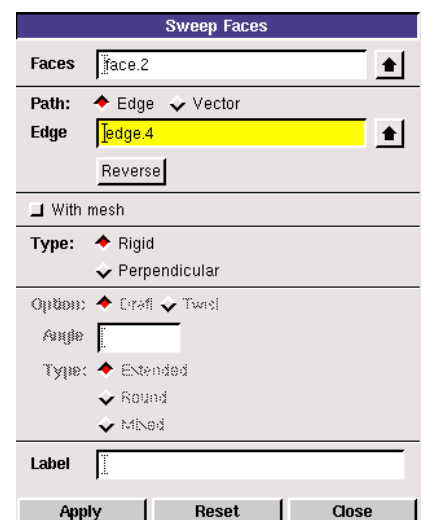


Figura 31. Ventana para configurar el extrusionado

Después eliminamos la parte exterior del deflector que “sobra” para obtener la geometría buscada.

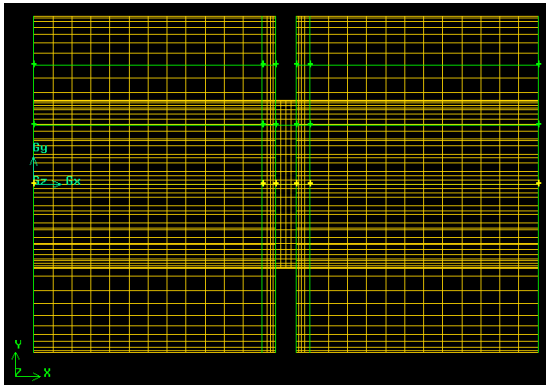


Figura 32. Malla computacional de un paso – MH1

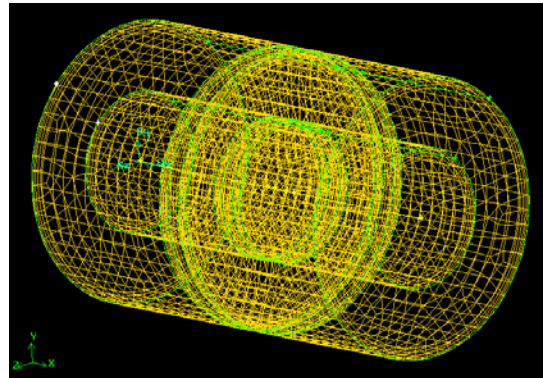


Figura 33. Malla computacional en perspectiva – MH1

6 – Condiciones de contorno

Zones → Spicify Boundary Types

Seleccionamos la entrada y la salida y le asignamos la condición de contorno correspondiente:

- Entrada: Velocity inlet
- Salida: Pressure outlet

Nota: si no asignamos nada a algún contorno externo Gambit los supone como “wall”, el volumen interno lo supone como fluido.

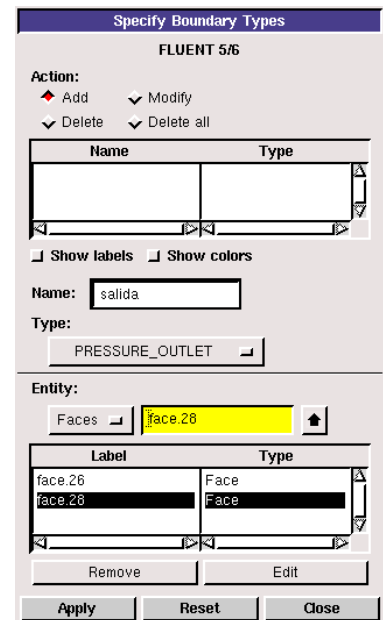


Figura 34. Ventana condición de contorno

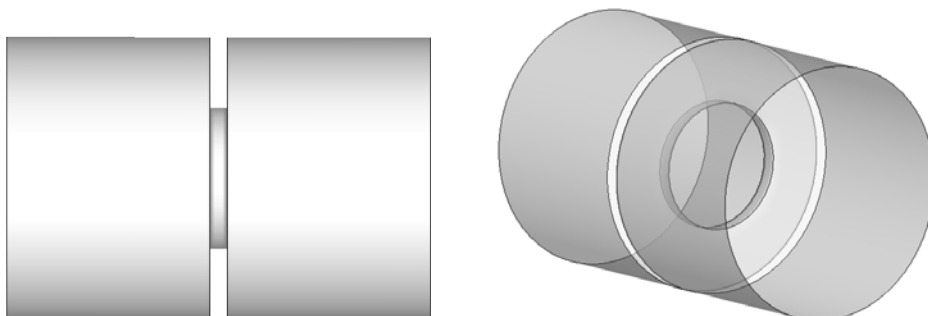


Figura 35. Paso de reactor MH1

7 – Paso con trazador

Por último tenemos que crear un paso del reactor que contenga un volumen de trazador. Éste paso también se podría realizar en Fluent pero se realizará aquí por la simplicidad del proceso y para hacer más fácil la identificación del trazador cuando se introduzcan los datos en Fluent.

El trazador lo situaremos en el orificio del deflector:

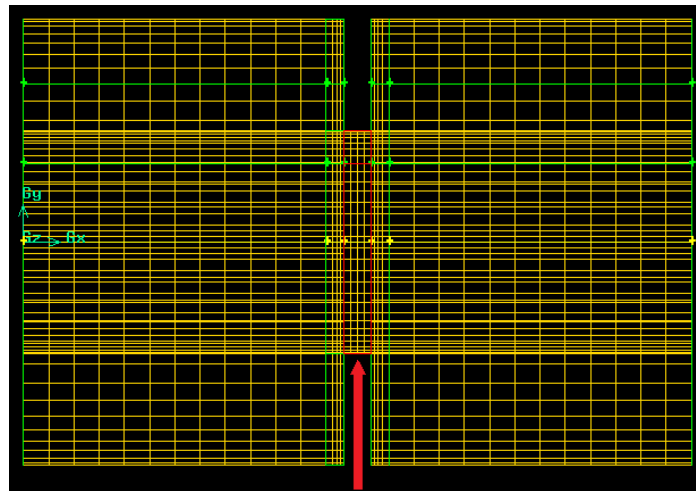


Figura 36. Mallado de paso donde se indica la localización del trazador

Aprovecharemos la misma malla creada anteriormente. Sólo tenemos que indicar donde se encontrará el trazador y designarlo como fluido (Specify Continuum Types). A este volumen lo llamaremos “Trazador”.

8 – Exportar malla

Finalmente se debe exportar el archivo como un archivo *mesh*, reconocible por el solver FLUENT.

File → Export

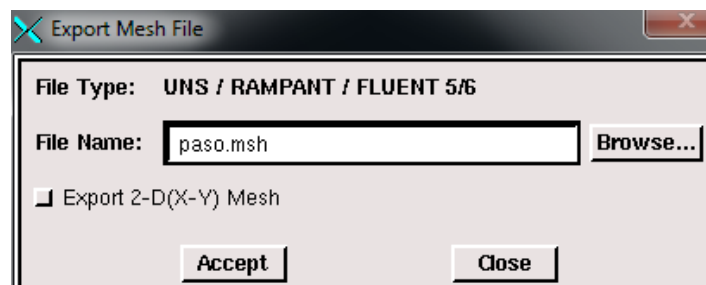


Figura 37. Ventana de exportación de malla

2.3.2. Deflector con 3 orificios

Para el caso del paso de reactor con 3 orificios, el procedimiento seguido es el mismo que para el de 1 orificio, teniendo en cuenta las condiciones geométricas indicadas anteriormente:

Número de Orificios	D (mm)	d (mm)	L=3xd (mm)
3	25	$\sqrt{\frac{4A}{3\pi}} = 7.2$	21.6

Tabla 5. Condiciones geométricas MH3

En este caso el deflector toma la forma:

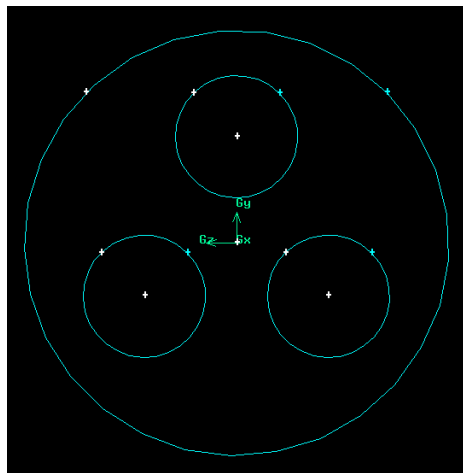


Figura 38. Superficies circulares para definir el reactor

-Mallado de capa límite (Mesh boundary-layer)

Las características del mallado de capa límite son, para el conducto:

- Tamaño de la primera hilera (a) : 0.2
- Factor de crecimiento (b/a=c/b): 1.2
- Número de hileras: 4
- Profundidad del mallado (D): 1.0736

Para los orificios:

- Tamaño de la primera hilera (a) : 0.15
- Factor de crecimiento (b/a=c/b): 1.2
- Número de hileras: 4
- Profundidad del mallado (D): 0.8052

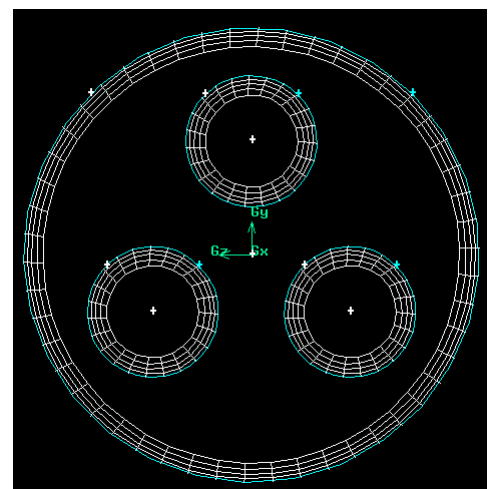


Figura 39. Mallado de capa límite en el reactor

Capítulo 2 – Modelización con Gambit

-Mallado de bordes.(Mesh Edges)

Se ha tomado una separación entre nodos equidistante (Ratio = 1). Para cada caso se tiene:

- Circunferencia exterior: 70 espaciados
- Circunferencia interior: 22 espaciados

-Mallado de caras (Mesh faces). Quad – Pave

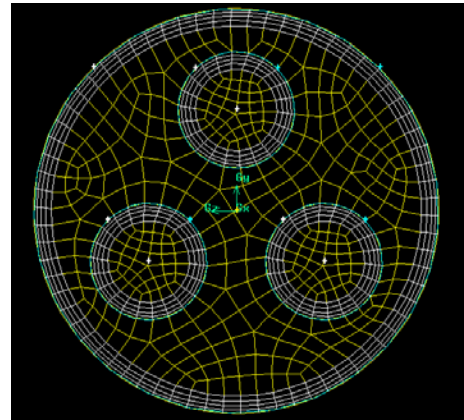


Figura 40. Mallado de cara MH3

4 – Mallamos las líneas de referencia para extrusión

Mallaremos la zona definida para capa límite (1 mm) con un Ratio = 1.2 y un Espaciado = 4, consiguiendo un mallado semejante al caso anterior.

Para la parte central, la correspondiente al deflector (1.5 mm), se toma Ratio: 1, Espaciado: 4

Para las dos líneas de los extremos se toma Ratio: 1, Espaciado: 8

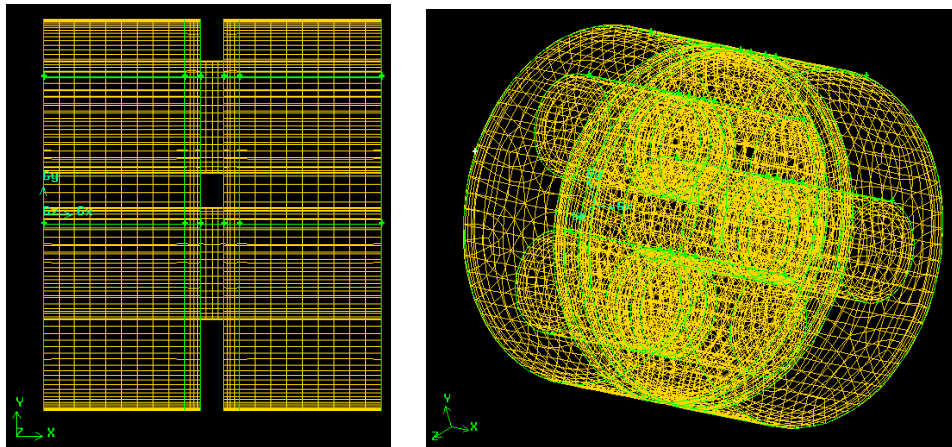


Figura 41. Malla computacional de un paso MH3

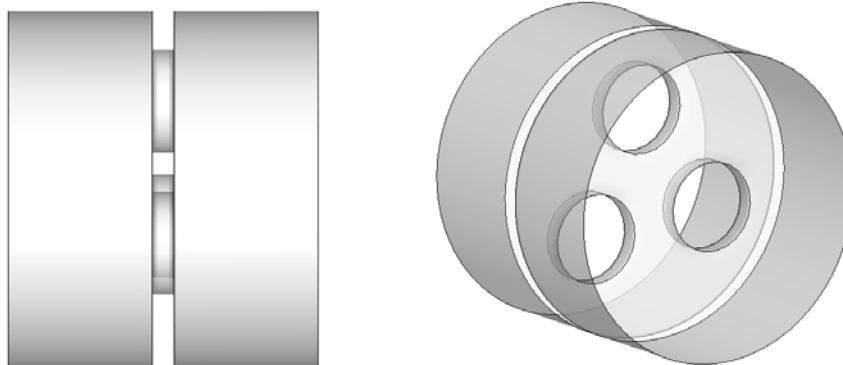


Figura 42. Paso de reactor MH3

2.3.3. Deflector con 7 orificios

Para el caso del paso de reactor con 7 orificios, el procedimiento seguido es el mismo que para el de 1 orificio, teniendo en cuenta las condiciones geométricas indicadas anteriormente:

Número de Orificios	D (mm)	d (mm)	L=3xd (mm)
7	25	$\sqrt{\frac{4A}{3\pi}} = 4.7$	14.1

Tabla 6. Condiciones geométricas MH7

En este caso el deflector toma la forma:

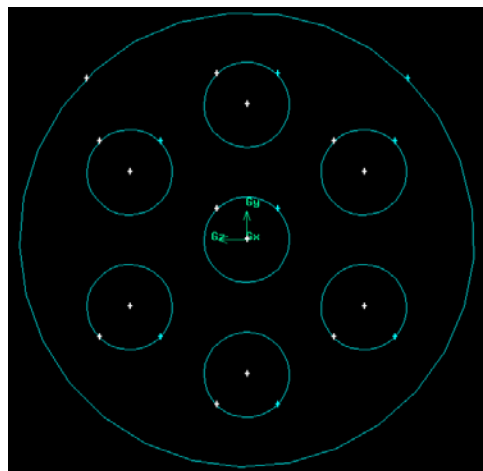


Figura 43. Superficies circulares para definir el reactor MH7

-Mallado de capa límite (Mesh boundary-layer)

Las características del mallado de capa límite son, para el conducto:

- Tamaño de la primera hilera (a) : 0.2
- Factor de crecimiento (b/a=c/b): 1.2
- Número de hileras: 4
- Profundidad del mallado (D): 1.0736

Para los orificios:

- Tamaño de la primera hilera (a) : 0.15
- Factor de crecimiento (b/a=c/b): 1.2
- Número de hileras: 4
- Profundidad del mallado (D): 0.8052

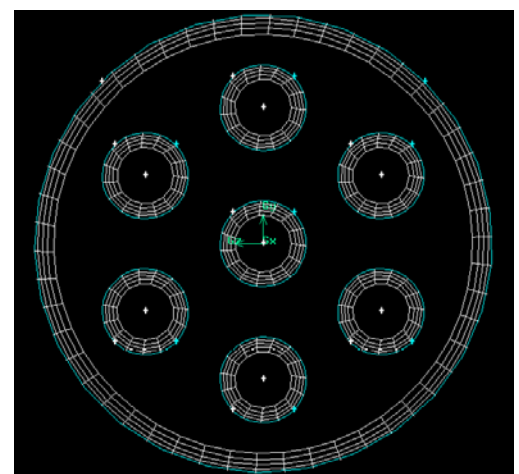


Figura 44. Mallado de capa límite en el reactor MH7

-Mallado de bordes.(Mesh Edges)

Se ha tomado una separación entre nodos equidistante (Ratio = 1). Para cada caso se tiene:

- Circunferencia exterior: 74 espaciados
- Circunferencias interiores: 14 espaciados

-Mallado de caras (Mesh faces). Quad – Pave

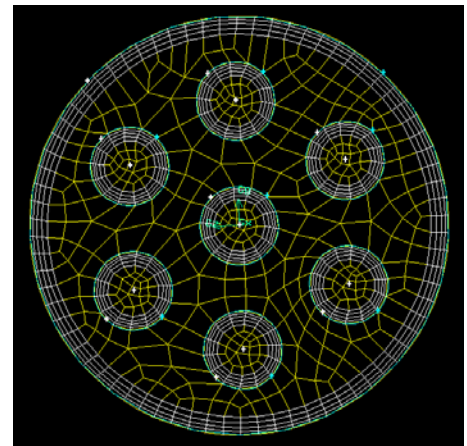


Figura 45. Mallado de bordes MH7

4 – Mallamos las líneas de referencia para extrusionar

Aquí la capa límite la haremos de manera diferente a como la hicimos anteriormente. Mallaremos la zona definida para capa límite (1 mm) con un Ratio = 1.2 y un Espaciado = 4, consiguiendo un mallado semejante al caso anterior.

Para la parte central, la correspondiente al deflector (1.5 mm), se toma Ratio: 1, Espaciado: 4

Para las dos líneas de los extremos se toma Ratio: 1, Espaciado: 6

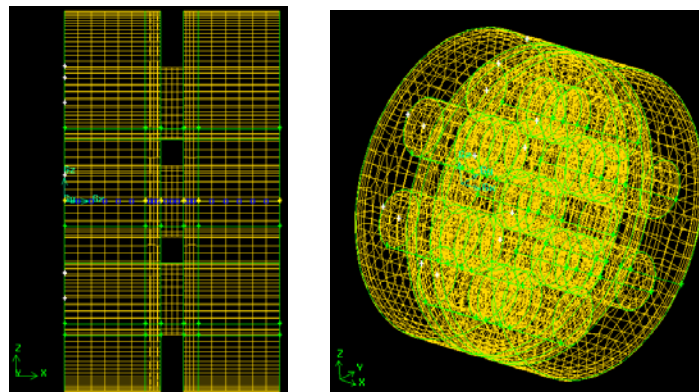


Figura 46. Malla computacional de un paso MH7

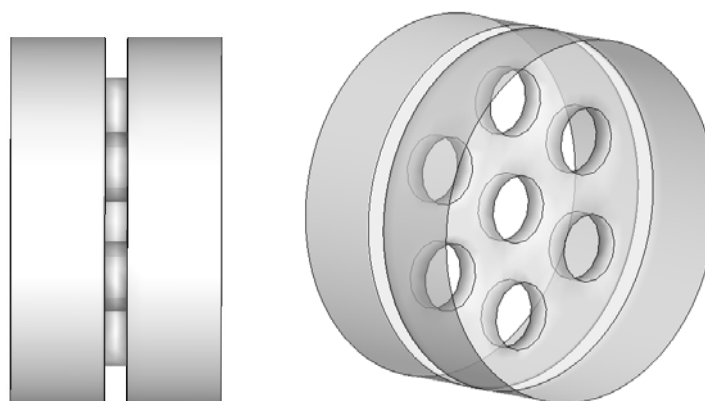


Figura 47. Paso de reactor MH7

CAPITULO 3 – PROCESADO EN FLUENT

3.1. Importación a Fluent y creación del reactor

A continuación explicaremos como se importa la malla a Fluent y como diseñaremos el reactor completo a partir de la malla creada en Gambit.

Una vez dentro de Fluent, para importar la malla hacemos:

File > Import > GAMBIT

Y seleccionamos el archivo (.msh) de nuestra malla.

Como ya hemos dicho nuestro reactor estará formado por varios pasos, por lo que tendremos que ir añadiendo mallas hasta conseguir el tamaño buscado.

Para ello hay que ir desplazando las mallas ya cargadas en Fluent, pues éste carga las nuevas mallas con las mismas coordenadas que fueron creadas en Gambit, es decir, para nuestro caso, creadas con origen en el punto (0, 0, 0).

Para ello desplazaremos la malla de modo que al cargar la nueva tengan una cara coincidente.

Grid > Translate

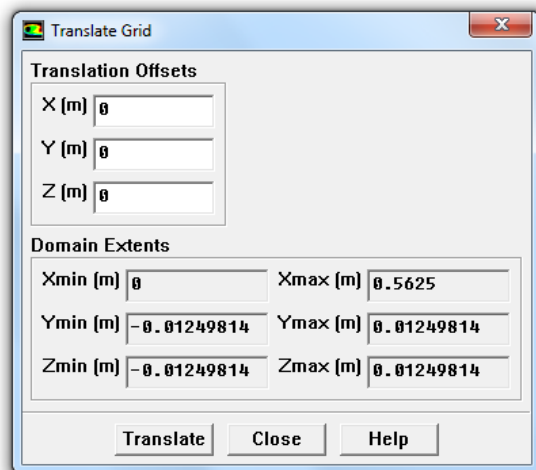


Figura 48. Ventana con la que se translada la malla

Capítulo 3 – Procesado en Fluent

A continuación tendremos que ir uniendo las diferentes caras coincidentes de las mallas que hemos ido cargando para que Fluent considere que tenemos un único caso sin discontinuidades. Para ello utilizamos la herramienta Fuse, donde indicamos las dos secciones, coincidentes que queremos unir.

Grid > Fuse

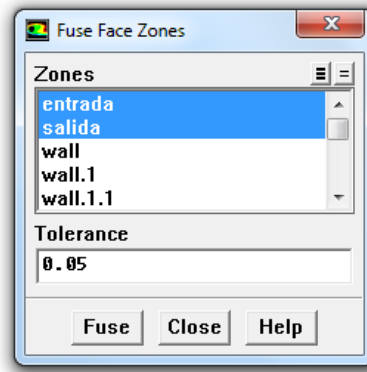


Figura 49. Unión de dos caras coincidentes

Por defecto, Fluent carga la malla en metros. Tenemos que indicar la unidad en la que fue creada la malla, para tener la escala adecuada. En nuestro caso milímetros.

Grid > Scale

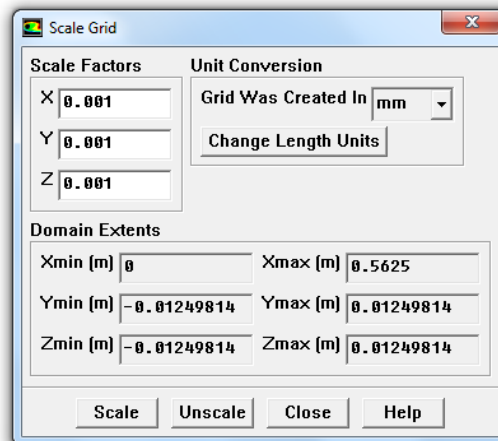


Figura 50. Aplicación de la escala adecuada

Por último guardamos el caso que hemos creado.

File > Write > Case

Se guardará un archivo con extensión .cas

3.2. Perfil oscilatorio

Como ya hemos mencionado, necesitamos un flujo oscilatorio para nuestras simulaciones. Para la generación de este flujo partimos del concepto de “perfil UDF”.

Un perfil UDF (Used Defined Function) se trata de un perfil definido por el usuario que varía como una función de coordenadas espaciales o del tiempo. Algunas de las variables que se pueden definir son: velocidad, temperatura, presión, etc. En el ANEXO 1 podemos encontrar un ejemplo.

En nuestro caso podemos utilizar un perfil UDF para definir un perfil plano de velocidades que varía en función del tiempo.

Una vez tenemos definido el código del perfil UDF, lo podemos cargar en Fluent:

Define → User-Defined → Functions → Interpreted

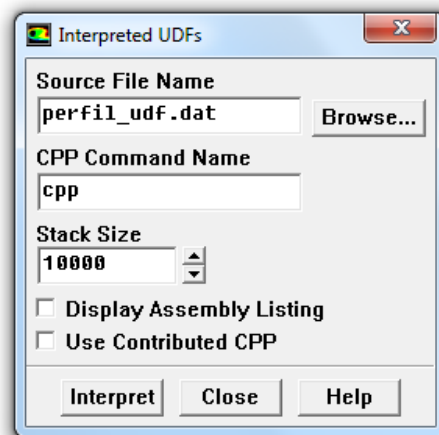


Figura 51. Panel para cargar el perfil UDF

En el panel seleccionamos el archivo UDF que queremos interpretar.

Especificamos el preprocesador que será usado en el campo CPP Command Name. Mantendremos “cpp”, que es el que viene predefinido por Fluent.

En el tamaño de la pila (Stack Size), mantenemos el valor predeterminado de 10000, ya que el número de variables es sólo de una y no creará problemas.

Por último haciendo click en Interpret, cargamos el perfil UDF.

Para seleccionar el perfil UDF como condición de contorno de velocidad en la sección de entrada, abrimos el panel Velocity Inlet.

Define → Boundary Conditions

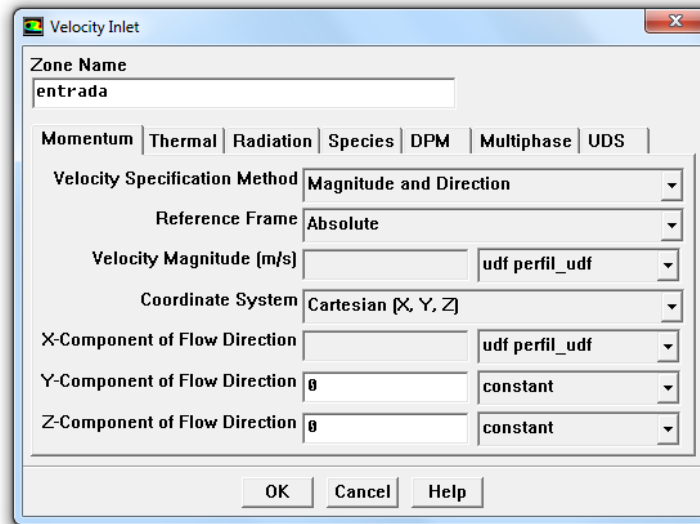


Figura 52. Selección del perfil UDF como condición de contorno

Si realizamos una simulación de flujo oscilatorio con este perfil, encontramos una zona de adaptación entre el perfil plano de velocidades producido por el perfil UDF y el verdadero perfil de velocidades oscilatorio que aparece en el interior del reactor.

En la siguiente imagen se observa este fenómeno:

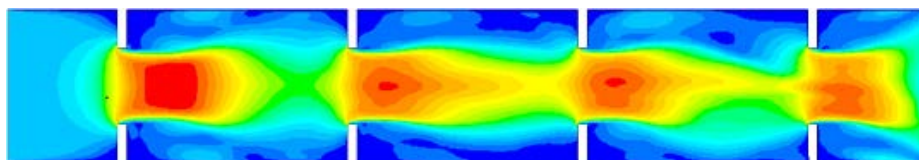


Figura 53. Reactor de cuatro pasos con flujo oscilatorio producido con UDF

Esa zona de adaptación constituye un gasto computacional considerable, que produce, en esa área, unos resultados que no se adaptan a la realidad.

Para intentar conseguir un perfil de velocidades que se acerque más a la realidad se adopta una opción que consiste en simular un reactor corto, de cuatro pasos, en el que se definirá un perfil UDF como condición de contorno a la entrada. Como en el caso anterior, tenemos una zona de adaptación a la entrada y a la salida, pero ésta no será la zona que nos interesa. Si tomamos el perfil de velocidades que se produce en la sección central del reactor, éste si se aproximará al perfil de velocidades que tendremos en las mismas secciones (unión de cada paso) a lo largo de todo el reactor con flujo oscilatorio.

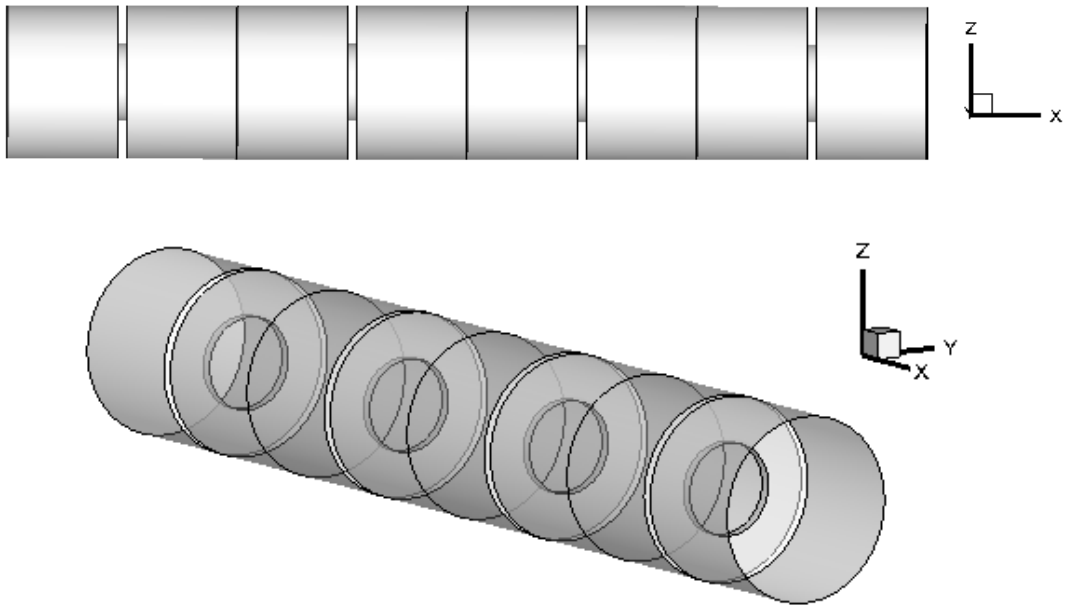


Figura 54. Reactor de 4 pasos utilizado para la obtención del perfil oscilatorio

En la siguiente imagen se muestra la sección que se irá guardando a lo largo de la simulación para obtener el perfil oscilatorio. Se guardará un perfil de velocidades por cada paso de tiempo.

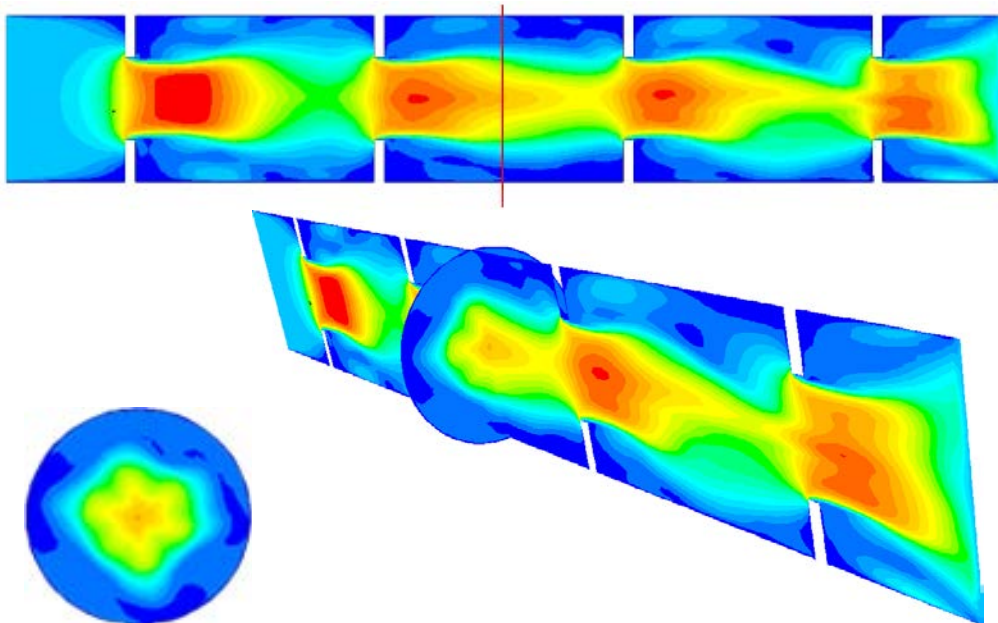


Figura 55. Reactor donde se muestra la sección de la que extraemos el perfil de velocidades oscilatorio

A la hora de realizar la simulación, con el fin de evitar el transitorio inicial, se simulará el flujo oscilatorio guardando los perfiles en el tercer ciclo de oscilación, como se observa en la siguiente imagen.

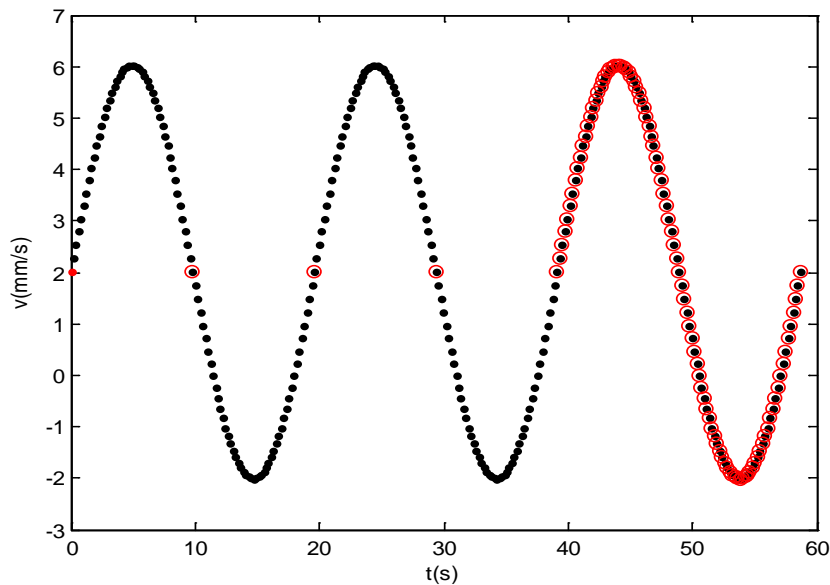


Gráfico 3. Puntos donde se guardan los perfiles en el tercer ciclo

3.3. Procesado en Fluent

3.2.1. Archivos Journal

Para realizar las sucesivas simulaciones se ha optado por la creación de varios archivos “journal” (.jou).

Un archivo journal es una serie de comandos almacenados en un archivo de texto. El archivo puede ser escrito en un editor de texto o generado por Fluent como una transcripción de los comando dados a Fluent durante la sesión. Un archivo journal generado por Fluent incluirá todas las operaciones realizadas en la sesión. Esto es bastante útil si se tiene una serie de tareas que se necesitan ejecutar, pudiendo usarlo como atajo.

Para grabar un archivo journal utilizando Fluent:

File → Write → Start Journal

Se realizan todas las tareas necesarias y después se parar la grabación con:

File → Write → Stop Journal

En el presente proyecto se ha utilizado Matlab para generar los diferentes archivos de texto de los journal. Dichos códigos se pueden observar en los ANEXOS 2 y 3.

Los códigos de matlab están creados de tal modo que posteriormente no haya que configurar nada en Fluent para resolver el caso, es decir, todas la configuraciones de Fluent vienen reflejadas en el archivo, por tanto cargando la malla del reactor y ejecutando dicho archivo sería suficiente para la resolución de un caso. Únicamente se tiene que indicar en el archivo de Matlab las condiciones del flujo (Re , Re_o y St).

En los siguientes apartados se resume el tratamiento que se le ha dado a todos los casos, partiendo desde la carga del reactor, pasando por los ajustes de materiales y condiciones de contorno, hasta llegar al a solución deseada.

3.2.2. Materiales y transporte de especies

En el presente proyecto se trabaja únicamente con un material fluido, agua. Sin embargo para el estudio del transporte de especies en Fluent se necesita configurar 3 materiales.

- Agua
- Agua trazador
- Trazador

El material fluido del “trazador” se define a partir de dos materiales, en nuestro caso idénticos, “agua” y “agua trazador”.

Para configurarlos:

Define → Materials

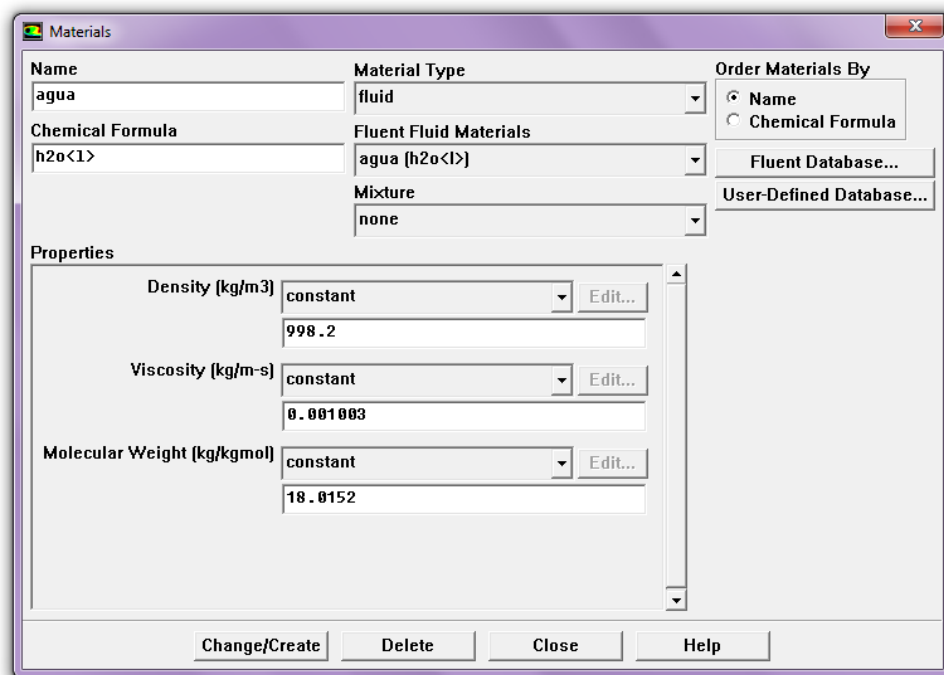


Figura 56. Configuración del material agua

Para crear el material “trazador”, antes hay que activar el modelo de transporte de especies:

Define → Models → Species → Transport & Reaction

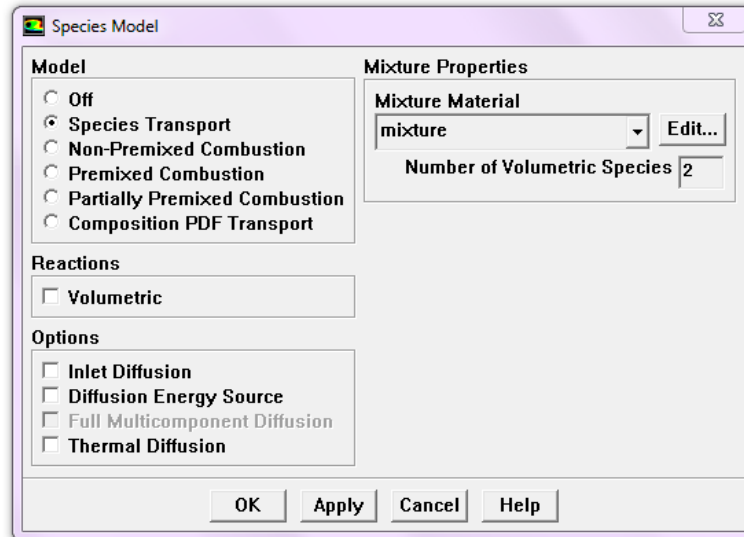


Figura 57. Activación del modelo de transporte de especies

Después se puede configurar el material “trazador”, que es del tipo “mixture”:

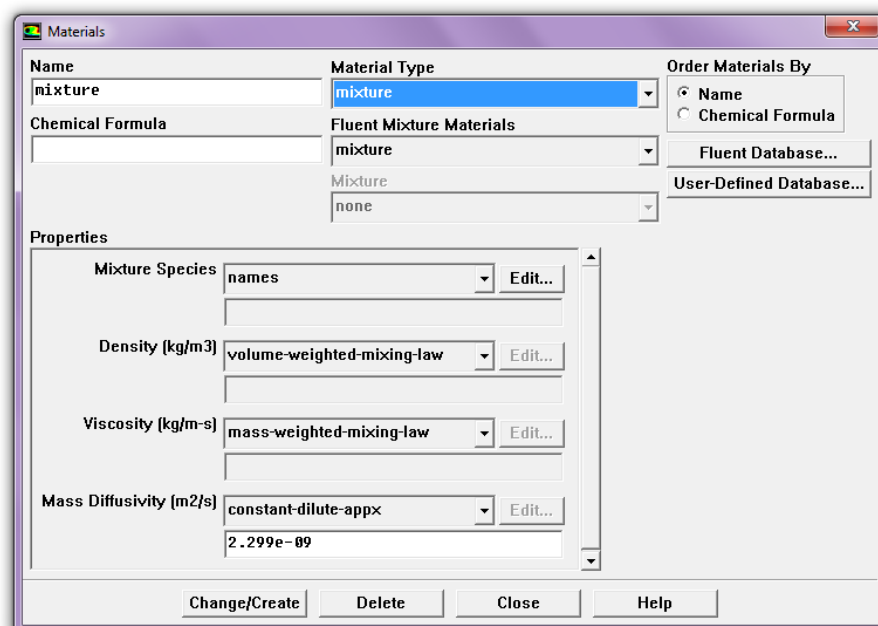


Figura 58. Configuración del material trazador

3.2.3. Modelos

En un reactor de flujo oscilatorio con deflectores de nuestro tipo, teóricamente, debido a la vorticidad producida por la acción del flujo oscilatorio sobre los deflectores se tendrá un flujo turbulento.

Sin embargo, debido a las limitaciones de potencia de cálculo y cuestiones de convergencia, finalmente se ha decidido resolver los casos utilizando el **modelo Laminar**. Además, los valores de Reynolds neto y Reynolds oscilatorio utilizados no son muy altos (50 y 100 respectivamente) por lo que no existirá un gran diferencia en los resultados.

En Fluent, el modelo Laminar es el que viene activado por defecto. De todos modos, si queremos asegurarnos de que está correctamente seleccionado podemos hacerlo en el menú:

Define → Models → Viscous → Laminar

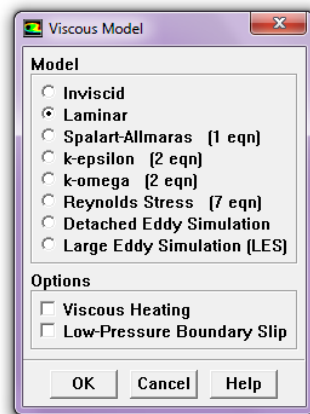


Figura 59. Selección de modelo laminar

3.2.4. Residuos

Los residuos son una herramienta importante 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 problema 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 nunca se conseguirá que se hagan cero.

Para el proyecto se ha considerado unos residuos del orden de 10^{-4} , con una precisión suficiente teniendo en cuenta la potencia computacional de cálculo de la que disponemos.

Para configurarlos:

Solve → Monitors → Residuals

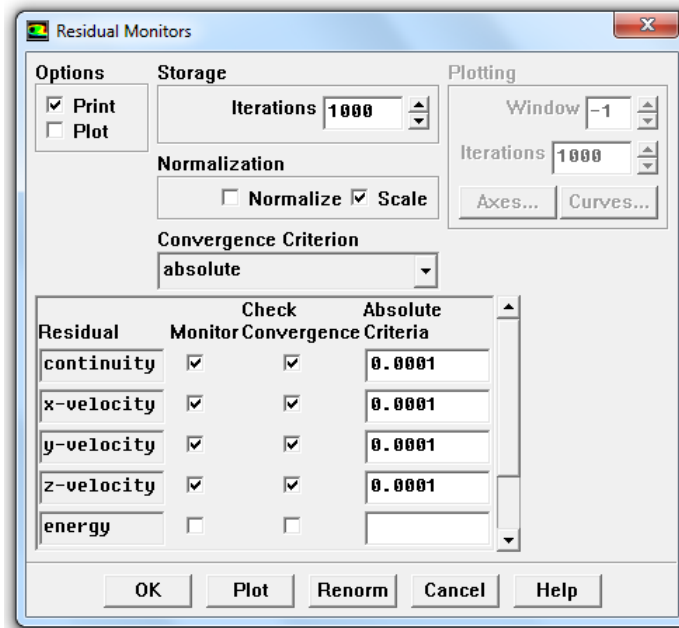


Figura 60. Configuración de los residuos

3.2.5. Evaluación de magnitudes fluidas

Después de cada iteración o paso temporal, se pueden calcular y monitorizar los valores de las magnitudes fluidas sobre un **plano** del dominio computacional, de modo que se pueda observar la evolución de éstas durante el proceso iterativo.

Para obtener valores de dichas magnitudes se pueden emplear distintas técnicas de cálculo:

- **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 área de las distintas celdas que constituyen la superficie.
- **Flow Rate**: calcula el flujo de la magnitud a través de la superficie.
- **Mass Flow Rate**: calcula el flujo másico de la magnitud a través de la superficie.
- **Mass-Weighted Average**: calcula la media de la magnitud a través de la superficie.

- **Sum:** calcula la suma de los valores de una magnitud sobre una superficie, ponderándola con el gasto másico que atraviesa cada una de las celdas que componen la 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.

En nuestro caso, monitorizaremos todas las secciones de unión entre cada paso además de la de salida y entrada, para posteriormente seleccionar cuales son más interesantes para nuestro estudio. Con ello se pretende estudiar la concentración de trazador que pasa a través de ellas en función del tiempo.

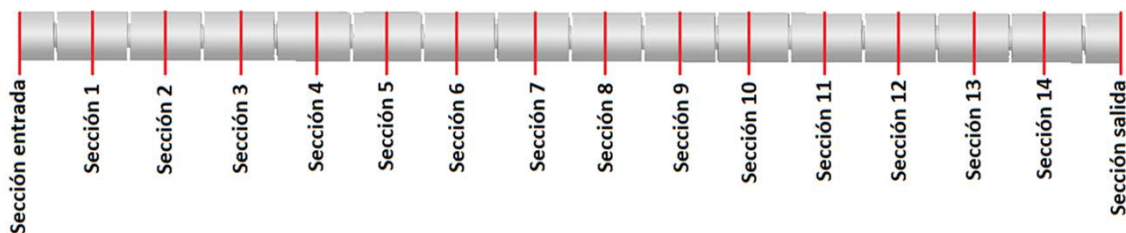


Figura 61. Disposición de las secciones de monitorización a lo largo del reactor

Para ello, configuramos en Fluent:

Solve → Monitors → Surface

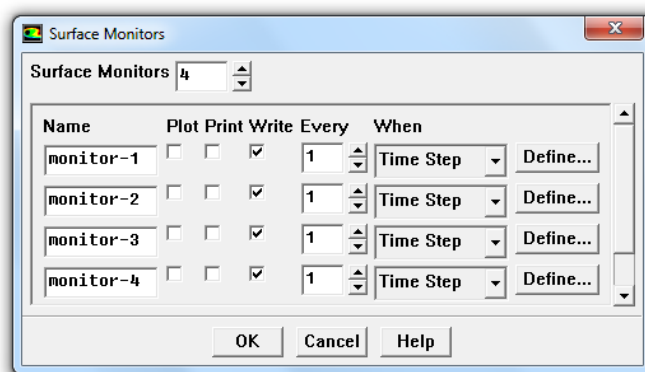


Figura 62. Definición de superficies a monitorizar

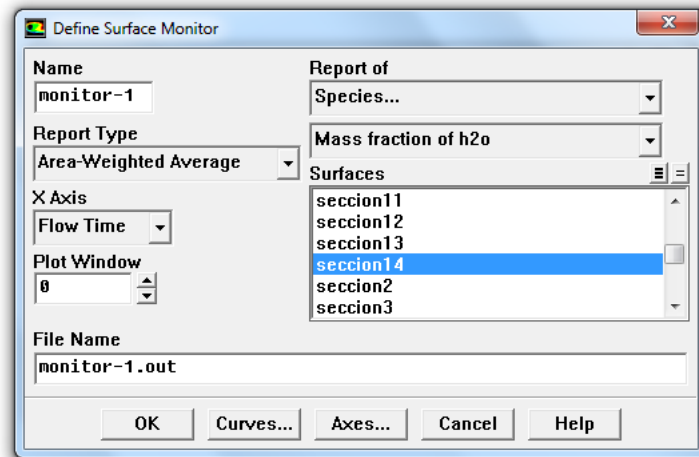


Figura 63. Configuración de las características a monitorizar

La variable que se estudiará es la fracción másica de trazador.

$$\phi = \frac{m_{traz}}{m_{tot}} \quad (34)$$

Donde m_{traz} es la masa del trazador (kg) y m_{tot} la masa total en el reactor (kg).

Se llevará a cabo dos monitorizaciones en cada paso de tiempo, guardándose todo en dos archivos que posteriormente se estudiarán.

Seleccionamos “**Flow Time**” en el eje X para conocer la concentración del trazador a lo largo del tiempo de simulación de cada caso.

Un tipo de reporte será “**Area-Weighted Average**”. Este cálculo se lleva a cabo dividiendo el sumatorio del producto del campo seleccionado y el área de cada celda por el área total de la superficie:

$$\frac{1}{A} \int \phi dA = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^n \phi_i |A_i| \quad (35)$$

Con este reporte tendremos la fracción másica que hay sobre ese plano en cada momento.

Otro tipo de reporte será “**Flow Rate**”. Este cálculo se lleva a cabo con el sumatorio del producto de la densidad y el campo seleccionado con el producto escalar del vector superficie de la sección y el vector velocidad en la celda:

$$\int \phi \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = \sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \vec{v}_i \cdot d\vec{A}_i \quad (36)$$

Con la ayuda de este reporte seremos capaces de conocer el flujo de trazador a través de la sección estudiada.

3.2.6. Paso de tiempo

La configuración del paso de tiempo se realiza mediante el siguiente menú:

Solve > Iterate

En este apartado cabe destacar como es interesante estudiar y resolver los instantes de tiempo en los que el movimiento oscilatorio tiene los ángulos 0, 45, 90, 135, 180, 225, 270, 315 y 360 grados. Por ser los puntos con flujo neto mínimo, máximo e intermedio entre estos dos últimos.

Para ello tenemos que determinar en cuanto puntos dividimos cada ciclo de tal modo que todos los casos de interés queden entre estos puntos.

Teníamos que la ecuación de la velocidad era:

$$u(t) = u_{net} + 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t)$$

Por tanto, la velocidad máxima e intermedia tienen la forma:

$$u_{max} = u_{net} + 2\pi f x_0 \quad (37)$$

$$u_{med} = \frac{u_{max}}{2} = \frac{Vn}{2} + \pi f x_0 \quad (38)$$

Despejaremos el tiempo para el cual se da la velocidad intermedia:

$$u_{med} = \frac{Vn}{2} + \pi f x_0 = Vn + 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t) \rightarrow t$$

Donde, tras despreciar Vn por ser $Vn \ll 2\pi f x_0$, llegamos a:

$$t = \frac{1}{12f} = \frac{T}{12} \quad (39)$$

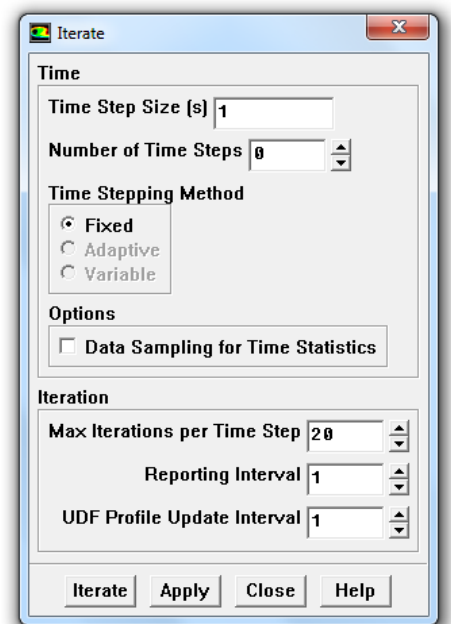


Figura 64. Ventana donde se indica el paso de tiempo y el número de pasos de tiempo

Por tanto, tenemos que dividir cada ciclo en un múltiplo de 12. En nuestro caso hemos tomado **96 pasos de tiempo**. Para una solución más exacta podríamos haber tomado más pasos de tiempo, pero debido a las limitaciones de potencia de cálculo se ha decidido no hacerlo así.

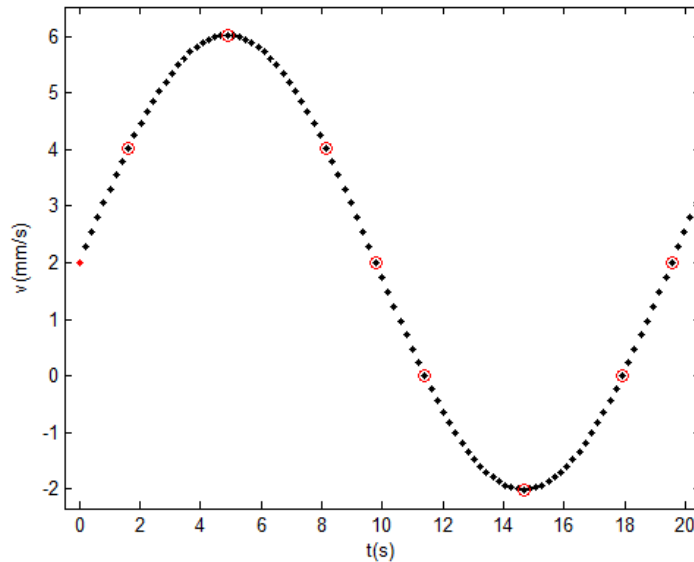


Gráfico 4. Discretización de un ciclo

De este modo tendremos, en el peor de los casos, es decir, para frecuencia mínima ($f = 0.0256$ Hz en el caso de placa con 1 orificio) tenemos un paso de tiempo de 0.407 s, siendo el periodo de oscilación en este caso de 39.06 s.

En este punto, cabe destacar como muchos autores hacen uso del número de Courant para calcular el paso de tiempo necesario en sus simulaciones.

El número de Courant unidimensional se define como:

$$C_t = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \quad (40)$$

Donde:

u : velocidad (m/s)

Δt : paso de tiempo (s)

Δx : paso espacial (m)

Para el caso n-dimensional tenemos:

$$C_t = \Delta t \sum_{i=1}^n \frac{u_{x_i}}{\Delta x_i} \quad (41)$$

El intervalo espacial no tiene por qué ser el mismo para cada variable espacial.

Una explicación física del número de Courant, para una simulación de CFD, es que éste nos informa sobre cómo se mueve el fluido a través de las celdas computacionales. Si el número de Courant es ≤ 1 , las partículas fluidas se mueven de una celda a otra contigua en un paso de tiempo (como mucho). Si por el contrario es > 1 , una partícula fluida se mueve a través de dos o más celdas en cada paso de tiempo, pudiendo afectar negativamente a la convergencia.

Si aplicáramos el criterio del número de Courant a nuestro caso tendríamos que para una celda localizada en el orificio del reactor (donde encontramos la mayor velocidad y suponemos que sólo existe componente axial, aplicando de este modo la ecuación unidimensional del número de Courant):

$$C_t = \frac{u\Delta t}{\Delta x} = \frac{0.0241 \cdot \Delta t}{0.000375} = 1$$

Despejando:

$$\Delta t = 0.0156 \text{ s}$$

Que se conseguiría para el siguiente número de pasos de tiempo por ciclo (p):

$$p = \frac{1}{f \Delta t} = \frac{1}{0.0256 \cdot 0.0156} \approx 2504 \text{ pasos de tiempo por ciclo}$$

Se plantean dos razones por la cuales no se ha tenido en cuenta el número de Courant para el cálculo del paso de tiempo:

- Fluent utiliza un solver implícito, por lo que hasta para grandes números de Courant puede no tener problemas con la convergencia. Al utilizar pasos de tiempo más grandes solo se necesitarán más iteraciones por paso de tiempo para llegar a la solución deseada. Esto se ha corroborado realizando simulaciones con diferente número de pasos de tiempo por ciclo, obteniendo en todos los casos prácticamente el mismo resultado sin tener problemas de convergencia en ningún momento.
- Se observa que la cantidad del número de pasos de tiempo por ciclo necesarios, siguiendo el criterio de Courant, es muy grande. Esto conlleva un coste computacional muy grande. Debido a las limitaciones de potencia de cálculo que se han tenido, se ha optado por un paso de tiempo mayor.

3.2.7. Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno son condiciones aplicadas en los límites o fronteras 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.

En nuestro caso sólo se aplican dos condiciones de contorno, a la entrada del reactor “Velocity Inlet” y a la salida “Pressure Outlet”. Para ello, en Fluent:

Define → Boundary conditions

Seleccionando en cada caso la condición de contorno deseada. En la sección de entrada se irá insertando en cada paso de tiempo los perfiles de velocidad extraídos del reactor de 4 celdas (ver apartado...), lo que nos dará el flujo oscilatorio buscado.

Para ello, primero se tiene que cargar el perfil:

Define → Profiles

Donde se selecciona el perfil a cargar y se muestran las variables que éste contiene.

Una vez cargado el perfil, se pasa a definirlo como condición de contorno en la entrada y salida, del mismo modo que definía el perfil UDF en un apartado anterior.

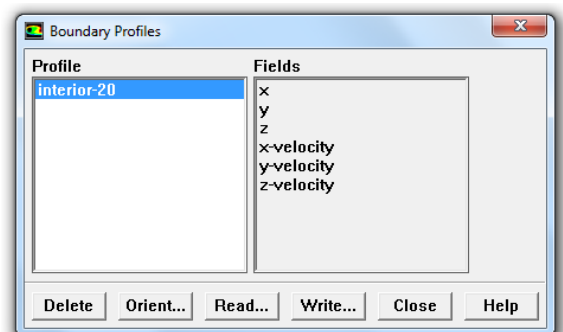


Figura 65. Ventana para cargar un perfil

3.2.8. Discretización

El método numérico que utiliza FLUENT para resolver el modelo matemático de ecuaciones es el llamado método de los volúmenes finitos. Este método consiste en integrar las ecuaciones que gobiernan el sistema en cada volumen de control, obteniendo ecuaciones discretas.

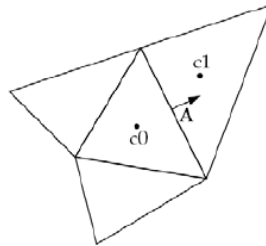


Figura 66. Discretización de un volumen de control

Por defecto FLUENT guarda los valores discretos ϕ de las variables escalares en los centros de las celdas (c_0 y c_1 de la figura 9). Sin embargo, los valores de las caras, ϕ_f (flujo de ϕ a través de la cara f), que se necesiten se obtienen interpolando a partir de los valores del centro de la celda (en el ejemplo de la figura 9 el valor de la cara A se obtendría de la interpolación de los valores de c_0 y c_1). 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 utilizados en este proyecto

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 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. En el presente proyecto se utilizan diferentes discretizaciones a lo largo de la simulación. Se comienza, en los ciclos previos a la inyección del trazador, con esquemas de primer orden por ayudar a la convergencia para finalmente pasar a esquemas de segundo orden con una exactitud mayor. En concreto se utilizan los siguientes esquemas:

Etapla inicial: Estacionario y Primer ciclo con Solver no estacionario con formulación temporal de primer orden.

Presión - Standard

Cantidad de movimiento – First Order Upwind

Etapla final: Resto de la simulación, Solver no estacionario con formulación temporal de segundo orden.

Presión – First Order Upwind

Cantidad de movimiento – Second Order Upwind

Especies – Second Order Upwind

3.2.9. 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.

$$\phi = \phi_{old} + \alpha \Delta \phi \quad (42)$$

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.

En este proyecto se ha utilizado diferentes valores de los factores de subrelajación a lo largo avanzaba la simulación. Al principio se utilizan valores más pequeños, para conseguir una convergencia más suave. Posteriormente se utilizan valores mayores, que favorecen la rapidez del cálculo.

Los valores utilizados son:

Etapla inicial: Estacionario.

Presión – 0.3

Densidad – 0.8

Fuerzas sobre el cuerpo – 0.8

Cantidad de movimiento – 0.4

Etapla intermedia: Primer ciclo, Solver no estacionario con formulación temporal de primer orden.

Presión - 0.3

Densidad - 1

Especies – 0.6

Fuerzas sobre el cuerpo – 1

Cantidad de movimiento – 0.4

Etapa final: Resto de la simulación, Solver no estacionario con formulación temporal de segundo orden.

- Presión - 0.3
- Densidad - 1
- Especies – 0.8
- Fuerzas sobre el cuerpo – 1
- Cantidad de movimiento – 0.8

3.2.10. Plano axial

Para poder visualizar lo que ocurre en el reactor con el campo de velocidades y la dispersión del trazador se ha creado un plano que corta en sentido axial a todo el reactor.

En este plano se guardarán las variables necesarias para la visualización de los fenómenos anteriormente mencionados.

Surface → Plane

Seleccionamos la opción de creación mediante punto y normal. En la imagen se observan los parámetros introducidos.

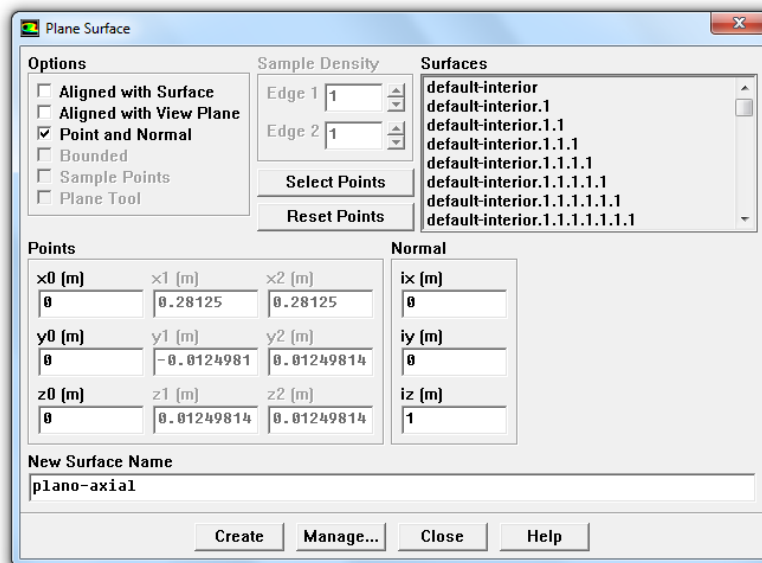


Figura 67. Creación de plano para visualizar los fenómenos

A continuación se muestra un ejemplo de una variable de un caso sobre el plano creado:

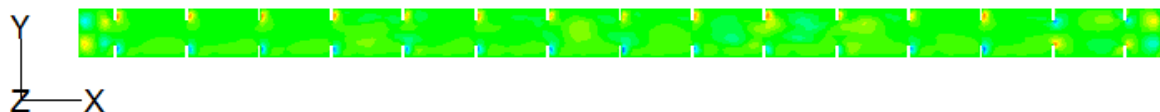


Figura 68. Velocidad en la dirección Y para un instante de tiempo sobre el plano transversal

CAPÍTULO 4 – INYECCIÓN DEL TRAZADOR Y ÚLTIMOS AJUSTES

4.1. Introducción

El presente capítulo se ha desarrollado con el ánimo de establecer un método para calcular la distancia de seguridad mínima para inyectar el trazador, debido a que la bibliografía no se ha encontrado unas claras pautas para su cálculo.

Además, una vez calculada esta distancia se realizan los últimos ajustes del modelo para resolver finalmente las simulaciones.

4.2. Distancia de seguridad para inyectar el trazador

Para realizar nuestras simulaciones, como ya se ha indicado anteriormente, se tiene que inyectar un trazador. En el presente proyecto se ha tomado el criterio de inyectar el trazador en el volumen de fluido de los orificios de los deflectores.

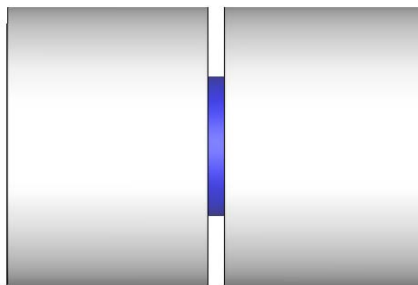


Figura 69. Zona de inyección del trazador (en azul) en un paso

Pero, ¿en qué paso inyectamos este trazador?

Para obtener la mejor posición, de entre todos los pasos, en la que inyectar en el trazador partimos de la premisa de que tenemos que dejar una **distancia de seguridad** para que el trazador no se escape por la entrada.

La razón es simple. La cantidad del trazador que atraviesa una condición de contorno (en nuestro caso, entrada o salida) se pierde y no se vuelve a contabilizar. Es decir, si a causa del movimiento oscilatorio, una porción del trazador atraviesa la sección de entrada, o de salida, aunque debiera volver a entrar ya no lo hará.

Además, se busca que esa distancia de seguridad sea la mínima posible, ya que en caso contrario se estaría simulando parte de reactor que no aportaría nada a nuestro estudio, con su consiguiente gasto computacional. La única parte que interesa desde el punto de vista descriptivo es la distancia desde el punto inyección hasta la sección de medida de concentración.

Capítulo 4 – Inyección del trazador y últimos ajustes

Para determinar la distancia de seguridad se llevará a cabo una serie de planteamientos para estudiar y determinar el comportamiento del trazador.

Como ya hemos dicho, la razón para el desarrollo de este método es que en la bibliografía no se ha encontrado unas claras pautas a la hora de tener en cuenta esta distancia de seguridad en simulaciones en CFD. La mayoría de veces se deja una distancia lo suficientemente grande para asegurar que no escapa gran cantidad de trazador, sin utilizar ningún criterio claro. Esto tiene el problema, como ya hemos comentado, de que no es eficiente desde el punto de vista de los recursos de cálculo.

4.3.1. Planteamiento analítico

Para empezar se considera el reactor con deflectores con un solo orificio y se estudia la trayectoria que seguiría una partícula fluida que parte de la posición en la que se inyecta el trazador y que sigue el movimiento producido por la velocidad total dentro del reactor (velocidad neta más oscilatoria).

La ecuación de la velocidad venía dada por:

$$u(t) = u_{net} + 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t)$$

Donde encontramos un término de velocidad neta (V_n) y otro oscilatorio.

$$u_{net} = 0.002009 \text{ m/s}$$

$$f x_0 = \frac{Re_o \mu}{2\pi \rho D} = cte = \frac{100 \cdot 0.001003}{2\pi \cdot 998.3 \cdot 0.025} = 0.0006396 \text{ m/s}$$

Supondremos entonces el caso extremo hipotético de una partícula que se encuentra siempre en una trayectoria rectilínea a través de los orificios de los deflectores, y que tiene la mayor velocidad posible.

Por continuidad tenemos:

$$u(t) \cdot S_D = V_{max}(t) \cdot A \quad (43)$$

$$V_{max}(t) = V(t) \cdot \frac{S_D}{A} \quad (44)$$

Donde:

S_D : Sección del conducto

A : Sección ocupada por los orificios

Capítulo 4 – Inyección del trazador y últimos ajustes

La relación S_D/S_d es para todos los casos constante, calculando por simplicidad para el caso de un orificio se tiene que:

$$\frac{S_D}{A} = \frac{\frac{\pi D^2}{4}}{\frac{\pi d^2}{4}} = \frac{D^2}{d^2} = \frac{25^2}{12.5^2} = 4$$

Llegando a:

$$V_{max}(t) = 4 \cdot u(t) \quad (45)$$

La ecuación de la posición la conseguimos integrando la velocidad:

$$X(t) = \int V_{max}(t) dt = 4Vn \cdot t - 4x_0 \cos(2\pi ft) + Cte \quad (46)$$

Donde Cte es una constante que se obtiene de aplicar la condición de que la partícula se encuentra en la posición de inyección del trazador ($X = 0$) en $t = 0$.

$$Cte = 4x_0$$

Para obtener la posición más cercana a la salida que tendrá dicha partícula calculamos el mínimo de la función $X(t)$.

$$\frac{dX(t)}{dt} = V(t) = 4Vn + 8\pi f x_0 \sin(2\pi ft) = 0$$

$$t_{seg} = \frac{1}{2\pi f} \arcsin\left(\frac{-Vn}{2\pi f x_0}\right) \quad (47)$$

Representando gráficamente la ecuación de posición ($X(t)$) y la de velocidad ($V(t)$), tenemos lo siguiente:

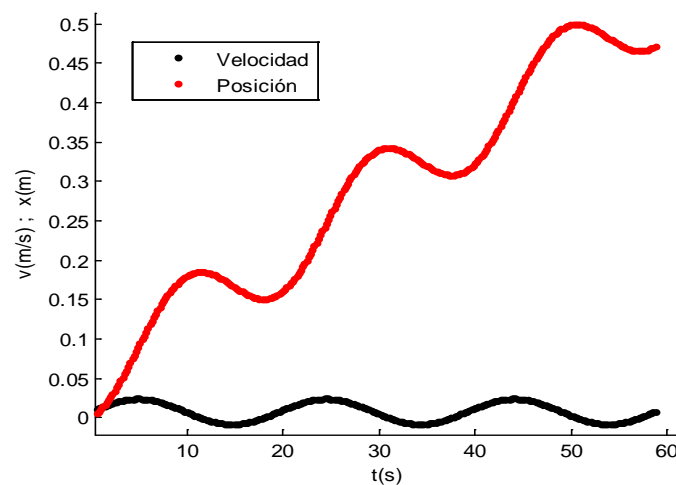


Gráfico 5. Velocidad (negro) y posición (rojo) de una partícula que sigue una trayectoria sobre una línea recta a lo largo del eje del reactor

Se observa que con el planteamiento realizado toda partícula debería avanzar a lo largo del reactor, sin llegar a escapar por la entrada. Sin embargo, si se realiza una simulación se observa que esto no ocurre así. El planteamiento realizado no es aplicable a todas las partículas. Parte del trazador va en dirección a la entrada ya que a lo largo del reactor, éste va quedando atrapado entre los deflectores, donde puede que no cambie de paso mientras la velocidad es positiva pero sí cuando es negativa, debido a la vorticidad creada por estos deflectores.

4.3.2. Método de las secciones

Entonces, dado que la dispersión axial depende de la forma en que el trazador va quedando atrapado en los diferentes deflectores, se planteó realizar una simulación inyectando el trazador justo en el centro del reactor y estudiar como era su dispersión.

En este caso, para tomar la distancia de seguridad, se planteó la condición de que por esa superficie de control no saliera más de un 5% del volumen del trazador, considerando ésta una cantidad despreciable.

Para encontrar la cantidad de trazador que escapa compararemos la curva obtenida de monitorizar la fracción másica en cada sección con la curva obtenida de la fracción másica total en todo el volumen.

La variable que se monitoriza tanto en cada sección como en el volumen del dominio es la fracción másica de trazador.

En las secciones el tipo de reporte será “Flow Rate”. Este cálculo se lleva a cabo con el sumatorio del producto de la densidad y el campo seleccionado con el producto escalar del vector superficie de la sección y el vector velocidad en la celda:

$$\int \phi \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = \sum_{i=1}^n \phi_i \rho_i \vec{v}_i \cdot d\vec{A}_i \quad (48)$$

Con la ayuda de este reporte seremos capaces de conocer el flujo de trazador a través de la sección estudiada.

Como intentamos encontrar que sección sería la idónea para hacer de nueva sección de entrada **tendremos que tratar los datos de la monitorización de cada sección como si esa sección fuera la sección de salida**. Para hacer esto se analizarán las curvas obtenidas para la sección de salida y para el resto de secciones.

En el presente proyecto se tienen 3 tipos de reactores con 3 condiciones de flujo en cada caso, es decir, 9 casos diferentes.

Capítulo 4 – Inyección del trazador y últimos ajustes

Para hacer el estudio con más exactitud se tendría que aplicar el método a cada uno de los reactores, sin embargo solo se estudiará el caso más desfavorable de todos, es decir, el cual en el que exista una dispersión axial mayor y pueda escapar más cantidad de trazador por la sección de entrada. De este modo solo será necesario realizar una simulación. Para el resto de reactores se tomará la misma distancia de seguridad.

Para ello se tienen en cuenta las siguientes consideraciones:

- En el **reactor con un solo orificio** los volúmenes muertos son mayores debido a que existe mayor distancia entre los orificios y la pared del reactor, por tanto mayor cantidad de trazador puede quedar atrapado entre los deflectores y avanzar hacia la entrada desplazándose cuando el flujo es negativo. Por tanto simularemos este caso (MH1).
- En la bibliografía [6] se observa, que dado un número de Reynolds y un número de Reynolds oscilatorio, la varianza aumenta para **menores números de Strouhal**. Debido a esto se simulará el caso con menor número de Strouhal de los establecidos anteriormente ($St = 0.0796$)

Por tanto el caso que estudiaremos será:

- Reactor con deflectores con 1 orificio
- $St = 0.0796$

También se toma el criterio de que el reactor a simular (MH1) tendrá 15 pasos.

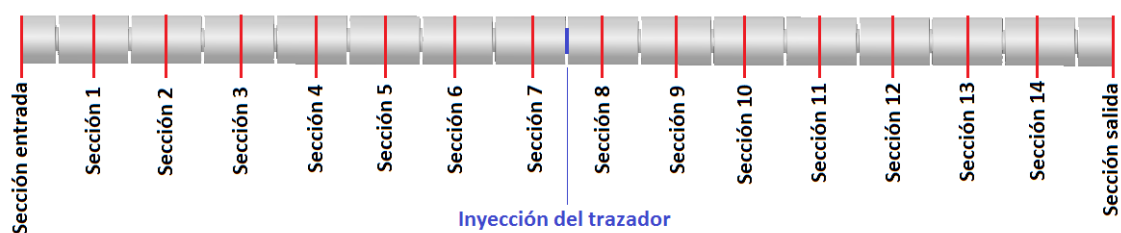


Figura 70. Reactor MH1 donde se muestran las secciones de control y el punto de inyección del trazador

Una vez realizada la simulación, para la sección de entrada (azul) y de salida (rojo) se tienen las siguientes curvas de flujo de trazador. Si observamos sólo tenemos valores de un signo (negativos), cuando escapa trazador a través de esas secciones.

Capítulo 4 – Inyección del trazador y últimos ajustes

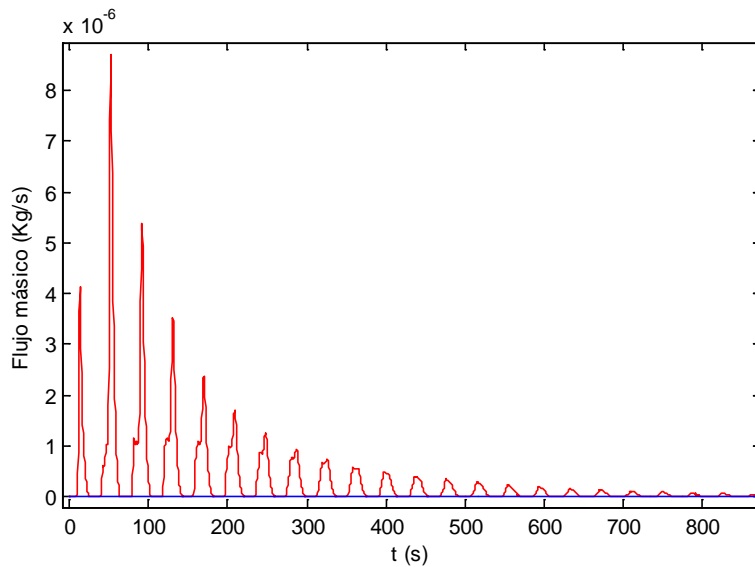


Gráfico 6. Flujo másico de trazador por la sección de salida (rojo) y la de entrada (azul)

En este caso la curva del flujo de trazador a través de la sección de entrada (curva azul) es inapreciable, es decir, muy poca cantidad de trazador atraviesa esa sección. Ampliando la imagen se puede apreciar mejor la magnitud de la curva:

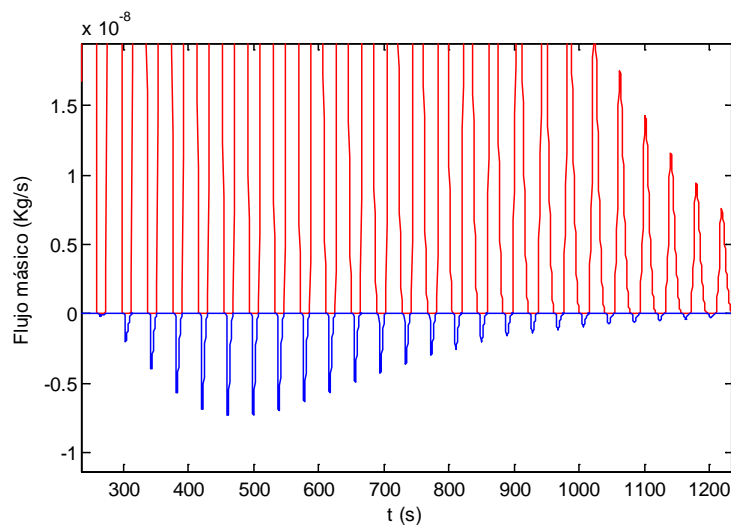


Gráfico 7. Detalle del flujo másico de trazador por la sección de entrada (azul)

La razón de que los valores de flujo másico a través de la entrada sean negativos es debido al signo del producto escalar del vector velocidad y el vector superficie de la sección. En nuestro caso, el vector superficie tiene sentido positivo sobre el eje X.

Si multiplicamos los valores en esta simulación por el diferencial de tiempo utilizado en la simulación, obtenemos la cantidad de trazador que sale en cada instante a través de las superficies citadas. Si sumamos las cantidades de trazador que se van escapando tendremos una curva que indica la cantidad de trazador total que ha salido por esa sección para cada instante de tiempo.

Capítulo 4 – Inyección del trazador y últimos ajustes

Multiplicaremos además por “-1” el valor de flujo másico de trazador a través de la entrada para no tener en cuenta el signo negativo del flujo.

Además si se suman los valores de las ambas curvas para un tiempo muy grande, último valor de la simulación, podemos suponer que ya ha salido todo el trazador del reactor y por tanto ese valor será la masa de trazador total. Este valor lo representaremos mediante una línea recta de color verde.

Para las curvas anteriores se tiene:

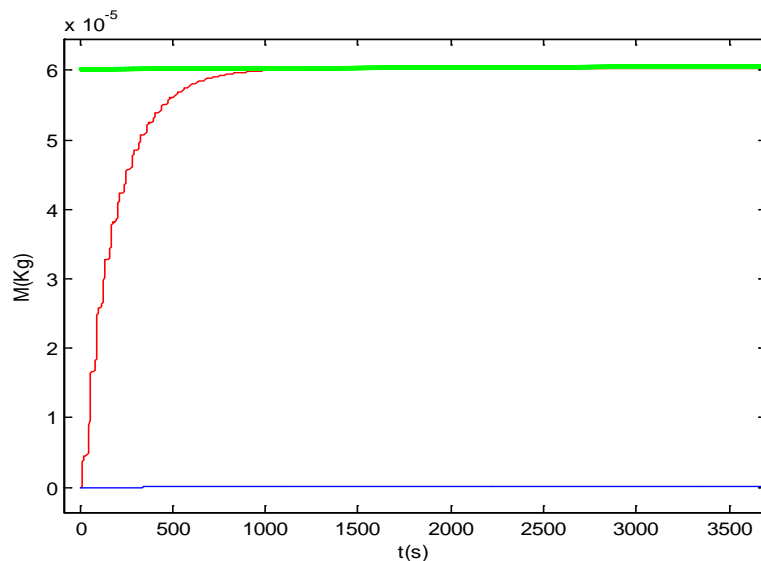


Gráfico 8. Cantidad de trazador que ha escapado por la sección de entrada (azul) y la sección de salida (rojo) en función del tiempo. Cantidad de trazador total al iniciar la simulación (verde)

Si representamos el valor del flujo másico para una **sección intermedia** la curva tiene la siguiente forma:

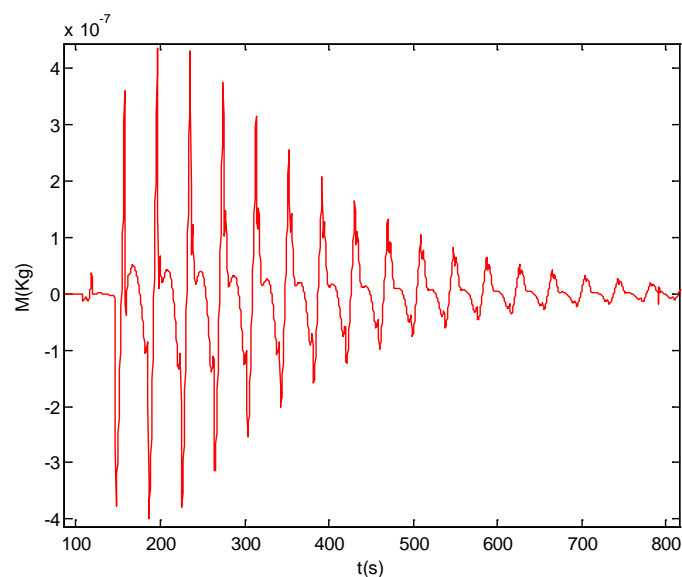


Gráfico 9. Flujo másico de trazador a través de la sección 4

Capítulo 4 – Inyección del trazador y últimos ajustes

En este caso observamos como la curva tiene valores positivos y negativos, es decir, el trazador atraviesa la sección en ambos sentidos.

Si queremos simular que esta sección sea la de salida, tenemos que suponer que todos los datos que pasan a través de esa sección se “pierden” y no se vuelven a contabilizar.

Para simular esto, nos quedaremos con los valores negativos de la curva, es decir, los valores en los que el trazador está “escapando” a través de esa sección, de tal modo que a la hora de realizar la integración, la curva resultante sólo tenga pendiente positiva.

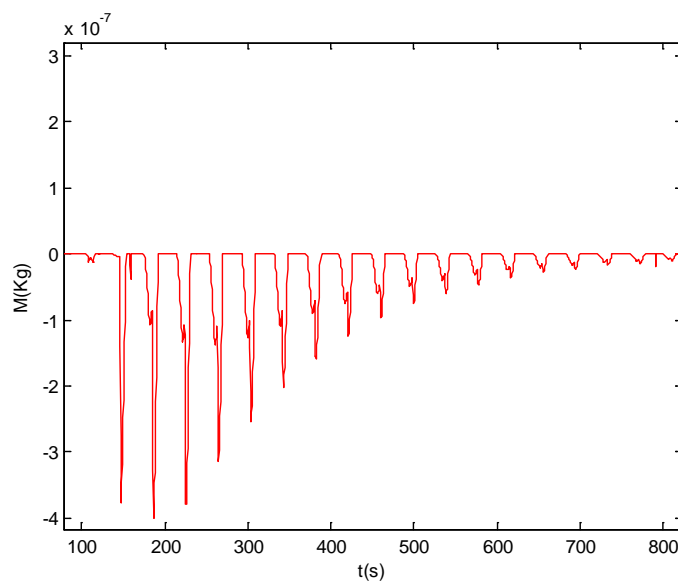


Gráfico 10. Flujo másico de trazador a través de la sección 4 en dirección a la entrada

Hay que destacar como este planteamiento se trata sólo de una **aproximación**, ya que en el caso de que fuera una sección de salida real, la masa de trazador que atraviesa la sección no volvería a pasar trazador al interior del reactor. Ese hipotético caso no es posible de simular con este planteamiento, debido a que no se sabe lo que ocurre con la totalidad del trazador que vuelve a entrar por esa sección. Habría que hacer una simulación completa para cada una de las secciones, sin embargo para ahorrar recursos de cálculo se ha planteado esta aproximación.

En todo caso se trata de una **aproximación conservativa**, ya que como mínimo estamos contabilizando toda la masa del trazador que ha pasado al menos una vez por esa sección. De hecho, es posible que se contabilice fracción másica más de una vez si debido al movimiento oscilatorio parte del trazador vuelve a pasar por esa sección. De este modo nos aseguramos que en el caso de que fuera la sección de entrada real, la cantidad sería igual o menor a la contabilizada por este método.

Capítulo 4 – Inyección del trazador y últimos ajustes

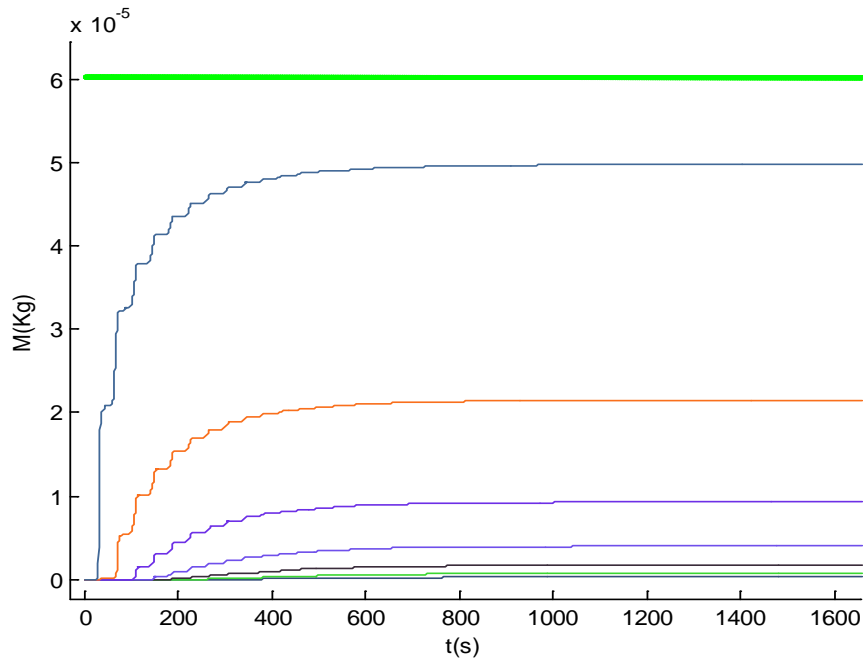


Gráfico 11. Resultados de plantear el método de cálculo de la distancia de seguridad. Cantidad de trazador que escapa por la entrada en función del tiempo

MH1, St = 0.0796	
Sección	Cantidad de trazador (%)
Entrada	0.14
1	0.48
2	1.18
3	2.57
4	5.44
5	14.93
6	34.47
7	79.83

Tabla 7. Cantidad de trazador (en %) que escapa por cada una de las secciones

Con los resultados anteriores se elige la sección 4 como sección de entrada. Se observa que por ella teóricamente escapa un 5.44% de trazador, pero, dado que se trata de una aproximación al alza, se puede estimar que en el caso real se escapará un porcentaje menor al 5%. Por lo tanto, se inyectará el trazador en el **paso número 4**, dejando 3 pasos y medio de distancia de seguridad.

Esta misma distancia de seguridad será la adoptada para todos los tipos de reactores.

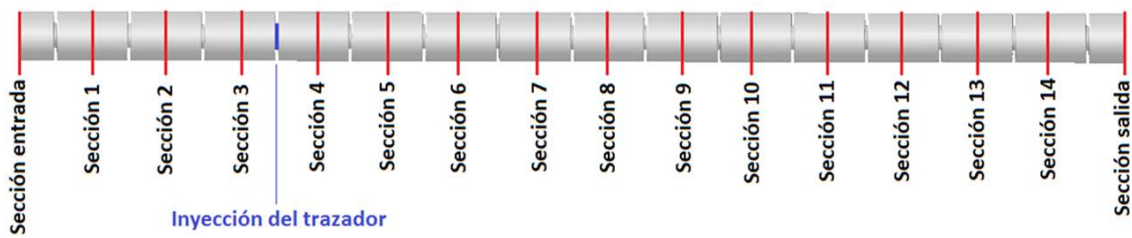


Figura 71. Reactor donde se muestran las secciones de control y el punto de inyección del trazador seleccionado

4.3. Inyección del trazador

A continuación se plantea como se inyecta el trazador en Fluent.

Para configurar la inyección del trazador desde Fluent utilizamos el menú:

Solve → Initialize → Patch

En este menú se selecciona la variable a inyectar (agua-trazador) y la zona en la que se inyectará (trazador_1).

La casilla “value” nos indica la fracción másica de la variable que se introduce en el volumen seleccionado. En nuestro caso como queremos todo ese volumen con trazador, seleccionamos un valor de fracción másica igual a 1.

De este modo conseguimos simular una entrada del tipo impulso para el estudio de la curva de tiempos de residencia (RTD).

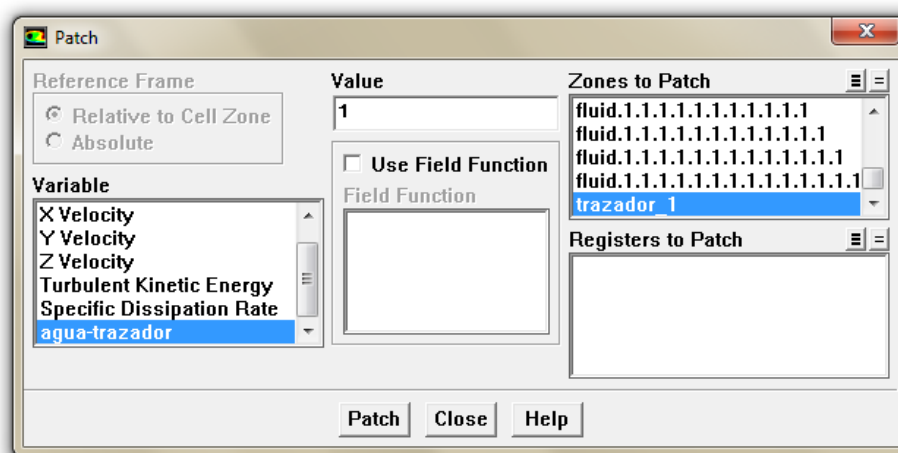


Figura 72. Configuración de la inyección del trazador

4.4. Disposición final de los reactores simulados

4.4.1. Reactor con deflector de 1 orificio

Con el fin de permitir que el trazador avance la máxima distancia posible antes de la monitorización de las curvas RTD, la sección finalmente seleccionada para tal fin será la **sección 12**. De este modo dejamos 3 pasos entre esta sección y la de salida para que el trazador que escape no afecte a las medidas.

Por lo tanto, tenemos que en el caso MH1 ($L_{MH1} = 37.5 \text{ mm}$), que tiene 15 pasos, la distancia recorrida por el trazador será igual a:

$$L_{t-MH1} = N_t \cdot L_{MH1} = (15 - 3.5 - 3) \cdot 37.5 = 318.75 \text{ mm}$$

Siendo N_t el número de pasos que hay entre la inyección del trazador y la medida de la curva RTD.

Para poder comparar las curvas de los distintos reactores, se busca que la distancia (L_t) entre la inyección del trazador y la medida de la curva RTD sea la misma en todos los casos. Sin embargo, también es interesante que la monitorización de la curva sea siempre en la unión de dos pasos, de tal modo que se encuentre equidistante a los deflectores, donde pueden aparecer zonas muertas.

El problema de este planteamiento es que cada paso de reactor tiene una longitud distinta, por lo que las distancias no podrán ser exactamente iguales, habrá que considerar la distancia de L_t como la más cercana a la conseguida para MH1, dada por la sucesión de pasos en cada tipo de reactor, teniendo en cuenta que se deja 3.5 pasos de seguridad a la entrada y 3 pasos a la salida.

4.4.2. Reactor con deflector de 3 orificios

Para el caso MH3 ($L_{MH3} = 21.6 \text{ mm}$) tenemos:

$$N_t = \frac{L_{t-MH1}}{L_{MH3}} = \frac{318.75}{21.6} = 14.75 \approx 14.5 \text{ pasos}$$

Quedando:

$$L_{t-MH3} = N_t \cdot L_{MH3} = 14.5 \cdot 21.6 = 313.2 \text{ mm}$$

4.4.3. Reactor con deflector de 7 orificios

Para el caso MH7 ($L_{MH7} = 14.1 \text{ mm}$) tenemos:

$$N_t = \frac{L_{t-MH1}}{L_{MH7}} = \frac{318.75}{14.1} = 22.6 \approx 22.5 \text{ pasos}$$

Quedando:

$$L_{t-MH7} = N_t \cdot L_{MH7} = 22.5 \cdot 14.1 = 317.25 \text{ mm}$$

De este modo la disposición de los tres reactores queda de la siguiente manera:

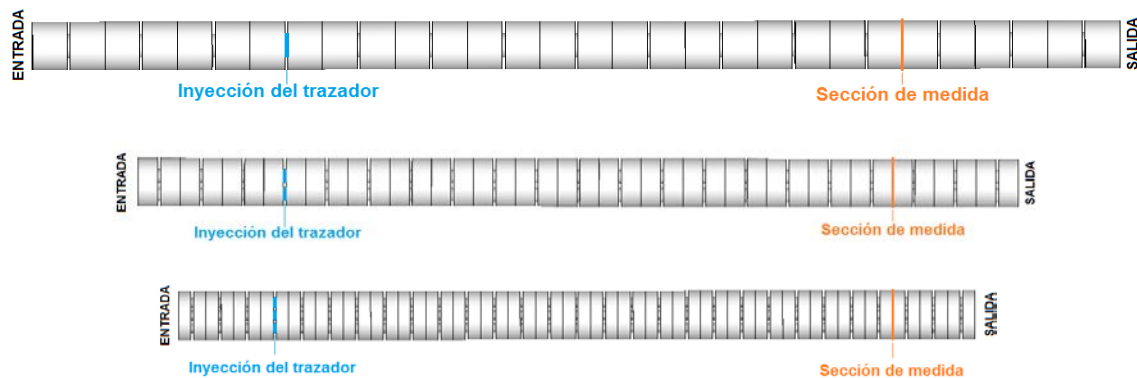


Figura 73. Disposición final de los reactores. MH1, MH3 y MH7 de arriba a abajo.

4.5. Tiempo de simulación

Por último, una vez conocemos la distancia entre la inyección del trazador y la sección de medida, queda por definir el tiempo de simulación. Este tiempo tiene que ser el suficiente para que todo el trazador escape del reactor.

Se observa como otros autores utilizan el concepto de tiempo hidráulico de residencia (τ_h) para calcular el tiempo de simulación.

Como ya habíamos definido, el tiempo hidráulico de residencia viene de dividir la longitud que el trazador tiene que atravesar (L_t) entre la velocidad neta (u_n), es decir:

$$\tau_h = V/Q = L_t/u_n$$

Estos autores suponen que pueden existir zonas muertas dentro del reactor por lo que utilizan un tiempo de simulación igual al doble de este tiempo, es decir:

$$t_s = 2\tau_h \tag{49}$$

Si reproducimos este planteamiento, para el peor de los casos (mayor tiempo de residencia) tenemos:

Deflector 1 Orificio

Zona de medida	L_t (m)	u_n (m/s)	τ_h (s)	t_s (s)
Sección 12	0.31875	0.00201	158.61	317.22

Tabla 8. Tiempo de simulación según tiempo hidráulico de residencia para MH1

Sin embargo, cuando realizamos la simulación para el caso $St = 0.0796$ se tiene que el tiempo medio de residencia (τ) es igual a 286.7 s, escapando trazador incluso por encima de los 1000 segundos de simulación.

De este modo se observa que este planteamiento no es válido para este tipo de reactores. El trazador va quedando atrapado entre los deflectores, creándose zonas muertas que provocan que el trazador tarde más tiempo en salir.

Debido a esto, se decide simular un tiempo lo suficientemente grande para que escape todo el trazador. Se escoge para todos los casos un tiempo de simulación igual a **60 ciclos** de oscilación, tiempo suficiente en todos los casos.

CAPÍTULO 5 – RESULTADOS

5.1. Cantidad de trazador que se escapa por la sección de entrada en cada simulación

Primeramente, una vez realizadas todas las simulaciones se comprobará si el método planteado en el capítulo anterior es válido. Para ello se contabiliza la cantidad de trazador que se escapa por la sección de entrada en cada uno de los casos.

A continuación se muestra unas tablas con los resultados obtenidos:

Reactor	Strouhal	Cantidad de trazador (%)
MH1	0.0796	4.19
	0.106	0.95
	0.159	0.036

Tabla 9. Cantidad de trazador que escapa por la sección de salida en las simulaciones del reactor MH1

Reactor	Strouhal	Cantidad de trazador (%)
MH3	0.138	2.13
	0.184	0.79
	0.276	0.026

Tabla 10. Cantidad de trazador que escapa por la sección de salida en las simulaciones del reactor MH3

Reactor	Strouhal	Cantidad de trazador (%)
MH7	0.210	1.00
	0.280	0.58
	0.420	0.022

Tabla 11. Cantidad de trazador que escapa por la sección de salida en las simulaciones del reactor MH7

Como se observa, el método planteado para calcular la distancia de seguridad es **válido**, ya que se cumple que en ningún caso se escapa más del 5% de trazador por la sección de entrada. Además se confirma que el método planteado es conservativo, ya que la cantidad de trazador que escapa es menor a la definida por el método. Para el caso MH1, $St = 0.0796$, el método daba un valor de 5.44 % pero realmente se tiene que escapa sólo un 4.19 %.

Si representamos gráficamente la tendencia de la cantidad de trazador que escapa por la sección entrada en función del número de Strouhal se obtienen los siguientes resultados:

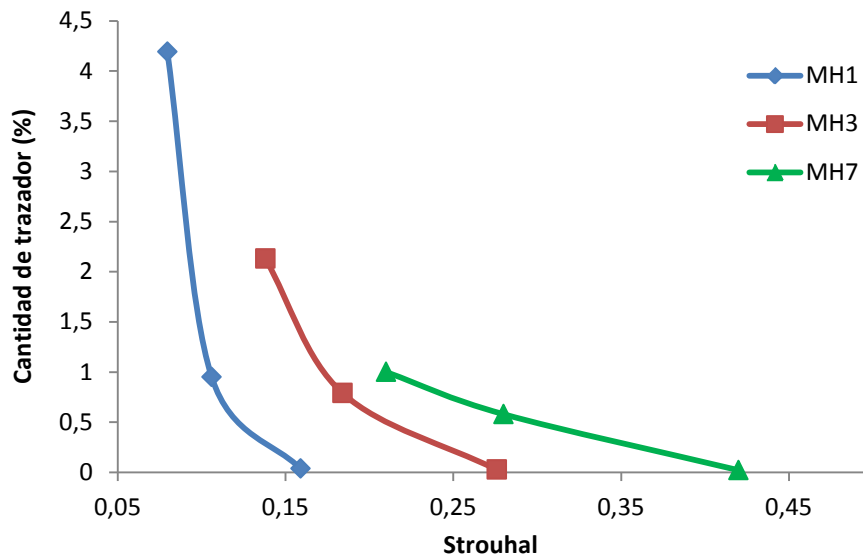


Gráfico 12. Cantidad de trazador que escapa por la sección de entrada en función del número de Strouhal

Se confirma que, para una misma geometría dado el mismo Reynolds y Reynolds oscilatorio, la cantidad de trazador que escapa por la sección de entrada aumenta cuando disminuye el número de Strouhal.

A la hora de comparar los reactores entre sí no se tiene la suficiente información, ya que ,como se ha planteado en el capítulo anterior, en todos los casos se tiene el mismo número de pasos de distancia de seguridad, pero al tener cada paso una longitud distinta no se puede comparar directamente.

Lo que sí se puede distinguir es como para el caso MH1, cuyo rango de número de Strouhal es el menor de todos (0.0796 – 0.159), existe un mayor rango para la cantidad de trazador que escapa (4.19 – 0.036 %), es decir, es más sensible a los cambios en el número de Strouhal.

Para el otro caso extremo, reactor MH7, ocurre lo contrario, tiene el mayor rango de número de Strouhal (0.210 – 0.420) y presenta la menor variación en la cantidad de trazador que escapa (1 – 0.022 %), es decir, presenta menor sensibilidad a los cambios en el número de Strouhal.

5.2. Curvas RTD adimensionales

Además de representar las curvas de distribución en función de las variables concentración y tiempo, con el fin de que sea posible comparar diferentes casos y geometrías se adimensionalizan las variables representadas, obteniendo de ese modo curvas adimensionalizadas. Para ello, primero se discretizan las ecuaciones planteadas en el Capítulo 1 utilizadas en el análisis de las curvas RTD. Se tiene que:

Tiempo:

En su forma adimensionalizada:

$$\theta = \frac{t_i}{\tau} \quad (50)$$

Donde t_i es el tiempo en su forma discreta y τ es el tiempo medio de residencia.

$$\tau = \frac{\sum_i t_i C_i \Delta t_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} \quad (51)$$

C_i es la concentración de trazador en el tiempo t_i y Δt_i es el intervalo entre dos medidas, es decir, en nuestro caso, el paso de tiempo de las simulaciones.

Curva de distribución:

En su forma discreta (Ecuación 52) y adimensionalizada (Ecuación 53):

$$E(t_i) = \frac{C_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} \quad (52)$$

$$E(\theta) = \tau E(t_i) = \tau \frac{C_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} \quad (53)$$

Varianza:

En su forma discreta (Ecuación 54) y adimensionalizada (Ecuación 55):

$$\sigma(t_i)^2 = \frac{\sum_i (t_i - \tau)^2 C_i \Delta t_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} \quad (54)$$

$$\sigma(\theta)^2 = \frac{\sigma(t_i)^2}{\tau^2} = \frac{\sum_i (t_i - \tau)^2 C_i \Delta t_i}{\tau^2 \sum_i C_i \Delta t_i} \quad (55)$$

5.3. Resultados dentro del rango de trabajo de cada reactor

A continuación se muestran las soluciones de las curvas de tiempo de residencia para los tres reactores dentro de su rango de funcionamiento, es decir, para los flujos determinados por los distintos números de Strouhal dados por la condición del profesor Xiong-Wei Ni (Ecuación 27) y el límite superior de amplitud definido por nosotros (Ecuación 28).

5.3.1. Deflector 1 orificio

Tras realizar las simulaciones, representando las curvas sin adimensionalizar tenemos:

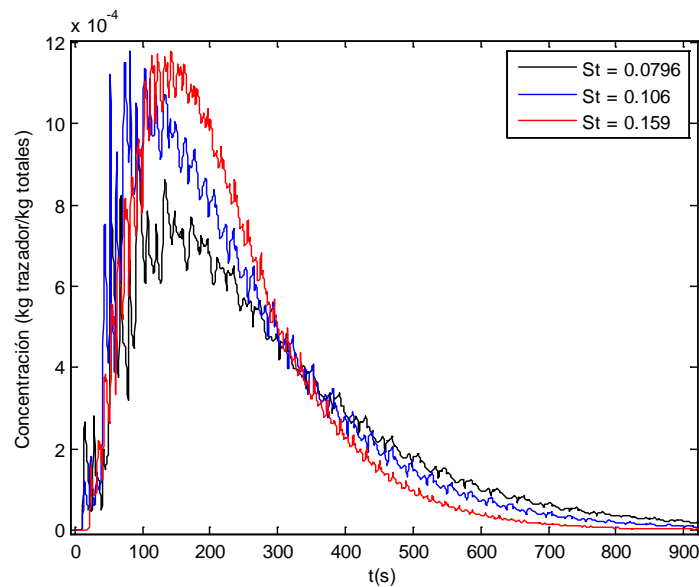


Gráfico 13. Curvas de distribución casos MH1

Adimensionalizando las curvas:

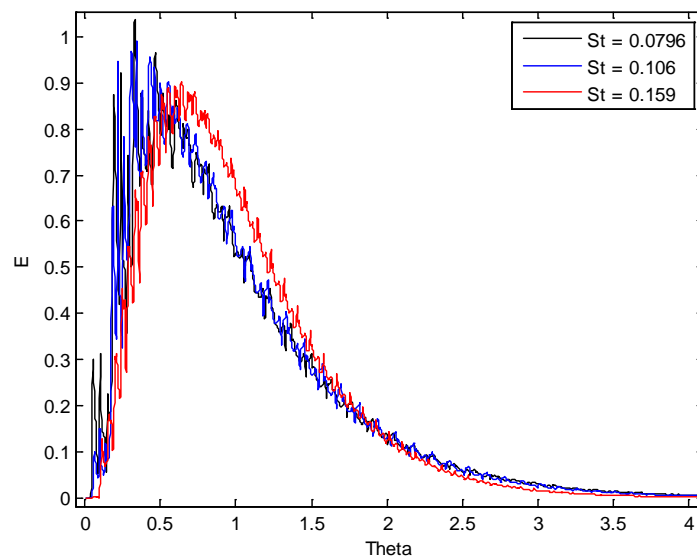


Gráfico 14. Curvas de distribución adimensionalizadas casos MH1

Capítulo 5 - Resultados

Calculando la varianza y el tiempo de residencia para cada caso:

St	Varianza
0,0796	0,501
0,106	0,478
0,159	0,346
0,42	0,342

Tabla 12. Varianza en función de número de Strouhal. MH1

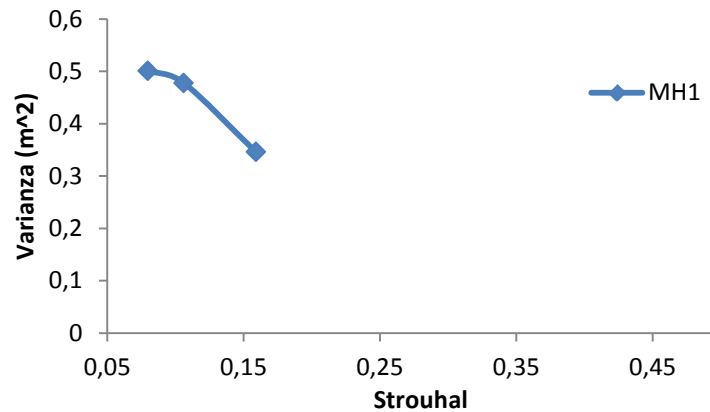


Gráfico 15. Varianza en función del número de número de Strouhal casos MH1

St	τ_h (s)	τ (s)	Diferencia (%)
0,0796	158,63	286,71	44,67%
0,106	158,63	241,98	34,45%
0,159	158,63	223,51	29,03%

Tabla 13. Tiempo medio de residencia en función de número de Strouhal. MH1

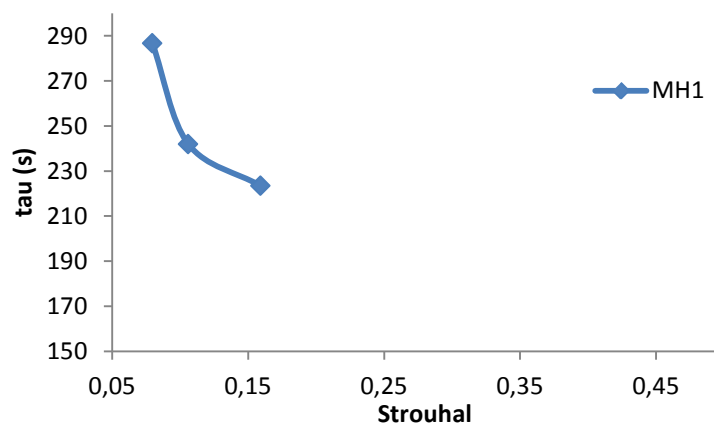


Gráfico 16. Tiempo medio de residencia en función del número de Strouhal casos MH1

Capítulo 5 - Resultados

En este caso se observa como el **tiempo de residencia** disminuye cuando aumenta el número de Strouhal. Lo mismo ocurre con la **varianza**. Ésta disminuye cuando aumenta el número de Strouhal.

Cuando el tiempo de residencia experimental (τ) es igual al tiempo hidráulico de residencia (τ_h), se deduce que no existen zonas muertas en el reactor. Por el contrario, si el tiempo de residencia experimental es mayor que el tiempo de residencia teórico, entonces se deduce que hay presencia de zonas muertas y/o recirculaciones que retienen el trazador más tiempo dentro del reactor y que por lo tanto empobrecen el mezclado. La presencia de zonas muertas conlleva a zonas no afectadas por los vórtices y que por tanto donde no existe mezclado. Las recirculaciones se entienden como un desaprovechamiento de los vórtices pues únicamente se mezcla la misma porción de fluido, al menos durante un periodo de tiempo.

La varianza se puede relacionar, al igual que el tiempo de residencia, con la presencia de zonas muertas y/o recirculaciones, que hacen que parte del trazador tarde más en salir, alejándose de las curvas buscadas estrechas y simétricas donde la mayor parte del mezclado es radial.

5.3.2. Deflector 3 orificios

Representando las curvas sin adimensionalizar tenemos los resultados:

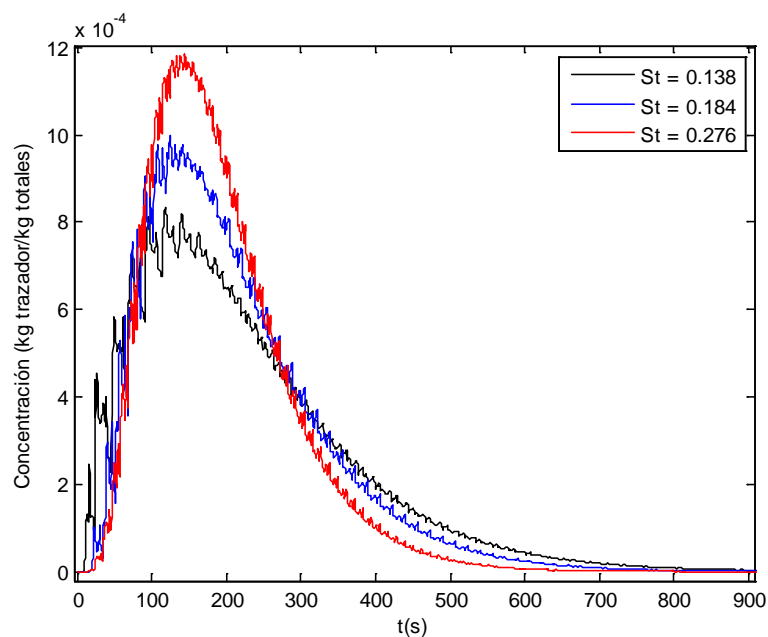


Gráfico 17. Curvas de distribución casos MH3

Adimensionalizando las curvas:

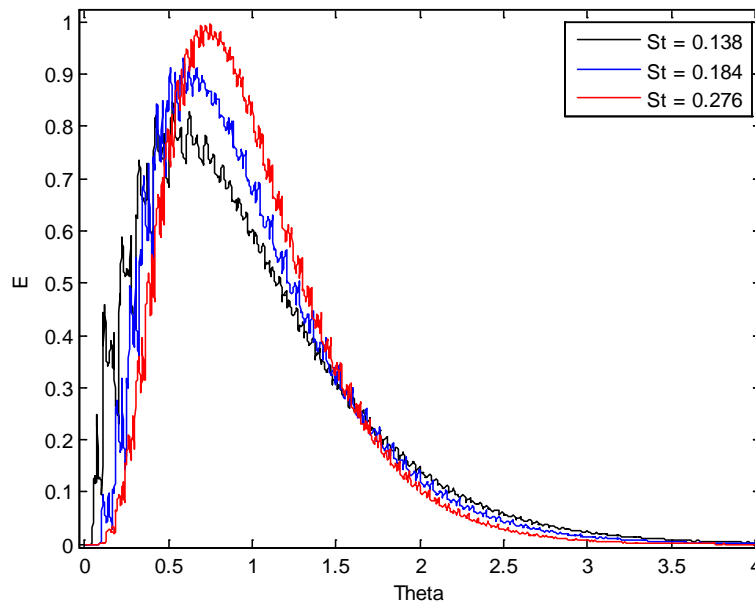


Gráfico 18. Curvas de distribución adimensionalizadas casos MH3

Calculando la varianza y el tiempo de residencia para cada caso:

St	Varianza
0,138	0,423
0,184	0,319
0,276	0,236

Tabla 14. Varianza en función de número de Strouhal. MH3

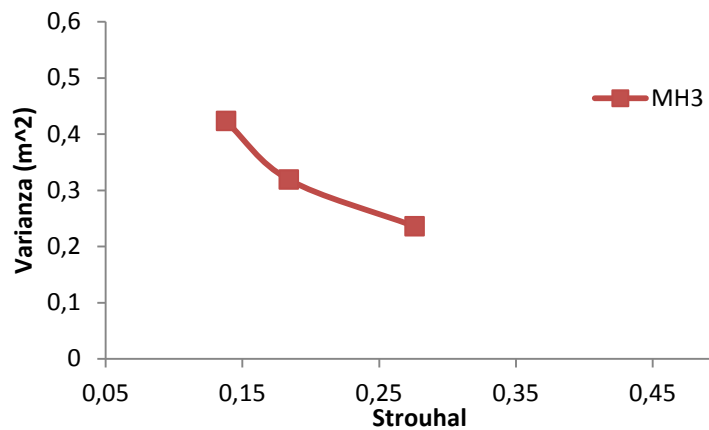


Gráfico 19. Varianza en función del número de Strouhal casos MH3

St	τ_h (s)	τ (s)	Diferencia (%)
0,138	155,87	225,25	30,80%
0,184	155,87	211,63	26,35%
0,276	155,87	192,06	18,85%

Tabla 15. Tiempo medio de residencia en función de número de Strouhal. MH3

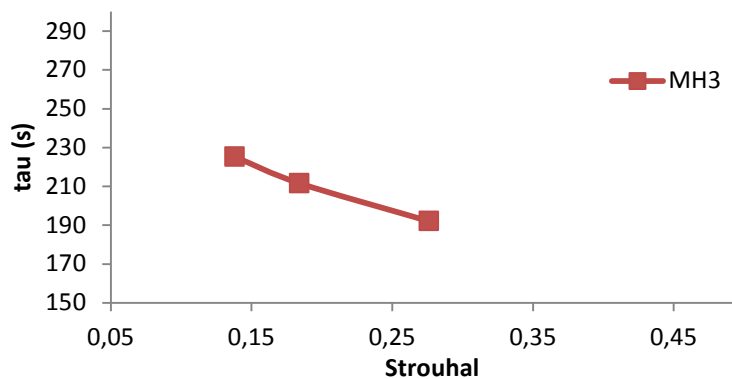


Gráfico 20. Tiempo medio de residencia en función del número de Strouhal casos MH1

Al igual que en el caso anterior, para el reactor MH3 se observa una disminución en el **tiempo de residencia** y en la **varianza** cuando aumenta el número de Strouhal. Sin embargo en este caso las pendientes de las curvas son menores, es decir, a pesar de tener un mayor rango de número de Strouhal el rango de tiempo de residencia y varianza es menor.

Otro aspecto destacable, que en el caso anterior también se apreciaba pero en menor magnitud, es que al aumentar el Strouhal disminuye la **asimetría**. Con mayores números de Strouhal se consiguen curvas más estrechas, con mayor pico y menor cola, asemejándose más al modelo ideal de flujo en pistón. Por lo tanto de este hecho también se puede deducir que al aumentar el Strouhal mejora el mezclado radial, que habitualmente es lo buscado con este tipo de reactores.

5.3.3. Deflector 7 orificios

Representando las curvas sin adimensionalizar tenemos los resultados:

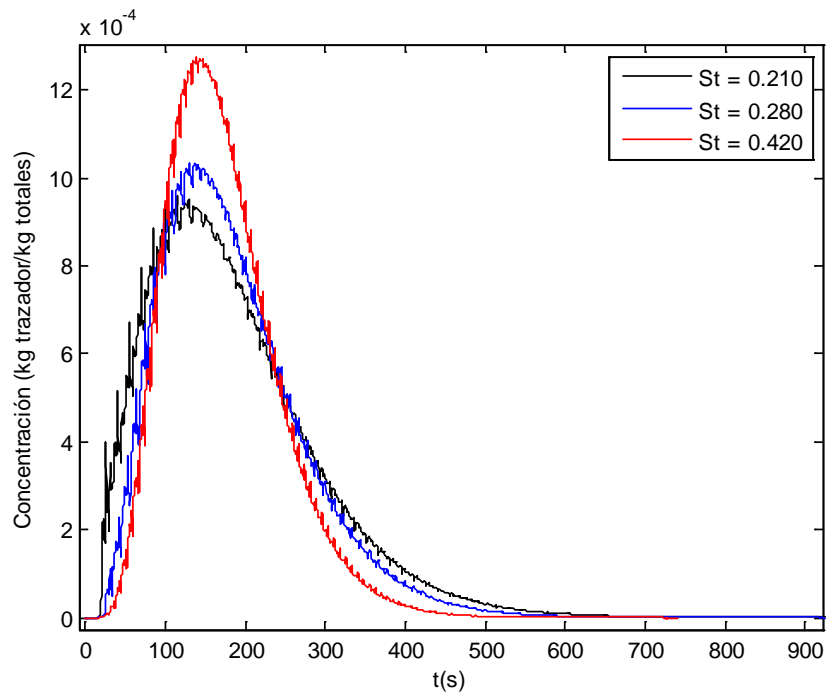


Gráfico 21. Curvas de distribución casos MH7

Adimensionalizando las curvas:

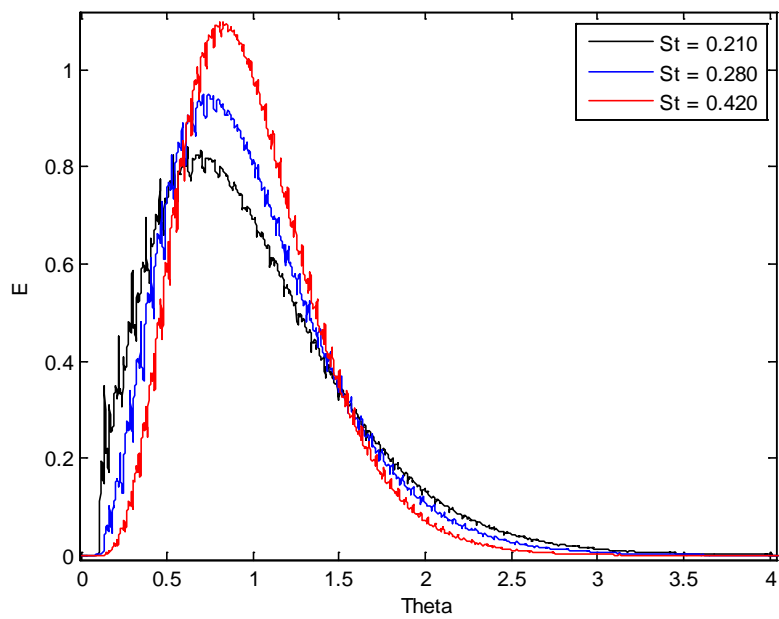


Gráfico 22. Curvas adimensionalizadas de distribución casos MH7

Calculando la varianza y el tiempo de residencia para cada caso:

St	Varianza
0,210	0,317
0,280	0,236
0,420	0,161

Tabla 16. Varianza en función de número de Strouhal. MH7

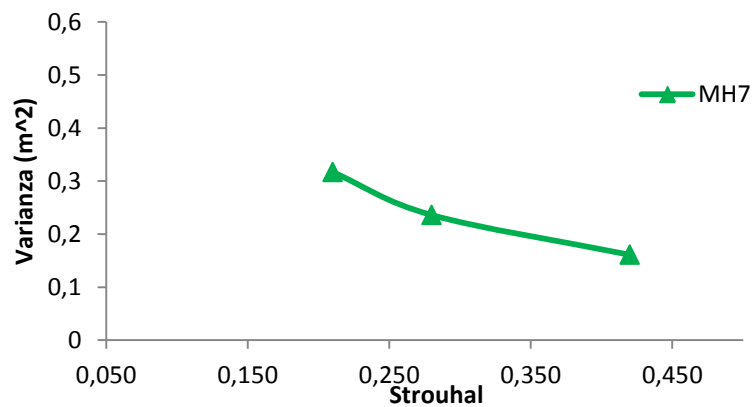


Gráfico 23. Varianza en función del número de Strouhal casos MH7

St	τ_h (s)	τ (s)	Diferencia (%)
0,210	157,88	185,11	14,71%
0,280	157,88	184,18	14,28%
0,420	157,88	172,5	8,47%

Tabla 17. Tiempo medio de residencia en función de número de Strouhal. MH7

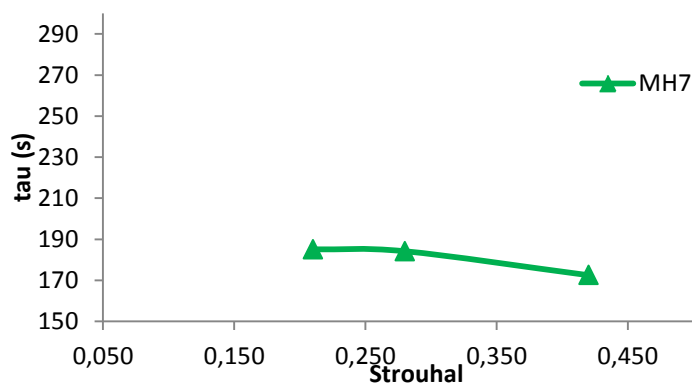


Gráfico 24. Tiempo medio de residencia en función del número de Strouhal casos MH7

En el caso del reactor MH7 la tendencia es similar a los casos anteriores, con el aumento del número de Srouhal se observa una disminución del tiempo de residencia y de la varianza.

Para este reactor se observan las curvas más simétricas de todas las simulaciones.

5.3.4. Comparación de los 3 reactores

Si comparamos las curvas de los tres reactores se tiene que la curva de cada uno es prácticamente la continuación del anterior, es decir, si cada uno de los reactores trabaja dentro de su rango de trabajo las condiciones de funcionamiento donde comparten número de Srouhal son muy similares.

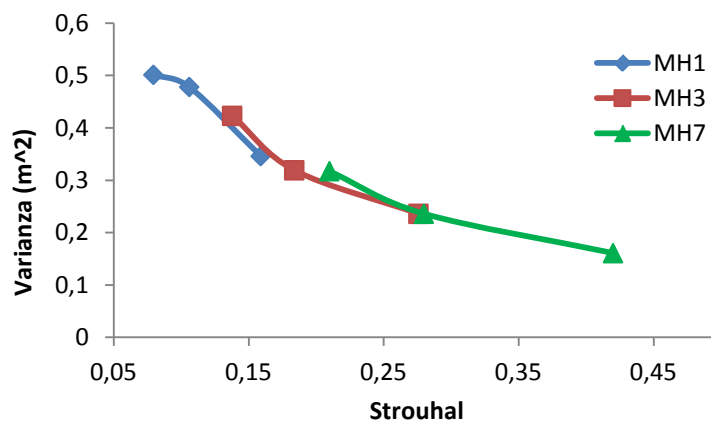


Gráfico 25. Varianza en función del número de Srouhal para los tres reactores

En el caso de la varianza (Gráfico 25) las tres curvas se unen prácticamente para formar una curva mayor que ocupa todo el rango de trabajo.

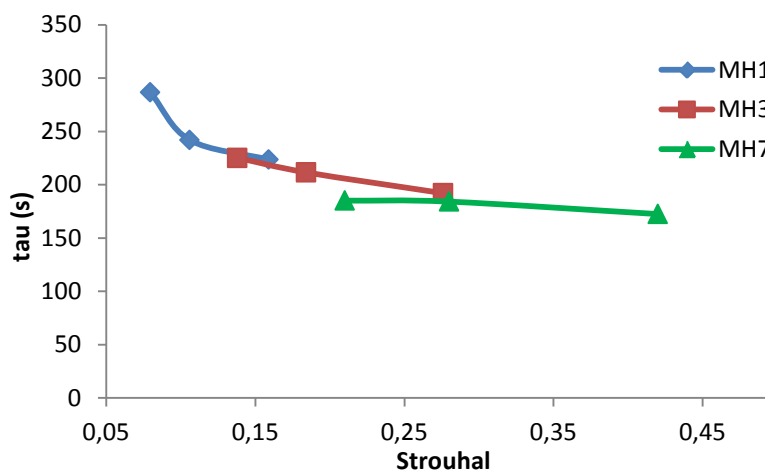


Gráfico 26. Tiempo de residencia en función del número de Srouhal para los tres reactores

En el caso del tiempo medio de residencia (Gráfico 26) ocurre algo parecido a la varianza. En este caso sólo hay un valor que se sale de la “continuidad” de la curva total. Este caso es, en el reactor con deflectores con 7 orificios, para un $St = 0,210$.

Una de las explicaciones para este fenómeno podría ser la menor cantidad de volúmenes muertos que existe con el uso de este tipo de deflector, haciendo que hasta para números de Strouhal bajos no quede tanta cantidad de trazador atrapado en estas zonas, disminuyendo el tiempo de medio de residencia.

5.4. Resultados en el rango total

Las curvas adimensionalizadas para todos los casos estudiados, en cada tipo de reactor, se muestran a continuación:

5.4.1. Deflector 1 orificio

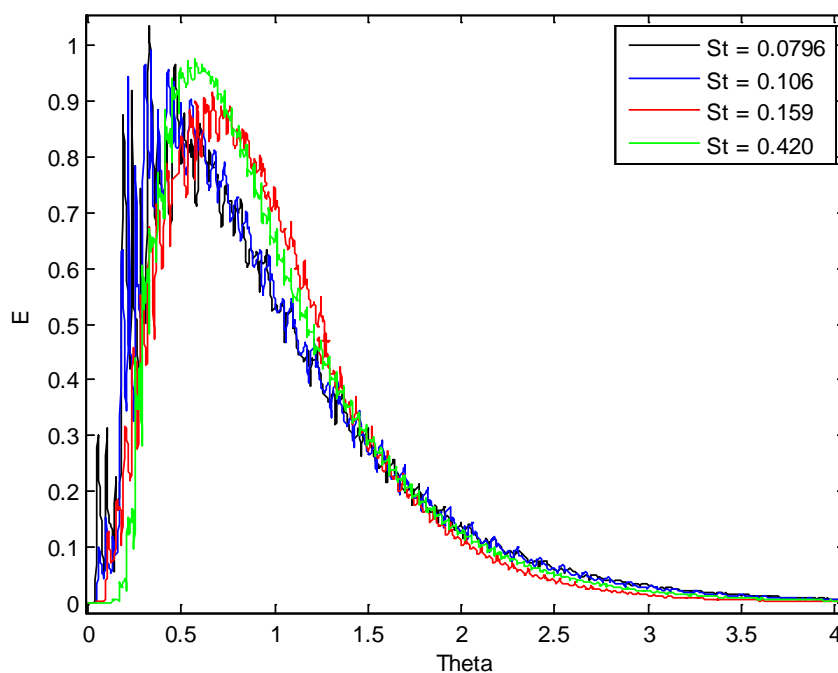


Gráfico 27. Curvas adimensionalizadas para todos los casos del reactor MH1

Para el caso MH1 (Gráfico 27) se observa como para el número de Strouhal mayor ($St = 0.420$) la asimetría vuelve a aumentar comparado con el caso anterior ($St = 0.159$), la curva presenta el máximo más a la izquierda además de tener una cola más larga. De esto se saca la conclusión de que el mezclado radial empeora, por lo que sí se puede concluir que existe un Strouhal máximo de funcionamiento para conseguir un mezclado correcto.

5.4.2. Deflector 3 orificios

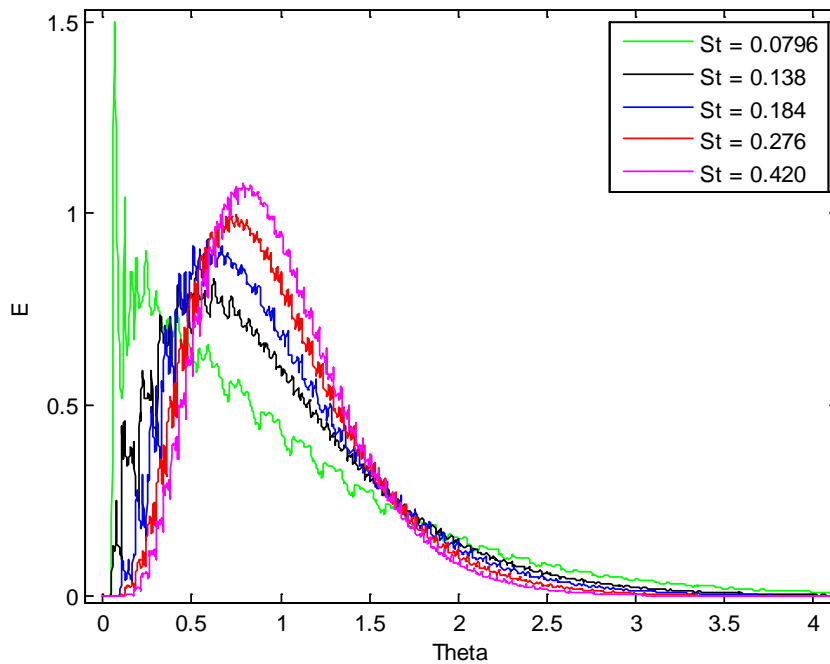


Gráfico 28. Curvas adimensionales para todos los casos del reactor MH3

En este caso, dónde se tiene como novedad las dos simulaciones de los extremos ($St = 0.0796$ y $St = 0.420$) se observa una distribución muy asimétrica para el límite inferior, lo que supone un mezclado radial pobre, y para el límite superior se observa como la simetría mejora, pudiendo concluir que mejora el mezclado.

5.4.3. Deflector 7 orificios

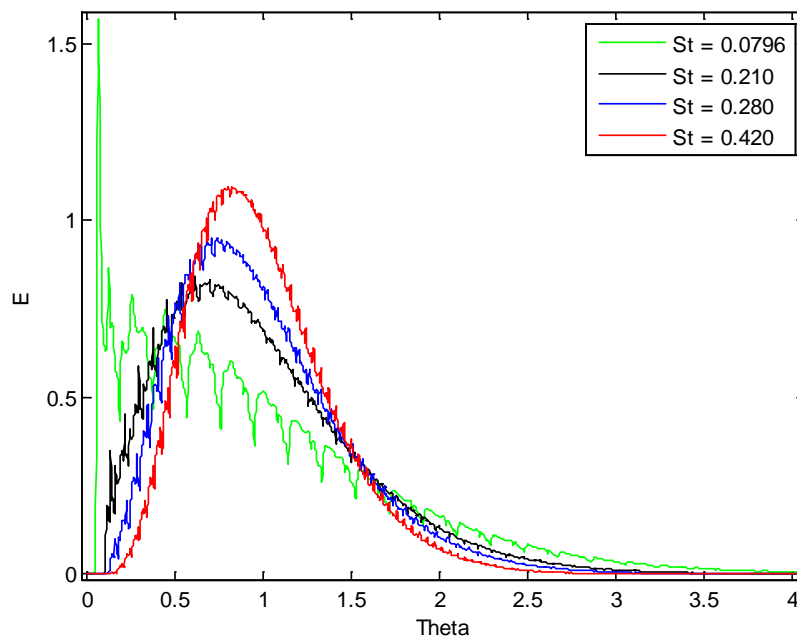


Gráfico 29. Curvas adimensionales para todos los casos del reactor MH1

Para el reactor MH7 se tiene la curva más simétrica de todas las obtenidas ($St = 0.420$) y también la más asimétrica de todas ($St = 0.0796$) por lo que se intuye que sí existe un rango de funcionamiento idóneo para cada tipo de reactor.

Además se observa como al aumentar el número de orificios, este rango idóneo de funcionamiento se da para mayores números de Strouhal.

5.4.4. Comparación de los 3 reactores

A continuación se muestran las curvas de varianza y tiempo de residencia en función del número de Strouhal para todos los casos de los tres reactores:

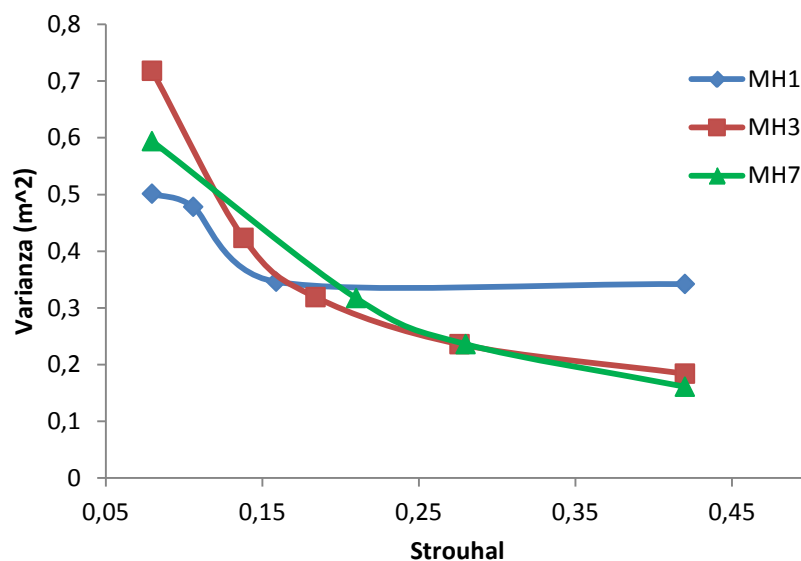


Gráfico 30. Varianza en función del número de Strouhal para todos los casos simulados

Se observa como para el caso de MH1, la varianza no continúa bajando cuando aumenta el Strouhal a partir de $St = 0.159$. Este hecho, junto al hecho de que la curva para $St = 0.420$ también aumenta la simetría respecto a $St = 0.159$, y teniendo en cuenta que sería necesario estudiar más casos intermedios (entre $St = 0.159$ y $St = 0.420$) para tener una conclusión más concreta, desprende la idea de que **sí se cumple la recomendación** del profesor Xiong-Wei Ni para el caso de deflector con un orificio. Recomendación que nos marcaba el límite máximo de número de Strouhal para conseguir un buen mezclado.

Para los otros dos tipos de reactores, MH3 y MH7, se observa un rango más amplio, no se tienen discontinuidades a partir del límite definido por la extrapolación realizada de la recomendación del profesor Xiong-Wei Ni. Además de observar que las curvas de distribución eran aún más simétricas y con menor tiempo de residencia después de éste límite.

Por esto se llega a la conclusión de que la extrapolación para deflectores con multiorificios de la recomendación del profesor Xiong-Wei Ni no es correcta. La explicación de que estos reactores puedan trabajar para un mayor rango de Strouhal puede ser debido a la disminución de volúmenes muertos, debido a la geometría de los deflectores, lo que favorece el mezclado.

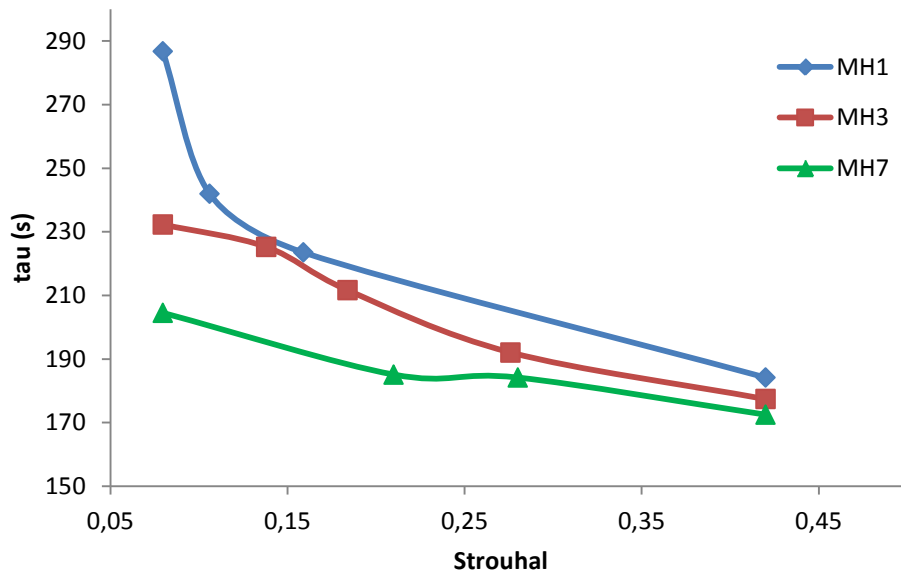


Gráfico 31. Tiempo de residencia en función del número de Strouhal para todos los casos simulados

En cuanto a los tiempos de residencia se observa en todos los casos una disminución cuando aumenta el número de Strouhal. Sin embargo, conforme aumenta el número de orificios se observa como la variación de este tiempo se va haciendo menor, para el caso MH1 se tiene la curva con más pendiente, y para el caso MH7 todo lo contrario.

En las siguientes imágenes se observa la comparación de las distribuciones de residencia en los tres tipos de reactores para los valores extremos simulados, $St = 0.420$ en el Gráfico (32) y $St = 0.0796$ en el Gráfico (33).

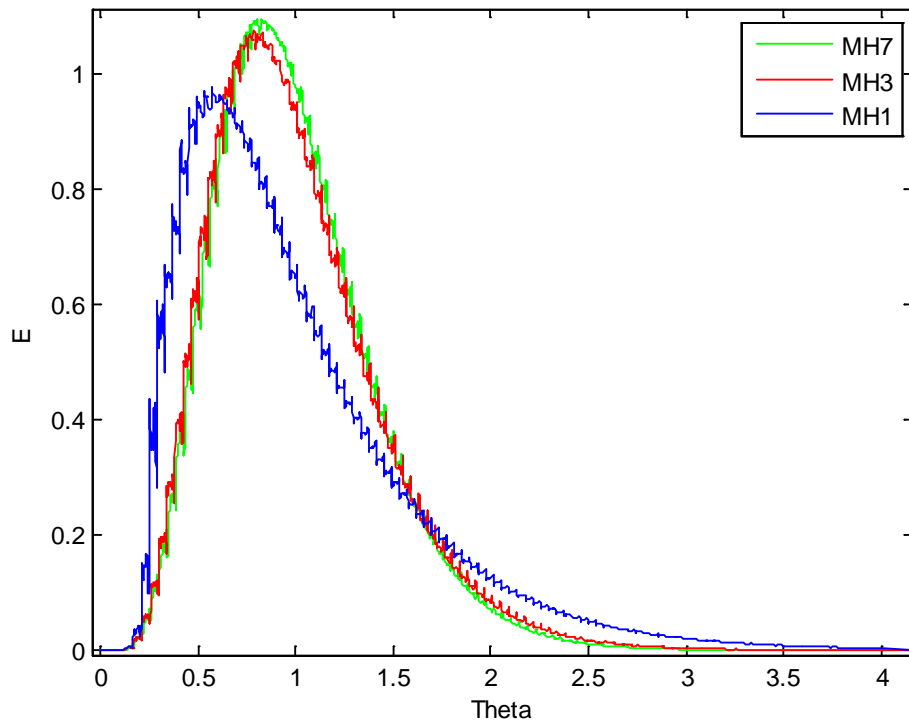


Gráfico 32. Curvas adimensionales para $St = 0.420$ en los tres reactores

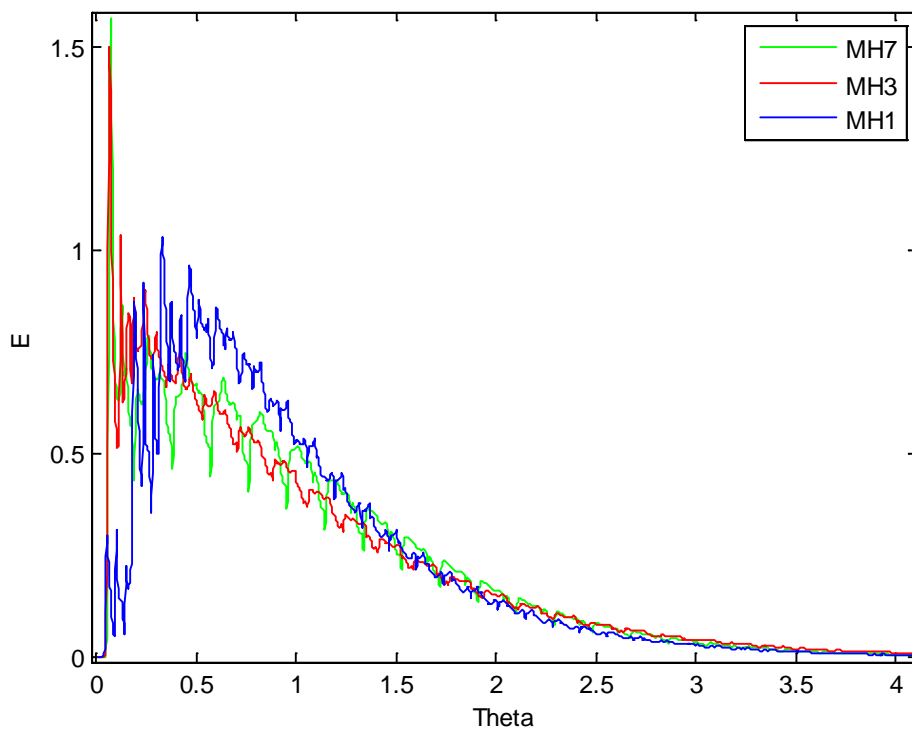


Gráfico 33. Curvas adimensionales para $St = 0.0796$ en los tres reactores

Para el caso $St = 0.0796$ Se observa como la curva del reactor MH1 la que presenta mayor simetría. Las curvas de MH7 y MH3 son muy asimétricas. Es en el caso de MH7 dónde se observa la peor distribución de todas, asimetría muy grande y curva muy irregular, lo que nos lleva a la conclusión que existe un **límite inferior** de número de Strouhal para el cual se da un buen mezclado para cada tipo de reactor, aumentando este límite a la vez que lo hace el número de orificios.

Se necesitaría un estudio más profundo para establecer este límite inferior exacto para cada tipo de reactor.

Cantidad de trazador que escapa por la entrada en todos los reactores a $St = 0.0796$

Por último, dado que se tienen las simulaciones para el menor número de Strouhal en los 3 reactores, se puede comprobar la afirmación que se hizo en el apartado de cálculo de la distancia de seguridad que decía que el tipo de reactor más propicio para que escapara trazador por la entrada era el de 1 solo orificio.

A continuación se muestran los resultados:

Reactor	Cantidad de trazador (%)
MH1	4.17
MH3	3.75
MH7	2.90

Tabla 18. Cantidad de trazador que escapa por la sección de entrada para los tres reactores con $St = 0.0796$

Se observa como en el caso del reactor con 1 solo orificio escapa más trazador que en el resto de reactores. Además, se recuerda que la distancia desde la inyección a la salida es mayor en el caso de un solo orificio (ya que se tomó la distancia de seguridad en número de pasos), por lo que si esta distancia fuera la misma en todos los casos, estos resultados serían aún más extremos. De este modo se corrobora la afirmación hecha.

CAPITULO 6 – CONCLUSIONES

6.1. Conclusiones

Tres mallados de reactores de flujo oscilatorio (OBR) con deflectores con diferente número de orificios han sido diseñados (deflectores con 1, 3 y 7 orificios).

Se ha explicado como la curva de tiempos de residencia (RTD) juega un papel importante en la caracterización de un reactor, ya que refleja las condiciones de mezclado dentro de él.

Se ha planteado un método aproximado, pero en todo caso conservativo, para calcular la distancia de seguridad a tener en cuenta en la inyección del trazador. Se ha comprobado para diferentes casos cumpliéndose en todos ellos.

- Se tiene además que los casos más propicios a que escape trazador por la sección de entrada son:
- Reactores con mayor volumen muerto, es decir, reactores con menor número de orificio, en nuestro caso deflector con un orificio.
- Número de Strouhal menor (para un número de Reynolds y número de Reynolds oscilatorio constantes).
- Número de Reynolds bajo, ya que el avance neto del trazador hacia la salida será menor debido a que la velocidad neta también lo será.

Un total de 13 simulaciones en 3 dimensiones han sido llevadas a cabo para estudiar las curvas de tiempo de residencia (RTD) en los tres reactores diseñados. El fluido utilizado ha sido agua. Los diferentes flujos simulados han venido definidos por el número de Reynolds, número de Reynolds oscilatorio y número de Strouhal.

Se ha comprobado, dentro del rango de trabajo definido para cada reactor, como al aumentar el número de Strouhal disminuía la varianza y el tiempo medio de residencia, obteniéndose curvas más simétricas, es decir más estrechas y con menor cola. Se puede concluir que, dentro del rango de trabajo, al aumentar el número de Strouhal mejora el mezclado radial, que es lo buscado en este tipo de reactores.

Se ha determinado que para un número de Reynolds y número de Reynolds oscilatorio constante existe un rango idóneo de funcionamiento para conseguir un buen mezclado dado por el número de Strouhal. Los límites de este rango se dan para mayores números de Strouhal cuando aumenta el número de orificios.

Además se ha comprobado que la condición propuesta por el profesor Xiong-Wei Ni, que nos definía el límite máximo de número de Strouhal para un buen comportamiento del mezclado, es válida para el caso de reactor con deflector con un orificio (MH1). Sin embargo no se cumple la extrapolación para los casos con mayor número de orificios, posiblemente por la disminución de los volúmenes muertos, lo que les permite trabajar bien para límites por encima de los impuestos por esta condición.

6.2. Futuros trabajos

A continuación se muestra una serie de futuras posibles líneas de trabajo que ayudarían a completar los resultados obtenidos en el presente proyecto:

- Estudiar el comportamiento de los volúmenes muertos y de los patrones del flujo para estudiar recirculaciones internas con el fin de realizar diseños de deflectores que mejoren el mezclado.
- Completar el estudio con un mayor número de casos, sobre todo estudiando el comportamiento con diferentes números de Reynolds y números de Reynolds oscilatorio.
- Plantear el estudio con diferentes tipos de fluidos para ver cómo afectan las distintas condiciones (densidad y viscosidad) a los curvas de residencia.
- Comparar el estudio con los patrones de flujo para cada caso con el fin de obtener resultados más concluyentes.

ANEXOS

ANEXO 1 - Perfil UDF

A continuación encontramos un ejemplo de archivo UDF, utilizado para generar el perfil plano de velocidades oscilatorio:

```
#include "udf.h"
DEFINE_PROFILE(perfil-udf, thread, position)
{
face_t f;
real t = CURRENT_TIME;
begin_f_loop(f, thread)
{
F_PROFILE(f, thread, position) = 0.002009416 + 0.004018832*sin(0.16079879*t);
}
end_f_loop(f, thread)
}
```

Dónde la expresión:

$$0.002009416 + 0.004018832 \cdot \sin(0.16079879 \cdot t)$$

proviene, para unas condiciones dadas de frecuencia y amplitud de oscilación, del perfil de velocidades:

$$V(t) = V_n + 2\pi f x_0 \sin(2\pi f t)$$

donde encontramos el término de velocidad neta V_n , y otro de velocidad oscilatoria.

ANEXO 2 - Código Journal y PBS para la generación de perfiles de velocidad oscilatorios

Archivo “perfil_oscilatorio.m”

El siguiente código generado con Matlab (perfil_oscilatorio.m) nos permite generar el archivo Journal necesario para, en Fluent, realizar la extracción de los perfiles de velocidad oscilatorios producido en un reactor de cuatro pasos como se explicaba en la Memoria.

En el código aparecen comentarios explicando cada una de las variables y los pasos que se van llevando a cabo.

```
%Antes de todo, configurar el material de cada zona en Fluent.
%(este Journal no lo hace)

%Modelo

clear all
close all

ren=50; %Reynolds neto
reo=100; %Reynolds oscilatorio
st=0.159; %Strouhal
D=25e-3; %Diametro conducto (m)
H=1; %Orificios (holes)

b=96; %Número de puntos en un ciclo

rho=998.2; %Densidad (kg/m3)
mu=0.001003; %Viscosidad (kg/m.s)

x=D/(4*pi*st); %mm
f=reo*mu/(2*pi*x*rho*D); %Hz

dt=1/(f*b); %Paso de tiempo

vn=ren*mu/(rho*D); %Velocidad neta

stt=st*1000;

cont = 0; %Contador

%Nombre con el que se guardará el journal

if f<1 %Toma una precaución en el caso de que f < 1 Hz
%En principio, para nuestro caso no nos afecta, tenemos f > 1Hz
```

Anexos

```
cadena=sprintf('4celdas_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d.jou',H,ren,reo,stm);
profile=sprintf('4celdas_MH%d',H);

else

cadena=sprintf('4celdas_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d.jou',H,ren,reo,stm);
profile=sprintf('4celdas_MH%d',H);

end

fid = fopen(cadena,'w');
ff=sprintf('rc %s.cas',profile); %rc: read case
fwrite(fid,ff);
fprintf(fid,'\n'); %Retorno de carro

%Inicializamos
fwrite(fid,'/solve/initialize/initialize-flow');
fprintf(fid,'\n');

%RESOLVEMOS ESTACIONARIO. SOLUCION INCIAL

%Establecemos condición de contorno inicial
%U-neta a la entrada. Presion = 0 a la salida.

fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/zone-type');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'entrada.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'velocity-inlet');
fprintf(fid,'\n');

fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/velocity-inlet');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'entrada.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'y');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'y');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'y');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
vneta=sprintf('%d',vn);
fwrite(fid,vneta);
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
```

```

fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '/define/boundary-conditions/zone-type');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'salida');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'pressure-outlet');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '/define/boundary-conditions/pressure-outlet');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'salida');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '0');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'y');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');

%Reporting interval: cada cuanto se comprueba la convergencia

fwrite(fid, '/solve/set/reporting-interval 10'); %10
fprintf(fid, '\n');

%Resolvemos en estacionario. Solución inicial

fwrite(fid, '/solve/iterate 500');
fprintf(fid, '\n');

%RESOLVEMOS NO ESTACIONARIO

%Cargamos el perfil UDF (perfil.dat)
%Necesitamos cargarlo en el journal para que el servidor lo reconozca

fwrite(fid, '/define/user-defined/interpreted-functions');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "perfil_udf.dat");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "cpp");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '10000');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');

%Definimos el UDF como condicion de contorno en entrada

fwrite(fid, '/define/boundary-conditions/velocity-inlet');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'entrada.1.1');
fprintf(fid, '\n');

```

```

fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'udf');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"perfil_udf"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');

%Definimos modelo no estacionario

fwrite(fid,'/define/models/unsteady-2nd-order');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');

%Establecemos residuos

fwrite(fid,'/solve/monitors/residual/convergence-criteria');

fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1e-4'); %continuity
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1e-4'); %x-velocity
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1e-4'); %y-velocity
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1e-4'); %z-velocity
fprintf(fid,'\n');

%Modelo de discretización

fwrite(fid,'/solve/set/discretization-scheme mom'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'/solve/set/discretization-scheme pressure'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'12');
fprintf(fid,'\n');

```

Anexos

```
%Establecemos el paso de tiempo

f33=sprintf('/solve/set/time-step %1.6f',dt); %Paso de tiempo
fwrite(fid,f33);
fprintf(fid,'\n');

%Resolvemos los dos primeros ciclos seguidos (para evitar transitorio)

bb=2*b; %2 primeros ciclos = 2*(número de pasos de tiempo en un ciclo)

doscic=sprintf('/solve/dual-time/ %d 200',bb);
fwrite(fid,doscic);
fprintf(fid,'\n');

%Resolvemos el tercer ciclo y guardamos perfiles

for i=1:1:b

fwrite(fid,'/solve/dual-time/ 1 200'); %Resuelve 1 paso de tiempo con 200
iteraciones
fprintf(fid,'\n');

%Guardamos el perfil de velocidad

fwrite(fid,'/file/write-profile'); %Escribe el perfil para cada paso de
tiempo
fprintf(fid,'\n');
perfil=sprintf('perfil_%d_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d',i,H,ren,reo,sto);
%Nombre con el que se guarda el perfil
fwrite(fid,perfil);
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'interior-20'); %Indicamos que perfil guardamos
fprintf(fid,'\n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'x-velocity'); %Indicamos que variables guardar
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'y-velocity');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'z-velocity');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'q'); %No más variables: q=quit
fprintf(fid,'\n');

cont = cont + 1;

%Guardamos archivo Tecplot

    fwrite(fid,'file/export/tecplot');
    fprintf(fid,'\n');

tecplot=sprintf('TEC_prueba_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d_perfil_%d',H,ren,reo,sto,cont);
ff=sprintf('%s.plt',tecplot);
fwrite(fid,ff);
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'plane-transversal'); %Nombre seccion
```

Anexos

```
fprintf(fid, '\n');  
fprintf(fid, '\n');  
fwrite(fid, 'x-velocity');  
fprintf(fid, '\n');  
fwrite(fid, 'y-velocity');  
fprintf(fid, '\n');  
fwrite(fid, 'z-velocity');  
fprintf(fid, '\n');  
fwrite(fid, 'velocity-magnitude');  
fprintf(fid, '\n');  
fwrite(fid, 'q');  
fprintf(fid, '\n');
```

end

Archivo PBS

A continuación se muestra el archivo PBS necesario para correr nuestro caso en el servidor de la UPCT.

```
#!/bin/bash  
#PBS -lnodes=2:ppn=8  
#PBS -m e  
#PBS -M canoasis@hotmail.es  
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 $PBS_O_WORKDIR  
/share/apps/Fluent.Inc/bin/fluent 3ddp -t${NB} -ssh -pethernet -  
cnf=${PBS_NODEFILE} -g -i 4celdas_MH1_Ren50_Reo100_St1590.jou >  
4celdas_MH1_Ren50_Reo100_St1590-${NB}-procs.out
```

ANEXO 3 - Código Journal y PBS para la simulación del transporte de trazador en un OBR

El siguiente código generado con Matlab consta de tres partes. Nos permite, en Fluent, la simulación de un reactor con flujo oscilatorio en el que se inyecta un trazador, como se explicaba en la Memoria.

Primero tenemos el programa “casos_obr.m” dónde se introducen las características de cada reactor, datos del servidor y se configura el número de pasos por ciclo. A su vez, este programa llama a otros dos:

- “journal_obr.m”: que genera el archivo Journal para la simulación.
- “pbs_obr.m”: que genera el archivo pbs necesario para correr el caso en el servidor:

En los códigos aparecen comentarios explicando cada una de las variables y los pasos que se van llevando a cabo.

Archivo “casos_obr.m”

```
clear all
close all

%Datos fluido
rho=998.2; %Densidad (kg/m3)
mu=0.001003; %Viscosidad (kg/m·s)

%SERVIDOR UNIVERSIDAD
node=2; %labmach.upct.es
core=8; %labmach.upct.es

%Datos reactor

D=25e-3; %Diametro conducto (m)
H=1; %Orificios (holes)
C=3; %Número de ciclos

%Características del flujo

ren=50; %Reynolds neto
reo=500; %Reynolds oscilatorio
st=0.159; %Strouhal

un=ren*mu/(rho*D); %Velocidad neta

b=96; %Número de puntos en un ciclo
N=b/2; % Número de puntos en un semiciclo
```

Anexos

```
%N junto con f, nos dará el paso de tiempo a usar: dt=1/(2*f(k,h)*N)
it=200; % Iteraciones por paso de tiempo

cont=0; %Contador a cero para empezar a guardar archivos Tecplot

%x0: Amplitud de oscilacion, calculada a partir de D y St
%f: Frecuencia de oscilacion, calculada a partir de Reo

x0=D/(4*pi*st); %mm
f=reo*mu/(2*pi*x0*rho*D); %Hz

dt=1/(2*f*N); %Paso de tiempo

dur=C/f; %Duración de todos los ciclos

%Gráfica

t=dt:dt:dur; %Tiempo. Empezamos en 0+dt
u = un + 2*pi*f*x0*sin(2*pi*f*t); %'u' dependiente de 't'
uini=un; %+2*pi*f*x0; %Velocidad inicial (Velocidad máxima) la definimos
ya que 'u' viene definida a partir de 'dt'

plot(0,uini*1000,'r.') %Gráfica de uini
hold on
plot(t,u*1000,'k.')
```

%Gráfica de la senoide de la velocidad

```
hold on

%Llamamos al programa que genera el archivo Journal

journal_obr(b,ren,reo,st,dt,f,it,rho,D,un,uini,H,cont);

%Llamamos al programa que calcula el archivo pbs

pbs_obr(H,ren,reo,st,node,core);

end

end
```


Archivo journal_obr.m

```
function[]=journal_obr(b,ren,reo,st,dt,f,it,rho,D,un,uini,H,cont)

stt = st*10000;

cadena=sprintf('JOURNAL_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d.jou',H,ren,reo,stt);
profile=sprintf('reactor_MH%d',H);

%Abrimos el archivo "reactor_MH.. .cas"

fid = fopen(cadena,'w'); %'w' Delete the contents of an existing file or
create a new file, and open it for writing.

%Read Case and Data

ff=sprintf('rc %s.cas',profile); % %s: cadena de caracteres

fwrite(fid,ff);
fprintf(fid,'\n');

%Primero resolvemos en ESTACIONARIO con Umax (Solucion inicial: uini)

%Creamos material agua

fwrite(fid,'/define/materials/copy');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'water-liquid');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'/define/materials/change-create');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'water-liquid');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'agua');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
```

```
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');

%Establecemos fluido agua

fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/fluid');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'agua');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');

%Copiamos agua al resto de fluido

fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/copy-bc');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
```

```

fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'fluid.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1.1');
fprintf(fid,'\n');

%Ahora también al trazador (aún no inyectado)

for p=1:H %Seleccionamos todos los orificios donde se inyecta trazador
(según deflector)

    traz1=sprintf('trazador_%d',p);
    fwrite(fid,traz1);
    fprintf(fid,'\n');

end

fwrite(fid,'()');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'quit');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'quit');
fprintf(fid,'\n');

%SOLUCIÓN INICIAL

%Tipo de condición de contorno a la entrada y salida

fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/zone-type');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'entrada');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'velocity-inlet');
fprintf(fid,'\n');

fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/zone-type');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'salida');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'pressure-outlet');
fprintf(fid,'\n');

```

```

%Condicion de contorno salida

fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/pressure-outlet');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'salida');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'y');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');

%Condicion de contorno entrada y salida

fwrite(fid,'file/read-profile');
fprintf(fid,'\n');
ff3=sprintf('perfil_21_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d',H,ren,reo,stt);

%Comenzamos con el perfil 24 (Vmax) (para mejorar convergencia)

fwrite(fid,ff3);
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'quit');
fprintf(fid,'\n');

%Cargamos perfil a la entrada

fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/velocity-inlet');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'entrada');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"interior-20"); %(nombre con el carga el perfil)
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"x-velocity");
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');

```

```

fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "interior-20");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "y-velocity");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "interior-20");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "z-velocity");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'quit');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'quit');
fprintf(fid, '\n');

%Inicializamos

fwrite(fid, '/solve/initialize/initialize-flow');
fprintf(fid, '\n');

%Establecemos residuos

fwrite(fid, '/solve/monitors/residual/convergence-criteria');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %continuity
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %x-velocity
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %y-velocity
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %z-velocity
fprintf(fid, '\n');

%Modelo de discretización

fwrite(fid, '/solve/set/discretization-scheme mom'); %
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '0');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '/solve/set/discretization-scheme pressure'); %
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '10');
fprintf(fid, '\n');

%Factores de subrelajación

fwrite(fid, '/solve/set/under-relaxation mom'); %
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '0.4');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '/solve/set/reporting-interval 10');
fprintf(fid, '\n');

```

Anexos

```
%Solución en estacionario

fwrite(fid, '/solve/iterate 400');
fprintf(fid, '\n');

%RESOLVEMOS NO ESTACIONARIO (con trazador)

%Creamos material agua-trazador

fwrite(fid, '/define/materials/copy');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'fluid');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'water-liquid');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'h2o-trazador');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '/define/materials/change-create');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'water-liquid');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'agua-trazador');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');

%Modelo Species Transport

fwrite(fid, '/define/model/species/species-transport yes mixture-
template');
fprintf(fid, '\n');

%Desactivamos la opción inlet-diffusion
fwrite(fid, '/define/model/species/inlet-diffusion');
```

Anexos

```
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');

%Desactivamos la opción Diffusion-energy-source
fwrite(fid, '/define/model/species/diffusion-energy-source');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');

    %Creamos material mixture (agua + agua-trazador)

fwrite(fid, '/define/materials/change-create');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'mixture-template');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'mixture');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '2');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'agua-trazador');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'agua');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '0');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '0');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'volume-weighted-mixing-law');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'mixing-law');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'mass-weighted-mixing-law');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'mass-weighted-mixing-law');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'constant-dilute-appx');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '2.299e-9');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
```

Anexos

```
fwrite(fid,'yes');

fprintf(fid,'\n');

%Definimos modelo no estacionario (de primer orden)

fwrite(fid,'/define/models/unsteady-1st-order');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');

%Intervalo de reporte

fwrite(fid,'/solve/set/reporting-interval 10');
fprintf(fid,'\n');

%Resolvemos el primer ciclo sin inyectar aún el trazador para evitar el
transitorio

%Factor subrelajación

fwrite(fid,'/solve/set/under-relaxation species-0'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'/solve/set/under-relaxation mom'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0.4');
fprintf(fid,'\n');

t=1;

%f3: Funcion para establecer paso de tiempo(dt)

f3=sprintf('/solve/set/time-step %1.6f',dt);
fwrite(fid,f3);
fprintf(fid,'\n');

%RESOLVEMOS PRIMER CICLO

for t=24:96 %primer ciclo, comenzando desde el perfil 21

cont=cont+1;

%Condiciones de contorno entrada/salida (oscilatorio)

%Cargamos el perfil en cada instante de tiempo

fwrite(fid,'file/read-profile');
fprintf(fid,'\n');
f1=sprintf('perfil_%d_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d',t,H,ren,reo,sto);
fwrite(fid,f1);
fprintf(fid,'\n');
```



```

%Pegamos perfil a la entrada

    fwrite(fid, '/define/boundary-conditions/velocity-inlet');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'entrada');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'no');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'no');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "interior-20"); %(nombre con el que carga el perfil)
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "x-velocity");
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'no');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "interior-20");
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "y-velocity");
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'no');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "interior-20");
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "z-velocity");
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'no');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, '0'); %agua-trazador mass fraction
    fprintf(fid, '\n');

    %Solve dual-time-iterate

    f4=sprintf('/solve/dual-time-iterate %d %d',1,it); %it: numero de
iteraciones-->ver export_casos

    fwrite(fid, f4);
    fprintf(fid, '\n');

end

cont=0;

```

Anexos

```
%Definimos modelo no estacionario (de segundo orden)

fwrite(fid,'/define/models/unsteady-2nd-order');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');

%Modelo discretización transporte de especies

fwrite(fid,'/solve/set/discretization-scheme species-0'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'/solve/set/discretization-scheme mom'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'/solve/set/discretization-scheme pressure'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'10');
fprintf(fid,'\n');

%Factores de subrelajación

fwrite(fid,'/solve/set/under-relaxation species-0'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0.8');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'/solve/set/under-relaxation mom'); %
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0.8');
fprintf(fid,'\n');

%RESOLVEMOS SEGUNDO CICLO (Aún sin trazador)

for t=1:96 %1 ciclo

%Condiciones de contorno entrada/salida (oscilatorio)

    %Cargamos el perfil en cada instante de tiempo

    fwrite(fid,'file/read-profile');
    fprintf(fid,'\n');
    fl=sprintf('perfil_%d_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d',t,H,ren,reo,sto);
    fwrite(fid,fl);
    fprintf(fid,'\n');

    %Pegamos perfil a la entrada

    fwrite(fid,'/define/boundary-conditions/velocity-inlet');
    fprintf(fid,'\n');
    fwrite(fid,'entrada');
    fprintf(fid,'\n');
    fwrite(fid,'no');

    fprintf(fid,'\n');
```

```

fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"interior-20"'); % (nombre con el que carga el perfil)
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"x-velocity"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"interior-20"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"y-velocity"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"interior-20"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"z-velocity"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'no');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'0'); %agua-trazador mass fraction
fprintf(fid,'\n');

%Solve dual-time-iterate

f4=sprintf('/solve/dual-time-iterate %d %d',1,it);
fwrite(fid,f4);
fprintf(fid,'\n');

end

%INYECTAMOS TRAZADOR (según número de orificios)

for p=1:H %Inyectamos en todos los orificios (según tipo deflector)

    traz=sprintf('/solve/patch trazador_%d () species-0 1',p);
    %species-0 : agua-trazador
    fwrite(fid,traz);
    fprintf(fid,'\n');

end

%Establecemos los residuos

```

```

fwrite(fid, '/solve/monitors/residual/convergence-criteria');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %continuity
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %x-velocity
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %y-velocity
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %z-velocity
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1e-4'); %agua-trazador
fprintf(fid, '\n');

t=0;

%Define Surface Monitor - Residence Time Distribution

%Monitor entrada

fwrite(fid, '/solve/monitors/surface/set-monitor');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'monitor-entrada');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "Area-Weighted Average");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'concentration-agua-trazador');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'entrada');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '()');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "monitor-0");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'flow-time');
fprintf(fid, '\n');

%Monitor entrada-FLOW

fwrite(fid, '/solve/monitors/surface/set-monitor');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'monitor-flow-entrada');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "Flow Rate");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'agua-trazador');

fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'entrada');

```

Anexos

```
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '(');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'y');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "monitor-flow-0");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'y');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'flow-time');
fprintf(fid, '\n');

%Monitor 14 superficies interiores

for g=1:14

    fwrite(fid, '/solve/monitors/surface/set-monitor');
    fprintf(fid, '\n');
    mon1=sprintf('monitor-%d',g);
    fwrite(fid, mon1);
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "Area-Weighted Average");
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'concentration-agua-trazador');
    fprintf(fid, '\n');
    mon2=sprintf('seccion%d',g);
    fwrite(fid, mon2);
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, '(');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'no');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'no');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes');
    fprintf(fid, '\n');
    mon3=sprintf('monitor-%d',g);
    fwrite(fid, mon3);
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, '1');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'flow-time');
    fprintf(fid, '\n');

end

%Monitor 14 superficies interiores-FLOW

for g=1:14
```

```

fwrite(fid, '/solve/monitors/surface/set-monitor');
fprintf(fid, '\n');
mon1=sprintf('monitor-flow-%d',g);
fwrite(fid, mon1);
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "Flow Rate");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'agua-trazador');
fprintf(fid, '\n');
mon2=sprintf('seccion%d',g);
fwrite(fid, mon2);
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '()');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'n');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'y');
fprintf(fid, '\n');
mon3=sprintf("monitor-flow-%d",g);
fwrite(fid, mon3);
fprintf(fid, '\n');
%iter2=sprintf('%d',it); % Guarda cada "it" iteraciones = 1 time step
%fwrite(fid, iter2);
%fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'y');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'flow-time');
fprintf(fid, '\n');

end

%Monitor salida

fwrite(fid, '/solve/monitors/surface/set-monitor');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'monitor-salida');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, "Area-Weighted Average");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'concentration-agua-trazador');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'salida');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '()');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'no');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'yes');
fprintf(fid, '\n');

fwrite(fid, "monitor-15");
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '1');
fprintf(fid, '\n');

```

Anexos

```
fwrite(fid,'yes');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'flow-time');
fprintf(fid,'\n');

%Monitor salida-FLOW

fwrite(fid,'/solve/monitors/surface/set-monitor');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'monitor-flow-salida');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"Flow Rate"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'agua-trazador');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'salida');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'()');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'n');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'y');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'"monitor-flow-15"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'1');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'y');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'flow-time');
fprintf(fid,'\n');

%Guardamos archivo .dat INICIAL (antes de resolver con el trazador
%inyectado)
fwrite(fid,'file/write-data');
fprintf(fid,'\n');
data=sprintf('DATA_INICIAL_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d',H,ren,reo,stt);
fwrite(fid,data);
fprintf(fid,'\n');

%Guardamos archivo .cas INICIAL
fwrite(fid,'file/write-case');
fprintf(fid,'\n');
data=sprintf('CASE_INICIAL_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d',H,ren,reo,stt);
fwrite(fid,data);
fprintf(fid,'\n');

%Tecplot antes de resolver con trazador
fwrite(fid,'file/export/tecplot');
fprintf(fid,'\n');

tecplot=sprintf('TEC_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d_1',H,ren,reo,stt);
%ciclo%d -- k
ff=sprintf('%s',tecplot);
fwrite(fid,ff);
```

Anexos

```
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'plano-transversal'); %Nombre sección
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, '()'); %No más secciones
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'velocity-magnitude');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'concentration-agua-trazador');
fprintf(fid, '\n');
fwrite(fid, 'q');
fprintf(fid, '\n');

%RESOLVEMOS CON EL TRAZADOR INYECTADO

for k=1:100 %número total de ciclos que se simularán

    for t=1:96 %1 ciclo

        cont=cont+1;

    %Condiciones de contorno entrada/salida (oscilatorio)

        %Cargamos el perfil en cada instante de tiempo

        fwrite(fid, 'file/read-profile');
        fprintf(fid, '\n');
        fl=sprintf('perfil_%d_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d', t, H, ren, reo, stt);
        fwrite(fid, fl);
        fprintf(fid, '\n');

        %Pegamos perfil a la entrada

        fwrite(fid, '/define/boundary-conditions/velocity-inlet');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'entrada');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'no');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'yes');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'yes');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'yes');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'yes');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'no');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, "interior-20"); %(nombre con el que carga el perfil)
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, "x-velocity");

        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'yes');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'no');
        fprintf(fid, '\n');
```



```

    fwrite(fid, "interior-20" ');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "y-velocity" ');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'yes' ');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, 'no' ');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "interior-20" ');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, "z-velocity" ');
    fprintf(fid, '\n');
    fwrite(fid, '0' '); %agua-trazador mass fraction
    fprintf(fid, '\n');

    %Solve dual-time-iterate
    f4=sprintf('/solve/dual-time-iterate %d %d',1,it);
    fwrite(fid,f4);
    fprintf(fid, '\n');

    %Guardamos archivos de Tecplot

    pasos=4; %cada cuantos pasos de tiempo se guarda el archivo

    e=cont/pasos;

    if e==round(e)

        %Tecplot
        fwrite(fid, 'file/export/tecplot' ');
        fprintf(fid, '\n');

        tecplot=sprintf('TEC_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d_%d', H, ren, reo, stt, cont);

        ff=sprintf('%s', tecplot);
        fwrite(fid, ff);

        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'plano-transversal' '); %Nombre sección
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, '()'); %No más secciones
        fprintf(fid, '\n');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'velocity-magnitude' ');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'concentration-agua-trazador' ');
        fprintf(fid, '\n');
        fwrite(fid, 'q' ');
        fprintf(fid, '\n');
    end
    end
    end

    %Guardamos archivo .dat al finalizar la simulación

    fwrite(fid, 'file/write-data' ');
    fprintf(fid, '\n');
    data=sprintf('DATA_FINAL_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d', H, ren, reo, stt);

```

Anexos

```
fwrite(fid,data);  
fprintf(fid,'\n');  
  
%Terminamos  
  
fwrite(fid,'q');  
fprintf(fid,'\n');  
fwrite(fid,'exit');  
fprintf(fid,'\n');  
fwrite(fid,'yes');  
fprintf(fid,'\n');  
fclose(fid);
```

Archivo "pbs_obr.m"

```

function[]=pbs_obr(H,ren,reo,st,node,core)

stt=st*10000;

cadena=sprintf('MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d.pbs',H,ren,reo,stt);
profile=sprintf('JOURNAL_MH%d_Ren%d_Reo%d_St%d',H,ren,reo,stt);

define=sprintf('#PBS -lnodes=%d:ppn=%d',node,core);
fid = fopen(cadena,'w');
fwrite(fid,'#!/bin/bash');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,define);
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'#PBS -m e');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'#PBS -M canoasis@hotmail.es');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'cd $PBS_O_WORKDIR');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'NB=`wc -l $PBS_NODEFILE | awk '{print $1}'``');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'ulimit -l unlimited');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'# echo "Numero de procesos: $NB"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'# echo "En los nodos:"');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'# cat $PBS_NODEFILE');
fprintf(fid,'\n');
fwrite(fid,'cd $PBS_O_WORKDIR');
fprintf(fid,'\n');
ff=sprintf('/share/apps/Fluent.Inc/bin/fluent 3ddp -t${NB} -ssh -
pethernet -cnf=${PBS_NODEFILE} -g -i %s.jou > %s-${NB}-
procs.out',profile,profile);
fwrite(fid,ff);

fclose(fid);

```

ANEXO 4 - Videos con TECPLOT 360

En el cd adjunto a este proyecto se pueden encontrar diversos videos de las simulaciones realizadas en este proyecto.

Para realizar estos videos se ha utilizado TECPLOT 360, un software de visualización que permite el post-procesado de los datos obtenidos mediante simulación numérica. Además se pueden realizar animaciones de estos resultados, lo que facilita la visualización de los casos.

En este proyecto se han realizado diferentes videos:

Dispersión del trazador

Se han realizado videos de las simulaciones donde se observa la dispersión del trazador durante los 2 primeros minutos desde la inyección.

En el CD adjunto a este PFC encontramos los videos que aparecen en la siguiente tabla:

Reactor	Número de Srouhal	Nombre archivo
MH1	0.0796	Trazador_MH1_St0796
	0.106	Trazador_MH1_St106
	0.159	Trazador_MH1_St159
	0.420	Trazador_MH1_St420
MH3	0.0796	Trazador_MH3_St0796
	0.138	Trazador_MH3_St138
	0.184	Trazador_MH3_St184
	0.276	Trazador_MH3_St276
	0.420	Trazador_MH3_St420
MH7	0.0796	Trazador_MH7_St0796
	0.210	Trazador_MH7_St210
	0.280	Trazador_MH7_St280
	0.420	Trazador_MH7_St420

Tabla 19. Denominación de los videos de las simulaciones

BIBLIOGRAFÍA

- [1] **FLUENT 6.3 User's Guide**
- [2] **Evaluation of axial dispersion and mixing performance in oscillatory baffled reactors using CFD**
Mikko Manninen, Elena Gorshkova, Kirsi Immonena and Xiong-Wei Ni
- [3] **The quantitative description of fluid mixing using Lagrangian- and concentration-based numerical approaches**
M.R. Mackley, R.M.C. Neves Saraiva
- [4] **The simulation of stretch rates for the quantitative prediction and mapping of mixing within a channel flow**
E.P.L. Robert and M.R. Mackley
- [5] **Development and evaluation of novel designs of continuous mesoscale oscillatory baffled reactors**
Anh N. Phan, Adam Harvey
- [6] **Characterisation of mesoscale oscillatory helical baffled reactor—
Experimental approach**
Anh N. Phan, Adam P. Harvey
- [7] **Continuous flow systems. Distribution of residence times**
P. V. Danckwerts (1953)
- [8] **Chemical Reaction Engineering**
Octave Levenspiel
- [9] **Handbook of Industrial Mixing**
Edward L. Paul, Victor A. Atiemo-Obeng and Suzanne M. Kresta
- [10] **Mixing, chaotic advection and turbulence**
J.M. Ottino

