

Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

Estudio numérico del transporte de trazadores en reactores de flujo oscilatorio con elementos insertados

Titulación: Ingeniero Industrial

Intensificación:

Alumno: Álvaro Pascual Toledano

Director: Juan Pedro Solano Fernández

Cartagena, 9 de octubre de 2013

INDICE GENERAL

1-	GENERALIDADES EN REACTORES DE FLUJO OSCILATORIO	4
1.1	CONDICIONES GENERALES:.....	4
1.2	MECANISMO DE MEZCLA	7
1.3	VENTAJAS, LIMITACIONES Y ALGUNAS APLICACIONES.	8
1.4	PARÁMETROS ADIMENSIONALES CARACTERÍSTICOS.	10
1.5	TRABAJOS PREVIOS, DESDE PRINCIPIOS DE LA DÉCADA DE LOS 90 HASTA HOY.	11
1.6	COLUMNAS DE FLUJO OSCILATORIO. APORTACIONES DE XIONG- WEI NI.	13
2-	TECNICA DE INYECCION DE TRAZADORES	15
2.1	INTRODUCCIÓN.....	15
2.2	CARACTERÍSTICAS DEL RTD (RESIDENCE TIME DISTRIBUTION).....	15
2.3	CARACTERÍSTICAS GENERALES DEL MOVIMIENTO.	18
2.3.1	<i>Características del flujo “pistón” ó “plug flow”</i>	19
2.3.2	<i>Evaluación del tipo de flujo desarrollado.</i>	20
2.3.3	<i>Formas adimensionales</i>	21
2.3.3.1	Flujo dispersivo:	21
2.3.3.2	Flujo convectivo.	23
3-	METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN NUMÉRICA EN FLUENT.....	26
3.1	ECUACIONES MATEMÁTICAS DEL CAMPO FLUIDO.	26
3.2	HIPÓTESIS DE SIMULACIÓN	28
3.2.1	<i>Esquemas numéricos</i>	28
3.2.1.1	Solver segregado	28
3.2.1.2	Solver acoplado	29
3.2.1.3	Llinealización: Formulación implícita y explícita.....	30
3.2.2	<i>Esquemas de interpolación y discretización</i>	32
3.2.2.1	Esquemas de discretización.....	33
3.2.2.1.1	Esquemas upwind de primer orden	33
3.2.2.1.2	Ley exponencial	33
3.2.2.1.3	Esquema upwind de segundo orden	34
3.2.2.1.4	Esquema QUICK.....	34
3.2.2.1.5	Forma linealizada de las ecuaciones discretizadas	35
3.2.2.1.6	Factores de subrelajación.....	35
3.2.2.1.7	Evaluación de las derivadas.....	36
3.2.2.2	Elección de los esquemas de discretización	36
3.2.2.2.1	Esquemas de primer orden vs. esquemas de de segundo orden	36
3.2.2.2.2	Otros esquemas de discretización.....	37
3.2.2.3	Esquemas de interpolación en el solver segregado	37
3.2.2.3.1	Discretización de la ecuación de cantidad de movimiento.....	37
3.2.2.3.2	Esquemas de interpolación de la presión	38
3.2.2.3.3	Discretización de la ecuación de continuidad.....	38
3.2.2.3.4	Esquema de interpolación de la densidad.....	39
3.2.2.3.5	Acoplamiento presión velocidad	40
3.2.2.4	Elección de los esquemas de interpolación en el solver segregado.	40
3.2.2.4.1	Esquema de interpolación de presiones.....	40
3.2.2.4.2	Esquema de interpolación de densidades	40
3.2.2.4.3	Acoplamiento presión-velocidad.....	40
3.3	TRANSPORTE DE ESPECIES	41
3.3.1	<i>Reacciones Volumétricas</i>	41
3.3.1.1	Ecuaciones del transporte de especies	41
3.3.1.2	Difusión másica en flujo laminar.	42

3.3.1.3	Difusión másica en flujo turbulento	42
3.3.1.4	Tratamiento del transporte de especies en la ecuación de la energía	42
3.4	CONDICIONES DECONTORNO	43
3.5	CONVERGENCIA ITERATIVA.....	44
3.5.1	<i>Residuos</i>	45
3.6	DEFINICIÓN DE LA GEOMETRÍA Y DOMINIO COMPUTACIONAL	45
3.6.1	<i>Diseño del mallado en Gambit</i>	45
3.6.1.1	Generación del mallado	47
3.6.1.2	Generación de un paso del muelle.....	54
3.6.2	<i>Diseño y configuración en Fluent</i>	55
3.6.2.1	Carga del paso en Fluent	55
3.6.2.2	Construcción de la geometría del tubo.	58
3.6.3	CONFIGURACIÓN DE UN CASO EN FLUENT	61
3.6.3.1	Modelado del transporte de especies.....	61
3.6.3.2	Definición del método de inyección.....	65
3.7	METODOLOGÍA PARA LA RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA.	67
3.7.1	PROCEDIMIENTO GENERAL CASO ESTACIONARIO	67
3.7.1.1	Definición de condiciones periódicas en la entrada y la salida:	68
3.7.1.2	Obtención del perfil de velocidades en el plano central.	69
3.7.1.3	Carga del perfil en el tubo de 25 pasos.	70
3.7.2	Procedimiento general caso oscilatorio	71
3.7.2.1	Mecanismo generador de la oscilación.	71
3.7.2.2	Reynolds oscilatorio y número de Strouhal.....	72
3.7.2.3	Perfil de velocidades oscilatorio.....	73
3.7.2.4	Procedimiento general:.....	74
4-	PUESTA A PUNTO Y VALIDACIÓN DE LA TÉCNICA.	75
4.1	INTRODUCCIÓN.....	75
4.2	REGIÓN CONVECTIVA:	76
4.2.1	<i>CASO 1: TUBO MUY CORTO</i>	78
4.2.2	<i>CASO 2: TUBO CORTO</i>	80
4.2.3	<i>CASO 3:</i>	81
4.3	ZONA DE DISPERSIÓN PURA:.....	83
4.3.1	<i>CASO 4 : "REGIÓN DE TAYLOR"</i>	84
4.3.2	<i>CASO 5: "REGIÓN DE ARIS"</i>	86
5-	RESULTADOS 3D: ESTACIONARIO Y OSCILATORIO	88
5.1	INTRODUCCIÓN.....	88
5.2	RESULTADOS CON FLUJO ESTACIONARIO	88
5.3	ZONAS DE MEDIDA DEL TRAZADOR.....	89
5.4	RESULTADOS FLUJO OSCILATORIO.....	94
5.5	COMPARATIVA ESTACIONARIO VS OSCILATORIO	97
5.6	IMÁGENES DE LA DISPERSIÓN DEL TRAZADOR.	99
6-	CONCLUSIONES	100
6.1	VALIDACIÓN DE LA TÉCNICA DE INYECCIÓN DE TRAZADORES.	100
6.2	RESULTADOS 3D, ESTACIONARIO Y OSCILATORIO	100
7-	ANEXO I	102
7.1	INTRODUCCIÓN.....	102
7.2	CASO ESTACIONARIO.....	102

1- GENERALIDADES EN REACTORES DE FLUJO OSCILATORIO

1.1 Condiciones generales:

Supóngase para el análisis el flujo de un fluido con unas propiedades de densidad y viscosidad características, que fluye por el interior de un tubo de diámetro interior d_t y avanza con una velocidad media U_{med} , ahora bien, se puede añadir a este flujo principal una componente oscilatoria, cuyo valor de velocidad máximo sea $u_0 = 2 \cdot \pi \cdot f \cdot x_0$ donde x_0 es la amplitud de la onda oscilatoria y f la frecuencia.

Esta composición recibe el nombre de **flujo oscilatorio puro** (pure oscillatory flow, POF).

También se pueden introducir elementos de distintas secciones en el interior del ducto, como pueden ser espiras, anillos concéntricos al tubo, etc, estos elementos han de estar equiespaciados, con ellos se obtendrá el **flujo oscilatorio con orificios deflectores** (oscillatory baffled flow, OBF). Los dispositivos de mezcla que generan estos flujos oscilatorios se denominan (Oscillatory baffled column, OBC).

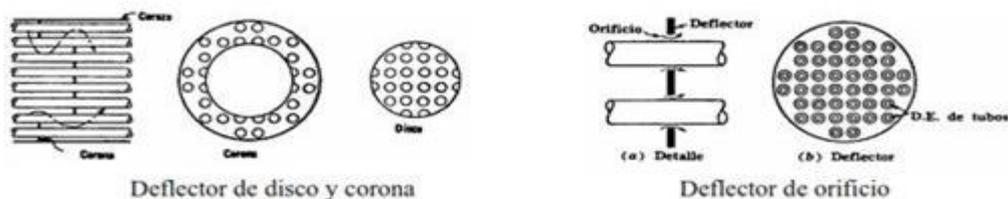


Figura 1-1: Deflectores de orificio, disco y corona



Figura 1-2: Ejemplos de deflectores utilizados

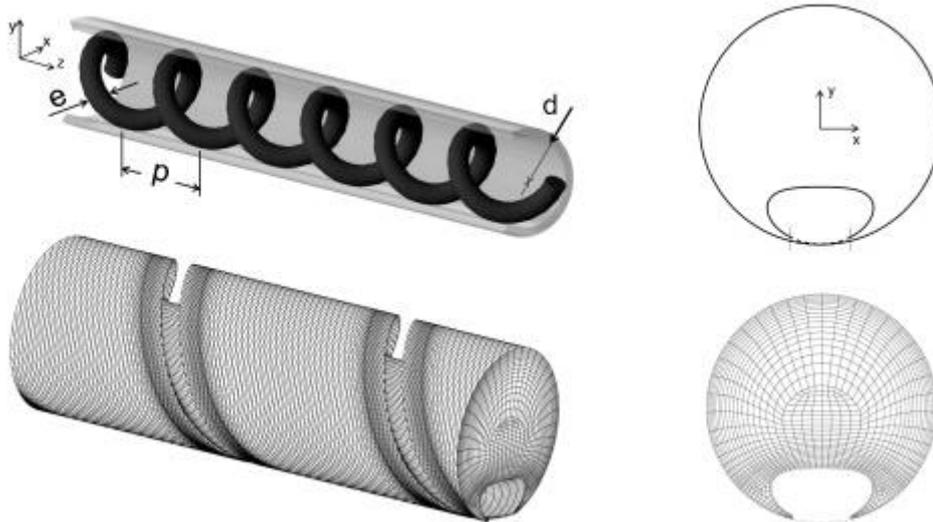


Figura 1-3: Mallado y diseño de un tubo 3D

El objetivo de estos deflectores es crear un mejor mezclado en el interior del tubo con la estrangulación y relajación de la sección del tubo que genera una recirculación en las proximidades de estos elementos lo cual afecta al flujo general. Este efecto se cuantifica mediante el cálculo del “ratio de constricción” que se calcula como:

$$CR = \frac{A_{def}}{A_t} \quad \text{Ec- 1.1}$$

DONDE A_{DEF} ES LA SECCIÓN EFECTIVA CON EL DEFLECTOR Y A_T LA SECCIÓN TOTAL SIN DEFLECTORES.

Por su parte, el flujo que circula por el interior de la columna está compuesto por un **flujo neto**, caracterizado por una velocidad u_{net} constante a lo largo del tiempo, sobre el que se superpone un **flujo oscilatorio**, cuya velocidad u_{osc} sigue una ley sinusoidal con el tiempo. En la práctica, la magnitud de la componente oscilatoria es muy superior a la magnitud de la componente neta:

$$U_{osc} = 2 \cdot \pi \cdot f \cdot x_0 \sin(2 \cdot \pi \cdot f \cdot x_0 \cdot t) \quad \text{Ec- 1.2}$$

$$U_t = U_{osc} + U_{net} \quad \text{Ec- 1.3}$$

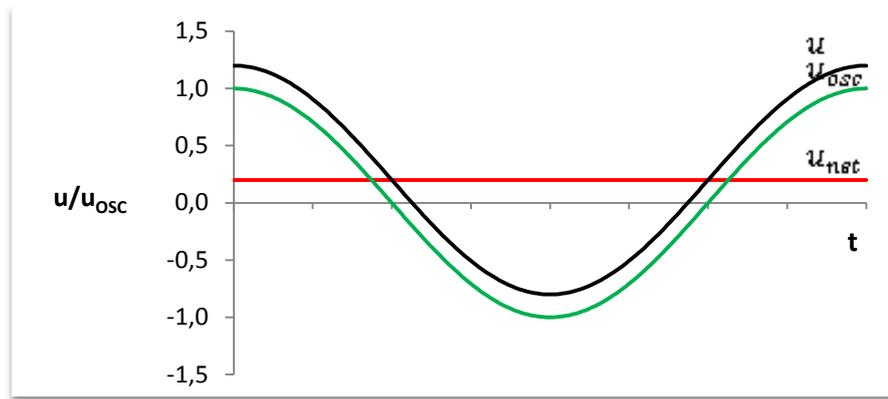


Figura 1-4: Composición de velocidades onda oscilatoria más flujo neto

Este flujo oscilatorio se genera mediante el accionamiento de un pistón que con su movimiento longitudinal X en la dirección del flujo.

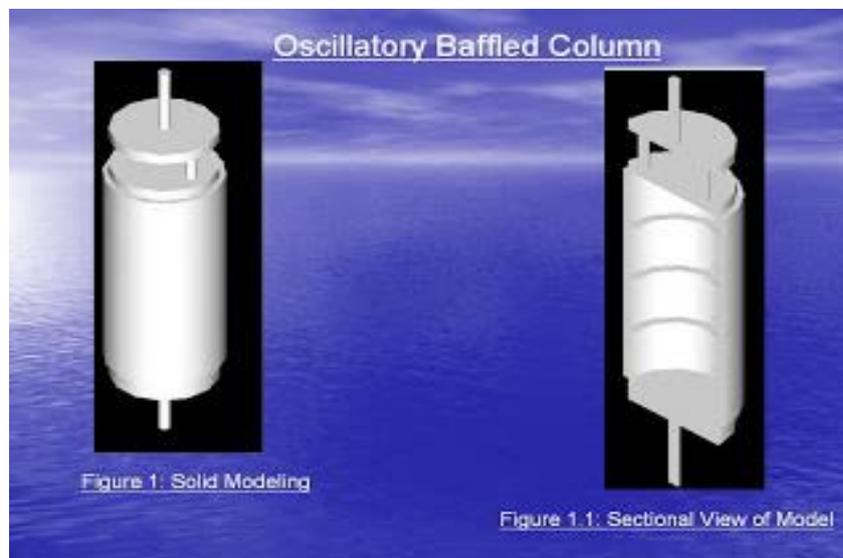


Figura 1-5: Pistón generador de la oscilación

Este pistón puede mover tanto el flujo como directamente los elementos deflectores para generar el movimiento oscilatorio.

Los reactores tipo **Oscillatory baffled reactor (OBR)** son en los que se produce una reacción química en su interior.

Estos reactores se conocen con el nombre genérico **reactores de flujo oscilatorio** (oscillatory flow reactors, **OFR**).

Según modo de funcionamiento puede ser de dos tipos:

- 1- Reactor de **flujo discontinuo** (batch oscillatory baffled reactor , BOBR).
En estos reactores se carga una cantidad de volumen de reactivos limitada por tanto tienen procesos de carga, reacción, descarga, limpieza, etc.
- 2- Reactor de **flujo continuo** (continuos oscillatory baffled reactor, COBR).

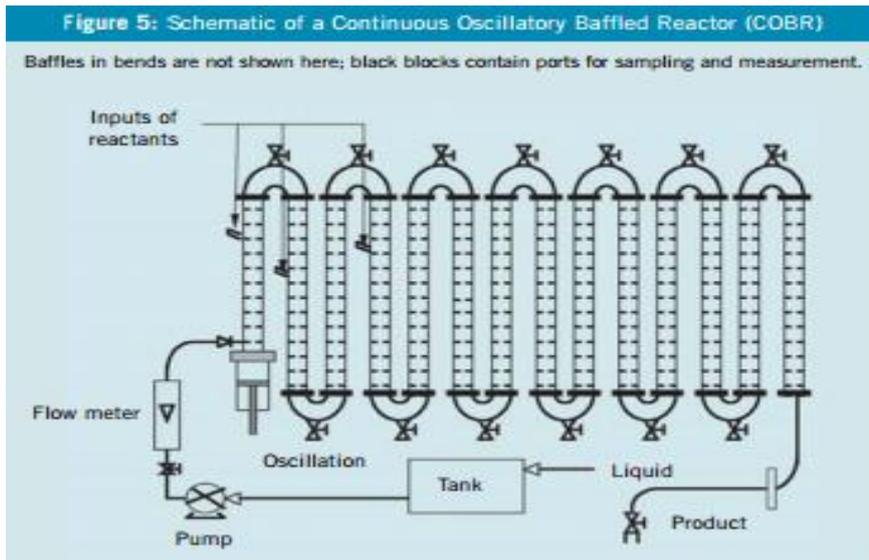


Figura 1-6: Esquema de funcionamiento en un reactor de flujo continuo

Como se puede apreciar en el esquema, se tiene una bomba que genera el flujo continuo, un pistón que crea la componente oscilatoria y en el interior de los tubos se aprecian los deflectores, este es un reactor de flujo continuo pues la bomba toma los reactivos del tanque y bombea continuamente, los reactantes se inyectan directamente en los tubos.

1.2 Mecanismo de mezcla

Los deflectores y la componente oscilatoria genera un mezclado eficaz, en la siguiente imagen se muestran los remolinos formados tras los deflectores, en este caso se trata del paso de un muelle.

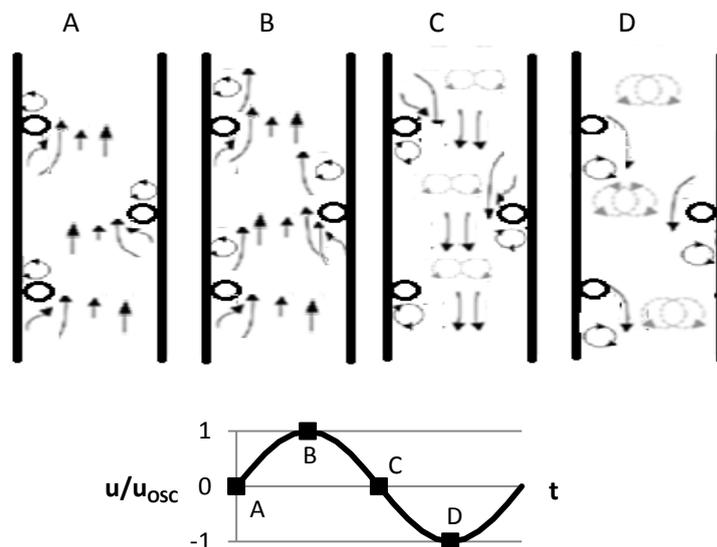


Figura 1-7: Líneas del sentido de flujo según el punto de la onda oscilatoria

Se puede observar los diferentes vórtices de velocidad que se genera al cambiar de sentido la dirección del flujo cuando la onda está en su zona negativa.

Estos torbellinos o vórtices de velocidad se van generando de forma homogénea con el tiempo pues se repiten en cada ciclo y paso de tiempo. Se puede ver como los vórtices se alejan del deflector según aumenta el valor de la amplitud.

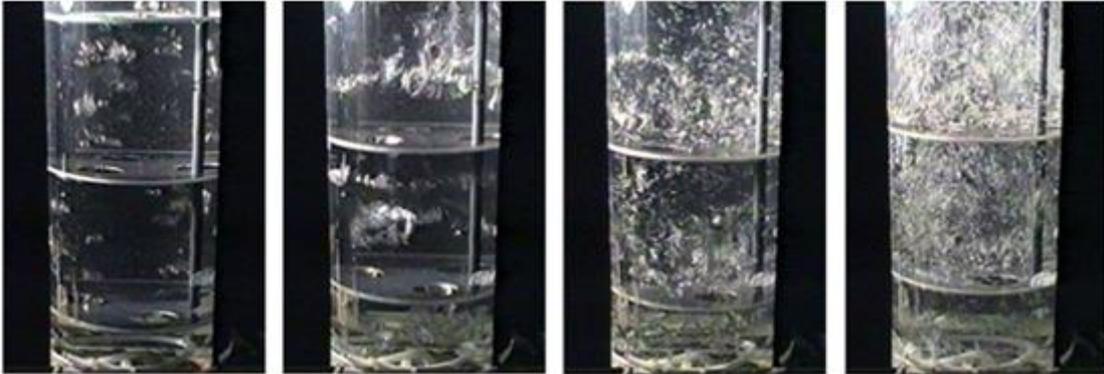


Figura 1-8: Visualización del mecanismo de mezcla. Sin oscilación (a). Comienzo de la oscilación (b). Tras un ciclo completo de oscilación (c). Tras varios ciclos completos de oscilación (d).

1.3 Ventajas, limitaciones y algunas aplicaciones.

En comparación con los reactores de agitación tradicionales, los OFB tienen grandes ventajas;

- ✓ Tiempo de reacción más corto, lo que implica mayor capacidad para obtener grandes cantidades de productos en menor tiempo.
- ✓ Velocidades del flujo lentas, al contrario que las grandes velocidades superficiales que necesitan los reactores tubulares convencionales para poder mezclar con eficacia los reactivos y reactantes.
- ✓ Mayor control de la reacción.
- ✓ Gran ventaja en reacciones lentas, pues la mezcla se produce independientemente del gasto másico introducido lo que le confiere una gran ventaja respecto a los reactores tradicionales que necesitan de tubos con gran longitud y poco diámetro para conseguir una mezcla precisa.

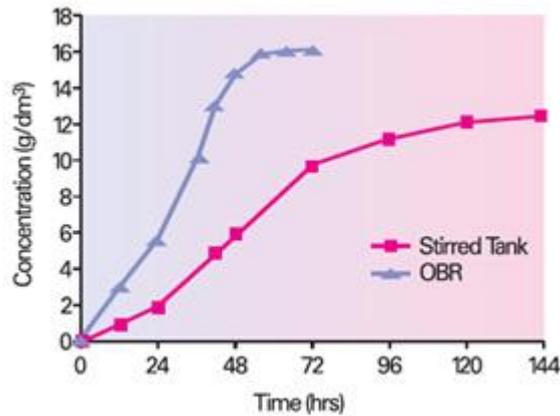


Figura 1-9: Comparativa mezclado en reactor OBR vs Agitadores

Toda nueva tecnología tiene sus limitaciones, en los OBR se da el caso de que si en la reacción participa un gas, este tendrá un límite de capacidad entorno al 15% pues los gases amortiguan la propagación de la oscilación perdiendo por tanto efectividad en la mezcla y reacción.

Otro factor a tener en cuenta en caso de reactivos y reactantes líquidos sería la viscosidad de los mismos pues a partir de ciertos valores de esta los fenómenos de entremezclado no se producen con la eficiencia necesaria, una posible solución para poder trabajar con líquidos de viscosidad algo superior a este límite sería aumentar la temperatura para poder bajar así la viscosidad de los mismos.

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

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

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

1.4 Parámetros adimensionales característicos.

Como se ha visto el flujo queda compuesto por dos movimientos, flujo neto y oscilatorio, por tanto se tendrán dos números de Reynolds uno para cada componente del flujo.

Así el Reynolds que caracteriza la componente neta del flujo es:

$$\mathbf{Re}_n = \frac{\rho \cdot V_n \cdot d_t}{\mu} \quad \mathbf{Ec- 1.4}$$

Donde V_n es la velocidad media del flujo neto. El Reynolds oscilatorio viene dado por la expresión:

$$\mathbf{Re}_{osc} = \frac{\rho \cdot [2 \cdot \pi \cdot f \cdot x_0] \cdot d_t}{\mu} \quad \mathbf{Ec- 1.5}$$

Otro parámetro adimensional es el Strouhal que se define como sigue:

$$\mathbf{St} = \frac{d_t}{4 \cdot \pi X_0} \quad \mathbf{Ec- 1.6}$$

Donde d_t es el diámetro del tubo liso y X_0 es la amplitud de la oscilación introducida que en este caso se trata del desplazamiento que realiza el pistón generador de la oscilación.

El tipo de deflector estudiado en el presente proyecto es un muelle, cuya inserción en el tubo liso junto con la componente oscilatoria aumentará de forma considerable los fenómenos de mezcla y difusión.

El estudio se centrará en la región laminar con Reynolds neto en torno a **50** mientras que el Reynolds oscilatorio podrá variar en un rango de entre **50 a 800**, rangos en los cuales se puede mantener las condiciones de flujo tapón las cuales son más idóneas para aumentar la mezcla y difusión. Por su parte el número de Strouhal que en primera aproximación relaciona la velocidad media del flujo con la oscilación, teniendo en cuenta que la componente neta de la velocidad es muy pequeña con respecto a la velocidad máxima de oscilación tendrá un valor **St ≤ 0.2**.

1.5 Trabajos previos, desde principios de la década de los 90 hasta hoy.

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

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

A partir de entonces, el número de trabajos acerca del flujo oscilatorio en reactores químicos aumenta muy considerablemente. Las áreas de investigación científica han incluido, entre otras, modelos de flujo (Mackley y Ni, en 1991 y 1993), perfiles locales de velocidad y distribución de esfuerzo cortante (Ni *et al.*, en 1995), distribución del tiempo de residencia (Mackley y Ni, en 1991 y 1993 ; Ni, en 1994), dispersión (Mackley y Ni, en 1991 y 1993 ; Ni, en 1995), transferencia de calor (Mackley y Stonestreet, en 1995), transferencia de masa (Hewgill *et al.*, en 1993 ; Ni *et al.*, en 1995 ; Ni y Gao, en 1996), mezcla y separación de partículas (Mackley *et al.*, en 1993), perfiles de velocidad de partículas (Liu *et al.*, en 1995), reacción (Ni y Mackley, en 1993), correlaciones de escalado (Ni y Gao, en 1996), deflectores oscilantes en flujo oscilatorio (Baird y Rama Rao, en 1995; Stonestreet, en 1995) o parámetros adimensionales de caracterización del flujo (Zhao y Cheng, en 1995).

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

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

En los últimos años, tiene una especial importancia el desarrollo de reactores de flujo oscilatorio con orificios deflectores en meso escala, para el análisis de procesos en laboratorio. Son dispositivos con volúmenes del orden de mililitros, normalmente en torno a 5 mm de diámetro D , y con secciones transversales de diámetro D_0 , considerablemente menores que en los diseños convencionales de *OFR*. En 2005, Reis *et al.* presentaron un novedoso meso-reactor de flujo, compuesto por tubos lisos con constricciones periódicas, demostrando con estudios experimentales y numéricos que es posible alcanzar una buena mezcla con este tipo de dispositivos:

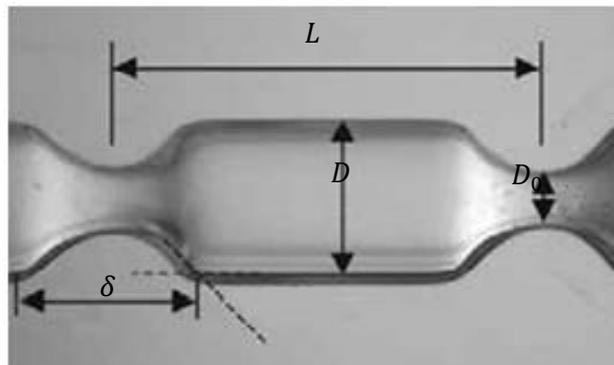


Figura 1-10: Meso-reactor de flujo oscilatorio. $D=4.4$ mm, $L=13$ mm, $\delta=6$ mm, $D_0=1.6$ mm.

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

1.6 Columnas de flujo oscilatorio. Aportaciones de Xiong- Wei Ni.

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

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

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

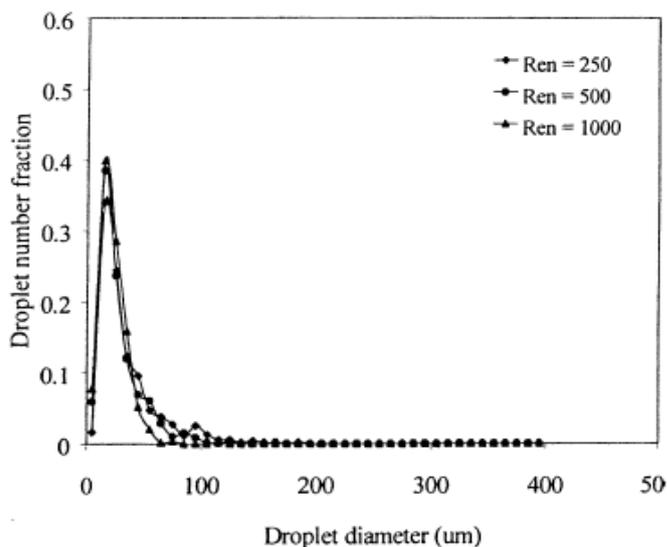


Figura 1-11: Típica forma gaussiana de la distribución del tamaño de gota en un reactor de flujo oscilatorio.

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

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

En 2005, Jian y Ni publican un estudio numérico acerca del comportamiento del escalado en tres columnas oscilatorias con orificios deflectores, con diámetros de 50, 100 y 200 mm respectivamente. Demuestran que el aumento de escala es lineal y que las condiciones mecánicas del fluido en términos de ratios de velocidad son independientes del factor de escala.

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

2- TECNICA DE INYECCION DE TRAZADORES

2.1 Introducción

En este capítulo se abordan aspectos relacionados con la inyección del trazador en un flujo desarrollado en el interior del tubo caso de estudio, explicando que variables y características del tubo, fluido y flujo influyen sobre los resultados, además de distinguir entre modelos de dispersión y modelos convectivos.

2.2 Características del RTD (Residence Time Distribution)

Se trata del tiempo de residencia medio que tardan las partículas del fluido en recorrer el interior del tubo, que viene definido por la velocidad media del flujo U_{med} y la longitud del tubo L :

$$\tau = \frac{L}{U_{med}} \quad \text{Ec- 2.1}$$

Este es el tiempo característico del flujo con el cual se podrán adimensionalizar las ecuaciones. Al inyectar el trazador en un punto del tubo, como puede ser al inicio del mismo, las moléculas o partículas del mismo tardarán un tiempo τ promedio en recorrer la longitud total del tubo, este en realidad no es el tiempo que tardan todas las partículas en recorrer el tubo, sino el tiempo medio total que tardarán, es decir, para un tiempo $t = \tau$ llegará la mayor cantidad de partículas por tanto en ese instante habrá un máximo en la concentración del trazador, no obstante antes de ese instante llegarán partículas y después también.

Esta diferencia en los tiempos de residencia de las partículas estriba en el campo de velocidades desarrollado en el interior del tubo, pues evidentemente debido a que la velocidad de las partículas disminuye a medida que se acercan a las paredes del tubo, estas partículas cercanas a las paredes del tubo tendrán tiempos de residencia mayores que las que estén en la zona central del flujo.

Una forma de detectar esa cantidad de trazador a la salida del tubo es midiendo la fracción másica del mismo respecto al fluido del flujo principal.

Introduciendo un volumen de trazador sobre el flujo desarrollado en un instante dt se analiza como el flujo principal arrastra este volumen y lo “dispersa” a lo largo del tubo, de forma que en la salida se registran diferentes curvas de fracción másica en función del tipo de flujo desarrollado y las propiedades de este.

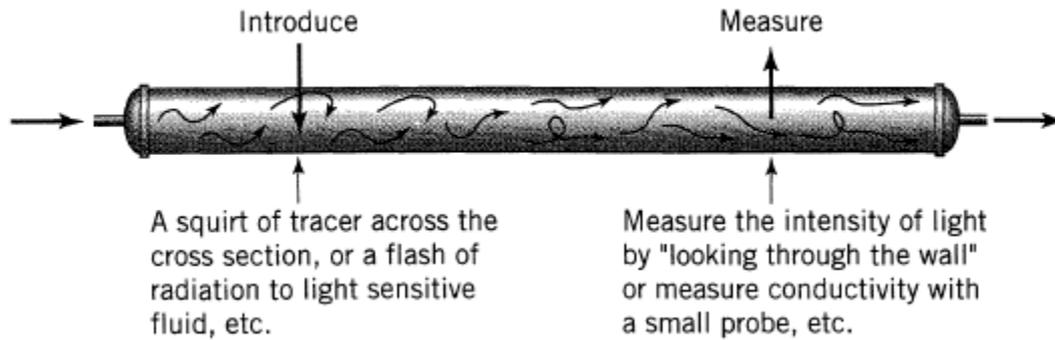


Figura 2-1: Esquema inyección-medida del trazador

Se inyecta una cantidad de trazador en un instante determinado a esta cantidad se le llama C_{pulso} ya que será una función tipo impulso siendo C_{pulso} la concentración del trazador en la zona de inyección medida en Kg/m^3 la forma de esta función se puede ver en la siguiente figura:

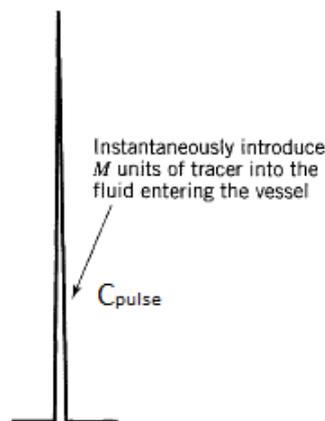


Figura 2-2: Función de inyección en el punto de inyección

Pero la variable que mejor identifica lo que sucede con el trazador es la función de distribución de tiempos de residencia 'E' la cual se obtiene simplemente dividiendo el valor de la concentración del trazador entre el área bajo la curva que se obtiene al dispersarse el mismo en la corriente principal. Sin entrar a valorar el tipo de flujo todavía, un ejemplo de respuesta del sistema podría ser:

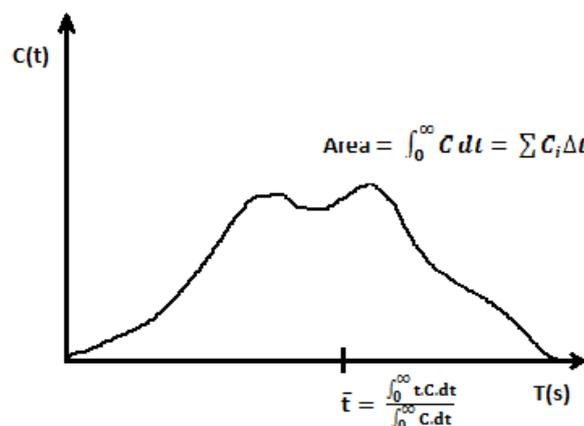


Figura 2-3: Respuesta del sistema a entrada impulso

Para obtener los valores de la **curva 'E'** basta con escalar la curva C_{pulso} dividiendo esta entre el área bajo la curva C_{pulso} , en la figura anterior se aprecia cómo se puede obtener el área mediante la expresión.

$$\text{Area} = \int_0^{\infty} C dt = \sum C_i \Delta t_i = \frac{M}{v} \quad \left[\frac{\text{kg s}}{\text{m}^3} \right] \quad \text{Ec- 2.2}$$

Donde **M** es la masa del trazador y **v** es el caudal volumétrico, por tanto:

$$E = \frac{C_{\text{pulso}}}{\text{Area}} = \frac{v \cdot C_{\text{pulso}}}{M} \quad \text{Ec- 2.3}$$

Mientras que el tiempo medio que tardan en recorrer el tubo la mayor parte de partículas se puede definir como:

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot C \cdot dt}{\int_0^{\infty} C \cdot dt} = \frac{\sum_i t_i C_i \Delta t_i}{\sum_i C_i \Delta t_i} = \frac{V}{v} \text{ (s)} \quad \text{Ec- 2.4}$$

Donde 'V' es el volumen total de fluido en el interior del tubo en m^3 . Si se tienen en cuenta estas dos últimas expresiones se podría obtener un caso más general, adimensional, para poder evaluar diferentes casos independientemente del valor de ciertos parámetros.

El tiempo adimensional será:

$$\theta = \frac{t}{\bar{t}} = \frac{v \cdot t}{V} \quad \text{Ec- 2.5}$$

Adimensionalizando:

$$E_{\theta} d\theta = E dt \rightarrow E_{\theta} = E \frac{dt}{d\theta} \quad \text{Ec- 2.6}$$

Derivando e introduciendo la expresión anterior en esta última:

$$E_{\theta} = \frac{V}{v} E = \bar{t} \cdot E \quad \text{Ec- 2.7}$$

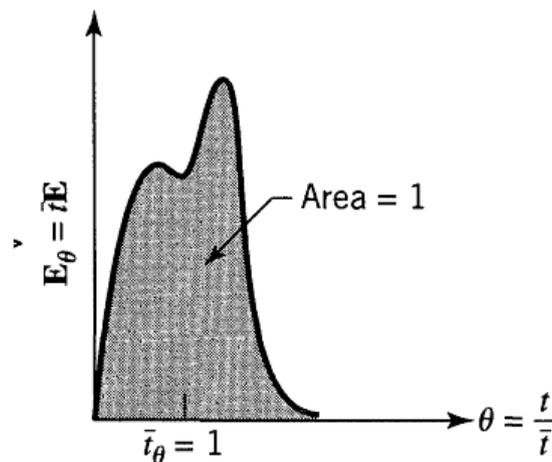


Figura 2-4: Concentración adimensional

Analizado a groso modo el modelo adimensional de distribución de tiempos de residencia en la inyección de un trazador a una corriente principal.

2.3 Características generales del movimiento.

La ecuación teórica que gobierna esta concentración de trazador viene dada por la **Ley de Fick**:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{Ec- 2.8}$$

Ecuación en la que se considera el eje 'x' como eje del movimiento y 'C' la concentración del trazador la cual es función del tiempo y la posición $C=C(x,t)$.

'D' es el coeficiente de dispersión longitudinal, por tanto el primer término de esta ecuación representa la dispersión del trazador en el flujo principal. Evidentemente la dispersión se produce tanto en la dirección del movimiento general del flujo como en dirección perpendicular a este, pero el orden de magnitud de esta última es bastante inferior al que hay en dirección longitudinal por tanto no se tendrá en cuenta.

El segundo miembro es el término convectivo, donde 'U' es la velocidad promedio.

De esta ecuación se desprende que el flujo puede ser de varios tipos:

- 1- Puramente dispersivo.
- 2- Puramente convectivo.
- 3- Mezcla entre dispersión y convección.

Un ejemplo de las curvas que se pueden obtener en el caso dispersivo al inyectar el trazador se muestra en la figura.

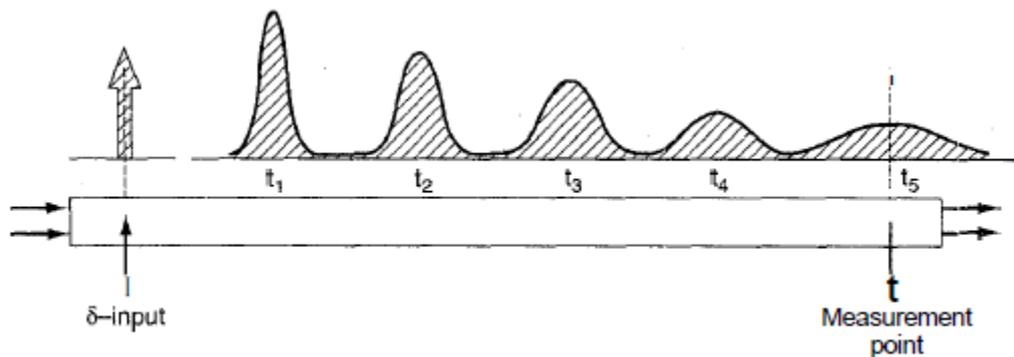


Figura 2-5: Evolución de la concentración del trazador

En esta figura se puede observar donde se introduce un diferencial de volumen en un instante de tiempo ($\delta - input$) y qué curvas de fracción másica del trazador se obtienen para diferentes distancias respecto al punto de inyección, como se aprecia siguen una distribución Gaussiana y a mayor distancia respecto al punto de inyección se puede ver una mayor dispersión.

2.3.1 Características del flujo “pistón” ó “plug flow”

Además de los flujos laminar y turbulento se puede reconocer el flujo pistón como un flujo característico. Para caracterizar este tipo de flujo se considera un tubo por el cual discurre un fluido con un flujo pistón en su interior al cual se le impone aguas arriba un cierto grado de retro mezclado el cual es independiente de la posición dentro de Vessel de manera que no existen zonas muertas, pequeñas circulaciones, ni extrangulamientos del flujo. A esto se le denomina **dispersed plug flow** o **dispersión model**.

En el modelo de dispersión se considera que la velocidad y concentración del trazador es constante a lo largo de casi toda la sección del tubo, similar a un flujo turbulento.

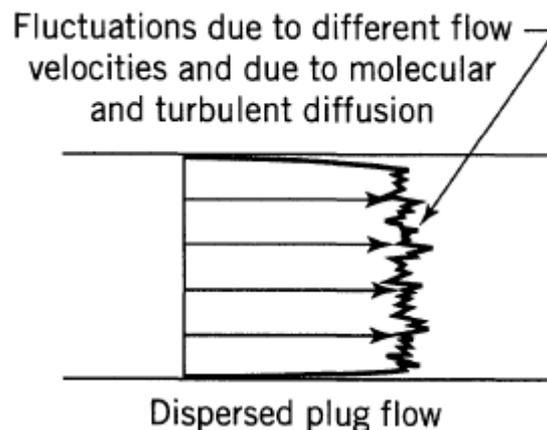


Figura 2-6: Perfil velocidades en flujo de dispersión

En el modelo **convectivo** las curvas de concentración cambian menos con la distancia al punto de inyección y se muestran anti simétricas debido a que la convectividad produce un flujo más uniforme, por tanto las partículas se entremezclan en menor magnitud lo que produce que la concentración de trazador a la salida y en distintos planos intermedios cambie en menor medida que en el modelo de dispersión.

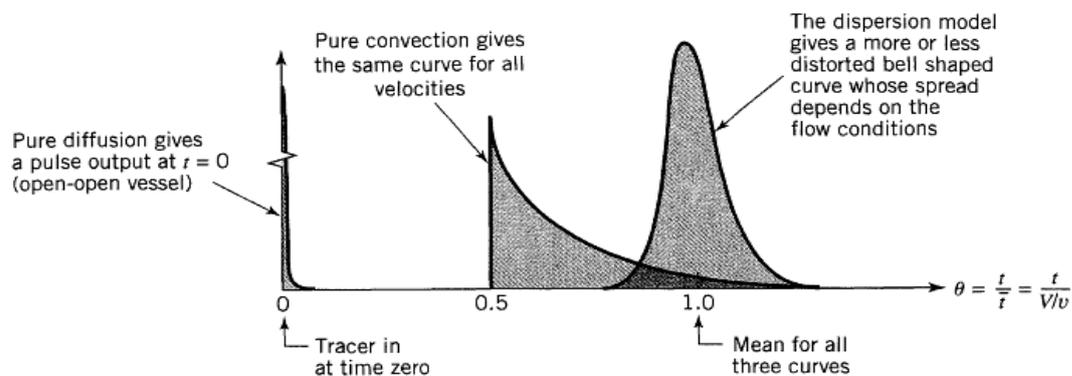


Figura 2-7: Comparativa concentración trazador convección-dispersión-difusión

En el flujo convectivo se tienen varias capas de moléculas a distintas velocidades desde la pared del tubo hasta el centro del mismo, siendo mayor la velocidad de las partículas en el centro y llegando a anularse en la pared. Como muestra la figura:

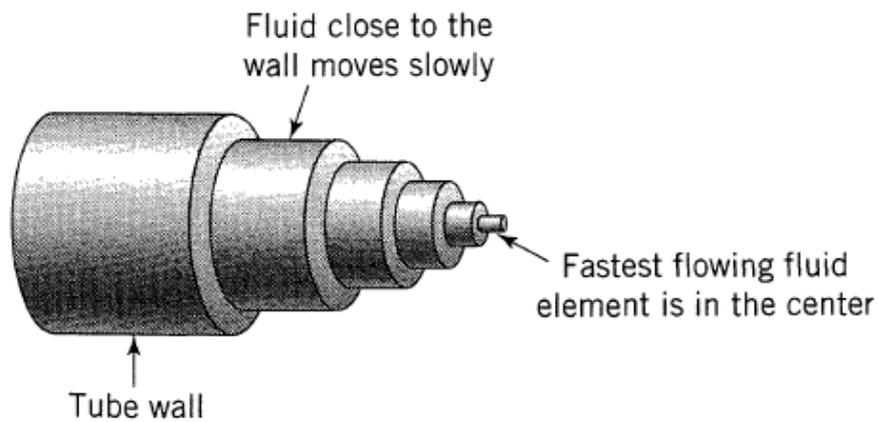


Figura 2-8: Perfiles de velocidad entre la pared y el centro del tubo

2.3.2 Evaluación del tipo de flujo desarrollado.

Para poder elegir un modelo u otro se ha de comprobar en qué región del movimiento estamos, pues como se comentó las partículas del fluido interactúan de forma distinta entre sí en un caso u otro dando lugar a las diferencias comentadas en cuanto a las curvas de salida de fracción másica del trazador consecuencia de fenómenos de mezclado diferentes.

En primer lugar recordar que el flujo debe ser **laminar** para poder seguir la estrategia que se va a explicar a continuación.

El fluido con el que se trabaja es agua tanto en el flujo principal como el trazado, algunas de sus propiedades son:

- ✓ **Densidad:** $\rho = 998.2 \text{ kg/m}^3$
- ✓ **Viscosidad:** $\mu = 0.001003 \text{ m}^{-1}\text{s}^{-1}$
- ✓ **Difusividad:** $D = 2.32 \text{ e}^{-9}\text{m}^2/\text{s}$

Para determinar qué modelo es el que se va a desarrollar (dispersivo o convectivo) se ha de tener en cuenta ciertos **grupos adimensionales** como son:

- **Reynolds:** $Re = \frac{\rho \cdot u \cdot d_t}{\mu}$
- **Schmith:** $Sc = \frac{\mu}{\rho \cdot \mathfrak{D}}$
- **Bodestein:** $Bo = Re \cdot Sc = \frac{u \cdot d_t}{\mathfrak{D}}$
- **Relación de aspecto del tubo:** L/d_t

Donde \mathfrak{D} es el coeficiente de dispersión molecular el cual está relacionado con el coeficiente de dispersión axial antes mencionado D , u es la velocidad media del flujo, L y d_t son la longitud y el diámetro del tubo, respectivamente.

Por tanto en función del valor de nuestras variables se obtendrán diferentes números adimensionales con los cuales a partir de la tabla siguiente se comprueba que tipo de movimiento va a desarrollar el flujo en cuestión.

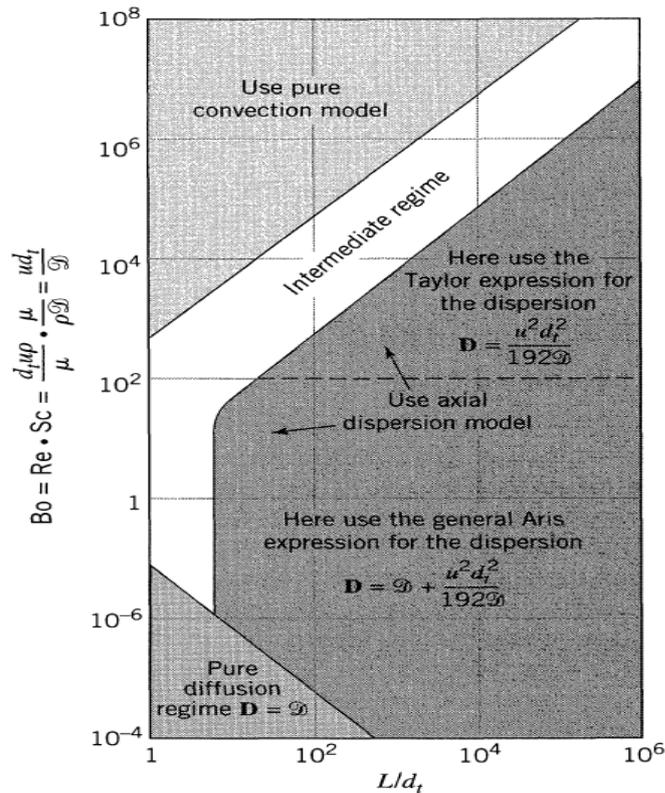


Figura 2-9: Modelos desarrollados en función de los parámetros

2.3.3 Formas adimensionales

Para comparar los distintos tipos de flujos entre se ha de recurrir a la adimensionalización de las variables a representar gráficamente, concentración de trazador y tiempo. En según qué flujo será válida una forma adimensional u otra.

2.3.3.1 Flujo dispersivo:

A partir de la
$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x}$$

Ec- 2.8 eliminando de esta el

término convectivo queda la expresión:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{Ec- 2.9}$$

Adimensionalizando las variables como sigue:

- $\theta = \frac{t}{\tau}$ siendo $\tau = \frac{L}{U_{med}} \rightarrow \theta = \frac{t \cdot U_{med}}{L}$
- $\zeta = \frac{(u \cdot t + x)}{L}$ donde operando $\rightarrow \zeta = \theta + \frac{x}{L}$

Sustituyendo en la $\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ expresión:

Ec- 2.9 se llega a la

$$\frac{\partial C}{\partial \theta} = \frac{D}{u.L} \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial C}{\partial \zeta} \quad \text{Ec- 2.10}$$

Donde el grupo adimensional $\frac{D}{u.L}$ llamado **parámetro de dispersión de Vessel**, indica el grado de dispersión que hay en el flujo.

Según los posibles valores que puede adquirir el grupo adimensional $\frac{D}{u.L}$ se puede distinguir dos casos extremos en los que:

- ✓ $\frac{D}{u.L} \rightarrow 0$ Fenómenos de dispersión bajos (flujo parecido al 'flujo pistón').
- ✓ $\frac{D}{u.L} \rightarrow \infty$ Alta dispersión.

Para el caso de estudio este número vale en torno a 0.01. Resolviendo la $\frac{\partial C}{\partial \theta} = \frac{D}{u.L} \frac{\partial^2 C}{\partial \zeta^2} - \frac{\partial C}{\partial \zeta}$ Ec- 2.10 se llega a:

$$E(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4.\pi.\frac{D}{u.L}}} e^{\left(-\frac{(1-\theta)^2}{4.\left(\frac{D}{u.L}\right)}\right)} \quad \text{Ec- 2.11}$$

La obtención de esta ecuación escapa a los objetivos del presente proyecto por su grado de complejidad matemática, lo que interesa son las curvas que se generan a partir de dicha **ecuación 2.11**.

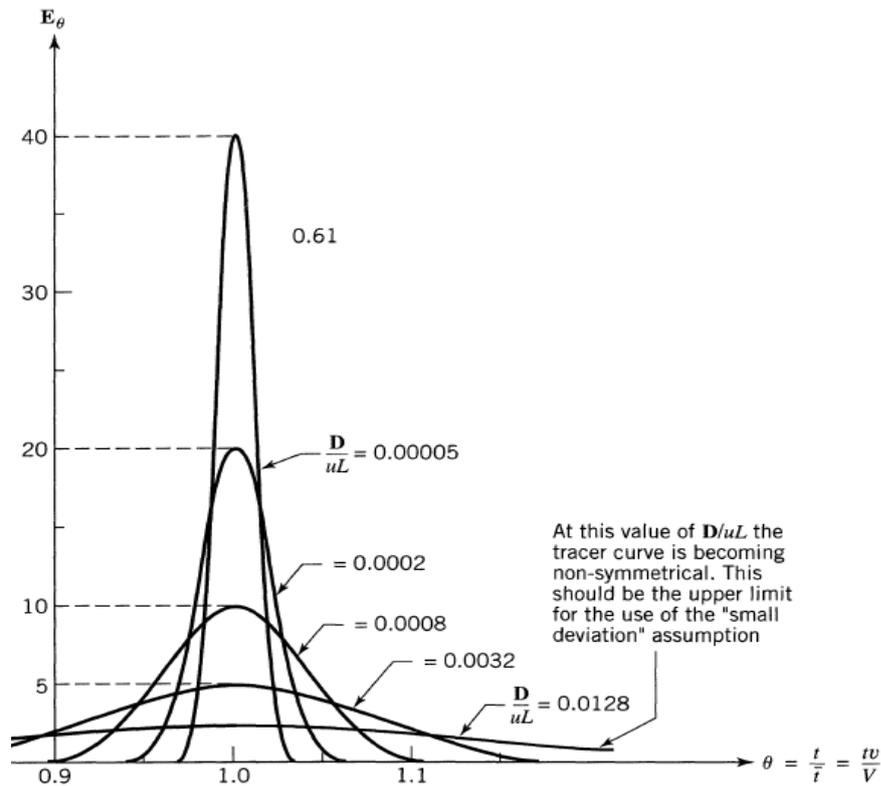


Figura 2-10: curvas concentración adimensional del trazador frente tiempo adimensional

Se aprecia en estos casos, en los que la dispersión es baja, que las curvas siguen una distribución Gaussiana centradas perfectamente en 1, como parece lógico pensar a mayor dispersión (mayor número de Vessel) por lo que la concentración del trazador será menor pues las partículas se entremezclan más con el flujo principal.

2.3.3.2 Flujo convectivo.

Para la región convectiva despreciando el término debido a la difusividad la **ecuación 2.2** queda:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{Ec- 2.12}$$

Dentro de este tipo de flujo y en función de cómo sea inyectado y medido el trazador se obtendrán distintas respuestas en las curvas de concentración del trazador. La inyección y medida pueden ser de tipo planar o tipo flux.

- **Planar:** significa que el trazador se inyecta o se mide en estado estático es decir, no adquiere las condiciones de velocidad del flujo principal.
- **Flux:** El trazador se inyecta o se mide estando este con una cierta velocidad o perfil adquirido.

Por tanto de estas dos condiciones se pueden dar cuatro casos distintos:

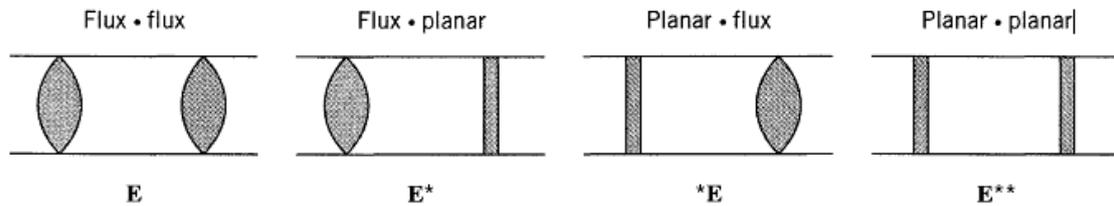


Figura 2-11: Tipos de condiciones inyección/medida del trazador

Para cada una de las cuatro condiciones diferentes se tiene una curva particular que se muestra de forma adimensional en la siguiente figura:

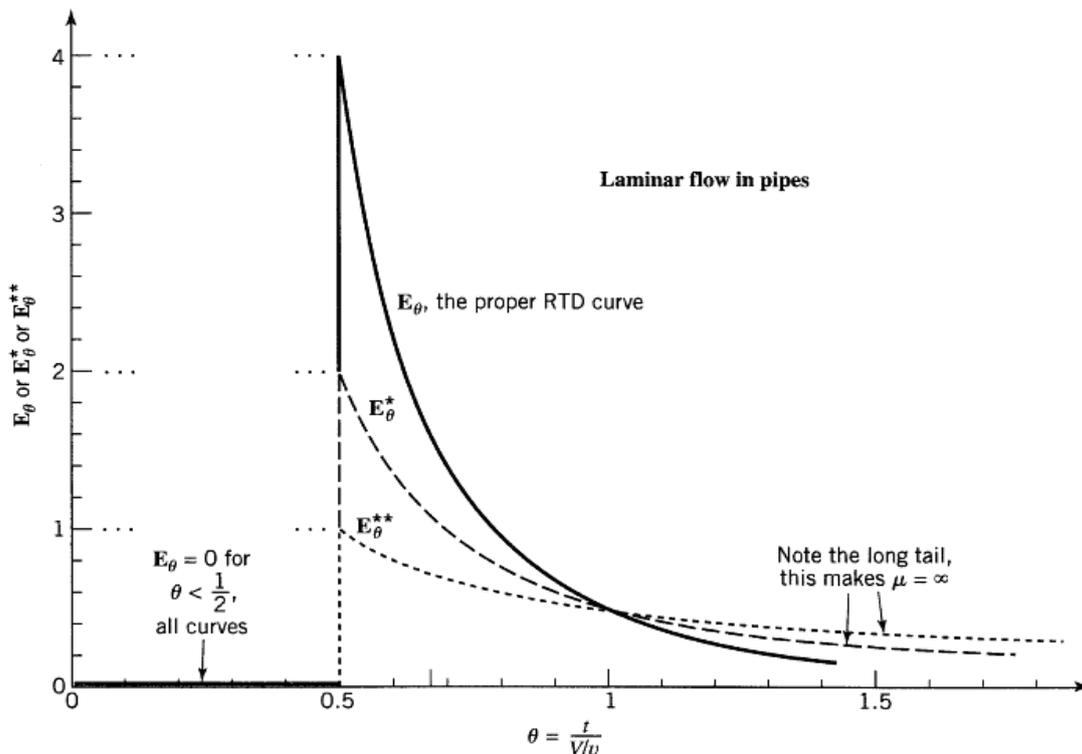


Figura 2-12: Respuesta del trazador según las condiciones de contorno inyección/medida

Donde las curvas E^* (Flux-planar) y $*E$ (planar-Flux) coinciden. La gráfica muestra la concentración del trazador adimensional E_θ frente al tiempo adimensional θ .

Para el caso particular objeto de estudio por el presente proyecto, en Fluent se define un diferencial de volumen en un instante de tiempo dado para inyectar el trazador, el cual responde a la condición Planar, mientras que la medida se realiza una vez que el flujo principal ha arrastrado consigo al trazador lo que responde a la condición Flux. Por tanto en el capítulo 15 del Levenspiel relaciona la curva con la ecuación que sigue:

$$E_t = \frac{\tau}{2.t^2} \quad \text{Ec- 2.13}$$

Para $t \geq \frac{\tau}{2}$ siendo $\tau = \frac{L}{v}$

- Siendo E la concentración del trazador,

- τ el tiempo de residencia medio de las partículas del trazador y
- t el tiempo real de flujo.

Que se puede adimensionalizar mediante $\theta = \frac{t}{\tau}$ obteniendo la expresión:

$$E_{\theta} = \frac{1}{2 \cdot \theta^2} \quad \text{Ec- 2.14}$$

Por tanto quedan así definidas las ecuaciones teóricas con las que se podrán comparar los resultados obtenidos en Fluent, según el proceso que se ha indicado en este capítulo, seleccionando los parámetros adimensionales para entrar en la gráfica de la **Figura 2-6** y saber en qué región se encuentra el flujo hipotético.

3- METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN

NUMÉRICA EN FLUENT

En este capítulo exponen las ecuaciones de gobierno que rigen el comportamiento de un flujo laminar, incomprensible y estacionario en su forma diferencial. Posteriormente, se presentan los distintos algoritmos de que dispone Fluent para resolver el sistema de ecuaciones obtenido, así como las condiciones de contorno, modelos para definir las propiedades físicas del fluido y su comportamiento, y criterios empleados para evaluar la convergencia.

3.1 Ecuaciones matemáticas del campo fluido.

Las ecuaciones siguientes gobiernan el comportamiento temporal de fluidos tridimensionales y la transferencia de calor para fluidos Newtonianos.

- Ecuación de continuidad:

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

- Tres componentes de la ecuación de cantidad de movimiento:

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

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

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

- Ecuación de la energía:

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

- Ecuaciones de estado:

$$p = p(\rho, T) \quad y \quad i = i(\rho, T) \quad \text{Ec- 3.6}$$

Si se observa la forma de dichas ecuaciones (4.1 a 4.3), se puede ver que tienen una estructura común. Introduciendo una variable genérica ϕ en esas ecuaciones, se obtiene,

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

La ecuación (3.7) se denomina ecuación del transporte de la variable ϕ . Ésta representa varios fenómenos de transporte: la variación con respecto al tiempo y el término convectivo en el lado izquierdo de la ecuación y el término de difusión (Γ =coeficiente de difusión) y el asociado a otros fenómenos en el lado de derecho. La ecuación (3.7) puede ser empleada para trabajar con la temperatura en la ecuación de la energía cambiando i por T a través de una ecuación de estado y viceversa.

La ecuación (3.7) se emplea como punto de partida para el método de los volúmenes finitos. Haciendo ϕ igual a 1, u , v , w y i (ó T) y seleccionando los valores adecuados para el coeficiente de difusión Γ y para S_ϕ , se pueden obtener las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía expuestas en el apartado anterior. El método de los volúmenes finitos se desarrolla mediante la integración de la ecuación (4.5) sobre un volumen de control tridimensional V_c , obteniéndose,

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

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

$$\int_{V_c} \nabla \cdot \vec{a} dV = \int_{S_c} \vec{n} \cdot \vec{a} dA \quad \text{Ec- 3.9}$$

Aplicando el teorema de Gauss, la $p = p(\rho, T)$ y $i = i(\rho, T)$ se puede escribir como, Ec- 3.6

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

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

El flujo de dispersión es positivo según la dirección opuesta al gradiente ϕ . Así, el producto contenido en la primera integral del lado derecho expresa el aumento de ϕ en el elemento

fluido debido a la difusión. El último término del lado derecho de la ecuación (4.8) representa el incremento de ϕ debido a las fuentes asociadas a otros fenómenos.

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

3.2 HIPÓTESIS DE SIMULACIÓN

En este apartado se describen los esquemas y algoritmos de que dispone Fluent para discretizar, linealizar y resolver el sistema de ecuaciones de gobierno expuestas en el subapartado 4.2.2.1.7, una vez integradas según lo establecido en el apartado anterior, sobre el dominio computacional que se vaya a estudiar. También se incluye un análisis comentando los casos en los que es recomendable emplear unos u otros esquemas o algoritmos.

3.2.1 Esquemas numéricos

Fluent permite escoger entre dos tipos de métodos numéricos para resolver las ecuaciones obtenidas tras aplicar el método de los volúmenes finitos sobre las ecuaciones del apartado 4.1. Éstos son: el *solver segregado* y el *solver acoplado*.

En ambos *solver* la técnica de los volúmenes de control usada consiste en, dividir el dominio computacional en volúmenes de control discretos según la malla empleada.

Integrar las ecuaciones de gobierno sobre los volúmenes de control individuales para construir un sistema de ecuaciones algebraicas para las variables incógnita discretizadas (velocidad, presión, temperatura, etc.).

Linealizar las ecuaciones discretizadas y resolver el sistema de ecuaciones linealizado resultante para obtener los valores de las variables incógnitas del problema.

Los dos métodos numéricos emplean un proceso de discretización similar (volúmenes finitos), pero la aproximación empleada para linealizar y resolver las ecuaciones discretizadas es diferente.

3.2.1.1 *Solver segregado*

El *solver segregado* es un algoritmo que resuelve las ecuaciones de gobierno de forma secuencial. Dado que las ecuaciones de gobierno son no-lineales (y acopladas) se necesita de un proceso iterativo para que el código converja a la solución final. Cada iteración consta de los pasos que se muestran de manera esquemática en la figura 4.4 y que se comenta a continuación,

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

Resolución de las tres componentes de la ecuación de la cantidad de movimiento simultáneamente empleando los valores actualizados de la presión y los flujos másicos en las caras de los volúmenes de control. De esta forma, actualiza el campo de velocidades.

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

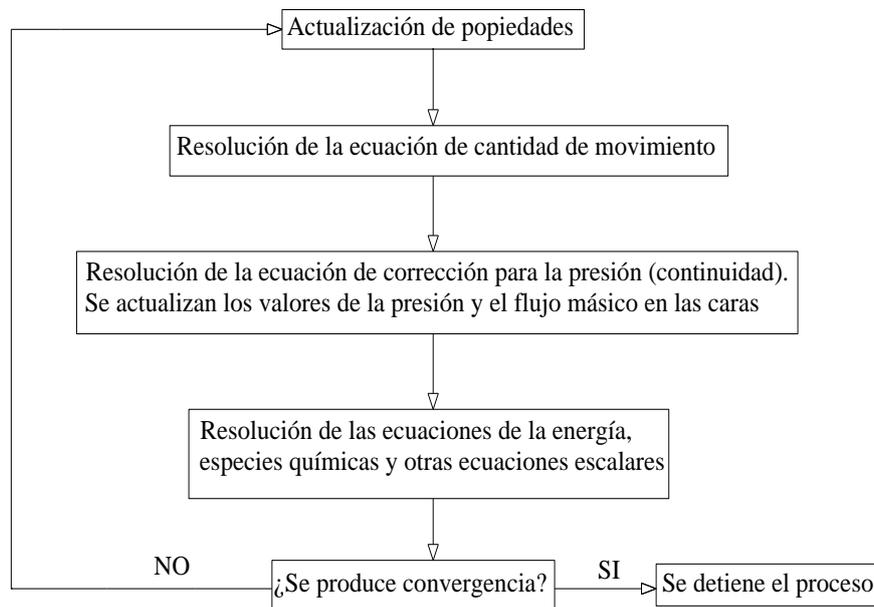


Figura 3-1: Proceso de cálculo del solver segregado

3.2.1.2 Solver acoplado

El *solver acoplado* es un algoritmo que resuelve las ecuaciones de gobierno de forma simultánea. Dado que las ecuaciones de gobierno son no-lineales (y acopladas) se necesita de un proceso iterativo para que el código converja a la solución final. Cada interacción consta de los pasos que se muestran de manera esquemática en la figura 4.2 y que se comentan a continuación,

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

3.2.1.3 Linealización: Formulación implícita y explícita

Independientemente del método que se emplee para resolver las ecuaciones de gobierno discretizadas, estas deben ser linealizadas para obtener un sistema de ecuaciones para las variables dependientes en cada celda del dominio computacional. Entonces, el sistema de ecuaciones linealizadas es resuelto para obtener los valores de dichas variables dependientes. Dependiendo de la forma en que se linealizen las ecuaciones, se puede obtener una formulación *implícita* o *explícita* del problema. Cuando se habla de estos términos se hace referencia a:

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

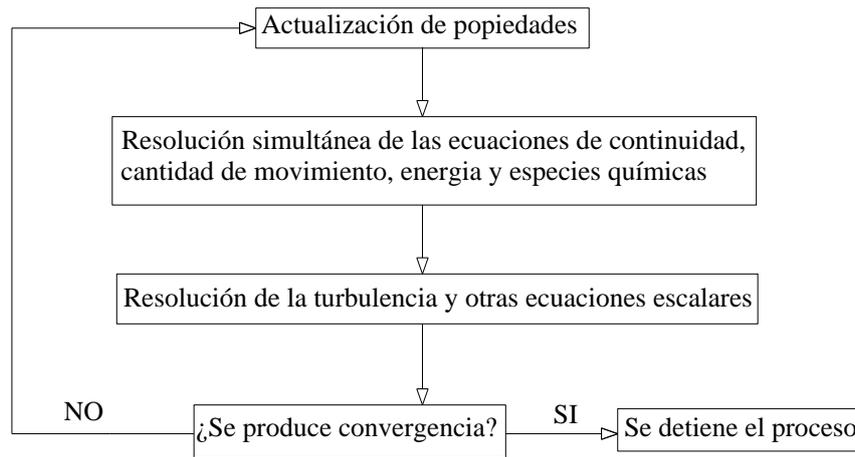


Figura 3-2: Proceso de cálculo del solver acoplado

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

En resumen, el *solver segregado* resuelve al mismo tiempo las incógnitas de todas las celdas para una única variable (por ejemplo: la presión). Entonces, resuelve la siguiente variable considerando de nuevo todas las celdas al mismo tiempo de manera sucesiva hasta obtener la solución de todas las variables. El *solver segregado* no permite trabajar con la *formulación explícita* del problema.

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

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

actualizado del campo de presión, velocidades y temperatura. En resumen, el solver acoplado con la linealización *implícita* de las ecuaciones, resuelve las variables p, u, v, w y T en todas las celdas del dominio computacional al mismo tiempo.

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

3.2.2 Esquemas de interpolación y discretización

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

Si se discretiza la ecuación del transporte (3.10) para el caso estacionario obtenida mediante el método de los volúmenes finitos, tomando como volumen de control una celda triangular (bidimensional) como la mostrada en la figura 4.3 se obtiene,

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

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

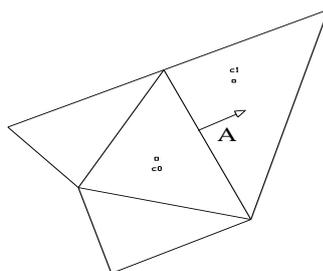


Figura 3-3: Volumen de control sobre el que se aplica el método de los volúmenes finitos

Por defecto, Fluent almacena los valores discretos de la variable ϕ en los centros de las celdas (c_0 y c_1 de la figura 3.3). Sin embargo, se necesitan los valores de ϕ_f , de modo que estos se obtienen interpolando los valores de los centros de las celdas. Esto se consigue empleando un esquema *upwind*.

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

3.2.2.1 Esquemas de discretización

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

3.2.2.1.1 Esquemas *upwind* de primer orden

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

3.2.2.1.2 Ley exponencial

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

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

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

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

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

$$Pe = \frac{\rho u L}{\Gamma} \quad \text{Ec- 3.14}$$

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

3.2.2.1.3 Esquema upwind de segundo orden

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

$$\phi_f = \phi + \nabla \phi \cdot \Delta \vec{s} \quad \text{Ec- 3.15}$$

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

$$\nabla \phi = \frac{1}{V} \sum \tilde{\phi}_f \vec{A} \quad \text{Ec- 3.16}$$

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

3.2.2.1.4 Esquema QUICK

Para mallas formadas por elementos cuadrangulares y hexaédricos, Fluent dispone del esquema QUICK, que permite realizar un cálculo con precisión de orden elevado del valor de ϕ en las caras de la celda. El esquema QUICK está basado en una media ponderada sobre un esquema *upwind* de segundo orden e interpolaciones sobre los valores centrales de las celdas.

Para la cara e de la figura 4.5 si el flujo va de izquierda a derecha, el valor de ϕ se obtiene según:

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

Haciendo $\theta=1$, la ecuación 3.17 se transforma en un interpolación centrada de segundo orden, mientras que si se hace $\theta=0$, se obtiene una interpolación *upwind* de segundo orden. EL QUICK más comúnmente empleado es aquel que adopta el valor de $\theta=1/8$. El esquema

QUICK, generalmente, es aquel que proporciona resultados más precisos si se tienen mallas estructuradas alineadas con la dirección del flujo,

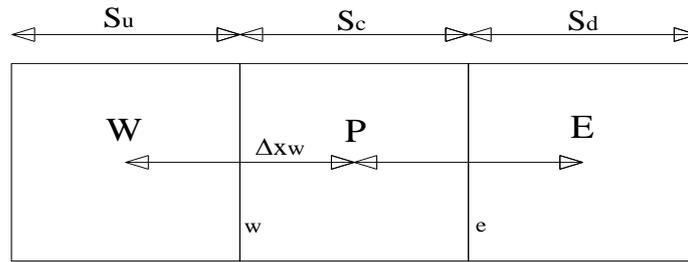


Figura 3-4: Volumen de control unidimensional

3.2.2.1.5 Forma linealizada de las ecuaciones discretizadas

La forma discretizada de la ecuación del transporte (ecuación (3.11)) contiene la incógnita ϕ en el centro de celda y celdas adyacentes, siendo esta ecuación, en general, no lineal respecto a dichas variables. La forma linealizada de la ecuación de la ecuación (4.9) puede escribirse como,

$$a_p \phi = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad \text{Ec- 3.18}$$

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

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

3.2.2.1.6 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,

$$\phi = \phi_{old} + \alpha \Delta \phi \quad \text{Ec- 3.19}$$

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

3.2.2.1.7 Evaluación de las derivadas

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

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

donde $\bar{\phi}_f$ es el valor de ϕ en el centroide de la cara f y el sumatorio está extendido a todas las caras que forman el conjunto de la celda. En función de la forma de calcular el valor de $\bar{\phi}_f$ se tienen las dos formulaciones siguientes:

➤ *Formulación basada en la celda*

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

$$\bar{\phi}_f = \frac{\bar{\phi}_{c0} + \bar{\phi}_{c1}}{2} \quad \text{Ec- 3.21}$$

➤ *Formulación basada en los nodos*

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

$$\bar{\phi}_f = \frac{1}{N_f} \sum_n^N \bar{\phi}_n \quad \text{Ec- 3.22}$$

donde $\bar{\phi}_n$ se obtiene realizando la media ponderada entre los valores de los nodos vecinos. En el caso de mallas estructuradas la formulación basada en la celda proporciona mejores resultados, mientras que para mallas no-estructuradas o híbridas se recomienda emplear la formulación basada en nodos.

3.2.2.2 Elección de los esquemas de discretización

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

3.2.2.2.1 Esquemas de primer orden vs. esquemas de de segundo orden

Cuando el flujo se encuentra alineado con la malla, emplear una discretización de primer orden puede ser aceptable. Sin embargo, si esto no es así, una discretización de primer orden en los términos convectivos incrementa el error numérico de discretización. Para mallas triangulares y tetraédricas, dado que el flujo no se encuentra alineado con la malla, se

obtendrán mejores resultados si se emplea una discretización de segundo orden. Para mallas cuadrangulares y hexaédricas, también se obtendrán resultados más precisos, especialmente, en casos de flujos complejos.

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

3.2.2.2 Otros esquemas de discretización

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

3.2.2.3 Esquemas de interpolación en el solver segregado

En este apartado se comentan los esquemas de interpolación que implementa Fluent en la discretización de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento para el solver segregado.

Estos esquemas se pueden entender más fácilmente si se toma como referencia las ecuaciones de continuidad (ecuación (3.23)) y cantidad de movimiento (ecuación (3.24)) en su forma integral y estacionaria,

$$\oint \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = 0 \quad \text{Ec- 3.23}$$

$$\oint \rho \vec{v} \vec{v} \cdot d\vec{A} = -\oint p I \cdot d\vec{A} + \oint \bar{\tau} \cdot d\vec{A} + \int_V \vec{F} dV \quad \text{Ec- 3.24}$$

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

3.2.2.3.1 Discretización de la ecuación de cantidad de movimiento

Aplicando el mismo procedimiento que se aplicó anteriormente para discretizar la ecuación del transporte (3.11) se obtiene la forma discretizada de la ecuación de cantidad de movimiento, que para su componente x viene dada por,

$$a_p u = \sum a_{nb} u_{nb} + \sum p_f A \hat{i} + S \quad \text{Ec- 3.25}$$

Si el campo de presiones y los flujos másicos a través de las caras fueran conocidos, la ecuación (3.25) podría ser resuelta de la forma expuesta en 4.2.2, obteniéndose como solución el campo de velocidades. Sin embargo, el campo de presiones y los flujos másicos a través de las caras no son conocidos a priori y deben ser obtenidos como parte de la solución. Además, los valores del campo de presiones a almacenar así como la discretización del gradiente de presiones son aspectos de gran importancia, los cuales se comentarán a continuación.

Fluent emplea un proceso mediante el cual se almacenan los valores de la presión y la velocidad en el centro de las celdas. Sin embargo, la ecuación (3.25) necesita el valor de la presión en la cara que está entre las celdas c_0 y c_1 mostrada en la figura 4.3. Por lo tanto, es

necesario emplear un esquema de interpolación que permita obtener los valores de la presión en las caras a partir de los valores del centro de las celdas.

3.2.2.3.2 Esquemas de interpolación de la presión

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

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

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

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

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

3.2.2.3.3 Discretización de la ecuación de continuidad

La ecuación (3.23) puede ser discretizada sobre el volumen de control de la figura 4.6, obteniéndose la siguiente ecuación,

$$\sum_f^N J_f A_f = 0$$

Ec- 3.26

donde J_f es el flujo másico a través de la cara f ($\mathbb{Q}v_n$).

Como ya se comentó anteriormente, el solver segregado resuelve las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento secuencialmente. En este proceso secuencial, la ecuación de continuidad se usa como medio para obtener el valor de la presión. Sin embargo, la presión no aparece explícitamente en la **ec-3.24** para flujos incompresibles, ya que la densidad no está directamente relacionada con la presión. Existen algoritmos, como la familia de algoritmos *SIMPLE* (*Semi-Implicit Method for pressure-Linked Equations*), que sirven para introducir el término de la presión dentro de la ecuación de continuidad. Estos serán comentados en la sección 3.3.2.3.5.

Para poder trabajar con la **ec-3.26** es necesario obtener los valores de la velocidad en la cara a partir de los valores del centro de la celda almacenados. Si se emplea una interpolación lineal con los valores de los centros de las celdas para obtener los valores en las caras, aparecen valores que no se corresponden con la física del problema para el campo de presiones. Para evitar este fenómeno, Fluent emplea un promediado ponderado sobre la ecuación de cantidad de movimiento, utilizando los coeficientes a_p de la ecuación (3.23). Aplicando el procedimiento anterior, el flujo a través de una cara se obtiene como,

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

Ec- 3.27

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

3.2.2.3.4 Esquema de interpolación de la densidad

Para casos de flujos compresibles, Fluent aplica una interpolación tipo upwind para obtener la densidad en las caras (para flujos incompresibles se emplea una media aritmética). Esta interpolación se puede realizar mediante tres esquemas: upwind de primer orden, upwind de segundo orden y *QUICK*.

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

- El esquema *QUICK* empleado para la densidad es similar al empleado en otras variables (3.3.2.1.4).

3.2.2.3.5 Acoplamiento presión velocidad

El acoplamiento presión-velocidad se consigue usando la *ecuación 3.27* para obtener una ecuación para la presión a partir de la ecuación de continuidad discretizada *ecuación 3.26*. Fluent permite escoger entre tres tipos de algoritmos de acoplamiento presión-velocidad: *SIMPLE*, *SIMPLEC* y *PISO*.

3.2.2.4 Elección de los esquemas de interpolación en el solver segregado.

3.2.2.4.1 Esquema de interpolación de presiones

Como ya se trató en el apartado 3.1.2.3.2, existen una serie de esquemas de interpolación de la presión disponibles cuando se trabaja con el solver segregado.

Para muchos casos, el esquema estándar es aceptable, pero en ciertos casos es recomendable emplear uno de los otros esquemas disponibles:

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

3.2.2.4.2 Esquema de interpolación de densidades

Como ya se trató en el apartado 3.1.2.3.4, existen tres esquemas de interpolación para densidad cuando se trabaja con el solver segregado.

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

3.2.2.4.3 Acoplamiento presión-velocidad

En Fluent, se encuentran disponibles los algoritmos *SIMPLE*, *SIMPLEC* y *PISO*. El algoritmo *SIMPLE* es el que se aplica por defecto, pero en algunos problemas, es preferible emplear el algoritmo *SIMPLEC*, particularmente cuando se puede aplicar factores de subrelajación de mayor magnitud, como se describe a continuación.

Para flujos relativamente no muy complejos (flujos laminares), en los que la convergencia está limitada por el acoplamiento entre la presión y la velocidad. Con el algoritmo *SIMPLEC*, se

suele fijar el factor de subrelajación para la presión en la unidad, lo cual ayuda a la mayor velocidad en la convergencia.

Sin embargo, en algunos problemas, el incrementar el valor de este factor de subrelajación puede acarrear problemas de inestabilidades en la convergencia. En estos casos es necesario el empleo de un valor menor para el factor de relajación asociado o emplear el algoritmo *SIMPLE*. En flujos complejos que implican turbulencia y otros modelos físicos, el esquema *SIMPLEC* acelerará la convergencia siempre y cuando ésta se encuentre limitada por el acoplamiento entre la presión y la velocidad. Con bastante frecuencia, son otros modelos físicos los que imponen mayores restricciones en la convergencia; en estos casos, se observará que da lo mismo el uso de uno u otro algoritmo, *SIMPLE* o *SIMPLEC*.

El algoritmo *PISO* con *neighbor correction* es muy recomendable para todo tipo de flujos no estacionarios, especialmente, cuando se quiere usar un alto *time step*. En problemas en los que se use el modelo de turbulencia *LES*, que normalmente requiere bajos *time step*, el empleo del esquema *PISO* podría provocar un incremento del coste computacional, por lo que resultarían más adecuados los esquemas *SIMPLE* o *SIMPLEC*.

El esquema *PISO* puede mantener el proceso de convergencia más estable aun usando elevados *time steps* y un factor de subrelajación para la presión y la cantidad de movimiento de la unidad. Sin embargo, en problemas estacionarios, el esquema *PISO* con *neighbor correction* no aporta ventajas sobre el uso de los esquemas *SIMPLE* o *SIMPLEC* con factores de subrelajación óptimos.

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

3.3 TRANSPORTE DE ESPECIES

Con Fluent se pueden modelar los fenómenos de mezcla y transporte de especies químicas mediante la resolución de las ecuaciones de conservación que describen los fenómenos de convección, difusión y reacciones para cada especie participante. Múltiples reacciones químicas se pueden modelar, en reacciones que ocurren en la zona principal, zonas cercanas a las paredes y regiones porosas. Independientemente de si existe reacción entre las fases o no.

3.3.1 Reacciones Volumétricas

3.3.1.1 Ecuaciones del transporte de especies

Cuando se elige resolver ecuaciones de conservación de especies químicas, Fluent predice la fracción másica local para cada especie, Y_i , a través de la solución de la ecuación de convección o difusión para cada especie i . Esta ecuación de conservación toma la forma siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot Y_i) + \nabla \cdot (\rho \cdot \bar{v} \cdot Y_i) = -\nabla \cdot \bar{J}_i + R_i + S_i \quad \text{Ec- 3.28}$$

Donde R_i es el valor neto de producción de especies por reacción química, S_i es la tasa de creación por adición de la fase dispersa, definida por el usuario.

N-1 ecuaciones de este tipo serán resueltas para las N fases que conforma la composición de especies. Evidentemente la suma de las fracciones máscas de las especies debe resultar igual a 1 y la fracción máscica de la especie N-esima se determinará de forma que a la unidad se le resta la suma de las fracciones máscicas de las N-1 especies restantes.

Para minimizar el error el término N deberá ser una especie tal que tenga un gran valor de fracción máscica como sucede por ejemplo con el nitrógeno cuando el oxidante es el aire.

3.3.1.2 Difusión máscica en flujo laminar.

En la ecuación anterior el término \bar{J}_i representa la difusión máscica en el flujo, la cual surge de los gradientes de concentración de temperatura.

Por defecto Fluent utiliza una aproximación a la Ley de Fick para modelar la difusión máscica debida a los gradientes de concentración. La expresión que adquiere este término en Fluent es:

$$\bar{J}_i = -\rho \cdot D_{im} \nabla Y_i - D_{T,i} \cdot \frac{\nabla T}{T} \quad \text{Ec- 3.29}$$

Aquí D_{im} es el coeficiente de difusión molecular en la mezcla de las especies y $D_{T,i}$ es el coeficiente de difusión térmico. En algunos flujos laminares la dilución de las especies puede no ser suficiente, y necesitar un modelo de difusión para multicomponentes.

3.3.1.3 Difusión máscica en flujo turbulento

La ecuación para la difusión máscica en flujo turbulento es:

$$\bar{J}_i = -\left(\rho \cdot D_{im} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i - D_{T,i} \cdot \frac{\nabla T}{T} \quad \text{Ec- 3.30}$$

Donde Sc es el número de **Schmidt** $Sc = \frac{\mu_t}{\rho \cdot D_{ti}}$ siendo μ_t la viscosidad turbulenta y $D_{T,i}$ la difusividad turbulenta. El valor del Sc por defecto es 0.7, el efecto de la difusividad laminar en flujos turbulentos es despreciable por tanto no es necesario introducirlo.

3.3.1.4 Tratamiento del transporte de especies en la ecuación de la energía

Para flujos de mezcla con multicomponentes, el transporte de entalpia debido a la difusión será:

$$\nabla \cdot [\sum_{i=1}^n h_i \cdot \bar{J}_i] \quad \text{Ec- 3.31}$$

Este efecto puede ser significativo en el valor de la entalpía y hay que tenerlo en cuenta. En concreto si el número de Lewis se aleja de la unidad.

$$Le,i = \frac{K}{\rho \cdot C_p \cdot D_{im}} \quad \text{Ec- 3.32}$$

con K conductividad térmica.

3.4 CONDICIONES DECONTORNO

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

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

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

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

- *Intake fan*: es similar a la condición *inlet vent* sólo que para casos de flujos externos.
- *Outlet vent*: se emplea para definir coeficientes de pérdidas, dirección del flujo, temperatura y presión ambiente a la salida del flujo.
- *Exhaust fan*: se emplea para establecer las condiciones fluidas, térmicas y de presión, en las que ha de producirse la salida del flujo.

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

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

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

Además de las condiciones de contorno, hay que definir las características o comportamiento del fluido (densidad, calor específico, viscosidad, conductividad térmica, etc.), ya sea constante o dependiente de la temperatura.

3.5 CONVERGENCIA ITERATIVA

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

3.5.1 Residuos

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

3.6 DEFINICIÓN DE LA GEOMETRÍA Y DOMINIO COMPUTACIONAL.

El principal objetivo de este proyecto es analizar el comportamiento de un fluido (agua en este caso) en cuanto a los fenómenos de mezcla y dispersión que se producen con un flujo oscilatorio en el interior de un tubo en el cual se insertan unos deflectores (muelle) y cómo este flujo principal dispersa un volumen discreto de otro fluido (también agua) a lo largo del tubo, comprobando tiempos de residencia, concentraciones, etc mediante los mecanismos que se describirán posteriormente. Para poder reproducir el flujo se utilizarán varias “herramientas” informáticas como son Fluent, Matlab y Gambit.

Debido a que generar un muelle mediante Gambit es un trabajo laborioso, pues se han de definir distintos planos contiguos que dan lugar a la geometría del muelle mientras se va introduciendo la rotación característica del muelle en cada plano etc, se ha dispuesto de un programa diseñado en Matlab, el cual genera directamente a partir de nuestros datos del muelle característicos la geometría deseada.

3.6.1 Diseño del mallado en Gambit

Como se comenta anteriormente, se dispone de un programa en Matlab generador de la geometría, en este se han de introducir los siguientes datos para definir el muelle:

- *Datos geométricos:*
 - ✓ Longitud del paso del muelle: 7.5mm
 - ✓ Diámetro interior del tubo: 5mm
- Espesor del muelle: 1.2mm
- *Valores de discretización:*
 - ✓ Elementos o planos por paso: 35
 - ✓ Pasos totales: 1
- *Tamaño de la zona de contacto con el tubo:*
 - ✓ Límite de contacto: 17

Límite de transición: 42

➤ *Número de caras en las que se divide el domino:*

✓ Numero de subdominios: 3

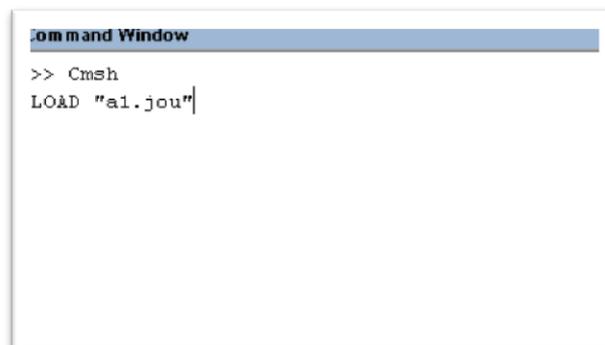
✓ Numero de subdominios limitados por aristas:

A[0,3] donde A["num de subdominios limitados por 3 aristas", "num de subdominios limitados por 4 aristas"].

Límite de contacto y de transición son los ángulos formados entre la tangente a la curva del muelle y la tangente a la curva del tubo en los puntos donde se cortan ambas geometrías. Se puede elegir una mayor cantidad de planos por paso, y también introducir más pasos, pero esto último ralentiza gambit, y si se toman muchos planos por paso pueden resultar redundantes en cuanto a la resolución del problema en Fluent, no obstante hay varios criterios para seleccionar estos datos de entrada los cuales no son el objetivo de este PFC.

Este programa va generando una serie de journal que se han de ir cargando en Gambit, y realizando ciertas operaciones.

En primer lugar se inicia Gambit llamando al fichero Muelle, se ha de elegir la ruta de guardado en el mismo lugar donde se tienen los archivos de matlab, se van a describir los pasos de cómo generar la geometría de un paso del muelle con gambit sin entrar en profundidad sobre cómo se generan los journal y como es el programa para generarlos. Se disponen de dos archivos de matlab llamados *replaceinfile.m* y *Cmsh.m* este último hace la llamada al anterior, ejecutamos *Cmsh.m* en matlab y el programa nos imprime por pantalla lo siguiente:



```
Command Window
>> Cmsh
LOAD 'a1.jou'
```

Figura 3-5

El programa ha generado el primer journal que se debe cargar en gambit llamado *a1.jou* por tanto ahora en gambit: **File/Run journal** -> Se abre la ruta del journal "a1.jou" y se hace click en **accept** el programa generará el primer plano del muelle como se muestra en la imagen.

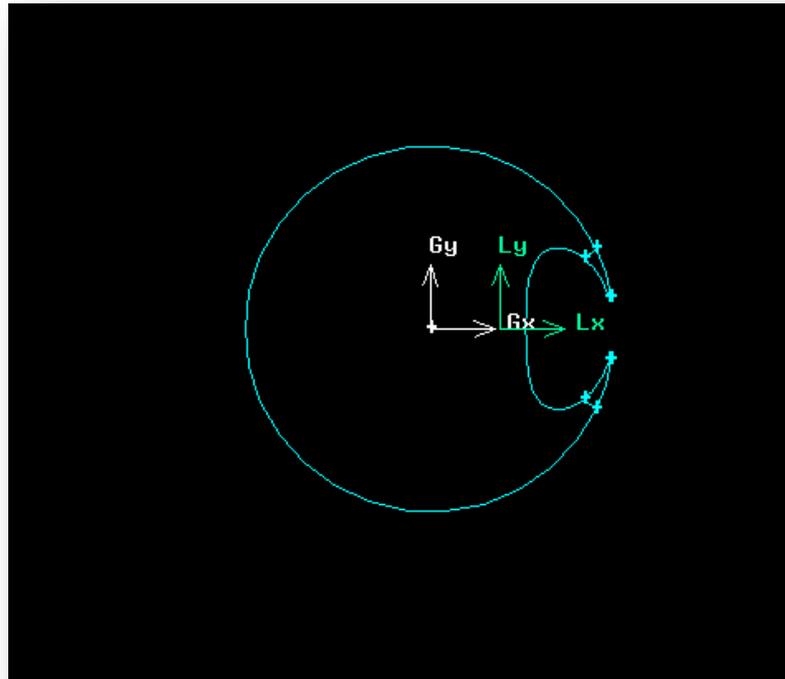


Figura 3-6: Sección del tubo con el muelle

En esta figura se aprecia la sección del tubo con el muelle, como se observa en la imagen hay una zona donde no está unido, la zona de contacto tubo-muelle, se podría acercar un poco más, modificando el ángulo anteriormente mencionado límite de contacto, pero puede dar lugar a problemas en la resolución en Fluent debido a que los elementos de la malla deben ser muy pequeños en esas zonas cercanas al punto de contacto pudiendo generar una distorsión demasiado elevada en el mallado.

A continuación se genera el mallado, distinguiéndose tres caras en la imagen llamadas face.1, face.2, face.3 siendo face.3 la cara mayor de las tres, y face.1, face.2 las dos caras simétricas de la zona de contacto.

3.6.1.1 Generación del mallado

En primer lugar se va a definir la malla de las caras 1 y 2, como sigue:

1- Zoom de la cara 1 mediante ctrl + botón izquierdo del ratón

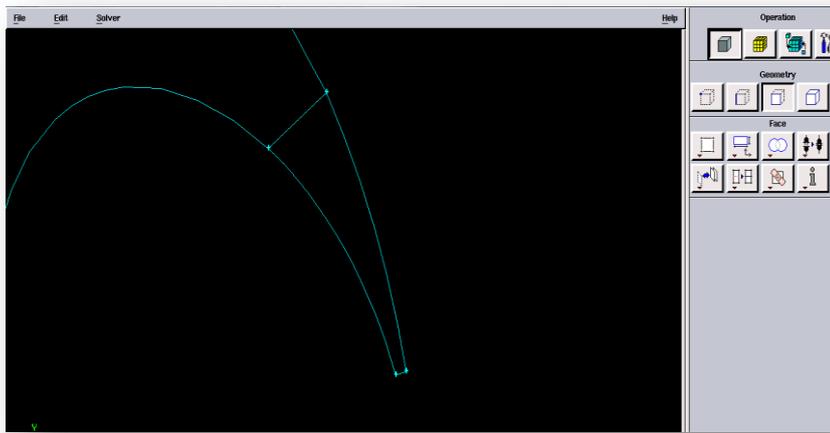


Figura 3-7: Cara 1

2- Selecciona el icono la siguiente combinación de iconos en el cuadro de herramientas se desplegará la ventana Mesh Edges.

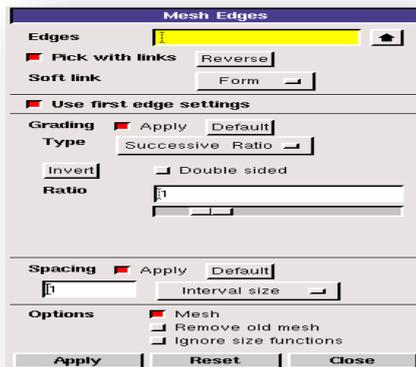


Figura 3-9: Menu mallado

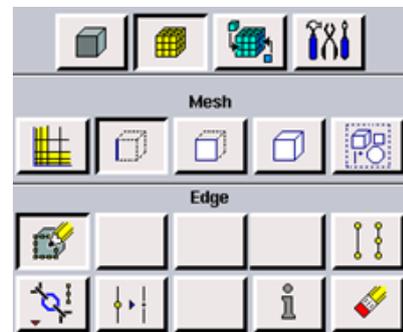


Figura 3-8

3- Selecciona las aristas que se han de mallar, (si se hace click en el botón derecho y dejando este pulsado se pulsa también el izquierdo el cursor se cambia a modo selección y se podrán seleccionar más fácilmente las aristas que se desean mallar).

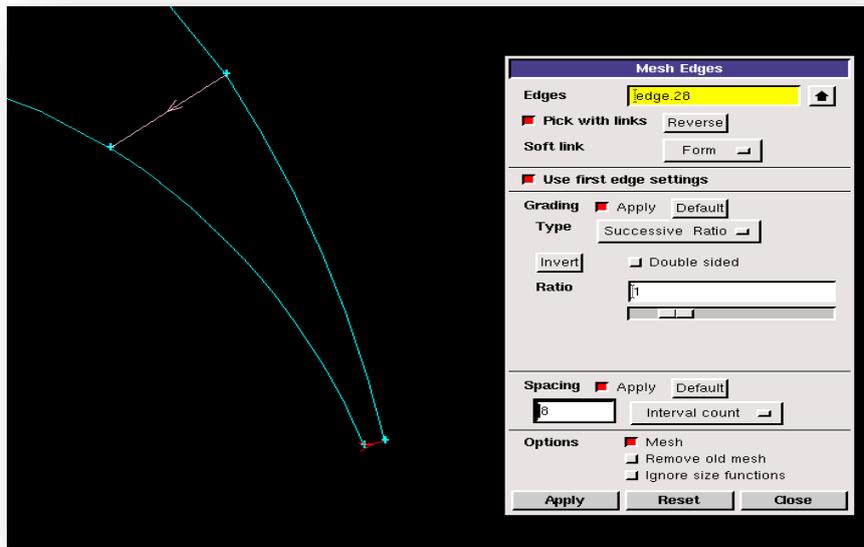


Figura 3-10: Panel de selección de líneas a mallar

En la subventana Spacing se elige interval count (esto es introducir directamente el número de puntos) y introduce 8 puntos.

- 4- Se hace click en **Apply** y se verán los puntos dibujados en azul sobre las aristas seleccionadas.
- 5- A continuación se seleccionan las otras dos aristas que aún no se han mallado.

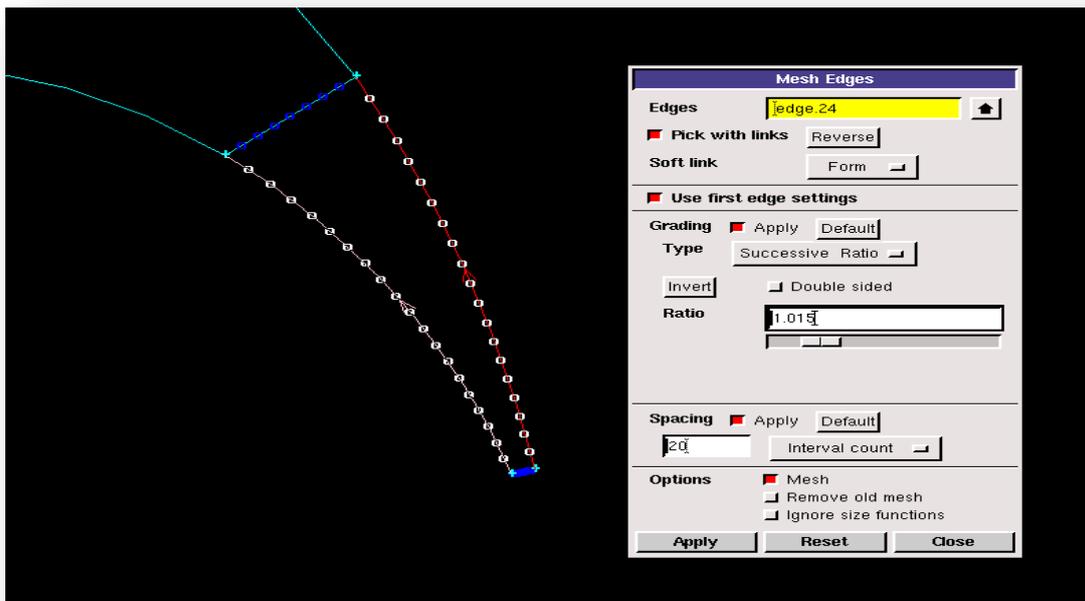


Figura 3-11: Líneas malladas con rango de crecimiento de malla

Al seleccionar las aristas aparece la flecha que se aprecia en el centro de las mismas con esta flecha se indica hacia dónde va ir aumentando la distancia entre puntos cuando se selecciona un ratio de crecimiento como el que se ha introducido ahora de 1.015, elegidos 20 puntos en cada arista estos estarán más juntos en la zona más estrecha pues interesa que allí haya un mayor número de puntos de resolución.

6- Click en **apply**.

Con la otra cara (face.2) se procederá igual mientras que para face.3 se muestra a continuación.

1- Selecciona una de las dos líneas, por ejemplo la interior.

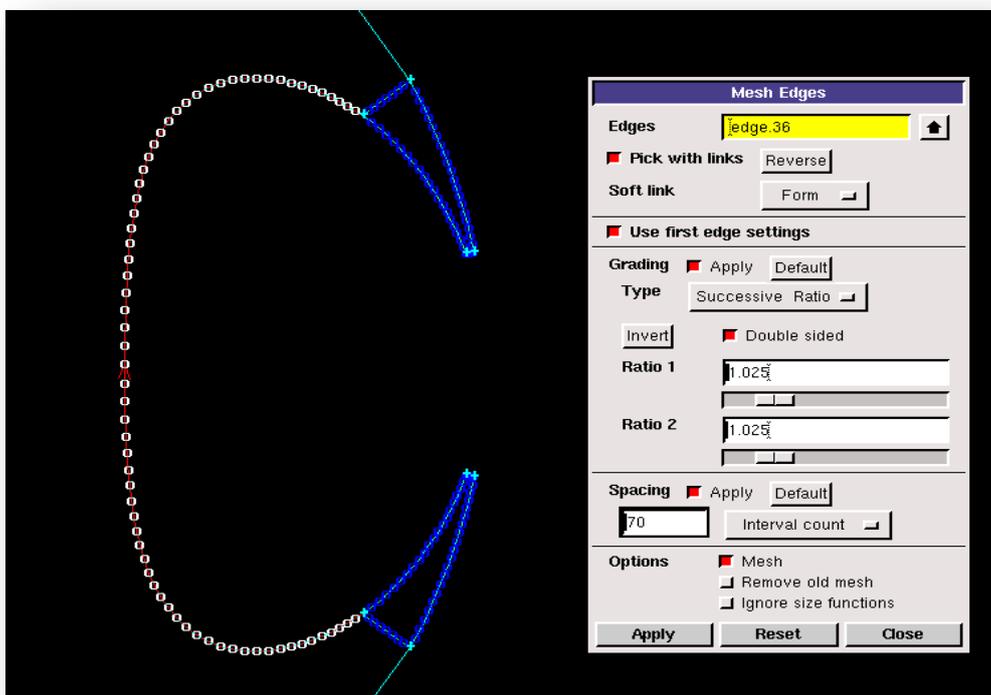


Figura 3-12: Mallado face 3 con doble rango de crecimiento línea del muelle

2- Como se aprecia se ha elegido un doble patrón de crecimiento con sentido desde los vértices hasta el centro de la línea, y 70 puntos.

3- Click en **Apply**.

4- Ahora seleccionando la línea exterior

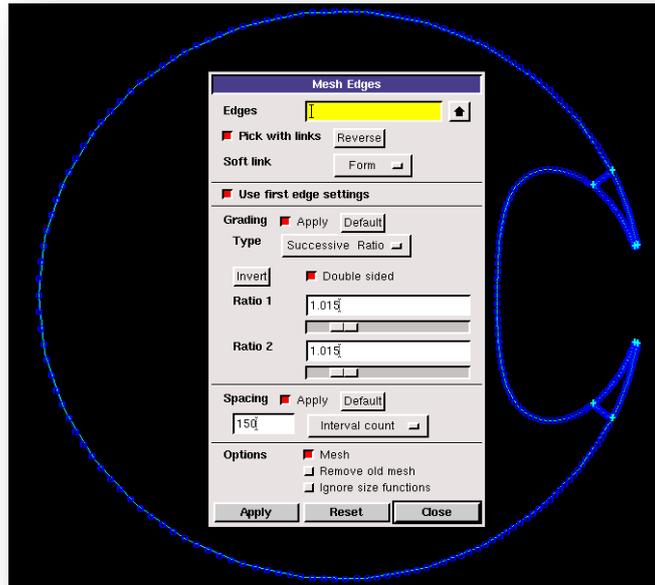


Figura 3-13: Mallado de face 3 línea exterior

5- En este caso el patrón de crecimiento escogido como **1.015** inferior al anterior caso pues la longitud de esta curva es mayor, introducidos aquí 150 puntos.

6- Click en **Apply**.

Como se mencionó anteriormente en el centro del tubo no es necesario un gran número de puntos pues el flujo no cambia tanto en esa zona como en la cercanía de la pared y del muelle por tanto se puede definir en gambit un patrón de crecimiento de la malla desde la pared hasta el centro del tubo para tener así un menor número de puntos de cálculo y aligerar el peso numérico de este mallado. Seleccionando la siguiente combinación de pestañas en la ventana de herramientas se muestra la siguiente ventana en pantalla.

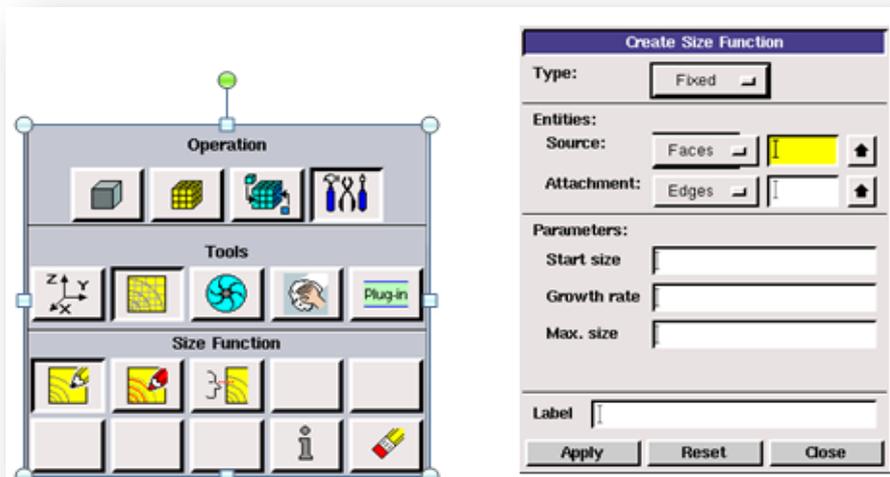


Figura 3-14: Menú función de crecimiento del mallado

- 1- En **source** se ha de elegir **Edges**, escogiendo la exterior en primer lugar como punto de partida del patrón de crecimiento.
- 2- En **Attachment** se ha de escoger la opción **Faces** y elegir *face.3* como zona final.
- 3- En **Start size** se introduce el inicio del tamaño entre puntos, que viene dado por la distancia anteriormente elegida, 0.08.
- 4- **Growth rate**, es el rango de crecimiento, se introduce un valor de 1.4.
- 5- **Max size** es el tamaño máximo de distancia entre puntos, se introduce un valor de 4.
- 6- Especificar el nombre de la función por ejemplo *patron1*.
- 7- Click en **Apply**.

Puesto que este patrón solo actúa desde la línea exterior del tubo hacia el centro se debe también definir otro que actúe desde la línea interior hacia el centro del tubo, procediendo de la misma forma pero cambiando algunos datos.

- 1- En **Source** se elige ahora la línea interior.
- 2- En **Attachment** se elige la cara *face.3*.
- 3- **Start size** en este caso es 0.06.
- 4- **Growth rate** y **Max size** se deja en 1.4 y 4 respectivamente.
- 5- Especifica el nombre como *patron2*.
- 6- Alick en **Apply**.

Volviendo al menú de generación del mallado mediante la combinación de pestañas siguientes.

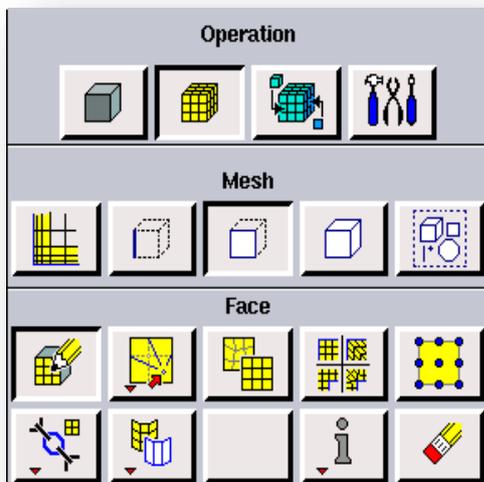


Figura 3-15

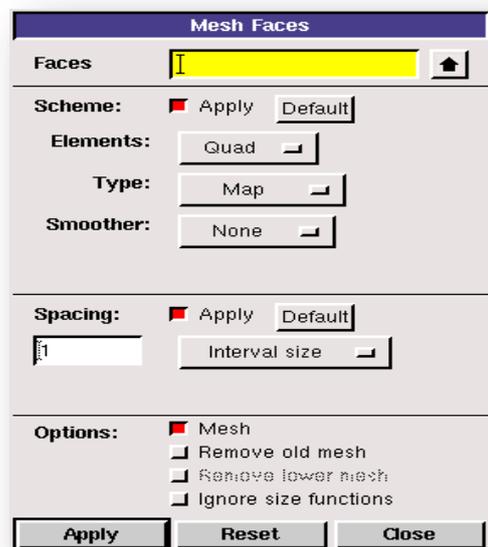


Figura 3-16

En este caso se elige en **mesh** el icono **Face** y se desplegará la ventana Figura 3-16:

En la pestaña **Faces** se eligen en primer lugar las caras *face.1* y *face.2* que por ser iguales tendrán el mismo mallado, tras esto se hace click en **apply** y automáticamente gambit malla estas dos caras.

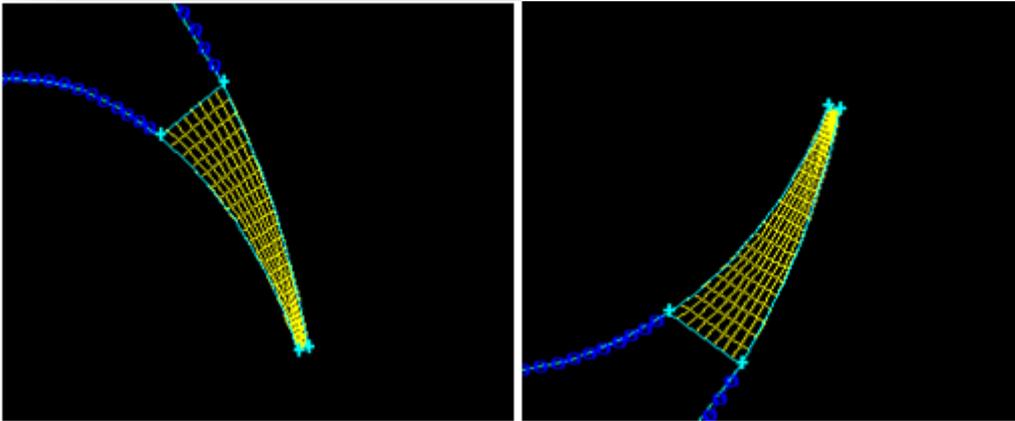


Figura 3-17: Mallado de las caras 1 y 2

Procediendo igual con face.3 solo que en esta se ha de cambiar el tipo de elemento a triangular por no tener los mismos números de puntos en las dos líneas que delimitan esta superficie, se hace click en apply para obtener así el mallado de la zona central.

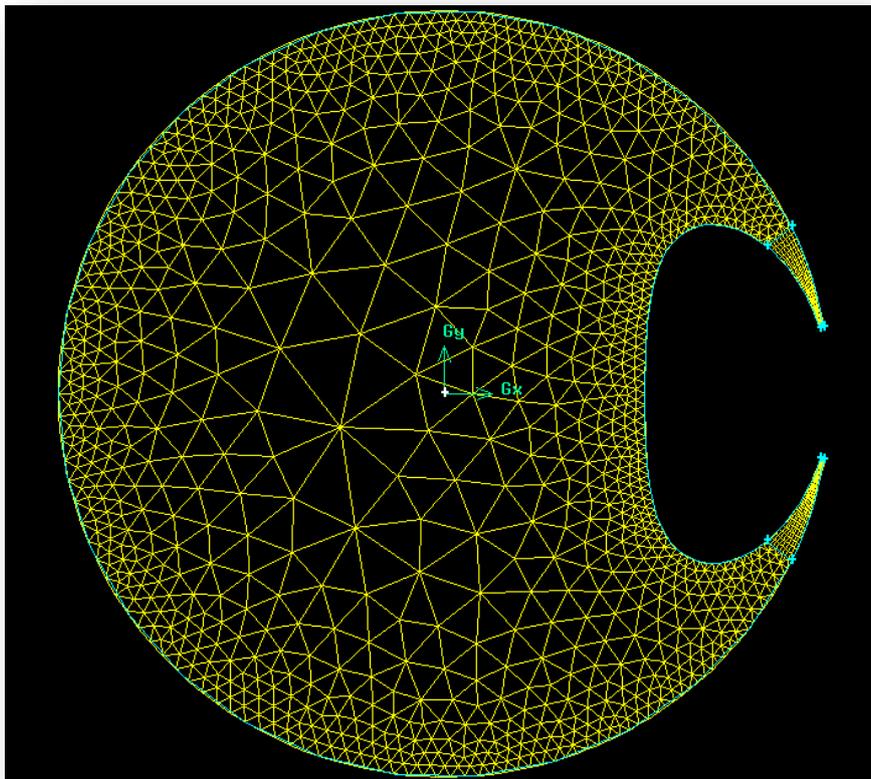


Figura 3-18: Mallado total sección del tubo con el muelle

Se puede apreciar perfectamente los patrones de crecimiento introducidos en la cara central (face.3) siendo los elementos cerca de la pared del tubo del orden de los que hay en las caras 1 y 2, y en el centro del tubo mucho mayores. En gambit se puede ver el número total de puntos que se han generado en esta malla que es de 910.

3.6.1.2 Generación de un paso del muelle

Una vez mallado se vuelve a matlab que generará "a2.jou" de nuevo en **Run journal** se ejecuta este archivo para seguir generando la geometría.

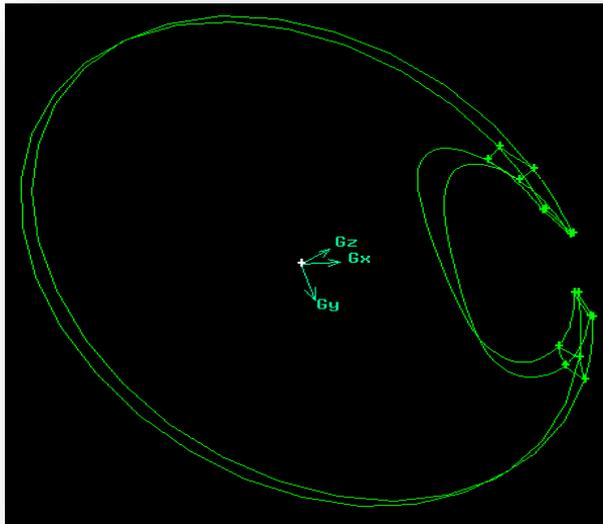


Figura 3-19

Se puede apreciar cómo se ha trasladado al mismo tiempo que se ha girado un cierto ángulo el plano, por tanto se tiene un pequeño elemento diferencial de volumen.

Ahora se definen las paredes del tubo seleccionando las opciones siguientes en la barra de herramientas según la **figura 3-19**:

Que despliega la siguiente ventana **Figura 3-20**:

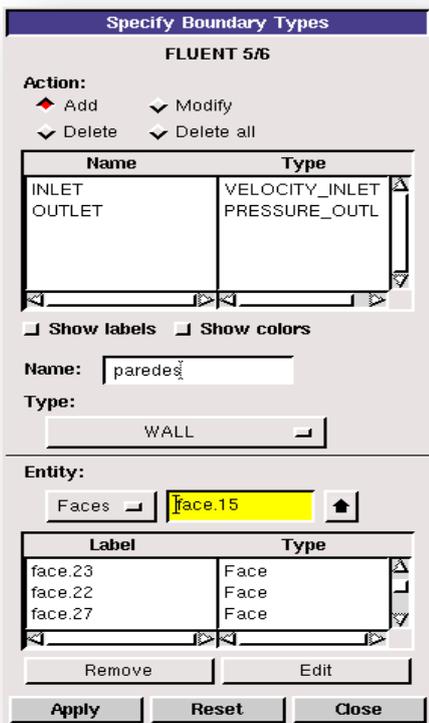


Figura 3-20

- 1- Opción **add** .
- 2- En la pestaña **Name** introducir paredes como nombre.
- 3- En **Type** seleccionar **WALL**
- 4- Seleccionar las caras del volumen que forman la pared del tubo.
- 5- Click en **apply**.

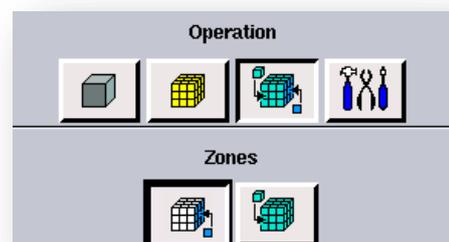


Figura 3-21

Tras esto, de nuevo en matlab, se generará el archivo “a3.jou” este irá trasladando y girando el plano con la malla incluida hasta completar un paso entero. Finalmente se ha de cargar “a4.jou” y tras esto exportar la malla a Fluent. La geometría generada se puede apreciar en la imagen siguiente, en la cual se ha eliminado la malla para poder apreciar mejor el muelle.

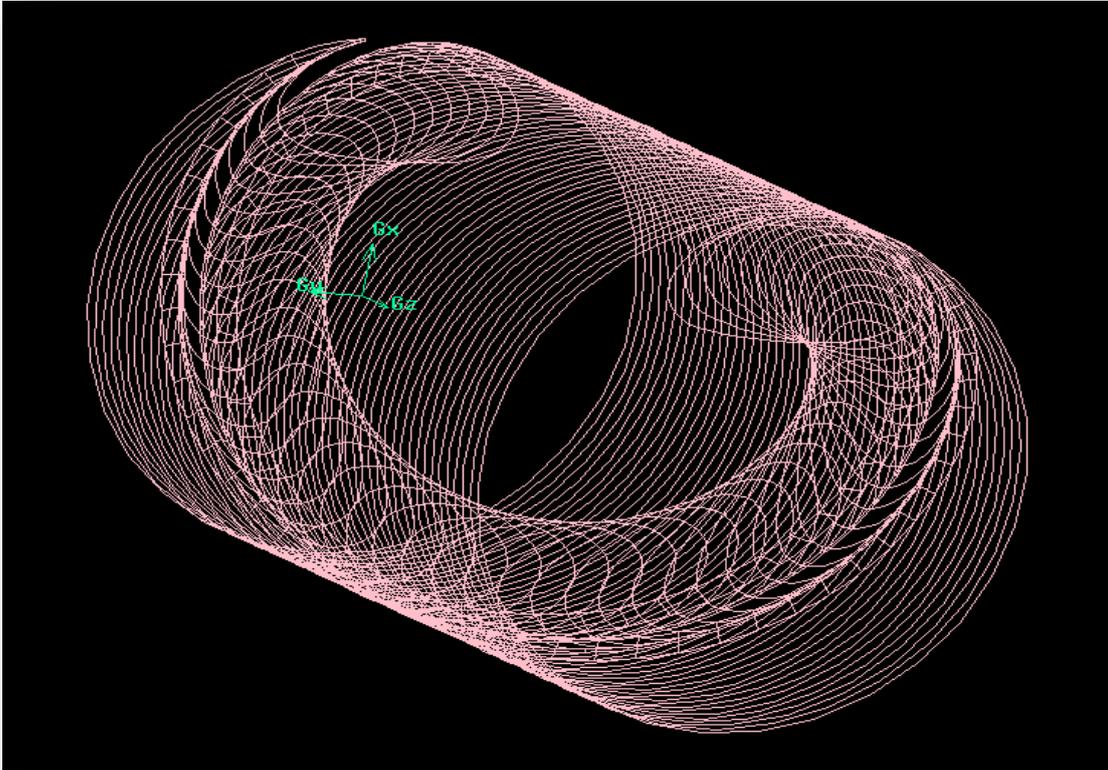


Figura 3-22: Vista del recorrido del muelle en el interior del tubo

Finalmente exportar la malla siguiendo la línea de comandos **file/export/mesh..** introduciendo el nombre que se desea, se crea el archivo con extensión .msh el cual posteriormente se cargará en gambit.

3.6.2 Diseño y configuración en Fluent

A continuación se desarrollará la forma de configurar el programa Ansys Fluent para la cual se quiere resolver el flujo en el interior del tubo con el muelle definido en gambit.

3.6.2.1 Carga del paso en Fluent

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

- Inicia fluent en modo **3ddp** (3 dimensiones y doble precisión).
- Carga el archivo guardado de Gambit con nombre *muelle.msh*.
 1. File/read/case...

2. Busca el archivo en el directorio donde se guardó.
3. Selecciona y click en **Abrir**.

Se mostrará en pantalla la siguiente información.

```

51372 nodes.
10850 mixed wall faces, zone 3.
2342 mixed pressure-outlet faces, zone 4.
2342 mixed velocity-inlet faces, zone 5.
200658 mixed interior faces, zone 7.
81970 mixed cells, zone 2.

Building...
grid,
materials,
interface,
domains,
zones,
  default-interior
  inlet
  outlet
  paredes
  interior
shell conduction zones,
Done.

```

Figura 3-23: Ventana de comandos de Fluent

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

- **Grid/Check** (Siempre se ha de chequear la malla).
- **Grid/Scale..** despliega la ventana siguiente

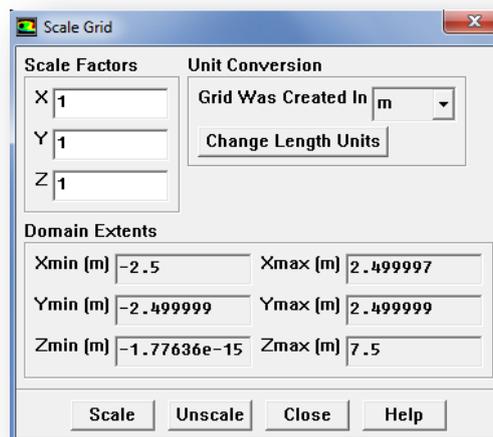


Figura 3-24: Menú Escalar la malla

- En **Unit Conversion** elegir *Grid Was Created In* “mm” y automáticamente los valores de **Scale Factors** se cambian a 0.001.
- Click en **Scale**.
- Guardar como *paso.cas.gz*. (**File/write/case...**).

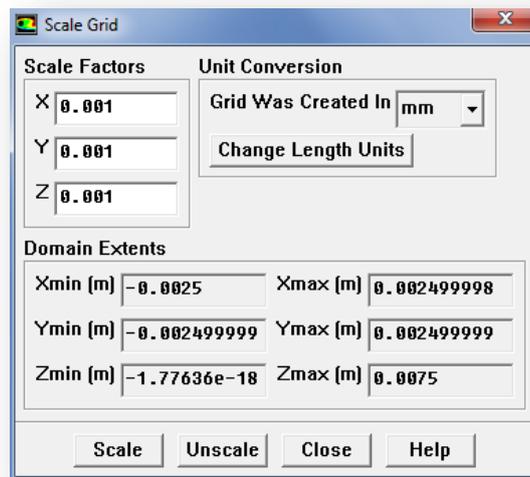


Figura 3-25: Malla escalada a metros

Donde se puede ver como **Xmax**, **Ymax**, **Zmax** han sido multiplicados por el factor 0.001 obteniendo el valor real en metros.

Posteriormente se puede observar la malla creada mediante la herramienta:

- **Display/Grid...** despliega la ventana siguiente.

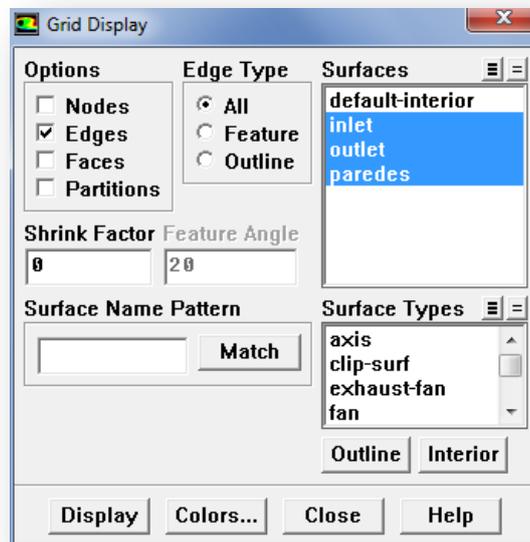


Figura 3-26: Menú despliegue de malla

Se pueden seleccionar diferentes superficies, como se aprecia en Surfaces, aparecen los nombres definidos en gambit, inlet, outlet, paredes.

➤ Click en **Display**.

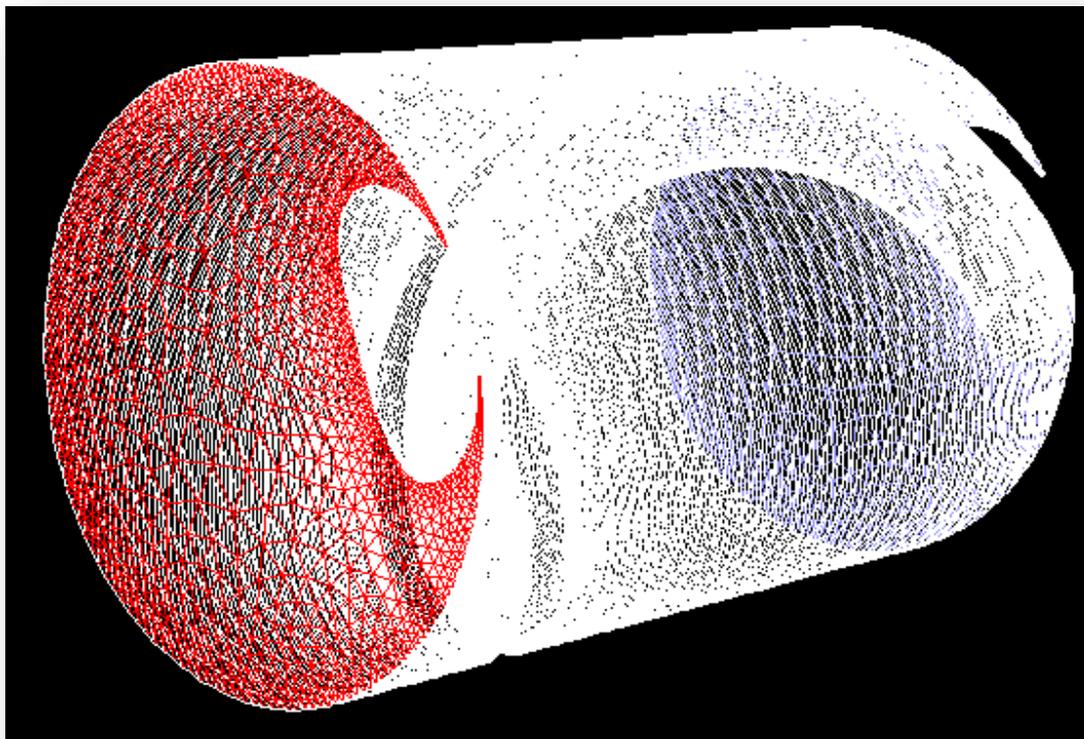


Figura 3-27: Mallado de un paso cargado en Fluent.

Ahora bien, para conseguir tener un tubo de una longitud suficiente como para analizar el flujo en su interior se han de ensamblar varios pasos, en este caso ensamblaremos 25, lo que dará una longitud total de $0.075 \times 25 = 0.1875$ m:

- 1- Se ensamblan 20 pasos.
- 2- Se ensambla un paso donde se define la inyección del trazador.
- 3- Ensamblaje de otros 4 pasos para completar los 25.

3.6.2.2 Construcción de la geometría del tubo.

Una vez que se tienen definidos el paso del tubo y el paso del tubo donde se inyecta el trazador se debe construir la geometría del tubo, para lo cual se dispone de una opción en Fluent en la que se pueden fusionar los distintos pasos del tubo llegando a tener una cantidad suficiente de pasos para poder analizar la mezcla y dispersión del trazador a lo largo de la geometría. En el presente proyecto se van a analizar la dispersión tanto en flujo estacionario como en flujo oscilatorio, en el caso estacionario se escogerá una longitud de 25 pasos que equivale a 0.1875 m de tubo, mientras que en el caso del oscilatorio y por falta de recursos y tiempo para estudiar un tubo de tal longitud se analizará la dispersión en un tubo con 20 pasos (0.15m).

Esta situación podría parecer un problema en principio y sobre todo a la hora de comparar unas curvas de fracción másica del trazador en estacionario y en periódico pero gracias al análisis dimensional, es decir, la adimensionalización mediante tamaños y magnitudes

características de geometría, velocidad del flujo, etc, se podrán comparar las curvas sin mayor problema.

1. Para ensamblar se van a seguir una serie de pasos, los cuales pueden parecer algo rudimentarios pero muy sencillos y esquemáticos.

- 1.1- En la ruta **Grid/translate...** se traslada el primer paso una distancia tal que se pueda introducir un segundo paso quedando ambos enfrentados,

es decir, 0.0075m, como se ve en **Traslacion Offsets** en la dirección del *eje z* se introduce este valor.

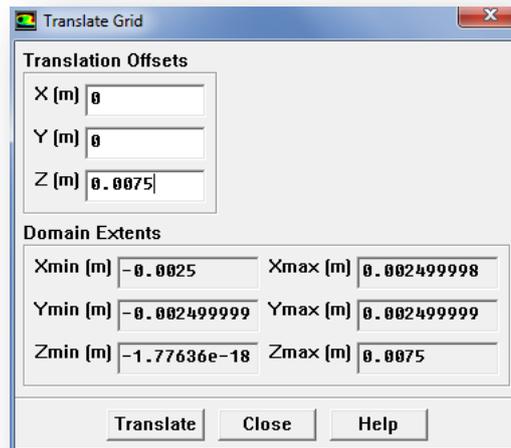


Figura 3-28

- 1.2- Click en **Translate**.
 2. Después de trasladar se trata de cargar de nuevo un paso, como sigue:
 - 2.1- **Grid/Zone/Append case file...**
 - 2.2- Buscar de nuevo el archivo *paso.cas.gz*.
 - 2.3- Tras esto se tendrán ambos pasos enfrentados pero no unidas sus celdas por tanto habrá que unirlos.

3. Mediante la herramienta Fuse, **Grid/Fuse** donde se eligen las caras que se desea unir.



Figura 3-29

Para saber que caras son las que se han de unir sin riesgo de cometer un error es mejor ir a **Display/Grid** y ver cuáles son las caras que coinciden en el espacio.

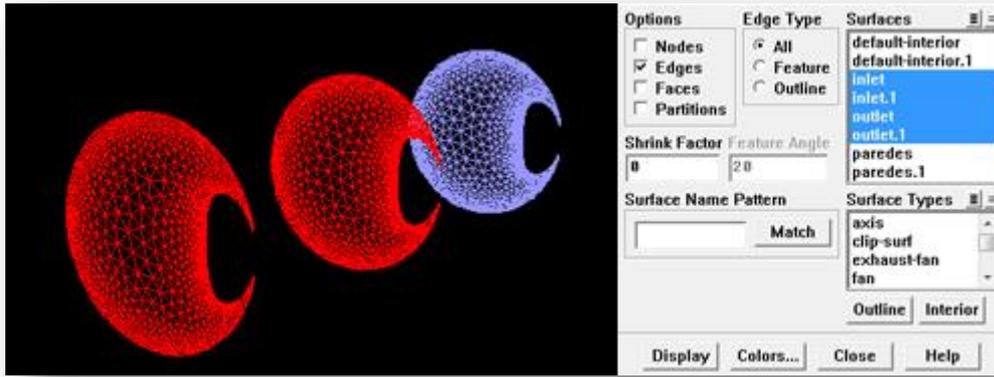


Figura 3-30: Vista secciones de fusión de dos pasos

En este caso coinciden las superficies llamadas **inlet** y **outlet.1** por tanto son estas las superficies a seleccionar para unir ambos pasos.

4. Después de unir ambos pasos se guarda como **File/write/2pasos.cas.gz**.

Para el siguiente paso se trasladará $Z=0.015m$, es decir, la longitud de dos pasos para así poder fusionar este mallado de dos pasos consigo mismo obteniendo un mallado de 4 pasos. Se guarda este como **4pasos.cas.gz** y se vuelve a trasladar esta vez la distancia correspondiente a los 4 pasos y así sucesivamente hasta llegar a los 20 pasos con cuidado de unir siempre las caras de la forma que se ha descrito.

5. Fusión del paso del trazador. Para poder inyectar el trazador se utilizará la función Patch que se explica al final de este capítulo, esta función requiere un diferencial de volumen en el cual se inyectará el trazador, por tanto se debe crear en Gambit a partir del paso del muelle generado anteriormente un diferencial de volumen llamado **trazador**, de la forma que sigue:

- 5.1- Abrir el archivo *muelle.dbs* donde se tenía guardada la geometría.
- 5.2- En la barra de herramientas, **Operations** se marcan las pestañas que se muestran en la siguiente figura.
- 5.3- Se abrirá la ventana
- 5.4- Se ha de dividir el conjunto de volúmenes (35 en total) en tres regiones todas de **Type Fluid**, los 15 primeros volúmenes [1,2,3,...,15] se denominaran Fluid1.

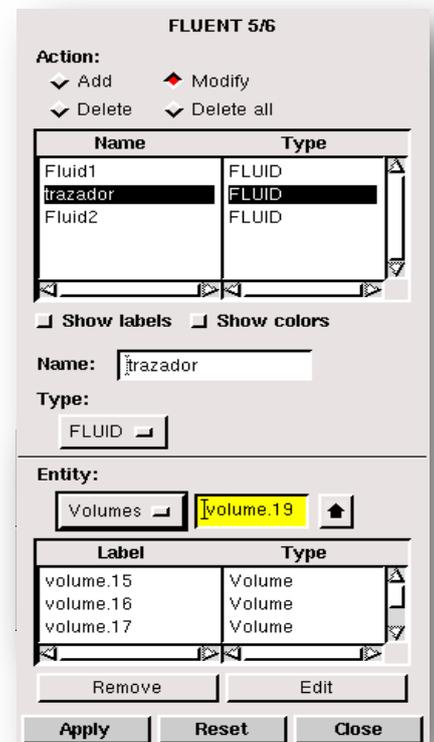


Figura 3-31: Configuración del trazador

Los 5 siguientes [16,17,18,19,20] se denominaran trazador que será la zona definida para inyectar este, mientras los últimos volúmenes [21,22,23,....,35] se les da el nombre conjunto Fluid2.

- 5.5- Guarda el fichero como *pasotrz.dbf*.
- 5.6- Exporta el fichero como *pasotrz.msh*, como se dijo anteriormente en **File/Export/mesh...**
6. Volviendo a fluent donde se tienen ya guardados los primeros 20 pasos , se trasladan estos la longitud de un paso ($z=0.0075m$) para introducir el *pasotrz.msh*, antes de nada se debe abrir este archivo chequearlo y escalarlo para que se pueda fusionar con los anteriores, cuando estén unidos se guarda como *21pasotrz.cas.gz*.
7. Finalmente se fusionan los 21 pasos con el fichero *4pasos.cas.gz* para obtener así los 25 pasos requeridos.
8. El motivo por el cual se han dejado 4 pasos entre el trazador y la entrada es sencillo y viene dado por el movimiento de las partículas al generar la oscilación ya que algunas de estas volverán hacia el inicio con el consecuente riesgo de que algunas se puedan perder en la entrada con lo cual se perdería volumen del trazador.

3.6.3 CONFIGURACIÓN DE UN CASO EN FLUENT

A continuación se configurará en fluent las opciones necesarias para modelar el caso de estudio, como se ha explicado anteriormente, en el quinto paso se introducirá el trazador, para ello fluent dispone de diferentes maneras, la opción Discrete Phase y species transport, se ha elegido el transporte de especies para ver la evolución del trazador en el tubo.

No se entrará a valorar qué tipo de solver es más efectivo y otros detalles sobre cómo se genera el flujo neto.

3.6.3.1 Modelado del transporte de especies.

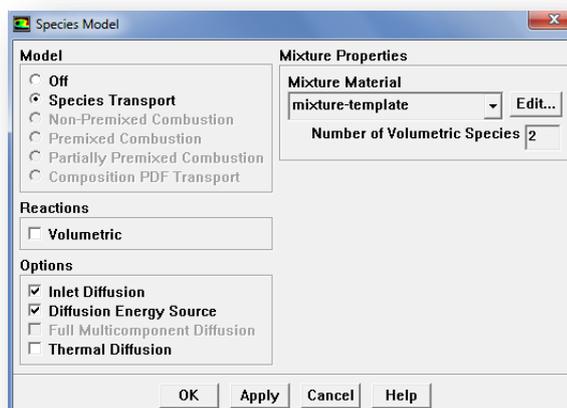


Figura 3-32: Menú transporte de especies

Define/Models/Species/Transport&Reaction... despliega la ventana siguiente:

- 1- Se ha de seleccionar en el recuadro **Model** la opción *Species Transport*.
- 2- No habrá reacciones pues tanto el fluido principal como el trazador serán agua líquida, así en el recuadro **Reactions** no se marca la pestaña *Volumetric*.
- 3- En el recuadro **Options** se ha de marcar *inlet Diffusion* para simular una difusión molecular ya desde la entrada del fluido. También se activará la opción *Diffusion Energy Source*.
- 4- Tras clicar en Apply saldrá una ventana que informa de que hay nuevas opciones y materiales disponibles.

Tras esto se deben elegir los fluidos de flujo principal y del trazador mediante la opción **Materials**:

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

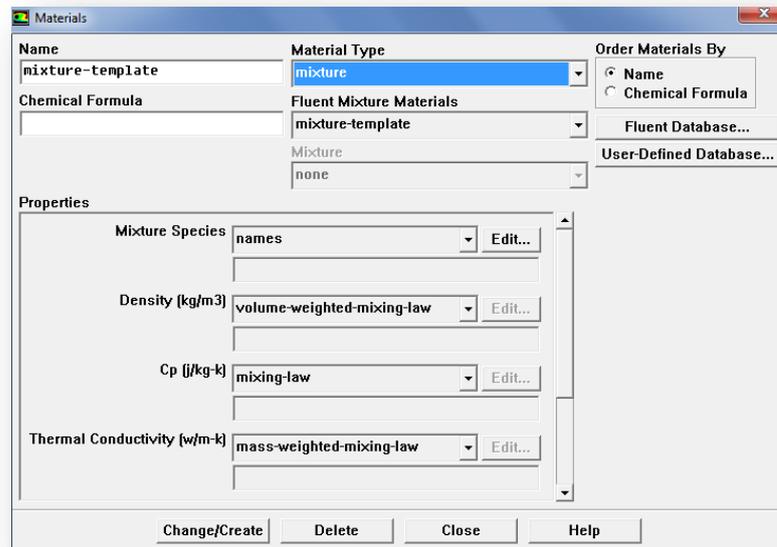


Figura 3-33: Definición de las propiedades y del tipo de material fluido

- 2- Ahora se han de añadir el agua desde Fluent Database, pinchando en ese botón se desplegará otra ventana donde se buscará H_2O (líquida).

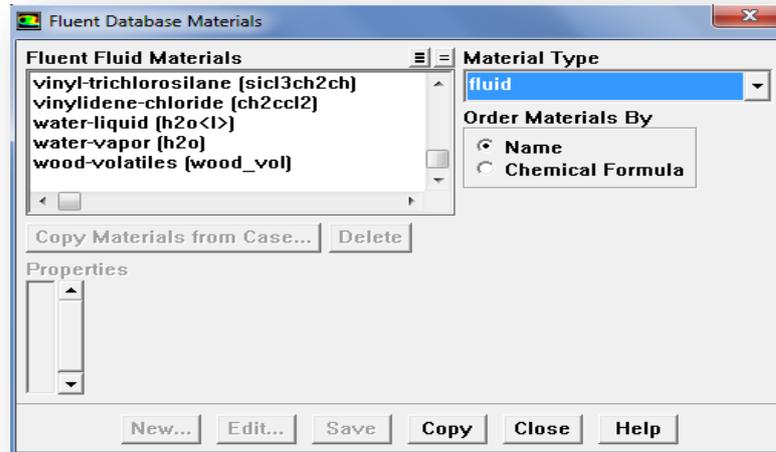


Figura 3-34: Database de los materiales disponibles en Fluent.

Seleccionando en **Material Type** la opción fluid, que es donde está contenida el agua líquida.

- 3- Click en Copy para sacar el fluido a la ventana anterior donde eligiendo en **Material Type** -> *fluid* aparecerá la opción de elegirlo en **Fluent fluids Materials** seleccionando el agua de la lista de materiales desplegados.

Una vez se tengan los materiales incorporados se pasa a configurar las propiedades y el nombre del mismo. Por ejemplo en la imagen se muestra que nombre se le da al fluido principal,

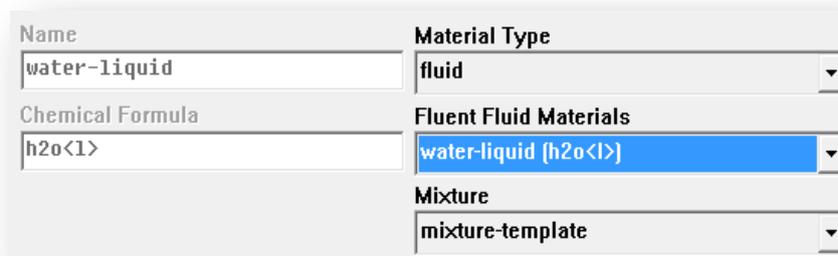


Figura 3-35: Ventana para elegir los fluidos del transporte de especies

Las propiedades que debe poseer el fluido y que se han de introducir en fluent son:

Property	Value
Density (kg/m ³)	998.2
Cp (j/kg-k)	4182
Thermal Conductivity (w/m-k)	0.6
Viscosity (kg/m-s)	0.001003
Molecular Weight (kg/kgmol)	18.0152

Figura 3-36: Pestaña para introducir las propiedades del agua (vienen por defecto)

Una vez definidas estas propiedades, las cuales vienen por defecto, se ha de hacer click en **Change/Create**, saltará una ventana automáticamente en la que se pregunta si se desea sobrescribir el fluido modificado, pinchamos en sí.

- 4- Ya definido este fluido principal, se trata ahora de definir el trazador, lo cual simplemente se realiza modificando el nombre del fluido principal (definido anteriormente como agua) por el nombre *trazador*. Tras esto de nuevo el programa preguntará si se desea sobrescribir el fluido anterior, en este caso se le dice que no para tener así ambos fluidos ya definidos.
- 5- Ahora bién, en la pestaña **Material Type** se debe escoger de entre las opciones (mixture,fluid, solid) la opción *mixture* y configurarla añadiéndole los materiales

Available Materials	Selected Species
water-liquid-new-new (h2o<I>-new-new)	trazador
water-liquid-new (h2o<I>-new)	h2o<I>
nitrogen (n2)	
oxygen (o2)	
water-vapor (h2o)	
air	

Figura 3-37: Selección de los elementos del transporte de especies.

- 6- definidos anteriormente. Para ello en la ventana **Properties** la pestaña **Mixture Species** se definen los fluidos participantes en el transporte de especies haciendo click en **edit** lo que despliega la ventana de configuración siguiente:

En la cual ya se deben introducir en la ventana **Selected Species** los nombres de los fluidos definidos, (h₂O y trazador) , click en Ok.

- 7- En Fluent también se puede configurar la forma de mezclado de las especies, es decir, la forma en la que las propiedades de la mezcla varían al introducir el trazador sobre la corriente de agua principal, se elegirán los siguientes modelos:

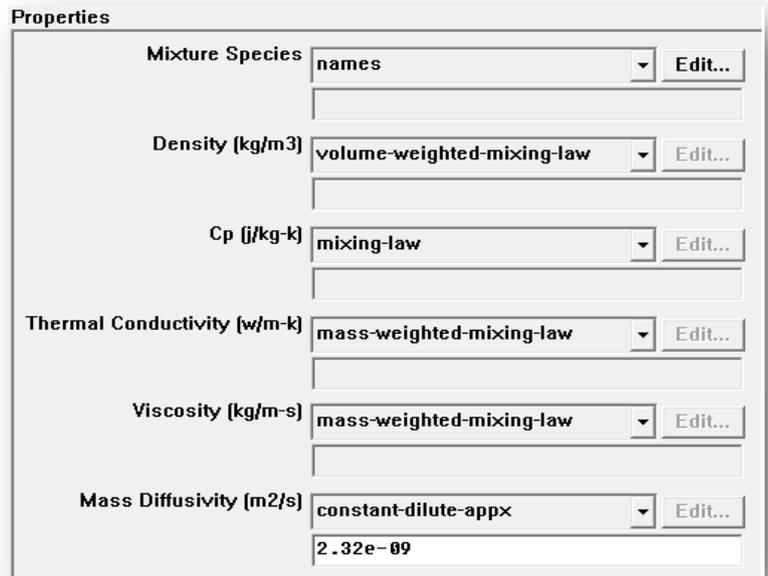


Figura 3-38: Propiedades de mezcla del trazador en el fluido principal

La constante de difusividad masica $2.32e^{-09}$ (m²/s) hay que introducirla manualmente.

- 8- Click en **Change/Create** y sobrescribir.

3.6.3.2 Definición del método de inyección.

Para inyectar el trazador en la corriente principal Fluent dispone de varias opciones, una de ellas es inyections la cual no se va a utilizar ni a valorar, y la otra es mediante la función Patch, la cual se encuentra mediante la línea de comandos: **Solve/initialize/Patch...** Esta opción funciona de forma que se ha de seleccionar un volumen dentro del tubo en el cual se inyectará el trazador, en el momento de inyección se ha de indicar en Fluent que este diferencial de volumen, llamado trazador y cuya definición se verá a continuación, se ha de llenar de agua del trazador en un instante, realizar así unas pocas iteraciones para después volver a “cerrar el grifo” dejando de inyectar trazador, momento a partir del cual se empieza a mezclar el trazador con el fluido de la corriente principal.

Para que se active la pestaña Patch primero se ha de inicializar el flujo esto es mediante la instrucción **Solve/initialize/initialize-flow**.

- 3- Como se puede ver por defecto **Value** se mantiene a "0" en el instante de la inyección este valor se ha de cambiar a "1" momento en el cual el diferencial de volumen definido se "llenará" de trazador.
- 4- Tras unas cuantas iteraciones y un diferencial de tiempo por ejemplo de 0.01 segundos se habrá inyectado una cierta cantidad de trazador.
- 5- A continuación se debe volver a introducir en **Value** el valor "0" para dejar de inyectar y a partir de este instante comienza el transporte del trazador por la corriente principal.

3.7 METODOLOGÍA PARA LA RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA.

A continuación se explica un procedimiento de trabajo para la resolución del problema con Fluent, debido a la complejidad del sistema (cada sección del tubo posee unos 990 nodos y se tienen 35 secc/paso x 25 pasos = 875 secciones, que multiplicadas por 990 nodos, se obtienen aproximadamente 866250 puntos donde se han de resolver todas las ecuaciones, continuidad, energía, cantidad de movimiento, ecuaciones de estado, etc) lo que lleva a pensar que un procesador corriente no tiene capacidad para resolver satisfactoriamente este gran sistema de ecuaciones, para ello la *Universidad Politécnica de Cartagena* nos ha permitido el uso del servidor que dispone de una potencia suficiente para resolver el problema. No entraremos a valorar el funcionamiento del mismo, solo la forma de proceder para aprovechar este recurso.

3.7.1 PROCEDIMIENTO GENERAL CASO ESTACIONARIO

Los pasos a seguir de forma general para el caso en estacionario serán:

- 1- Abrir en Fluent el archivo 2pasos.cas.gz.
- 2- Configurar en el mismo las propiedades (materiales, transporte de especies, etc) definidas anteriormente.
- 3- Definir condiciones periódicas en la entrada y la salida.
- 4- Resolver en estacionario y obtener una solución del campo de velocidades en la sección central del tubo de dos pasos.
- 5- Copiar la solución en una sección del tubo largo de 25 pasos.
- 6- Resolver tantos pasos de tiempo necesarios para que el trazador llegue a la salida.

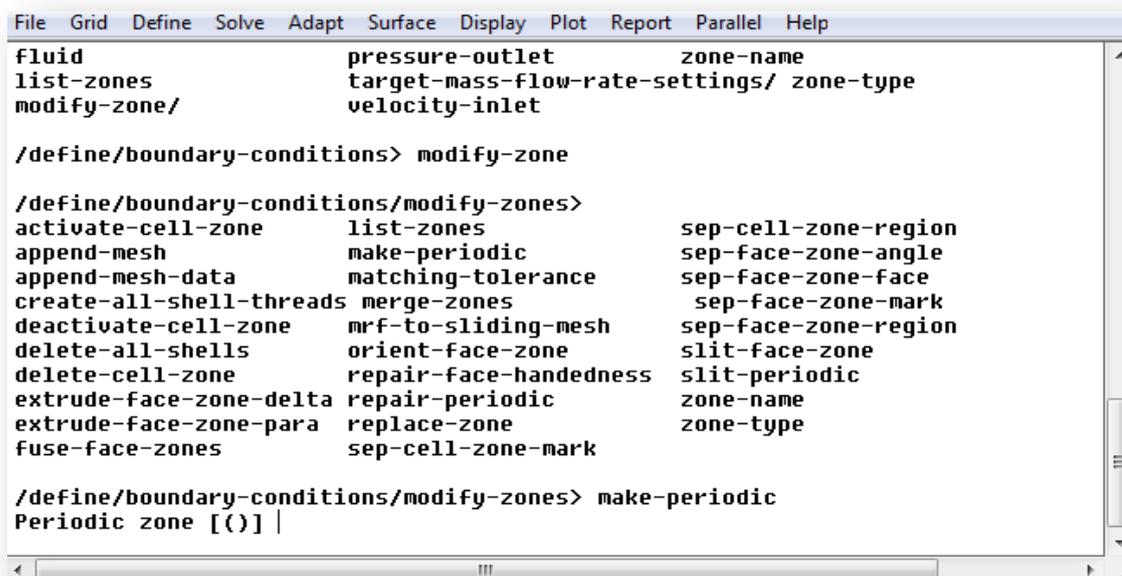
3.7.1.1 Definición de condiciones periódicas en la entrada y la salida:

Al definir las condiciones periódicas para la entrada y la salida lo que se está imponiendo es que tanto a la entrada como a la salida se tenga el mismo perfil de velocidades, como al introducir el muelle se desconoce cuál va a ser el campo de velocidades del fluido en el interior del tubo, se ha de introducir el gasto másico tal que la velocidad media sea la que se necesita en el experimento en cuestión, para ello se ha de conocer la sección efectiva y la velocidad, ya que el gasto se define como:

$$G = \rho \cdot Secc \cdot V = 998,2 \cdot 1,74954 \cdot 10^{-5} \cdot 0,01 = 0,0001746390828 \frac{kg}{s}$$

Por tanto esta es la cifra que se ha de especificar en Fluent para obtener un perfil de velocidades con velocidad neta $V = 0,01$ m/s. Para hacer periódicas estas zonas se ha de usar la ventana de comandos, introduciendo las siguientes líneas:

- 1- **Define/boundary-conditions/modify-zone/make-periodic...** como se muestra en la **Figura 3-37**:



```
File  Grid  Define  Solve  Adapt  Surface  Display  Plot  Report  Parallel  Help
fluid          pressure-outlet      zone-name
list-zones     target-mass-flow-rate-settings/ zone-type
modify-zone/   velocity-inlet

/define/boundary-conditions> modify-zone

/define/boundary-conditions/modify-zones>
activate-cell-zone      list-zones           sep-cell-zone-region
append-mesh            make-periodic        sep-face-zone-angle
append-mesh-data       matching-tolerance  sep-face-zone-face
create-all-shell-threads merge-zones          sep-face-zone-mark
deactivate-cell-zone   mrf-to-sliding-mesh sep-face-zone-region
delete-all-shells     orient-face-zone     slit-face-zone
delete-cell-zone       repair-face-handedness slit-periodic
extrude-face-zone-delta repair-periodic      zone-name
extrude-face-zone-para replace-zone         zone-type
fuse-face-zones       sep-cell-zone-mark

/define/boundary-conditions/modify-zones> make-periodic
Periodic zone [()] |
```

Figura 3-41: Configuración del modelo periódico.

- 2- Tras esto el programa pide las zonas donde se quiere establecer la condición de periodicidad, en este caso interesan la entrada (**inlet.1**) y la salida (**outlet**) por tanto introduciendo en primer lugar inlet.1 pulsando intro y en segundo lugar outlet tras lo cual se ha de pulsar intro dos veces.
- 3- Tras esto el programa pregunta si se desean condiciones periódicas rotacionales, se debe teclear **no** pues nos interesan condiciones periódicas traslacionales, por tanto tras introducir **no** + pulso intro automáticamente el programa las escoge traslacionales.

- 4- A continuación pregunta si se desea crear condiciones periódicas respondiendo **yes**, tras esto y por último pregunta *autodetect translation* vector se introduce de nuevo **yes**.
- 5- De esta forma se activará la opción **periodic-condition** en la pestaña **define**.

Abriendo esta pestaña aparecerá la siguiente ventana: Donde se debe especificar qué tipo de movimiento gobierna, en este caso como se comentó que se introducirá el gasto másico así pues en la ventana **Type** selecciona **Specify Mass Flow** en el cuadro **Mass Flow Rate** se introduce el gasto calculado anteriormente, como se aprecia está en Kg/s, mientras que la dirección de flujo es en según el eje z, por tanto, en **Flow Direction** se ha de imponer 1 en el recuadro del eje Z. Dejando el resto de opciones por defecto, click en **Ok**, ya se tendrán definidas las condiciones periódicas deseadas.

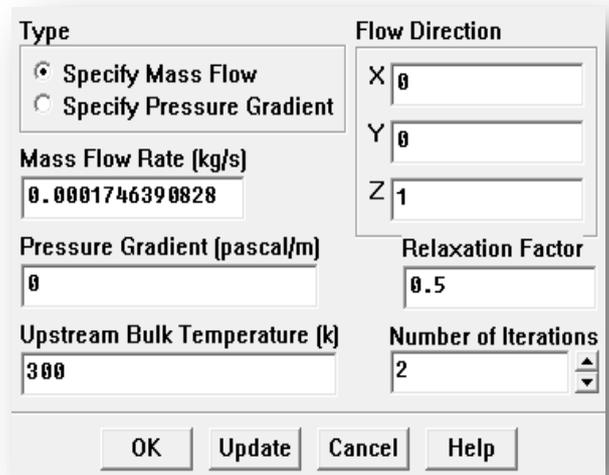


Figura 3-42: Menú modelo periódico

3.7.1.2 Obtención del perfil de velocidades en el plano central.

Con estas condiciones se trata ahora de calcular unos cuantos pasos de tiempo por ejemplo 5 (depende de la convergencia), y obtener el perfil de velocidades en el plano de la sección central del tubo de dos pasos la cual se llama **interior-12** en este caso. Se debe escoger esta sección puesto que en la entrada y la salida se ha impuesto un campo de velocidades, mientras que en esta sección el campo obtenido es el que se desarrolla debido a la geometría del tubo. Una vez obtenido este perfil, se procederá a pegarlo en el tubo de 25 pasos objeto de estudio con lo cual se habrá conseguido obtener un perfil en poco tiempo válido para poder iniciar el flujo en el tubo largo como si ya hubiese una corriente desarrollada en su interior, que es el objetivo que sigue todo este entramado.

Para exportar esta solución del tubo periódico de dos pasos al tubo de 25 pasos se procederá del siguiente modo:

- 1- **File/write/profile...** despliega la siguiente ventana:
- 2- Seleccionar ahora en **Options** Define New Profiles.
- 3- En *surfaces* se ha de seleccionar la cara central que se llama interior-12 en este caso.

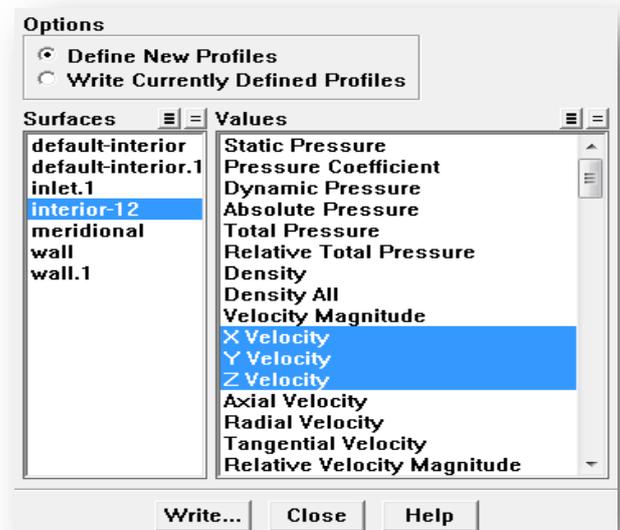


Figura 3-43: Opción write profiles

- 4- Mientras que en *values* que son todas las propiedades que fluent va calculando se deben escoger **X Velocity, Y Velocity, Z Velocity**.
- 5- Click en **Write..** e introduciendo “ **periodic central** ” como nombre quedará así guardado el perfil de velocidades en el plano central.

3.7.1.3 Carga del perfil en el tubo de 25 pasos.

A continuación se desea introducir este perfil de velocidades en X, Y, Z en el tubo largo de 25 pasos, y a partir de aquí lanzar el caso y obtener la fracción másica del trazador en la salida del tubo, además de otros muchos planos intermedios que se han definido para ir viendo cómo evoluciona esta curva del trazador a lo largo del tubo. Para cargar el perfil se ha de proceder como sigue:

- 1- Abrir el caso de 25 pasos.
- 2- **File/read/profile...** donde se debe ir al directorio donde se ha guardado el archivo “periodic-central” y abrirlo.
- 3- En “periodic central” está la información sobre la velocidad y la posición de cada punto de la malla que define la sección, por tanto, en **boundary-conditions** se debe especificar la velocidad de forma que se comience a resolver a partir del perfil cargado en *interior-12*.
- 4- Set...

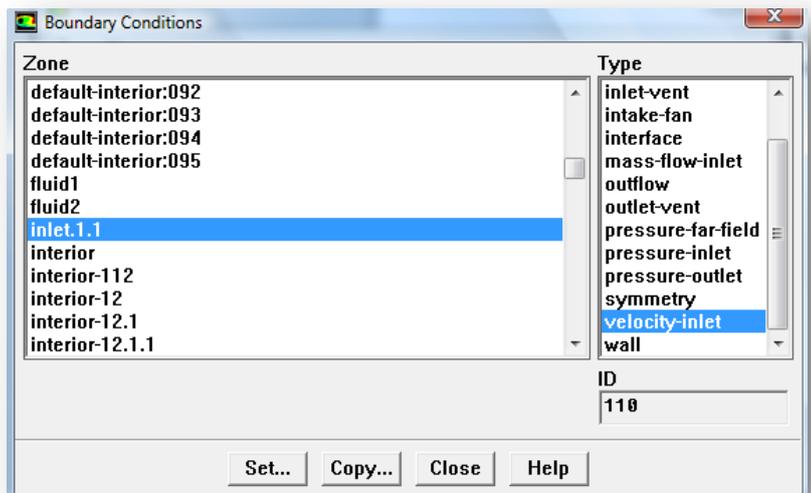


Figura 3-44: Menú Boundary Conditions

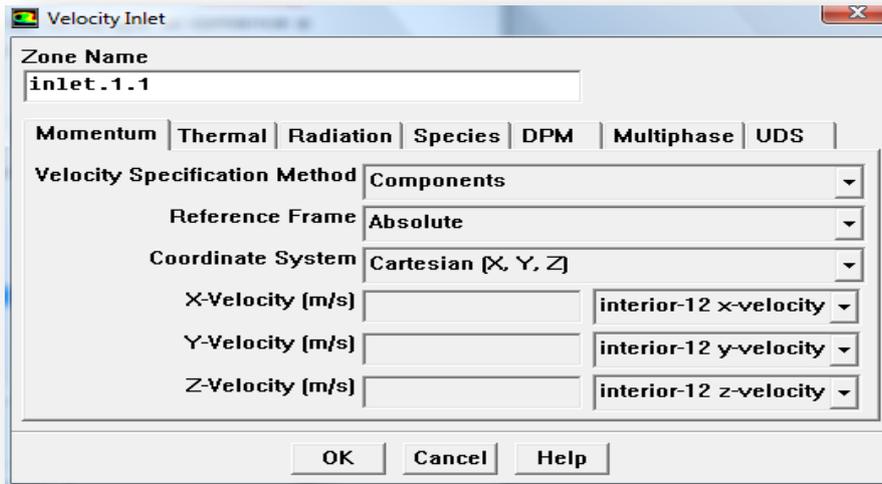


Figura 3-45: Definición del perfil de velocidad en la entrada

- 5- En **velocity Specification Method** se debe elegir *Components*, lo que habilitará las componentes en X,Y,Z velocity, se dejan *Absolute* y *Cartesian(X,Y,Z)* para cada componente se despliega una lista en la que aparecen las **coordenadas x,y,z** y las **velocidades x-velocity**, etc, se debe seleccionar para cada pestaña su velocidad correspondiente.
- 6- Click en **OK**

Por tanto el programa ya tiene definido como debe iniciar la resolución de las ecuaciones a partir del perfil cargado en la sección llamada “interior-12”.

3.7.2 Procedimiento general caso oscilatorio

En el caso oscilatorio el journal es bastante más complejo pues el programa tiene que resolver cada uno de los puntos de la curva senoidal que genera el perfil de velocidades y a su vez la oscilación, es decir, para generar una componente oscilatoria al flujo principal se debe discretizar una curva senoidal mediante una serie de puntos, para lo que se ha utilizado un programa en matlab.

3.7.2.1 Mecanismo generador de la oscilación.

Como en toda onda oscilatoria se tiene una variable fundamental a la hora de generarlas que es la amplitud de onda (x_0). Para entender mejor que amplitud de onda se modela en Fluent, a continuación se representa un ensayo experimental real.

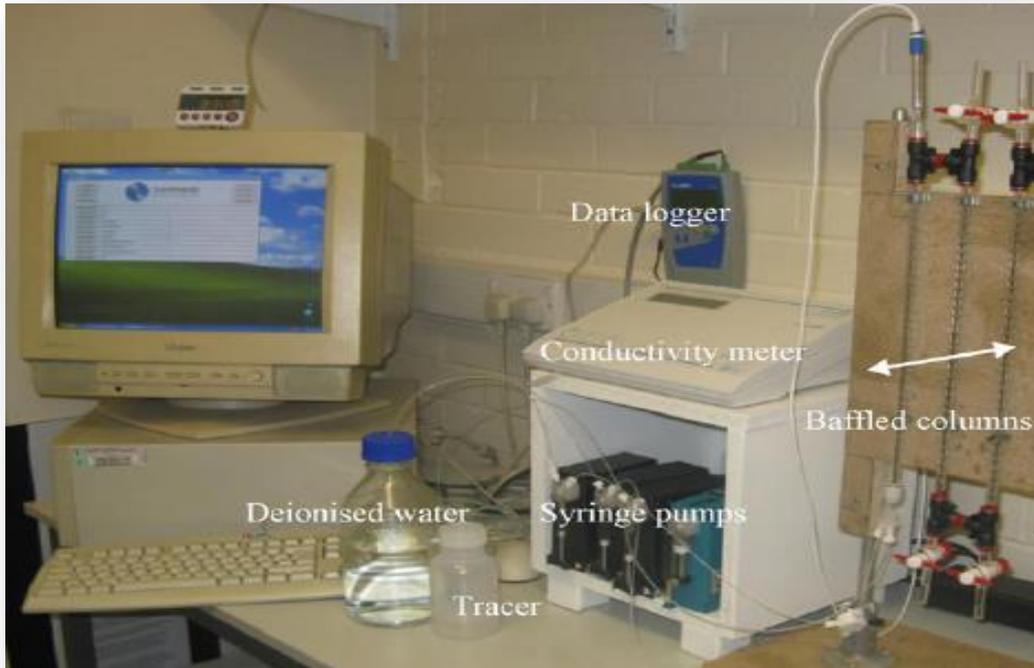


Figura 3-46: Instalación experimental Universidad de UTAH

En la imagen se puede ver Syringe pumps (bombas de inyección) las cuales toman el agua del recipiente y lo inyectan en los tubos con el muelle en su interior, pues bien, la amplitud de onda que se simula en fluent es equivalente a la amplitud del pistón de los inyectores que genera la oscilación en este ensayo experimental.

3.7.2.2 Reynolds oscilatorio y número de Strouhal.

Al introducir la oscilación se debe tener en cuenta también el concepto del Reynolds oscilatorio y el número de Strouhal, hay que distinguir el Reynolds neto, que es el comentado hasta ahora, del oscilatorio, pues cada uno de ellos indica características diferentes del flujo. El Reynolds oscilatorio mide la intensidad de mezclado en el interior de los tubos del reactor, mientras que el Strouhal da una idea de la efectividad de propagación de los torbellinos que se generan en los tubos del reactor. Las expresiones de estos parámetros adimensionales son:

$$Re_0 = \frac{2\pi \cdot f \cdot X_0 \cdot \rho \cdot D_t}{\mu} \qquad St = \frac{D_t}{4\pi \cdot X_0}$$

Donde se aprecia que ambos parámetros dependen directamente de la amplitud de onda oscilatoria X_0 , la frecuencia f , además de otros ya vistos como la viscosidad, densidad y diámetro del tubo.

Por tanto de esto se extrae la gran ventaja de introducir el muelle, viene dada por dos aspectos:

- De la definición del Reynolds oscilatorio se puede extraer que al introducir los “obstáculos” mediante el muelle, el mezclado en el interior se hará más intenso.

- De la definición del número de Strouhal se desprende que estos “Baffled” también proporcionan una mejor propagación de los torbellinos que se desarrollan en el interior del tubo.
- Por tanto mediante estos obstáculos y la oscilación se puede mantener un Reynolds neto bastante bajo y al mismo tiempo aumentar estos dos parámetros modificando la frecuencia y la amplitud de la oscilación.

En cuanto a la distancia adecuada entre los pasos del muelle no hay un criterio consensuado, pues es un caso aún en estudio y a falta de sacar conclusiones.

3.7.2.3 Perfil de velocidades oscilatorio.

El procedimiento general es el mismo que en el caso estacionario pero con la particularidad de que se han de resolver todos los puntos que discretizan la curva senoidal. Por tanto, se han de obtener los campos de velocidades iniciales mediante el muelle periódico de forma similar a la que se hizo para el caso estacionario pues para cada punto de la senoidal se obtendrá un perfil de velocidades diferente ya que la velocidad va cambiando con el tiempo debido a la oscilación.

Al discretizar la curva oscilatoria se ha tenido en cuenta que al inicio de la oscilación se produce un transitorio, por tanto los primeros 3 ciclos no se van a discretizar pues los perfiles de velocidad aún no están “asentados” o completamente desarrollados.

Como se aprecia en la curva representativa de la oscilación generada en el campo de velocidades en los dos primeros ciclos no se han evaluado los perfiles de velocidad, se remarcan en rojo los puntos de la curva en los que se han obtenido los perfiles de velocidad, pues bien, esta curva se alarga en el tiempo hasta los 250 ciclos, para que el trazador tenga el tiempo suficiente de llegar hasta la salida del tubo. Esto se ha determinado con un cálculo sencillo y como se venían determinando los tiempos reales de residencia de las partículas en el interior del tubo.

Dado que la velocidad se compone por una componente neta más la componente oscilatoria como indica la siguiente ecuación:

$$U = u_n + 2 \cdot \pi \cdot f \cdot x_0 \cos(2 \cdot \pi \cdot f \cdot x_0 \cdot t)$$

Donde $u_n = 0.01$ m/s, por tanto a pesar de la oscilación el flujo general avanza por el interior del tubo con esta velocidad neta. Así pues para obtener el tiempo real necesario que debe resolver Fluent bastará con calcular:

$$\tau_{resd} = \frac{L_t}{u_n} = \frac{0.1875}{0.01} = 18.75 \text{ s}$$

Ahora bien, la frecuencia de la onda se fija en este caso en 8 Hz por lo que el periodo será:

$$T = \frac{1}{f} = \frac{1}{8} = 0.125 \text{ s/ciclo}$$

Así pues si cada ciclo tiene 0.125s el número total de ciclos se puede calcular como:

$$N^{\circ} \text{ ciclos} = \frac{\tau_{resd}}{T} = \frac{18.75}{0.125} = 150 \text{ ciclos.}$$

Pero este es un cálculo aproximado de cuantos ciclos harán falta para que lleguen la mitad de las partículas del trazador, por lo que se deben dar unos segundos más de tiempo para que pase todo el trazador por la salida del tubo. Por ello se han dado 250 ciclos que equivale a 31.25s de tiempo real.

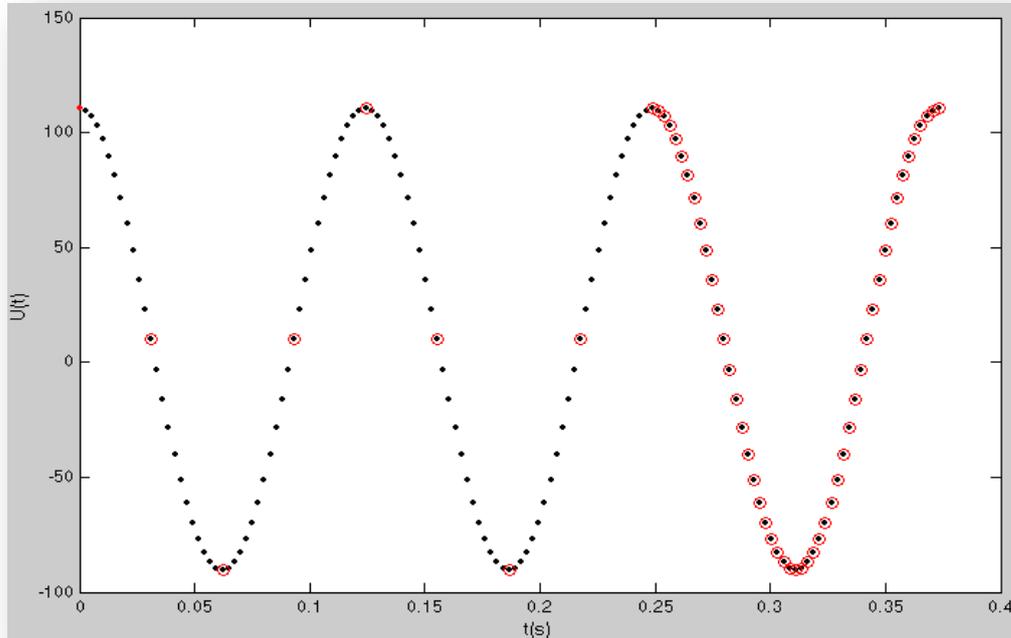


Figura 3-47: Discretización de la onda oscilatoria que genera la velocidad.

Como se comentó para descartar el transitorio que se produce inicialmente los campos de velocidades de los dos primeros ciclos de la curva se desprecian y se empiezan a registrar a partir del tercer ciclo. Como se ve cada punto en rojo será un punto a resolver por Fluent con un perfil de velocidades iniciales cargado desde el muelle periódico evidentemente cada punto del oscilatorio se corresponde con su similar del periódico.

3.7.2.4 Procedimiento general:

- 1- Generar con matlab el journal con la componente oscilatoria para obtener los perfiles iniciales de velocidad que se “pegarán” en el tubo largo.
- 2- Cargar en el servidor el .cas del caso periódico con el journal generado en matlab
- 3- Una vez obtenidos los perfiles de velocidad en cada punto de la curva de oscilación:
 - 3.1 Generar el journal para el tubo objeto de estudio en matlab.(En este automáticamente por el programa de matlab se escribirán los perfiles de velocidad generados en la solución del caso periódico).
 - 3.2 Cargar al servidor el .cas del tubo experimental (25 pasos) además del journal generado por matlab.
- 4- Lanzar el caso en el servidor para obtener las curvas de la fracción másica del trazador.

4- PUESTA A PUNTO Y VALIDACIÓN DE LA TÉCNICA.

4.1 Introducción.

En este capítulo se trata de exponer como variando ciertos parámetros del flujo o del fluido, se obtienen diferentes modelos de dispersión, manteniéndose siempre dentro del régimen laminar, como ya se comentó, se pueden desarrollar tres tipos de movimientos:

- 1- Convectivo puro.
- 2- Convectivo y difusivo.
- 3- Difusivo puro.

Se abordaran diferentes casos cada uno de los cuales se centrará en una región particular, excepto en la zona convectiva/difusiva pues no es de interés en el presente proyecto, para ello se emplea una geometría de un tubo en dos dimensiones pues simplifica mucho el tiempo de resolución en Fluent, y su diseño en Gambit es muy sencillo, como se explica en el Anexo1 y por lo que no se va a entrar en más detalle sobre la generación de la geometría en el presente capítulo.

Para saber en qué región se está se usará la siguiente figura en la cual también se han especificado las condiciones globales de cada caso como son el número de Bodestein y la relación de aspecto entre la longitud del tubo y el diámetro del mismo.

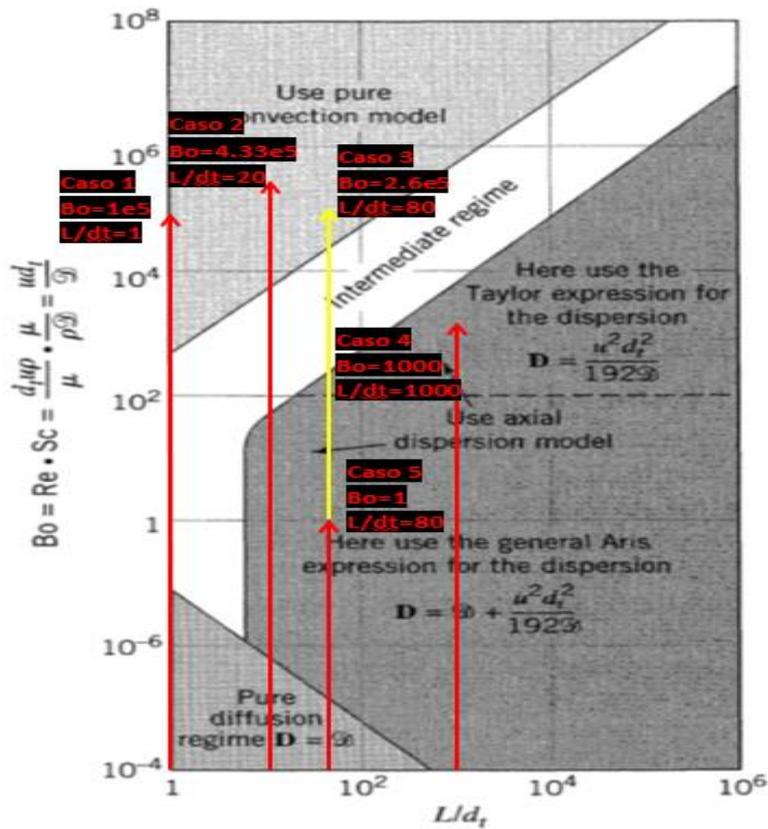


Figura 4-1: Regiones en función de los parámetros

4.2 Región convectiva:

Como se ha visto en el **capítulo 2** en la región convectiva las ecuaciones teóricas que gobiernan el movimiento, las cuales dependen de la forma en que el trazador se inyecta y se mide, es decir, si a la hora de inyectar o medir este posee cierta velocidad característica (condición llamada **Flux**) o se mantiene invariante (condición llamada **Planar**) hasta que la corriente principal lo arrastre.

En el caso objeto de estudio del presente proyecto las condiciones más interesantes, pues son las que se asemejan a la forma de inyectar que se han definido en Fluent, son:

- **Planar** para la zona de inyección.
- **Flux** para la zona de medida.

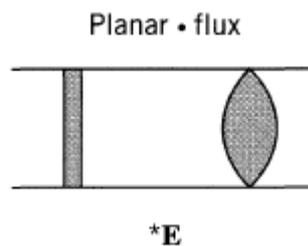


Figura 4-2: Condiciones de inyección/medida del trazador

Las condiciones quedan así definidas puesto que como se comentó en el **capítulo 3**, cuando se inyecta en Fluent mediante la opción **Patch** el valor de la fracción de trazador en un diferencial de volumen definido, se pone a 1, por tanto el trazador no viene afectado por la corriente principal en el momento de la inyección, mientras que en la salida o en los planos donde se registra la fracción másica del trazador, este viene arrastrado por la corriente principal con lo cual adquiere ya un cierto perfil.

La ecuación teórica que gobierna este movimiento se escribe:

$$E_t = \frac{\tau}{2.t^2} \quad \text{para} \quad t \geq \frac{\tau}{2} \quad \text{siendo} \quad \tau = \frac{L}{v} \quad \text{Ec- 4.1}$$

- Siendo **E** la concentración del trazador,
- **τ** el tiempo de residencia medio de las partículas del trazador y
- **t** el tiempo de flujo.

Para poder superponer graficas de concentraciones de trazador en distintos tubos y tiempos de residencia con las curvas obtenidas en Fluent se debe adimensionalizar esta ecuación, obteniendo la que sigue:

$$E_\theta = \frac{1}{2.\theta^2} \quad \text{con} \quad \theta = \frac{t}{\tau} \quad \text{parámetro adimensional.} \quad \text{Ec- 4.2}$$

Con las ecuaciones teóricas introducidas para la región convectiva, se definirán a continuación los casos.

Los números adimensionales aquí necesarios se definieron en el capítulo 2 no obstante se van a introducir en este capítulo por tanto:

- ✓ $Sc = \frac{\mu}{\rho.\eta}$
- ✓ $Bo = Re . Sc = \frac{u.d_t}{\eta}$
- ✓ $Re = \frac{\rho.u.d_t}{\mu}$

Las propiedades del fluido como ya se comentó también en capítulos anteriores:

- ✓ $\eta = 2.32 \cdot 10^{-9} m^2/s$
- ✓ $\mu = 0.001003 m^{-1}s^{-1}$
- ✓ $\rho = 998.2 kg/m^3$

Como se verá el coeficiente D será modificado suponiendo un fluido con las propiedades del agua pero con otro coeficiente distinto, esto es para poder entrar en las zonas de la **Figura 4-1**.

4.2.1 CASO 1: TUBO MUY CORTO.

En este primer caso se define en Gambit la geometría de un tubo con las siguientes características:

- ✓ $L = 0.005 \text{ m}$
- ✓ $d_t = 0.005 \text{ m}$
- ✓ $L/d_t = 1$

Mientras que los parámetros del flujo elegidos para entrar en la zona convectiva serán:

- ✓ $Re = 230$
- ✓ $Sc = 433$
- ✓ $Bo = Re \cdot Sc = 10^5$

Con este número de Reynolds y los parámetros de la geometría del tubo se puede calcular la velocidad y el tiempo de residencia como:

$$✓ \quad v = \frac{Re \cdot \mu}{\rho \cdot d_t} = 0.0464 \text{ m/s}$$

$$✓ \quad \tau = \frac{L}{v} = \frac{0.005}{0.0464} = 0.107 \text{ s}$$

Por tanto se cargará en fluent todos estos datos quedando el programa configurado para obtener el flujo con las características convectivas, obteniendo la siguiente gráfica de la fracción másica del trazador mediante Matlab, en la misma se superpone también la curva teórica adimensional definida anteriormente mediante la $E_\theta = \frac{1}{2 \cdot \theta^2}$ con $\theta = \frac{t}{\tau}$ parámetro adimensional. **Ec- 4.2.**

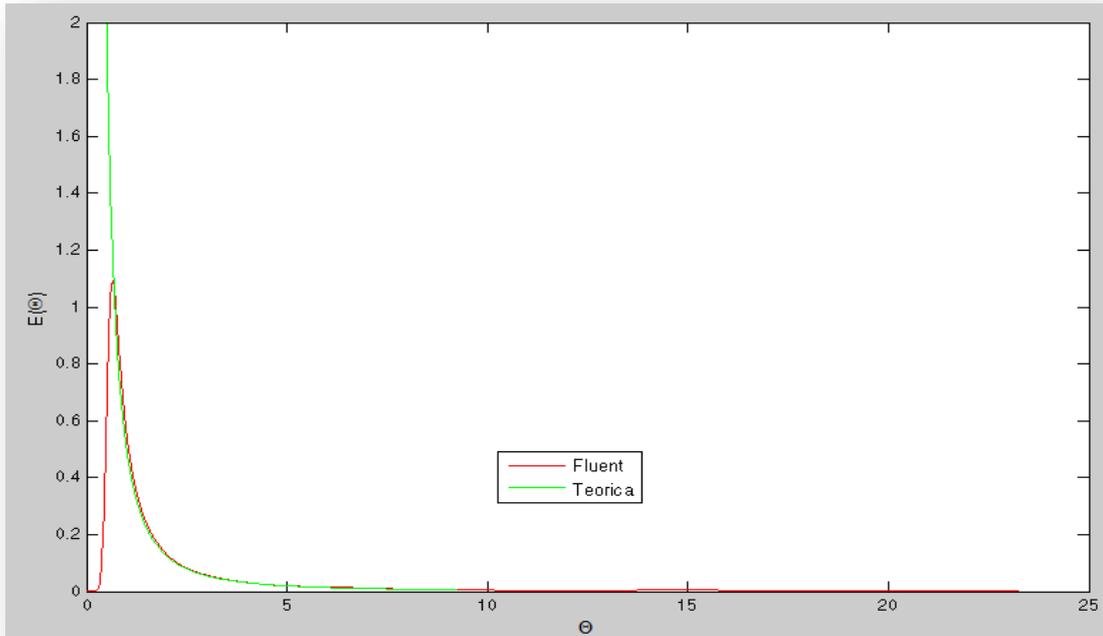


Figura 4-3: Curva adimensional fracción másica del trazador frente a curva teórica (caso 1)

Como se puede observar se ha obtenido un resultado que se asemeja mucho a la curva teórica que describe la $E_{\theta} = \frac{1}{2\theta^2}$ con $\theta = \frac{t}{\tau}$ parámetro adimensional. **Ec- 4.2**, por tanto efectivamente se puede concluir que el flujo es puramente convectivo. También se muestra la curva sin adimensionalizar para ver el salto real producido en la fracción másica.

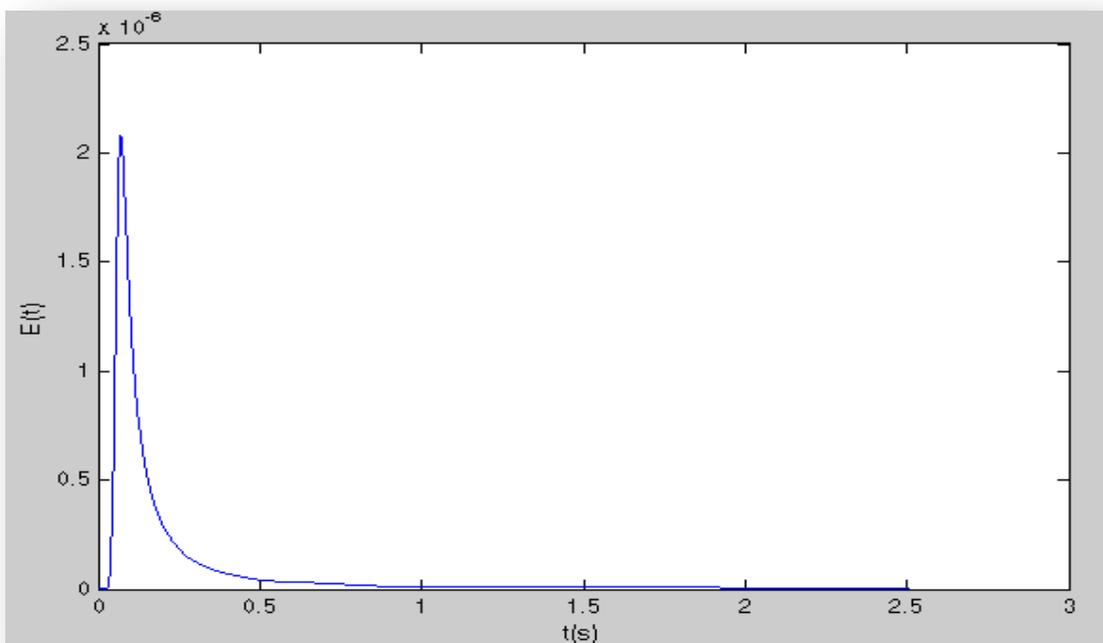


Figura 4-4: Curva fracción másica de trazador

4.2.2 CASO 2: TUBO CORTO

En este segundo caso la geometría del tubo tiene las siguientes características:

- ✓ $L = 0.1 \text{ m}$
- ✓ $d_t = 0.005 \text{ m}$
- ✓ $L/d_t = 20$

Mientras que los parámetros del flujo elegidos para entrar en la zona convectiva serán:

- ✓ $Re = 1000$
- ✓ $Sc = 433$
- ✓ $Bo = Re \cdot Sc = 433 \cdot 10^3$

Con este número de Reynolds y los parámetros de la geometría del tubo se puede calcular la velocidad y el tiempo de residencia como:

$$✓ v = \frac{Re \cdot \mu}{\rho \cdot d_t} = 0.2 \text{ m/s}$$

$$✓ \tau = \frac{L}{v} = \frac{0.005}{0.0464} = 0.5 \text{ s}$$

Configurando de nuevo Fluent se obtendrán las gráficas como anteriormente mediante matlab:

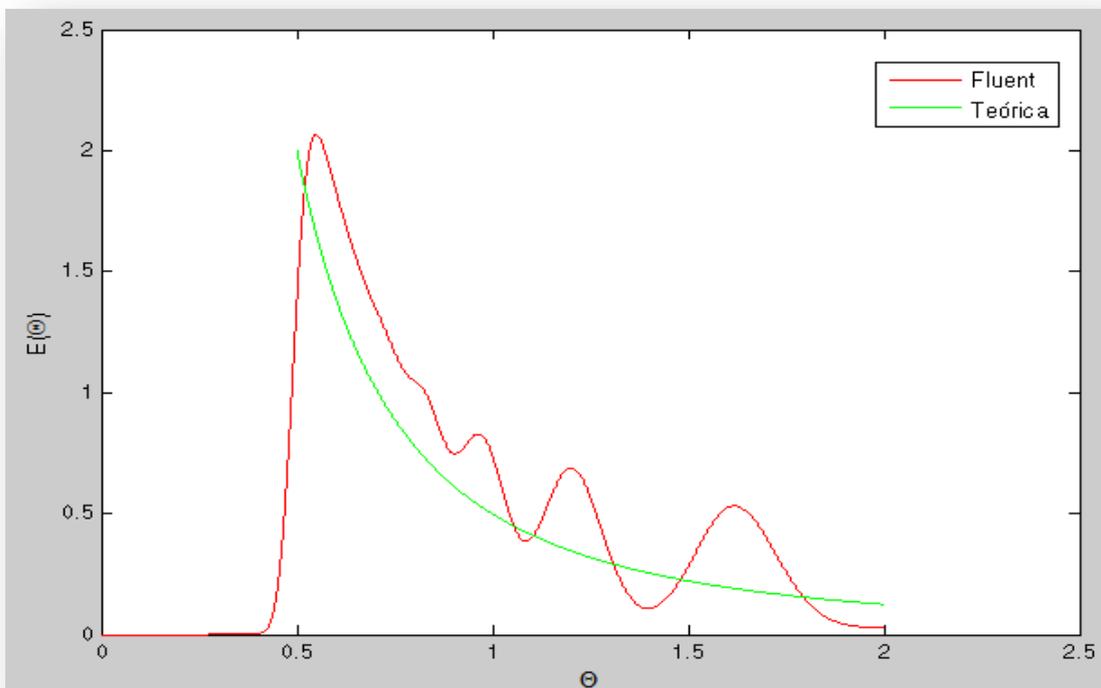


Figura 4-5: Curva adimensional fracción másica del trazador frente a curva teórica (caso 2)

En este segundo caso se puede observar de nuevo que la curva adimensional que nos da Fluent sigue la misma tendencia que la curva teórica en flujos convectivos, por tanto el flujo seguirá siendo convectivo, no obstante se producen ciertas oscilaciones en la concentración lo cual se entrará a valorar al final de este capítulo.

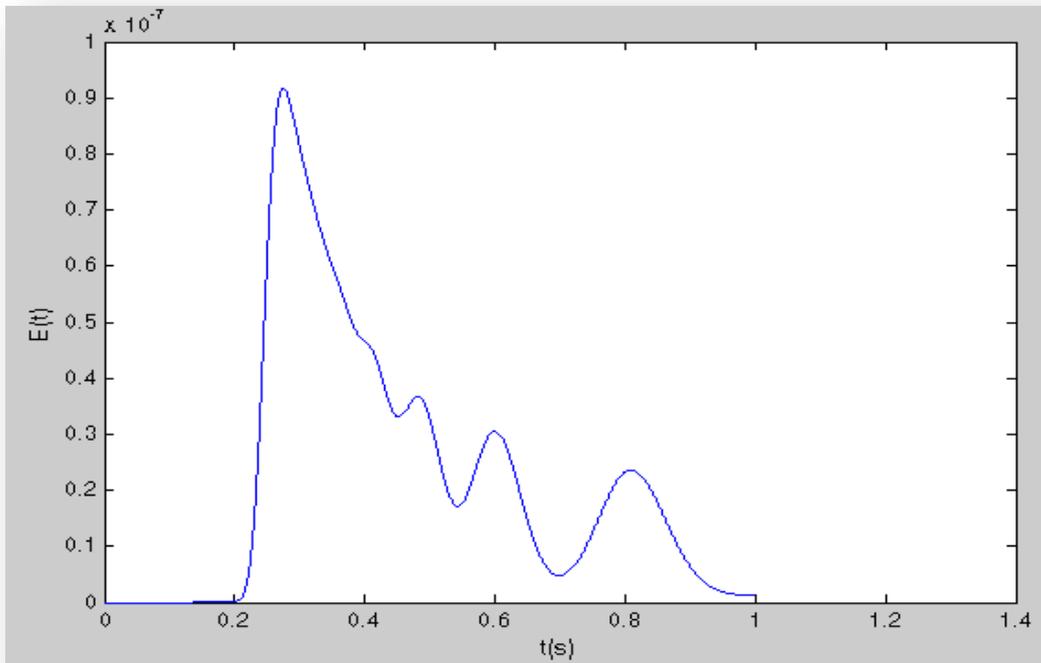


Figura 4-6: Curva fracción másica del trazador

4.2.3 CASO 3:

En este tercer caso la geometría del tubo tiene las siguientes características:

- ✓ $L = 0.4$ m
- ✓ $d_t = 0.005$ m
- ✓ $L/d_t = 80$

Mientras que los parámetros del flujo elegidos para entrar en la zona convectiva pero con un Reynolds intermedio entre los dos casos anteriores para comparar el efecto de este en el fenómeno de mezcla y el flujo.

- ✓ $Re = 600$
- ✓ $Sc = 433$
- ✓ $Bo = Re \cdot Sc = 433 \cdot 10^3$

Con este número de Reynolds y los parámetros de la geometría del tubo se puede calcular la velocidad y el tiempo de residencia como:

$$\checkmark v = \frac{Re \cdot \mu}{\rho \cdot d_t} = 0.1206 \text{ m/s}$$

$$\checkmark \tau = \frac{L}{v} = \frac{0.005}{0.0464} = 3.3167 \text{ s}$$

Configurando de nuevo Fluent se obtendrán las gráficas como anteriormente mediante matlab:

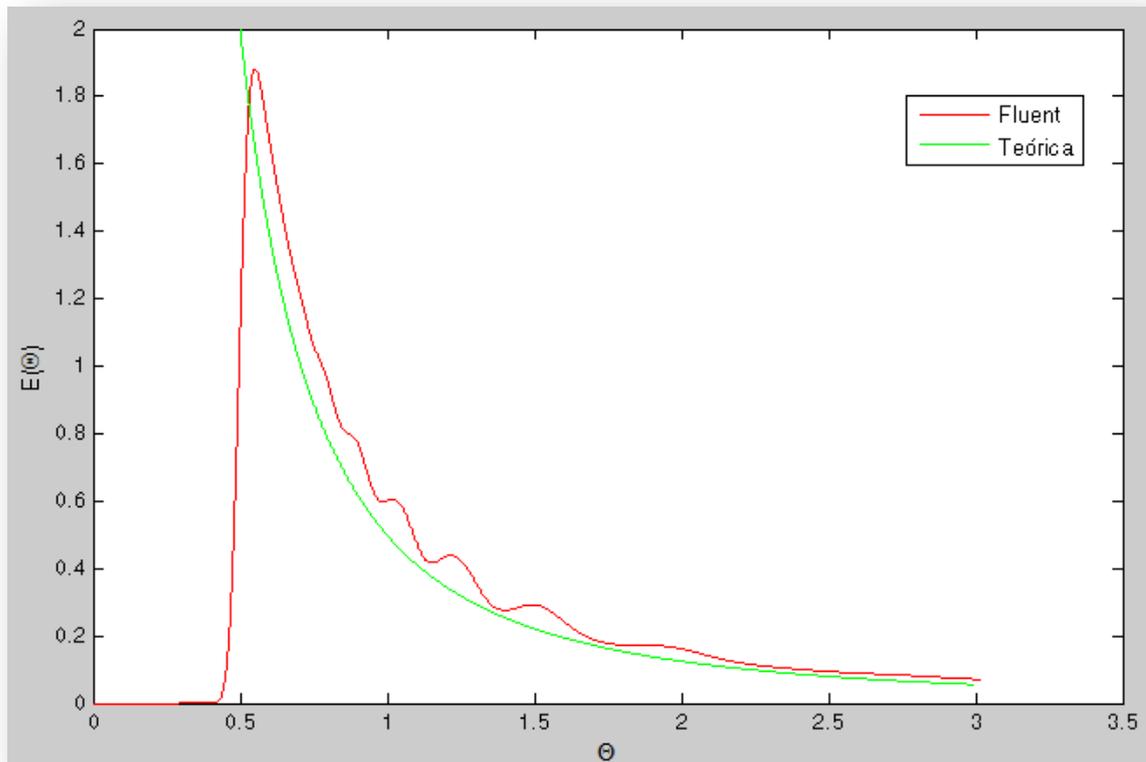


Figura 4-7: Curvas adimensionales (caso 3).

En este tercer caso se puede observar que sigue predominando el término convectivo frente al dispersivo pues la curva experimental (de fluent) se adapta a la curva teórica definida con la ecuación 4.2. A continuación se representará la curva fracción masica del trazador sin adimensionalizar.

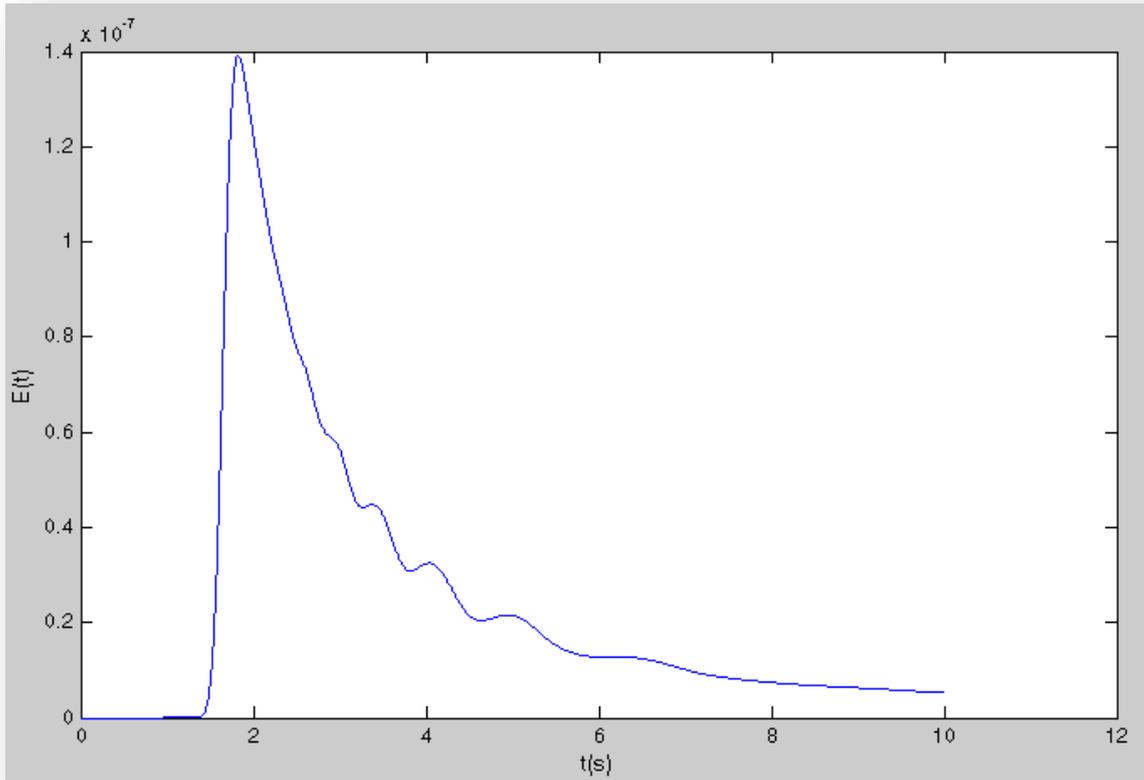


Figura 4-8: Curva fracción másica del trazador (caso 3)

4.3 ZONA DE DISPERSIÓN PURA:

Para analizar experimentalmente esta zona se han desarrollado dos casos, como se aprecia en la figura 4.1 dentro de la zona dispersiva hay tres regiones dos de las cuales son las que se van a analizar, descartada queda la región llamada **pure diffusion** en la que el coeficiente de dispersión axial se considera igual al parámetro de difusividad molecular, es decir, $D = \mathcal{D}$. Como ya se explicó en el capítulo 2 la ecuación teórica adimensional que gobierna en régimen dispersivo es:

$$E(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi \frac{D}{uL}}} e^{-\left(\frac{(1-\theta)^2}{4 \frac{D}{uL}}\right)} \quad \text{Ec- 4.3}$$

Donde la variable θ sigue siendo el tiempo adimensional definido anteriormente y $E(\theta)$ la concentración adimensional.

4.3.1 CASO 4 : “REGIÓN DE TAYLOR”

En esta región para Bodestein mayores que 100 se ha de calcular el coeficiente de dispersión axial según la ecuación de Taylor:

$$D = \frac{u^2 d_t^2}{192 \eta} \quad \text{Ec- 4.4}$$

En este caso dispersivo la geometría del tubo ha de tener las siguientes características para entrar en la zona deseada de la gráfica:

- ✓ $L = 5 \text{ m}$
- ✓ $d_t = 0.005 \text{ m}$
- ✓ $L/d_t = 10^3$

Mientras que los parámetros del flujo elegidos para entrar en la zona convectiva serán:

- ✓ $Re = 230$
- ✓ $Sc = 4.33$
- ✓ $Bo = Re \cdot Sc = 10^3$

Debido a la gran longitud del tubo que se ha planteado en este caso para poder obtener una relación de aspecto muy grande sin variar el diámetro del tubo, es necesario tener un **Sc** bajo y para ello se dejan fijas las variables densidad y viscosidad y se cambia el valor de la **difusividad molecular η** del fluido que en este caso será:

$$\checkmark \quad \eta = 2.32 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$$

Lo que permite obtener tiempos de residencia aceptables manteniendo un Reynolds bajo y el Bodestein deseado.

Con este número de Reynolds y los parámetros de la geometría del tubo se puede calcular la velocidad y el tiempo de residencia como:

$$\checkmark \quad v = \frac{Re \cdot \mu}{\rho \cdot d_t} = 0.0464 \text{ m/s}$$

$$\checkmark \quad \tau = \frac{L}{v} = \frac{0.005}{0.0464} = 107\text{s}$$

Por tanto sustituyendo los datos en la ecuación 4.6 se obtiene un valor para el coeficiente de dispersión axial de:

$$\checkmark \quad D = 0.0012 \text{ m}^2/\text{s}$$

Configurando de nuevo Fluent se obtendrán las gráficas como anteriormente mediante matlab:

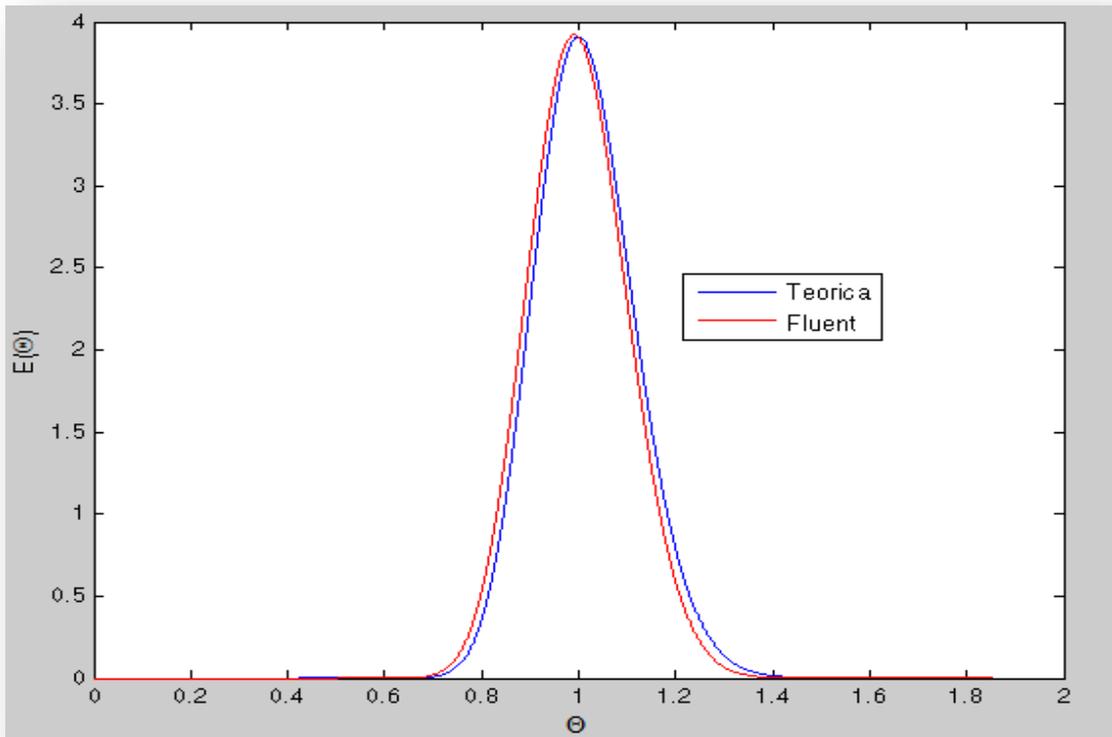


Figura 4-9: Curvas adimensionales teorica vs experimental

Mientras que la curva de concentración del trazador sin adimensionalizar, es decir, concentración frente a tiempo es:

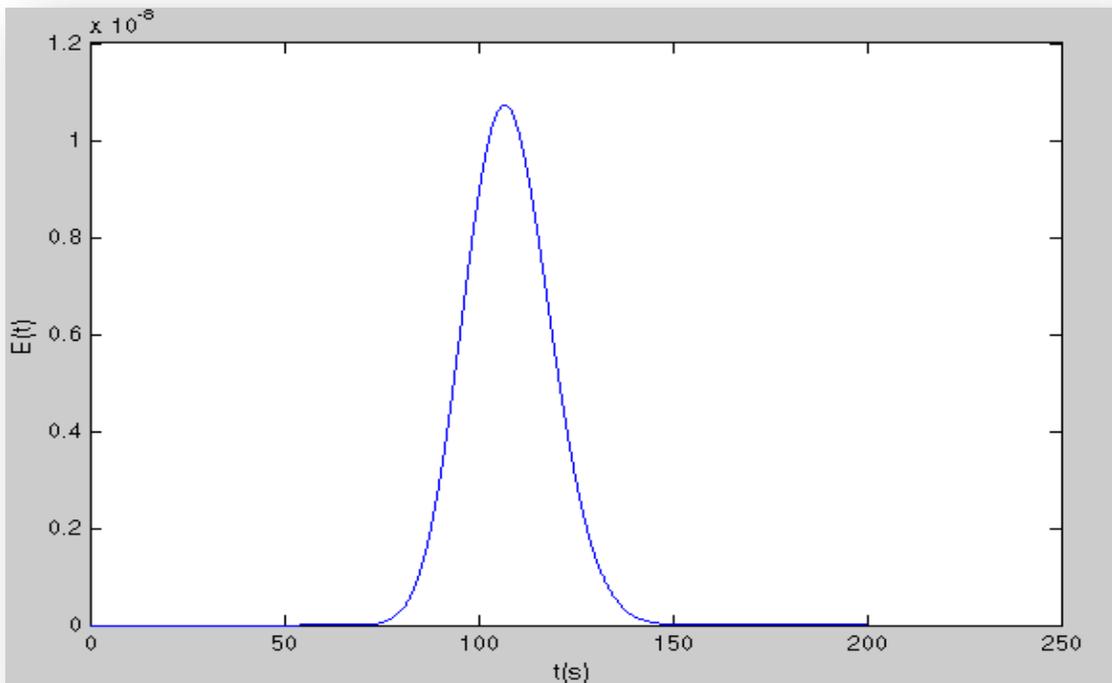


Figura 4-10: Curva fracción másica del trazador frente al tiempo

4.3.2 CASO 5: "REGIÓN DE ARIS"

En esta región el régimen será también dispersivo puro pero la diferencia estriba en la forma de calcular el coeficiente de dispersión axial, en la región de Aris sigue la ecuación:

$$D = \eta + \frac{u^2 d_t^2}{192 \eta} \quad \text{Ec- 4.5}$$

En este caso dispersivo la geometría del tubo ha de tener las siguientes características para entrar en la zona deseada de la gráfica:

- ✓ $L = 0.4 \text{ m}$
- ✓ $d_t = 0.005 \text{ m}$
- ✓ $L/d_t = 80$

Mientras que los parámetros del flujo elegidos para entrar en la zona convectiva serán:

- ✓ $Re = 100$
- ✓ $Sc = 0.01$
- ✓ $Bo = Re \cdot Sc = 1$

Debido a la necesidad de obtener un régimen que entre en esta región con un número de Reynolds bajo (100), es necesario de nuevo tener un **Schmith** bajo y para ello se dejan fijas las variables densidad y viscosidad y se cambia el valor de la **difusividad molecular** η del fluido que en este caso será:

$$\checkmark \quad \eta = 1 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

Lo que permite obtener tiempos de residencia aceptables manteniendo un Reynolds bajo y el Bodestein deseado.

Con este número de Reynolds y los parámetros de la geometría del tubo se puede calcular la velocidad y el tiempo de residencia como:

$$\checkmark \quad v = \frac{Re \cdot \mu}{\rho \cdot d_t} = 0.0201 \text{ m/s}$$

$$\checkmark \quad \tau = \frac{L}{v} = \frac{0.005}{0.0464} = 19.9 \text{ s}$$

Por tanto sustituyendo los datos en la ecuación 4.6 se obtiene un valor para el coeficiente de dispersión axial de:

$$\checkmark \quad D = 0.0001012 \text{ m}^2/\text{s}$$

Configurando de nuevo Fluent se obtendrán las gráficas como anteriormente mediante matlab:

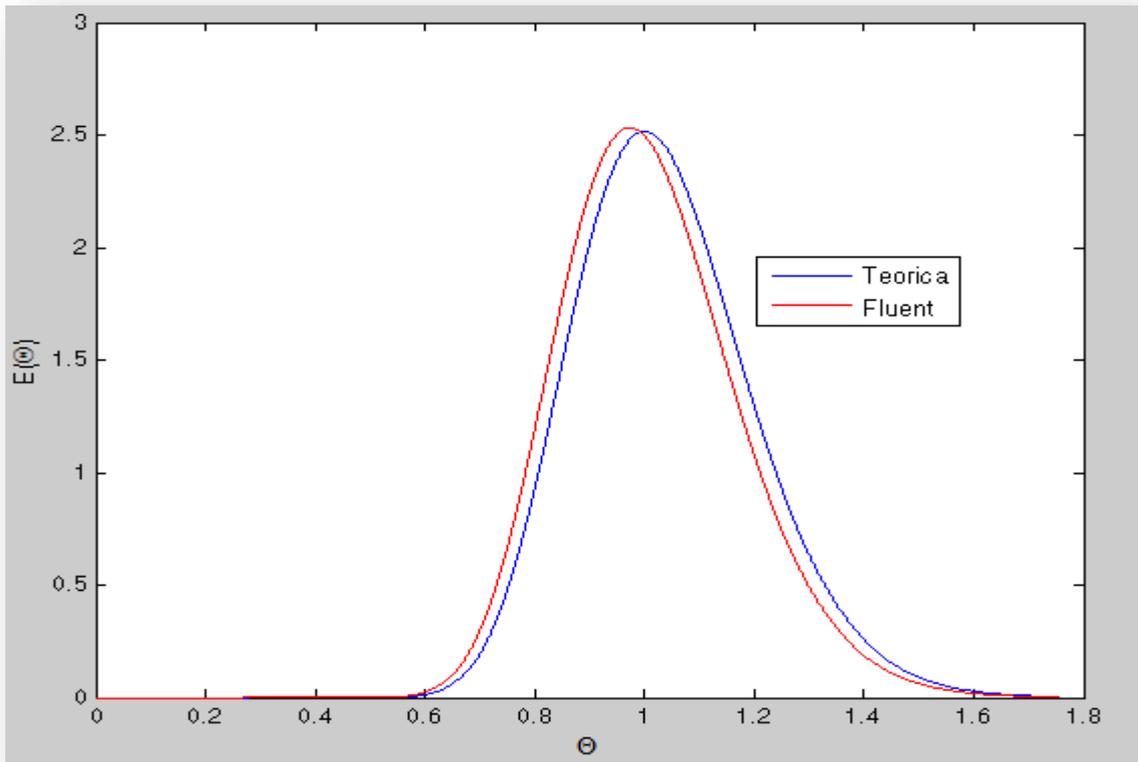


Figura 4-11: Curvas adimensionales fracción mástica trazador teórica vs fluent

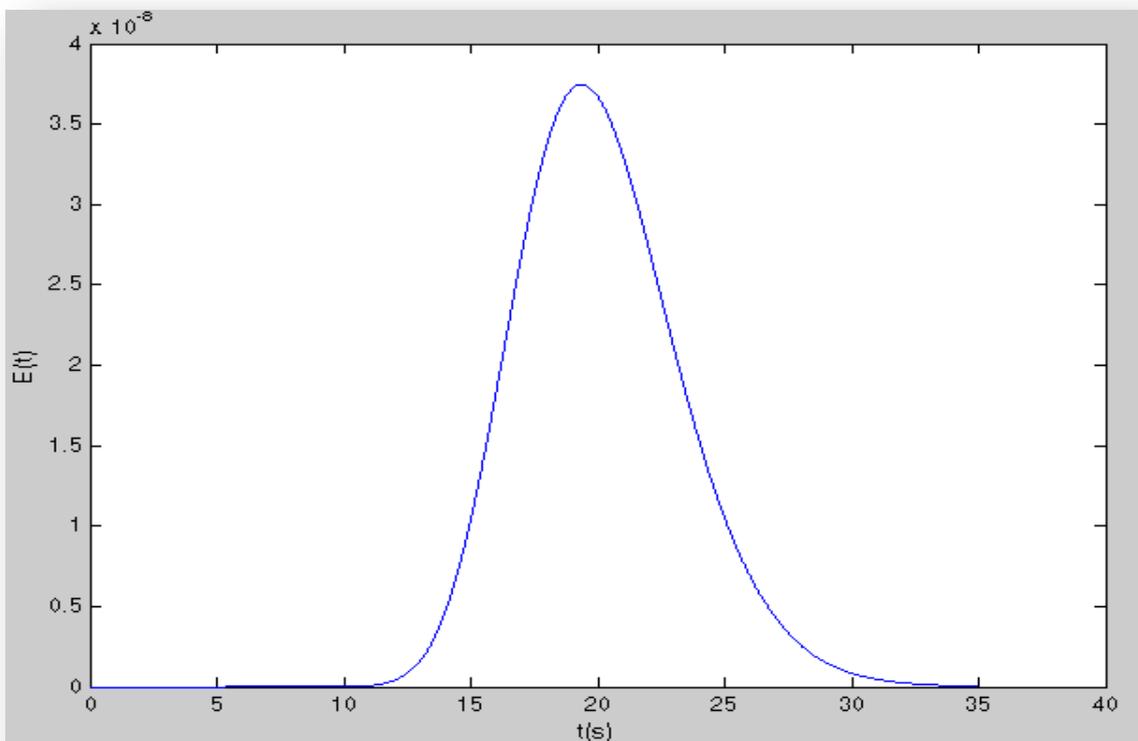


Figura 4-12: Curva fracción mástica del trazador

5- RESULTADOS 3D: ESTACIONARIO Y OSCILATORIO

5.1 INTRODUCCIÓN

Para analizar los resultados se han registrado las curvas de la fracción másica del trazador en diferentes planos del tubo. Evidentemente es de gran interés poder comparar las curvas del sistema estacionario con las del sistema oscilatorio puesto que esto permitirá observar las posibles ventajas que introduce la componente oscilatoria respecto a un flujo estacionario.

En primera aproximación se puede intuir sin necesidad de cálculos que el flujo oscilatorio generará un mayor mezclado junto con los deflectores (muelle) introducidos del trazador en el flujo principal ya que el vaivén del trazador en el interior generará flujos rotacionales y torbellinos en las zonas cercanas a los deflectores. Esto se traduce en una ventaja directa, y es que a igualdad de mezclado para ambos casos (estacionario y oscilatorio) el flujo oscilatorio necesitará menos distancia luego los tubos se pueden acortar y compactar así el reactor.

5.2 RESULTADOS CON FLUJO ESTACIONARIO

Como se explicó en el *capítulo 3* las **condiciones geométricas** del tubo serán:

- Longitud del tubo: $L = 0.1875 \text{ m}$ (equivalente a los 25 pasos fusionados, cada paso tiene una longitud de 0.0075m).
- Diámetro del tubo: $D_t = 0.005 \text{ m}$.

Mientras que las **condiciones del flujo** dado que fluido principal y trazador son agua,

- Velocidad media del flujo: $V_{med} = 0.01 \frac{\text{m}}{\text{s}}$
- Número de Reynolds: $Re = \frac{\rho \cdot u \cdot d_t}{\mu} = 49.7$
- Número de Schmith: $Sc = \frac{\mu}{\rho \cdot \eta} = 866$
- Número de Bodestein: $Bo = Re \cdot Sc = \frac{u \cdot d_t}{\eta} = 4.3104 \times 10^4$

Por tanto atendiendo a estas características se observa que el flujo según el Reynolds es laminar en el interior del tubo, el resto de números dan una idea de otras características que se abordaron en capítulos anteriores.

No obstante en aquel capítulo se estudió el asunto con tubos lisos sin ningún deflector en su interior, lo que atañe en este capítulo con el uso del muelle no se puede analizar según se hizo con tubo liso pues por causas evidentes sucederán ciertos fenómenos que distinguen estos casos de los anteriores.

5.3 Zonas de medida del trazador.

Con el fin de obtener varias curvas del trazador a lo largo del tubo se configuró Fluent de manera que registrase la fracción de masa del mismo en distintas secciones a lo largo del tubo en este capítulo se incorporarán las curvas más relevantes para explicar los resultados obtenidos, no obstante en el anexo II se pueden ver el resto de curvas obtenidas. A continuación se puede ver en qué secciones se ha medido la fracción másica, antes de esto recordar que la inyección del trazador no se hace en la entrada al tubo sino en el paso quinto por los motivos explicados anteriormente y que se recordarán en el caso oscilatorio.

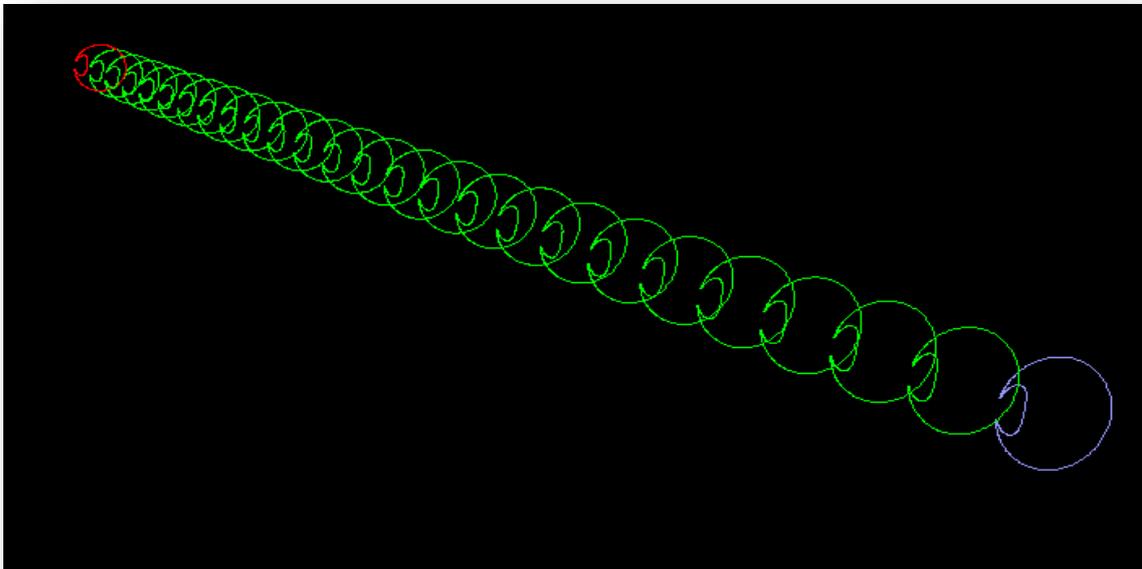


Figura 5-1: Secciones de los pasos que forman el tubo

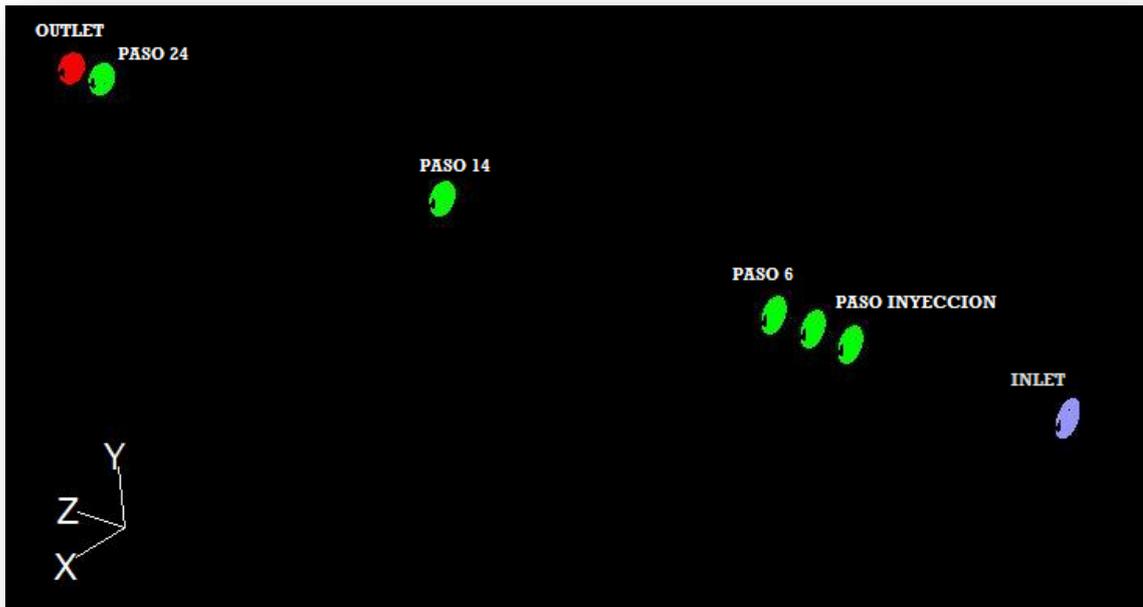


Figura 5-2: Secciones de medida fracción del trazador.

En la figura 5.2 se pueden apreciar las secciones en las que se va a medir que son, a la salida del paso 6, 14 y a la salida del tubo (outlet) mientras que en la figura 5.1 se muestran las secciones de unión entre los distintos pasos que conforman el tubo total.

La distancia entre el punto de inyección y la salida del paso del trazador se va a calcular a continuación para posteriormente no tener que realizar el cálculo en todos los casos.

Se sabe que en cada paso hay 35 diferenciales de volumen, como se explicó en el capítulo 3 solo se cogieron 5 diferenciales de volumen que resulta están justo en el centro del paso, es decir, quedarán 15 volúmenes aguas arriba del volumen de inyección y otros 15 aguas abajo. Por tanto el cálculo es sencillo pues cada rebanada de volumen dista de la contigua una longitud de:

$$d_l = \frac{L_p}{N_v} = \frac{0.0075}{35} = 2.1429 \cdot 10^{-4} \text{ m}$$

Por tanto:

$$dL_{iny-trz} = 15 \times 2.1429 \cdot 10^{-4} = 0.0032 \text{ m}$$

- Paso 6

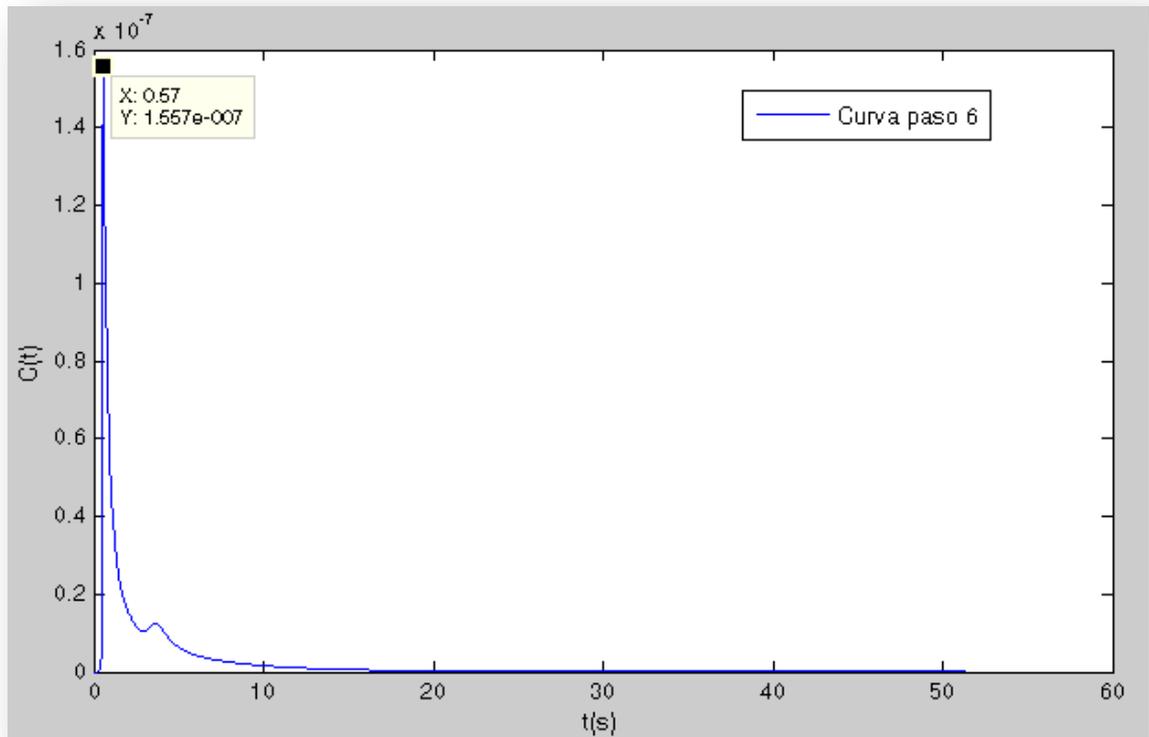


Figura 5-3: curva fracción másica trazador paso 6

La sección de medida está a una distancia de un paso y medio respecto al punto de inyección, que es justo la mitad del paso 5, por tanto la distancia entre el punto de inyección y la medida en este caso, llamando L_6 a esta distancia se puede calcular como:

$$L_6 = 0.0075 + 0.0032 = 0.0107 \text{ m}$$

Donde 0.0075 es como ya se indicó la longitud de un paso del muelle, y 0.0032 la distancia desde el punto de inyección hasta el final del paso de inyección.

Por tanto, se puede calcular el tiempo medio que tardarán las partículas de trazador en llegar hasta esta sección mediante la fórmula indicada también anteriormente:

$$\tau_6 = \frac{L_6}{V} = \frac{0.0107}{0.01} = 1.07 \text{ s}$$

- Paso 14

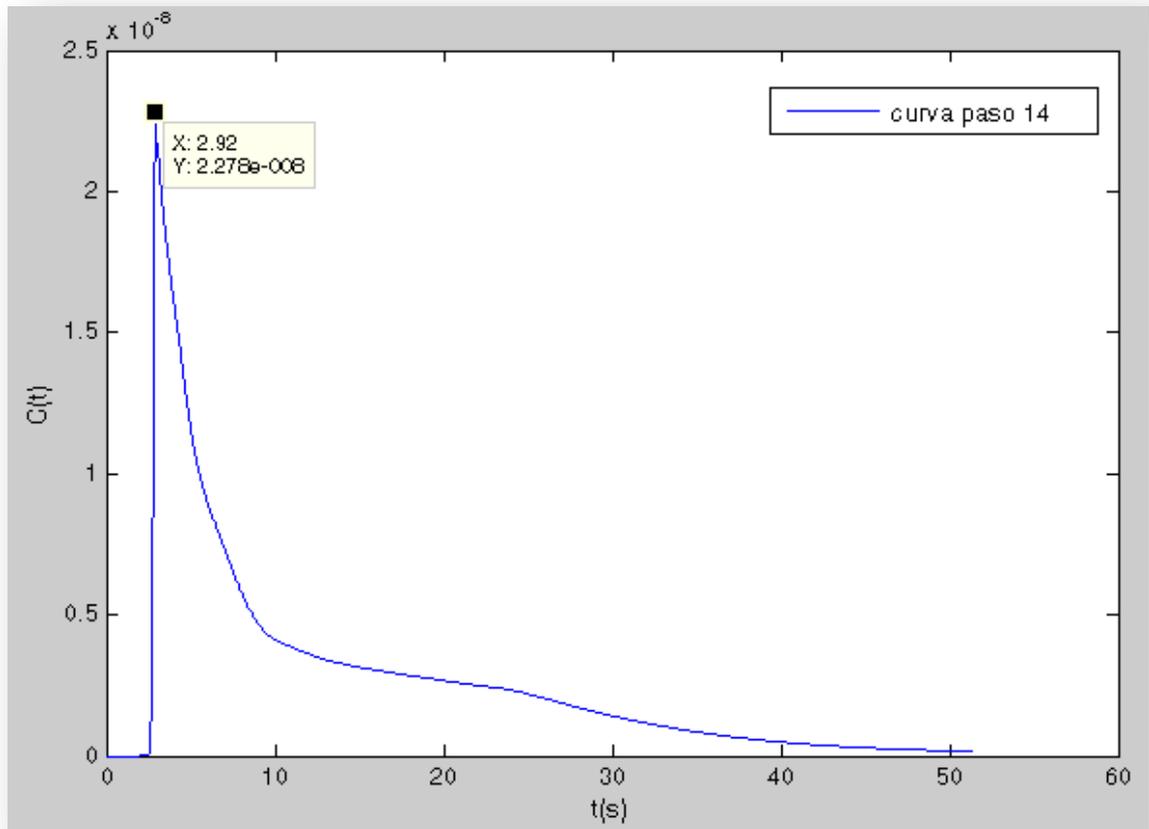


Figura 5-4: Curva fracción másica del trazador paso 14

En este caso la distancia desde el punto de inyección hasta el punto de medida se denominará como L_{14} que se calcula como:

$$L_{14} = n^{\circ}pasos \times 0.0075 = 9 \times 0.0075 + 0.0032 = 0.0707m$$

Mientras que el tiempo de residencia teórico será:

$$\tau_{14} = \frac{L_{14}}{v} = \frac{0.0707}{0.01} = 7.07 s$$

En este caso el tiempo de residencia teórico difiere en 0.5 s respecto del obtenido por Fluent,

- Salida del tubo

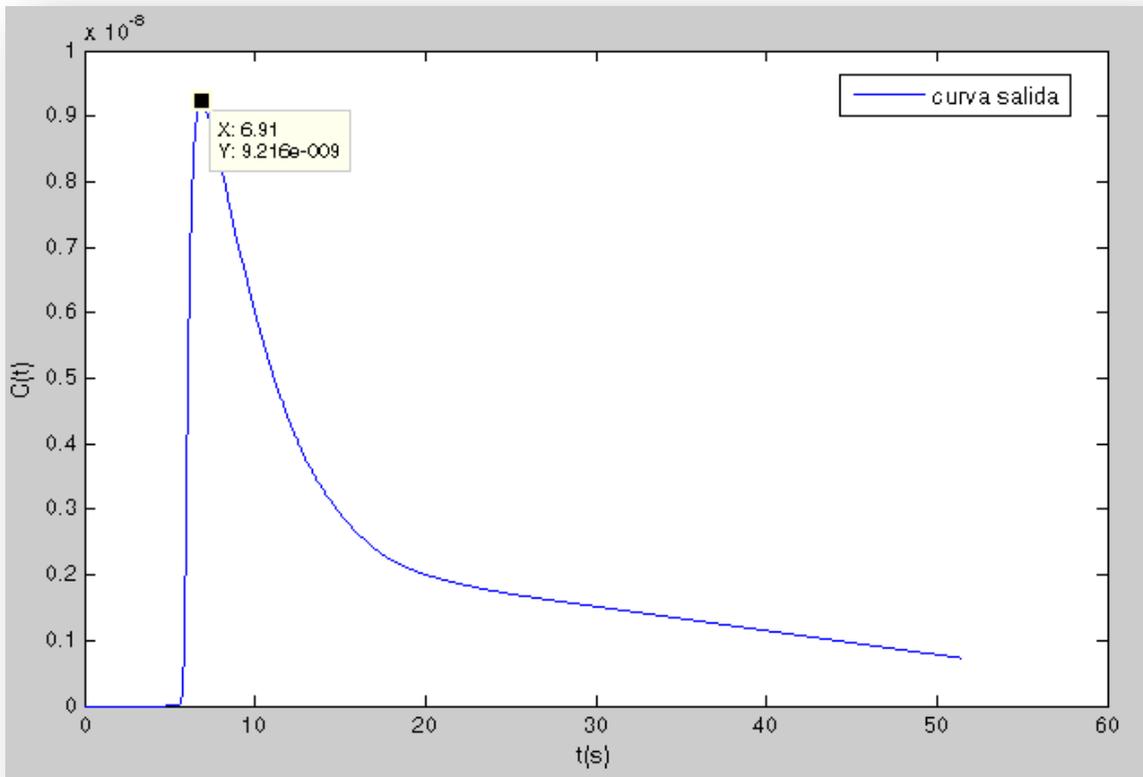


Figura 5-5: Curva fracción másica a la salida del tubo

En la salida la longitud es igual a la longitud total del tubo 0.1875 m, menos la distancia desde el punto de inyección hasta la entrada, es decir,

$$L_{out} = 0.1875 - 4 * 0.0075 - 0.0032 = 0.1543m$$

Y el tiempo de residencia teórico:

$$\tau_{out} = \frac{L_{out}}{v} = \frac{0.1543}{0.01} = 15.43 s$$

Se puede apreciar por comparación de las tres curvas, que al mismo tiempo que el trazador tarda más en pasar por el punto de medición conforme este está más lejos, también se aprecia como la curva tiende hacia cero con mayor lentitud, es decir, la “cola” de la curva se va engrosando, esto se debe a que las partículas que viajan cercanas a la pared tardan cada vez más tiempo en salir pues se generan zonas muertas donde los torbellinos no permiten a las partículas avanzar con la misma facilidad que lo hacen las partículas que circulan por la corriente central del tubo. Comentar también el hecho de que la curva en la salida no llega a bajar completamente hasta cero debido a que el tiempo de iteración (del programa) se alargaría demasiado para que esto sucediera, con los medios disponibles.

Para poder comparar mejor estas curvas se va proceder a la adimensionalización de las tres y a representarlas en la misma gráfica.

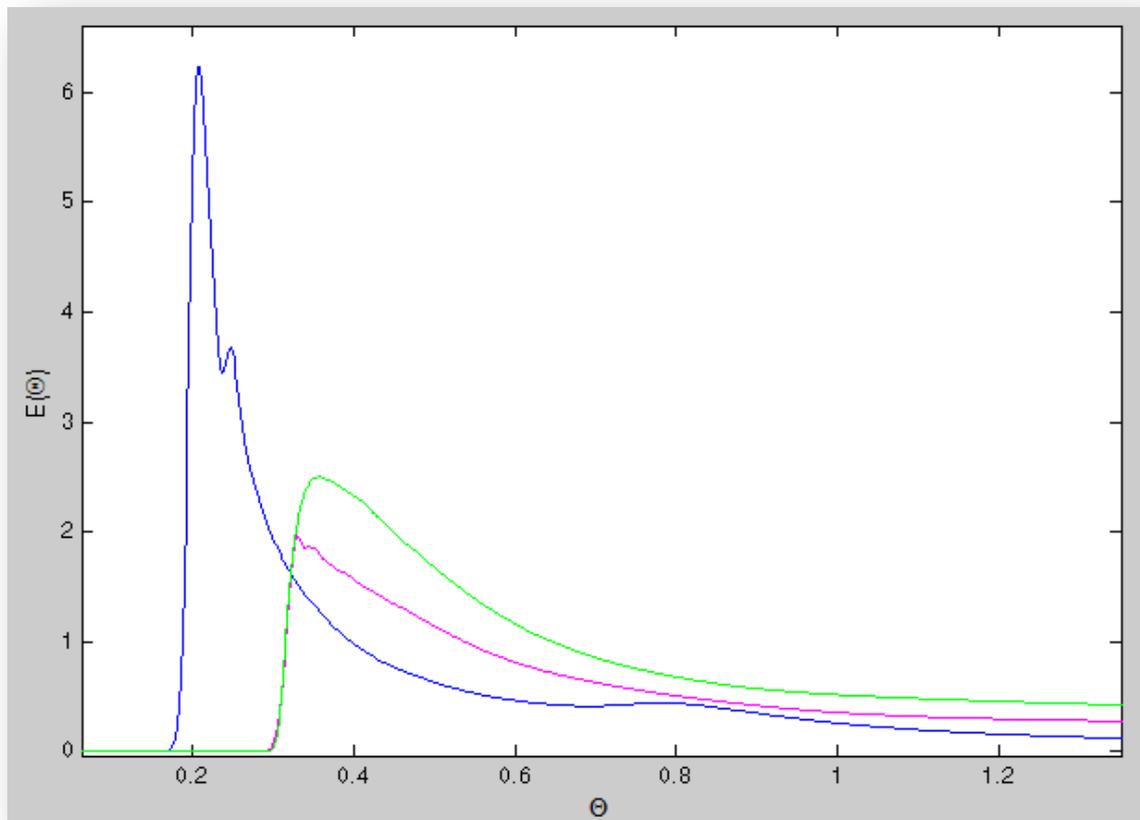


Figura 5-6: Curvas adimensionales para los distintos pasos de medición

En estas curvas se puede observar, de forma similar a lo visto en el capítulo anterior, como, cuanto más lejos este el punto de inyección respecto del punto de medición la “cola” de la curva se hace más “gruesa”, pues las partículas de trazador se van dispersando cada vez más, aunque al tener el muelle insertado se consigue que estas curvas sean más parecidas que si no existiera este. Esto se debe a que el muelle genera una corriente principal más cercana al Plug Flow, es decir, más uniforme que un flujo turbulento, pero en régimen laminar.

5.4 Resultados Flujo oscilatorio

El objetivo final del presente proyecto es estudiar si la onda oscilatoria generada al campo de velocidades del flujo principal en conjunto con la disposición de un muelle en el interior del tubo en cuestión, consigue efectos de mezclado entre el trazador y el fluido principal claramente superiores y en un tiempo inferior al que se ha conseguido en el caso estacionario con una corriente uniforme.

Para ello y debido a que la introducción de la componente oscilatoria, la cual como ya se comentó alarga bastante la resolución del problema, pues hay que resolver todo el tubo en cada punto discreto de la onda por lo que se ha tenido que jugar con varias posibilidades, en un principio se discretizó la curva tomando 96 puntos por cada ciclo.

Debido al tiempo de resolución y la escasez de medios solo se han podido sacar resultados para los pasos 5 y 14 que han sido suficientes como para poder comparar las curvas con las anteriores del caso estacionario.

Como se comentó renglones unos renglones arriba el paso 5 es justo el paso donde se inyecta el trazador por tanto se puede intuir que al primer golpe de oscilación gran cantidad de trazador será registrada a través de ese “punto de control”.

En cuanto a los parámetros característicos del flujo, se introduce con la oscilación el llamado Reynolds oscilatorio que tiene la expresión siguiente:

$$Re_0 = \frac{2\pi \cdot f \cdot X_0 \cdot \rho \cdot D_t}{\mu} = 500$$

Donde, f es la frecuencia de la onda que en este caso es $f = 8 \text{ Hz}$, $x_0 = 0.002 \text{ m}$ es la amplitud de oscilación del pistón que genera la onda. El resto de parámetros siguen siendo los mismos que en el caso estacionario.

$$St = \frac{D_t}{4\pi \cdot X_0} = 0.2$$

Sin más dilaciones pues las características de la oscilación se explican en el capítulo 3 se van a exponer los resultados obtenidos en los pasos 5 y 14.

- **Paso 5**

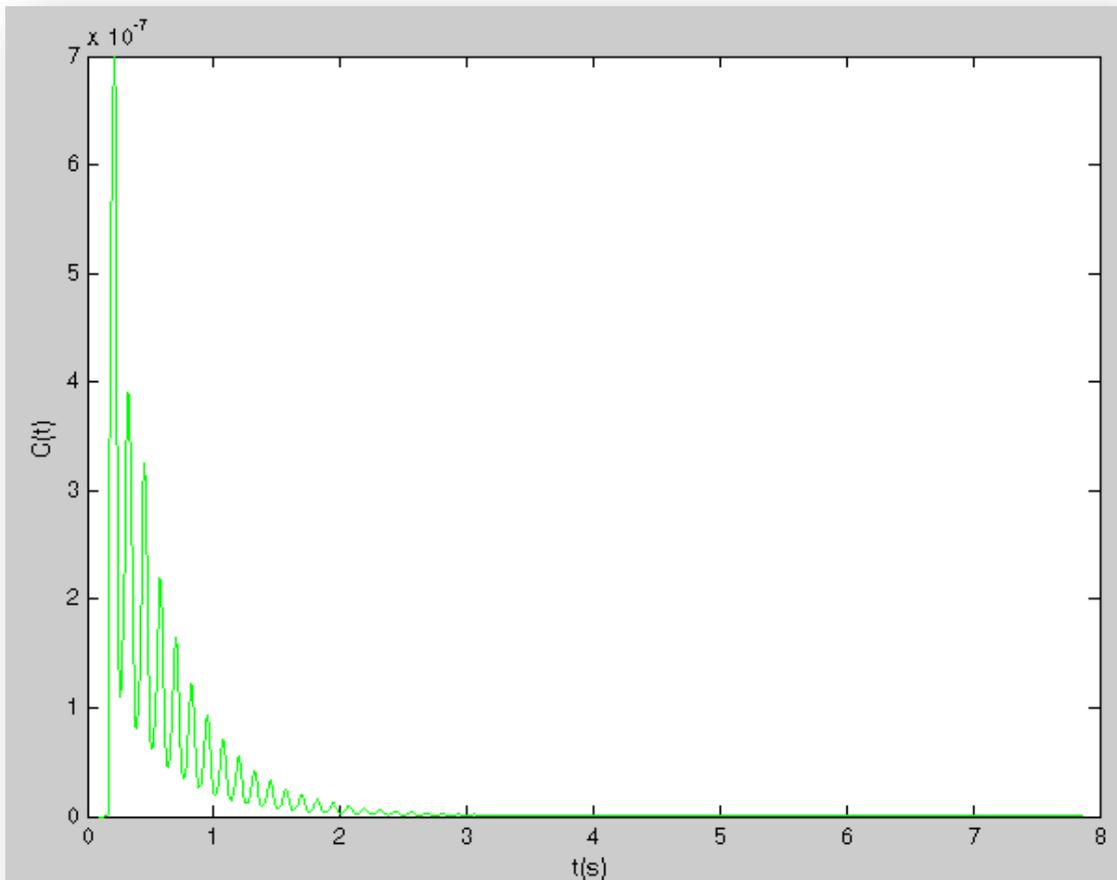


Figura 5-7: Curva fracción másica del trazador en paso 5

El punto de medida como se ha comentado está a menos de medio paso del punto de inyección, para calcular exactamente esta distancia, que se sigue llamando L_{out} ,

Por tanto:

$$L_{out} = 15 \times 2.1429 \times 10^{-4} = 0.0032 \text{ m}$$

Y el tiempo de residencia medio:

$$\tau_5 = \frac{L_5}{V} = \frac{0.0032}{0.01} = 0.32 \text{ s}$$

En este gráfico se puede apreciar como por la cercanía entre inyección y medida el salto se produce en muy poco tiempo mientras que lógicamente por la oscilación parte del trazador que pasó por el punto de medición retorna hacia aguas arriba.

- **Paso 14**

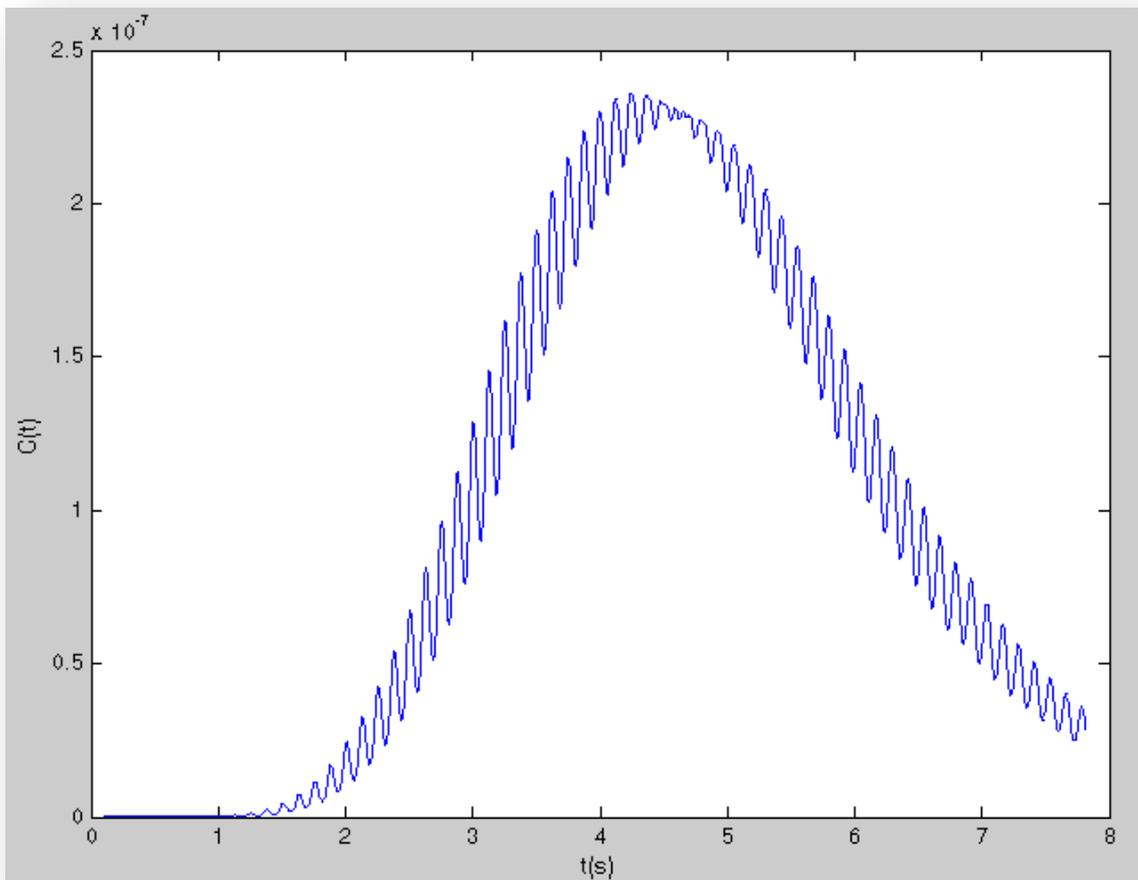


Figura 5-8: Curva fracción másica del trazador en paso 14

Esta grafica se toma la medida en el paso 14 al igual que en el estacionario la distancia L_{out} seguirá siendo 0.707m, la velocidad neta del flujo principal sigue siendo $U_n = 0.01 \text{ m/s}$.

Para ver mejor los efectos de la onda oscilatoria se han representado en una misma grafica la curva del caso estacionario frente a la del caso oscilatorio en los pasos 5 y 14 como se muestra a continuación. Como se comentó anteriormente el paso 5 es el paso donde se inyecta el trazador por tanto en este en primera aproximación no se deben notar en exceso los efectos de la oscilación en cuanto a la forma general de la curva. Mientras que en el paso 14 estos efectos subyacerán como se va a comprobar debido a que el flujo oscilatorio no deja zonas muertas ni partículas adheridas a las paredes del tubo.

5.5 Comparativa estacionario vs oscilatorio

A continuación se trata de comparar los resultados en ambos tipo de flujo para ver la posible ventaja del oscilatorio frente al flujo estacionario. Se comparan las curvas de fracción másica en los pasos 5 y 14.

- **Paso 5**

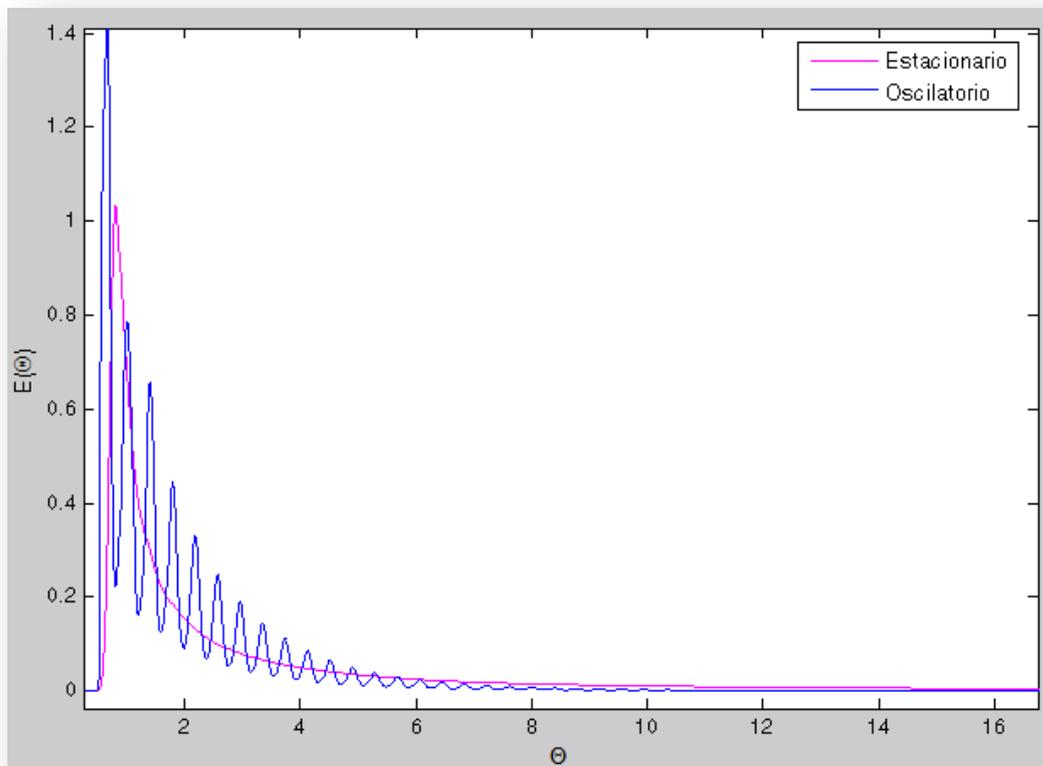


Figura 5-9: Curva fracción másica de trazador estacionario vs oscilatorio en paso5

Como se ve con bastante claridad ambas curvas prácticamente se superponen a excepción de la componente oscilatoria que produce esas ondas las cuales prácticamente tiene su centro en la curva estacionaria, como se comentó el paso 5 es justo el de inyección de trazador y la distancia desde el punto de inyección hasta el de medición es de 0.0032m por tanto era de esperar que el efecto oscilatorio en tan poca distancia apenas se note en cuanto a la mejor mezcla y dispersión del trazador.

- Paso 14

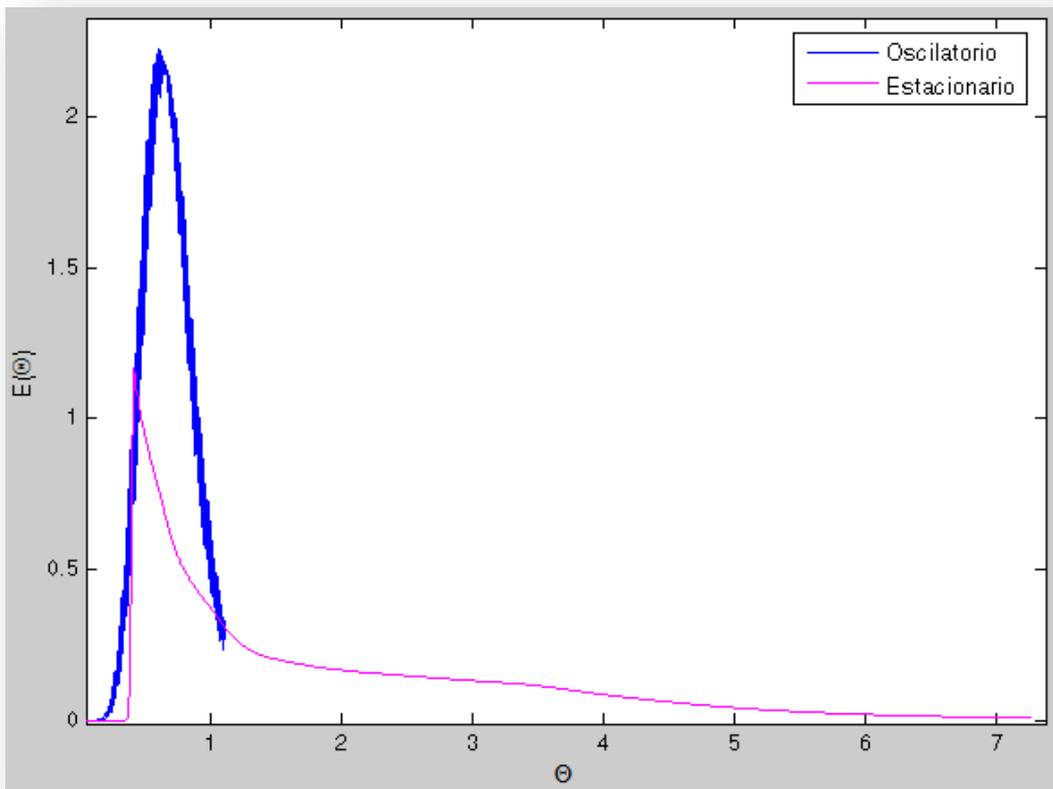


Figura 5-10: Curvas fracción másica estacionario vs oscilatorio en paso 14

En estas curvas se aprecia bastante mejor como la oscilación produce una campana mucho más estrecha, lo cual indica que efectivamente se generan, debido al cambio de sentido del flujo, unos remolinos que entremezclan de forma mucho más efectiva el trazador con la corriente principal.

5.6 Imágenes de la dispersión del trazador.

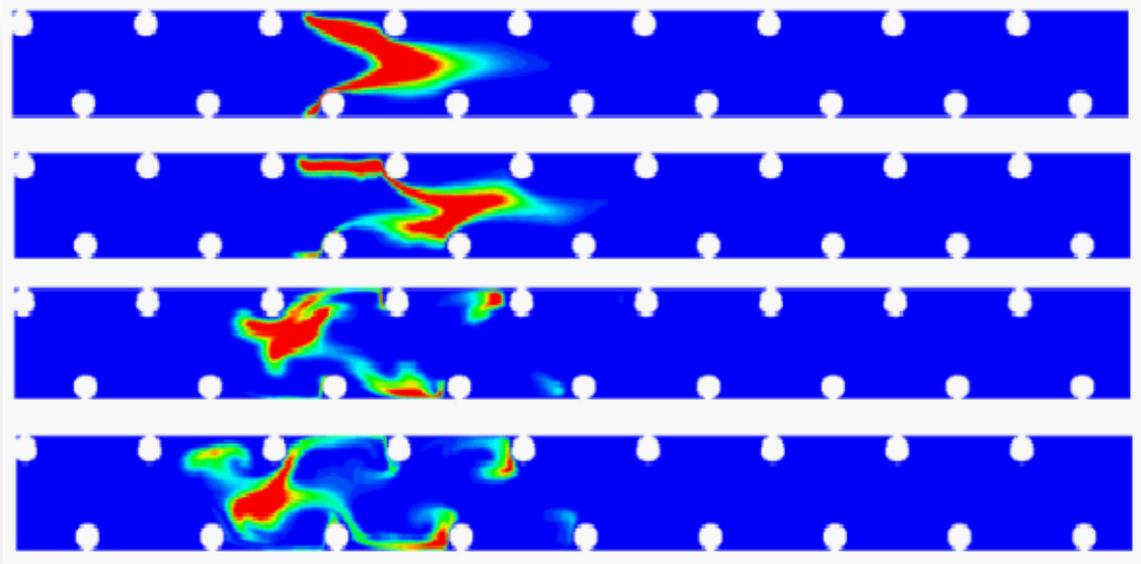


Figura 5-11: Fotogramas de la dispersión del trazador durante el primer segundo.

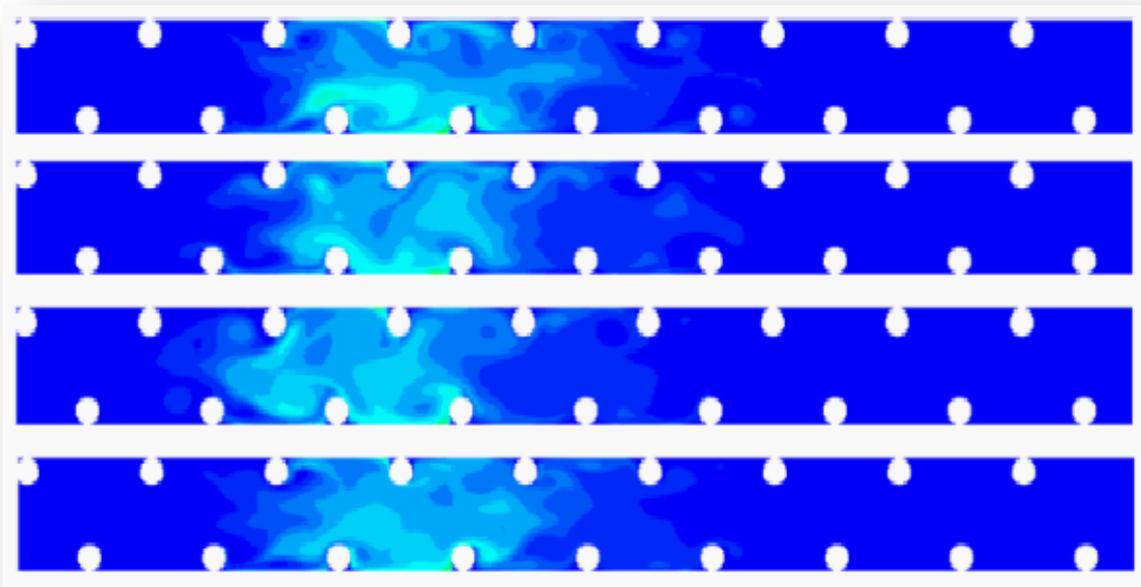


Figura 5-12: Fotogramas de la dispersión del trazador durante el cuarto segundo.

Vista de la dispersión del trazador en los segundos 1 y 4 para el caso oscilatorio estudiado de frecuencia 8Hz y Reynolds oscilatorio 500.

6- CONCLUSIONES

6.1 Validación de la técnica de inyección de trazadores.

A la hora de valorar si el método elaborado tiene o no validez, ha sido necesario realizar una serie de ensayos experimentales en Fluent, en 2 dimensiones y en estacionario, de forma que los resultados de estos se han comparado con la teoría estudiada en el *capítulo 2*, ya que el avance de este proyecto que es la evaluación de las ventajas que tiene en el transporte de especies la introducción de la onda oscilatoria junto con los baffles.

Se han analizado 5 casos en las distintas regiones que se muestran en la **Figura 4-1**, en los cuales se comprueba que en los casos convectivos (casos 1,2 y 3) las curvas de fracción másica del trazador obtenidas en Fluent y adimensionalizadas se adaptan con alguna pequeña

desviación respecto a la curva teórica definida por la $E(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi \frac{D}{uL}}} e^{\left(-\frac{(1-\theta)^2}{4\left(\frac{D}{uL}\right)}\right)}$

Ec- 2.11. Mientras que en la zona dispersiva (casos 4 y 5) estas curvas experimentales de Fluent adimensionales resultan ser casi calcadas a las curvas teóricas de la $E_{\theta} = \frac{1}{2\theta^2}$

Ec- 2.14.

Por tanto, en primera aproximación y para el caso 2 D se puede concluir que el método de inyección definido en el transporte de especies es válido.

Comentar también que debido a que las propiedades del fluido (agua) no permitían llegar a ciertos valores de número de Bodestein se jugó con algunos valores como el coeficiente de dispersión D, la relación de aspecto L/dt, para poder obtener valores de estos parámetros que permitiesen entrar en las regiones deseadas y comprobar que el método no falla en ninguno de los dos tipos de flujo convectivo y dispersivo.

6.2 Resultados 3D, estacionario y oscilatorio.

Para analizar la dispersión del trazador se ha dispuesto de dos casos uno estacionario, y otro oscilatorio, los resultados obtenidos en las curvas estacionarias que se muestran en el capítulo anterior, por la forma de la curva y comparando a las curvas teóricas estudiadas en el capítulo 2 se puede ver que el tipo de flujo desarrollado en su interior es más semejante al convectivo, la introducción de los baffles permite que el flujo en el centro del tubo sea más uniforme que en los casos de flujo laminar. Se observa también que a medida que nos alejamos del punto de inyección para medir la fracción de trazador la “cola” de la misma se alarga, esto podría deberse a que restos de trazador se van acumulando en las cercanías del muelle, con lo cual el tiempo necesario para que todo el trazador se disperse es demasiado alto.

Ahora bien para solucionar esto se introduce la oscilación en el campo de velocidades, la lógica parece que sugiere que en este ensayo y debido al mejor mezclado que supondría introducir la oscilación el trazador saldrá antes del tubo.

En efecto se han comparado las gráficas en flujo estacionario con oscilatorio y se concluye que la gráfica de fracción másica a medida que se mide más lejos del punto de inyección va adoptando una forma parecida a la campana de Gauss, que recuerda más a una dispersión que a un flujo de tipo convectivo, sin ser no obstante, ninguno de aquellos pues como se ha comentado aquella teoría está desarrollada para flujos estacionarios.

En la **Figura 5-10** se comparan directamente las curvas en flujo estacionario y en oscilatorio pudiendo apreciar en ellas perfectamente como la masa de trazador sale antes en el caso oscilatorio que en el estacionario, por tanto , se puede validar así este método de transporte de especies.

7- ANEXO I

7.1 Introducción

Como se ha comentado debido a la complejidad del mallado, gran cantidad de puntos en los que se han de resolver las ecuaciones de la mecánica de fluidos, además del tiempo (real) de resolución que debe ser unos 30 segundos para el caso transitorio y unos 18 segundos para el caso oscilatorio, según el cálculo del tiempo de residencia, dado por la velocidad de avance del fluido principal que es 0.01 m/s y por la longitud del tubo, esta cantidad de iteraciones no las puede resolver PC normal puesto que los procesadores no son lo suficientemente potentes, por tanto se ha dispuesto de un servidor en el cual se han cargado estos casos de mayor peso para poder resolver el enorme sistema de ecuaciones.

En este anexo se explica cómo se ha utilizado esta herramienta cedida por la Universidad Politécnica de Cartagena.

7.2 Caso estacionario

Como ya se ha explicado anteriormente y no es objeto de este anexo las configuraciones que se han de hacer en Fluent para “correr” este caso, directamente se va a disponer del journal que se ha de cargar en el server. El funcionamiento del server es similar al del programa por tanto a partir del programa se crean estos journal, un problema típico es que no se puede ver directamente la convergencia de los residuos en una gráfica como si se podía hacer con el programa en el PC, no obstante, se pueden ver los residuos en un .txt que el programa va escribiendo y actualizando. Por tanto como se puede sobreentender el proceso de generar el journal trata de ir al programa y en la ventana de comandos ir ejecutando las sentencias a mano, por ejemplo, para configurar la velocidad que se indicó en el capítulo 3 se debe proceder a escribir en la ventana de comandos los siguientes códigos:

- 1- Habrá que cargar en primer lugar el perfil de velocidad de la solución periódica.
- 2- **/Define/boundary-conditions/velocity-inlet**
- 3- Serie de comandos que nos solicita el programa se ve en la imagen:

```
define/boundary-conditions/velocity-inlet
Please answer y[es] or n[o].
Velocity Specification Method: Magnitude and Direction [no] n
Velocity Specification Method: Components [no] y
Reference Frame: Absolute [yes] y
Coordinate System: Cartesian (X, Y, Z) [yes] y
Use Profile for X-Velocity? [no] y
Use UDF Profile for X-Velocity? [no] n
profile names list: (interior-12 interior-12 interior-12 interior-12 interior-
profile name ["interior-12"]
data names list: (x y z x-velocity y-velocity z-velocity)
data name ["x"] x-velocity

Error: eval: unbound variable
Error Object: x-velocity
Invalid string.
data name ["x"] "x-velocity"
Use Profile for Y-Velocity? [no] y
Use UDF Profile for Y-Velocity? [no] n
profile names list: (interior-12 interior-12 interior-12 interior-12 interior-
```

4- En el journal solo se han de escribir las entradas que el programa va requiriendo.

A continuación se presenta el código usado para el caso estacionario, a partir del cual se irán comentando los diferentes comandos.

```
rc 25pasostrz.cas.gz
/file/read-profile
Periodic_central
/define/boundary-conditions/velocity-inlet
inlet
no
yes
yes
yes
yes
no
"interior-12"
"x-velocity"
yes
no
"interior-12"
"y-velocity"
yes
no
"interior-12"
"z-velocity"
no

no
0
quit
quit
/solve/monitors/residual/convergence-criteria
1e-4
1e-4
1e-4
1e-4
1e-4
/solve/set/discretization-scheme/pressure 10
/solve/set/discretization-scheme/mom 0
/solve/set/reporting-interval 1
/solve/set/time-step 0.1
/solve/dual-time-iterate 1 50

/solve/patch
trazador

species-0
1
/solve/monitors/residual/convergence-criteria
1e-4
1e-4
1e-4
1e-4
1e-4
/solve/set/discretization-scheme/pressure 10
/solve/set/discretization-scheme/mom 0
/solve/set/reporting-interval 1
/solve/set/time-step 0.01
/solve/dual-time-iterate 1 50
q
/solve/patch
trazador

species-0
/solve/monitors/residual/convergence-criteria
1e-4
1e-4
1e-4
1e-4
1e-4
1e-4
```

Carga del .cas y el perfil de velocidades de la solución periódica

Configuración del perfil de velocidades

Configura el error de los residuos

Configura el solver y resuelve 1 paso con 50 iteraciones

Inyecta el trazador (Patch a 1)

Configura el error de los residuos este paso puede saltarse pues es el mismo, no obstante no está de más ponerlo.

Vuelve a resolver un paso con tiempo por paso de 0.01 segundos y 50 iteraciones

Deja de inyectar trazador (Patch a 0)

Configura el error de los residuos este paso puede saltarse pues es el mismo, no obstante no está de más ponerlo.

```
/solve/set/discretization-scheme/pressure 10
/solve/set/discretization-scheme/mom 0
/solve/set/reporting-interval 1
/solve/set/time-step 0.01
/solve/dual-time-iterate 3500 50
wd 25pasos_un.dat.gz
q
exit
yes
```

Configura el solver, en este caso se programan 3500 iteraciones para completar los 35 segundos, también escribe el .dat por si fuera necesario.

Referencias y bibliografía.

- Levenspiel-Capítulo 13: The Dispersión Model.
- Levenspiel-Capítulo 15: The Convection Model For Laminar Flow.
- Chemical and Reactors.
- ANSYS FLUENT 14 user Guide.
- Elements of Chemical Reactions Engineering.
- Proyecto fin de Carrera: David S. Martínez Fernández.
- Flowfield and residence time distribution simulation of a cross-flow gas–liquidwastewater treatment reactor using CFD.
- Characterisation of mesoscale oscillatory helical baffled reactor—Experimental Approach. Autores: Anh N. Phan*, Adam P. Harvey.
- PFC Samuel Espin Tolosa.
- Evaluation of axial dispersion and mixing performance in oscillatory baffled reactors using CFD. Autores: Mikko Manninen,a Elena Gorshkova,a Kirsi Immonena and Xiong-Wei Nib.
- Residence Time Distributions in a Stirred Tank – Comparison of CFD predictions with Experiment. Autores: Byung-S. Choi, Bin Wan, Susan Philyaw, Kumar Dhanasekharan and Terry A. Ring.
- Development and evaluation of novel designs of continuous mesoscale oscillatory baffled reactors. Autores: Anh N. Phan*, Adam Harvey.