

**INSTITUTO TECNOLÓGICO Y DE ESTUDIOS SUPERIORES
DE MONTERREY**

CAMPUS MONTERREY

DIVISIÓN DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA
PROGRAMA DE GRADUADOS EN INGENIERÍA



**Estudio de la dinámica de fluidos en un cabezal de
entrada de gases utilizando CFD.**

TESIS

PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO
ACADÉMICO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS
ESPECIALIDAD EN INGENIERÍA ENERGÉTICA

POR

Edgar Galván Martínez

MONTERREY, NUEVO LEÓN

DICIEMBRE DE 2009

**Para mi familia,
a quienes les debo todo lo que soy;
y para ti, Rocío,
por ser mi fortaleza y un remanso de paz.**

TABLA DE CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS	III
RESUMEN	IV
LISTA DE FIGURAS	V
LISTA DE TABLAS	VII
1. INTRODUCCIÓN.	1
1.1 Contexto del problema.	1
1.1.1 Importancia de la producción de acero en la sociedad.	1
1.1.2 Proceso de reducción directa en la producción de acero.....	1
1.1.3 Transporte de gases reductores en el proceso de reducción directa.	2
1.1.4 Papel del plenum en el transporte de gases reductores.	3
1.2 Justificación	4
1.3 Objetivos	5
1.4 Organización del documento.	5
2 REVISIÓN DE LITERATURA.	7
2.1 Depositación de partículas en ductos.	7
2.1.1 Características generales.	7
2.1.2 Depositación de carbón pirolítico.	8
2.2 Transporte de cantidad de movimiento.	10
2.3 Flujo turbulento.	12
2.3.1 Características.	12
2.3.2 Descomposición de Reynolds.....	14
2.3.3 Tensor de esfuerzos de Reynolds.	16
2.3.4 Viscosidad cinemática de remolino y difusividad de remolino.....	18
2.3.5 Métodos utilizados en la solución de flujo turbulento.....	19
2.3.6 Modelo de longitud de mezclado de Prandtl.....	20
2.3.7 Modelo $k-\varepsilon$	22
2.4 Modelación con CFD.	26
3. MODELACIÓN DEL SISTEMA	30
3.1 Características del sistema a modelar	30
3.1.1 Características físicas.	30

3.1.2	Propiedades del gas proceso.	35
3.2	Suposiciones y simplificaciones.	36
3.2.1	En las características físicas.....	36
3.2.2	En las propiedades del gas proceso.	37
3.3	Ecuaciones gobernantes.....	38
4.	IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO EN CFD	40
4.1	Aproximación inicial.....	40
4.2	Implementación en COMSOL Multiphysics 3.5a.	43
4.2.1	Acciones preliminares.	43
4.2.2	Dibujo de la geometría del sistema.	43
4.2.3	Asignación de valores a parámetros del modelo.	45
4.3	Influencia del tipo de elementos finitos.....	48
4.4	Influencia del mallado.	50
4.5	Influencia de los parámetros de estabilización.....	52
4.6	Generación y análisis de resultados.....	53
4.7	Recomendaciones para futuras simulaciones.....	55
5.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN.	58
5.1	Dinámica de fluidos en el diseño base.....	58
5.2	Análisis de sensibilidad respecto a parámetros geométricos.....	71
5.3	Comparación entre dos diseños dados.....	76
6.	CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO.....	78
	REFERENCIAS.....	82
	ANEXOS	89
	ANEXO 1. Métodos de estabilización de turbulencia en COMSOL© Multiphysics 3.5a.....	89

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Carlos Iván Rivera Solorio por su asistencia y el tiempo que me dedicó como guía no sólo en cuanto a conocimientos técnicos se refiere.

Al M.C. Juan Antonio Villarreal Treviño, cuyo apoyo se remonta más allá de la realización de esta tesis y a quien le debo los pocos conocimientos que tengo en la industria.

Al Dr. Alejandro Javier García Cuéllar por su tiempo e interés dedicado a mi trabajo y a mi persona.

Al Instituto Mexicano de Ingenieros Químicos y a la empresa Ternium por el soporte económico brindado durante la realización de esta maestría.

A mis compañeros que me apoyaron y aconsejaron en el uso de herramientas computacionales utilizadas en esta tesis.

Y por último, a todos aquellos que con sus comentarios y apoyo pusieron su granito de arena en la realización de esta tesis.

¡Muchas gracias!

RESUMEN

En el presente documento se muestra la modelación, simulación y análisis de la dinámica de fluidos dentro de un cabezal de entrada de gases a un reactor de reducción directa. En este tipo de reactor se obtiene fierro esponja, un insumo en la producción de acero.

En la modelación del flujo de gases se utiliza el modelo turbulento $k-\varepsilon$ en flujo isotérmico con viscosidad y densidad constantes. Además, se considera que la presión es la misma en la parte final del sistema.

La simulación se realizó mediante un programa de dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) que utiliza el método de elementos finitos.

Previamente a la simulación del sistema deseado se verificó la influencia que algunos parámetros del programa tienen sobre los resultados. Tales parámetros son: tamaño de malla utilizado, tipo de elementos finitos y parámetros de estabilización turbulenta.

Inicialmente se modela y simula una geometría base para analizar el perfil de velocidades y presiones a lo largo del cabezal. Posteriormente se realiza un análisis de sensibilidad de algunos parámetros de diseño en vías de un proceso de optimización.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Proceso de reducción directa HYL sin reformador.....	2
Figura 2. Localización de plenum en reactor.....	3
Figura 3. Vista de planta de plenum.....	4
Figura 4. Variación de la velocidad instantánea.....	15
Figura 5. Volumen de control en flujo turbulento bidimensional.....	16
Figura 6. Gráfica que muestra los perfiles cortantes en un tubo. Tomado de Figura 9.12 de (Wilkes, 2007).....	18
Figura 7. Malla generada por CFD: se observa la distribución de densidad de celdas.....	27
Figura 8. Ubicación de plenum y línea de transferencia.....	30
Figura 9. Parte del sistema a modelar (color azul) que pertenece a la línea de transferencia.....	31
Figura 10. Diferencia de alturas entre plenum y línea de transferencia.....	32
Figura 11. Vista de planta de muro en entrada a plenum.....	32
Figura 12. Trayectoria del gas proceso dentro del plenum.....	33
Figura 13. Diámetro externo del plenum.....	34
Figura 14. Perfil de plenum y boquillas.....	34
Figura 15. Ejemplo de dibujo generado en Solidworks para exportar a Comsol. ...	41
Figura 16. Mensaje de error en Comsol con geometría .STL importada.....	42
Figura 17. Cuerpos simples 3D de Comsol.....	44
Figura 18. Ventana de configuración del dominio.....	46
Figura 19. Ventana de condiciones de frontera en entrada.....	47
Figura 20. Ventana de condiciones de frontera en salida.....	48
Figura 21. Ventana de configuración de elementos finitos.....	49
Figura 22. Efecto del parámetro “Resolution of narrow regions” para un mallado “Fine”: (a) con el valor predefinido de 0.8; (b) con valor de 0.6.....	52
Figura 23. Ventana de estabilización de flujo turbulento.....	53
Figura 24. Gráfica del flujo en coordenadas polares.....	55

Figura 25. Perfil general de velocidad cercano a las paredes.....	58
Figura 26. Contorno de velocidades en la parte media del flujo a la entrada del plenum.....	59
Figura 27. Contorno de velocidades en cortes paralelos al plano yz. En las zonas cuya velocidad es mayor al límite máximo de la gráfica (25 m/s) la gráfica se corta.	61
Figura 28. Vector velocidad en cortes paralelos al plano xz. La entrada del gas se encuentra a la izquierda.	61
Figura 29. Ubicación del corte de sección transversal a 243°.....	62
Figura 30. Contorno de velocidades en la sección transversal a 243° de la entrada.	62
Figura 31. Contorno de velocidades en cortes paralelos al plano xz en la parte posterior del plenum.....	63
Figura 32. Líneas de corriente en la parte posterior del plenum.	65
Figura 33. Vectores de velocidad en la parte posterior del plenum. La sección transversal azul está a 180° de la entrada.	65
Figura 34. Vista isométrica de la sección transversal y de los vectores de velocidad a 180° de la entrada.....	66
Figura 35. Vista lateral de la sección transversal y de los vectores de velocidad a 180° (plano xy). Se observan los remolinos verticales.	66
Figura 36. Distribución de velocidades en las boquillas.....	67
Figura 37. Distribución de presiones en el plenum.....	69
Figura 38. Vista inferior de la distribución de vorticidad en la conexión de línea de transferencia con el plenum.	69
Figura 39. Distribución de flujo en el diseño base.....	70
Figura 40. Efecto de variar el número de boquillas.....	72
Figura 41. Efecto de disminuir el área transversal de plenum en un 11%.....	73
Figura 42. Comparación de diseños de muro de contención.....	75
Figura 43. Distribución del flujo en el diseño base y en el alterno.....	77

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Modelos para resolver RANS.....	19
Tabla 2. Longitudes de mezclado para flujos turbulentos bidimensionales.....	22
Tabla 3. Parámetros del diseño base.....	35
Tabla 4. Comparación de funciones de aproximación.....	49
Tabla 5. Comparación de mallados.....	50
Tabla 6. Resultados obtenidos variando el número de boquillas.....	71
Tabla 7. Comparación respecto a número de boquillas con la misma área total de salida.....	73
Tabla 8. Comparación entre el diseño base y el diseño "Techo bajo".....	74
Tabla 9. Resultados para diferentes diseños de muros de contención.....	75
Tabla 10. Comparación entre diseño base y diseño alternativo.....	76

1. INTRODUCCIÓN.

1.1 Contexto del problema.

1.1.1 Importancia de la producción de acero en la sociedad.

Es indudable la importancia que tiene hoy en día el acero en nuestras vidas. Se encuentra presente en una gran cantidad de formas distintas en nuestro quehacer cotidiano. Por ejemplo, en forma de herramientas, utensilios, equipos mecánicos, electrodomésticos, electrónicos, maquinaria y en la gran mayoría de los edificios que se construyen actualmente.

Según la World Steel Association[†], en 2008 se produjeron 1,329,719,000 toneladas de acero en todo el mundo, de las cuales el 1.3 % (17,615,000 ton) fueron generadas en México.

1.1.2 Proceso de reducción directa en la producción de acero.

En la producción de acero se puede utilizar como materia prima la chatarra (de baja calidad porque contiene diversos elementos que alteran la calidad del acero), el arrabio (producido en alto horno) o el fierro esponja (producido en plantas de reducción directa y de alta calidad porque es hierro de alta pureza).

Actualmente, las dos tecnologías de reducción directa más utilizadas son del tipo MIDREX[©] y del tipo HYL[©]. En este documento se analizará un sistema que se encuentra enmarcado en la tecnología HYL[©].

El proceso de reducción directa consiste básicamente en la reacción de óxido de

[†] Sitio web: www.worldsteel.org Última revisión: 12 de noviembre 2009

reactor se realiza en primera instancia a través de un ducto cilíndrico con paredes interiores de ladrillo refractario y posteriormente por un cabezal de alimentación que circunda al reactor (ver Figura 2). En la jerga técnica de la empresa este cabezal de alimentación es llamado “plenum” y en lo que resta de este documento se le llamará así.

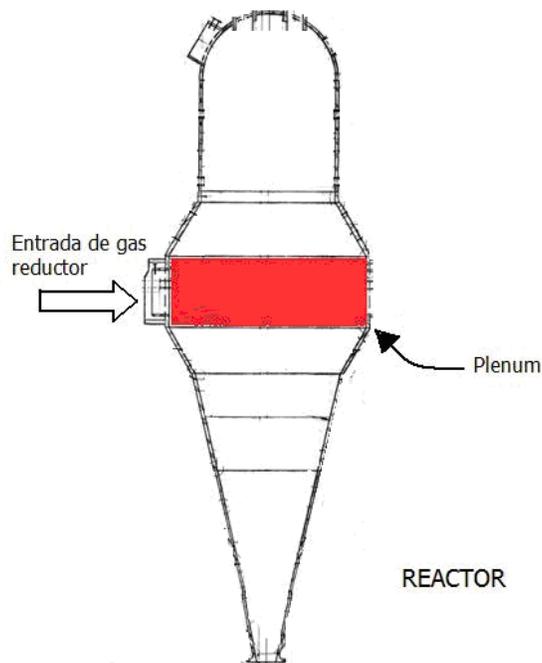


Figura 2. Localización de plenum en reactor.

1.1.4 Papel del plenum en el transporte de gases reductores.

El objetivo principal del plenum es distribuir adecuadamente al gas que entra al reactor para evitar que ocurran canalizaciones dentro del mismo y existan porciones de óxido de hierro sin reaccionar, lo cual disminuye la calidad del producto.

El gas reductor se introduce al reactor a través de boquillas rectangulares. El diseño de estas boquillas debe permitir que la distribución de flujo a través de ellas sea homogénea (ver Figura 3).

Es común que en el plenum se deposite un material carbonáceo en la superficie más distante a la entrada de gas, donde se produce un área de estancamiento. Con el paso del tiempo, la acumulación de estos depósitos provoca la obstrucción de algunas boquillas y la acumulación de material carbonáceo en las superficies del plenum.

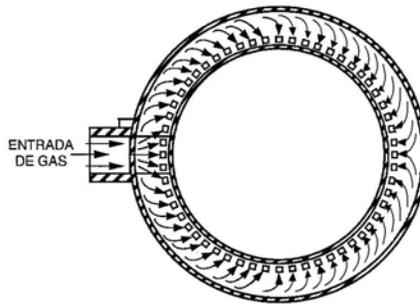


Figura 3. Vista de planta de plenum.

1.2 Justificación.

El desarrollo de esta tesis surge de la necesidad de optimizar el diseño de los plenum, distribuyendo de la manera más homogénea posible los gases y minimizando el tiempo de residencia del gas reductor en el plenum, contribuyendo con ello en la disminución de la depositación de carbón.

Con lo anterior se busca aumentar la eficiencia de la planta actual y además, generar información que sirva como precedente en la construcción de nuevas plantas.

1.3 Objetivos.

1.3.1 Objetivo general.

Optimizar el diseño de los plenum de reactores de reducción directa tomando como base la distribución del flujo hacia el reactor y el tiempo de residencia en el plenum.

1.3.2 Objetivos específicos.

- Obtener los perfiles de velocidad de flujo y presión dentro del plenum.
- Probar diferentes configuraciones geométricas del plenum y verificar los perfiles de velocidad y presión en cada una de ellas.

1.4 Organización del documento.

En la sección 2 se hace una revisión de literatura acerca de la depositación en ductos en general, así como de la depositación de carbón en particular. Enseguida se describen las ecuaciones gobernantes del flujo de gases incompresibles y en especial los modelos asociados a flujo turbulento. Además, se hace una revisión de los métodos de Dinámica de Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) y se explica brevemente el método de elementos finitos.

En la sección 3 se describe la configuración del sistema a modelar y se explican las suposiciones y simplificaciones que se tomaron en cuenta en la modelación del mismo.

En la sección 4 se detalla el proceso de implementación en el programa de CFD utilizado, así como los valores de parámetros propios de este programa en

particular.

En la sección 5 se presentan los resultados de acuerdo a los tres objetivos específicos que se contemplaron: la modelación del sistema actual, el análisis de sensibilidad con diferentes factores y la comparación de dos diseños en particular.

Por último en la sección 6 se presentan conclusiones de los resultados obtenidos y se especifican algunos puntos que pueden ser cubiertos por investigaciones posteriores.

2 REVISIÓN DE LITERATURA.

2.1 *Deposición de partículas en ductos.*

2.1.1 Características generales.

La deposición de partículas es un fenómeno en el cual partículas suspendidas en un fluido son transportadas a una superficie y se mantienen en contacto con ella de manera temporal o permanente. (Masuda et al., 2006).

Esta deposición se lleva a cabo desde una fase discontinua (sólida o líquida) hacia una fase continua (líquida o gas) y dependiendo de la combinación de fases que se tenga, es la denominación que recibe el sistema. En nuestro estudio estamos interesados en un sistema de tipo aerosol.

Un aerosol es una suspensión de pequeñas partículas (sólidas o líquidas) en gases. (Friedlander, 2000)

Existen diferentes términos para designar a tipos de aerosoles específicos, tales como: humo, que designa a una suspensión de pequeñas partículas sólidas provenientes de la combustión; polvo (atmosférico), que se refiere a partículas sólidas con diámetro menor a 500 μm que se encuentran dispersas en la atmósfera; niebla, que es una suspensión de gotas de agua en aire; etc.

Las partículas generalmente se clasifican por su tamaño, el cual se describe con el diámetro para el caso de partículas esféricas y con un diámetro equivalente para partículas no esféricas. Dependiendo del sistema de interés, se utilizan diferentes diámetros equivalentes de partícula. Algunos de estos diámetros equivalentes son los siguientes (Licht, 1988):

- *Diámetro de área proyectada.*
El diámetro de un círculo con área igual a la sombra proyectada por una partícula paralela al plano de la lente del microscopio.
- *Diámetro de volumen equivalente.*
El diámetro de una esfera que tiene un volumen igual al de la partícula.
- *Diámetro de sedimentación.* (diámetro de caída libre)
El diámetro de una esfera de igual densidad que tiene la misma velocidad de asentamiento que la partícula en un fluido específico.
- *Diámetro aerodinámico.*
El diámetro de una esfera de densidad unitaria (1 g/cm^3) que tiene la misma velocidad de asentamiento que la partícula en aire. Este es uno de los diámetros equivalentes más utilizados.
- *Diámetro de arrastre.*
El diámetro de una esfera con la misma fuerza de arrastre que la partícula en un fluido con la misma viscosidad y a la misma velocidad.

Las partículas cuyo diámetro es mayor a $1 \mu\text{m}$ son llamadas partículas gruesas (coarse particles). El rango entre 0.1 y $2.0 \mu\text{m}$ alberga las partículas en condición de acumulación, mientras que las partículas con diámetro menor a $0.1 \mu\text{m}$ son llamadas ultrafinas (Friedlander, 2000).

2.1.2 Depositación de carbón pirolítico.

Según el Compendio de terminología química de la IUPAC[‡], 2ª edición (“The Goldbook”), el término carbón pirolítico se define como: “material de carbón depositado a partir de hidrocarburos gaseosos sobre un sustrato subyacente apropiado (materiales de carbono, metales, cerámicos) en un rango de temperatura de 1000 a 2500 K (depositación química de vapores).”

[‡] Página de Internet: <http://old.iupac.org/goldbook/P04963.pdf> Última revisión 10 noviembre 2009.

La formación de carbono en condiciones termodinámicas favorables se produce a través de dos mecanismos: una nucleación homogénea en la fase gaseosa que genera negro de carbón (carbon black) y otro a través de la nucleación heterogénea y posterior crecimiento en una superficie donde se forma el carbón pirolítico.

Existe una analogía muy ilustrativa al respecto: la formación de carbón pirolítico y negro de carbón es similar al fenómeno de formación del hielo y la nieve, respectivamente. (Bourrat et al., 2006)

En cuanto a cómo se lleva a cabo esta formación, el mecanismo de depositación de carbón pirolítico está en debate desde la década de 1950 hasta ahora, principalmente porque la obtención de datos in situ acerca de las especies intermediarias responsables de la nucleación y posterior crecimiento de carbón pirolítico es difícil. De acuerdo a información en literatura (Monthieux et al., 2006; Oberlin, 2002; Hu et al., 2002; Delhaes, 2002), los mecanismos propuestos para la depositación de carbón pirolítico siguen dos hipótesis principales:

1. Durante la depositación de carbón catalítico la fase gaseosa está constituida por moléculas grandes poliaromáticas (PAHs, polyaromatic molecules) asociadas con radicales. Estos últimos necesitan sitios activos para depositarse, mientras que la depositación de los primeros se realiza aleatoriamente.
2. La fase gaseosa es transformada en una neblina de gotas de hidrocarburos.

Independientemente del mecanismo que domine, los factores que tienen un mayor impacto en la formación del carbón en fase gas son: temperatura, concentración de sustancias carburizantes y tiempo de residencia (Fulcheri et al. 2002).

2.2 Transporte de cantidad de movimiento.

La ecuación de cantidad de movimiento para un fluido newtoniano de densidad y viscosidad variable en la coordenada cartesiana x está dada por:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - \left(\frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \vec{v}) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] + \rho g_x \quad (2.2.1)$$

En donde

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad (\text{divergencia del vector velocidad}) \quad (2.2.2)$$

Para el caso de viscosidad constante, la ecuación anterior se puede recomodar como sigue:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \mu \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \vec{v}) + \rho g_x \quad (2.2.3)$$

El tercer término del lado derecho de la ecuación se puede reescribir como:

$$\mu \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] = \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = \mu \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \vec{v}) \quad (2.2.4)$$

Sustituyendo la ecuación 2.2.4 en la 2.2.3:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)$$

$$+ \frac{1}{3} \mu \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \vec{v}) + \rho g_x \quad (2.2.5)$$

Para flujo incompresible:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.2.6)$$

Por lo tanto, la ecuación de movimiento para la coordenada x se puede expresar como sigue:

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho g_x \quad (2.2.7)$$

De manera general:

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) + \rho g_i \quad (2.2.8)$$

Las ecuaciones 2.2.6 y 2.2.8 conforman el modelo matemático para un fluido newtoniano incompresible con viscosidad constante.

2.3 *Flujo turbulento.*

2.3.1 Características.

La mayoría de los flujos encontrados en la práctica de la ingeniería son turbulentos. Se encuentran en un estado de movimiento caótico y aleatorio en el cual los valores instantáneos de velocidad y presión cambian continuamente con el tiempo en cada región dada del flujo (Versteeg et al., 2007).

Las principales características de un flujo turbulento son (Kundu, 1990):

- *Aleatoriedad.* Flujo irregular, caótico e impredecible.
- *No linealidad.* Flujo altamente no lineal, por lo que pequeñas perturbaciones crecen espontáneamente. Además, resulta en el estiramiento de vórtices, un proceso clave para que los flujos turbulentos en 3D mantengan su vorticidad.
- *Difusividad.* Debido al mezclado macroscópico de las partículas de fluido, los flujos turbulentos se caracterizan por un crecimiento rápido de la difusividad térmica y de materia.
- *Vorticidad.* La turbulencia se caracteriza por altos niveles en la fluctuación de la vorticidad. Las estructuras formadas en un flujo turbulento son llamadas *eddies* (en este documento, se usará el término español de “remolinos”) y tienen un enorme rango de tamaños.
- *Disipación.* El mecanismo de estiramiento de vórtices transfiere energía y vorticidad de los remolinos grandes a los pequeños hasta que los gradientes se vuelven tan grandes que desaparecen por difusión viscosa.

A bajos números de Reynolds, los efectos viscosos dominan y pueden amortiguar perturbaciones pequeñas del flujo. Pero a números de Reynolds altos, los términos de inercia en las ecuaciones de Navier-Stokes conducen a una amplificación de las pequeñas perturbaciones.

Algunas características de los remolinos de flujo turbulento se enlistan a continuación:

- El tamaño del remolino mayor es comparable con la dimensión mínima de la corriente turbulenta. Por ejemplo, en flujos en tuberías, los remolinos más grandes que se forman tienen un tamaño del mismo orden de magnitud que el diámetro de la tubería (Wilkes, 2007).
- Los remolinos mayores se rompen en otros más pequeños que luego se convierten en otros aún más pequeños (cascada de energía). Finalmente, los remolinos más pequeños desaparecen con diámetros entre 0.1 y 0.01 mm. Por debajo de este tamaño, los remolinos se destruyen fácilmente por las fuerzas viscosas (Versteeg et al., 2007).
- Debido a que incluso los remolinos más pequeños contienen cerca de 10^{12} moléculas (y por lo tanto son de tamaño macroscópico), el flujo turbulento no es un fenómeno molecular (McCabe et al., 2002).
- El número de Reynolds de los remolinos más pequeños, basado en su velocidad (v) y longitud (η) características es igual a 1.
- Las escalas más pequeñas presentes en un fluido turbulento son aquellas en las cuales las fuerzas inerciales y viscosas son iguales. Estas escalas son llamadas microescalas de Kolmogorov.
- La energía asociada al movimiento de remolino en la escala de Kolmogorov

es disipada y convertida a energía térmica. Esta disipación ocasiona un incremento en las pérdidas de energía en flujo turbulento. (Versteeg et al., 2007)

2.3.2 Descomposición de Reynolds.

Cualquier intento por describir completamente el campo de velocidad, ya sea a través de mediciones o de simulaciones numéricas, como una función del tiempo es prácticamente imposible, excepto para flujos simples a números relativamente bajos de Reynolds. Por otro lado, debido a que las fluctuaciones por lo general son pequeñas en comparación con la velocidad promedio, es aceptable adoptar un enfoque estadístico para describir los efectos de los componentes dependientes del tiempo y tratar al flujo como si fuera completamente estable (Kays et al., 1993).

Así, la velocidad en cualquier punto del espacio y del tiempo está representada por la velocidad promedio a lo largo del tiempo (las cantidades promediadas a lo largo del tiempo se denotarán de aquí en adelante con una sobrebarra) más una fluctuación de la velocidad (que se denotarán con un apóstrofo)(ver Figura 4).

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i \quad (2.3.1)$$

En donde:

$$\bar{u}_i = \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \frac{1}{t_0} \int_0^{t_0} u(t) dt \quad (2.3.2)$$

En la Figura 4 se muestra la velocidad promedio y las fluctuaciones de la velocidad.

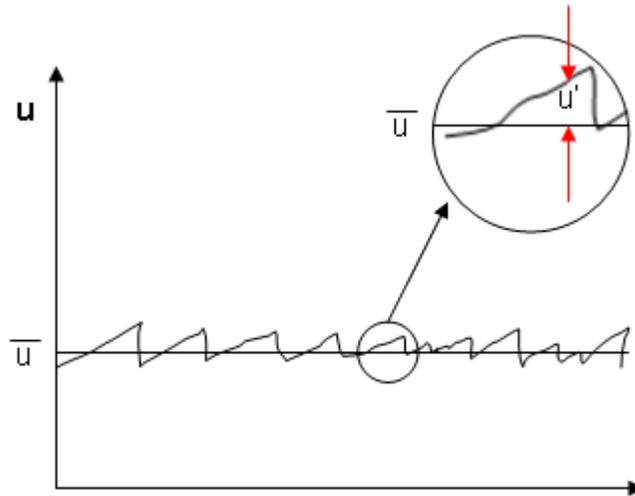


Figura 4. Variación de la velocidad instantánea.

Por definición, los promedios de las fluctuaciones a lo largo del tiempo son iguales a cero:

$$\overline{u'_i} = 0 \quad (2.3.3)$$

Por lo tanto, los promedios sobre el tiempo de las cantidades promedio son las cantidades promedio mismas:

$$\overline{\overline{u}_i} = \overline{u}_i \quad (2.3.4)$$

La ecuación de continuidad con densidad constante se puede escribir como:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3.5)$$

Sustituyendo el valor de la velocidad en sus dos componentes:

$$\frac{\partial(\overline{u}_i + u'_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} + \underbrace{\frac{\partial u'_i}{\partial x_i}}_0 = \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3.6)$$

Y sustituyendo (2.3.4) en (2.3.6), resulta:

$$\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3.7)$$

De igual manera se puede seguir un procedimiento similar (expresar la velocidad en términos de sus dos componentes estadísticas) con la ecuación de Navier-Stokes y se obtiene la siguiente expresión:

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \overline{\rho u_i' u_j'} \right] + \rho g_i \quad (2.3.8)$$

La anterior ecuación es llamada RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) y es similar a la ecuación original de Navier-Stokes, excepto que:

1. Los valores originales de velocidad y presión han sido sustituidos por los valores promediados sobre el tiempo.
2. Hay un tensor de esfuerzos adicional, conocido como *tensor de esfuerzos de Reynolds*, el cual queda definido como:

$$\tau'_{ij} = -\overline{\rho u_i' u_j'} \quad (2.3.9)$$

2.3.3 Tensor de esfuerzos de Reynolds.

Considere un volumen de control en un flujo bidimensional paralelo al eje x con un gradiente de velocidad en la dirección y (ver Figura 5) (u – componente en x de la velocidad; v – componente en y de la velocidad).

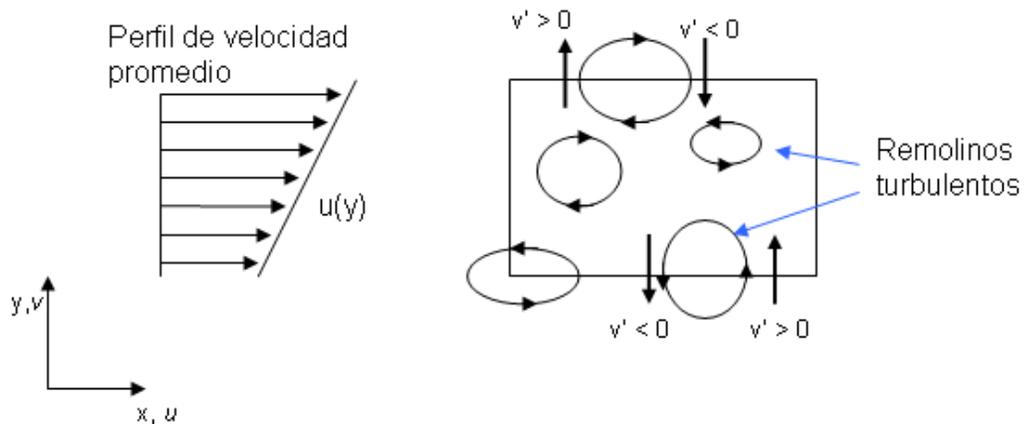


Figura 5. Volumen de control en flujo turbulento bidimensional.

La presencia de remolinos en las fronteras del volumen de control ocasiona que haya transporte de materia en todas las fronteras. Esta recirculación del fluido no puede crear o destruir materia, pero esas porciones de fluido transportadas por los remolinos transfieren cantidad de movimiento y energía hacia y desde adentro del volumen de control.

Debido a la existencia de un gradiente de velocidad en el eje y , las fluctuaciones de v con signo negativo generalmente transportarán porciones de fluido con una mayor cantidad de movimiento en x desde la frontera superior hacia el interior del volumen de control. Asimismo, fluctuaciones positivas de v en la frontera inferior transportarán porciones de fluido con menor velocidad (en promedio) hacia el interior del volumen de control.

El resultado neto es un intercambio de cantidad de movimiento debido al transporte convectivo de los remolinos, lo cual ocasiona que las capas más lentas de fluido se aceleren y las más rápidas se desaceleren. En consecuencia, las capas de fluido experimentan esfuerzos cortantes turbulentos adicionales: el *tensor de esfuerzos de Reynolds*. En la presencia de gradientes de concentración o de temperatura, los remolinos también ocasionarán transferencia de calor y materia adicional a través de las fronteras del volumen de control. (Versteeg et al., 2007).

En la Figura 6 se ilustran los perfiles de esfuerzos cortantes en un tubo. El tensor de esfuerzos de Reynolds domina en la mayoría del sistema, pero cerca de la pared declina bruscamente y el tensor de esfuerzos viscosos domina en esa región.

Para cuantificar el tensor de esfuerzos de Reynolds se utiliza una relación proporcional a la rapidez promedio de deformación, la cual fue propuesta por Boussinesq en 1877:

$$\tau_{ij}^t = \mu_i \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} = 2\mu_i S_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (2.3.10)$$

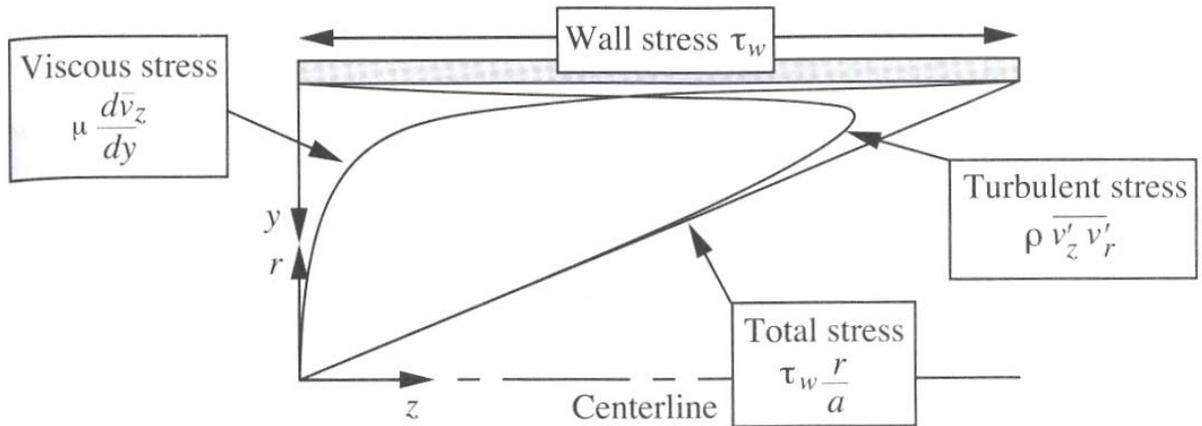


Figura 6. Gráfica que muestra los perfiles cortantes en un tubo. Tomado de Figura 9.12 de (Wilkes, 2007)

2.3.4 Viscosidad cinemática de remolino y difusividad de remolino.

El tensor de esfuerzos de Reynolds es definido como un tensor de esfuerzos turbulentos aparentes y podría pensarse que, al igual que el tensor de esfuerzos viscosos, tendería a cero si no hay un gradiente de la velocidad promedio. En la realidad esto no es necesariamente cierto, pero la aproximación es lo suficientemente exacta para la mayoría de las aplicaciones prácticas (Kays et al., 1993). Por lo tanto, es válida la siguiente relación:

$$\tau'_{ij} \propto \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad (2.3.11)$$

El factor de proporcionalidad de la anterior relación es definido como viscosidad turbulenta:

$$\tau'_{ij} = \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \quad (2.3.12)$$

La viscosidad cinemática turbulenta (o difusividad turbulenta) puede obtenerse de la viscosidad turbulenta haciendo una analogía con sus contrapartes viscosas:

$$\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho} \quad (2.3.13)$$

2.3.5 Métodos utilizados en la solución de flujo turbulento.

Generalmente, los métodos que se utilizan en la solución de flujos turbulentos se agrupan en 3 conjuntos (Versteeg et al., 2007):

- Modelos turbulentos que resuelven las ecuaciones RANS. (Reynolds Averaged Navier-Stokes)

Se concentra en las propiedades promedio del fluido y los efectos de la turbulencia en tales propiedades. Es necesario modelar de alguna forma los términos extra que aparecen en las ecuaciones de Navier-Stokes como consecuencia de la interacción entre fluctuaciones. Entre los más conocidos de estos modelos se encuentran $k-\varepsilon$ y el de longitud de mezclado.

A continuación se muestra una tabla con los principales modelos de este tipo, clasificados de acuerdo al número de ecuaciones de transporte adicionales:

Tabla 1. Modelos para resolver RANS.

# de ecuaciones de transporte adicionales	Modelo
0	Longitud de mezclado
1	Spalart-Allmaras
2	$k-\varepsilon$ $k-\omega$ Esfuerzos algebraicos
7	Esfuerzos de Reynolds

De los modelos mostrados en la Tabla 1, el de longitud de mezclado y el $k-\varepsilon$ son los más utilizados y validados actualmente (Versteeg et al., 2007). Estos modelos se basan en la suposición de que existe una analogía entre la acción del tensor de esfuerzos viscoso y el tensor de esfuerzos de Reynolds. En las secciones 2.3.6 y 2.3.7 se profundizará sobre ellos.

- Simulaciones de remolinos grandes (*large eddy simulation*).

Es una forma intermedia de cálculos turbulentos que rastrea el comportamiento de los remolinos más grandes. Requiere de un proceso de selección de remolinos de acuerdo a su tamaño en las ecuaciones de Navier-Stokes antes de los cálculos principales. Las ecuaciones de flujo en estado transitorio deben resolverse, por lo que se demanda una gran cantidad de recursos computacionales. Sin embargo, la utilización de esta técnica en flujos con geometrías complejas tiende a incrementarse con la refinación de los programas de CFD y la disponibilidad de más recursos computacionales.

- Simulaciones numéricas directas (DNS)

Se toman en cuenta los valores promedio y todas las fluctuaciones de velocidad. Las ecuaciones de Navier-Stokes en estado transitorio se resuelven en un mallado tan fino como la longitud de escala de Kolmogorov, a la cual la disipación de energía se lleva a cabo; además, los intervalos de tiempo deben ser lo suficientemente pequeños para resolver el período de las fluctuaciones más rápidas. Requiere la mayor cantidad de recursos computacionales y es poco usado en el cálculo de flujos industriales (Versteeg et al., 2007).

2.3.6 Modelo de longitud de mezclado de Prandtl.

En términos dimensionales, ya que la viscosidad cinemática de remolino tiene unidades $longitud^2 tiempo^{-1}$, se puede expresar como el producto de velocidad turbulenta de escala (v , $longitud^1 tiempo^{-1}$) y una longitud de escala (l , $longitud^1$). Si una velocidad de escala y una longitud de escala son suficientes para describir los efectos de la turbulencia, entonces de un análisis dimensional resulta que:

$$v_t = Cv_l \quad (2.3.14)$$

Donde C es una constante de proporcionalidad adimensional.

La mayor parte de la energía cinética turbulenta se encuentra en los remolinos

grandes, por lo que la longitud de escala debe referirse a éstos. Si aceptamos que hay una fuerte conexión entre el flujo promedio y el comportamiento de los remolinos más grandes, entonces podemos intentar relacionar la velocidad de escala característica de estos remolinos con la del flujo promedio.

Se ha encontrado que esta suposición funciona bien en flujos turbulentos bidimensionales donde el único esfuerzo de Reynolds significativo es τ_{xy}^t y el único gradiente de velocidad promedio importante es $\partial u_x / \partial y$.

Para tales flujos es correcto, al menos dimensionalmente, establecer que:

$$v = cl \left| \frac{\partial u_x}{\partial y} \right| \quad (2.3.15)$$

Donde c es una constante adimensional y ahora l es la longitud de escala de los remolinos más grandes. Se toma el valor absoluto para asegurarse que la velocidad de escala es independiente del signo del gradiente de velocidad. Combinando las ecuaciones (2.3.14) y (2.3.15) y absorbiendo las dos constantes en una nueva longitud de escala l_m , se obtiene:

$$v_t = l_m^2 \left| \frac{\partial u_x}{\partial y} \right| \quad (2.3.16)$$

La cual es la ecuación fundamental del modelo de longitud de mezclado de Prandtl.

Considerando que $\partial u_x / \partial y$ es el único gradiente de velocidad importante, el tensor de esfuerzos de Reynolds se puede reescribir como:

$$\tau_{xy}^t = \tau_{yx}^t = \rho l_m^2 \left| \frac{\partial \overline{u_x}}{\partial y} \right| \frac{\partial \overline{u_x}}{\partial y} \quad (2.3.17)$$

La turbulencia es función del flujo, y si el flujo cambia (y con él la turbulencia) es necesario tomarlo en cuenta en el modelo, variando l_m .

Para ciertos flujos turbulentos simples, tales como flujo libre turbulento o capas límite de pared, la estructura de la turbulencia es lo suficientemente simple para que l_m pueda ser descrita por ecuaciones algebraicas simples. En la Tabla 2 se muestran

algunas de estas funciones algebraicas.

Tabla 2. Longitudes de mezclado para flujos turbulentos bidimensionales.

Tipo de flujo	Longitud de mezclado	Longitud característica
Capa de mezclado	0.07L	Espesor de capa
Jet	0.09L	Mitad de anchura del jet
Onda	0.16L	Mitad de anchura de onda
Jet axisimétrico	0.075L	Mitad de anchura del jet
Capa límite - Subcapa viscosa y capa de ley log. - Capa exterior	$\kappa y [1 - \exp(-y^+ / 26)]$ 0.09L	Espesor de la capa límite
Tuberías y ductos	$L[0.14 - 0.08(1 - y/L)^2 - 0.06(1 - y/L)^4]$	Radio de tubería o mitad de anchura del canal

Ventajas y desventajas del modelo de longitud de mezclado de Prandtl.

Ventajas

- Fácil de implementar y con bajo costo en términos de recursos computacionales.
- Buena predicción en capas delgadas : jets, capas de mezclado, ondas y capa límite.

Desventajas

- Incapaz de describir flujos con separación y recirculación.
- Sólo calcula propiedades promedio del fluido y esfuerzos cortantes turbulentos.

2.3.7 Modelo k-ε.

Aunque el modelo de longitud de mezclado proporciona el valor de las fluctuaciones

de la velocidad del fluido y se pueden relacionar de manera proporcional al gradiente de velocidad promedio, Prandtl y Kolmogorov pensaban que sería más lógico relacionar estas fluctuaciones y el tensor de esfuerzos de Reynolds directamente a propiedades de la turbulencia misma. (Wilkes, 2007)

Tales propiedades son:

1. La *energía cinética turbulenta* por unidad de masa de los componentes de la fluctuación, definida como:

$$k = \frac{u_i' u_i'}{2} \quad [\text{longitud}^2 \text{ tiempo}^{-2}] \quad (2.3.18)$$

En coordenadas cartesianas:

$$k = \frac{u_x'^2 + u_y'^2 + u_z'^2}{2}$$

2. La rapidez de disipación turbulenta (ε) de la energía cinética turbulenta. Definida como:

$$\varepsilon = \nu_t \overline{\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} \quad [\text{longitud}^2 \text{ tiempo}^{-3}] \quad (2.3.19)$$

La producción y destrucción de energía turbulenta cinética siempre están relacionadas íntimamente. La rapidez de disipación turbulenta aumenta con la producción de energía cinética turbulenta.

El modelo k- ε supone que la viscosidad cinemática turbulenta (o de remolino) ν_t en cualquier punto sólo depende de k y ε en cualquier punto. Como las dimensiones de ν_t son $\text{longitud}^2 \text{ tiempo}^{-1}$, se deduce la siguiente relación:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.3.20)$$

Donde C_μ es el primero de 5 parámetros ajustables que más adelante se detallarán.

Ahora se requiere obtener a k y ε en función de la posición y el tiempo. Partiendo de

la RANS (ver sección 2.3.2) y considerando la rapidez de disipación de energía por fuerzas viscosas, se puede llegar a una ecuación de transporte para la energía cinética turbulenta. Aquí sólo se presenta la ecuación resultante, si se desea profundizar en la derivación de esta ecuación se puede consultar, entre otros (Durbin et al, 2001), (Schiestel, 2008).

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \rho \frac{C_\mu k^2}{\sigma_k \varepsilon} \right) \nabla k \right] + \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^t)^2 - \rho \varepsilon \quad (2.3.21)$$

Utilizando un procedimiento similar se obtiene una ecuación para la rapidez de disipación turbulenta.

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla \varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \rho \frac{C_\mu k^2}{\sigma_\varepsilon \varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \rho C_{\varepsilon 1} C_\mu k (\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^t)^2 - \rho C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.3.22)$$

Las ecuaciones contienen 5 parámetros ajustables: C_μ , σ_k , σ_ε , $C_{1\varepsilon}$ y $C_{2\varepsilon}$. El modelo estándar k- ε emplea valores constantes que se ajustaron a datos experimentales para un amplio rango de flujos turbulentos y a continuación se muestran sus valores:

$$C_\mu=0.09 \quad \sigma_k=1.00 \quad \sigma_\varepsilon=1.30 \quad C_{1\varepsilon}=1.44 \quad C_{2\varepsilon}=1.92$$

En ocasiones se utiliza el concepto de intensidad de turbulencia (T_i) como descriptor de las fluctuaciones que sufre el fluido. Está definido como:

$$T_i = \frac{\left(\frac{2}{3} k \right)^{1/2}}{U_{ref}} \quad (2.3.23)$$

Las ecuaciones para k y ε son elípticas debido al término del gradiente de difusividad, por lo que las condiciones frontera que necesita son:

- Entrada: distribuciones de k y ε .
- Salida o plano de simetría: $\partial k / \partial n = 0$ y $\partial \varepsilon / \partial n = 0$.
- Corriente libre: k y ε deben proporcionarse o $\partial k / \partial n = 0$ y $\partial \varepsilon / \partial n = 0$
- Paredes: depende del número de Reynolds

Cuando se simula un flujo industrial comúnmente no se cuenta con mediciones de k y ε por lo que deben usarse valores provenientes de literatura y hacer un análisis de sensibilidad con respecto a sus valores. Si no hay información disponible al respecto, se pueden suponer las distribuciones de k y ε en flujos internos a partir de la intensidad de turbulencia y una longitud característica (por ejemplo, el diámetro hidráulico) con las siguientes aproximaciones:

$$k = \frac{2}{3} (U_{ref} T_i)^2 \quad (2.3.24)$$

$$\varepsilon = C_{\mu}^{3/4} \frac{k^{3/2}}{l} \quad (2.3.25)$$

$$l = 0.07L \quad (2.3.26)$$

Estas aproximaciones están íntimamente relacionadas con la teoría de longitud de mezclado y la distribución universal cerca de una pared sólida.

Ventajas y desventajas del modelo k- ε .

Ventajas

- El modelo de turbulencia más simple para el cual sólo se necesitan los valores iniciales y/o las condiciones de frontera.
- Excelente predicción para la mayoría de los flujos importantes en la industria.
- El modelo de turbulencia más ampliamente validado.

Desventajas

- Mayor necesidad de recursos computacionales que la de longitud de mezclado.
- Pobre rendimiento en flujos en sistemas tales como:
 - a. Algunos flujos no confinados.
 - b. Flujos rotatorios.
 - c. Flujos con anisotropía en los esfuerzos normales de Reynolds (por ejemplo, flujos desarrollados en ductos no circulares).

2.4 Modelación con CFD.

Un programa de CFD (Computational Fluid Dynamics) obtiene la solución numérica de las ecuaciones gobernantes de un fluido en un segmento de espacio y tiempo determinado. Esta solución numérica es calculada a partir de la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes y de las ecuaciones particulares de cada fenómeno estudiado (por ejemplo: transferencia de calor, turbulencia, fluidos multifase, depositación de partículas, etc.)(Wilkes, 2007).

Las ecuaciones diferenciales parciales que definen al sistema en cuestión son convertidas en ecuaciones algebraicas mediante la sustitución de los diferenciales por diferencias finitas en una malla que define la geometría y el dominio de flujo de interés. Las condiciones de frontera (valores en la entrada) apropiadas son aplicadas a la malla y las distribuciones de cantidades tales como velocidad, presión, temperatura y concentración son determinadas iterativamente en cada punto del espacio y del tiempo.

Este tipo de software ha demostrado ser muy útil en la predicción del comportamiento de fluidos para un amplio rango de aplicaciones de ingeniería enfocados en la mejora de equipos o diseño de procesos. Es utilizado en los estudios previos para nuevos diseños, diseño detallado de equipos, escalamiento, etc.

Para resolver las ecuaciones gobernantes, los programas de CFD convierten un sistema continuo dado (con un número infinito de grados de libertad) a un sistema discreto (con un número finito de grados de libertad). Ordinariamente, utilizan dos niveles de discretización o aproximación (Wilkes, 2007):

- Discretización del dominio (o generación de malla). El espacio que comprende el dominio es subdividido en regiones pequeñas, regulares y conectadas, llamadas celdas o elementos (y al conjunto de subregiones y

contornos de subregiones se les llama rejilla o malla). La distribución de la densidad de las celdas es generada de acuerdo a las condiciones físicas del flujo (ver Figura 7). Así, en zonas donde las condiciones del fluido cambian rápidamente (gradientes grandes), la densidad de celdas es mayor (y por lo tanto, las celdas son más pequeñas).

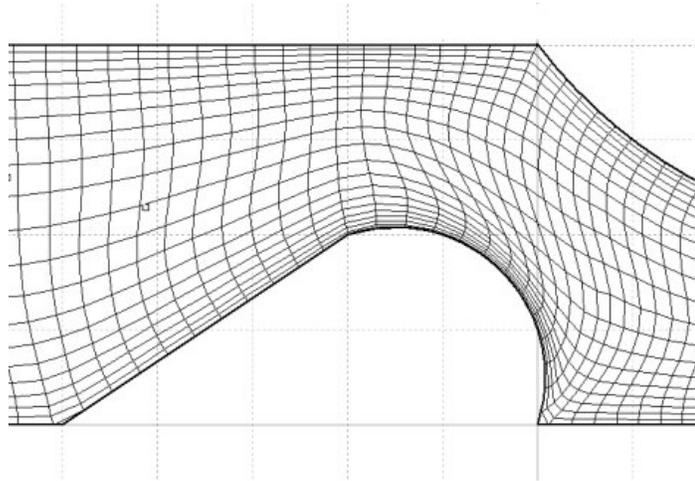


Figura 7. Malla generada por CFD: se observa la distribución de densidad de celdas.

- Discretización de ecuaciones. Las ecuaciones diferenciales parciales gobernantes son convertidas a ecuaciones algebraicas para cada una de las celdas a través de métodos numéricos tales como diferencias finitas, volúmenes finitos, etc.

Una vez que se tiene el sistema de ecuaciones algebraicas, se resuelve numéricamente con las condiciones frontera y datos de entrada adecuados.

Método del elemento finito.

Originalmente, el método del elemento finito fue desarrollado y utilizado esencialmente en la determinación del esfuerzo y desplazamiento de estructuras sólidas. Desde la década de los 80's ha sido refinado y utilizado en problemas de flujo de fluidos y transferencia de calor (Michaelides, 2006).

El método del elemento finito es una generalización de los métodos variacionales (o variacional directo o de Ritz) y de los residuos ponderados (Galerkin, mínimos cuadrados, colocación, subdominio, etc.), los cuales están basados en la suposición de que la solución de una ecuación diferencial puede ser representada como una combinación lineal de parámetros desconocidos y la apropiada selección de funciones en el dominio completo del problema.

La idea básica del método del elemento finito es ver un dominio dado como un ensamblaje de figuras geométricas simples, llamadas elementos finitos, para los cuales es posible generar sistemáticamente las funciones de aproximación necesarias en la solución de ecuaciones diferenciales por cualquiera de los métodos: variacional o de residuos ponderados (Reddy et al, 2001)(Chapra, 2003).

Las funciones de aproximación son usualmente construidas usando ideas de teoría de interpolación, por lo cual son llamadas funciones de interpolación (Reddy et al., 2001).

El método numérico es llamado del “elemento finito” cuando sus elementos están en una (segmentos de línea) o dos (segmentos de área) dimensiones; cuando se trata de un problema en 3 dimensiones (volumen pequeño dentro del dominio tridimensional), al método se le llama de “volúmenes finitos”. Los puntos que definen a los elementos son llamados nodos. Sin importar las dimensiones problema, los elementos pueden traslaparse si esto es conveniente (Michaelides, 2006).

Los pasos principales en el análisis de elemento finito de un problema son los siguientes (Reddy et al., 2001):

1. Discretización del dominio en un conjunto de elementos finitos (mesh generation, “malleo” o “mallado”).

2. Integral ponderada o formulación débil (weak formulation) de las ecuaciones diferenciales analizadas.
3. Desarrollo del modelo del elemento finito del problema usando su integral ponderada (o forma débil).
4. Ensamblaje de los elementos finitos para obtener el sistema global de ecuaciones algebraicas.
5. Asignación de condiciones frontera.
6. Solución de ecuaciones.
7. Proceso posterior de la solución y cantidades de interés.

En este documento sólo se hace una breve reseña del método del elemento finito. Para una introducción más detallada del tema se recomienda ver (Wilkes, 2007)(Reddy et al., 2001)(Michaelides, 2006)(Chapra, 2003) y si se requiere una inspección profunda del tema se recomienda ver (Ern et al., 2004).

3. MODELACIÓN DEL SISTEMA.

3.1 Características del sistema a modelar.

3.1.1 Características físicas.

Cada planta de reducción directa tiene un diseño particular y no hay ni medidas ni geometrías estándar en cuanto al diseño de los plenum. Para este estudio se tomó como diseño base al que se encuentra en una planta típica de reducción directa. Sobre este diseño se realizarán las variaciones en sus parámetros para encontrar áreas de oportunidad en su diseño.

En este diseño base se considera que el transporte del gas proceso (gas reductor) desde el calentador hacia el reactor se realiza a través de una línea de transferencia que tiene perfil circular y diámetro interno de 1.532 m (ver Figura 8).

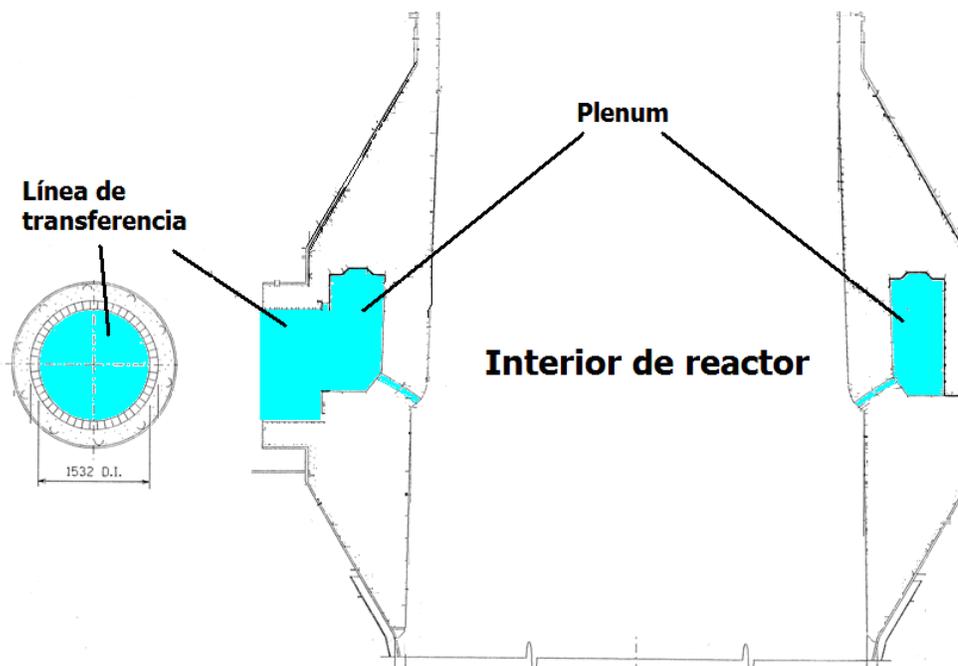


Figura 8. Ubicación de plenum y línea de transferencia.

Esta línea de transferencia es un ducto recubierto en su parte interior con ladrillo refractario debido a las altas temperaturas del gas proceso.

Poco antes de conectarse con el cuerpo del reactor, la línea de transferencia tiene cierta curvatura que le permite contactar al reactor de forma ortogonal. Esta curvatura origina que el flujo de gases tenga una componente diferente a cero en la dirección horizontal perpendicular al flujo.

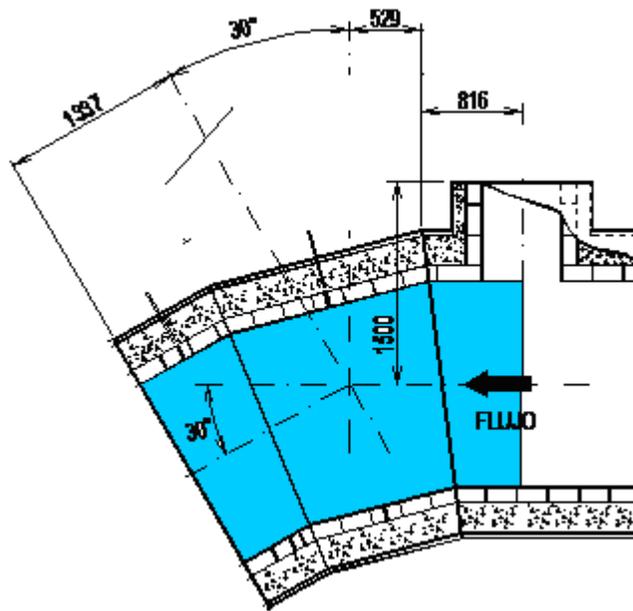


Figura 9. Parte del sistema a modelar (color azul) que pertenece a la línea de transferencia.

En la Figura 9 se muestra la parte del sistema a modelar que forma parte de la línea de transferencia. Se eligió como entrada al sistema el corte transversal que se encuentra en la parte media del ducto que aparece en la figura. Este ducto está cerrado en la operación normal de la planta por lo que se esperaría que no influya su existencia.

La línea de transferencia y el plenum no se encuentran a la misma altura. Ni su límite inferior ni su límite superior coinciden. Esta diferencia de alturas se muestra en la Figura 10.

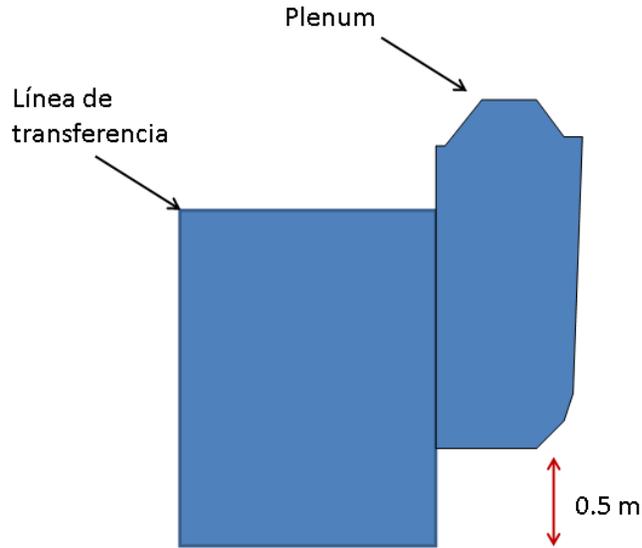


Figura 10. Diferencia de alturas entre plenum y línea de transferencia.

En la entrada del plenum se encuentra un muro de contención de aproximadamente 30 cm de altura. Este muro se coloca para que el gas reductor no impacte de manera directa en las boquillas frontales del plenum, además de proteger a las paredes del plenum de la radiación emitida por la combustión parcial que se lleva a cabo en la línea de transferencia.

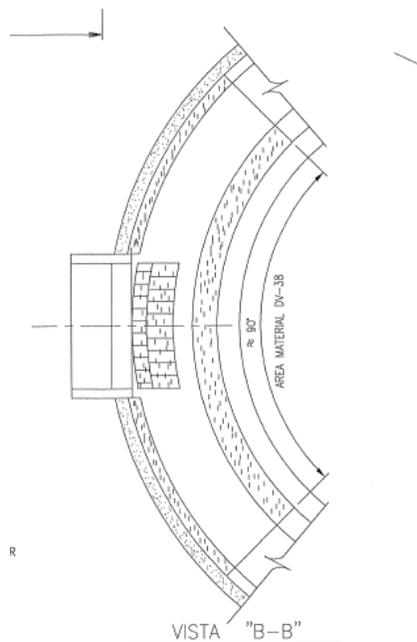


Figura 11. Vista de planta de muro en entrada a plenum.

La extensión de este muro se limita sólo al diámetro de la línea de transferencia y no

está adherido a la pared del plenum, por lo que hay aberturas entre los extremos del muro y las paredes del plenum. Estas aberturas tienen alrededor de 10 cm de ancho.

Una vez que el gas ya está dentro del plenum, se traslada a lo largo de la circunferencia del plenum y se introduce al reactor por medio de boquillas cuyo perfil es rectangular. Estas boquillas se encuentran ubicadas en la parte inferior del plenum. En la Figura 12 se muestra un corte por la mitad del plenum en el que se ilustra esta trayectoria.

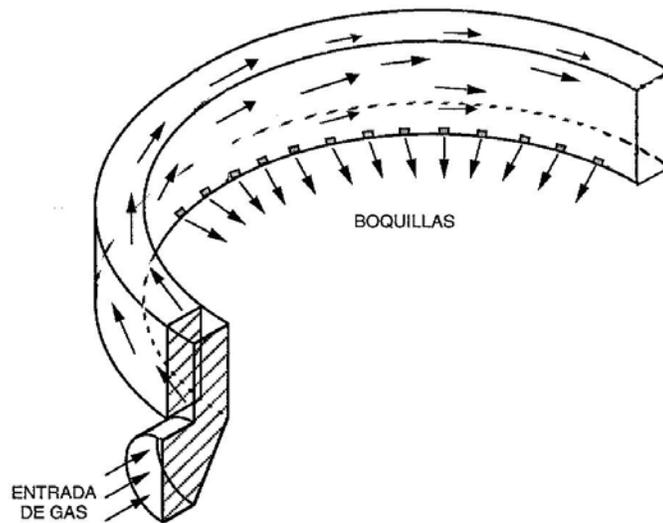


Figura 12. Trayectoria del gas proceso dentro del plenum.

El cuerpo del plenum es un toroide. Es decir, es la figura geométrica que se obtiene como resultado de revolucionar una figura geométrica en dos dimensiones sobre un eje de revolución. En este caso, la parte del plenum que se encuentra más alejada de este eje se encuentra a 4.131 m de distancia del mismo, y por lo tanto el diámetro externo del toroide es 8.262 m.

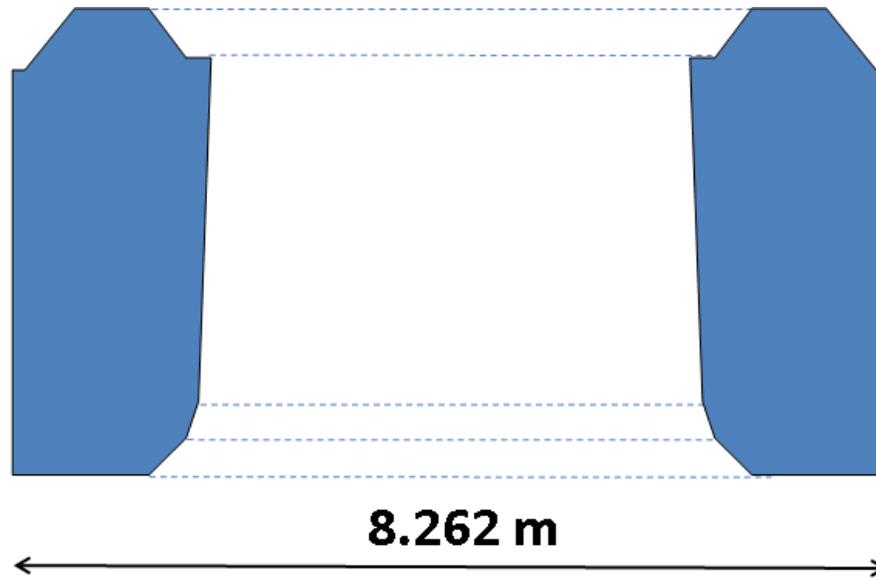


Figura 13. Diámetro externo del plenum.

La sección transversal del plenum tiene un perfil tal como se muestra en la Figura 14 y su área es 0.963 m^2 . Cuenta con 95 boquillas distribuidas uniformemente a lo largo de la circunferencia del plenum.

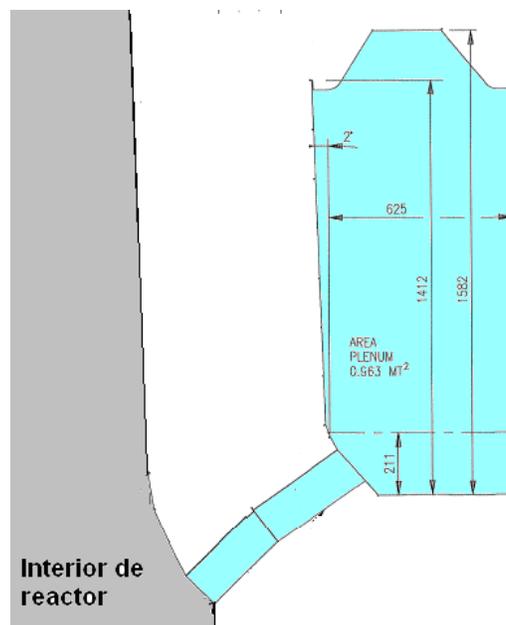


Figura 14. Perfil de plenum y boquillas.

Las boquillas son ductos de perfil rectangular cuyas medidas en la parte final del sistema son $64 \times 136 \text{ mm}$ para dar un área total de boquillas de 0.83 m^2 . Cabe

destacar que el área transversal de las boquillas no es constante y en la parte inicial de las mismas se tiene un área aproximadamente 16% mayor que al final de las mismas. Además, la trayectoria que marcan las boquillas no es una línea recta, ya que se tiene un ligero cambio de dirección en la parte media de las mismas.

Las boquillas desembocan en el interior del reactor, donde se llevan a cabo las reacciones de reducción directa. En este análisis se toma como frontera del sistema a la parte final de las boquillas.

A manera de resumen se presenta la Tabla 3 en las que se exponen los parámetros que corresponden al diseño base y que en la sección 5.2 se modificarán para realizar el análisis de sensibilidad.

Tabla 3. Parámetros del diseño base.

Parámetro	Cantidad
Número de boquillas	95
Ancho boquilla(m)	0.064
Altura boquilla(m)	0.136
Área boquilla(m ²)	8.704 x 10 ⁻³
Área total boquillas(m ²)	0.827
Área transversal plenum (m ²)	0.963

3.1.2 Propiedades del gas proceso.

Las características del gas proceso que se toman en cuenta en este análisis se basan en el flujo y presión de diseño y en la composición de gases que se tienen típicamente en una planta de este tipo. A continuación se muestra un resumen de estas características (*):

- Flujo de entrada: 174000 MCNH
- Presión constante al final de boquillas: 519752Pa (5.3kg_f/cm²)
- Temperatura utilizada en el cálculo

de propiedades:

1100 °C

(*) Estas condiciones pueden variar de acuerdo a los requerimientos del proceso.

Propiedades calculadas a partir de la temperatura, presión y composición de la mezcla de gases:

-Densidad:	0.494 kg/m ³
-Viscosidad:	4.089 x 10 ⁻⁵ Pa.s
-Conductividad térmica:	0.326 W/m.K
-Peso molecular:	10.7 g/mol

Tomando en cuenta las anteriores propiedades del gas y que el área transversal al flujo en la frontera de entrada es el área del círculo con diámetro igual a 1.532 m se pueden calcular las siguientes características del flujo:

- Flujo molar:	7764 kmol/h
- Flujo másico:	82734 kg/h
- Área transversal al flujo:	1.8433 m ²
- Gasto másico:	44882 kg/n.m ²
- Velocidad de flujo:	25 m/s
- Número de Reynolds:	467147

3.2 Suposiciones y simplificaciones.

3.2.1 En las características físicas.

1. Se modificó ligeramente el perfil transversal original (se eliminó el lado más pequeño del perfil, ver Figura 13) para disminuir el número de aristas y de superficies muy pequeñas, lo cual significa un ahorro en memoria

computacional. Se vigiló que el área en ambos diseños fuera similar al perfil original.

2. Las boquillas se dibujaron con área transversal constante en toda su longitud, despreciando el efecto de la disminución de área.
3. La curvatura de la línea de transferencia es del tipo mitrada, es decir, está formada por 3 secciones cilíndricas adyacentes (ver Figura 9) que al unirse desvían la dirección del flujo en 30° . Se simplificó esta geometría a un codo de curvatura uniforme de 30° con radio de 4.99 m más una sección lineal de 0.2 m.
4. Se dibujó la línea de transferencia de tal forma que se introduce 0.085m dentro del plenum.
5. La rugosidad de las paredes no se consideró en este análisis.

3.2.2 En las propiedades del gas proceso.

1. Mezcla isotérmica. En la realidad existe un gradiente de temperatura debido a que cerca del sistema, corriente arriba, se lleva a cabo la combustión parcial de los gases con O_2 . Además, en la mezcla de gases aún se llevan a cabo reacciones químicas. Sin embargo, se espera que aun sea una buena aproximación para el caso de transporte de cantidad de movimiento, donde la temperatura básicamente impacta en la densidad y viscosidad del gas proceso.
2. Flujo turbulento, newtoniano e incompresible.
3. Para asignar un valor a la longitud de escala turbulenta (parámetro de entrada en el modelo $k-\epsilon$) se utilizó la ecuación 2.3.26, donde L se tomó como el

diámetro de la línea de transferencia (1.532m). Por lo tanto,
 $l = 0.07(1.532) \approx 0.1m$.

4. El valor de la escala de turbulencia se estableció en 10%. Durante las corridas de prueba se verificó que el efecto de este parámetro no afectaba la distribución de gases en las boquillas.
5. Presión constante a la salida de boquillas igual a 519752Pa. De acuerdo a las consideraciones que se tienen en planta, esta suposición es aceptable.
6. Perfil de velocidad igual a una constante (25 m/s) en la entrada al sistema. No se tienen las condiciones para suponer algún perfil de velocidad debido a que corriente arriba del sistema se tiene la combustión parcial, que modifica algún posible perfil que se hubiera desarrollado con anterioridad en la línea de transferencia.
7. La acción de la fuerza gravitacional es despreciable ya que es un gas muy ligero.

3.3 Ecuaciones gobernantes.

Como quedó establecido en la sección 2.3, las ecuaciones para flujo turbulento de forma general siguen las ecuaciones de continuidad y de balance de momentum resultantes de la descomposición de Reynolds:

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3.7)$$

RANS (Reynolds Averaged Navier_Stokes):

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u_i' u_j'} \right] + \rho g_i \quad (2.3.8)$$

Y se utilizan las ecuaciones del modelo k-ε.

Para la energía cinética turbulenta:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \bar{v} \cdot \nabla k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \rho \frac{C_\mu k^2}{\sigma_k \varepsilon} \right) \nabla k \right] + \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} (\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^t)^2 - \rho \varepsilon \quad (2.3.21)$$

Para la rapidez de disipación turbulenta:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \bar{v} \cdot \nabla \varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \rho \frac{C_\mu k^2}{\sigma_\varepsilon \varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \rho C_{\varepsilon 1} C_\mu k (\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^t)^2 - \rho C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.3.22)$$

4. IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO EN CFD

4.1 *Aproximación inicial.*

Se eligió en un principio a COMSOL© Multiphysics (de aquí en adelante se le mencionará solamente como “Comsol”) versión 3.5a como el software de CFD a utilizar en este análisis debido a que cuenta con ecuaciones de turbulencia ya integradas, lo cual, aunado a su interfaz amigable facilita la implementación del modelo.

Aunque Comsol tiene herramientas de dibujo integradas, tiene algunas limitaciones en cuanto al alcance de las mismas. Por ejemplo: no se cuenta con una herramienta para realizar una matriz circular de objetos (como es el caso de las boquillas del plenum), por lo que la matriz circular debe realizarse manualmente boquilla por boquilla con herramientas más simples tales como copiar, pegar y rotar. Además, no se puede extruir un perfil bidimensional a lo largo de una trayectoria establecida, lo cual podría ser muy útil para dibujar la curva mitrada de la línea de transferencia.

Debido a que la geometría del sistema tiene cierto grado de dificultad para dibujarse en tres dimensiones (máxime si se desean realizar modificaciones en la parte de análisis de sensibilidad), como primera opción se contempló realizar el dibujo en un software especializado en el dibujo en 3D y posteriormente importarlo desde el CFD con el formato conveniente.

Se utilizó el software SolidWorks© 2008 (de aquí en adelante se le mencionará solamente como Solidworks) para el dibujo de la geometría del sistema y se observaron las ventajas para realizar modificaciones al dibujo, tales como:

- Posibilidad de modificar el número de boquillas simplemente cambiando el valor de un parámetro.

- Posibilidad de modificar el perfil transversal del plenum sin necesidad de rehacer el modelo.
- Al realizar modificaciones en las dimensiones de las boquillas, basta con modificar una de ellas (la boquilla base) y automáticamente las demás se modifican.
- Posibilidad de hacer la línea de transferencia con una curvatura mitrada.
- Conexión exacta entre la línea de transferencia y el cuerpo del plenum sin necesidad de que se traslapen.

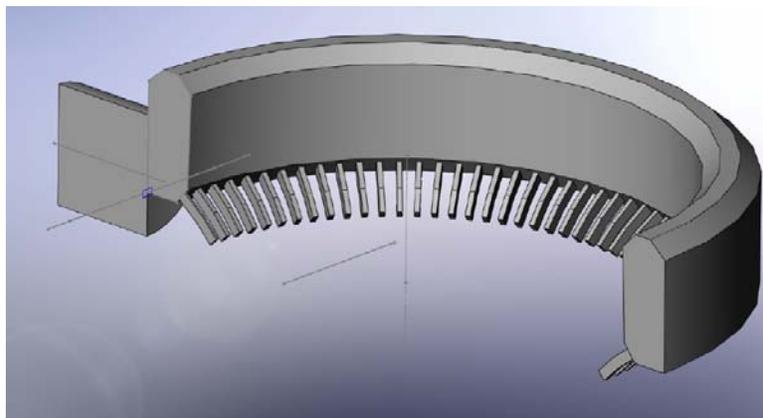


Figura 15. Ejemplo de dibujo generado en Solidworks para exportar a Comsol.

A continuación se exportaron las geometrías hechas en Solidworks a Comsol con los dos tipos de formato que acepta este último en su versión básica para figuras tridimensionales: .STL y .VRML. Comsol comercializa por separado un módulo de importación de geometrías que acepta una amplia gama de formatos, pero para nuestro estudio sólo se contó con la versión básica.

Se encontró que la importación en Comsol sólo se lograba con los archivos de extensión .STL, mientras que con los archivos de formato .VRML, Comsol reportaba errores en el proceso de importación.

Aunque se logró importar las geometrías con formato .STL, no resultaron adecuadas para llevar a cabo nuestro análisis, pues cuando se intentó realizar las simulaciones, el programa generaba reportes de error durante el mallado de la geometría. Incluso con geometrías muy simplificadas, Comsol mostraba tener dificultad en la visualización de los dibujos, aun cuando no reportara errores durante el proceso de importación. Un ejemplo de este problema se muestra en la Figura 16, donde al fondo de la imagen se observa la imagen que mostraba Comsol del dibujo importado con extensión .STL.

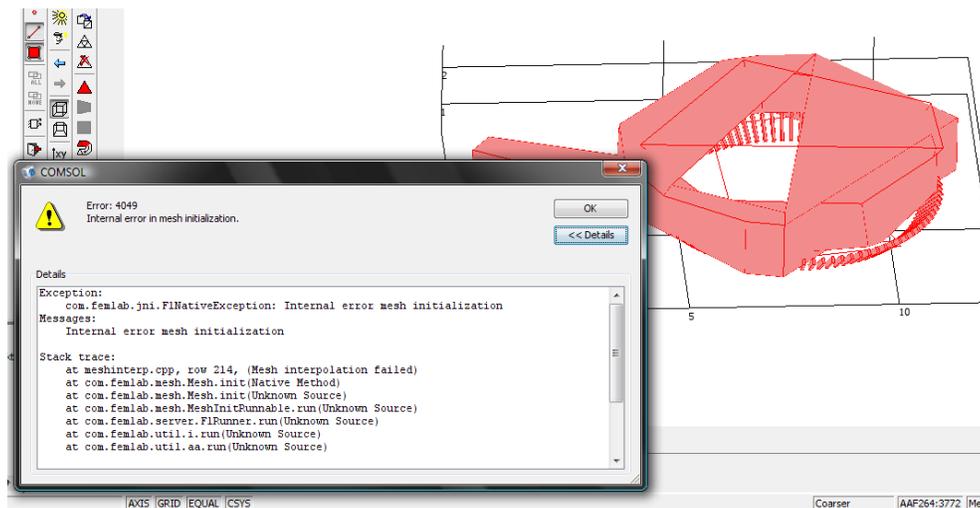


Figura 16. Mensaje de error en Comsol con geometría .STL importada.

También se intentó correr simulaciones con geometrías de la mitad del plenum, para disminuir el número de grados de libertad a resolver, pero los resultados fueron similares.

Por lo anterior se optó por realizar todo el proceso de modelación, incluido el dibujo de las geometrías, en Comsol. Debido a las limitaciones de dibujo de este software, se hicieron algunas simplificaciones a la geometría. Estas simplificaciones se enlistan en la sección 3.2.1.

4.2 Implementación en COMSOL Multiphysics 3.5a.

4.2.1 Acciones preliminares.

La modelación en Comsol comienza con la elección del modelo físico y el tipo de análisis que se desea realizar. Luego se define la geometría sobre la que se llevará a cabo el análisis (puede ser importada o dibujada en Comsol). Enseguida se deben definir los valores de los parámetros de entrada del modelo físico. Por último se establecen los parámetros de mallado y solución del problema.

Dentro del programa se encuentran cargados una gran cantidad de modelos enlistados en categorías de acuerdo a la rama de la física que resuelven. Dependiendo de lo establecido en la licencia de uso se tiene acceso a diferentes módulos de trabajo, dentro de los cuales existen diferentes modelos físicos. Estos modelos pueden acoplarse y resolverse simultáneamente, de allí el nombre de Multiphysics.

En nuestro análisis se eligió un modelo de flujo turbulento en estado estacionario en un espacio de trabajo tridimensional. Este modelo físico se encuentra dentro de la carpeta Fluid Dynamics del módulo Chemical Engineering de Comsol.

Todas las corridas de simulación se llevaron a cabo en una computadora con procesador Intel(R) Core(TM)2 Duo con 2038 MB de memoria RAM, 2.00 GHz, en sistema operativo de 32 bits con Windows Vista Home Premium.

4.2.2 Dibujo de la geometría del sistema.

A continuación se realiza una descripción del proceso para la elaboración de uno de los diseños. Cabe mencionar que para casi todos los diseños que se realizaron, se debió realizar todo el procedimiento descrito a continuación.

El proceso de dibujo tridimensional en Comsol se basa en la superposición de figuras simples tridimensionales (ver Figura 17) y cuerpos contruidos a partir de dibujos bidimensionales.

Para dibujar los cuerpos simples basta con establecer las medidas y coordenadas de posición de las figuras, mientras que para las demás figuras se debe crear una nueva hoja de trabajo ("Geometry") bidimensional. Esta hoja de trabajo se crea en la opción "Work-Plane Settings" del menú "Draw". Es en esta nueva hoja de trabajo que se dibuja el perfil que se desea extruir, revolucionar o embeber.

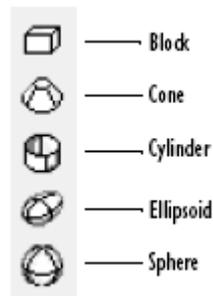


Figura 17. Cuerpos simples 3D de Comsol.

Debido a la naturaleza de la geometría del sistema a modelar en este análisis, sólo se utilizaron figura hechas a partir de dibujos bidimensionales, por lo que se crearon varias hojas de trabajo.

En estas hojas de trabajo se dibujó: el perfil transversal de la línea de transferencia, que es simplemente un círculo de diámetro 1.532 m; el perfil transversal del plenum; el perfil lateral de una de las boquillas y; la base del muro de contención a la entrada del plenum.

A partir del perfil transversal de la línea de transferencia (un círculo) se originaron tres figuras. Primero, se creó un cilindro de 0.285 m que se traslapa 0.085 m con el plenum. Luego se revolucionó el círculo en 360° y en 330° con un radio de curvatura de 4.99 m para crear las figuras de las que se obtuvo el codo de 30° (ver sección

3.2.1) de la línea de transferencia. Para lograr esto se utilizó la operación “Difference”.

Utilizando el perfil transversal del plenum se obtuvo el cuerpo del plenum simplemente revolucionando el perfil en 360° sobre un eje de simetría a 4.131 m de distancia de la pared externa del plenum.

A partir del perfil lateral de una boquilla se obtuvo el cuerpo tridimensional de la boquilla base con la operación “Extrusion”. Luego, se creó una copia de esta boquilla que se pegó en el mismo lugar donde se encontraba la boquilla base. Entonces se utilizó la herramienta “Rotate” para rotar esta copia en un ángulo dado como $360^\circ/125=2.88^\circ$. Luego estas dos boquillas se copiaron y las copias resultantes se colocaron en la misma posición que las originales y se siguió un procedimiento similar pero ahora con un ángulo de rotación $2 \times 360^\circ/125=5.76$, y así sucesivamente hasta que se completó la circunferencia.

El muro de contención a la entrada del plenum se creó simplemente extruyendo el perfil de su base 35 cm.

Una vez que se tienen las figuras construidas y colocadas en la posición correcta, se procede a unir las con la herramienta “Union”. Al final de esta unión se eliminaron las fronteras interiores creadas por la superposición de los objetos. Esto se llevó a cabo con la herramienta “Delete Interior Boundaries”.

La parte del proceso de dibujo que demanda mayor cantidad de tiempo es la elaboración de las boquillas, debido a su elevado número y a la falta de una herramienta de matriz circular que permita rotar una figura tridimensional a lo largo de una circunferencia.

4.2.3 Asignación de valores a parámetros del modelo.

Una vez que se tiene la geometría dibujada se procede a asignar las propiedades del fluido y los valores de frontera del problema.

Las propiedades del fluido que Comsol toma como parámetros de entrada en el modelo k-ε son la densidad y la viscosidad del fluido, además de las fuerzas que actúan sobre todo el sistema.

Los valores de densidad y viscosidad se enlistan en la sección 3.1.2 y la única fuerza que aplica es la fuerza gravitacional, pero como se estableció en la sección 3.2.2, se despreciará en este análisis.

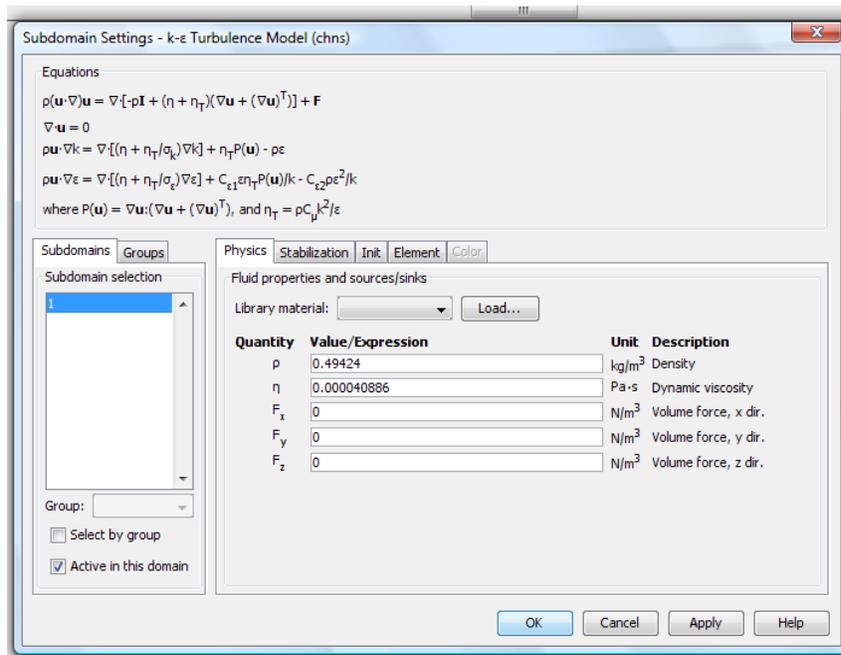


Figura 18. Ventana de configuración del dominio.

En la Figura 18 se muestra la interfaz gráfica de Comsol donde se introducen los datos anteriormente mencionados. También se puede observar las ecuaciones gobernantes del dominio del problema y otras tres pestañas adyacentes a "Physics" en las que se introducen parámetros relativos a la solución numérica del sistema. En las secciones 4.3 y 4.5 se profundizará al respecto.

Los restantes parámetros que se requieren son las condiciones de frontera en la entrada, salida y en las paredes.

En la entrada se introduce una velocidad constante de 25 m/s y los parámetros de turbulencia iguales a 0.1 m y 0.1 (ver Figura 19), tal como se explica en la sección 3.2.2.

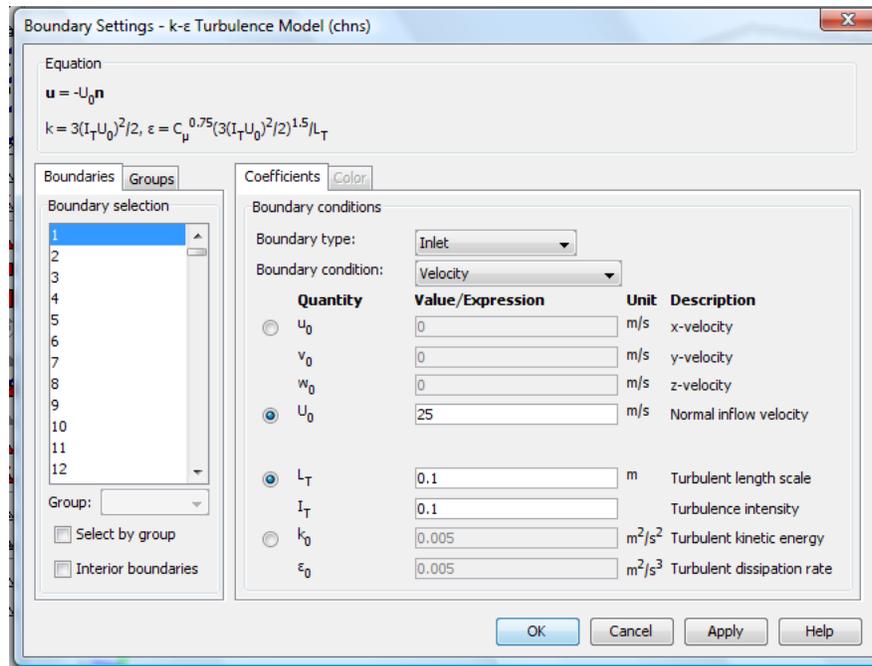


Figura 19. Ventana de condiciones de frontera en entrada.

En las fronteras de salida se coloca una condición de presión constante (sin esfuerzos cortantes viscosos) igual a 0. La fase de asignación de valores a las fronteras de salida es una de las que demandan mayor cantidad de tiempo porque debe seleccionarse una por una todas las boquillas para cada geometría diferente. (Ver Figura 20)

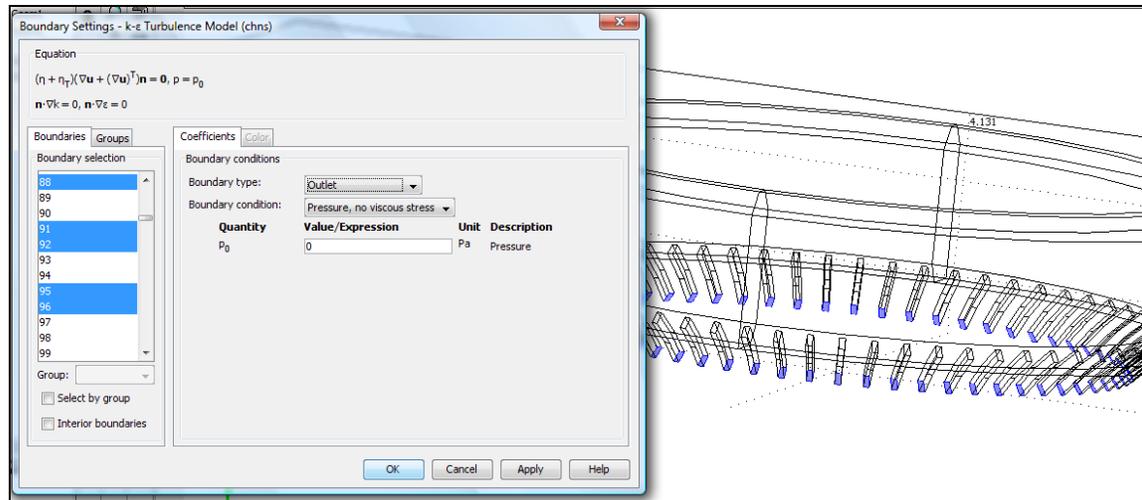


Figura 20. Ventana de condiciones de frontera en salida.

Por último, en las paredes se utiliza la opción predefinida en Comsol de una ecuación logarítmica de la pared con longitud característica igual a la mitad de la distancia mínima de un elemento finito.

4.3 Influencia del tipo de elementos finitos.

Como se mencionó en la sección 2.4, se utilizan funciones de aproximación para resolver las ecuaciones gobernantes en los elementos finitos y en Comsol se tiene la opción de elegir el orden de estas funciones. El valor predefinido que se tiene para el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ es de funciones cuadráticas para los componentes de la velocidad y funciones lineales para la presión. En la nomenclatura de Comsol, este tipo de funciones de aproximación reciben el nombre de P2P1.

Sin embargo, para la geometría del plenum y los recursos computacionales con que se contaron para este estudio se utilizaron funciones de aproximación lineales para todos los parámetros (ver Figura 21). Se tomó esta decisión en base a los resultados de corridas de pruebas preliminares realizadas con una geometría que representa la mitad del sistema.

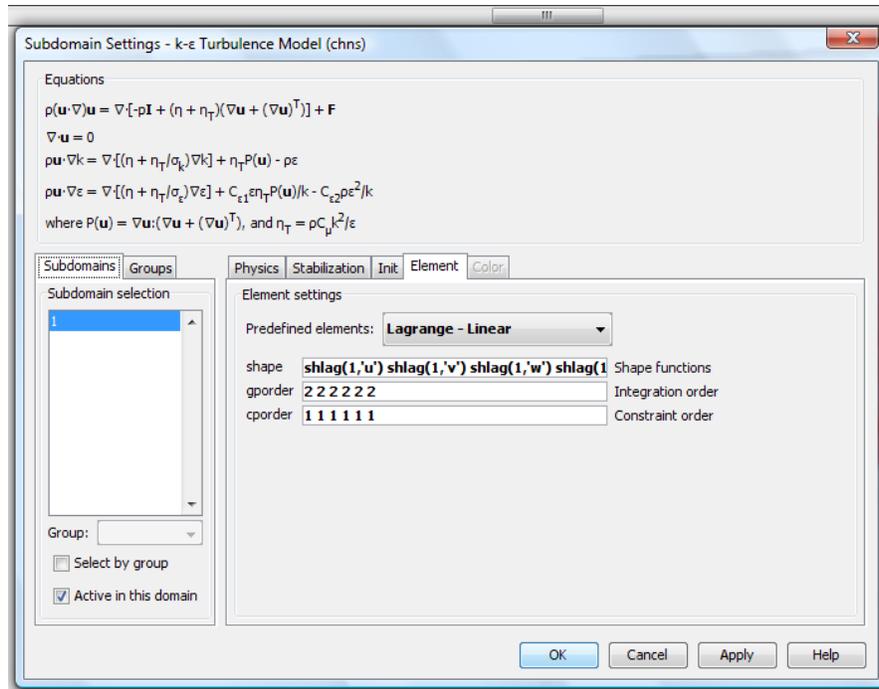


Figura 21. Ventana de configuración de elementos finitos.

En la Tabla 4 se comparan los grados de libertad que requiere una simulación con elementos P2P1 (Prueba 1) contra los que requiere una simulación lineal (Prueba 2) para el mismo número de elementos finitos. El número de grados de libertad con P2P1 se quintuplica y la simulación no converge.

Tabla 4. Comparación de funciones de aproximación.

Prueba	Tipo	Mallado	Elementos	G. Libertad	Converge	Tiempo(seg)
1	P2P1	Fine	23497	217693	No	-
2	Lineal	Fine	23497	41148	Sí	241
3	P2P1	Normal	15029	142245	Sí	1213

Con elementos P2P1 se logra la convergencia al disminuir el número de elementos finitos utilizando el siguiente nivel de mallado predefinido (“Normal”). Sin embargo, el número de grados de libertad sigue siendo mayor (3.4 veces mayor) con los elementos P2P1 y el tiempo de solución es 5 veces mayor.

Los resultados mostrados en la Tabla 4 muestran que no es viable realizar las simulaciones con elementos del tipo P2P1 debido a que aumentan desmedidamente el número de grados de libertad a resolver. Además, los resultados mostrados son para la mitad del sistema real, por lo que aplicarlo al sistema completo no es posible con los recursos computacionales con los cuales se contó para este estudio.

4.4 Influencia del mallado.

Normalmente es aceptado que entre más fino sea el mallado, mayor exactitud tendrá el modelo simulado, por lo que se realizaron pruebas para determinar el nivel de mallado óptimo en este sistema.

El mallado de mejor calidad que se logró implementar en este sistema fue el nivel marcado como "Fine" en Comsol. En algunos diseños se alcanzó la convergencia con el siguiente nivel de mallado "Finer" pero debido a que estos resultados no fueron generalizados, se optó por realizar las comparaciones de diseños en base a mallados semejantes.

Comparando este mallado "Fine" con otros de elementos con mayor tamaño se observaron diferencias en la desviación estándar del flujo por boquilla, es decir, se observó una diferencia en la distribución del flujo. Esto se puede observar en la Tabla 5.

Tabla 5. Comparación de mallados.

Mallado	Elementos	Flujo vol. entrada (m³/s)	Flujo vol. salida (m³/s)	Diferencia flujos (%)	Desv. std. salida (m³/s)
Extremely coarse	33948	41.48834	30.639655	-26	0.020567
Normal	53646	44.00203	39.379693	-11	0.031675
Fine	81498	43.50415	42.200859	-3	0.035985

Otro aspecto que se puede observar en la tabla anterior es que entre menor es la calidad del mallado, mayor es la diferencia entre los flujos de salida y entrada, lo cual puedes como indicador de la validez del mallado, puesto que según la ecuación de continuidad y que la densidad es constante, ambos flujos debieran ser iguales, lo cual justifica el utilizar el mallado más fino posible.

Una vez que se definió el tipo de mallado a utilizar, se ajustó un parámetro más en vías de mejorar la exactitud del modelo. Este parámetro es el llamado “Resolution of narrow regions” que básicamente es un factor que regula el tamaño de los elementos en regiones muy pequeñas.

Debido a que en la modelación del plenum también se toman en cuenta los volúmenes de las boquillas y sí se tienen regiones pequeñas, se varió este parámetro cuyo valor predefinido para el mallado “Fine” es 0.8.

El tamaño de los elementos en las regiones pequeñas es proporcional al de este parámetro, por lo cual, al disminuir su valor debe aumentar la exactitud en la predicción de estas zonas. La disminución se realizó progresivamente hasta que ya no se convergió con un valor de 0.5, por lo cual se quedó establecido como 0.6 el valor de este parámetro.

Un indicador del resultado de esta modificación se muestra en la Figura 22 y se puede observar que en la frontera final de la boquilla se aumentó el número de elementos terminales de 8 a 14. También se observa un aumento en el número de elementos en la sección longitudinal de la boquilla.

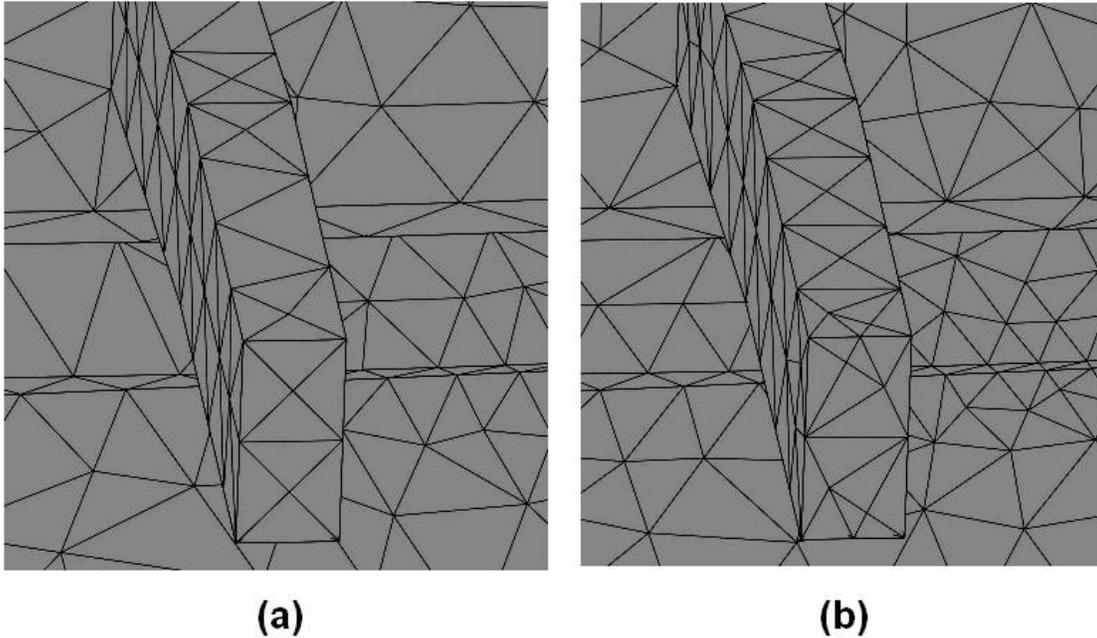


Figura 22. Efecto del parámetro “Resolution of narrow regions” para un mallado “Fine”: (a) con el valor predefinido de 0.8; (b) con valor de 0.6.

Esta modificación es importante en la descripción del perfil de flujo dentro de la boquilla puesto que se espera que existan gradientes mayores que en el plenum debido a que en esta zona se tienen altas velocidades (en algunas zonas de ciertos diseños por encima de 60 m/s).

4.5 Influencia de los parámetros de estabilización.

Comsol incluye en su interfaz gráfica un apartado para la estabilización de las ecuaciones de balance de cantidad de movimiento en flujo turbulento.

Es importante recalcar que aun cuando se tenga cargado el modelo de flujo turbulento, los valores predeterminados de Comsol para la estabilización por difusión artificial no son los de flujo turbulento, sino los de las ecuaciones de Navier-Stokes, por lo que deben ser modificados manualmente (ver Figura 23), de otra forma no se logra que converja la solución.

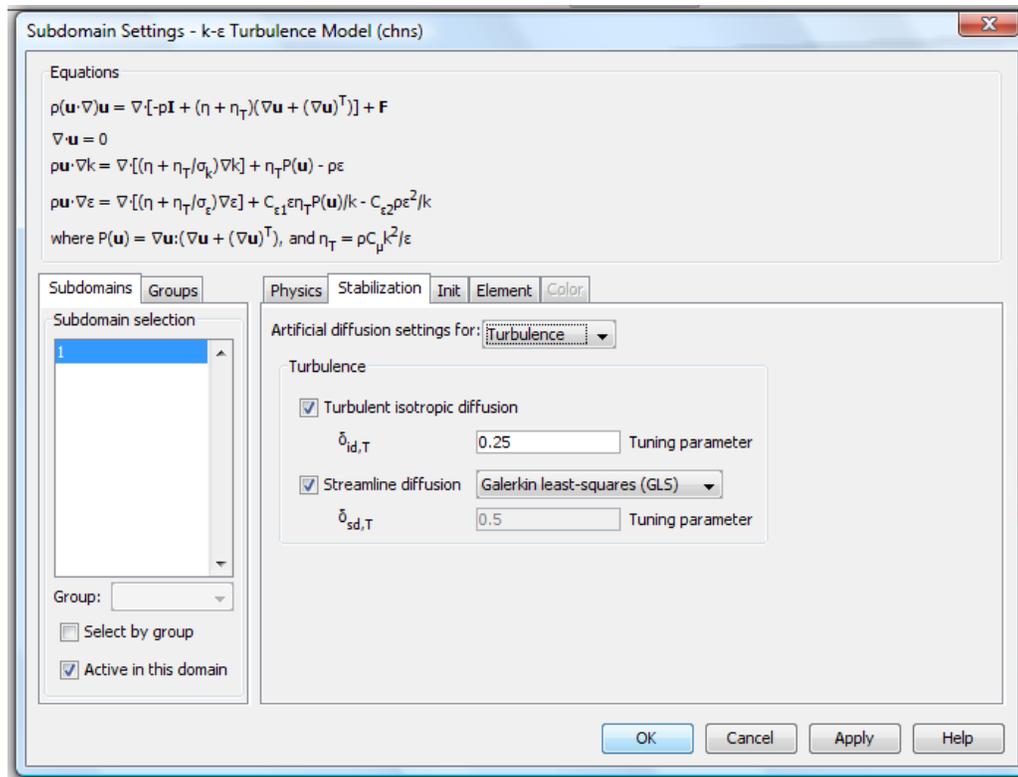


Figura 23. Ventana de estabilización de flujo turbulento.

Una vez que se escogió la difusión artificial para flujo turbulento, se activaron los dos métodos que aparecen y se preservaron los valores que aparecen como predeterminados. En Anexo 2 de este documento se realiza una breve descripción de ambos métodos.

En la solución del sistema fue de vital importancia este parámetro de estabilización, pues de otra forma no se alcanzó la convergencia en los diseños de plenum bajo ninguna circunstancia.

4.6 Generación y análisis de resultados.

Los resultados que arroja Comsol inmediatamente después de resolver el sistema son imágenes de superficie de la velocidad del fluido. Por supuesto, se tiene completa libertad de elección en cuanto a las variables a graficar y demás parámetros de visualización y en la sección de resultados. Sin embargo, aun

después de resolver el sistema Comsol tiene herramientas de posproceso que para cuestiones de nuestro análisis resultaron muy útiles, más allá de sólo obtener los perfiles de las variables.

En nuestro análisis se incluyen diferentes imágenes que reflejan el comportamiento del flujo dentro del plenum y su distribución en las boquillas y después se cuantifica la distribución y la caída de presión procesando datos utilizando las herramientas de posproceso de Comsol.

La herramienta que se utilizó para obtener la distribución de flujo y la caída de presión del sistema es “Boundary Integration”, la cual integra el valor de una variable de interés en toda la extensión de la frontera seleccionada, por lo cual el resultado que arroja es una cantidad escalar con unidades $\text{variable_de_interés} \cdot \text{área}$.

Esta herramienta se utilizó en las fronteras de entrada y salida para la variable velocidad para obtener (en unidades de flujo volumétrico): la distribución de flujo en las boquillas y la diferencia entre el flujo de entrada y salida (para validar el mallado, ver Tabla 5). También se obtuvo la integral de la presión en la entrada (en unidades de fuerza) para calcular la caída de presión (dividiendo la fuerza calculada por Comsol entre el área transversal de la entrada) en el sistema.

Los datos de flujo volumétrico se normalizaron a porcentaje de flujo total y se colocaron en dos tipos de gráficas: de dispersión lineal y de dispersión en coordenadas polares.

En las gráficas de dispersión en coordenadas polares (realizadas en Excel©) que se utilizaron se representa al flujo que sale por cada boquilla en función de la localización de la boquilla en la circunferencia del plenum. La numeración sigue el sentido de las manecillas del reloj en una vista de planta (viendo al plenum desde arriba) y la boquilla marcada como 1 es la que se encuentra justo en medio de la

conexión con la línea de transferencia. En la Figura 24 se explica este tipo de gráfica.

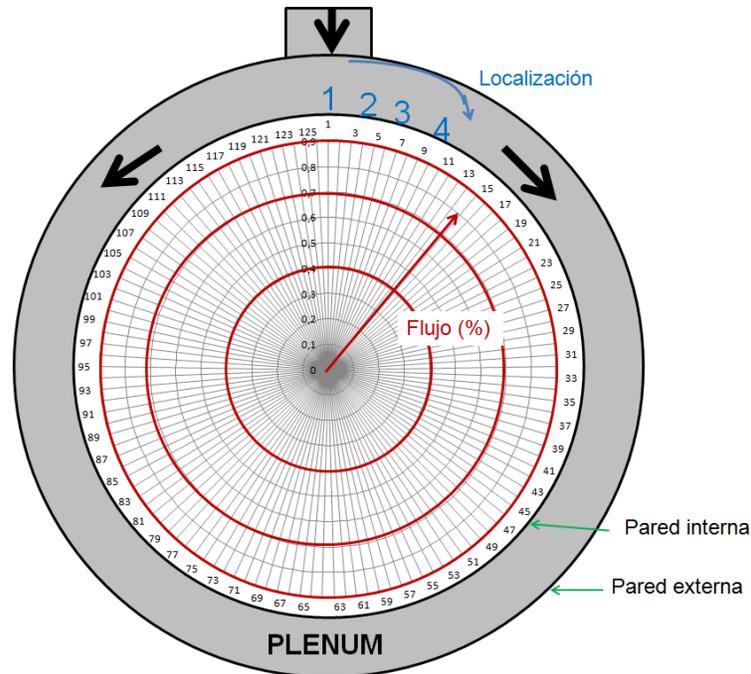


Figura 24. Gráfica del flujo en coordenadas polares.

4.7 Recomendaciones para futuras simulaciones.

- Si no se cuenta con el módulo de importación de geometrías, es preferible llevar a cabo el dibujo de los modelos en el mismo Comsol, con la mayor simplificación geométrica posible para disminuir el tiempo de solución.
- Se recomienda evitar la introducción de paredes con aristas demasiado cortas, ya que en estas zonas el mallado tenderá a hacerse tan denso que probablemente no se llegue a la convergencia.
- En problemas donde al menos una de las condiciones frontera es la presión, debe fijarse la presión igual a 0 en una de estas fronteras. Es decir, se recomienda evitar las presiones absolutas y utilizar presiones manométricas.

- Se observó que el software tiene problemas de convergencia cuando dentro del dominio se encuentra un ángulo mayor a 180° .
- Es recomendable evitar al máximo las aristas innecesarias. Una opción alternativa es utilizar codos en lugar de tuberías con aristas.
- Verificar que se cumpla la conservación de materia entre la entrada y la salida es recomendable aun cuando en el modelo matemático esté expresada en la forma de ecuación de continuidad.
- Cuando se requiera analizar dibujar y/o analizar geometrías un tanto complejas en Comsol, es recomendable asignarle una considerable cantidad de tiempo a familiarizarse con los comandos de edición del software antes de realizar el diseño. Por ejemplo, para hacer selecciones múltiples de objetos primero seleccione uno de ellos con click izquierdo (objeto se vuelve rosa), enseguida utilice click izquierdo + Ctrl (objeto se vuelve morado) y pase al siguiente objeto a seleccionar. Esto es muy útil para darle el mismo valor de frontera a diferentes superficies. Si desea deseleccionar uno de los objetos sin deseleccionar los demás proceda igual que anteriormente: click izquierdo (objeto se vuelve verde) y enseguida click izquierdo + Ctrl (objeto ya no está seleccionado).
- Si la cantidad de recursos computacionales es limitada, pueden analizarse las siguientes posibilidades: utilizar funciones de aproximación de menor orden, utilizar mallado más grueso pero al mismo tiempo aprovechar las diferentes opciones adicionales de mallado, aprovechar la simetría de la figura y simular sólo la mitad o con una dimensión menor.

- Utilizar la herramienta “Generate report” es una buena opción para almacenar los datos más importantes de un diseño rápidamente y en un formato de uso común (.html).

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.

5.1 *Dinámica de fluidos en el diseño base.*

En la Figura 25 se puede observar que la velocidad de flujo a lo largo del plenum decae desde arriba de 20 m/s en la zona inicial hasta menos de 10 m/s en la parte posterior, lo cual es muy razonable porque el flujo de gases es menor. Además se observa que inclusive en la parte inicial del plenum hay una zona de muy baja velocidad en la parte superior, ya que el flujo principal se divide en dos ramales. Éstos chocan con la pared interna del plenum y se desplazan lateralmente.

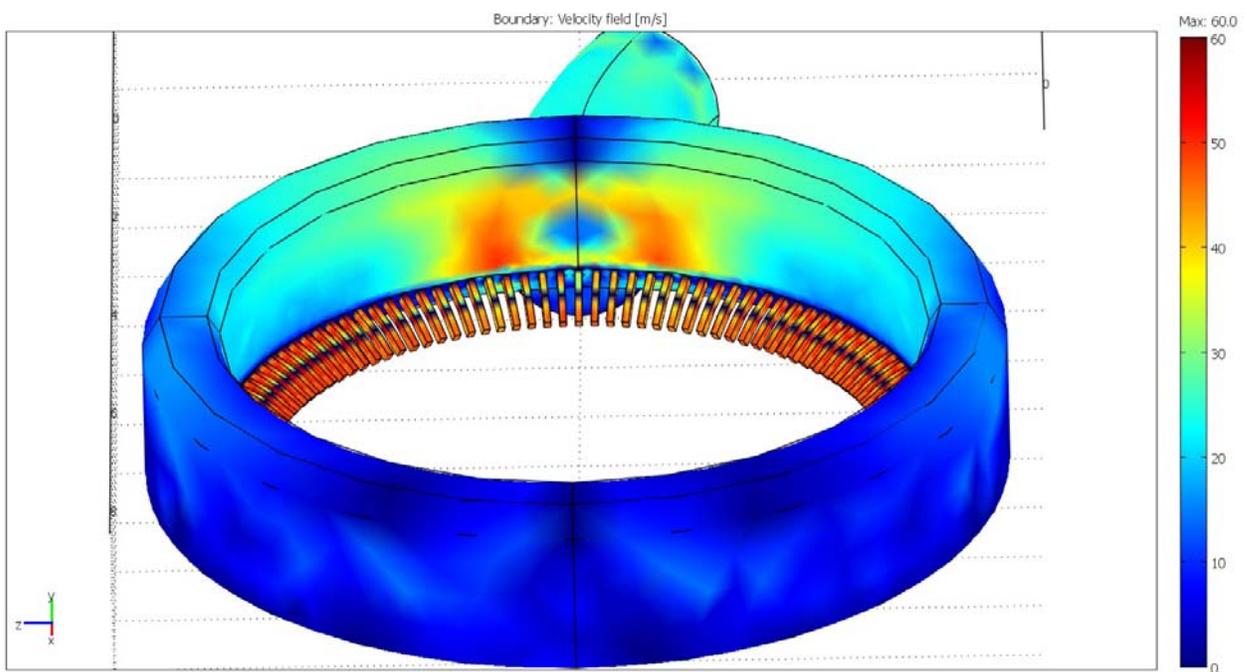


Figura 25. Perfil general de velocidad cercano a las paredes.

En la parte posterior del plenum aún se observa poca homogeneidad en la magnitud de la velocidad, pues hay zonas claras y oscuras intercaladas, lo cual es indicativo de alta turbulencia.

En la Figura 26 se observa la distribución de la velocidad a la entrada del plenum. Las zonas blancas dentro del flujo indican que se tiene una velocidad mayor a la velocidad que se fijó como límite máximo para la figura; en este caso, 60 m/s. La línea de transferencia parece adelgazarse corriente arriba, pero esto es debido sólo a la curvatura de la misma.

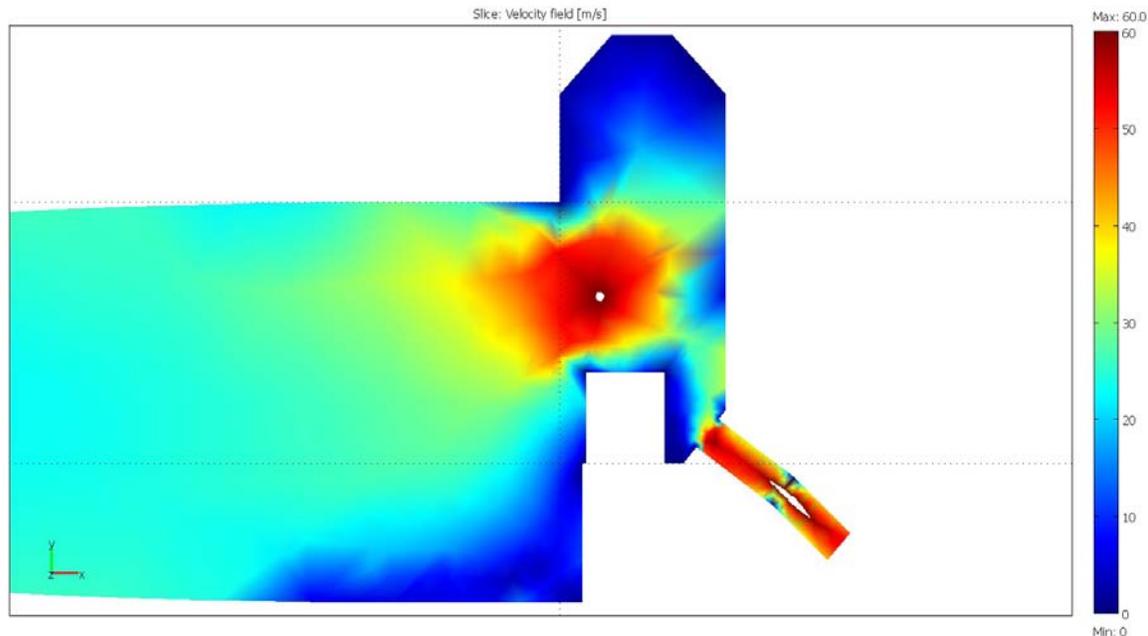


Figura 26. Contorno de velocidades en la parte media del flujo a la entrada del plenum.

Pueden observarse 3 zonas importantes de baja velocidad: en la parte inferior final de la línea de transferencia, en la parte superior del plenum y en un área pequeña entre el muro de contención y las boquillas. A continuación hablaremos un poco sobre estas 3 zonas.

Según el testimonio de personal de planta, la parte final de la línea de transferencia no es zona importante de depositación de carbono, aun con las bajas velocidades que se tienen, lo cual es de llamar la atención y puede servir como un indicativo del mecanismo químico que gobierna la depositación, ya que en esta zona se esperaría tener una mayor temperatura debido a la combustión parcial en la línea de transferencia.

En cuanto a la zona superior del plenum se trata de una “zona muerta” debido a la diferencia entre los pisos del plenum y de la línea de transferencia. Aunque el flujo entra al plenum a muy alta velocidad, éste se desplaza lateralmente tal como se observa en la Figura 25.

La zona posterior al muro de contención es una zona de alta probabilidad de depositación debido a las bajas velocidades, pero no es posible evitarlo si se desea atenuar el impacto del flujo frontal.

La sección que se observa en la Figura 26 también corta por la mitad a la boquilla número 1 y en ella se aprecia cómo el cambio de dirección genera la canalización del flujo por la parte media. Esto se debe a que en las aristas se generan vórtices.

Después de dividirse en dos corrientes prácticamente iguales a la entrada del plenum, el gas proceso se transporta mayoritariamente por la parte superior adyacente a la pared interna del plenum como puede observarse en Figura 27 y Figura 28.

Puede observarse como en la primera mitad del plenum, el flujo se encuentra con cierto grado de estratificación por niveles de velocidad en una dirección diagonal, pero a partir de la mitad (punto de inflexión del flujo) estos estratos se comienzan a descomponer y en la parte final ya no existen. Sin embargo, se mantiene una corriente principal adyacente a la pared interna, originada por la succión de las boquillas.

En la Figura 28 se observa cómo el corte longitudinal superior pasa de ser de alta velocidad en la primera mitad del plenum a ser el de menor velocidad en la parte final del plenum. Mientras que el corte inferior se mantiene más o menos estable en todo el plenum. Es decir, al principio la acción del muro de contención y de la diferencia de altura entre pisos ocasiona que el flujo se vaya preferentemente por la parte superior y conforme se va perdiendo masa, el efecto de la succión de las

boquillas hace que el flujo vaya preferentemente por la parte media adyacente a la pared interna.

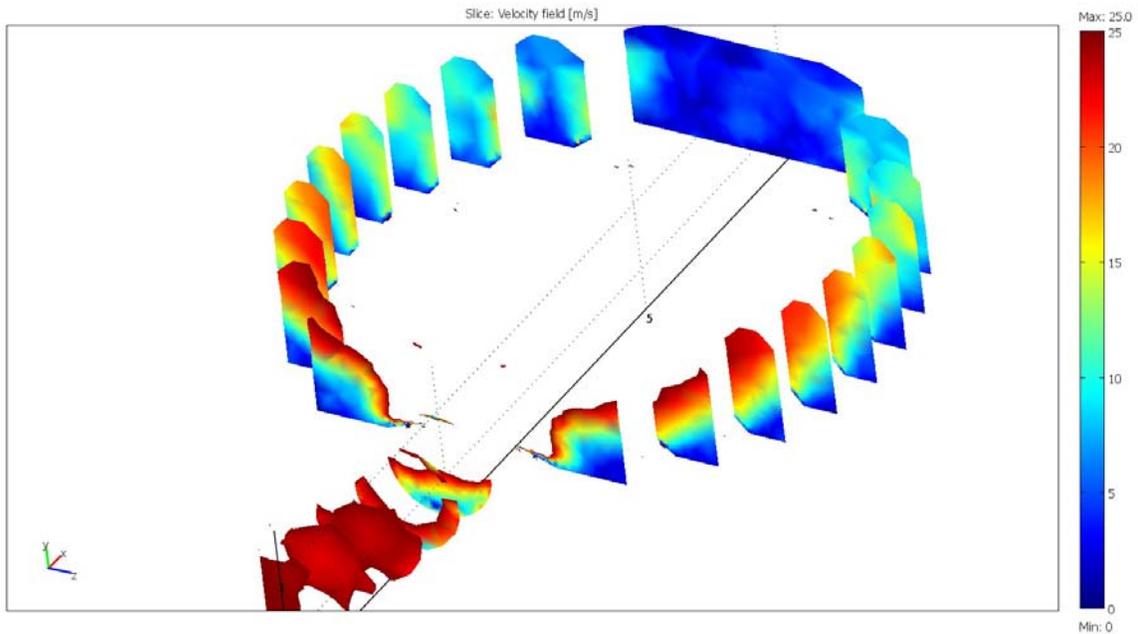


Figura 27. Contorno de velocidades en cortes paralelos al plano yz. En las zonas cuya velocidad es mayor al límite máximo de la gráfica (25 m/s) la gráfica se corta.

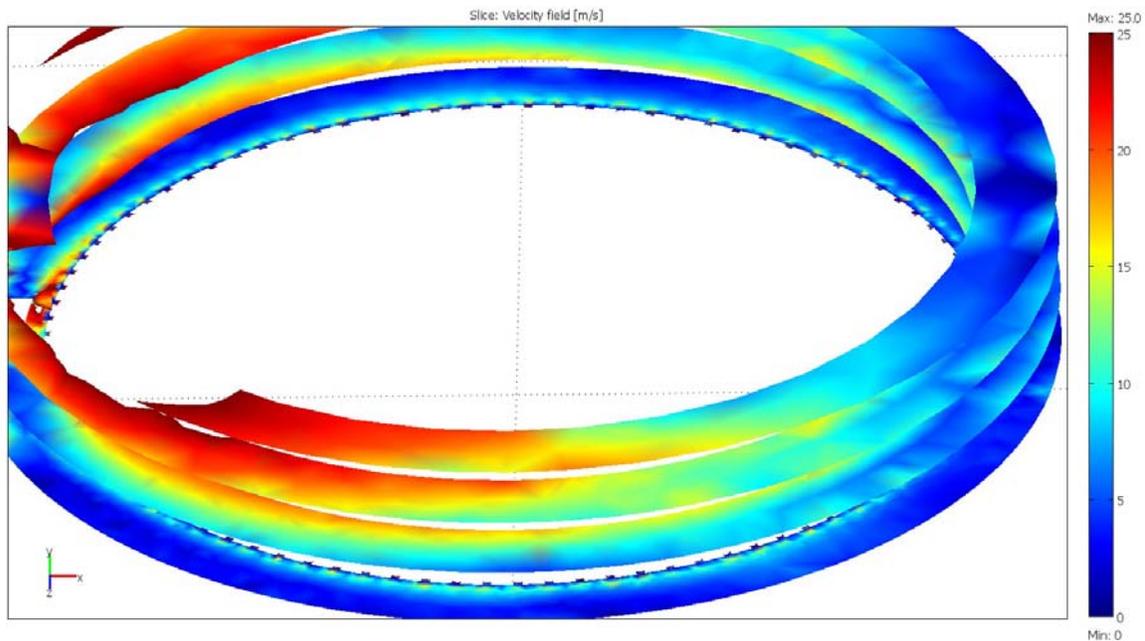


Figura 28. Vector velocidad en cortes paralelos al plano xz. La entrada del gas se encuentra a la izquierda.

También en la Figura 28 podemos notar que en la parte superior de la mitad del plenum se tiene un punto de inflexión en el que el flujo se separa de la pared interna y se dirige a la pared externa. Esto se observa con cada vez menor intensidad conforme se descende en los cortes. Para observar de mejor manera este hecho se procedió a realizar un corte transversal al flujo en la segunda parte del plenum, a 243° de la entrada, tal como se observa en la Figura 29. El resultado se muestra en la Figura 30.

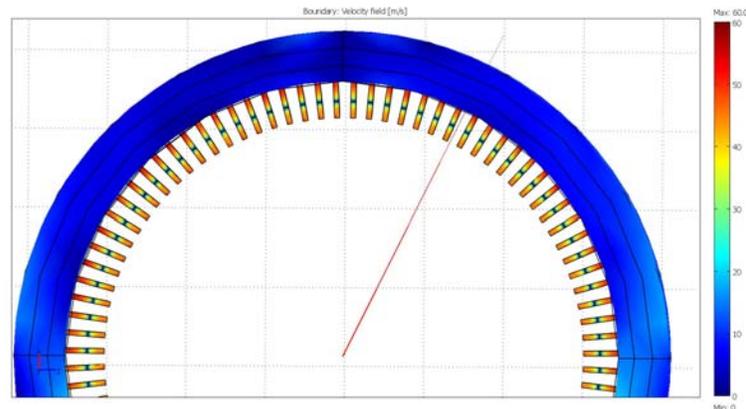


Figura 29. Ubicación del corte de sección transversal a 243° .

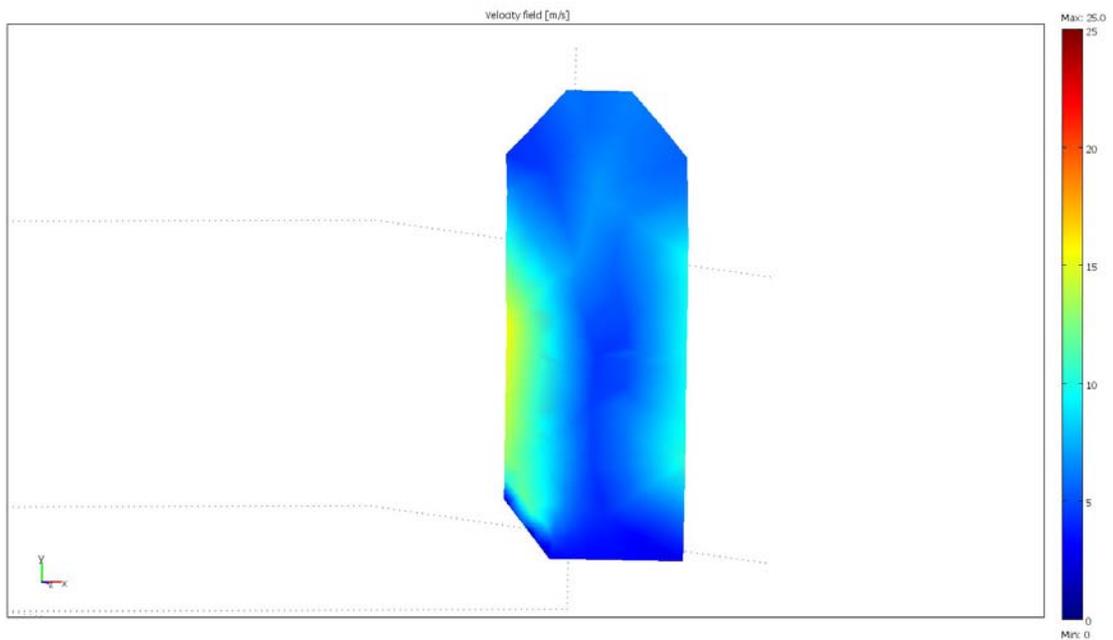


Figura 30. Contorno de velocidades en la sección transversal a 243° de la entrada.

Se distinguen dos corrientes claramente separadas. La corriente adyacente a la pared interna sigue siendo dominante y en la parte media del corte se tiene una velocidad más baja que en las zonas laterales. Aun así, la parte baja del plenum sigue siendo la de menor velocidad.

A la mitad de la altura del plenum se observa un descenso desde 15 m/s en la zona adyacente a la pared interna hasta 5 m/s en la mitad del plenum. Lo cual nos habla de la intensa turbulencia que sigue produciéndose dentro del plenum.

Esta diferencia de velocidades a una misma altura en la parte posterior del plenum se puede observar mejor en la Figura 31. En ésta, se observa que en algunos cortes longitudinales se tiene una zona de baja velocidad en la parte media del plenum. La presencia de zonas aisladas de velocidad alta en la parte final parece ser indicador de que el gas está siguiendo trayectorias dispersas.

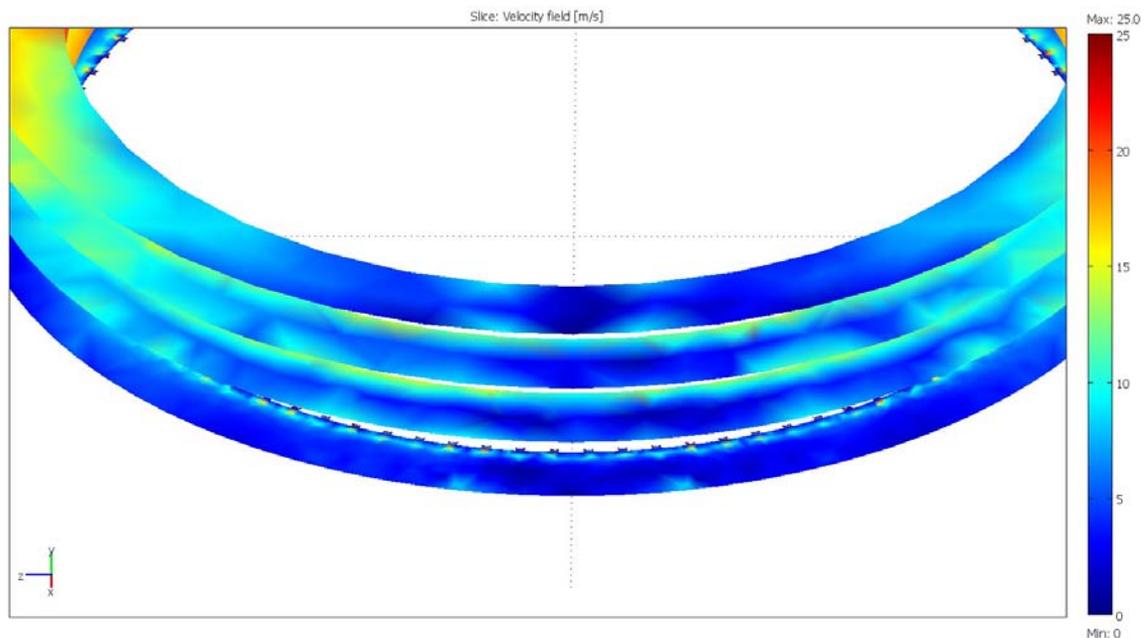


Figura 31. Contorno de velocidades en cortes paralelos al plano xz en la parte posterior del plenum.

Debido a que el flujo se divide en dos corrientes a la entrada del plenum, en la parte posterior de éste se tiene un choque frontal de ambas corrientes, por lo que se crea una zona con remolinos de gran tamaño a velocidades relativamente bajas. (ver

Figura 32). El tiempo de residencia de las moléculas fase gas que entran en estos remolinos se incrementa debido a que la distancia total que recorren desde la entrada hasta la salida se incrementa. Es en esta parte posterior donde se forma la mayor cantidad de carbono en las paredes, techo y piso del plenum.

El choque de las dos corrientes ocurre cerca de la pared interna y origina que el gas retroceda por la zona cercana a la pared exterior. Luego, este gas se introduce por boquillas que se encuentran corriente arriba. También puede observarse que en la parte superior final del plenum las velocidades del gas son muy bajas.

La dirección y magnitud del vector velocidad en la parte posterior del plenum se visualiza mejor en la Figura 33. Allí se percibe que el movimiento del flujo es notoriamente vertical, excepto en la parte superior. La velocidad también tiende a ser mayor cerca de la pared interna.

Es de suponerse que la dirección vertical del vector velocidad se debe a que en esa zona, las componentes horizontales del gas ya han sido atenuadas con el choque entre las dos corrientes de flujo y la mayor parte del gas no puede ir ni hacia adelante ni hacia atrás, por lo que sólo le queda salir por las boquillas. Este fenómeno puede estar encadenado a la distribución de flujo en las boquillas que se revisará más adelante.

Tal vez la parte más interesante en la Figura 33 sea la zona superior del plenum. En ésta se observan velocidades muy bajas (representada por flechas más pequeñas) y cuyo movimiento es claramente horizontal, a diferencia de lo que pasa en las zonas medias y bajas. Este movimiento horizontal a baja velocidad provoca que el tiempo de residencia de estas moléculas sea mucho mayor al que entra directamente a las boquillas o incluso a las que retroceden corriente arriba dentro de los remolinos grandes observados en la Figura 32. Esta información también puede ser muy útil en la dilucidación del mecanismo que conlleva a la formación de carbono.

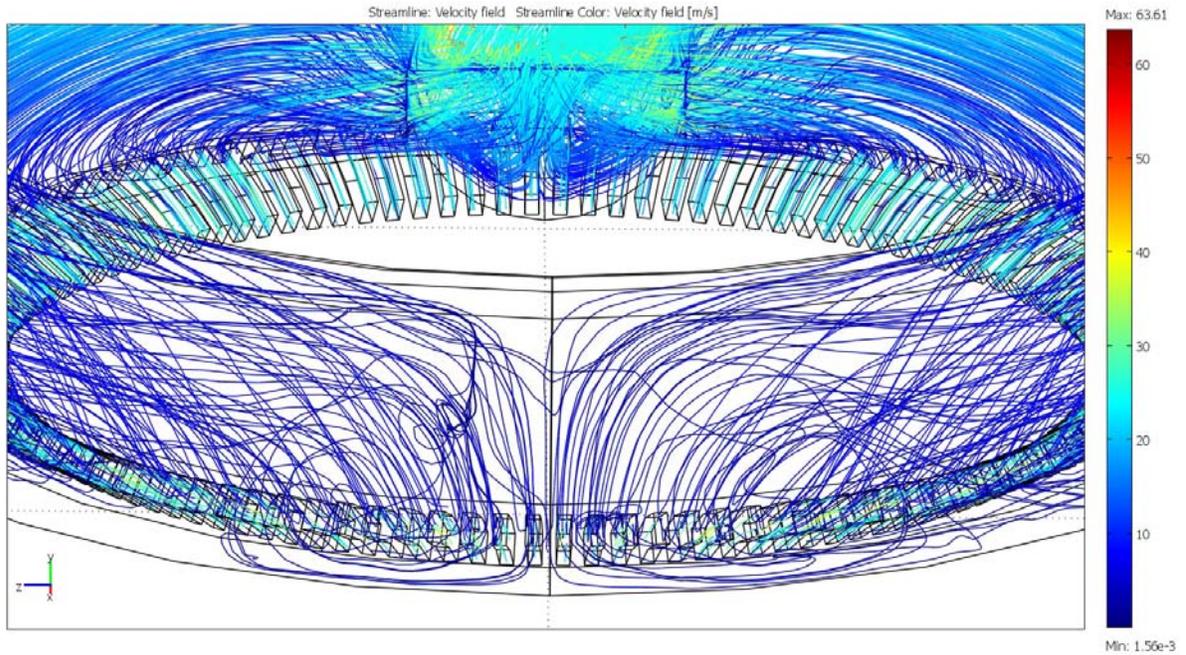


Figura 32. Líneas de corriente en la parte posterior del plenum.

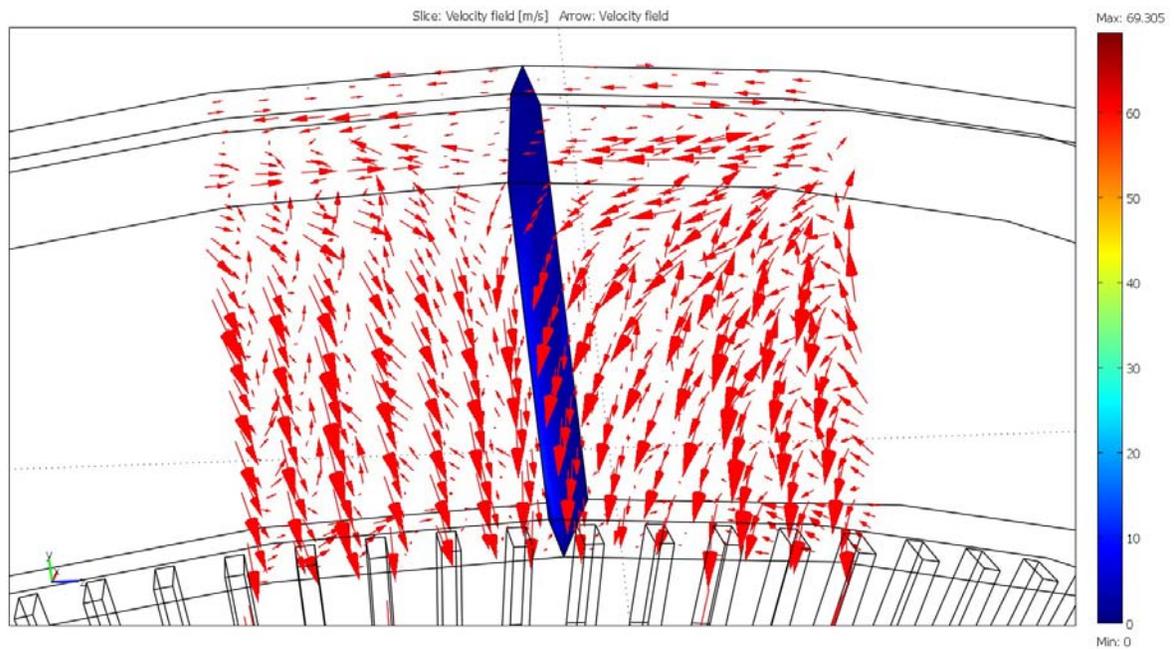


Figura 33. Vectores de velocidad en la parte posterior del plenum. La sección transversal azul está a 180° de la entrada.

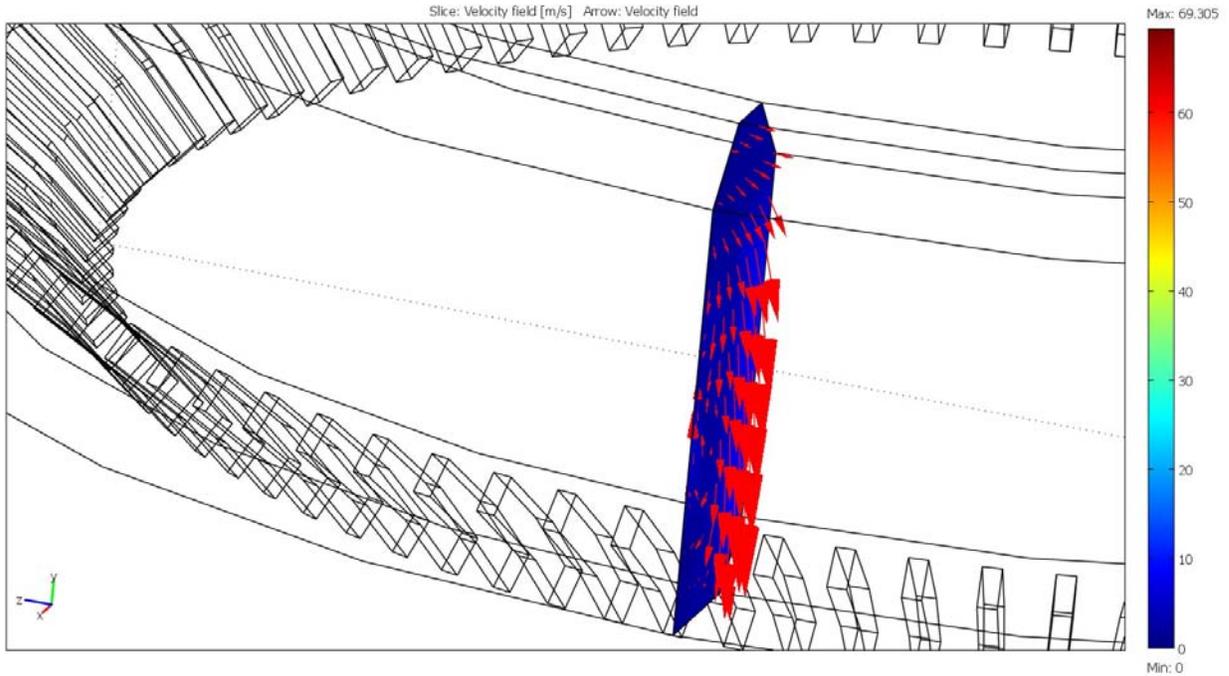


Figura 34. Vista isométrica de la sección transversal y de los vectores de velocidad a 180° de la entrada.

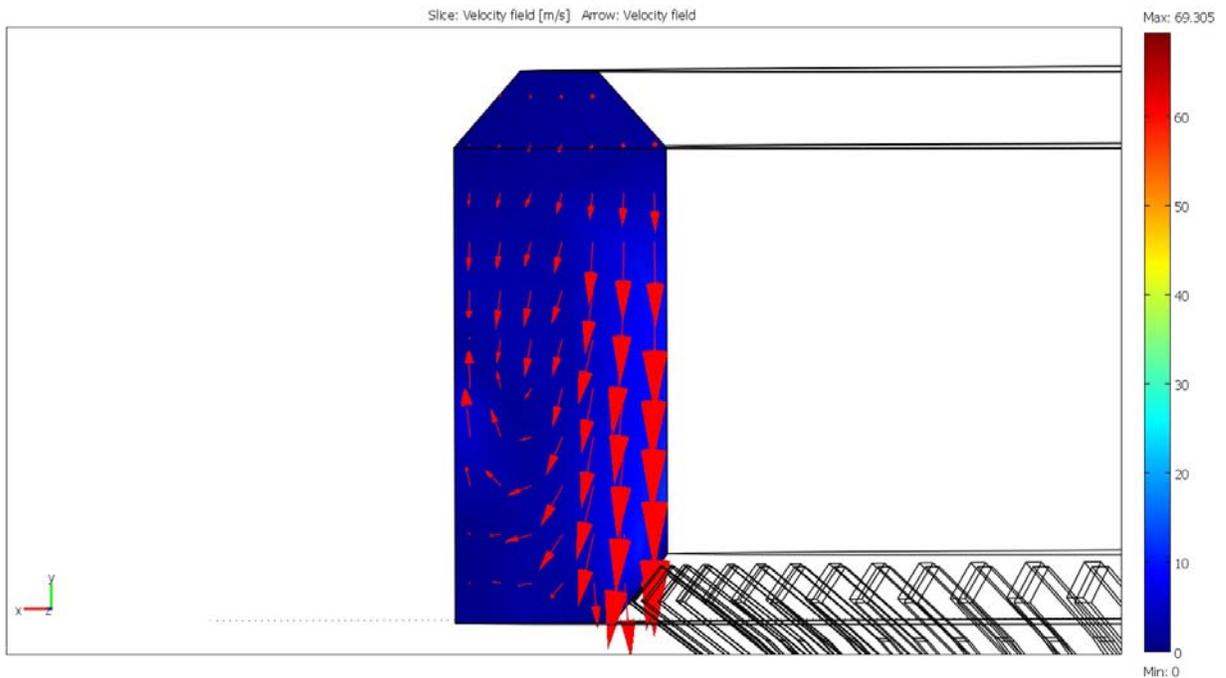


Figura 35. Vista lateral de la sección transversal y de los vectores de velocidad a 180° (plano xy). Se observan los remolinos verticales.

En la Figura 34 se visualiza el patrón de flujo que tiene el gas proceso en la parte más lejana a la entrada. Puede observarse que el flujo no es simétrico porque cruza el plano en una sola dirección, aunque en los resultados de distribución de flujo no se observa una diferencia significativa.

Sin embargo, no deja de ser trascendente que el flujo cruza el plano de tal forma que se verifica que la curvatura de la línea de transferencia tiene injerencia en el perfil de flujo dentro del plenum, aun en la parte más lejana del mismo.

En la Figura 35 se observa el movimiento de remolino vertical que tiene el flujo en la parte final del plenum. Por lo tanto, a la trayectoria horizontal que se observa en la Figura 33 habría que agregarle una trayectoria vertical a las moléculas de gas que tienen mayor tiempo de residencia.

La velocidad dentro de las boquillas se visualiza en la Figura 36, donde se observa la canalización mencionada anteriormente. La continuidad de los colores se corta en las zonas donde la velocidad supera la velocidad límite fijada para la gráfica (60 m/s). Esto ocurre en la parte media de todas las boquillas de este diseño.

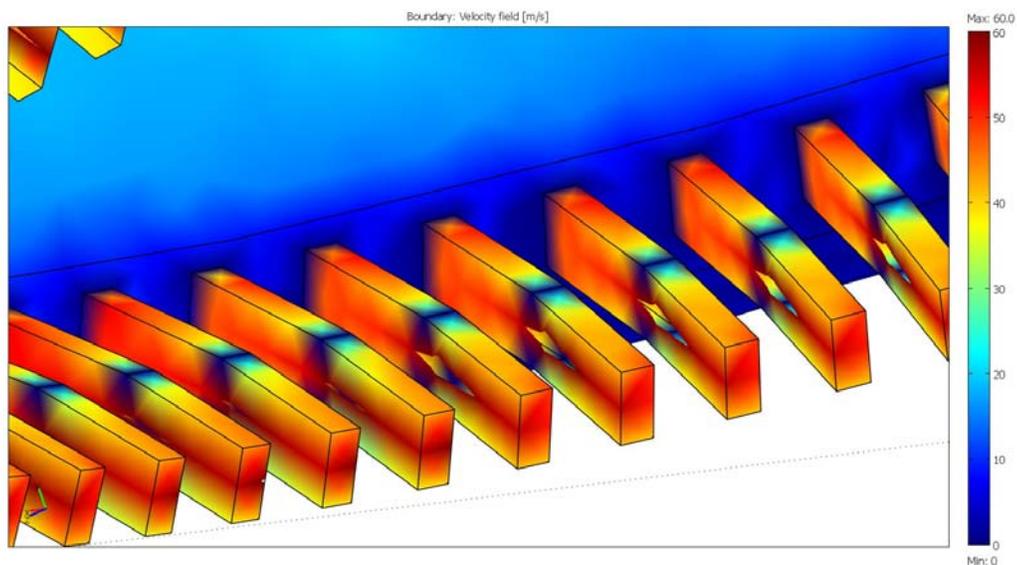


Figura 36. Distribución de velocidades en las boquillas.

La razón de este aumento de velocidad es que existe un ligero cambio en la dirección del fluido dentro de la boquilla. Este cambio en la dirección aunado a las altas velocidades del gas en esas regiones originan gradientes de velocidad considerables cerca de las aristas, por lo que se generan altos niveles de vorticidad (ver también Figura 38). En consecuencia, la mayor parte del flujo se canaliza hacia la parte media de la boquilla. Esto también provoca una caída de presión adicional a la que se presenta en la entrada de la boquilla (ver también Figura 37).

La caída de presión en el cuerpo del plenum es despreciable, como se puede observar en la Figura 37. Además, en esta figura se observa que la caída de presión se da principalmente en tres regiones: en la conexión entre la línea de transferencia y el plenum, en la conexión entre plenum y boquillas y en el cambio de dirección dentro de las boquillas. Esta última causa de caída de presión puede evitarse fácilmente cambiando la configuración de los ladrillos refractarios que conforman las boquillas.

Por último, en la Figura 38 se presentan las zonas con mayores niveles de vorticidad. Además de las ya mencionadas zonas medias de las boquillas, se observan altos niveles en las zonas cercanas a la entrada de las mismas y en las aberturas que existen entre el muro de contención y la pared externa del plenum.

Asimismo, existen dos zonas donde el nivel de vorticidad se dispara (desde azul turquesa hasta rojo): a la izquierda de la primera boquilla y en la abertura izquierda del muro de contención. Es de resaltar que estos puntos están del lado sobre el que se inclina el flujo después de la curvatura de la línea de transferencia, por lo que podría decirse que son producto de la asimetría del flujo.

Sin embargo, esta asimetría del flujo que se observa en zonas aisladas y en la parte posterior del plenum, no se refleja en forma significativa en los resultados de distribución de flujo por boquilla, tal como se muestra en la Figura 39.

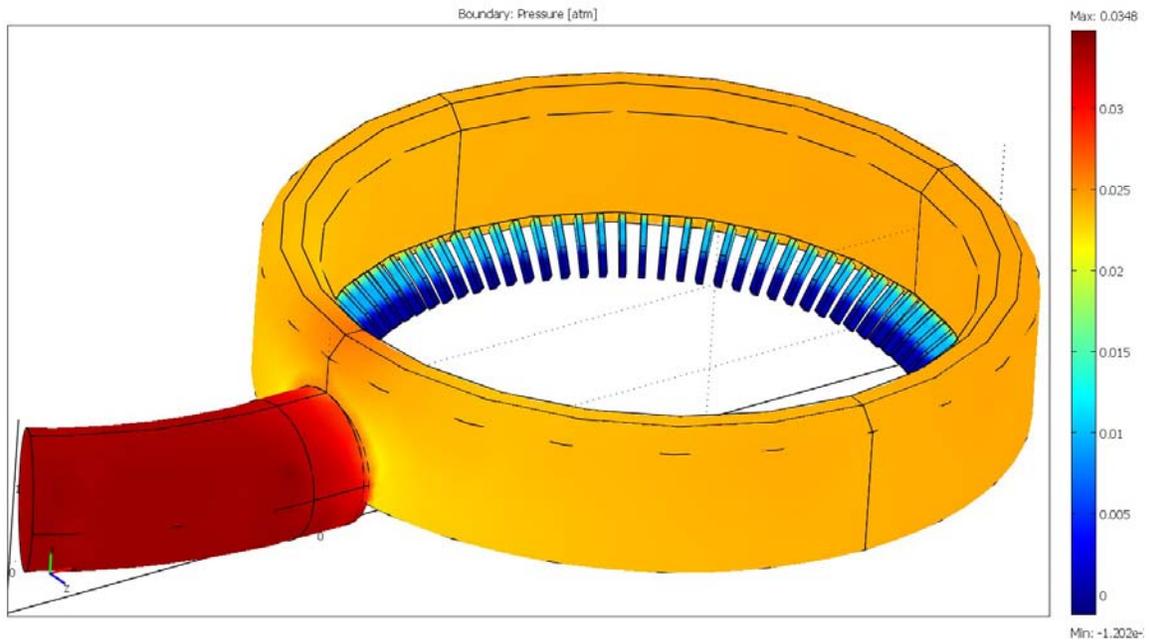


Figura 37. Distribución de presiones en el plenum.

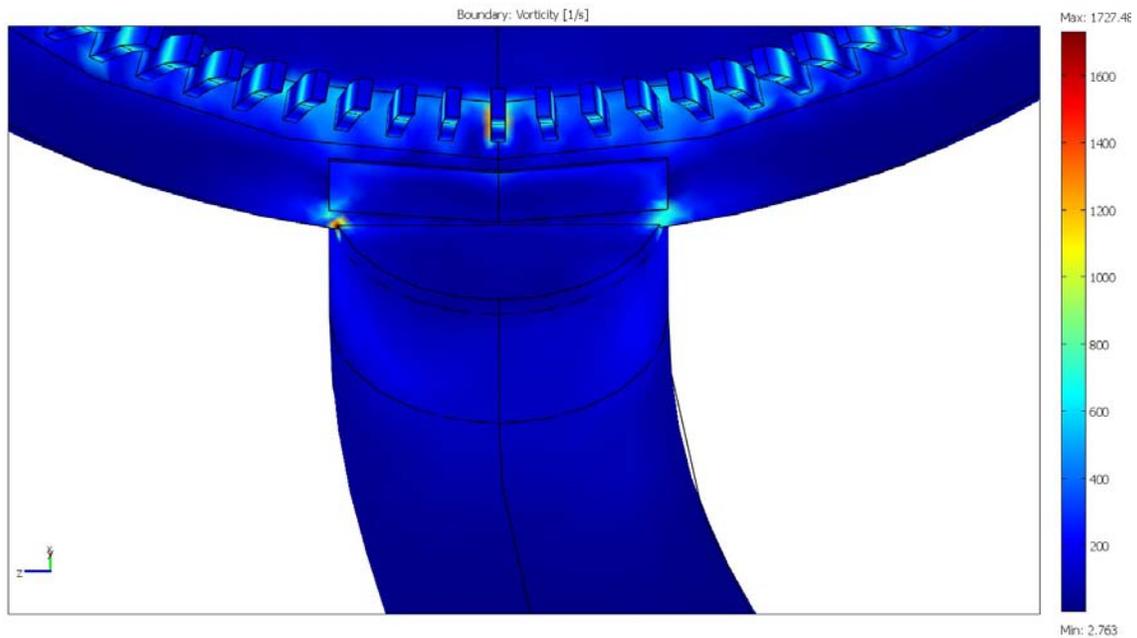


Figura 38. Vista inferior de la distribución de vorticidad en la conexión de línea de transferencia con el plenum.

En la gráfica de distribución de flujo se observa que el gas tiende a salir del plenum por las boquillas de la parte posterior. (Para explicación sobre este tipo de gráficas ver la sección 4.6) De hecho, en toda la segunda mitad del plenum el flujo por boquilla se encuentra arriba del promedio ($100\% / 95 = 1.05$).

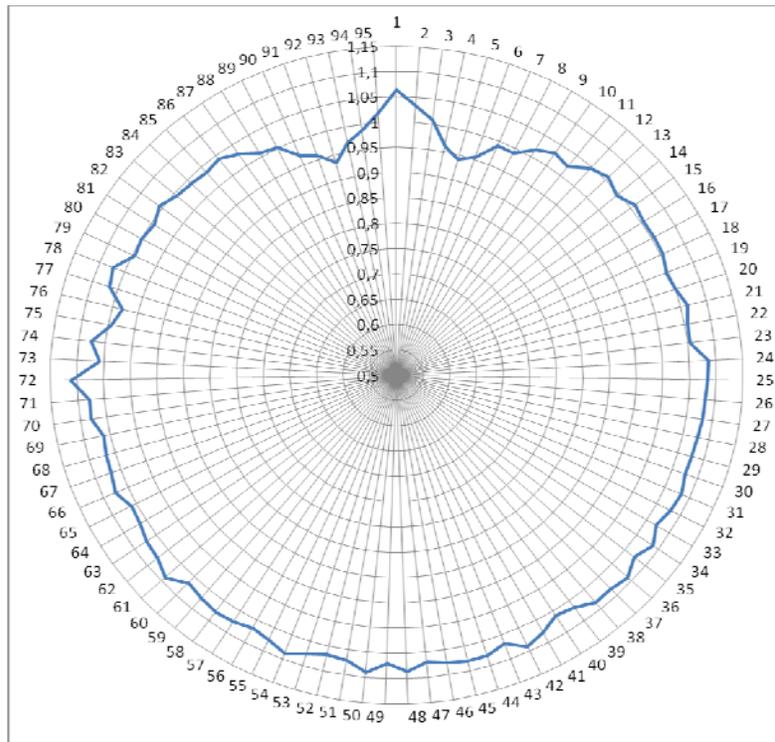


Figura 39. Distribución de flujo en el diseño base.

Los resultados de esta gráfica también indican que el choque frontal del flujo que viene de la línea de transferencia origina una dispersión mayor en la parte inicial del plenum, originando que se tenga un pico en las primeras boquillas para enseguida decaer hasta los niveles más bajos de todo el plenum en las boquillas 5 y 92. Estas depresiones en las zonas aledañas a la entrada fueron características para todos los diseños analizados.

5.2 Análisis de sensibilidad respecto a parámetros geométricos.

Se varió el número de boquillas manteniendo constantes las medidas de las boquillas, por lo cual el área total de salida es diferente para cada diseño. En la Tabla 6 y la Figura 40 se pueden observar los resultados obtenidos. (Para ver más detalles sobre cómo se obtuvieron los datos mostrados a partir de la información calculada por Comsol, vea la sección 4.6)

La columna denotada como “Cociente” es una desviación estándar normalizada. Es el resultado de dividir la desviación estándar (en % de flujo) entre el flujo promedio (también en % de flujo) y se calculó como medida complementaria al análisis de los resultados ya que la sola desviación estándar no toma en cuenta el cambio en el número de boquillas y el valor del flujo promedio sí lo hace. En la Figura 40 puede observarse que el valor del cociente crece más rápidamente que la desviación estándar. Esto se debe a que el flujo promedio por boquilla disminuye conforme se aumenta el número de boquillas.

Tabla 6. Resultados obtenidos variando el número de boquillas.

Número	Flujo promedio(%)	Desv. Std. (%)	Cociente	Caída de presión(kg _f /cm ²)
65	1.538462	0.027712	0.018013	0.053007
75	1.333333	0.035385	0.026539	0.044488
85	1.176471	0.035493	0.030169	0.037183
95	1.052632	0.036353	0.034536	0.032977
105	0.952381	0.038419	0.04034	0.029193
115	0.869565	0.037292	0.042886	0.025971
125	0.8	0.04221	0.052762	0.023939
135	0.740741	0.040967	0.055306	0.022149
145	0.689655	0.041811	0.060627	0.020773

El comportamiento observado en la Figura 40 es acorde con los lineamientos que normalmente se toman en consideración en el diseño del plenum: a mayor caída de presión, mejor distribución de flujo. Sin embargo, la relación caída de presión-distribución de flujo parece no ser lineal, ya que mientras la desviación estándar y el cociente aumentan de forma aproximadamente lineal, la caída de presión disminuye

con un comportamiento cuadrático con respecto al número de boquillas. No obstante, la curvatura de la caída de presión es poco pronunciada y en cierta forma también podría modelarse con una línea recta.

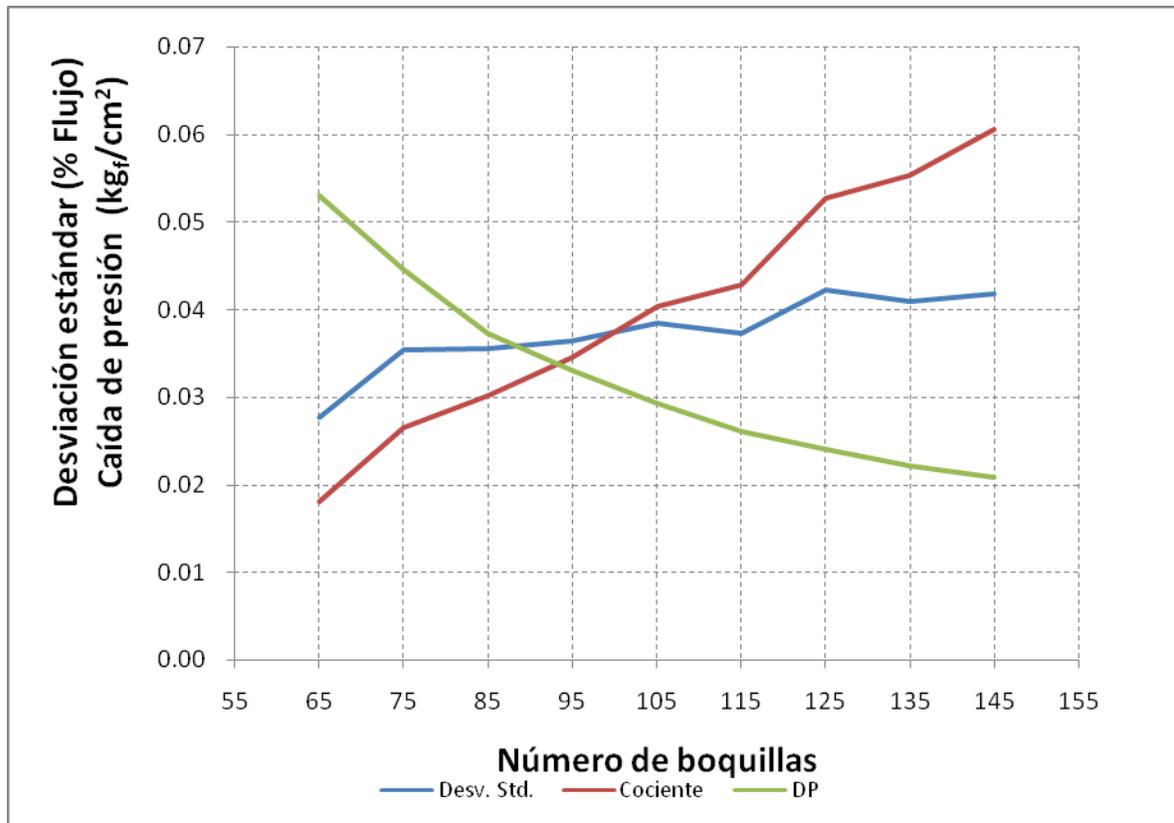


Figura 40. Efecto de variar el número de boquillas.

Cabe mencionar que tampoco se puede aumentar demasiado el número de boquillas porque se expondría a un mayor riesgo de fallas mecánicas en los ladrillos colocados entre boquillas.

También se varió el número y dimensiones de las boquillas, manteniendo aproximadamente constante el área total de las boquillas. Sin embargo, para este parámetro se obtuvieron pocos datos y los resultados no parecen ser concluyentes con respecto a la influencia que pudiera tener este parámetro. Aun así se muestran los resultados obtenidos en la Tabla 7.

Tabla 7. Comparación respecto a número de boquillas con la misma área total de salida.

Núm.	Ancho boq. (mm)	Altura boq. (mm)	Flujo promedio(%)	Desv. Std. (%)	Cociente	Caída de presión(kg/cm ²)
65	80	160	1.538462	0.054389	0.035353	0.031482
75	74	148	1.333333	0.061886	0.046414	0.030326
95	66	132	1.052632	0.036353	0.034536	0.032977

Con el fin de aumentar las velocidades dentro del plenum, se contempló la alternativa de reducir el área del plenum disminuyendo la altura del plenum. En la Tabla 8 y Figura 41 se compara un diseño con disminución del área de plenum contra el diseño base.

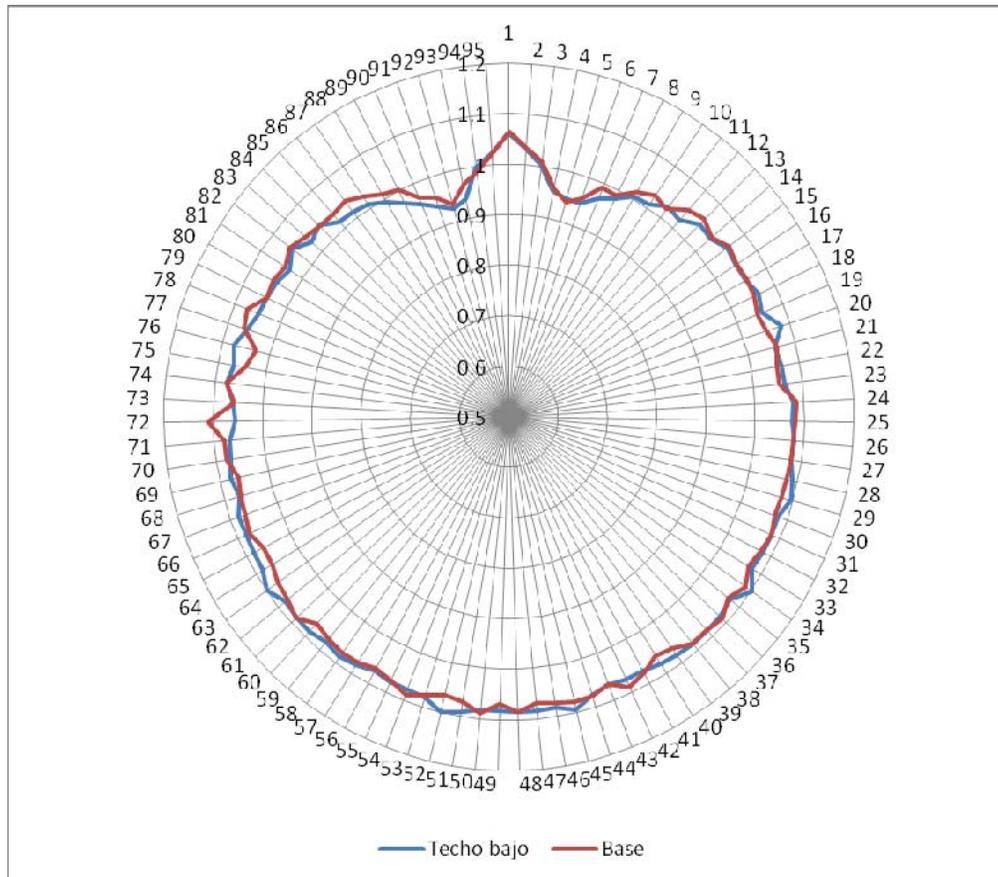


Figura 41. Efecto de disminuir el área transversal de plenum en un 11%.

En el diseño marcado como “Techo bajo” se disminuyó la altura del plenum en 16 cm (la altura de uno de los ladrillos de las paredes del plenum) y el área transversal disminuyó un 11%.

Tabla 8. Comparación entre el diseño base y el diseño "Techo bajo".

	Flujo promedio (%)	Desv. Std. (%)	Cociente (DStd/Fprom)	DP(kg/cm²)
Base	1.052632	0.036353	0.034536	0.032977
Techo bajo	1.052632	0.042441	0.040319	0.033394

La modificación no cambió significativamente los resultados obtenidos con el diseño base. Inclusive, se tienen resultados con un menor rendimiento que en el diseño base. Las desviación estándar aumenta un poco y la caída de presión se mantiene prácticamente igual. Este último detalle viene a confirmar que el área transversal de plenum no juega un papel importante en la caída de presión.

Por lo anterior, se puede apuntar que una disminución de la altura como se contempló (disminuyendo el techo la altura de un ladrillo) no traería un mayor rendimiento del plenum.

En cuanto al impacto que pudiera tener un cambio en el muro de contención a la entrada del plenum, en la Tabla 9 y en la Figura 42 se muestran los resultados para diferentes diseños. El diseño marcado como triangular se realizó con una longitud de la mitad del diseño base y con la misma altura que éste.

En la Tabla 9 no se percibe un impacto significativo del muro de contención en cuanto a la distribución de flujo, por lo que desde este punto de vista se podría prescindir de él. Es más, sin el muro se obtienen resultados ligeramente mejores que con el diseño base.

Sin embargo, para tomar una decisión al respecto de la conveniencia o no del muro de contención deben tomarse en cuenta si esto afectaría a la protección de las paredes del interior del plenum contra la radiación de la combustión incompleta y contra el choque frontal de los gases.

Tabla 9. Resultados para diferentes diseños de muros de contención.

	Flujo promedio (%)	Desv. Std. (%)	Cociente (DStd/Fprom)	DP(kg/cm ²)
Base	1.052632	0.036353	0.034536	0.032977
Mitad	1.052632	0.035862	0.034069	0.030585
Sin muro	1.052632	0.033545	0.031867	0.027858
Triangular	1.052632	0.035206	0.033446	0.028512

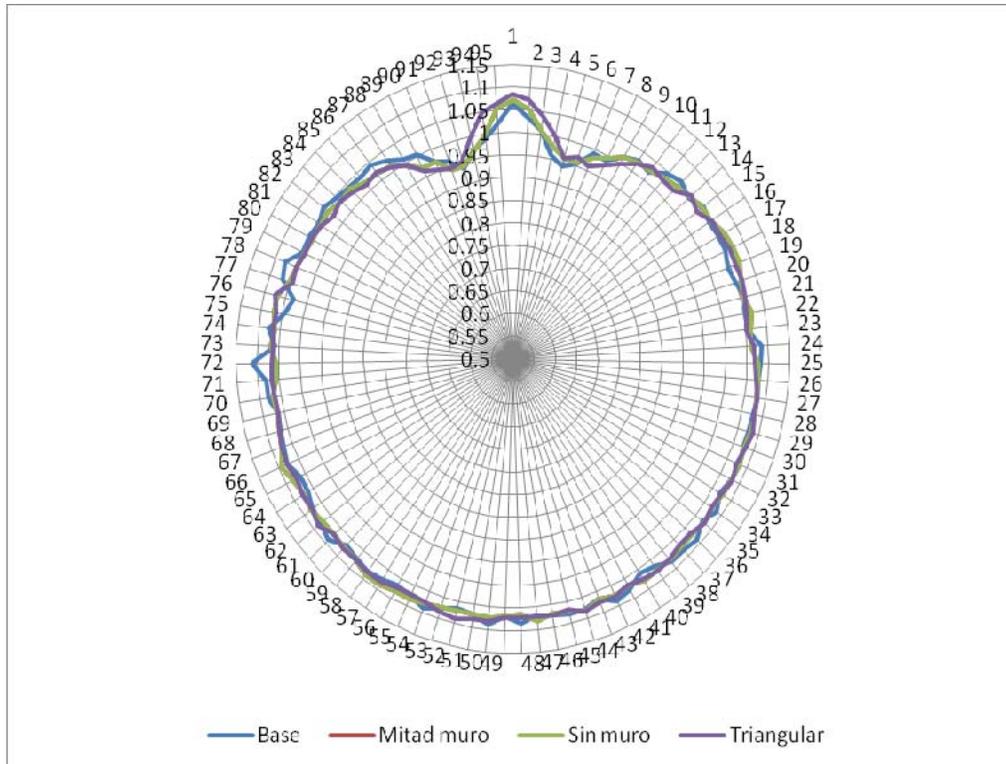


Figura 42. Comparación de diseños de muro de contención.

5.3 Comparación entre dos diseños dados.

Por último, se realizó la comparación entre dos diseños específicos sobre los cuales la empresa tenía interés analizar. Estos dos diseños cuentan con diferente número de boquillas y con área similar total de salida, por lo tanto tienen diferente área individual de boquilla. El perfil transversal del plenum también es diferente.

En la Tabla 10 se muestra un resumen de los resultados obtenidos para estos dos diseños. La desviación estándar y su cociente sobre el flujo promedio resultan más bajos para el diseño alterno, mientras que la velocidad promedio al final del plenum es mayor para el diseño base.

Tabla 10. Comparación entre diseño base y diseño alterno.

	Base	Alterno
Flujo promedio (%flujo)	1.052631579	0.8
Desviación estándar (%flujo)	0.036353	0.025032
Flujo promedio (MCNH)	1831.578947	1392
Desviación estándar (MCNH)	63.25422	43.55575
Cociente Desv.Std./Flu.Prom.	0.03453535	0.03129
Caída de presión (kgf/cm ²)	0.032977	0.035144
Velocidad final promedio(m/s)	4.308915294	3.134243

Debido a la diferencia del número de boquillas, no se puede realizar una gráfica polar, por lo que se utiliza una dispersión de datos (ver Figura 43). En el eje de las abscisas se grafica la coordenada polar que comienza en la parte media de la boquilla 1. Como el flujo promedio por boquilla tampoco es igual, se procedió a normalizar las gráficas con respecto al flujo promedio. Por lo tanto, en el eje de las ordenadas se grafica: [% de flujo en una boquilla determinada (Fb) - % promedio de flujo en las boquillas (Fbprom)]. Este sistema se utilizó para tener un parámetro cuya media para ambos diseños fuera igual a cero y poderlos comparar gráficamente.

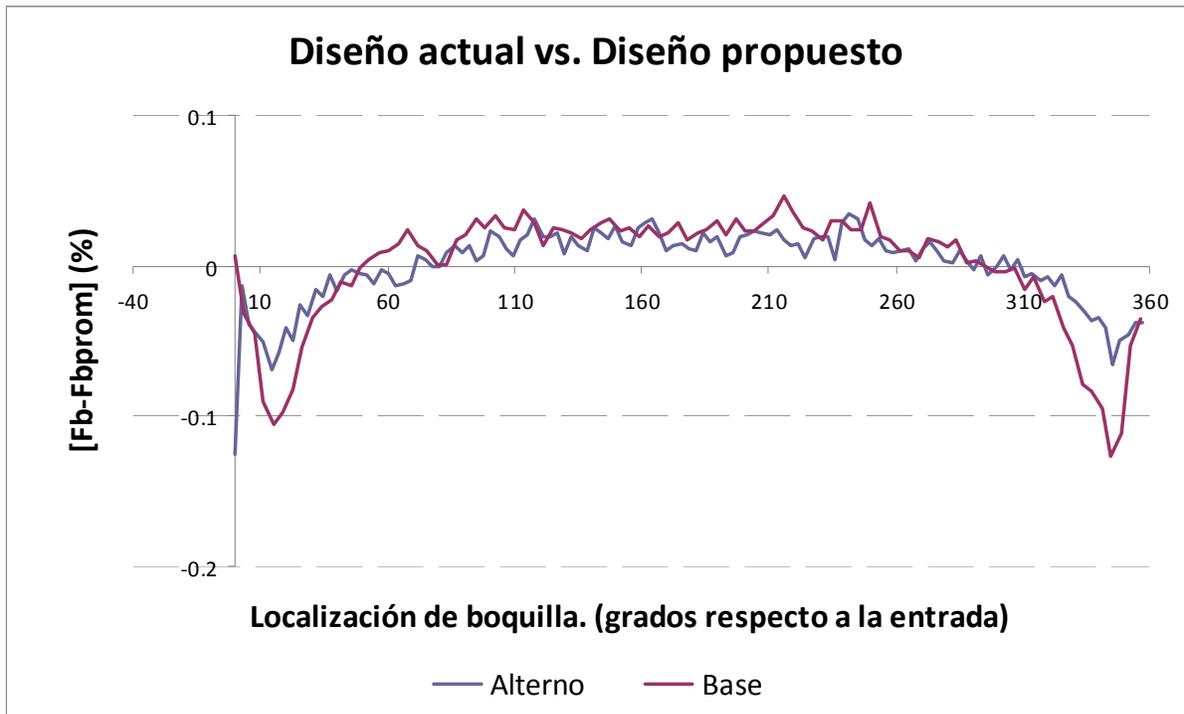


Figura 43. Distribución del flujo en el diseño base y en el alterno.

A primera vista se observa que el diseño alterno tiene una menor dispersión sobre la media (en este caso 0 para ambos) y que las depresiones en la zona aledaña a la entrada al plenum son más pronunciadas en el diseño base, lo cual tiene que ser compensado con una mayor entrada de gas en la parte posterior del plenum.

6. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

A modo de resumen del análisis de la dinámica de fluidos en el plenum puede decirse que:

- 1) En el tramo corto de la línea de transferencia el flujo prácticamente no sufre variaciones en la velocidad promedio y la curvatura no parece incidir fuertemente en él.
- 2) En la entrada al plenum, la diferencia de alturas de la línea de transferencia y el plenum, sumado a la altura del muro de contención, provocan que la mayor parte del flujo se transporte hacia la parte superior del plenum. En esta zona se da una gran parte de la caída de presión total.
- 3) A lo largo del cuerpo del plenum la caída de presión es mínima. Gran parte del flujo se realiza adyacente a la pared interna y superior del plenum.
- 4) Aproximadamente a la mitad del plenum la corriente principal desaparece y el fluido sigue trayectorias dispersas.
- 5) En la parte final del plenum se forman grandes remolinos como producto del choque de las dos corrientes.
- 6) En la zona final superior se tiene una región de muy baja velocidad. Además, el fluido tiende a seguir trayectorias verticales hacia las boquillas y alguna parte del flujo retrocede corriente arriba del plenum con los remolinos.
- 7) La caída de presión dentro de las boquillas se da en dos partes principales: en la entrada a ellas y en el cambio de dirección que sufren a la mitad de las

mismas. Las altas velocidades y el cambio de dirección provocan gradientes de velocidad muy altos, lo que conlleva a altos niveles de vorticidad también.

Uno de los hallazgos más relevantes de esta investigación es que, al contrario de lo que se esperaba, la simulación indica que el fluido tiende a desalojar el plenum por la parte posterior del mismo, y no tanto por la parte frontal. Esto, como ya se mencionó, tiene su origen en que la parte inicial del plenum no puede (ni debe) desalojar todo el gas proceso, por lo que gran parte del flujo sigue su camino hasta la parte final del plenum.

Las moléculas del gas proceso que llegan a la parte final se encuentran con las que vienen del otro lado del plenum y ocurre un choque entre las dos corrientes. En este punto, las moléculas tienen dos opciones: o vuelven corriente arriba vía remolinos o se quedan en la parte superior realizando un movimiento horizontal.

Por supuesto, la onda de choque se esparce corriente arriba del plenum y por tal motivo se observa la distribución de flujo actual.

En cuanto a los parámetros investigados, el que mostró mayor impacto en la distribución fue el área total de salida en las boquillas, que también influye mucho en la caída de presión de los gases. Los resultados aquí obtenidos pueden ser muy útiles para determinar un área de salida de gases en base a la máxima caída de presión permisible.

Los resultados obtenidos muestran que el muro de contención no mejora la distribución de flujo en las boquillas, por lo que su existencia no se justifica por esa razón. Sin embargo, es importante recordar que este muro puede jugar un papel importante como barrera protectora del plenum contra la radiación térmica emitida por la combustión de oxígeno en la línea de transferencia. La magnitud de este efecto térmico puede ser un aspecto a evaluar en futuros trabajos.

El diseño alternativo resultó tener una distribución de flujo ligeramente mejor que el diseño base y una caída de presión ligeramente mayor, por lo que la preferencia por alguno de los dos diseños probablemente debe basarse en otro estudio, más que en el de la dinámica de fluidos. Además, el tiempo de residencia promedio en el diseño alternativo es ligeramente mayor que en el base debido a la diferencia en volúmenes de los diseños.

Por todo lo anteriormente mencionado se puede decir que el objetivo general de optimizar el diseño de los plenum se logró al cumplir los dos objetivos específicos: obtener los perfiles de velocidad y presión en el diseño base de plenum y el efecto de algunos de sus parámetros geométricos.

En cuanto a las áreas de oportunidad que se presentan para posibles trabajos futuros se encuentran:

- Adición de un modelo de transporte de materia para determinar la distribución de tiempo de residencia del gas dentro del plenum.
- Adición de modelo de transporte de partículas para determinar la deposición de partículas sólidas, suponiendo que ese sea el mecanismo dominante de la formación de carbono.
- Modificar otros parámetros, tales como el perfil transversal del flujo en las boquillas. Por ejemplo, probar con boquillas cilíndricas.
- Tratar de correlacionar empíricamente los parámetros de entrada con los resultados de salida.
- Incluir un modelo de transporte de energía para simular el flujo no isotérmico.

- Realizar una interfaz gráfica para la construcción de diferentes diseños de plenum vía Matlab©.
- Realizar pruebas experimentales con un modelo a escala.

REFERENCIAS

Alemán-Milán G (2008) *Kinetic modeling and characterization of an aerosol formed during the pyrolysis of ethane*. PhD. Thesis, Dalhousie University, Canada.

Annabattula P (2006) *A CFD model to predict pressure loss coefficient in circular ducts with a motorized damper*. MS Thesis, University of Nevada, Las Vegas, USA.

Bird R B, Stewart W E, Lightfoot E N (1992) *Fenómenos de transporte*. Editorial Reverté.

Bourrat X, Langlais F, Chollon G, Vignoles G L (2006) *Low temperature pyrocarbons: a review*. J. Braz. Chem. Soc. 17(6) 1090-1095.

Clift R (1978) *Bubbles, drops and particles*. Academic Press.

Chapra S C, Canale, R P (2003) *Métodos numéricos para ingenieros con programas de aplicación*. McGraw-Hill. Cuarta edición.

De Pauw V, Collin A, Send W, Hawecker J, Gerthsen D, Pfrang A, Schimmel T (2006) *Deposition rates during the early stages of pyrolytic carbon deposition in a hot-wall reactor and the development of texture*. Carbon 44(1) 3091-3101.

Dean A M (1990) *Detailed kinetic modeling of autocatalysis in methane pyrolysis*. Ind. Eng. Chem. Res. 94(4) 1432-1439.

Delhaes P (2002) *Chemical vapor deposition and infiltration processes of carbon materials*. Carbon 40(5) 641-657.

Dobre T G, Sánchez-Marcano J G (2007) *Chemical engineering. Modelling, simulation and similitude*. Wiley-VCH.

Dong G L, Hüttinger K J (2002) *Consideration of reaction mechanisms leading to pyrolytic carbon of different textures*. Carbon 40(14) 2515-2528.

Durbin P A, Peterson-Reif B A (2001) *Statistical theory and modeling for turbulent flows*. Wiley & Sons.

Ern A, Guermond J L (2004) *Theory and practice of finite elements*. Springer.

Fabry F, Flamant G, Fulcheri L (2001) *Carbon black processing by thermal plasma. Analysis of the particle formation mechanism*. Chem. Eng. Sc. 56(6) 2123-2132.

Fincke J R, Anderson R P, Hyde T A, Detering B A (2002) *Plasma pyrolysis of methane to hydrogen and carbon black*. Ind. Eng. Chem. Res. 41(6) 1425-1435.

Fox R O (2006) *CFD models for analysis and design of chemical reactors. IV Production of fine particles*. Adv. Chem. Eng. 31(1) 273-287.

Friedlander S K (1950) *Deposition of aerosol particles from turbulent gases*. PhD Thesis, University of Illinois, USA.

Friedlander S K (2000) *Smoke, dust and haze. Fundamentals of aerosol dynamics*. Oxford University Press, segunda edición.

Fulcheri L, Probst N, Flamant G, Fabry F, Grivei E, Bourrat X (2002) *Plasma processing: a step towards the production of new grades of carbon black*. Carbon 40(2) 169-176.

Glasier G F (2000) *Molecular growth, aerosol formation and pyrolytic carbon deposition during the pyrolysis of ethane at high conversion*. PhD Thesis, Dalhousie University, Canada.

Grenda J M, Androulakis I P, Dean, A M (2003) *Application of computational kinetic mechanism generation to model the autocatalytic pyrolysis of methane*. Ind. Eng. Chem. Res. 42(5) 1000-1010.

Hari S (2003) *CFD simulations of dilute fluid-particle flows in aerosol concentrators*. PhD Thesis, Texas A&M University, USA.

Hryb D, Cardozo M, Ferro S, Goldschmit (2009) *Particle transport in turbulent flow using both Lagrangian and Eulerian formulations*. International Communications in heat and mass transfer. 36(1) 451-457.

Hu Z J, Hüttinger K J (2003) *Influence of the surface area/volume ratio on the chemistry of carbon deposition from methane*. Carbon 41(1) 1501-1508.

Hu Z J, Hüttinger K J (2002) *Mechanisms of carbon deposition - a kinetic approach*. Carbon 40(4) 624-628.

Hu Z J, Hüttinger K J (2001) *Chemistry and kinetics of chemical vapor deposition of pyrocarbon. VIII. Carbon deposition from methane at low pressures.* Carbon 39(3) 433-441.

Iacono G L, Tucker P G, Reynolds A M (2005) *Predictions for particle deposition from LES of ribbed channel flow.* Heat and Fluid Flow 26(1) 558-568.

Kays W M, Crawford M E (1993) *Convective heat and mass transfer.* McGraw-Hill, tercera edición.

Kundu P K (1990) *Fluid mechanics.* Academic Press, primera edición.

Iai A C K, Byrne M A, Goddard A J H (2002) *Particle deposition in ventilation duct onto three-dimensional roughness elements.* Building and Environment 37(1) 939-945.

Li A, Norinaga K, Zhang W, Deutschmann O (2008) *Modeling and simulation of materials synthesis: Chemical vapor deposition and infiltration of pyrolytic carbon.* Composites Sc. & Tech. 68(5) 1097-1104.

Licht W (1988) *Air pollution control engineering.* Marcel Dekker Inc., segunda edición.

Marchioli C, Giusti A, Salvetti M V, Soldati A (2003) *Direct numerical simulation of particle wall transfer and deposition in upward turbulent pipe flow.* Int. J. Multiphase Flow 29(1) 1017-1038.

Masuda H, Higashitani K, Yoshida H (2006) *Powder technology handbook.* CRC

Press, tercera edición.

Matheu D M, Dean A M, Grenda J M, Green W H (2003) *Mechanism generation with integrated pressure dependence: a new model for methane pyrolysis*. J. Phys. Chem. A 107(41) 8552-8565.

McCabe W L, Smith J C, Harriott P (2002) *Operaciones unitarias en ingeniería química*. McGraw-Hill, sexta edición.

Michaelides E E (2006) *Particles, bubbles and drops. Their motion, heat and mass transfer*. World Scientific, primera edición.

Monthioux M, Allouche H, Jacobsen R L (2006) *Chemical vapour deposition of pyrolytic carbon on carbon nanotubes. Part 3: Growth mechanisms*. Carbon 44(15) 3183-3194.

Norinaga K, Hüttinger K J (2003) *Kinetics of surface reactions in carbon deposition from light hydrocarbons*. Carbon 41(8) 1509-1514.

Oberlin A (2002) *Pyrocarbons*. Carbon 40(1) 7-24.

Reddy J N, Gartling D K (2001) *The finite element method in heat transfer and fluid dynamics*. CRC Press, segunda edición.

Reznik B, K J Hüttinger (2002) *On the terminology for pyrolytic carbon*. Carbon 40(5) 621-624.

Sanders P A (1979) *Handbook of aerosol technology*. Van Nostrand Reinhold Company, segunda edición.

Schiestel R (2008) *Modeling and simulation of turbulent flows*. Wiley & Sons, primera edición.

Shams M, Ahmadi G, Rahimzadeh H (2000) *A sublayer model for deposition of nano- and micro- particles in turbulent flows*. Chemical Engineering Science 55(24) 6097-6107.

Shi D (2008) *Advanced simulation on particle processing: the roles of cohesion, mass and heat transfer in gas-solid flows*. PhD Thesis of University of Pittsburgh.

Soldati A, Marchioli C (2009) *Physics and modelling of turbulent particle deposition and reentrainment: review of a systematic study*. Int. J. Multiphase Flow.

Versteeg H K, Malalasekera W (2007) *An introduction to computational fluid dynamics*. Pearson Education, segunda edición.

Wang Q, Squires K D, Chen M, McLaughlin J B (1997) *On the role of the lift force in turbulence simulations of particle deposition*. Int. J. Multiphase Flow 23(4) 749-763.

Wilkes J O (2007) *Fluid mechanics for chemical engineers*. Prentice Hall, segunda edición.

Wilson S R (2008) *Aerosol deposition measurements as a function of Reynolds number for turbulent flow in a 90° pipe bend*. MS Thesis of Carleton University.

Winkler C M, Rani S L, Vanka S P (2006) *A numerical study of particle wall-deposition in a turbulent square duct flow*. Powder Technology 170(1) 12-25.

Zhang W G, Hüttinger K J (2001) *Chemical vapor deposition of carbon from methane at various pressures, partial pressures and substrate surface area/reactor volume ratios*. Journal of Materials Science 36(14) 3503-3510.

Zhao B, Chen J J (2006) *Numerical analysis of particle deposition in ventilation duct*. Building and Environment 41(1) 710-718.

Zhao B, Wu J (2006) *Modeling particle deposition from fully developed flow in ventilation duct*. Atmospheric Environment 40 457-466.

Zhao B, Wu J (2009) *Modeling particle fate in ventilation system-Part I: Model development*. Building and Environment 44 605-611.

Zhao B, Wu J (2006) *Modeling particle deposition onto rough walls in ventilation duct*. Atmospheric Environment 40 6918-6927.

User's Guide. COMSOL Multiphysics versión 3.5a. (2008)

Chemical Engineering Module, User's Guide. COMSOL Multiphysics versión 3.5a. (2008)

Modeling Guide. COMSOL Multiphysics versión 3.5a. (2008)

ANEXOS

ANEXO 1. Métodos de estabilización de turbulencia en COMSOL® Multiphysics 3.5a.

La solución numérica de las ecuaciones de transporte puede exhibir oscilaciones aun cuando la solución exacta sea suave. Estas oscilaciones son causadas por inestabilidades numéricas.

Para explicar a detalle esta situación, suponga la siguiente ecuación genérica escalar de transporte convectivo-difusivo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta \cdot \nabla u = \nabla \cdot (c \nabla u) + F \quad (\text{A.1})$$

En donde β es el vector velocidad convectivo, c es el coeficiente de difusión, u es una cantidad escalar transportada y F es un término de generación.

El método de discretización de elementos finitos que utiliza COMSOL Multiphysics es el método de Galerkin. Cuando se discretiza la ecuación A.1 con este método, la solución del problema se vuelve inestable para un número de Péclet mayor a uno.

$$Pe = \frac{\|\beta\|h}{2c} > 1 \quad (\text{A.2})$$

En donde h es el tamaño del elemento de malla.

El número de Péclet es una medida de comparación entre los efectos convectivos y difusivos. Un número de Péclet grande indica que los efectos convectivos dominan sobre los efectos difusivos.

Pueden ocurrir oscilaciones cuando el número de Péclet es mayor a uno y se da alguna de las siguientes situaciones:

- Una condición de frontera de Dirichlet con un gradiente muy grande cerca de una frontera, formando una capa límite. Si el tamaño de la malla no permite resolver la capa límite se crea una perturbación local.
- Una condición inicial dependiente del tiempo que no se puede resolver con el mallado utilizado puede ocasionar que una perturbación local se propague por todo el dominio.
- Un término de difusión inicial pequeño cercano a un término de generación variable o a una condición de frontera de Dirichlet puede originar una perturbación local.

Para cada problema existe una resolución de malla lo suficientemente pequeña para la cual la discretización de la solución se vuelve estable. Sin embargo, no es factible utilizar un mallado tan fino, porque se consume una gran cantidad de recursos computacionales. En cambio, es más práctico utilizar métodos de estabilización que agregan un término de difusión artificial a la ecuación de transporte de cantidad de movimiento. A continuación se describen los dos métodos utilizados en este trabajo.

Difusión isotrópica turbulenta

En este método se suma el siguiente término al coeficiente de difusión de la ecuación A.1:

$$c_{\text{art}} = \delta_{\text{id}} h \|\beta\| \quad (\text{A.3})$$

En donde δ_{id} es un parámetro de afinación.

Por lo tanto, en realidad la ecuación que se resuelve es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta \cdot \nabla u = \nabla \cdot ((c + c_{\text{art}}) \nabla u) + F \quad (\text{A.4})$$

Si se mantiene el valor predefinido de $\delta_{\text{id}} = 0.5$, el número de Péclet puede expresarse como:

$$Pe = \frac{h\|\beta\|}{2(c + c_{art})} = \frac{h\|\beta\|}{2c + h\|\beta\|} \quad (A.5)$$

Cuando el valor absoluto de β tiende a infinito, Pe se aproxima a 1, pero jamás excede tal valor.

Aunque una solución obtenida con difusión isotrópica podría no ser satisfactoria en todos los casos, la difusión añadida amortigua el efecto de las oscilaciones e impide que se propaguen a otras partes del sistema.

A diferencia de la difusión isotrópica para las ecuaciones de Navier-Stokes, que es proporcional a la velocidad, la difusión isotrópica turbulenta es proporcional a la producción de energía cinética turbulenta, k . También, el parámetro δ_{id} para las ecuaciones turbulentas es llamado $\delta_{sd,T}$. Por lo demás, el método es el mismo.

Una regla de dedo para el valor de parámetro $\delta_{sd,T}$ es mantenerlo dentro del rango (0,0.5] y ajustarlo tan pequeño como sea posible para obtener la solución más exacta.

Mínimos cuadrados de Galerkin. (GLS, Galerkin least-squares)

Este método es una versión avanzada del método de líneas de corriente opuestas de Petrov-Galerkin (SUPG, *Streamline Upwind Petrov-Galerkin*) que no perturba la ecuación original de transporte (ecuación A.1)

El orden de exactitud de este método es $O(h^{p+1/2})$. En donde $p \geq 1$ es el orden de magnitud de las funciones de aproximación y h es el tamaño del elemento finito.

La diferencia entre GLS y SUPG radica en que este último se limita a situaciones en las cuales los efectos de producción/absorción de la cantidad escalar transportada dominan sobre los efectos viscosos, mientras que GLS no tiene ese requerimiento.