



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Diseño de un equipo de recuperación de líquidos de gas natural empleando CFD

Marco Andrés Guevara Luna

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental
Bogotá D.C., Colombia
2015

Diseño de un equipo de recuperación de líquidos de gas natural empleando CFD

Marco Andrés Guevara Luna

Trabajo final presentado como requisito parcial para optar al título de:

Magister en Ingeniería Química

Director:

Ph.D. Luis Carlos Belalcazar Cerón

Línea de Investigación:

Ingeniería de Procesos: Diseño de Equipos de Proceso

Grupo de Investigación:

Grupo de Investigación en Calidad del Aire de la Universidad Nacional de Colombia

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental

Bogotá D.C., Colombia

2015

La preocupación por el hombre y su destino siempre debe ser el interés primordial de todo esfuerzo técnico. Nunca olvides esto entre tus diagramas y ecuaciones.

Albert Einstein

Agradecimientos

El desarrollo de este trabajo no hubiera sido posible de no ser por el apoyo por parte de HNA ingeniería Ltda en cuanto a equipo de cómputo y software requerido para las distintas etapas del proyecto. El tiempo de computo requerido fue de varios días, razón por la cual sin su paciencia no se hubiera podido llegar al buen término de este proyecto. Adicionalmente la ayuda de ESSS para solucionar los problemas del software y aclarar los términos del licenciamiento del mismo fue de gran importancia.

Debo agradecer también a un gran número de colegas, compañeros, familiares y amigos que me apoyaron con sus comentarios y compartieron conmigo sus increíbles experiencias y valioso conocimiento. Dentro de estos al ingeniero Sebastián Riaño quien compartió su conocimiento en el uso de Ansys Fluent conmigo antes de viajar a Estados Unidos a realizar sus estudios de PhD y a quien le deseo el mejor de los éxitos en su carrera. Agradezco las experiencias, anécdotas y buenos momentos al ingeniero Jaime Isaías Buitrago quien me ha apoyado en todas las etapas del proyecto y llevamos trabajando juntos ya 2 años en HNA ingeniería Ltda. A mi director Luis Carlos Belalcazar quien me ha guiado con mucha paciencia y con quien tengo las mejores discusiones técnicas que podría desear debo un agradecimiento especial.

Varios de los conceptos técnicos más valiosos para mí se los debo a mi gran colega y hermano Fredy Guevara, quien me conoce lo suficiente como para discutir los detalles tanto técnicos como personales de la vida y ha sido un apoyo incondicional a lo largo de este proyecto así como muchos más que ya terminaron, otros que están en curso y los que aún están por venir. Agradezco a mis amigos y compañeros de estudio y trabajo, que son tantos que no podría nombrarlos a todos, que han sido parte importante de mi formación técnica pero más que eso de mi formación como persona.

Finalmente debo agradecer a mis padres ya que ellos siempre me han apoyado en todas las decisiones que he tomado y me han animado cuando ha sido necesario, que debo admitir ha sido en muchas ocasiones. Debo agradecerles por recogerme en la biblioteca de la universidad todas las semanas cuando salgo tarde de clase o de reuniones técnicas con mi director, y también porque hablando con ellos tuve muchas de las grandes ideas que hicieron posible el desarrollo técnico del proyecto.

Agradezco a mis jurados de trabajo final de maestría quienes hicieron importantes aportes para lograr llegar a este documento final, así como también a abrir las puertas a nuevas formas de aplicar esta herramienta en las actividades de ingeniería.

Finalmente agradezco a los lectores de este documento a quienes espero les sirva de ayuda y como motivación para seguir ahondando en el campo del diseño en ingeniería empleando herramientas avanzadas de modelamiento computacional.

Resumen

En el proceso convencional para el tratamiento de gas natural se emplean tres etapas: endulzamiento, deshidratación y control de punto de rocío (HDP: Hydrocarbon Dew Point). Este proceso permite llevar el gas natural a especificaciones según las entidades de regulación locales [11]. Desarrollos recientes muestran que es posible implementar un solo equipo capaz de realizar la deshidratación y el control de Dew Point en una misma unidad de proceso, disminuyendo así la cantidad de equipos requeridos y el consumo energético asociado a la operación. La compañía holandesa Twister Bv [20] ha desarrollado equipos supersónicos compactos de tratamiento de gas natural pero se desconoce toda la información relacionada con la geometría de sus internos.

Con el fin de diseñar uno de estos equipos y mejorar su rendimiento, en este trabajo y en asocio con la compañía colombiana HNA ingeniería Ltda, se empleó la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD) para diseñar un equipo de Recuperación de Líquidos de Gas Natural (LGN) y en especial determinar la geometría de los internos. Se empleó la información disponible para definir la geometría del equipo, a pesar de que esta es muy limitada. Se evaluaron varias geometrías posibles para este equipo considerando todos los detalles de sus internos, los resultados fueron comparados con la información experimental disponible correspondiente al perfil de presión del equipo [20]. La modelación CFD se desarrolló en estado transitorio, incluyó el comportamiento multifásico de los fluidos, la turbulencia, y la termodinámica. Para el desarrollo de estas simulaciones se utilizó un computador con 128 Gb de RAM y 2 procesadores Intel Xeon 16 core 2.0 GHz.

Uno de los fenómenos más complejos de modelar en CFD es la turbulencia. La literatura recomienda emplear el modelo de turbulencia RSM para simular la turbulencia en este tipo de flujos. Pero este modelo demanda grandes recursos computacionales. Una alternativa es emplear el modelo $k-\epsilon$ RNG modificado, sin embargo este modelo no ha sido probado. Los resultados de este trabajo indican que el modelo $k-\epsilon$ RNG modificado produce prácticamente los mismos resultados que el modelo RSM pero con una reducción de hasta un 25% en el

tiempo de computo. Adicionalmente, se determinó el valor adecuado del Factor de giro (Swirl Factor) con el cual se obtienen resultados más precisos con el modelo k- ϵ RNG modificado.

Se plantearon geometrías adicionales con el fin de mejorar la eficiencia del equipo en términos de la separación de LGN. El diseño final es un equipo para la recuperación de LGN con una eficiencia de remoción de líquidos de gas natural de 75%, la cual es un 11% más alta que la reportada por Twister BV [17]

Una de las mayores preocupaciones cuando se trabaja con este tipo de equipos en los cuales las velocidades de los fluidos son muy altas, es la pérdida de material debida a la erosión. Por tanto, en este trabajo también se evaluaron las regiones de mayor daño al equipo por erosión, se estimó la pérdida de material media debida a este fenómeno natural de la operación.

Finalmente, se concluye que es posible diseñar y mejorar el desempeño de este tipo de equipos empleando la tecnología CFD. Esto abre las puertas a procesos más eficientes, y por lo tanto ambientalmente más amigables, a la vez que representa oportunidades de desarrollo como temas de investigaciones futuras en áreas como procesos, mecánica, materiales y recubrimientos y control y automatización de procesos. La implementación de este tipo de procesos permitirá obtener ventajas competitivas frente a otras tecnologías de tratamiento de gas natural.

Palabras clave: Intensificación de Procesos, Ingeniería de Procesos, Diseño de equipos, Gas Natural, LGN (Líquidos de Gas Natural), Dinámica Computacional de (CFD), Ansys-fluent®, Control de Punto de rocío, Deshidratación, Endulzamiento.

Abstract

The conventional natural gas treatment process has three stages: sweetening, dehydration and dew point control. This process allows the natural gas to meet specifications according with the local regulation entities [11]. Recent developments show that is possible to design an equipment able to dehydrate and adjust the natural gas dew point in one single process unit, reducing the equipment and energy consumption. The company Twister BV [20] has developed supersonic compact equipment designs but the geometrical details are unknown.

Aiming to design one of these devices and improve their performance in this project and with the collaboration of the colombian company HNA Engineering, CFD was implemented for the NGL recovery process modeling and in special aiming to determine the internals geometry of the equipment. Available information was used to define the possible geometries. Possible equipment geometries were evaluated considering all the internal details, the results were compared with the experimental information available about the hydraulic profile in the equipment [20]. The CFD modeling was developed in transient state and the multiphase behavior of the fluids, the turbulence and thermodynamics were included. For the development of these simulations high computation capacity was used: 128 Gb RAM and 2 Intel Xeon 16 core 2.0 GHz processors.

One of the most complex phenomena to model using CFD is the turbulence. The literature [17] recommends the use of RSM to simulate the turbulence in this kind of flows. But this model requires a big computational capacity. One alternative is to implement the turbulence model $k-\epsilon$ RNG modified for swirl Flow, however this model have not been probed. The results obtained in this work indicate that the model $k-\epsilon$ RNG modified allows obtaining the almost the same results than RSM but with a computational time reduction of about 25%. Furthermore, the suitable value of swirl factor was determined to obtain more accurate results with the model $k-\epsilon$ RNG modified for swirl flow.

Further geometries were developed aiming to improve the performance of the equipment relating the separation efficiency of NGL, an efficiency of 75% was obtained, 11% higher than the value reported by Twister Bv [17].

One of the main concerns about the operation of this kind of high velocity flow equipment is the surface damage due to the erosion. For that reason in this document is presented an evaluation of the regions with more possibilities to be damaged considering the erosion effect, and was also evaluated the mean losses of material due to this phenomena of the operation of the equipment simulation.

Finally is concluded that is possible design and improve the performance of this kind of process equipment using CFD technology. This opens the doors to more efficient and environmentally friendly processes, at the same time it represents opportunities for future researches to be developed in fields as processes, mechanics, materials and coatings, automation and control of processes. The implementation of this kind of processes allows getting competitive advantages in comparison with other technologies for gas treatment.

Keywords: Process intensification, Process Engineering, Equipment Design, Natural Gas, NGL (Natural Gas Liquids), Computational Fluid Dynamics (CFD), Ansys-fluent®, Dew Point Control, Dehydration, Sweetening.

Contenido

	Pág.
FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	25
1.1 Especificaciones del gas natural en Colombia.....	25
1.2 Comportamiento termodinámico del gas natural	27
1.3 Formación de hidratos de hidrocarburos	28
1.4 Proceso convencional de tratamiento de gas natural	30
1.5 Proceso basado en separadores supersónicos	33
1.6 Contexto económico.....	35
1.7 CFD (Computational Fluid Dynamics)	37
1.7.1 Pre-Procesamiento	39
1.7.1.1 Elaboración de la Geometría y Definición del Dominio de Flujo	40
1.7.1.2 Desarrollo del Mallado	43
1.7.1.3 Criterios de Convergencia	45
1.7.1.4 Set-Up	47
1.7.2 Procesamiento.....	48
1.7.2.1 Software CFD	48
1.7.3 Pos-Procesamiento	52
1.7.3.1 Presentación de Resultados	52

1.7.3.2	Análisis de Resultados	53
1.8	Turbulencia.....	53
METODOLOGIA.....		57
2.1	Modelamiento CFD	57
2.1.1	Pre-Procesamiento.....	58
2.1.1.1	Elaboración de la Geometría y Definición del Dominio	58
2.1.1.2	Mallado	59
2.1.1.3	Criterios de convergencia.....	62
2.1.1.4	Set-Up.....	63
Modelamiento de la Dinámica de los Fluidos		63
Comportamiento Termodinámico		65
Modelamiento de las Fases Dentro del Equipo		65
2.2.	Selección de la Geometría y Validación del Modelamiento	66
2.3.	Mejoramiento del Equipo en términos de su eficiencia para la recuperación de LNG.....	72
2.4.	Modelamiento de la Erosión en el Equipo	73
RESULTADOS		75
3.1	Modelamiento CFD y Selección de la Geometría del Equipo	75
3.2	Validación del Modelo de Turbulencia.....	79
3.3	Mejoramiento del equipo en términos de su eficiencia para la recuperación de LGN82	
3.4	Modelamiento del Fenómeno de Erosión.....	88
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES		92
REFERENCIAS		96
ANEXOS.....		99

Lista de figuras

	Pág.
Figura 1-1: Estado termodinámico del gas de pozo y líneas de vapor saturado para el gas natural de pozo (Negro) y de venta (Naranja). Adaptado de [2].....	28
Figura 1-2: Proceso de expansión del gas natural de pozo debido a la caída de presión por el transporte. Adaptado de [2]	29
Figura 1-3: Esquema del proceso convencional de tratamiento de gas natural y oportunidad de intensificación de procesos - línea punteada. Fuente: esta investigación	32
Figura 1-4: Proceso de recuperación de LNG empleando refrigeración mecánica [2].....	33
Figura 1-5: Esquema conceptual de un equipo de separación supersónica [17].....	34
Figura 1-6: Datos de la demanda de gas natural en Colombia del 2004 al 2015 [30]	35
Figura 1-7: Distribución del consumo mundial de gas natural en el año 2014 [31].....	36
Figura 1-8: Etapas y actividades de un modelamiento CFD	39
Figura 1-9: Dominios para una simulación CFD (a) pieza sólida, (b) dominio de flujo en amarillo y dominio solido con transparencia [3]	41
Figura 1-10: Malla para los dominios sólidos y de flujo del sistema en la figura 1-9 [3].....	43
Figura 1-11: Ilustración de dos elementos tetraédricos de malla de diferente calidad, (a) elemento de mala calidad, (b) elemento de buena calidad [3]	44

Figura 1-12: Residuales de una simulación en estado estacionario para dos casos de convergencia, (a) buena convergencia, (b) mala convergencia.....	46
Figura 1-13: Monitor de temperatura promediada en el área para una superficie en una simulación CFD.....	46
Figura 1-14: Reporte de flujos de masa y calor por el software Ansys Fluent para una simulación CFD.....	47
Figura 1-15: Presentación de resultados para la simulación CFD de una bomba centrífuga [3]	53
Figura 1-16: Modelos de turbulencia según su tipo, complejidad y costo computacional. Adaptado de [1].....	55
Figura 2-1: Geometría (a) y dominio de flujo (b) para la simulación CFD de un equipo supersónico de recuperación de LGN. Fuente: esta investigación	59
Figura 2-12: Detalle de la malla para el dominio de flujo en la zona de recolección de LGN. Fuente: esta investigación	61
Figura 2-13: Distribución de la ortogonalidad en los elementos de la malla elaborada para el dominio de flujo del equipo de recuperación de LGN. Fuente: esta investigación	62
Figura 2-14: Representación gráfica de los parámetros geométricos seleccionados para el diseño del equipo de recuperación de LGN Fuente: esta investigación, adaptado de [17]	68
Figura 3-1: Correlación entre los perfiles de presión obtenidos de la simulación los datos experimentales. Fuente: Esta investigación y datos tomados de [20].....	77
Figura 3-12: Perfiles de presión, experimentales [20] y obtenidos de la simulación CFD, en función de la longitud del equipo de recuperación de LGN para la geometría seleccionada	78
Figura 3-13: Comparación de resultados cualitativos para los modelos de turbulencia evaluados , (a) RSM, (b) Swirl Factor 0.11, (c) Swirl Factor 0.09, (d) Swirl Factor 0.15.	82
Figura 3-14: Líneas de corriente de la simulación del equipo mejorado	87
Figura 3-15: Contorno general de la pérdida de material ($\text{kg}^1\text{m}^{-2}\text{-s}^{-1}$) de las paredes internas del equipo mejorado debido a la erosión. (a) Vista general, (b) Detalle del generador de vórtice. Fuente: el presente trabajo	90
Figura A3-1: Perfil de presión a lo largo del equipo empleando los dos modelos de turbulencia evaluados	109
Figura A3-12: Perfil de temperatura a lo largo del equipo empleando los dos modelos de turbulencia evaluados	109

Figura A3-13: Perfil de velocidad a lo largo del equipo empleando los dos modelos de turbulencia evaluados110

Lista de tablas

	Pág.
Tabla 1-1: Especificaciones del gas de Venta según la CREG [11]	25
Tabla 2-1: Principales parámetros geométricos considerados para la selección de la geometría del equipo	67
Tabla 2-2: Geometrías preseleccionadas para el diseño del equipo de recuperación de LGN. Fuente: esta investigación)	69
Tabla 3-1: Selección de la geometría.....	75
Tabla 3-2: Matriz de coeficientes de correlación entre los resultados obtenidos con RSM y los perfiles obtenidos variando el “Swirl factor” del modelo k-e RNG modificado	80
Tabla 3-3: Principales parámetros geométricos considerados para el mejoramiento del equipo en términos de eficiencia de separación de LGN.....	83
Tabla 3-4: Mejoramiento de la eficiencia del equipo de recuperación de LGN	85
Tabla A1-1: Condiciones de diseño para el equipo de recuperación de LGN	100

Introducción

La creciente demanda energética mundial ha llevado al desarrollo de nuevas tecnologías tanto en el área de energías renovables como en mejoras tecnológicas para la explotación, tratamiento y distribución de hidrocarburos.

El gas natural representa una de las más importantes fuentes de energía en el mundo y su demanda sigue en crecimiento. Esto hace que sea de interés desarrollar novedosas y más eficientes tecnologías que permitan tratar el gas natural. Esto con el fin de hacerlo apto para su distribución y uso sin incurrir en altos costos.

En Colombia la implementación de sistemas de tratamiento de gas natural está condicionada a que el gas tratado debe cumplir con las especificaciones según la Comisión Reguladora de energía y Gas del Ministerio de Minas y Energía [11]. Estas autoridades establecen las características que debe cumplir el gas que se dispone para uso industrial y doméstico en todo el país.

Con el fin de que el gas de pozo llegue a las condiciones a las cuales es posible su distribución y consumo, según las especificaciones establecidas por las autoridades para su distribución en Colombia y su uso tanto industrial como doméstico, es necesario un proceso de tratamiento de gas natural llevado a cabo en una planta o en instalaciones de superficie adecuadas para el procesamiento de hidrocarburos ligeros.

El proceso convencional que ha sido utilizado por muchos años para llevar el gas a especificaciones tiene las siguientes operaciones básicas:

- Separación primaria: Para retirar fases densas generadas durante el transporte del gas desde el pozo.

- Endulzamiento. Consiste en retirar los componentes ácidos del gas hasta cumplir con las especificaciones, esto se hace comúnmente en una columna de absorción con amina saturada en agua.
- Deshidratación. Es una operación de absorción en la cual con un glicol se retira el agua del gas natural hasta cumplir con la especificación.
- Ajuste de punto de rocío o Hydrocarbon Dew Pointing. Consiste en retirar los componentes pesados del gas natural con el fin de evitar que se formen fases condensadas durante la distribución del gas y también previene la formación de hidratos de hidrocarburos.
- Compresión. Es llevar el gas a la presión requerida para que sea transportado por el gasoducto que se encarga de su transporte y distribución.

Estas operaciones involucran un número considerable de equipos de proceso principal, fuera de las instalaciones requeridas para sistemas auxiliares. Por lo tanto, este proceso conlleva a la consideración de diversos aspectos técnicos que lo hacen costoso principalmente en su operación, dentro de estos aspectos se encuentran los siguientes:

- La necesidad de robustos sistemas de control debido a la cantidad de unidades y posibles fallas en los equipos principales así como los peligros asociados a los fluidos de trabajo.
- Almacenamiento y el respectivo licenciamiento de sustancias químicas de alto riesgo, ya que los agentes desecantes son comúnmente glicoles y para inhibir la formación de hidratos de hidrocarburos se emplean químicos como metanol que son altamente inflamables y requieren permisos de manejo de estupefacientes.
- Gran cantidad de sistemas auxiliares como gas combustible, aire para instrumentos y tratamiento de aguas aceitosas y residuales en grandes cantidades.
- Consumo eléctrico alto debido a la compresión necesaria para la inyección a los gasoductos que operan a altas presiones.

- Alta probabilidad de formación de hidratos de hidrocarburos comprometiendo la integridad de las instalaciones de la planta y transporte del gas.

Todos estos aspectos hacen necesario considerar nuevas tecnologías que sean menos complejas y costosas en su operación y mantenimiento, así como más estables y compactas. Esto es posible aplicando los principios de la intensificación de procesos y el modelamiento computacional, en este caso CFD (Computational Fluid Dynamics). Este trabajo representa un primer intento por llevar a cabo un diseño de equipos de proceso en Colombia empleando esta tecnología, ya que anteriormente esta alternativa de diseño no había sido explorada en este país para equipos de tratamiento de gas natural.

El diseño que se desarrolla en este trabajo es un diseño preliminar ya que el software CFD empleado (Ansys Fluent) no permite considerar en detalle la termodinámica del sistema. Sin embargo, CFD es la herramienta ideal para describir sistemas con comportamientos hidráulicos complejos. Investigaciones y desarrollos futuros deberán considerar una forma de implementar modelos termodinámicos detallados para los fluidos de trabajo, con el fin de obtener resultados más precisos. Además deberán implementarse a futuro pruebas a escala piloto con el fin de validar los resultados del diseño.

Este reto de diseñar un separador supersónico de LGN (Líquidos de Gas Natural) ya ha sido asumido anteriormente por la compañía holandesa Twister BV la cual es pionera en el diseño e implementación de un nuevo tipo de tecnología basado en el aprovechamiento del efecto Joule-Thomson y el comportamiento del gas en condiciones supersónicas de flujo. Esta tecnología reduce las operaciones de deshidratación y ajuste de punto de rocío a un único equipo, disminuyendo así la cantidad de equipos y con ellos la necesidad de un fluido desecante como lo son los glicoles en el proceso convencional. Adicionalmente se tiene una reducción considerable en los costos de servicios, área de equipos instalados y sistemas auxiliares.

Bajo este enfoque novedoso de procesamiento de gas se han generado diversos estudios económicos y técnicos, así como patentes y artículos con información básica sobre separadores supersónicos para tratamiento de gas natural. Aun así no existe información suficiente y precisa como para llevar a cabo el diseño detallado, el mejoramiento y la construcción de este equipo en nuestro país, la compañía colombiana HNA ingeniería se propone implementar un modelo computacional CFD que permita llegar a una propuesta de

diseño preliminar de un equipo que opere bajo los mismos principios físicos que el separador supersónico de Twister BV. El desarrollo de este diseño asistido por computador se realizó en colaboración con la Universidad Nacional de Colombia y es el contenido de este trabajo final de Maestría en Ingeniería Química.

Este trabajo final de maestría es un primer intento de diseño empleando CFD para este tipo de equipos avanzados, es además el primer diseño desarrollado con CFD para un separador supersónico en Colombia. A pesar de que Ecopetrol cuenta con una unidad de este tipo para tratamiento de gas natural en la estación de Gibraltar/Colombia, esta no fue diseñada por una compañía colombiana, el diseño se llevó a cabo en Holanda por la compañía Twister BV [20].

El presente trabajo tiene por objetivo general: emplear CFD para el diseño básico de un equipo supersónico compacto de recuperación de hidrocarburos condensados de gas natural.

Los objetivos específicos son los siguientes:

- Implementación del modelo CFD y definición de las estrategias de simulación que serán aplicados al diseño.
- Determinar la geometría y los parámetros de diseño del equipo para procesar el gas natural.
- Estimar los puntos de mayor erosión en el equipo.

Inicialmente se exponen los fundamentos teóricos que hacen parte del tema, tratamiento de gas natural, y como éste puede ser mejorado utilizando la tecnología CFD como herramienta de diseño. Una descripción de la implementación de CFD es contenida en esta primera etapa del trabajo.

La metodología desarrollada es descrita en detalle en cada una de sus etapas, de acuerdo con el procedimiento recomendado para realizar un diseño con CFD [3]. Esta contiene el pre-procesamiento, procesamiento y pos-procesamiento en detalle de acuerdo con las actividades propias de cada una de estas etapas. La elaboración de la geometría y la definición del dominio de flujo son expuestas, al igual que el mallado y la configuración (Set-up) de las simulaciones CFD empleadas.

En cuanto a la configuración del modelamiento CFD se definen los modelos matemáticos adecuados para representar la física del proceso, estos modelos corresponden a: los modelos

de turbulencia, ecuación de estado, modelo de acople presión-velocidad y método de solución de las ecuaciones discretizadas (ver Anexo 4 para mayor información). Adicionalmente se determinan los parámetros de cada uno de estos con especial atención en los parámetros del modelo de turbulencia seleccionado (k - ϵ RNG modificado para flujo circular, mayor información en el Anexo 4).

El procesamiento fue desarrollado en un equipo cuyas características son descritas dentro del presente documento, el pos-procesamiento contiene un análisis de resultados de tipo cualitativo y cuantitativo empleando las herramientas de análisis de las cuales se dispone para tal fin.

Ya que el recurso requerido en términos de tiempo para el proyecto es limitado se hicieron las siguientes aproximaciones y suposiciones:

- Se emplea el modelo multifase DPM (Discrete Phase Model- Modelo de Fase Discreta, Ver Anexo 4 para más información) para el modelamiento de las fases condensadas del sistema, haciendo uso del enfoque de fase lagrangiana que aplica para este caso según el criterio de fracción de volumen de cada fase dentro del sistema.
- Los efectos térmicos debidos a la formación de las fases condensadas dentro del sistema no son considerados, ya que la proporción de estas respecto del gas natural no supera el 2% en volumen.
- El sistema se considera como altamente turbulento con flujo de tipo circular, para lo cual se emplea el modelo de turbulencia RSM, ver Anexo 4 para mayores detalles.
- Las propiedades macroscópicas del gas (viscosidad, densidad, calores específicos, etc) se tomaron como las de un gas típico de la región Caribe del norte de Colombia, ver Anexo 1.
- Ya que Ansys no permite considerar el comportamiento termodinámico de los cambios de fases, y el interés principal de este trabajo final de maestría reside en el modelamiento con base en el comportamiento hidráulico para responder a un tema de interés para la industria nacional, no se implementó ninguna UDF (Función definida por el usuario) o rutina de usuario para modelar la termodinámica del sistema.
- Finalmente, la eficiencia en la recuperación de LGN presentada en este trabajo es sólo un indicador aproximado de la capacidad que tiene el equipo, puesto que los valores presentados están sujetos a las suposiciones que aquí se listan.

Finalmente se discuten los resultados obtenidos permitiendo concluir que es posible mejorar el desempeño de este tipo de equipos empleando la tecnología CFD. Esto abre las puertas a procesos más eficientes, y por lo tanto ambientalmente más amigables, a la vez que representa oportunidades de desarrollo como temas de investigaciones futuras en áreas como procesos, mecánica, materiales y recubrimientos, y control y automatización de procesos. La implementación de este tipo de procesos permitirá obtener ventajas competitivas frente a otras tecnologías de tratamiento de gas natural en la región.

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

1.1 Especificaciones del gas natural en Colombia

Las especificaciones del gas para venta en Colombia están establecidas por la Comisión Reguladora de Energía y Gas (CREG). Esta comisión es una entidad Colombiana dependiente del Ministerio de Minas y Energía.

La CREG establece que para poder distribuir, transportar o vender gas natural en Colombia es necesario que el gas tenga las siguientes especificaciones:

Tabla 1-1: Especificaciones del gas de Venta según la CREG [11]

ESPECIFICACIONES	Sistema Internacional	Sistema Inglés
Máximo poder calorífico bruto (HHV) <i>(Nota 1)</i>	42.8 MJ/m ³	1150 BTU/scf
Mínimo poder calorífico bruto (HHV) <i>(Nota 1)</i>	35.4 MJ/m ³	950 BTU/scf
Contenido de líquido <i>(Nota 2)</i>	Libre de líquidos	Libre de líquidos
Contenido total de H ₂ S máximo	6 mg/m ³	0.25 grano/100scf
Contenido total de azufre máximo	23 mg/m ³	1.0 grano/100scf
Contenido CO ₂ , máximo en % volumen	2,00%	2,00%
Contenido de N ₂ , máximo en % volumen	3,00%	3,00%
Contenido de inertes máximos en % volumen <i>(Nota 3)</i>	5,00%	5,00%

ESPECIFICACIONES	Sistema Internacional	Sistema Inglés
Contenido de oxígeno máximo en % volumen	0.1 %	0.1 %
Contenido máximo de agua	97 mg/m ³	6.0 Lb/MMscf
Temperatura de entrega máxima	49 °C	120 °F
Temperatura de entrega mínima	7.2 °C	60 °F
Contenido máximo de polvos y material en suspensión (<i>Nota 4</i>)	1.6 mg/m ³	0.7 grano/1000 scf
Punto de Rocío (HDP: Hydrocarbon Dew Point)	7.2°C	45°F

Nota 1: Todos los datos sobre metro cúbico ó pie cúbico de gas están referidos a Condiciones Estándar.

Nota 2: Los líquidos pueden ser: hidrocarburos, agua y otros contaminantes en estado líquido.

Nota 3: Se considera como contenido de inertes la suma de los contenidos de CO₂, nitrógeno y oxígeno.

Nota 4: El máximo tamaño de las partículas debe ser 15 micrones.

Las anteriores especificaciones cambian de un país a otro de acuerdo a lo que establezcan las autoridades locales. Estas especificaciones se plantean con base en las condiciones de operación comunes de cada región. Un ejemplo de esto es el valor de punto de rocío (HDP: Hydrocarbon Dew Point) en los países de latitudes altas como lo son Canadá y Rusia donde esta especificación tiene valores de entre 5 y 10 °F (258 y 261 K) mientras que en Colombia es de 45 °F (280 K).

En este caso es de importancia la especificación correspondiente al valor de punto de rocío, esta se define como la temperatura cricondentérmica y depende de la composición del gas. La presencia de componentes pesados (nC₆+, principalmente) que podrían condensarse durante el transporte debido a las condiciones operativas de los gasoductos hacen que el valor del punto de rocío sea alto, por este motivo se busca ajustar este valor, ya que el gas de pozo tiene típicamente valores de más de 200 °F (366 K) de punto de rocío.

Esto explica porque los países con temperaturas ambiente bajas tienen una especificación más rigurosa para el valor de punto de rocío en el gas natural. La naturaleza del gas natural se comprende más fácilmente usando su comportamiento termodinámico.

1.2 Comportamiento termodinámico del gas natural

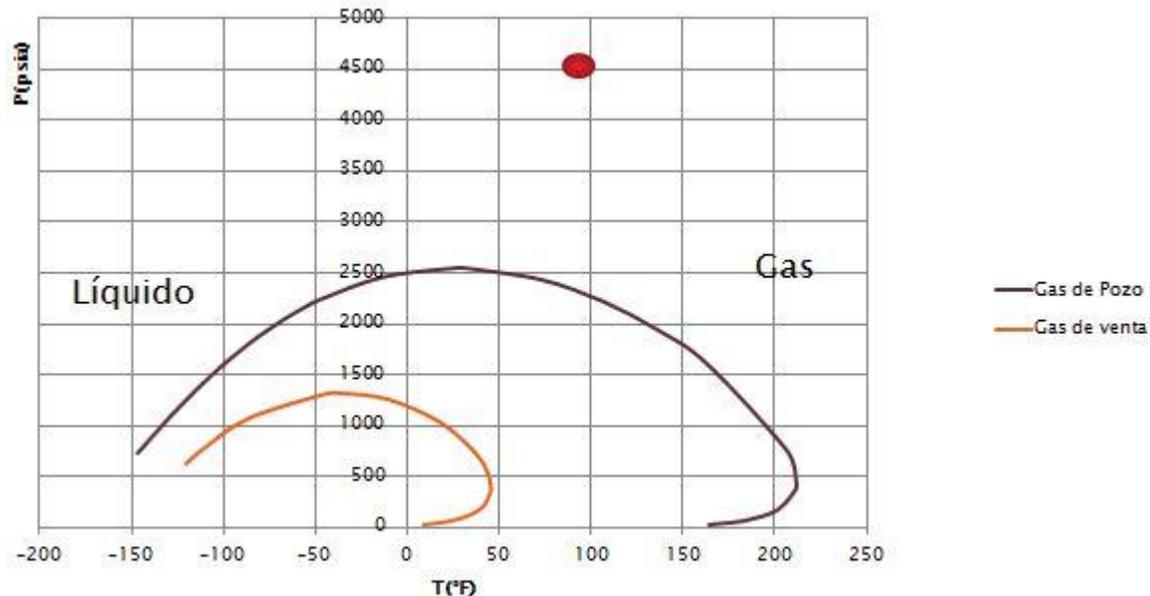
El gas natural es una mezcla multicomponente principalmente de hidrocarburos, agua y compuestos ácidos e inertes, la proporción de éstos depende de la formación geológica y del pozo. La Figura 1-1 muestra el estado termodinámico del gas natural en cabeza de pozo con un punto rojo, este consiste en un vapor a 4500 psia (30 MPa) y 80 °F (300 K), estos son valores típicos pero dependiendo del pozo pueden cambiar [2].

La humedad de un gas natural de pozo es considerable ya que se encuentra en estado de saturación con agua. De hecho el flujo de salida del pozo es a menudo bifásico ya que parte del agua se condensa a lo largo del ascenso de los fluidos durante la extracción. Al agua en estado líquido en la corriente de salida se le conoce como agua libre, mientras que el vapor de agua contenido en el gas es conocido con el nombre de agua asociada.

En el fondo del pozo el gas tiene temperaturas cercanas a 200 °F (366 K) pero debido a la caída de presión y a la condensación durante el proceso de extracción el fluido disminuye su temperatura a valores alrededor de 80 °F (300 K). Este estado termodinámico del gas en superficie es el también llamado gas en cabeza de pozo [2].

El gas en cabeza de pozo tiene un desarrollo de fases que se representa con la curva de color negro en la Figura 1-1. Esta curva permite apreciar que el gas una vez se ha extraído y está en superficie tiene una presión cricondenbárica cercana a los 2500 psia (17 MPa) y una temperatura cricondentérmica cercana a los 210 °F (372 K) para punto de rocío. Ya que la mayoría de los gasoductos transportan el gas a presiones menores a los 2000 psia (13.7 MPa) la disminución de la presión del gas llevaría a obtener un flujo bifásico en la tubería, lo cual trae consigo daños a la infraestructura de transporte y distribución así como problemas operativos entre los cuales están los altos costos, vibración, taponamientos por formación de hidratos, baches de líquidos, etc.

Figura 1-1: Estado termodinámico del gas de pozo y líneas de vapor saturado para el gas natural de pozo (Negro) y de venta (Naranja). Adaptado de [2]



Para evitar esta serie de problemas y daños a la infraestructura nacional de transporte y distribución de hidrocarburos ligeros la CREG ha establecido las especificaciones mostradas en la Tabla 1-1. Con el fin de obtener gas bajo estas especificaciones es necesario tratarlo por medio de diferentes procesos de separación, estos permiten llegar a un gas natural apto para su distribución y venta. La Figura 1-1 muestra el desarrollo de fases de un gas natural, con las características apropiadas para ser vendido en color naranja.

La Figura 1-1 permite observar que al disminuir el valor del punto de rocío a 45°F (280 K) la presión cricondenbárica también disminuye hasta valores cercanos a los 1500 psia (10.3 Mpa). Esto implica que con las caídas de presión durante el transporte en el gasoducto y en las tuberías de distribución el gas no presentará condensación, evitando así todos los problemas mencionados anteriormente.

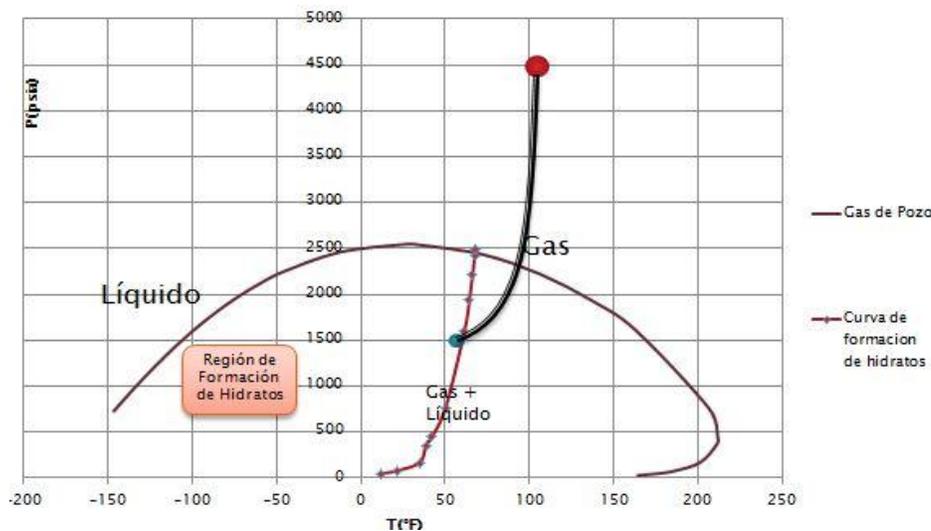
1.3 Formación de hidratos de hidrocarburos

Ya que el gas de cabeza de pozo se encuentra a una presión aproximadamente de 4500 psia (30 MPa) (Figura 1-1) transportarlo a esta presión sería costoso. La implementación de tubería a alta presión y accesorios de Rating mayor a 900# (2220 psig según la norma ANSI 16.5) conlleva a que económicamente la construcción y mantenimiento de una línea de transporte

sea inviable. Además de los riesgos asociados a unas condiciones de operación tan exigentes en caso de fallas como fugas y detonaciones [9].

Con el fin de evitar los sobrecostos y riesgos asociados al manejo de altas presiones en los gasoductos, el gas de pozo es sometido a una despresurización. Esta consiste en una caída de presión súbita que se lleva a cabo en la cabeza de pozo por medio de válvulas de despresurización llamadas chokes. La presión del gas a través de los chokes baja desde 4500 psia (30 MPa) hasta 1500 psia (10.3 MPa), esta expansión hace que la temperatura del gas también caiga desde 80 °F (300 K) a valores cercanos a los 55 °F (286 K) debido al efecto Joule-Thomson [2,9]. Este proceso de expansión súbita es esquematizado en la Figura 1-2 por la línea de color negro.

Figura 1-2: Proceso de expansión del gas natural de pozo debido a la caída de presión por el transporte. Adaptado de [2]



En la Figura 1-2 es posible apreciar como el proceso de expansión lleva a la formación tanto de dos fases (gas y líquido) como de hidratos de hidrocarburos. Los hidratos de hidrocarburos son sólidos que se forman a condiciones de altas presiones y bajas temperaturas en presencia de agua. Son la principal causa de taponamientos y problemas operativos en líneas y equipos.

Con el fin de evitar la formación de sólidos el gas debe no sólo ser tratado para disminuir su punto de rocío sino también deshidratado con el fin de evitar la formación de hidratos en los equipos de proceso de las plantas y en las líneas de transporte. Aun así mientras el gas es despresurizado y llevado a las instalaciones de tratamiento existe un alto riesgo de daños por la

formación de hidratos.

Una alternativa utilizada para contrarrestar la formación de hidratos en etapas previas a su tratamiento es el uso de agentes inhibidores de su formación, éstos son sustancias líquidas hidrofílicas como alcoholes y glicoles. En Colombia es común el uso de TEG (trietilenglicol) debido a que es también utilizado en el proceso de deshidratación de gas natural como agente desecante, otras sustancias como el metanol son empleadas debido a su alta eficiencia en la inhibición de la formación de estos sólidos, particularmente en Colombia su uso no es muy común debido a que es una sustancia regulada por la Dirección Nacional de Estupefacentes ya que es un alcohol empleado en la elaboración de sustancias psicoactivas.

1.4 Proceso convencional de tratamiento de gas natural

Para llevar el gas a condiciones adecuadas para su transporte y venta, por años se ha empleado un proceso basado en operaciones convencionales de separación. Una vez el gas natural crudo llega a las instalaciones de tratamiento se somete a una operación de separación inicial donde se retiran el agua libre, los sólidos y los compuestos pesados. En este punto se retiran todos los sólidos que pudieron formarse durante el transporte desde la cabeza de pozo o las arenas arrastradas por el gas en el fondo del pozo.

La Figura 1-3 muestra el proceso convencional una vez el gas ha pasado por la separación inicial en las instalaciones centrales de proceso o CPF (por sus siglas en inglés: Central Process Facility). En este mismo lugar el gas se somete a una operación de endulzamiento que consiste en una absorción reactiva con una solución de amina saturada en agua (de 30 % a 40 % en masa de amina) con el fin de retirar los compuestos que dan acidez al gas como CO_2 y H_2S . Comúnmente se emplea DEA (dietanolamina) ya que ofrece un buen rendimiento sin incrementar mucho los costos de operación. Esta operación se lleva a cabo en una columna y el diseño de los internos y su altura depende de las características propias del gas a endulzar como el contenido de CO_2 y H_2S que son los componentes cuyos contenidos en el gas están regulados por la CREG [11].

Ya que la solución de amina empleada para el endulzamiento tiene un alto contenido de agua el gas dulce que se obtiene de la operación está saturado con agua, esta situación hace que se requiera de una operación de deshidratación la cual se realiza en una columna de absorción.

En este caso la columna de absorción de gases es alimentada con el gas a deshidratar que está saturado en agua, el contenido de agua de un gas natural en estas condiciones es de alrededor de 200 lb-agua /MMscf (libras por millones de pies cúbicos estándar). Este gas entra en contacto con una solución líquida de un agente desecante comúnmente trietilenglicol (TEG) de 98% en peso con agua debido a su estabilidad y fácil recuperación [2].

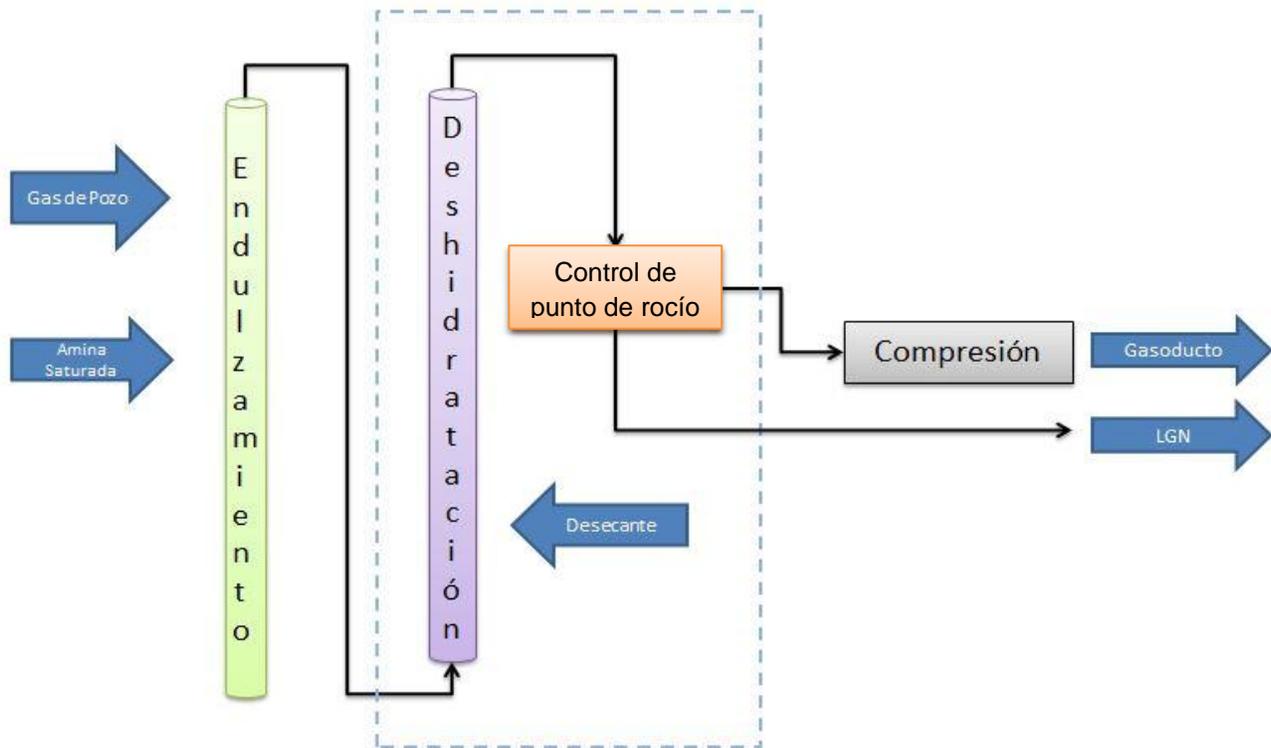
El TEG se encarga de absorber el agua contenida en el gas ya que es un agente de naturaleza hidrofílica, permitiendo obtener gas natural con un contenido de agua de menos de 6 lb-agua/MMscf que corresponde al valor máximo establecido por la CREG [11].

Las operaciones de endulzamiento y deshidratación se realizan a altas presiones, del orden de 1200 psia (8.2 MPa), y a temperaturas cercanas a los 90 °F (305 K). Estas se operan a alta presión ya que así se disminuyen los costos de operación debidos al consumo de DEA y TEG, a la vez que hace menos rigurosa la compresión al final del proceso. Para inyectar el gas al gasoducto se requiere de suficiente presión, por tal motivo operar la planta a alta presión permite disminuir costos de capital y operación en la batería de compresores [2].

Ya que el gas se encuentra deshidratado y no contiene cantidades importantes de compuestos ácidos que puedan dañar la infraestructura por formación de hidratos, o por corrosión, es posible llevar a cabo la operación de control de punto de rocío (Dew Point) o también llamada RECUPERACION DE LIQUIDOS DE GAS NATURAL (LGN). Esta operación busca disminuir el valor del punto de rocío retirando los componentes pesados del gas natural, también llamados Líquidos de Gas Natural (LGN).

Esta operación requiere que el gas esté deshidratado y endulzado dado que debe someterse a bajas temperaturas para condensar los componentes pesados del gas natural. Si el gas natural no está deshidratado puede formar hidratos obstruyendo las tuberías y equipos de proceso, y si no se encuentra endulzado, la corrosión causará daños a los equipos de proceso y tuberías, principalmente en las unidades de intercambio de calor.

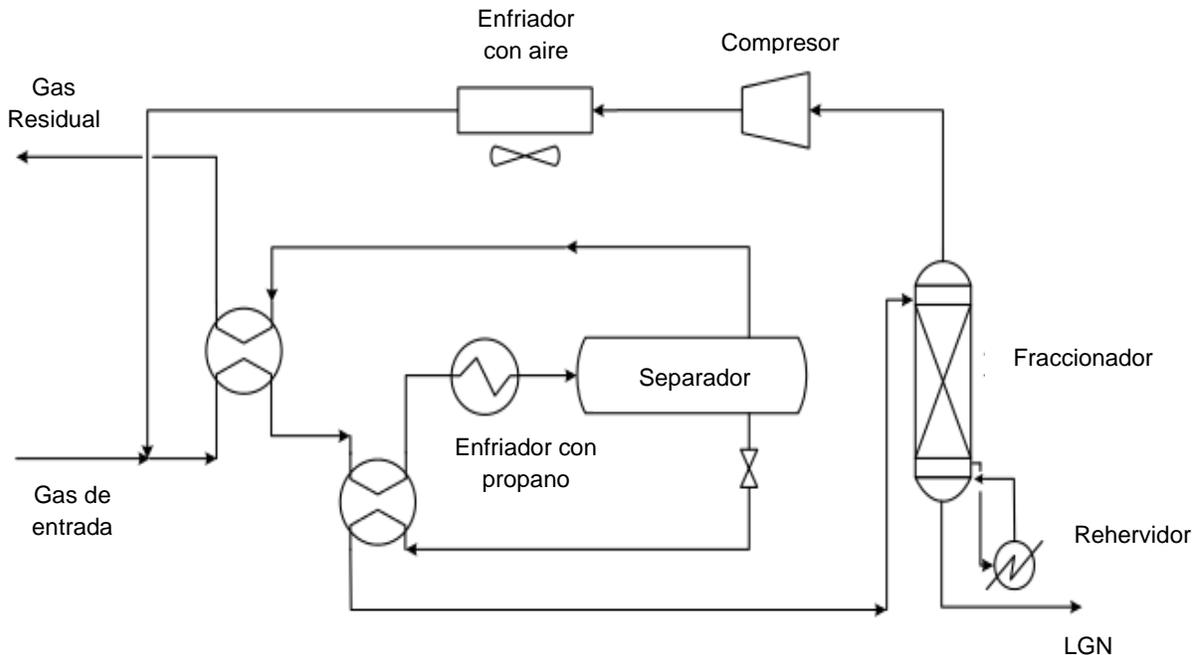
Figura 1-3: Esquema del proceso convencional de tratamiento de gas natural y oportunidad de intensificación de procesos - línea punteada. Fuente: esta investigación



La recuperación de LGN puede hacerse enfriando el gas por expansión súbita del gas empleando una válvula Joule-Thomson (si las presiones de operación lo permiten), o por simple refrigeración mecánica con una unidad de enfriamiento (chiller) [2]. Para ejemplificar el proceso llevado a cabo en la unidad de recuperación de LNG la Figura 1-4 contiene el proceso por medio de refrigeración mecánica con un enfriador que tiene como base un ciclo de refrigeración con propano como refrigerante.

En la Figura 1-4 el gas residual corresponde al gas que cumple especificaciones, para llegar a obtener este gas se tienen dos intercambiadores de calor que pre enfrían el gas de entrada para minimizar la carga de enfriamiento en el enfriador disminuyendo así costos de operación. Los hidrocarburos pesados deben ser retirados en un separador bifásico de baja temperatura.

Figura 1-4: Proceso de recuperación de LNG empleando refrigeración mecánica, Tomado de: [2].



Para que los condensados retirados en el separador puedan ser comercializados deben ser estabilizados en una torre de fraccionamiento, la estabilización consiste en retirar los compuestos volátiles (C4-) que pueden evaporarse a condiciones normales. En los procesos que tienen lugar dentro de los CPFs es importante estabilizar los LGN, ya la implementación de esta operación previene que una vez que los LGN son almacenados para su distribución a temperatura ambiente se generen atmósferas explosivas en las zonas de almacenamiento, o que haya evaporación de gases inflamables durante su transporte [2].

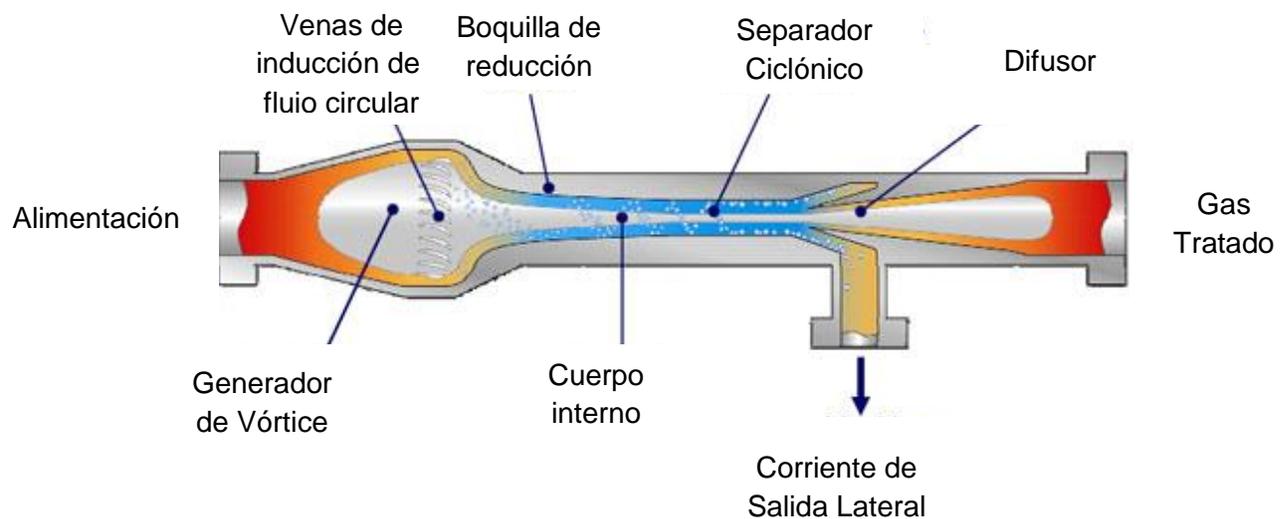
1.5 Proceso basado en separadores supersónicos

Como proceso alternativo al convencional y con base en los principios de la intensificación de procesos la compañía Twister BV ha diseñado un dispositivo de separación supersónico capaz de reunir la deshidratación y el control de Dew Point del proceso convencional en un mismo equipo. La Figura 1-3 muestra en un cuadro de líneas discontinuas estas dos operaciones que se pueden integrar en este caso. Este equipo también hace posible recuperar los LGN de forma

rápida y eficiente sin incurrir en el uso de agentes externos como inhibidores de formación de hidratos o agentes desecantes de gas natural [13,17].

El principio físico bajo el cual opera el separador supersónico es la generación de un flujo circular que se abre paso a lo largo de una tobera en cuya garganta se alcanzan las más bajas temperaturas y presiones (Figura 1-5), condiciones a las cuales se condensan los LGN de interés y se forman posibles sólidos. Las fuerzas generadas por el flujo circular (500000 g) [17,20] hacen que las fases pesadas se concentren en las áreas alejadas del eje del equipo, tomando provecho de esto se ubica después de la garganta del equipo un recolector de fases pesadas y posteriormente un difusor que busca recuperar presión.

Figura 1-5: Esquema conceptual de un equipo de separación supersónica, tomado de [17]



Este equipo debe operar a altas presiones por lo cual en muchas ocasiones se requiere de una etapa de compresión previa. Adicionalmente el equipo alcanza bajas temperaturas, del orden de 45°F (7.2 °C) de acuerdo a las especificaciones que deba cumplir el gas. Esto hace que la operación sea complicada, ya que se debe tener control preciso de la temperatura y presión del gas. Además se deben implementar robustos sistemas de control que consideren el comportamiento dinámico altamente inestable del fluido de trabajo, ya que habrá un gran número de fluctuaciones e inestabilidades debidas a cambios en el comportamiento de los pozos y condiciones meteorológicas principalmente.

Debido a la complejidad del equipo se diseñan varios dispositivos para cargas pequeñas que

oscilan entre 10 y 20 MMscfd (Millones de pies cúbicos estándar por día) con el fin de operar varios en paralelo y así dar flexibilidad al proceso. Cada batería de estos equipos tiene entre 4 y 6 separadores supersónicos conectados en paralelo con un separador de fases central al cual llegan las corrientes de los recolectores, esto con el fin de recuperar el gas que se pierde con los LGN, el agua y los sólidos.

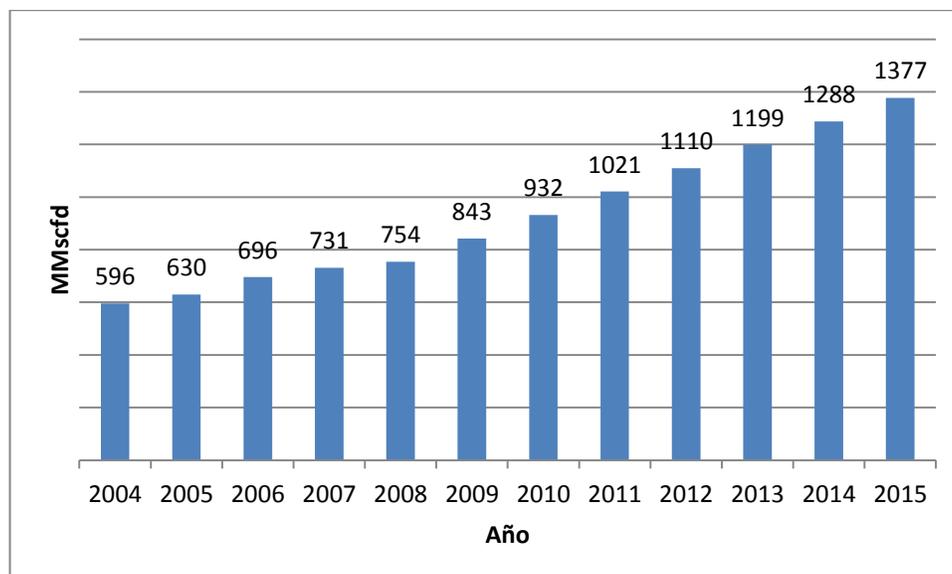
Twister BV cuenta con varias patentes en cuanto las piezas de los dispositivos de separación supersónica [18, 19, 21, 22, 23, 24]. Aun así no hay información suficiente disponible sobre los detalles geométricos de los internos de los equipos ni como estos afectan la operación para diferentes condiciones de operación.

En este caso se hace un primer acercamiento a la determinación de los factores geométricos involucrados en el diseño preliminar de este tipo de equipos.

1.6 Contexto económico

Colombia es un país productor de hidrocarburos que en los últimos años ha incrementado tanto sus índices de consumo como de producción de gas natural. La Figura 1-6 muestra el aumento en la demanda de gas natural a nivel nacional, para la última década, desde el año 2004 hasta el año 2014, y la predicción para el presente año 2015 [30].

Figura 1-6: Datos de la demanda de gas natural en Colombia del 2004 al 2015 [30].

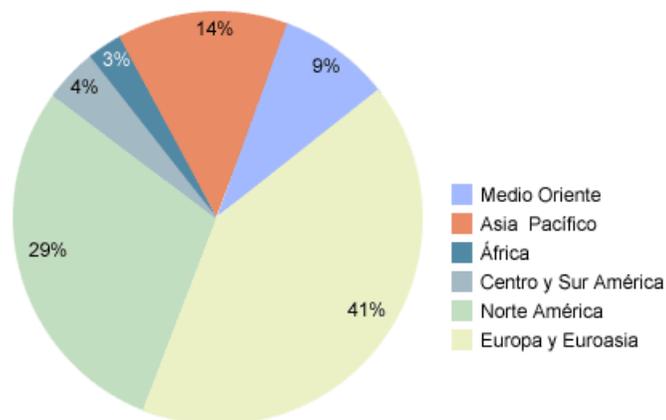


En la Figura 1-6 se puede ver que el aumento en el consumo de gas natural es importante cada año y que claramente ha tenido un alza constante en la última década. Considerando este aumento en la demanda es claro que el mercado para el gas natural, que es uno de los más importantes recursos de nuestro tiempo, representa una buena oportunidad de negocio para inversionistas nacionales y extranjeros

La demanda nacional de gas natural justifica que haya una inversión en nuevas y más eficientes tecnologías para tratar el gas natural. Frente a esta situación el sistema de separación supersónica de LGN se presenta como una tecnología novedosa y económica, sobre todo en términos de costos de operación [17].

Si se considera que la región de Suramérica representa el 4% del consumo mundial de gas natural (Figura 1-7), Colombia está localizada en una zona estratégica para la implementación de este tipo de tecnologías con el fin de abastecer esta importante demanda [31]. Además el desarrollo de tecnologías más eficientes que permitan llegar a un estado de competitividad frente a compañías internacionales es una de las bases del desarrollo y fortalecimiento de la industria colombiana.

Figura 1-7: Distribución del consumo mundial de gas natural en el año 2014 [31]



Ya que existe una importante oportunidad de negocio en la explotación del gas natural en Colombia y a nivel regional se justifica incurrir en costos de desarrollo e implementación de nuevas y más eficientes tecnologías que sean a su vez amigables ambientalmente con el fin de obtener rentabilidades mayores una vez el proceso se ha puesto en operación.

Las ventajas operativas en cuanto a ahorro en costos de operación y disminución del número de unidades de proceso con base en la intensificación de procesos hacen que la tecnología de separación supersónica de LGN sea un tema novedoso y de interés industrial para el sector de hidrocarburos, a la vez que justifica los esfuerzos hechos por las compañías del sector de Oil&Gas en todo el mundo.

1.7 CFD (Computational Fluid Dynamics)

El uso de métodos numéricos empleando herramientas computacionales para dar solución a los problemas de fluidos de forma detallada considerando las ecuaciones de Navier-Stokes como principio es llamado CFD, por sus siglas en inglés Computational Fluid Dynamics. Este enfoque de solución de problemas complejos de mecánica de fluidos surgió debido a la necesidad de entender y predecir matemáticamente el comportamiento complejo de los sistemas reales que involucran fluidos.

Para describir cuantitativamente un sistema de fluidos es necesario solucionar sistemas de ecuaciones diferenciales parciales correspondientes a los fenómenos involucrados (Ecuaciones de Navier-Stokes), estas ecuaciones no tienen solución analítica, salvo para algunos casos muy simplificados, razón por la cual es necesario el uso de herramientas de cómputo para dar solución numérica al problema, esta forma de describir el comportamiento de los fluidos es denominado CFD.

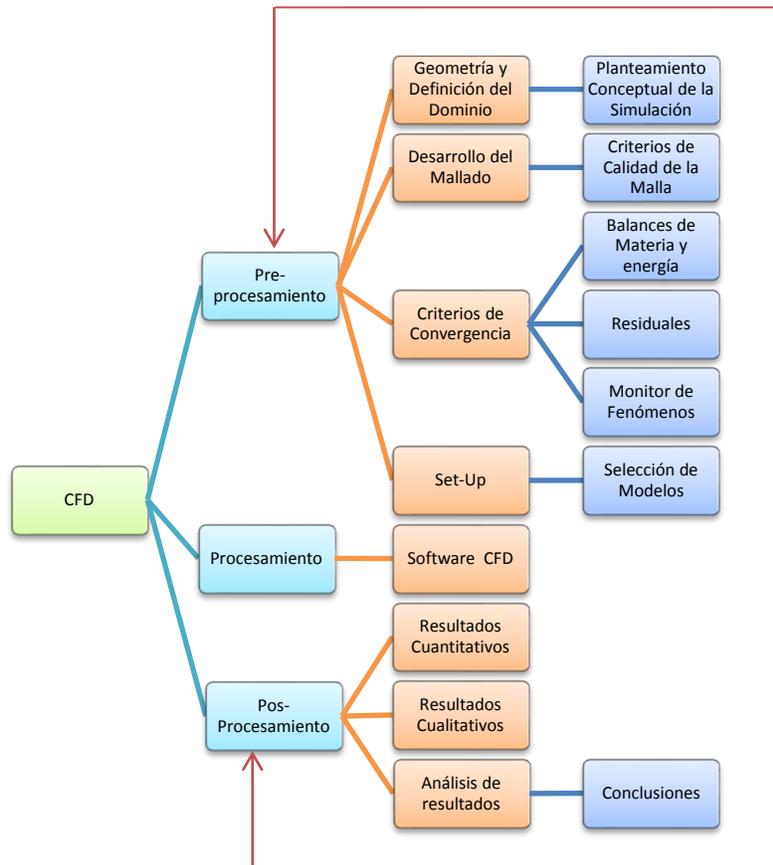
Las aplicaciones de esta forma de solucionar problemas de fluidos son muy amplias ya que puede ser implementada para cualquier sistema que involucre cualquier tipo de fluidos. Las áreas en las cuales es utilizada ampliamente esta tecnología son [3]:

- Ingeniería Ambiental.
- Hidráulica.
- Meteorología.
- Ingeniería mecánica.
- Ingeniería química.
- Ingeniería de procesos químicos y petroquímicos.
- Oil & Gas.

- Aerodinámica.
- Ingeniería aeroespacial.

El modelamiento de un proceso empleando CFD se basa en una metodología que comprende tres etapas principales: pre-procesamiento, procesamiento y pos-procesamiento [1,27,28,29]. Estos pasos reiterativos conforman la macro estructura del proceso para llevar a cabo un modelamiento CFD, y son aplicables también a cualquier tipo de modelamiento matemático empleando tanto simulación convencional de procesos como CFD. La Figura 1-8 muestra esquemáticamente la interacción entre las etapas del modelamiento y la forma en la cual se tiene una retroalimentación constante de los planteamientos iniciales a lo largo del desarrollo de una simulación de este tipo. También la Figura 1-8 contiene las actividades principales que deben desarrollarse en cada una de las etapas.

A continuación se describen en detalle cada una de las etapas de esta metodología y las actividades propias de cada una de estas dentro del proceso de modelamiento empleando simulaciones CFD.

Figura 1-8: Etapas y actividades de un modelamiento CFD. Fuente: esta investigación

1.7.1 Pre-Procesamiento

El pre-procesamiento es el planteamiento de la simulación, en esta etapa se definen los aspectos más importantes de la simulación así como la forma en que esta será validada. Deben definirse de forma muy concreta los objetivos de la simulación, los criterios de convergencia y demás insumos necesarios propios de un modelamiento CFD [1].

Uno de los aspectos más importantes que debe tener el pre-procesamiento es la definición de los objetivos de la simulación, ya que esto permite encaminar los pasos posteriores a obtener resultados que representen los fenómenos de interés con el fin de llegar a buenas conclusiones y toma de decisiones de ingeniería.

Esta etapa tiene una constante retroalimentación de los resultados obtenidos en simulaciones previas, por lo tanto es una etapa que hace a su vez de primera y última etapa. Debe tenerse en cuenta que la calidad de los resultados obtenidos depende fuertemente de la calidad de la

información que sea suministrada, esto aplica tanto para simulación convencional de procesos como simulaciones CFD. A continuación se discuten las principales actividades que la componen.

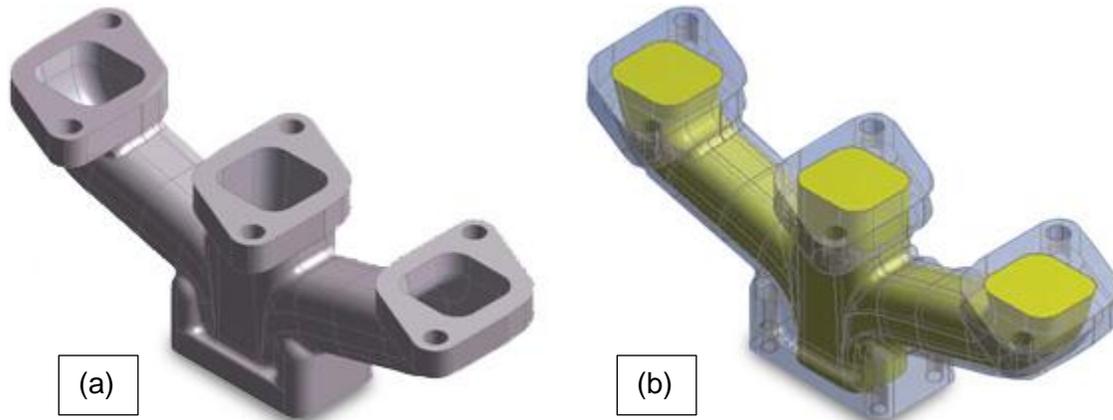
1.7.1.1 Elaboración de la Geometría y Definición del Dominio de Flujo

La elaboración de la geometría es un paso importante ya que esta debe considerar los detalles del sistema que será modelado, obedeciendo siempre a los objetivos de la simulación que sean establecidos desde un principio. En la mayoría de los casos se definen variables geométricas que hacen parte de una optimización para determinado equipo, esto precisamente es una de las grandes ventajas que presenta el modelamiento de procesos empleando CFD [1,28].

La elaboración de la geometría puede desarrollarse empleando cualquier tipo de software de diseño 3D, este es el primer paso de cualquier modelamiento por lo tanto se debe tener en mente que todos los pasos posteriores se verán afectados por la forma en que sea llevada a cabo esta actividad.

El desarrollo de la geometría debe hacerse teniendo en mente los resultados que se podrían llegar a obtener y como estos podrían afectarse por los detalles geométricos propios de cada sistema. Sin embargo considerar una cantidad muy grande de detalles puede llevar a que sea requerida una gran capacidad de cómputo en términos de recursos de Hardware y tiempo de simulación.

Figura 1-9: Dominios para una simulación CFD (a) pieza sólida, (b) dominio de flujo en amarillo y dominio sólido con transparencia [3]



El desarrollo de la geometría no es útil para un modelamiento empleando CFD si no se define el dominio de flujo correctamente. Con el fin de hacer esto los editores de geometrías 3D cuentan con diversas herramientas de limpieza de la geometría de trabajo. La Figura 1-9 ilustra como a partir de una geometría de trabajo puede definirse el dominio que corresponde al volumen de flujo que será utilizado para una simulación CFD. El tiempo de elaboración de la geometría y definición del dominio puede representar alrededor del 20% del tiempo total de un modelamiento CFD [1,3,28].

El dominio puede definirse como un único dominio o un sistema de subdominios acoplados, esto depende de la física objeto de la modelación y del tamaño del dominio. Por ejemplo, si el dominio es muy grande y simétrico es posible dividir este en varios subdominios o en un dominio con una frontera como eje de simetría reduciendo a la mitad la geometría original del sistema para su modelamiento. Sin embargo, esto no se recomienda para flujos altamente turbulentos debido a la naturaleza asimétrica tridimensional y dinámica del fenómeno.

Cuando el sistema presenta transferencia de calor entre fluidos sin mezcla, por ejemplo un intercambiador de calor de tubos y coraza, es posible dividir el sistema en tres subsistemas, el sólido del equipo, el fluido caliente y el fluido frío, y así modelar todo el sistema como un conjunto de tres subdominios acoplados.

En algunos casos debido a la complejidad geométrica del sistema la definición del dominio de flujo para los fluidos de trabajo no es tan simple, y se deben emplear algunas herramientas

computacionales especializadas ya que las simplificaciones pueden llevar a modelamientos erróneos de los fenómenos.

Software CAD 3D

Existen diversas herramientas computacionales que pueden ser empleadas para la elaboración de las geometrías y la definición de los dominios del sistema. Dentro de estas existen alternativas de tipo comercial y libre.

Software CAD 3D libre

Existen diversas alternativas con licencia libre para la elaboración de geometrías adecuadas para un modelamiento CFD, dentro de las más populares están:

- Salome
- FreeCad
- DraftSight

Software CAD 3D Comercial

En cuanto al software comercial para la elaboración de geometrías están disponibles los siguientes:

- Solid Works
- Ansys Design Modeler
- Autodesk Inventor
- Solid Edge
- CadWorx

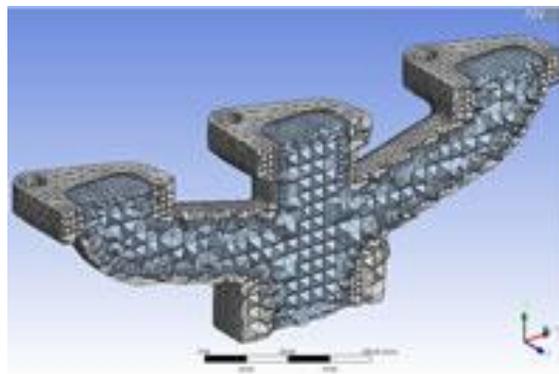
Las diferentes herramientas CAD que están disponibles tienen diversas ventajas y desventajas, en particular el software comercial tiene interfaces de usuario más amigables y claras con utilidades que facilitan el mejoramiento de los detalles de las geometrías que deben ser implementadas, estas bondades dependen de la máquina de la cual se disponga y del tipo de licencia que se adquiera. Por otra parte el software libre aunque es más ligero y permite obtener prácticamente los mismos resultados su interfaz de usuario no es tan sencilla haciendo que el tiempo requerido para llevar a cabo la elaboración de una geometría sea mayor al que se requiere si se utiliza software comercial.

1.7.1.2 Desarrollo del Mallado

El modelamiento CFD se basa en un enfoque numérico para resolver ecuaciones diferenciales parciales llamado volúmenes finitos, este consiste en dividir el dominio de flujo en volúmenes pequeños que conforman una malla tridimensional, esto se hace por medio de un procedimiento de discretización espacial llamado comúnmente como mallado. El mallado corresponde por lo tanto a la discretización del dominio de flujo [1,3,27,28]. Más detalles pueden consultarse en el Anexo 4.

El mallado es sumamente importante ya que las ecuaciones diferenciales parciales que describen los fenómenos de los fluidos en el dominio de flujo deben solucionarse numéricamente. La forma de hacerlo empleando el enfoque de volúmenes finitos es empleando una malla lo suficientemente fina y con elementos de buena calidad que permitan garantizar la convergencia y precisión de los resultados. De este modo en CFD la solución es siempre dependiente de la malla en alguna forma. La Figura 1-10 muestra la malla correspondiente a la geometría de la Figura 1-9.

Figura 1-10: Malla para los dominios sólidos y de flujo del sistema en la figura 1-9 [3]



La etapa de desarrollo de la malla es la etapa que más tiempo de trabajo de ingeniería requiere en términos de horas de ingeniería, este puede estar alrededor del 40% del tiempo total de trabajo. Lograr una malla que pueda ser manejada por el equipo de cómputo disponible y que al mismo tiempo tenga una buena calidad para llegar a soluciones representativas requiere de varios intentos, horas de revisión de la calidad de la malla y replanteamientos de la misma [1,3].

Criterios de Calidad de la Malla

La calidad de la malla generalmente se revisa empleando ciertos criterios cuantitativos para los

elementos que la conforman. La mayoría de los criterios que son utilizados para evaluar la calidad de las mallas se centran en la forma de los elementos que la componen [3]. La Figura 1-11 ilustra dos elementos de calidad muy diferente, el elemento (a) es un elemento de muy mala calidad, mientras que el elemento (b) es un elemento con una muy buena calidad.

Figura 1-11: Ilustración de dos elementos tetraédricos de malla de diferente calidad, (a) elemento de mala calidad, (b) elemento de buena calidad [3]



Existen muchos criterios que se complementan unos a otros en cuanto a la calidad de la malla se refiere, en este caso se emplean únicamente dos que resultan ser los más importantes para este caso de diseño. Estos criterios cuantitativos consisten en tratar como variables de los elementos de la malla como si se tratara de una granulometría de sólidos. Las dos variables más importantes que determinan la forma de los elementos y con base en las cuales se definen los criterios son:

Ortogonalidad, Es una comparación entre una celda del mallado con un elemento volumen que corresponde a un cubo perfecto (un cubo con todas sus aristas iguales), el cubo perfecto tiene una ortogonalidad con un valor de 1. Como criterio de calidad de una malla que será empleada para una simulación CFD se toma el valor de la ortogonalidad del elemento con la peor ortogonalidad de toda la malla, y se debe cumplir que esta no sea menor a 1×10^{-3} . La simulación puede tener problemas de convergencia por la presencia de un único elemento de mala calidad, por tal motivo este criterio se plantea para el elemento de peor calidad de la malla. [3].

Skewness (o sesgo/asimetría), Este criterio de calidad de malla funciona de forma inversa al anterior. Un mal elemento tiene un Skewness ratio (o relación de sesgo o asimetría) cercano a 1, por lo tanto el criterio consiste en que el elemento con el mayor skewness ratio no debe superar el 0.98 [3].

Si los anteriores criterios se cumplen la malla se considera de buena calidad y no se presentaran problemas de convergencia durante la simulación. Sin embargo, puede que se tenga entonces una malla con demasiados elementos haciendo muy largo el tiempo de cálculo, para lo cual existen diferentes estrategias de mallado como lo es la utilización de elementos de diversas formas (hexaedros, tetraedros, poliedros), la selección de una de estas formas dependerá también de los fenómenos a modelar.

1.7.1.3 Criterios de Convergencia

Los criterios de convergencia son importantes ya que indican cuando la simulación ha llegado a su final y si la física de interés presenta inestabilidades y se requiere de modificaciones en los parámetros de las ecuaciones. También estos criterios permiten saber si es necesario emplear un modelo físico mucho más riguroso con el fin de obtener mejores resultados.

Toda simulación CFD debe tener al menos tres criterios de convergencia que deben cumplirse, de lo contrario la simulación diverge así arroje resultados [3]:

Residuales. Es la diferencia del valor actual de la función que describe uno de los fenómenos en el modelamiento respecto de la iteración anterior. Estas pueden ser seguidas durante el desarrollo de la simulación gráficamente (Figura 1-12) y así conocer el estado de la convergencia durante la etapa de procesamiento. En este caso se ilustran dos casos en los cuales uno corresponde a una buena (a) convergencia y otro a una mala convergencia (b) de la simulación [1,3,28,32].

Monitor de fenómeno(s). Es un seguimiento que se realiza a una de las variables que indican el comportamiento del sistema y de los fenómenos de interés durante el modelamiento con el fin de garantizar la convergencia y estabilidad de estos. Para que este criterio de convergencia sea útil debe tenerse conocimiento previo acerca del fenómeno. La Figura 1-13 muestra un monitor para la temperatura promediada en el área de una de las condiciones de frontera de una simulación CFD cuando esta variable tiende a estabilizarse garantizando así la convergencia plena del fenómeno de interés, que en este caso es el fenómeno de transferencia de calor [1,3,29,32].

Figura 1-12: Residuales de una simulación en estado estacionario para dos casos de convergencia, (a) buena convergencia, (b) mala convergencia

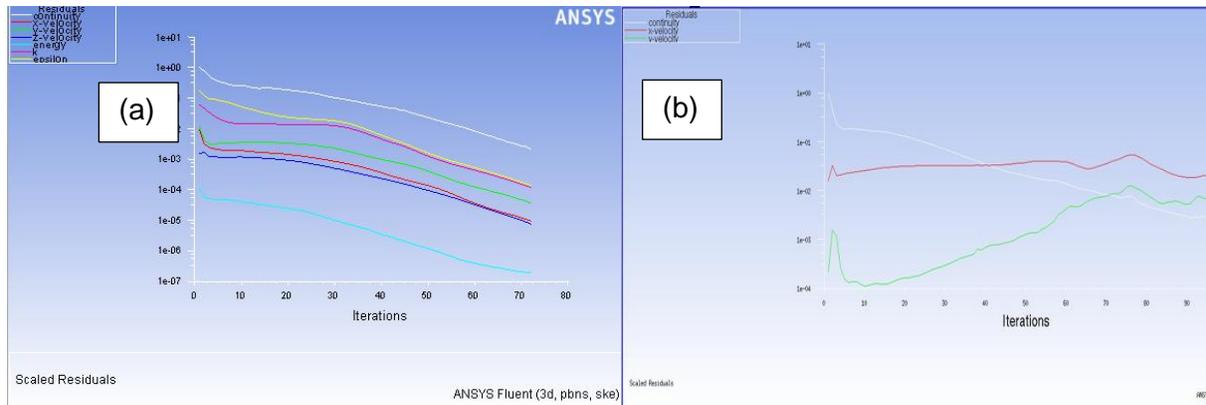
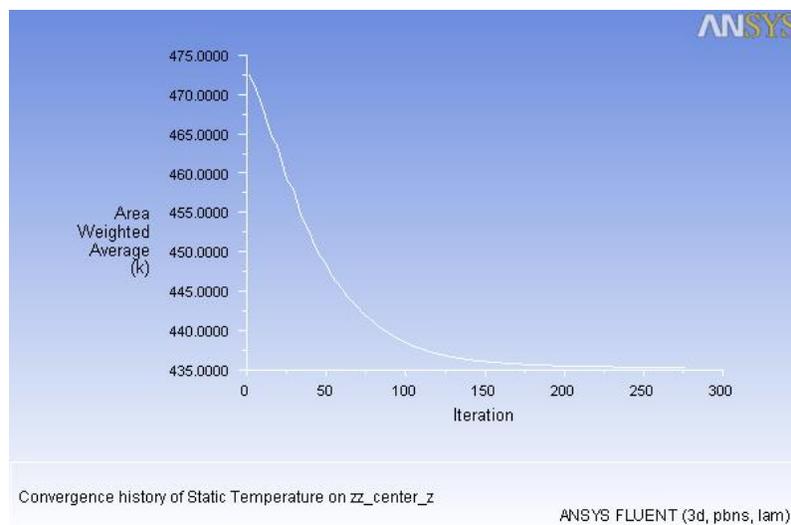
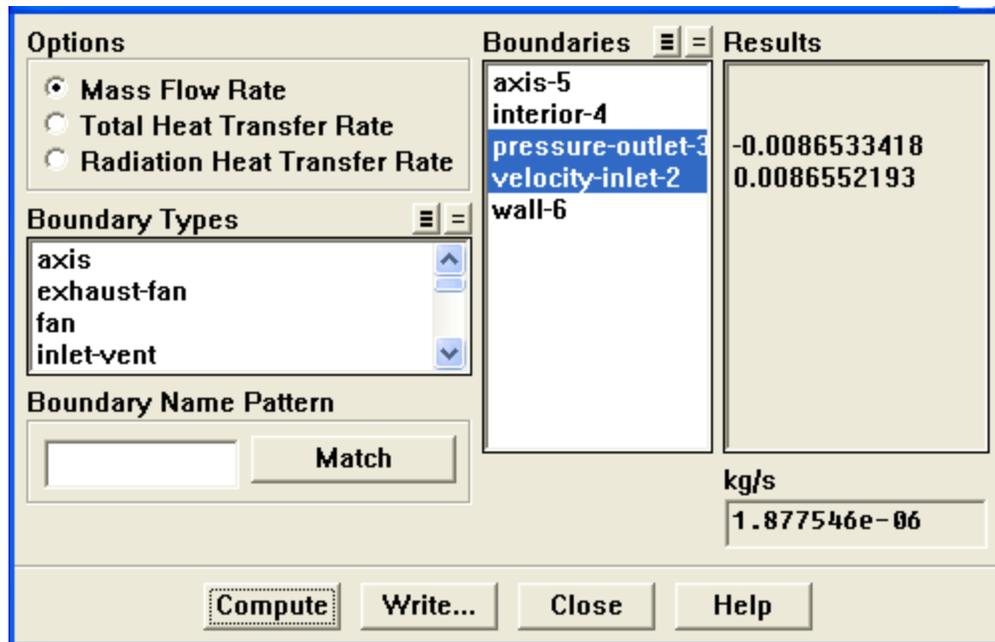


Figura 1-13: Monitor de temperatura promediada en el área para una superficie en una simulación CFD



Balance(s) de materia y energía. Los balances de materia y energía sobre el sistema deben cumplirse para el dominio. La Figura 1-14 ilustra la forma en que el software Ansys Fluent reporta los flujos de materia y energía, y realiza un balance general de estas cantidades para revisar que se cumpla la primera ley de la termodinámica en el sistema que se somete a la simulación. Los valores negativos son flujos de salida y los valores positivos son flujos de entrada, ya sean de masa o de calor [1,3,32].

Figura 1-14: Reporte de flujos de masa y calor por el software Ansys Fluent para una simulación CFD



1.7.1.4 Set-Up

La configuración del modelo o Set-Up corresponde a la definición de los detalles conceptuales del modelo CFD. Esta configuración debe contemplar una gran cantidad de detalles de acuerdo al proceso que se desea modelar, los fenómenos que se presentan o que se espera que se presenten y a las características de los fluidos [1,28]. Para conocer mayores detalles sobre los modelos remítase al Anexo 4.

Básicamente se deben definir los fluidos de trabajo y sus propiedades de ser necesario, ya que no se cuenta con un módulo que permita considerar en detalle la termodinámica del sistema, los fenómenos que se presentan, los algoritmos de discretización de las diferentes propiedades de transporte, naturaleza dinámica o estacionaria del proceso, condiciones de frontera, factores de relajación, modelos multifase, etc [1,26].

Claramente las consecuencias de emplear un modelo equivocado son bastante graves ya que podrían omitirse fenómenos o simplemente éstos podrían modelarse incorrectamente debido a la mala calidad del planteamiento.

Los aspectos que podrían llevar a muy malos resultados son comúnmente la mala selección del modelo de turbulencia o la mala selección y utilización del modelo multifase. Además de los

errores comunes en la definición del paso de tiempo y modelo de acople velocidad-presión. Hay disponible mucha información sobre estos temas en diversas fuentes en inglés, en este documento se presenta en el Anexo 4 la información teórica sintetizada en español.

En el trabajo que se presenta en este documento la selección del tipo de problema y el modelo de turbulencia son claves para llegar a buenos resultados, debido a la complejidad en términos de la hidráulica del equipo. Aquí el tipo de problema debe considerarse como Density-Based (Basado en Densidad) en vez de Pressure Based (Basado en Presión) debido a la naturaleza supersónica del proceso y al comportamiento compresible del fluido de trabajo [1,27,28,29]. Por otro lado, es importante tener en cuenta la cuidadosa selección del modelo de turbulencia para poder captar el fenómeno de flujo circular a lo largo del equipo, pues no todos los modelos son capaces de representar este comportamiento [1]. Aun así se busca emplear un modelo de turbulencia que sea lo suficientemente sencillo como para no incurrir en grandes tiempos de cálculo pero sin sacrificar en gran medida la precisión de los resultados en términos de la hidráulica del equipo, además debido a que este es un diseño preliminar que debe ser mejorado por medio de la implementación de rutinas que permitan considerar en detalle la termodinámica del sistema.

1.7.2 Procesamiento

El procesamiento es la ejecución del software que realiza la solución numérica de las ecuaciones diferenciales parciales que describen los fenómenos, lo cual es el principio del CFD. En esta etapa es básicamente el computador el que realiza el trabajo, mientras se hace seguimiento a las residuales y al monitor de las variables de los fenómenos de interés. El modelamiento termina cuando los criterios de convergencia definidos se han cumplido [1,29].

1.7.2.1 Software CFD

En el mercado mundial existe un gran número de software que se encuentra actualmente disponible para realizar modelamiento de procesos empleando la tecnología CFD. El software se encuentra disponible como software libre o como software comercial [3,32].

Software CFD libre

A diferencia de lo que se cree, hay una gran cantidad de software de licencia libre para hacer CFD en diversas aplicaciones tanto de carácter académico como industrial. A continuación se

listan algunos de los códigos abiertos CFD más comunes en el mercado, cabe aclarar que la mayoría de estos funcionan en sistemas operativos de UNIX, particularmente en Ubuntu-Linux. Aun así un buen número funcionan también en Windows, como es el caso de OpenFoam que a principios de este año (2014) lanzó una versión para este sistema Operativo [32].

- OpenFoam
- Code_Saturn
- SU2
- PyFR
- FEniCS
- Gerris Flow Flower
- Palabos
- Overture
- Clawpack
- OpenFVM
- FEATFLOW
- ISAAC
- Channelflow
- MOUSE
- QUICK'n SIMLE

El software libre presenta varias ventajas frente al comercial, una de ellas es que obviamente los costos en términos de software son nulos o prácticamente nulos, lo cual significa mayor rentabilidad y ventaja competitiva en cuanto a tarifas. Pero las ventajas no solo se encuentran en el aspecto económico, existe un gran número de ventajas técnicas que vale la pena resaltar. Una de las ventajas más interesantes es la posibilidad de utilizar la totalidad de la capacidad de cómputo sin incurrir en costos adicionales por licenciamiento y permisos para uso de procesadores en paralelo o clusters de varios equipos durante el desarrollo de una simulación.

Adicionalmente este tipo de software es constantemente actualizado y desarrollado por sus mismos usuarios, lo cual hace que haya innovación constante y mejoras continuas por parte de una comunidad mundial tratando temas relacionados con CFD. Las formas de mejorar las características del software en términos técnicos y hacerlo adaptable a las necesidades de cada simulación están a la mano de los usuarios. También debido a que gráficamente este tipo de códigos es más ligero y aprovecha mejor la capacidad del equipo de cómputo el tiempo de cálculo es menor al que se requeriría para la misma simulación en software comercial. Existe una ventaja clara en cuanto a la compatibilidad, ya que este tipo de software no tiene restricciones y esto hace que sean empleados varios tipos de formatos para mallas y geometrías sin inconvenientes.

Una desventaja notable es que las interfaces de usuario de este tipo de software no son muy amigables lo cual hace que el Set-up (o configuración) de una simulación tome más tiempo del que llevaría utilizando la interfaz de usuario de un software comercial para CFD.

El soporte técnico especializado puede ser escaso, y por lo tanto costoso en países como Colombia, por lo cual el usuario debe ser un buen conocedor del software y de la estructura numérica de la tecnología CFD.

Otra desventaja considerable es la velocidad de aprendizaje, pues tarda más tiempo dominar la tecnología CFD empleando software libre únicamente.

Software CFD Comercial

En cuanto al software comercial existe una buena oferta, aun así el mercado está controlado por algunas pocas suits, o paquetes de software, que se han posicionado sobre las demás en cuanto a CFD. A continuación se mencionan algunas de estas [3].

- Ansys Fluent
- Ansys CFX
- Comsol
- SolidWorks Flow Simulation
- ADINA
- FloVENT
- Flow Vision

El software comercial cuenta con ventajas en cuanto a uso por parte de usuarios poco conocedores del tema. Ya que la interfaz de usuario de un software comercial está diseñada para ser fácilmente asimilada por una persona que no requiere de profundos conocimientos en la dinámica de fluidos y su estudio empleando volúmenes finitos para poner en marcha una simulación. Adicionalmente el soporte es rápido y sólido, siempre y cuando se cubran los costos asociados a estos servicios. En países como Colombia existen varias empresas encargadas de dar soporte a este tipo de software representando una ventaja considerable frente al software libre en cuanto a cobertura y soporte oportuno.

La desventaja más grande que tiene este tipo de software es el alto costo de las licencias que deben adquirirse para poder emplear la capacidad total de la máquina y el software como tal. Por ejemplo, una licencia completa de Ansys está rondando los 70000 USD (año 2014). Adicionalmente el software comercial restringe las posibilidades de utilización de la capacidad de la máquina cuando la licencia no es la más completa. Esto hace que utilizar varios procesadores en paralelo o un clúster de varios equipos de cómputo para una simulación CFD sea bastante costoso en términos de licencia y software disminuyendo la ventaja competitiva de la compañía que realiza el proyecto en términos económicos. Sin embargo, en términos de horas de ingeniería puede ser más efectivo el software comercial.

La interfaz gráfica del software comercial tiene muy buenas herramientas que ayudan a las diferentes etapas del modelamiento, especialmente en cuanto al desarrollo de la geometría, definición del dominio, mallado y presentación de resultados, esto hace que el pre-procesamiento y pos-procesamiento se hagan en un menor tiempo que con software libre. Aun así no se tiene mucho control sobre las opciones que hay predeterminadas para modelos y condiciones de frontera, en caso de necesitarse un modelo especial o condición de frontera detallada para alguna propiedad se debe programar una UDF (User Defined Function - Función Definida por el Usuario), lo cual puede tomar bastante tiempo. Debe considerarse también que en general la mayoría del software comercial que se encuentra disponible en el mercado tarda más en la etapa de procesamiento que el software libre.

En cuanto a los formatos que pueden ser utilizados depende del tipo de licencia que se adquiera, una licencia más completa permite manejar una mayor cantidad de archivos de diferentes formatos para mallas o geometrías, e incluso resultados. Pero este beneficio está condicionado a los costos de la licencia.

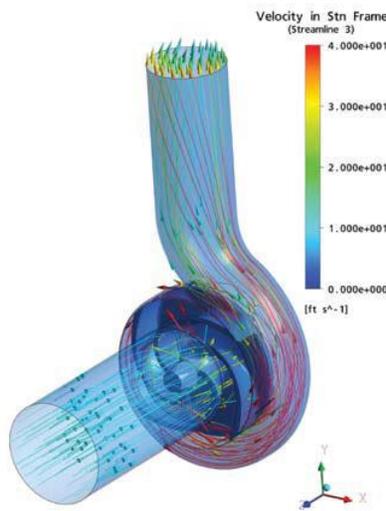
1.7.3 Pos-Procesamiento

El Pos-Procesamiento consiste en la visualización y análisis de resultados obtenidos del modelamiento previo. Con base a los análisis realizados en esta etapa se puede volver al Pre-Procesamiento para mejorar el modelo y la calidad de los resultados en la medida que el tiempo del proyecto y la capacidad de computación lo permitan [3,32].

1.7.3.1 Presentación de Resultados

Los resultados pueden mostrarse de forma cualitativa o cuantitativa dependiendo del tipo de análisis que sea requerido. El enfoque comúnmente utilizado es mostrar los resultados de las variables de interés de forma cualitativa, en forma de grafica como contornos, líneas de corriente o vectores, antes de mostrar resultados cuantitativos y realizar sobre éstos análisis más rigurosos. Esto debido a que gráficamente es más fácil identificar posibles inconsistencias en el modelo [1,3,27].

A diferencia de lo que se podría pensar, la etapa de presentación de resultados suele tardar bastante tiempo ya que es difícil encontrar la forma adecuada de organizar gráficamente los resultados importantes en cada caso, este tiempo es de alrededor del 30% del tiempo de trabajo en horas de ingeniería. Se debe buscar siempre que estos resultados sean lo suficientemente claros como para ser utilizados en la etapa posterior de análisis de resultados. La Figura 1-15 ilustra los resultados cualitativos de una simulación CFD para la succión, el rotor y la descarga de líquido en una bomba centrífuga en forma de líneas de corriente y vectores [3,32].

Figura 1-15: Presentación de resultados para la simulación CFD de una bomba centrífuga [3]

1.7.3.2 Análisis de Resultados

El análisis debe comenzar por los resultados cualitativos, ya que éstos deben ser consistentes numéricamente. Al mismo tiempo se debe considerar si la física que se espera es descrita al menos cualitativamente por el modelo antes de pasar a realizar un análisis cuantitativo más riguroso.

En un análisis cuantitativo las tablas y gráficas de las variables de interés como resultados de la simulación son comparados con datos experimentales, si se cuenta con éstos, si no es este el caso entonces se debe al menos realizar un análisis estadístico sobre los resultados de la simulación con el fin de validar la simulación y los modelos empleados así como los parámetros de las ecuaciones empleadas para dar solución al problema. Finalmente con base en los resultados obtenidos y el análisis de estos es posible plantear conclusiones para los objetivos del modelamiento CFD establecidos inicialmente.

1.8 Turbulencia

La turbulencia es un fenómeno tridimensional y dinámico que debe considerarse en el modelamiento CFD de separadores supersónicos. En este caso el flujo es subsónico, sónico y supersónico, y presenta además un patrón de flujo circular turbulento inducido por la geometría del equipo. Este como en muchos otros casos requiere de un modelamiento preciso de la turbulencia del flujo dentro del equipo de proceso.

La turbulencia es un fenómeno que hasta ahora es poco comprendido, la aleatoriedad de su comportamiento lo hace altamente inestable en el espacio. Los cambios energéticos de los flujos turbulentos requieren de aproximaciones para poder ser descritos y modelados cuantitativamente, en esta sección se hace un breve resumen de los tipos de modelos que se disponibles para describir flujos turbulentos. Información adicional al respecto puede ser consultada en el Anexo 4 del presente documento.

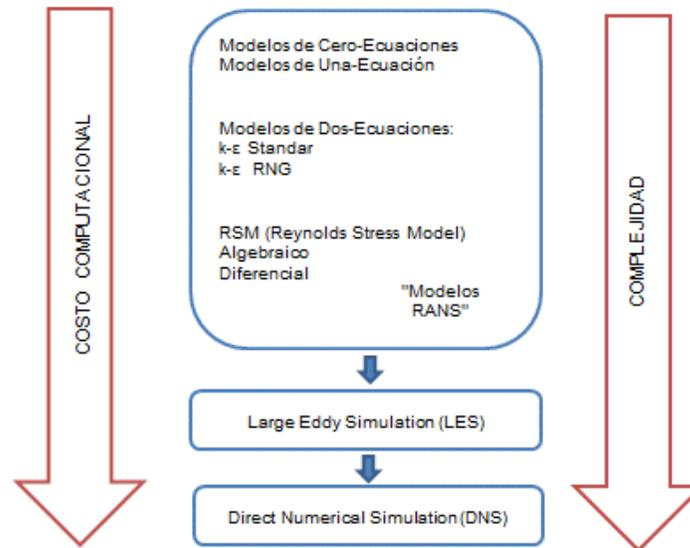
Para modelar la turbulencia existen varios enfoques (Figura 1-16), el primero consiste en los llamados modelos RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations). Este grupo de modelos se basa en dar solución a las ecuaciones de Navier-Stokes (Momento X, Y, Z y continuidad) para un flujo turbulento de forma discretizada y promediada en el tiempo, de ahí su nombre. Estas ecuaciones no pueden resolverse analíticamente para flujos turbulentos, por esta razón deben discretizarse y así plantear una forma de solución numérica, esto solo se logra si el paso de tiempo es muy pequeño lo cual implica un costo computacional muy alto. Para poder llevar a cabo la solución numérica de estas ecuaciones, éstas se transforman a ecuaciones “promediadas” en un intervalo de tiempo para así poderles dar una solución con los equipos de cómputo disponibles comercialmente en la actualidad.

El hecho de promediar estas ecuaciones en el tiempo implica un tratamiento matemático de las ecuaciones de Navier-Stokes del cual resultan dos grados de libertad adicionales que hay que satisfacer para dar solución al problema de flujo turbulento. En este orden de ideas los modelos RANS son una forma de completar estos grados de libertad del problema de flujo turbulento introduciendo cierto número de ecuaciones adicionales que deben solucionarse simultáneamente con las ecuaciones de Navier-Stokes.

Dentro de los modelos RANS el más utilizado es el modelo $k-\epsilon$ y sus modificaciones Este es un modelo semiempírico de dos ecuaciones ampliamente utilizado en la industria. Su amplio uso se debe a que los resultados que se pueden obtener son precisos en muchos problemas típicos de la industria con una rápida convergencia y aceptable capacidad de computación [1].

Los modelos RSM son un enfoque que busca determinar los elementos de los tensores de Reynolds involucrados en las ecuaciones de Navier-Stokes, debido a esto, resulta muy útil para el modelamiento de flujos altamente turbulentos con recirculaciones y patrones de flujo circular [1]. Al ser el más complejo de los modelos RANS para modelar la turbulencia, este modelo tiene unos requerimientos de capacidad de computación altos.

Figura 1-16: Modelos de turbulencia según su tipo, complejidad y costo computacional. Adaptado de [3]



Dentro de los otros tipos de modelos de turbulencia se encuentra el modelo LES, este modelo tiene como base una operación llamada “Low-Pass Filtering”, esta operación es aplicada a las ecuaciones de Navier-Stokes dando prioridad a los fenómenos que se desarrollan en las grandes escalas de la solución, reduciendo costos de computación. Su funcionamiento consiste en transformar las ecuaciones del flujo de fluidos con base en la solución al campo de velocidad permitiendo filtrar según la magnitud las escalas los resultados de menor relevancia, en donde las pequeñas escalas son eliminadas de acuerdo a las simplificaciones basadas en las teorías existentes de turbulencia y la capacidad de cómputo disponible [1]. En pocas palabras, solo considera las interacciones que se dan en escalas relativamente grandes dentro del sistema. Una de las limitantes de este modelo es que no se pueden realizar simulaciones en estado estacionario lo cual implica mayor tiempo de procesamiento.

Finalmente se encuentra el modelo de turbulencia DNS, este modelo es el más costoso en términos de capacidad de computación. Consiste en dar solución a las ecuaciones de Navier-Stokes discretizadas sin promediarlas en el tiempo, este enfoque requiere de pasos de tiempo muy pequeños y mallas muy finas razón por lo cual una simulación con este modelo resulta muy demandante en términos de tiempo y recursos de cómputo [1]. Una de sus grandes ventajas es que describe con una gran precisión el comportamiento de los eddies en escalas

tanto grandes como pequeñas, permitiendo obtener con gran detalle una descripción cuantitativa del comportamiento turbulento de los fluidos en movimiento dentro de un flujo en régimen turbulento.

Esta sección contiene sólo una descripción muy básica de los modelos y la forma en que opera un software para simulación CFD. El Anexo 4 de este documento contiene de una forma más detallada la teoría correspondiente a los modelos matemáticos y los métodos numéricos empleados para el desarrollo de simulaciones CFD.

METODOLOGIA

Para el modelamiento del equipo de recuperación de LGN fue utilizado el software Ansys Fluent, la licencia del software fue provista por la compañía HNA ingeniería Ltda. Este programa permite el desarrollo de simulaciones CFD con suficiente precisión como para ser empleado como herramienta en la actividad de diseño preliminar de proceso. Se seleccionó el software Ansys ya que se cuenta con los recursos necesarios para su utilización y sus herramientas hacen que el proyecto pueda ser completado en el tiempo esperado.

El equipo de cómputo utilizado fue un servidor diseñado para llevar a cabo este tipo de simulaciones, este equipo fue suministrado por HNA ingeniería Ltda. Para el desarrollo de este proyecto se utilizó un supercomputador con las siguientes características: **128 Gb RAM y dos procesadores Intel Xeon sixteen core 2.0 GHz.**

Para cumplir con los objetivos propuestos, esta investigación se desarrolló en cuatro etapas. En la primera etapa se definen todos los parámetros necesarios para la simulación CFD. En la segunda etapa se evalúan diferentes geometrías y configuraciones para seleccionar la más adecuada de acuerdo con los datos experimentales reportados en la literatura [17]. En la tercera etapa se evalúa el desempeño en términos de su eficiencia para la recuperación de LGN. Finalmente, en la última etapa se realizan las simulaciones necesarias para evaluar la erosión que ocurre en el equipo una vez este se encuentre en operación.

2.1 Modelamiento CFD

El modelamiento del equipo para llevar a cabo la separación supersónica más eficientemente empleando CFD requiere de ciertos pasos básicos. Estos pasos se encuentran dentro del marco de las etapas generales de un modelamiento matemático de un proceso (Figura 1-8) CFD [1,3, 32].

2.1.1 Pre-Procesamiento

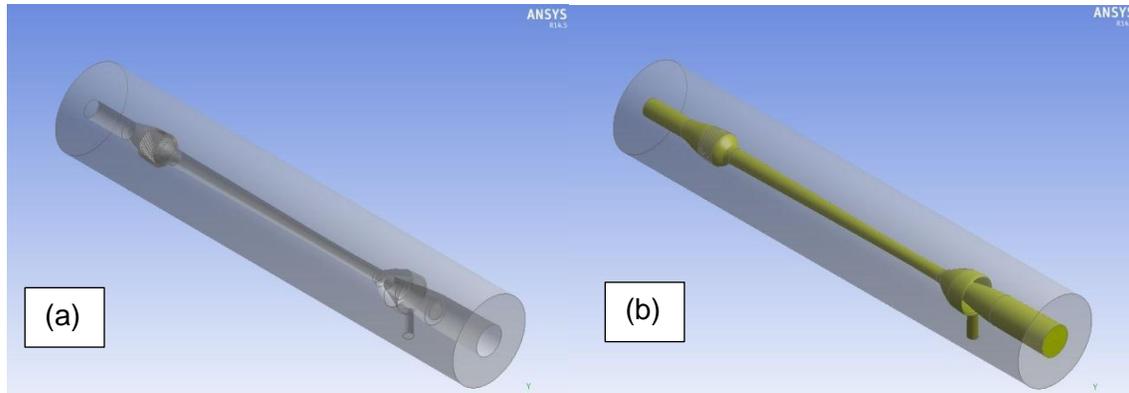
Esta primera etapa es de vital importancia en el modelamiento CFD, la calidad de los resultados obtenidos dependerá en gran medida de que tan bueno sea el desarrollo de esta etapa. Como se mencionó anteriormente en esta etapa se deben definir el objetivo principal que tendrá el modelamiento CFD. Para este caso de estudio el primer paso es determinar cuantitativamente el perfil de presión del equipo de recuperación de LGN modelando los fenómenos involucrados en la operación de éste para proponer posteriormente mejoras, y así obtener mejores eficiencias en la separación de LGN. Este análisis se realiza para llevar a cabo un diseño preliminar que considera principalmente la hidráulica, ya que el software Ansys Fluent no tiene un soporte termodinámico robusto que permita considerar adecuadamente la termodinámica del proceso sin la programación de rutinas de usuario.

A continuación se describen en detalle los pasos llevados a cabo para cada etapa del modelamiento CFD de acuerdo con la Figura 1-8.

2.1.1.1 Elaboración de la Geometría y Definición del Dominio

La elaboración de la geometría en este caso se realizó con base en la información disponible en la bibliografía [17,18,19,20,21,22,23,24,25]. Esta información fue utilizada para establecer las condiciones de diseño del equipo y la realización de cálculos hidráulicos previos con el fin de determinar los parámetros geométricos y operativos básicos que se consideraron en la elaboración de las geometrías de trabajo (Anexo 1). Una serie de patentes e información pública sirvió como base para elaborar las geometrías que fueron evaluadas para obtener perfiles hidráulicos que sirvieran para validar la simulación del equipo y esclarecer los parámetros geométricos principales del sistema.

Figura 2-1: Geometría (a) y dominio de flujo (b) para la simulación CFD de un equipo supersónico de recuperación de LGN. Fuente: esta investigación



Como se ha mencionado, solo se conoce parte de la información relacionada con la geometría y el dominio, hay detalles geométricos del equipo que se desconocen desde que esta tecnología comenzó a ser utilizada, especialmente en lo que se refiere a la hidráulica y los internos del equipo. Inicialmente se trabajó con un dominio y modelo geométrico base establecido a partir de los cálculos hidráulicos preliminares contenidos en el Anexo 1. Tan pronto los parámetros base de la simulación fueron definidos se procedió a modificar la geometría y el dominio para encontrar el más adecuado, que en este caso corresponde al diseño preliminar del equipo.

La Figura 2-1 ilustra la manera en que fue determinado el dominio para la geometría base. Para llevar a cabo este paso se utilizó el software Design Modeler de Ansys [3], este software se seleccionó para el desarrollo de esta etapa debido a que es una herramienta fácil de utilizar y su interfaz gráfica cuenta con diversas herramientas que facilitan la digitalización de los detalles propios de la geometría de este equipo como lo es la operación llamada llenado (Fill) que permite definir fácilmente el espacio interno de una geometría para una pieza sólida. En este caso este espacio corresponde al dominio de flujo del equipo de recuperación de LGN.

2.1.1.2 Mallado

Para la elaboración de las mallas se emplea el software Ansys Meshing [1,3,27]. Debido a que el mallado es la etapa del pre-procesamiento que más tiempo de trabajo en horas/ingeniero requiere tener un software con las herramientas de ayuda gráfica adecuadas puede repercutir

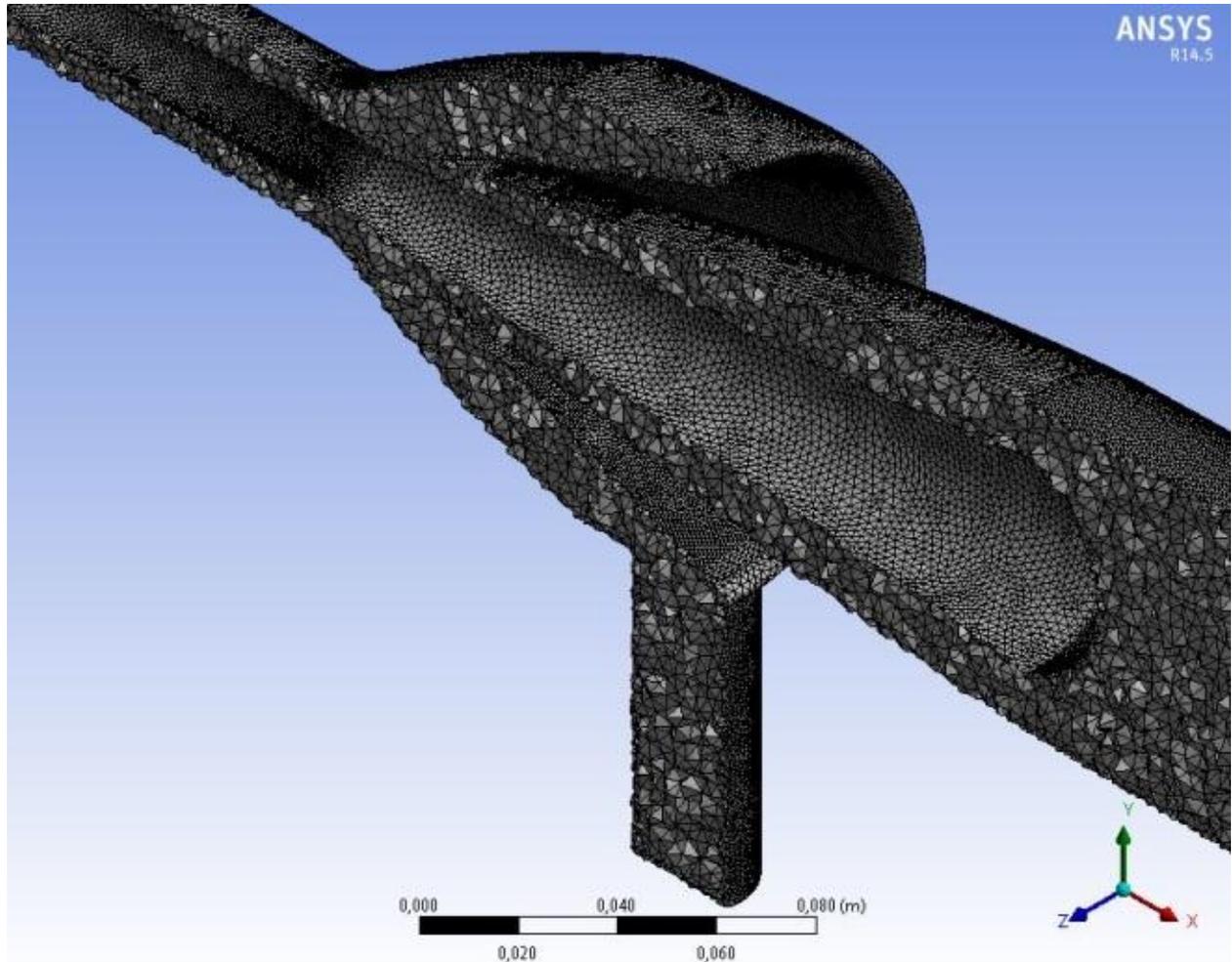
en una disminución considerable del tiempo del proyecto, por este motivo se seleccionó este software para este caso en particular. Debido a la complejidad del sistema la malla debe refinarse en varias secciones y sobre todo en donde el área transversal de transferencia es pequeña. Los parámetros para la realización del mallado se listan a continuación:

- Tamaño promedio de elemento: 1×10^{-4} m.
- Cantidad promedio de elementos en la malla: 1500000.
- Tipo de elementos: tetraedros.
- Relevance Center: 20.
- Smoothing: High.
- Transition: Fast.

Para mayores detalles sobre los parámetros de mallado, su importancia y funcionamiento en una simulación CFD puede remitirse a las fuentes citadas [1,3] o el Anexo 4 del presente documento.

La herramienta inflation (inflación) no fue utilizada debido a que la calidad de la malla podría verse afectada y no es de interés llevar a cabo un análisis detallado de los efectos de la pared y la capa límite. El tamaño de elemento promedio se determinó por medio de un análisis de los fenómenos y de forma paralela a la determinación de los parámetros del set-up de las simulaciones (Anexo 2 y 4). De este análisis desarrollado de forma previa se elaboró una malla gruesa definiendo únicamente el tamaño de elemento que se determinó, posteriormente se adicionaron las características mostradas arriba, una a la vez, para refinar la malla en las regiones donde el dominio tiene más detalles y es más estrecha el área de flujo.

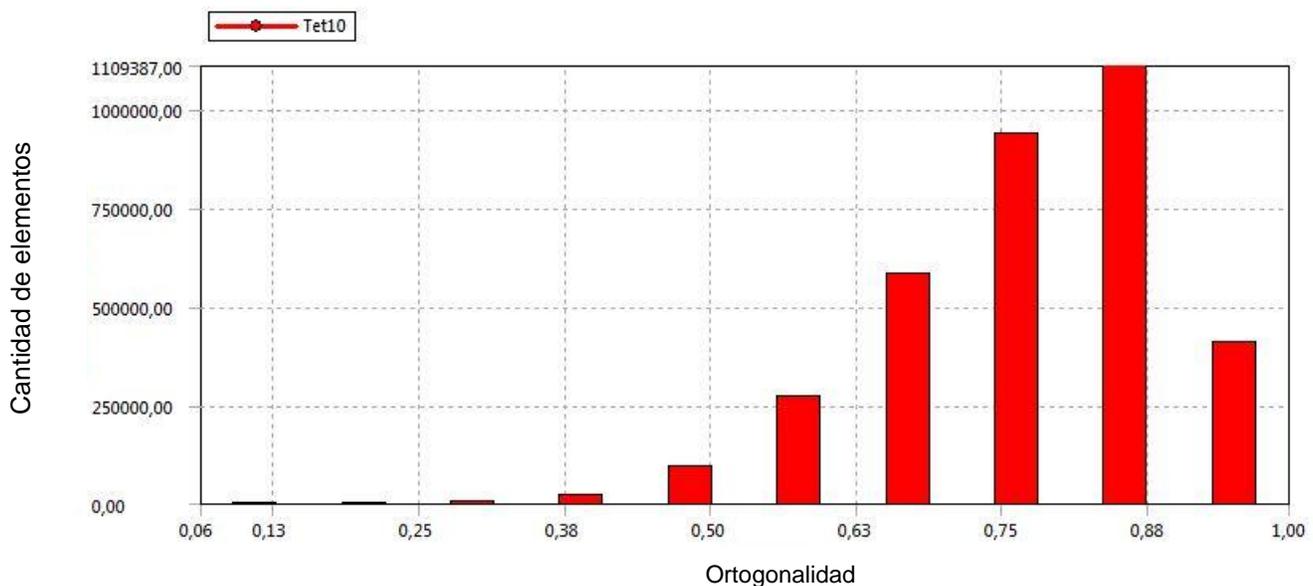
Figura 2-2: Detalle de la malla para el dominio de flujo en la zona de recolección de LGN.
Fuente: esta investigación



Para las mallas elaboradas, una por cada geometría, la calidad de éstas fue revisada empleando el criterio de la mínima ortogonalidad [3]. Este es un criterio cuantitativo que permite determinar si la malla es lo suficientemente buena como para no llevar a imprecisión en los resultados y problemas de convergencia durante las simulaciones CFD. Este criterio consiste en revisar la ortogonalidad del elemento con el valor más bajo de esta propiedad en toda la malla, y este valor debe ser mayor a 1×10^{-3} si la malla es lo suficientemente buena [3].

Con la configuración y los parámetros de mallado descritos anteriormente la calidad de la malla será muy buena, ya que el valor para la ortogonalidad más baja de los elementos de las mallas es de 0.03.

Figura 2-3: Distribución de la ortogonalidad en los elementos de la malla elaborada para el dominio de flujo del equipo de recuperación de LGN. Fuente: esta investigación



La Figura 2-3 muestra la distribución de la propiedad de ortogonalidad contra el número de elementos dentro de la malla con esta propiedad, donde el eje x se refiere al valor de ortogonalidad. Esta gráfica permite ver como es la calidad de los elementos de la malla en términos de su ortogonalidad.

Lo anterior permite entender porque se quiere que todos los elementos de la malla tengan un valor cercano a 1, o una distribución similar a la de la Figura 2-3. Al buscar que el peor elemento de la malla tenga una ortogonalidad mayor a 1×10^{-3} todos los elementos tendrán una calidad buena. El criterio se basa en el peor elemento debido a que la simulación puede divergir u obtener malos resultados solo por tener un único elemento de mala calidad.

2.1.1.3 Criterios de convergencia

Para obtener buenos resultados de un modelamiento empleando simulaciones CFD es necesario no solo tener una malla de buena calidad, también se requiere de criterios de

convergencia bien definidos de acuerdo con los objetivos del modelamiento que se quiere desarrollar.

Para garantizar una buena convergencia es importante definir por lo menos 3 criterios de convergencia diferentes [1,3]. Para este modelamiento estos se listan a continuación:

Residuales: las residuales para las ecuaciones de transporte y modelos de fenómenos que deben solucionarse se definen como 1×10^{-4} o inferiores.

Balances de materia y energía: La diferencia de la masa y energía entre las entradas y salidas del sistema se define como 1×10^{-4} Kg/s o W o inferiores respectivamente.

Monitor de fenómenos: la configuración del modelamiento debe considerar un monitor para la eficiencia en la recuperación de LGN. Se espera que este monitor no tenga más de 1×10^{-3} de diferencia entre pasos de tiempo para la simulación.

2.1.1.4 Set-Up

El Set-Up o configuración de las simulaciones que serán utilizadas para el modelamiento CFD del equipo se centra en la definición de los modelos que deben ser utilizados para representar los fenómenos de interés. A continuación se presenta en detalle el análisis de los modelos a utilizar para el modelamiento del equipo de recuperación de LGN.

Modelamiento de la Dinámica de los Fluidos

Debido a que se espera que dentro del equipo de recuperación de LGN se tengan velocidades que corresponden a números de Mach de entre 0.8 y 1.3 el modelamiento a realizar es muy complejo. La hidráulica del sistema debida a la condición de flujo supersónico hace que sea necesario un buen planteamiento de las simulaciones CFD. A condiciones supersónicas el gas natural se comporta como un gas compresible y altamente no ideal. Esto lleva a considerar en primera instancia que el tipo de solver que debe implementarse es Density-Based [1,3,26].

Una de las características particulares que tiene el flujo dentro de este tipo de equipos es el de flujo giratorio. El modelamiento de este tipo de flujo es complicado debido a que deben considerarse las interacciones de los volúmenes finitos del fluido de trabajo en el espacio tridimensional del dominio de flujo del equipo de recuperación de LGN. En este caso el flujo

giratorio es el que genera la fuerza centrífuga necesaria para separar las fases condensadas que se forman dentro del equipo. El modelamiento de este tipo de flujo requiere de un modelo de turbulencia apropiado. Estudios previos sugieren la utilización del modelo de turbulencia RSM (Reynolds-Stress-Model) [1,20,26], para mayores detalles ver el Anexo 4, sin embargo este modelo requiere mayor capacidad de cómputo. También es posible emplear el modelo k-ε RNG modificado para flujo giratorio (swirl flow), este modelo produciría resultados más rápido pero a la fecha su uso para la simulación de este tipo de flujos no ha sido ampliamente probado. En esta investigación se emplearon, evaluaron y compararon estos dos modelos de turbulencia. En este trabajo inicialmente se emplea el modelo recomendado por la literatura (RSM) y comparado con los datos experimentales con el fin de verificar que este modelo es apropiado para el caso particular de estudio. Posteriormente los resultados obtenidos de las simulaciones del equipo realizadas con RSM son comparados por medio de coeficientes de correlación con los resultados obtenidos empleando k-ε RNG modificado para flujo giratorio con varios valores para el parámetro factor de giro (Swirl Factor)

No fueron utilizadas simulaciones en estado estacionario debido a que la complejidad en la operación del sistema hace que el fenómeno de turbulencia deba ser considerado adecuadamente, en especial debido al flujo giratorio que tiene lugar dentro del equipo, y las simulaciones en estado estacionario son incapaces de representar este tipo de comportamiento debido a la naturaleza de la turbulencia misma.

La naturaleza tridimensional y dinámica de la turbulencia, y más cuando se trata de flujos complejos como es este caso, hace que sea importante el modelamiento del dominio 3D en estado transitorio. Para considerar con suficiente precisión el fenómeno de turbulencia que ocasiona el flujo circular que separa las fases por diferencia de densidad se implementaron simulaciones CFD en estado transitorio.

La configuración de las simulaciones se realizó con un paso de tiempo de 1×10^{-5} segundos, con 500 iteraciones en cada simulación. Fueron necesarias 5 horas de cálculo para el desarrollo de cada simulación, este tiempo es causa de la complejidad del problema que se trata, sobre todo si se considera que se utilizó una máquina de cómputo muy poderosa. Estos valores fueron establecidos paralelamente con el tamaño promedio de elemento de la malla por medio de un análisis previo, ver Anexo 2.

El paso de tiempo debe ser pequeño debido a las altas velocidades del fluido a lo largo del equipo durante el proceso [1]. El uso de pasos de tiempo más grandes hubiera llevado a obtener resultados imprecisos con posibles problemas de convergencia.

Comportamiento Termodinámico

El comportamiento compresible y altamente no ideal de los fluidos de trabajo del equipo, además del enfriamiento ocasionado por el efecto Joule-Thomson dentro del equipo hace que sea compleja la estimación de sus propiedades dentro de la simulación [2,26], esto es debido a que el software Ansys Fluent no cuenta con la posibilidad de considerar en detalle en comportamiento termodinámico del sistema como se mencionó anteriormente.

En este proceso la presión de operación alcanza valores de alrededor de 3 Mpa (500 psi) y bajas temperaturas del orden de 258 k (5 °F). A estas condiciones el gas natural se comporta como un gas altamente no ideal, esto hace necesario el uso de una ecuación de estado que permita estimar las propiedades PVT del gas natural dentro del equipo a las condiciones reales de operación [2].

Para este caso con el fin de estimar las propiedades del gas natural a las condiciones del proceso se implementó la ecuación de estado de Peng-Robinson [2]. Esta ecuación es lo suficientemente precisa en la estimación de propiedades hidrocarburos a estas condiciones de proceso.

Modelamiento de las Fases Dentro del Equipo

Este proceso busca separar las fases condensadas formadas a partir del gas natural que deben ser retiradas para llevarlo a cumplir con las especificaciones necesarias para su comercialización según la CREG. Las fases que se forman durante el proceso y que deben retirarse son condensados de gas natural (LGN), agua e hidratos de hidrocarburos [26,27].

En este caso con el fin de modelar el comportamiento multifase del sistema es necesaria la implementación de un modelo multifase apropiado para las simulaciones CFD. El modelo más apropiado para este caso es DPM (Discrete Phase Model) [3,26]. Para una mayor información sobre modelos multifase ver en Anexo 4.

DPM es un modelo basado en el enfoque de fase lagrangiana y cómo ésta interactúa con una fase euleriana, considera también la interacción que existe de esta con la fase continua del sistema. El criterio en el cual se basa la selección de este modelo para la simulación es principalmente la fracción de volumen de las fases condensadas. Ya que en el sistema estas fases no superan el 10% en volumen del dominio es recomendable el uso de DPM [26]. Para este caso particular la fracción en volumen de fases condensadas no supera 2%, lo cual hace que no sean importantes los efectos térmicos ni volumétricos por el cambio de fase, además ya que el proceso se da a velocidad supersónica los efectos viscosos son despreciables. Todo esto permite obviar las interacciones y fenómenos térmicos del gas con las fases condensadas presentes. El gas es la fase en mayor proporción y por tanto es la fase que determina la hidráulica del sistema que corresponde al principal interés en el desarrollo de este diseño preliminar de ingeniería.

Para la simulación multifase del equipo fueron implementadas 3 inyecciones de fases discretas lagrangianas (LGN, agua e hidratos) en medio de una fase euleriana continua (Gas natural). Estas inyecciones fueron ubicadas dentro del dominio del flujo del equipo en los puntos con las condiciones termodinámicas a las cuales cada una de las fases discretas se forma. Las posiciones de las inyecciones fueron definidas de acuerdo con los resultados de un modelamiento hidráulico inicial, empleando un gas típico del norte de Colombia (ver Anexo 1). Este enfoque para el modelamiento multifase es preciso y de fácil y rápida convergencia para este tipo de sistemas.

Las inyecciones se introdujeron considerando una distribución de rossin-rambler con diámetros de partículas entre 50 y 1000 micrometros, y un factor de dispersión de 3. Esto para todas las fases discretas empleadas en la simulación (para mayor información sobre el modelo multifase DPM ver Anexo 4).

2.2. Selección de la Geometría y Validación del Modelamiento

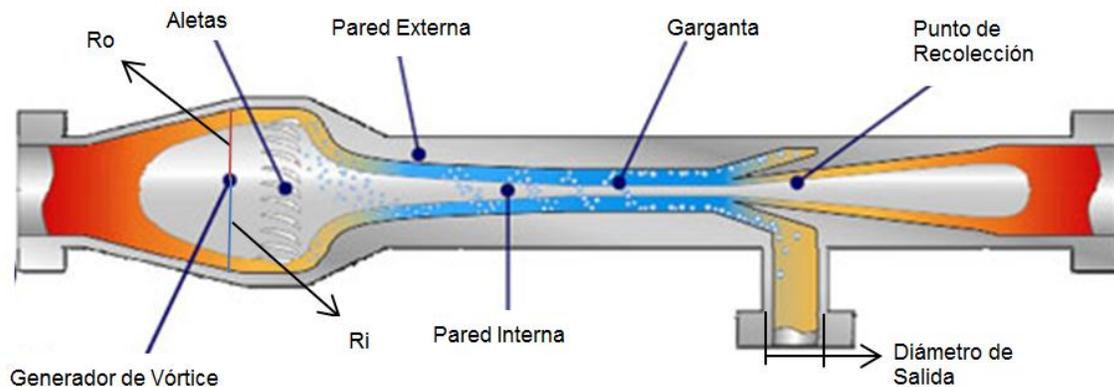
Para definir los detalles geométricos del equipo inicialmente se extrajo de la literatura toda la información posible, en la Tabla 2.1 se presentan los parámetros geométricos más importantes junto con información sobre la fuente de donde se obtuvo.

Tabla 2-1: Principales parámetros geométricos considerados para la selección de la geometría del equipo

Sección del Equipo	Variable	Rango	Comentarios
Generador de Vórtice	RO/RI [in]	1.72/1.39	Se estimó con cálculos hidráulicos (Anexo 1) a partir de la información disponible en la literatura [18,19,21,22,23,24]
	No. de Aletas	35-38	Se estimó este intervalo a partir de un conteo visual en los diagramas de la literatura [18,19,21,22,23,24]
	Angulo de las Aletas [°]	17-25	Intervalo reportado en la literatura [18,19,21,22,23,24]
Garganta y Recolector	RO/RI [in]	(0.45-0.93) / (0,24-0,47)	Se estimó con cálculos hidráulicos (Anexo 1) a partir de la información disponible en la literatura [18,19,21,22,23,24]
	Ubicación de la Garganta [m]	0.52-0.81	Se determinó este intervalo por medio de los perfiles de presión del equipo reportados en la literatura [20]
	Ubicación del Recolector [m] medidos desde el generador de vórtice	0.72-0.84	Se determinó este intervalo por medio de los perfiles de presión del equipo reportados en la literatura [20]
	Angulo del Recolector [°]	15-25	No hay información disponible sobre este parámetro, por esto fue determinado por medio de incrementos graduales hasta obtener convergencia y resultados coherentes.

Sección del Equipo	Variable	Rango	Comentarios
	Diámetro de Salida [in]	0.0165-0.02	Se estimó este intervalo a partir de relaciones geométricas desarrolladas sobre los diagramas de la literatura [18,19,21,22,23,24]

Figura 2-4: Representación gráfica de los parámetros geométricos seleccionados para el diseño del equipo de recuperación de LGN Fuente: esta investigación, adaptado de [17]



Los parámetros geométricos del equipo se muestran gráficamente en la (Figura 2-4), éstos fueron establecidos como las variables de diseño y mejora del equipo. Inicialmente se planearon alrededor de 60 simulaciones con varias combinaciones de estos parámetros geométricos, la mayoría de estas simulaciones fueron descartadas debido a resultados imprecisos en las condiciones de operación halladas o por problemas de convergencia. Posteriormente se preseleccionaron 9 posibles geometrías del equipo según lo que se conoce de su funcionamiento y dimensiones mayores (Tabla 2-1 y 2-2). Estas 9 geometrías se elaboraron definiendo valores para los principales parámetros geométricos dentro de los intervalos planteados con base en la información contenida en la literatura, los cálculos y estimaciones realizados previamente.

Las geometrías acá mostradas corresponden a las que produjeron resultados razonables dentro de los rangos de análisis para las condiciones de operación y que obtuvieron resultados cumpliendo con todos los criterios de convergencia planteados anteriormente.

Tabla 2-2: Geometrías preseleccionadas para el diseño del equipo de recuperación de LGN.

Fuente: esta investigación.

Generador de Vórtice			Garganta y Recolector					
Geometría	RO/Ri (in/in)	No. de Aletas	Angulo de las Aletas	RO/Ri (in/in)	Ubicación de la Garganta (m)	Ubicación del Recolector (m)	Angulo del Recolector	Diámetro de Salida LGN (m)
A	1.72/1.39	30	17°	0.82/0.65	0.52	0.7	21.4°	0.02
B	1.72/1.39	35	25°	0.89/0.69	0.51	0.73	20°	0.02
C	1.72/1.39	36	25°	0.93/0.43	0.52	0.72	20°	0.02
D	1.72/1.39	36	20°	0.46/0.24	0.7	0.74	20°	0.02
E	1.72/1.39	36	20°	0.48/0.29	0.68	0.72	15°	0.02
F	1.72/1.39	36	25°	0.787/0.43	0.67	0.82	22°	0.0165
G	1.72/1.39	36	25°	0.86/0.47	0.68	0.82	25°	0.0165

Generador de Vórtice			Garganta y Recolector					
Geometría	RO/Ri (in/in)	No. de Aletas	Angulo de las Aletas	RO/Ri (in/in)	Ubicación de la Garganta (m)	Ubicación del Recolector (m)	Angulo del Recolector	Diámetro de Salida LGN (m)
H	1.72/1.39	36	25°	0.87/0.39	0.81	0.84	21.6°	0.0165
I	1.72/1.39	36	25°	0.62/0.43	0.66	0.84	22°	0.0165

Las simulaciones para cada una de las geometrías propuestas fueron desarrolladas con los mismos parámetros para la elaboración de las mallas y la misma configuración (set-Up) para las simulaciones. Los resultados obtenidos en cada caso se compararon con los resultados de las pruebas experimentales desarrolladas por Twister BV [20] con el fin de definir la geometría base para la posterior mejora, a la vez que se valida así el modelamiento del equipo y los valores de los parámetros geométricos del mismo.

El planteamiento de los valores de los parámetros geométricos analizados se realizó de forma sistemática de acuerdo a la apreciación y análisis de los resultados de las simulaciones que llegaban a cumplir con los criterios de convergencia, revisando la sensibilidad de los resultados obtenidos al cambio en cada una de las magnitudes de los parámetros geométricos dentro de los rangos establecidos (Tabla 2-1 y 2-2).

Para validar el modelamiento CFD del equipo para recuperación de LGN fue utilizada la información experimental disponible en la literatura [20]. El perfil de presión a lo largo del equipo empleado durante pruebas piloto previas puede ser comparado con los resultados obtenidos del modelamiento con el fin de esclarecer todos los detalles geométricos del equipo y validar los resultados obtenidos de las simulaciones CFD desarrolladas. Cabe resaltar que los datos reportados por la literatura [20] corresponden solo a un perfil de presión de una única prueba y los puntos medidos a lo largo del equipo son sólo 11.

La forma en la que se desarrolla la comparación cuantitativa de los resultados obtenidos con los datos experimentales considera el valor de los coeficientes de correlación (R) entre los valores de presión calculados y experimentales a lo largo del equipo. De acuerdo con lo anterior se selecciona la geometría con más alto valor de coeficiente de correlación. En simulaciones CFD de flujos ciclónicos es común encontrar que los valores de coeficientes de correlación, entre datos experimentales y datos de simulación CFD, están entre 0.5 y 0.75, aun así aunque es poco común se pueden encontrar valores más altos de coeficientes de correlación dependiendo de aspectos como calidad de los datos experimentales y capacidad de procesamiento, además de la naturaleza propia de cada sistema. Estos valores moderados de coeficientes de correlación tienen lugar debido a que los flujos circulares son altamente turbulentos y su modelamiento involucra una gran cantidad de variables, especialmente las relacionadas con el flujo tridimensional debido a los tensores de Reynolds en las ecuaciones de transporte (Ver Anexo 4 para mayor información). De cualquier modo es importante resaltar aquí que en los estudios de modelación en ingeniería y en especial en modelación CFD, los coeficientes de correlación no son reportados de manera regular, esto impide evaluar de manera cuantitativa la capacidad de los modelos para reproducir la realidad.

R. Utikar, N. Darmawan, M. Tade, Q. Li, G. Evans, M. Glenny y V. Pareek, en el artículo citado [35], desarrollan una modelación CFD de un equipo con flujo circular, un ciclón, empleando tres modelos de turbulencia para la simulación del comportamiento hidráulico: $k-\epsilon$ (estándar), $k-\epsilon$ RNG sin modificar y RSM (Ver Anexo 4 para más información sobre estos modelos). En este artículo no se reportan de manera directa los coeficientes de correlación, sin embargo es posible calcularlos a partir de los resultados que se presentan. La Figura 3 del artículo citado [35] presenta los resultados obtenidos con CFD empleando los tres modelos de turbulencia y los datos experimentales para la relación de velocidades tangenciales en función de la relación de radios a lo largo del equipo. De los datos contenidos en esta figura es posible estimar los coeficientes de correlación entre datos experimentales y resultados de simulación para cada modelo de turbulencia empleado. Para el estudio [35] los valores de los coeficientes son: $R=0.0024$ para $k-\epsilon$ (estándar); $R=0.64$ para $k-\epsilon$ RNG sin modificar y $R=0.81$ para RSM.

El bajo valor obtenido por el modelo $k-\epsilon$ (estándar) es debido a que este es un modelo semiempírico incapaz de considerar los cambios tridimensionales de los tensores de Reynolds involucrados en los flujos circulares (ver Anexo 4 para mayor información).

Otro caso interesante es el reportado por Cutler A. D. y White J. A. en su artículo [36], en el cual desarrollan un modelamiento CFD para un flujo supersónico a través de un jet coaxial. Este estudio reporta comparaciones entre datos experimentales y resultados de modelaciones CFD para diversas variables del sistema. A modo ilustrativo la Figura 11 de la referencia citada [36] presenta datos experimentales de fracción molar de gas en el eje del jet y su comparación con varias simulaciones desarrolladas. Para la primera simulación desarrollada por los investigadores se puede estimar un coeficiente de correlación de 0.76, este es un valor típico para resultados empleando simulaciones CFD como se mencionó anteriormente.

De la misma manera que para las referencias [35, 36], se puede estimar el coeficiente de correlación obtenido por la compañía Twister BV para el modelamiento reportado en [20]. El equipo de CFD de Twister BV midió a escala piloto la presión a lo largo del equipo que es objeto del presente trabajo y presenta tanto el perfil experimental como el perfil obtenido de la simulación CFD realizada en la Figura 13. De igual modo, en dicho estudio no se reportan coeficientes de correlación. Sin embargo, se puede estimar el coeficiente de correlación del perfil medio de presión de la simulación CFD y los datos experimentales tomados sobre el equipo en operación como un coeficiente con un valor de 0.86.

De acuerdo con el criterio cuantitativo definido con base en el coeficiente de correlación se puede validar el modelamiento del equipo en cuanto a su geometría, mallado y modelamiento de los fenómenos que tienen lugar en el proceso.

2.3. Mejoramiento del Equipo en términos de su eficiencia para la recuperación de LNG

Una vez los parámetros de la geometría del equipo son conocidos es posible su mejoramiento en términos de su eficiencia en la remoción de LGN. Esto se hace realizando cambios a la geometría inicialmente determinada en la sección anterior.

Aquí se emplean los mismos parámetros de mallado y configuración de la simulación, de este modo los resultados serán comparables para poder seleccionar la más eficiente. La eficiencia en la separación de LGN para el equipo se estima como como:

$$eficiencia = \left(1 - \frac{C_{out}}{C_o}\right) * 100 \quad (2.1)$$

En la ecuación (2.1) [2] C_{out} es la concentración de LGN en la salida de gas natural tratado y C_o es la concentración máxima de LGN dentro del equipo. Estos valores son obtenidos de los resultados de las simulaciones CFD gracias a la implementación del modelo DPM para considerar el comportamiento multifase del fluido (para mayor información sobre el modelo multifase ver el Anexo 4). Para fines del desarrollo de este diseño preliminar esta eficiencia se estima en función de la distribución de las fases en las corrientes de salida del sistema. Esto permite considerar cuantitativamente el efecto de la hidráulica sobre la proporción de las fases involucradas en cada una de las corrientes, lo cual es la principal ventaja que se logra al emplear CFD.

En este punto, las características geométricas del equipo son clasificadas en dos principales secciones: generador de vórtice y, garganta y recolector. Para el generador de vórtice el radio interno y externo fue cambiado así como la cantidad y el ángulo de las aletas (Tabla 2-1 y 2-2).

Cambios en la garganta y el recolector del equipo fueron simulados también, considerando los radios internos y externos, la ubicación de la garganta y el recolector, el ángulo del recolector y el diámetro de la salida lateral para la recolección de LGN.

Estas características principales fueron definidas como las más importantes en el modelamiento y diseño del equipo, así como para su mejoramiento en cuanto a eficiencia, en este caso el cambio de los parámetros geométricos en busca de eficiencias más altas se realizó siguiendo el mismo procedimiento sistemático descrito para la selección de la geometría. Análisis adicionales cualitativos y cuantitativos sobre la operación del equipo fueron desarrollados.

2.4. Modelamiento de la Erosión en el Equipo

Finalmente se desarrolla un modelamiento básico de la erosión del equipo. Este consiste en estimar el daño, medido en pérdidas de material, sobre superficie interna del equipo debido a la fricción entre el fluido y la pared. La erosión también se debe a la presencia de fases pesadas en especial sólidos como en este caso.

Este fenómeno puede ser modelado empleando CFD, para ello es necesario contar con un modelamiento completo de la geometría final y mejorada del equipo de recuperación de LGN, considerando tanto la turbulencia como el comportamiento de las fases involucradas.

El modelo DPM permite estimar la erosión de las paredes internas del equipo gracias a que puede reproducir como es la interacción del sistema multifase con las diferentes superficies de la geometría, por medio de modelos de colisión y arrastre [3,26].

En este caso se emplea esta alternativa para la estimación de la erosión, este enfoque permite visualizar cuales son las zonas del equipo que serán más afectadas así como permite obtener una media cuantitativa aproximada de cuál será la pérdida de material a lo largo del tiempo para las paredes internas del equipo. Estos resultados son valiosos para tomar medidas en las etapas de diseño detallado, diseño mecánico y construcción que garanticen la integridad y tiempo de vida del equipo.

RESULTADOS

A continuación se presentan los resultados del modelamiento como herramienta de diseño preliminar del equipo de recuperación de LGN. En esta sección se presentan la definición de la geometría base, la evaluación y validación del modelo de turbulencia, el mejoramiento de la geometría definida y el modelamiento de la erosión sobre el equipo mejorado.

3.1 Modelamiento CFD y Selección de la Geometría del Equipo

Para la selección de la geometría base para el mejoramiento posterior se plantearon 9 geometrías diferentes para el equipo. Se definieron para cada una de estas geometrías 9 parámetros geométricos clasificados en las dos secciones principales del equipo, generador de vórtice, garganta y recolector.

Tabla 3-1: Selección de la geometría

Geometría	Coefficiente de Correlación (R)
A	0,36
B	0,63
C	0,16
D	0,63
E	0,15
F	0,02

Geometría	Coefficiente de Correlación (R)
G	0,43
H	0,43
I	0,64

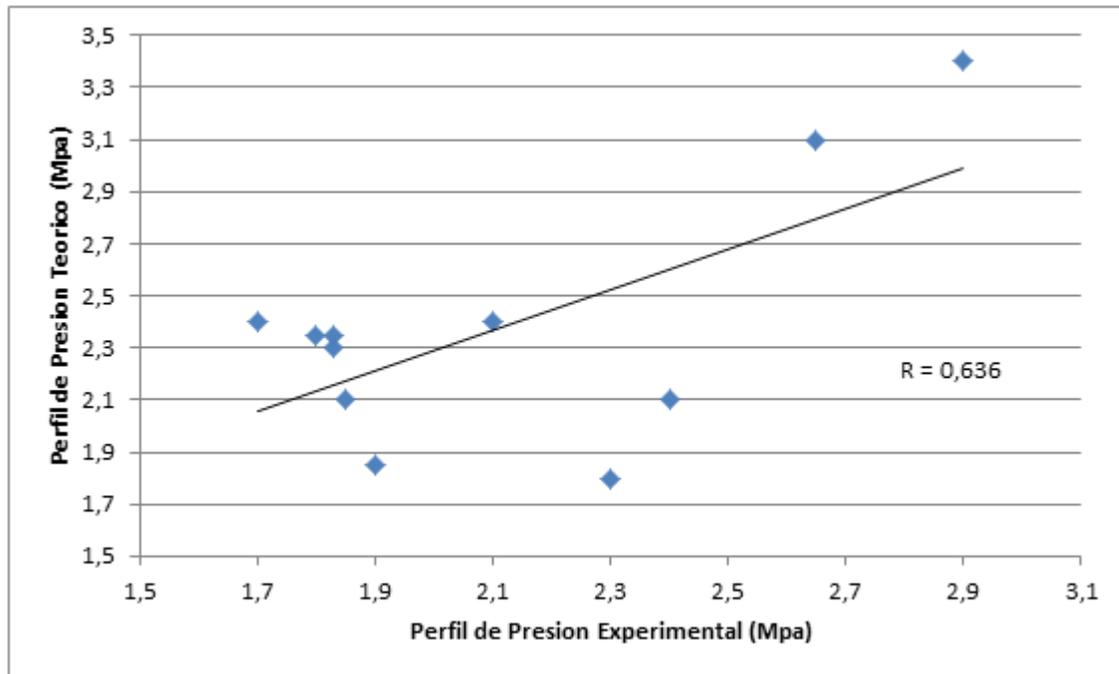
Para cada una de las geometrías simuladas se calculó el coeficiente de correlación, dicho coeficiente se obtiene de la regresión entre los datos del perfil de presiones experimental vs el obtenido con las simulaciones CFD para cada una de las 9 geometrías. En la Tabla 3-1 se presentan dichos coeficientes. En este caso se seleccionó la geometría con el coeficiente de correlación de mayor valor, en este caso la geometría **I** con un coeficiente de correlación de 0.64. Este valor es moderadamente alto para equipos con flujo de tipo circular, ya que se encuentra dentro del rango típico de valores de coeficientes de correlación de acuerdo a lo que se mencionó en la sección 2.2 del presente documento.

La grafica con el análisis de correlación llevado a cabo para la geometría seleccionada (**I**) se muestra en la Figura 3-1. Esto permite observar la dispersión de los datos obtenidos. Adicionalmente la correlación entre los dos grupos de datos (calculados y experimentales) permite validar la simulación CFD realizada en cuanto a la calidad de la malla y el set-up desarrollado. El coeficiente de correlación obtenido es moderadamente alto, lo cual lo hace aceptable según las comparaciones entre datos de resultados CFD y datos experimentales reportados en la literatura [35], adicionalmente esto permite concluir que el set-up (o configuración de la simulación) definido para las simulaciones CFD es el adecuado.

Ya que el comportamiento hidráulico del equipo es de particular interés debido a su complejidad se realiza ahora un análisis sobre los perfiles de presión, el calculado y el experimental (Figura 3-2). Los perfiles de temperatura y de velocidad a lo largo del equipo pueden verse en el Anexo 3 para la validación del modelo de turbulencia. La filosofía del diseño del equipo es separar las fases condensadas que se forman para ajustar el valor de punto de rocío [11] y contenido de agua sin perder mucha presión del fluido, para buscar así ahorros en compresión posterior [2,20,21]. Se observa que hay un punto de baja presión (1.8 MPa en la figura 3-2) en el cual debido a la estrangulación del gas natural y por la acción del efecto Joule-Thomson, el fluido se

enfria hasta alcanzar esta baja presión. La temperatura en el punto de más baja presión desciende hasta 260 K (ver Anexo 2) formando así las fases condensadas: LGN, agua e hidratos de hidrocarburos [2].

Figura 3-1: Correlación entre los perfiles de presión obtenidos de la simulación y los datos experimentales. Fuente: Esta investigación y datos tomados de [20]

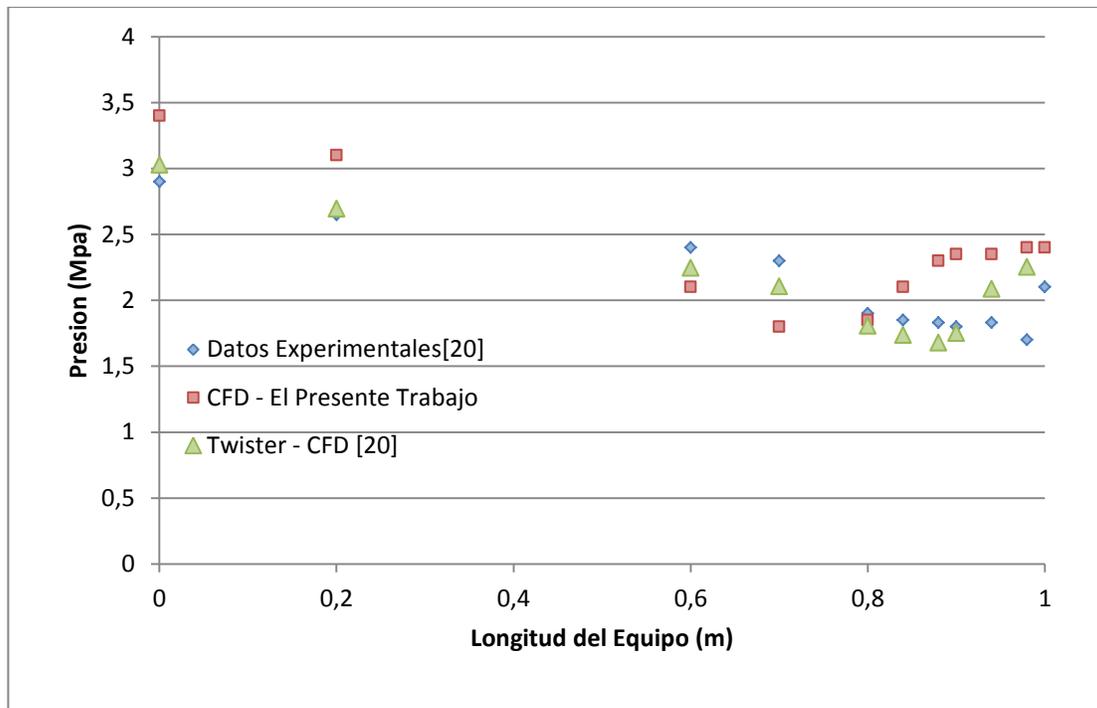


Después de la garganta del equipo está localizado el recolector de fases pesadas ya que se espera que los mayores efectos del flujo giratorio actúen en este punto llevando estas fases de mayor densidad hacia la corriente lateral de salida del equipo. Esta condición de separación es lograda debido a que en esta sección, gracias a los efectos del flujo giratorio, es en donde se alcanza la mayor velocidad de flujo supersónico, en este punto la velocidad es de 560 m/s o 1.3 Mach (ver Anexo 2) [17,18,19,20].

En la sección final del equipo, entre 0.7 y 1 m, se obtiene un aumento de la presión que corresponde a una recuperación de la presión de alrededor de 25%, esto representa un ahorro de 25% en costos de compresión posteriores al tratamiento del gas natural. Esta recuperación es lograda gracias a los parámetros geométricos definidos para el alineador de flujo del equipo.

En esta última sección se lleva a cabo una reducción gradual del área transversal de flujo haciendo que se recupere presión a la vez que el gas se calienta nuevamente para evitar congelación en las corrientes de proceso posteriores.

Figura 3-2: Perfiles de presión, experimentales [20] y obtenidos de la simulación CFD, en función de la longitud del equipo de recuperación de LGN para la geometría seleccionada



Debido a la operación del equipo existe una pérdida de gas natural por la corriente de recolección de LGN, esta cantidad está en 30% del gas alimentado para la geometría *I*. Esta corriente de gas debe ser llevada a un separador de fases y recirculado a un punto previo del proceso.

La Figura 3-2 permite observar los datos experimentales disponibles en la literatura [20], así como los resultados de los modelamientos CFD desarrollados por la compañía Twister BV y los resultados obtenidos en el presente trabajo. Los resultados obtenidos por Twister BV son mejores a los que se obtuvieron durante el desarrollo del presente trabajo, esto es debido principalmente a que el equipo de trabajo de ingeniería de Twister BV dispone de la información detallada de la geometría del equipo y de datos de operación del equipo en escala piloto y en campo. En este punto debe recordarse que esa información no está disponible al público pues hace parte de las patentes de la empresa.

Twister BV además de contar con información detallada sobre la operación, tiene una disponibilidad de recursos superior, en términos de tiempo y dinero, a diferencia de los que fueron destinados para el desarrollo de este trabajo. Todos estos aspectos finalmente repercuten en la calidad de los resultados.

La Figura 3-2 permite establecer posibles mejoras a la geometría con el fin de mejorar los resultados obtenidos, el hecho de que la presión sea mayor para los resultados de este trabajo en la primera sección del equipo sugiere que el área de flujo debe reducirse un poco para obtener unas pérdidas de presión similares a las de equipo real en operación.

La zona de la garganta del equipo, que es la zona con la mayor complejidad hidráulica debido a la presencia de un corriente lateral de salida y una baja presión y temperatura. En esta parte del equipo los dos modelamiento CFD, el realizado por Twister y el contenido en este trabajo, difieren de los datos experimentales reportados en la literatura [20]. esto es indicio de que el modelo requiere de mejoras y mejores ajustes para poder representar con mayor precisión el proceso real.

Finalmente en el alineador de flujo de la última sección del equipo los tres grupos de datos de la Figura 3-2 coinciden en que es posible recuperar presión con esta configuración, a pesar de esto los valores de presión de salida diferentes para los dos modelamientos y los datos experimentales [20], esto es debido a que el flujo en esta sección del equipo está afectada directamente por la garganta del mismo.

3.2 Validación del Modelo de Turbulencia

Las simulaciones CFD presentadas previamente se realizaron empleando el modelo de turbulencia RSM (Reynolds Stress Model) [20]. Para este tipo de equipos debido a su complejidad geométrica e hidráulica la literatura recomienda el uso del modelo de turbulencia RSM, ya que es más robusto.

El modelo de turbulencia RSM es usado en estos casos debido a que permite considerar en mayor detalle el flujo de información tridimensional entre los elementos de la malla, lo cual resulta útil cuando hay flujo altamente giratorio [1,3]. Sin embargo, este modelo por su complejidad requiere tiempos de cómputo elevados, por tanto es de interés para la comunidad científica probar otro modelo de turbulencia.

En este caso se prueba el modelo de turbulencia k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio [1,3,26,27,28,29,32]. Para evaluar el desempeño de este modelo se emplea la geometría *I*.

Para la simulación implementada usando RSM como modelo de turbulencia se obtuvo un coeficiente de correlación con un valor de 0.65. El modelamiento durante la selección de la geometría *I*, empleando el modelo de turbulencia k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio, obtuvo un coeficiente de correlación con un valor de 0.64. Es posible determinar con base en esto que existe una diferencia porcentual de apenas 1.4% entre los dos modelos de turbulencia lo cual permite validar el uso de k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio como apropiado para este caso de diseño de equipos de separación supersónicos.

Con el fin de mejorar el modelamiento y la precisión de los resultados de las simulaciones que se desarrollaran para el mejoramiento del equipo y la evaluación de las zonas de erosión se realizaron 3 simulaciones adicionales del equipo con la geometría *I* empleando el modelo de turbulencia k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio. Estas simulaciones consideraron tres valores del parámetro del modelo de turbulencia “Swirl Factor” o factor de giro. En razón de todo lo anterior, Los valores empleados fueron 0.09, 0.11 y 0.15. El valor por defecto en el simulador para el Factor de giro es 0,07, en este caso ya que el flujo es altamente giratorio se debe utilizar un valor mayor al típico. Esto es debido a que se debe estimar el flujo altamente giratorio que tiene lugar dentro del equipo y este factor relaja este fenómeno.

Tabla 3-2: Matriz de coeficientes de correlación entre los resultados obtenidos con RSM y los perfiles obtenidos variando el “Swirl factor” del modelo k-e RNG modificado

	Coefficientes de Correlación (R)		
Factor de Giro	Presión	Temperatura	Velocidad
0,09	0,91	0,89	0,97
0,11	0,91	0,99	1.00
0,15	0,91	0,85	0,97

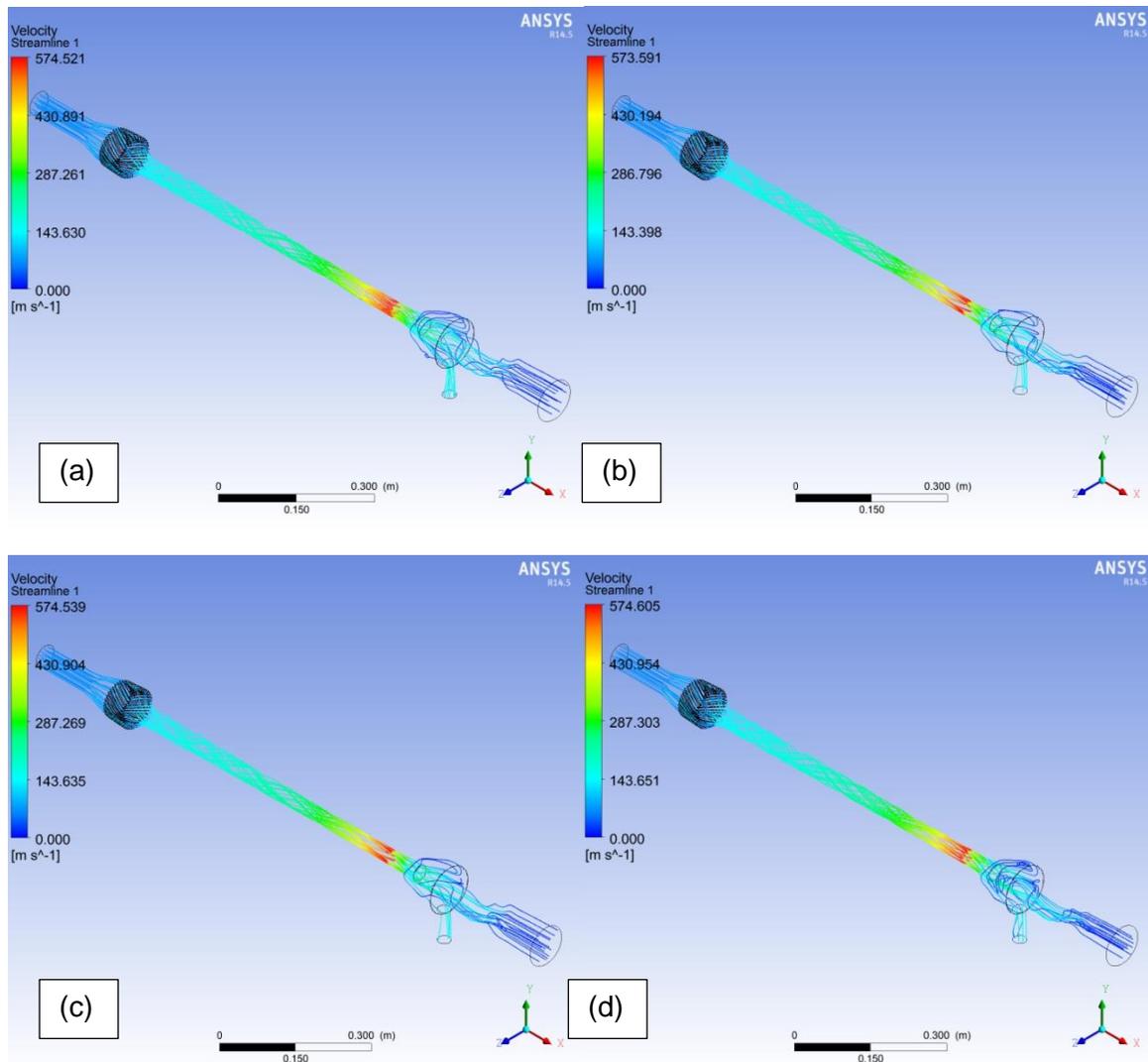
De cada una de las simulaciones fueron graficados los resultados correspondientes a los perfiles de presión, temperatura y velocidad (ver Anexo 3). Cada uno de estos perfiles fue comparado con el perfil correspondiente de los resultados de la simulación empleando RSM como modelo de turbulencia. Los valores de los coeficientes de correlación de cada uno de los

perfiles obtenidos con los 3 valores de Factor de giro con los obtenidos de la simulación con RSM se muestran en la Tabla 3-2.

De la Tabla 3-2 es posible concluir que la utilización de k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio como modelo de turbulencia llevará a resultados muy similares a los que se obtienen empleando RSM. Adicionalmente es posible mejorar la precisión de los resultados si se emplea un valor de Swirl Factor de 0.11. Esto no solo mejorará la precisión de los resultados que se obtendrán, también disminuirá el tiempo de computación en cerca de un 25% debido a que el modelo k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio es más sencillo y de más rápida convergencia.

Los resultados cualitativos para las 4 simulaciones, RSM y k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio con Swirl factor de 0.09, 0.11 y 0.15, correspondientes a las líneas de corriente de fluido con la escala de colores según la velocidad son mostrados en la Figura 3-3. Es posible observar que los resultados de este tipo para los tres modelos son prácticamente idénticos. Las simulaciones fueron exitosas en cuanto a que perciben correctamente el flujo giratorio y la condición supersónica de flujo en la garganta del equipo.

Figura 3-3: Comparación de resultados cualitativos para los modelos de turbulencia evaluados , (a) RSM, (b) Swirl Factor 0.11, (c) Swirl Factor 0.09, (d) Swirl Factor 0.15.



3.3 Mejoramiento del equipo en términos de su eficiencia para la recuperación de LGN

CFD es una herramienta que puede ser utilizada en ingeniería de procesos de alta complejidad, esta permite mejorar la operación de un equipo de proceso a través de mejoramiento de la geometría de sus internos. En este caso los parámetros geométricos definidos para el equipo

diseñado pueden ser modificados con el fin de mejorar el rendimiento del equipo en términos de su eficiencia en la recuperación de LGN, ecuación (2.1).

Buscando mejorar la eficiencia del equipo y con base en la geometría previamente definida (geometría *I*), se plantearon 10 nuevas geometrías, cada una con parámetros geométricos diferentes, Tabla 3-1 y 3-3. Cada una de estas geometrías fue simulada empleando la misma configuración de mallado definidas anteriormente, al igual que el modelo multifase DPM [26] y la ecuación de estado de Peng-Robinson para la estimación de las propiedades PVT del gas natural [2].

Tabla 3-3: Principales parámetros geométricos considerados para el mejoramiento del equipo en términos de eficiencia de separación de LGN

Sección del Equipo	Variable	Rango	Comentarios
Generador de Vórtice	RO/RI [in]	1.72/1.39	Se estimó con cálculos hidráulicos (Anexo 2) a partir de la información disponible en la literatura [18,19,21,22,23,24]
	No. de Aletas	35-38	Se estimó este rango a partir de los resultados obtenidos para la selección de la geometría [18,19,21,22,23,24]
	Angulo de las Aletas [°]	20-25	Rango reportado en la literatura [18,19,21,22,23,24]
Garganta y Recolector	RO/RI [in]	0.62/0.43	Se estimó con cálculos hidráulicos (Anexo 2) a partir de la información disponible en la literatura [18,19,21,22,23,24]
	Ubicación de la Garganta [m]	0.51-0.66	Se determinó este rango a partir de los resultados obtenidos para la selección de la geometría [20]
	Ubicación del Recolector [m]	0.72-0.84	Se determinó este rango a partir de los resultados obtenidos para la selección de la geometría [20]
	Angulo del Recolector [°]	15-25	No hay información disponible sobre este parámetro, por esto fue determinado por medio de incrementos graduales hasta obtener convergencia y resultados coherentes.
	Diámetro de Salida [in]	0.0165-0.02	Se determinó este rango a partir de los resultados obtenidos para la selección de la geometría [18,19,21,22,23,24]

Los parámetros geométricos se modifican dentro de los intervalos de la Tabla 3-3, estos son los planteados con base en la información reportada por Twister BV en sus patentes [21 ,22 ,23 ,24] y los cálculos hidráulicos preliminares realizados (Anexo 1). El principal criterio de modificación de la geometría es el análisis de los resultados de cada simulación realizada. Estas modificaciones tienen efectos en la eficiencia de la separación, a partir de la revisión de dichos efectos se hicieron cambios a la geometría de la anterior simulación, buscando mejoras en la eficiencia. Esta fue la forma de proceder debido a que un diseño de experimentos hubiera llevado a un tiempo de cómputo demasiado largo, y muchas de las simulaciones se descartaron por mala convergencia y/o resultados inconsistentes. Esta forma de proceder fue necesaria debido a que los efectos de los parámetros geométricos sobre la eficiencia de separación eran desconocidos para este tipo de equipos.

En cuanto al modelo de turbulencia las simulaciones fueron realizadas empleando y k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio con Swirl factor de 0.11 [1,3,26], ya que como se demostró en la sección anterior esto permite obtener resultados con un menor tiempo de computación y una mejor convergencia de las simulaciones a la vez que se aproxima más a los valores que se podrían obtener con el modelo de turbulencia RSM gracias a la utilización de un factor de giro de 0.11. Igualmente la geometría base seleccionada anteriormente (geometría *I*), fue simulada nuevamente para calcular su eficiencia en términos de la recuperación de LGN. Se estimó que esta configuración del equipo tendría una eficiencia de 64% para la recuperación de LGN.

Las geometrías mostradas a continuación se plantearon considerando los rangos y criterios establecidos en la Sección 2.2 con el fin de obtener geometrías que operen dentro de las condiciones recomendadas por la literatura [17].

Tabla 3-4: Mejoramiento de la eficiencia del equipo de recuperación de LGN

Simulación CFD	Generador de Vórtice			Garganta y Recolector					Criterio de Mejora
	Geometría	RO/Ri (in/in)	No. de Aletas	Angulo de Aletas	RO/Ri (in/in)	Ubicación de la Garganta (m)	Ubicación del Recolector (m)	Angulo del Recolector	Diámetro de Salida de LGN (m)
I-1	1.72/1,39	36	25°	0.62/0.43	0.66	0.84	22°	0.0165	64
I-2	1.72/1,39	35	25°	0.62/0.43	0.51	0.73	20°	0.02	65
I-3	1.72/1,39	35	25°	0.62/0.43	0.52	0.72	20°	0.02	74
I-4	1.72/1,39	36	20°	0.62/0.43	0.6	0.74	20°	0.02	71
I-5	1.72/1,39	36	20°	0.62/0.43	0.62	0.72	15°	0.02	56
I-6	1.72/1,39	36	22°	0.62/0.43	0.63	0.82	22°	0.0165	69
I-7	1.72/1,39	37	22°	0.62/0.43	0.55	0.82	25°	0.0165	65
I-8	1.72/1,39	37	25°	0.62/0.43	0.51	0.84	21.6°	0.0165	72

Simulación CFD	Generador de Vórtice			Garganta y Recolector					Criterio de Mejora
	Geometría	RO/Ri (in/in)	No. de Aletas	Angulo de Aletas	RO/Ri (in/in)	Ubicación de la Garganta (m)	Ubicación del Recolector (m)	Angulo del Recolector	Diámetro de Salida de LGN (m)
I-9	1.72/1,39	38	25°	0.62/0.43	0.66	0.84	22°	0.0165	75
I-10	1.72/1,39	38	23°	0.62/0.43	0.61	0.84	22°	0.0165	70

Empleando la ecuación (2.1) se calculó la eficiencia de los equipos para la separación de LGN para cada una de las geometrías propuestas. Esto es posible gracias al tipo de resultados que se obtienen de DPM como modelo multifase. Estas eficiencias son reportadas en la Tabla 3-4.

De los resultados tabulados en la Tabla 3-4, es posible determinar que la geometría *I-9* fue la que mayor eficiencia obtuvo bajo las mismas condiciones para el mallado y la simulación. Esta geometría tiene una eficiencia en la recuperación de LGN de 75%, la cual supera en 11% a la eficiencia reportada por Twister BV con un valor de 64% [17]. El criterio planteado desde el principio corresponde a la eficiencia hidráulica del equipo, con base en ello se seleccionó la geometría *I-9* como la de mayor eficiencia.

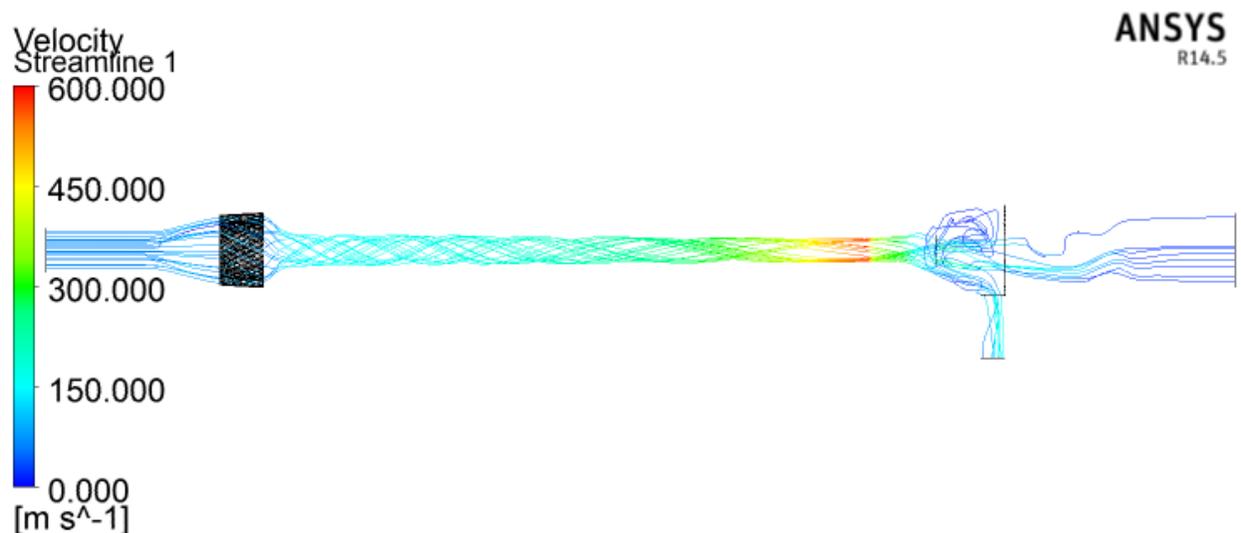
Estos resultados son comparables entre si ya que se definió una longitud del equipo igual para todos los casos de acuerdo con los datos experimentales de la literatura [20], Figura 3-2. Se puede observar que la geometría *I-9* tiene una eficiencia de 75% mientras que la geometría *I-3* tiene una eficiencia de 74%. Una de las diferencias principales entre estas dos geometrías es la cantidad de aletas, conservando el mismo ángulo de 25°, que aumenta de 35 a 38, las aletas son las que inducen el flujo circular en el sistema esto puede causar ese punto porcentual adicional en la eficiencia ya que con aletas adicionales el flujo se direcciona de una circular.

Otra diferencia notoria es la ubicación de la garganta, ya que esta cambia de 0.52 m para la geometría *I-3* a 0.66 m en la geometría *I-9*, esto representa un cambio en el comportamiento

hidráulico del equipo que está asociado tanto con el flujo predominantemente circular producido por las aletas como por la ubicación de la garganta que estando cerca de la salida provoca un arrastre mayor de las fases condensadas hacia la corriente lateral. Esto también está asociado con el hecho de que la geometría *I-3* tiene un diámetro de salida de la corriente lateral mayor al de la geometría *I-9*.

Para el caso de la geometría *I-5*, que corresponde a la geometría que obtuvo la eficiencia más baja, se puede asociar este bajo rendimiento de tan solo un 56% a varias características de la geometría. La principal es el bajo ángulo de las aletas que para esta geometría es de tan solo 20° , esto a pesar de tener 36 aletas afecta negativamente la eficiencia. La ubicación de la garganta se encuentra exactamente 10 cm antes de la línea lateral de recolección, mientras que para la geometría *I-9* con un mejor rendimiento se tiene una mayor distancia entre estas dos partes del equipo, esto es indicio de que el tiempo de residencia que tienen los fluidos del sistema después de la estrangulación en la garganta es importante para la eficiencia de la operación, esta es una característica que puede ser utilizada para desarrollos posteriores en búsqueda de mejores eficiencias hidráulicas.

Figura 3-4: Líneas de corriente de la simulación del equipo mejorado



Un análisis de resultados cualitativos es ahora realizado con base en los resultados gráficos que se pueden obtener de un modelamiento CFD [3]. Este análisis es realizado por medio de

las líneas de corriente, gracias a estas es posible ver las trayectorias de los volúmenes finitos del fluido de trabajo. Adicionalmente la escala de color indica el valor de la velocidad del fluido. Figura 3-4.

El valor del número de Mach para el gas natural se estima a partir de a una velocidad de aproximadamente 450 m/s, a una temperatura de 290 K y un presión de 8.27 MPa. Es posible entonces determinar que el número de Mach para el flujo dentro del equipo de hasta 1.3 [2] (ver Anexos 1 y 2).

La Figura 3-4 permite observar también que la simulación CFD representa bien el flujo giratorio, un aspecto crítico para garantizar la eficiencia del equipo y la separación de las fases pesadas en el recolector.

Las líneas de corriente dibujadas en detalle para el recolector de LGN, Figura 3-4, permiten observar como el recolector aprovecha el flujo giratorio del gas para arrastrar hacia la corriente lateral de salida del equipo las fases pesadas, dentro de las cuales están los LGN de interés. Esto se realiza a cambio de pérdida de gas por esta corriente, aproximadamente un 20% del gas de salida para el equipo mejorado. Esta distribución cambia de forma considerable con los parámetros geométricos definidos, como se evidencia por el cambio en los valores de eficiencia.

La Figura 3-4 muestra también las líneas de corriente para la sección inicial del equipo, donde se encuentra la boquilla de entrada y el generador de vórtice antes de entrar en la garganta del equipo. Se observa que el generador de vórtice es bastante eficiente en direccionar el flujo para que este sea de naturaleza giratoria a lo largo del equipo hasta llegar al recolector.

Se observa claramente como es el aumento gradual de velocidad antes de llegar a la garganta del equipo. La condición de flujo supersónica se alcanza en esta sección donde el flujo sufre la última aceleración antes de que los LGN sean retirados.

3.4 Modelamiento del Fenómeno de Erosión

Debido a que el flujo de alta velocidad tiene además una naturaleza circular y se generan cambios bruscos de presión y temperatura dentro del equipo, deben tomarse medidas para garantizar la integridad de los materiales de los cuales está construido el equipo. Esto es

importante para etapas posteriores del diseño de procesos y mecánico, y la construcción del mismo, pero es necesaria la estimación inicial del tipo de daño que puede llegar a tener el equipo, bajo las condiciones de operación, para así con base en los resultados tomar medidas desde la etapa de diseño. Esta estimación debe considerar la localización donde se tendrá más daño debido a erosión así como una cuantificación preliminar de éste.

CFD por medio del modelo multifase DPM [26] permite considerar el daño a las paredes del equipo, en términos de pérdidas de material por erosión debida al arrastre por el flujo [3,26]. Debido a las altas velocidades del fluido, además de la alta complejidad hidráulica de éste, se espera que las superficies internas del equipo sufran daños medidos en términos de pérdidas de material.

Para realizar este tipo de simulaciones es necesario definir el tipo de material del cual estará construido el equipo. Debido a que es necesario que el material resista bajas temperaturas y puede haber eventualmente presencia de compuestos ácidos se definió acero inoxidable 316 como el material de las paredes del equipo. La selección de este material fue consultada y de manera preliminar aceptada por el departamento de construcción y obra mecánica de la empresa HNA ingeniería Ltda.

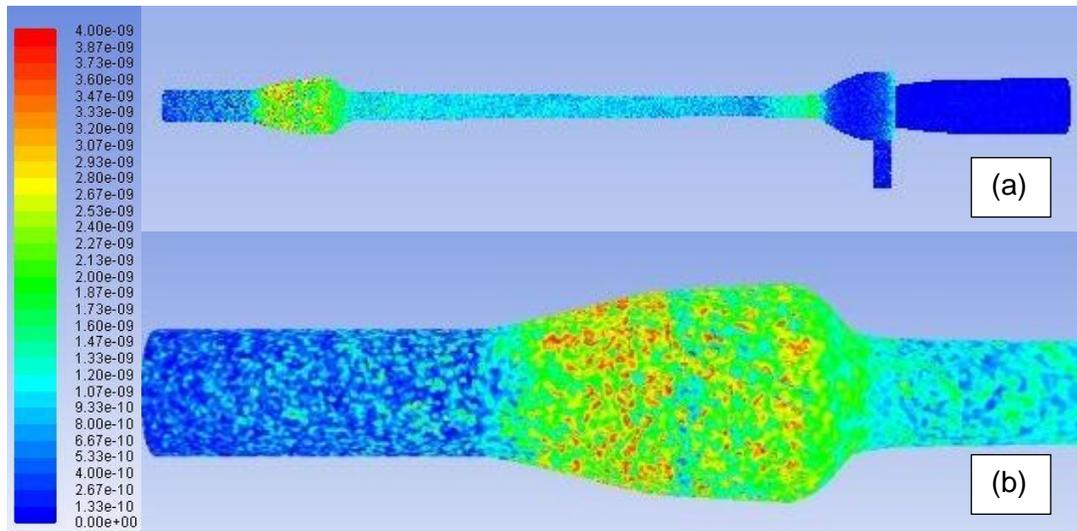
La Figura 3-5 muestra los contornos de velocidad de erosión sobre las paredes internas de todo el equipo, la escala de colores se encuentra en unidades de $\text{Kg m}^{-2}\text{s}^{-1}$. Los colores más cálidos representan las zonas donde habrá mayor erosión dentro del equipo. Con el fin de tener una idea más clara de lo que representa esta escala que reporta en el simulador se hace la siguiente conversión de unidades para el máximo valor de la velocidad de erosión para este caso.

$$4 \times 10^{-9} \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \text{s}} = 126 \frac{\text{g}}{\text{m}^2 \text{año}}$$

Esta magnitud permite determinar que se tendrá un nivel de erosión más alto de lo normal si se emplea un material como el acero inoxidable 316 o similar cuyas pérdidas de material típicas por erosión son $\left(50 - 100 \frac{\text{g}}{\text{m}^2 \text{año}}\right)$. Aun así sigue siendo de importancia determinar las zonas que más deterioro sufrirán para definir donde deberá utilizarse un recubrimiento interno especial, o tomar las medidas correspondientes desde la etapa de diseño.

Figura 3-5: Contorno general de la pérdida de material ($\text{kg}^1\text{m}^{-2}\text{-s}^{-1}$) de las paredes internas del equipo mejorado debido a la erosión. (a) Vista general, (b) Detalle del generador de vórtice.

Fuente: el presente trabajo.



La Figura 3-5 (a) muestra la vista lateral del equipo con el contorno de velocidad de erosión sobre las paredes del equipo. Se observa que las secciones del equipo con menores velocidades son las que menores niveles de daños por erosión presentan. Esto es consistente con lo que se espera del comportamiento real del equipo.

La Figura 3-5 (a) permite observar también la sección de recolección y la boquilla de salida del gas procesado. Se observan niveles de erosión altos en el recolector y la garganta del equipo. En la garganta del equipo donde se alcanzan las velocidades más altas se tienen niveles intermedios de erosión, esto hace que sea necesaria la aplicación de un recubrimiento interno con el fin de garantizar la integridad del equipo en esta región.

Igualmente la Figura 3-5 (b) muestra la erosión en el generador de vórtice y la boquilla de entrada. En el generador de vórtice se tienen los niveles más altos de erosión para este caso, por este motivo es necesario que en esta sección se aplique un recubrimiento interno apropiado.

Twister BV ha desarrollado y patentado un recubrimiento interno que reduce los daños por erosión y corrosión en el equipo a la vez que evita la deposición de sólidos en las paredes del equipo [19]. Se recomienda que sea utilizado este recubrimiento en este equipo mejorado para

garantizar su desempeño e integridad por al menos 15 años, que corresponde a la vida promedio de un proyecto de ingeniería en el sector de Oil & Gas.

Ya que este análisis de erosión fue realizado sobre la geometría mejorada, no es posible con los resultados que se tienen determinar el efecto de los parámetros geométricos sobre la erosión del equipo en términos de vida útil, o si existe una relación entre desgaste y eficiencia. Para llegar a la determinación de una relación entre estos aspectos deben llevarse a cabo más simulaciones y pruebas a escala piloto.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Se implementó CFD como herramienta para el diseño en la etapa conceptual de la ingeniería de procesos de un equipo de recuperación de LGN supersónico. Las estrategias de simulación se establecieron de acuerdo a los objetivos del proyecto y las características principales del equipo así como los fluidos de trabajo involucrados en el sistema. Se consideraron como especificaciones del gas para la venta las características establecidas por la CREG [11]. El desarrollo de este trabajo permite extraer las siguientes conclusiones:

- Fue posible diseñar de forma preliminar un equipo compacto para la recuperación de hidrocarburos condensados de gas natural empleando CFD. Del mismo modo, se determinó la geometría en términos de los principales parámetros geométricos del equipo. Los resultados de las modelaciones CFD obtenidos para el equipo fueron comparados con información experimental disponible [20]. El coeficiente de correlación entre estos dos perfiles de presión, resultados y CFD, obtenido para el equipo es de 0.64, el cual es un valor moderadamente alto y aceptable para casos que involucran flujos circulares. Lo anterior permite concluir que el set-up (configuración de las simulaciones) de la modelación empleado junto con la geometría definida son adecuados. Finalmente, la eficiencia en la recuperación de hidrocarburos condensados es de 75%, la cual es 11% superior a la eficiencia reportada por la compañía Twister BV [17].
- En este trabajo se implementaron y compararon los modelos de turbulencia RSM y k-ε RNG, Como se menciona en el documento, RSM es el modelo recomendado por la literatura para simular este tipo de flujos, sin embargo, este modelo es más complejo y por tanto demanda mayores recursos computacionales. El modelo k-ε RNG es más

sencillo, sin embargo, a la fecha no ha sido probado para simular este tipo de flujos. Los resultados indican que el modelo k- ϵ RNG produce prácticamente los mismos resultados que el modelo RSM a la vez que se reducen los tiempos de simulación en un 25%. Por tanto, se concluye que el modelo k- ϵ RNG también puede ser usado para modelar este tipo de flujos.

- Se realizó un modelamiento para determinar los puntos de mayor pérdida de material en las paredes internas del equipo debido a la erosión. Con base en los resultados obtenidos se estableció que los puntos con mayor erosión debido al flujo del gas natural, sólidos y líquidos dentro del equipo son el generador de vórtice y la garganta. Con base en el modelamiento de la erosión llevado a cabo se recomienda el uso de acero inoxidable 316 con el fin de aumentar el tiempo de vida útil del equipo y garantizar su integridad durante un periodo de operación de 15 años. Adicionalmente se recomienda el uso de un recubrimiento interno, puede ser el ya desarrollado y patentado por Twister BV [19,20], para las partes internas con más probabilidad de daño, en este caso el generador de vórtice y la garganta del equipo de recuperación de LNG.
- Finalmente, la modelación de la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD) demostró ser una herramienta muy útil para el diseño, mejoramiento y comprensión de equipos de proceso e intensificación de procesos y por tanto su uso podría extenderse al diseño y mejoramiento de otros equipos o procesos.

Recomendaciones

El presente estudio representa una etapa inicial a nivel de ingeniería de procesos para el desarrollo e implementación de este tipo de tecnología de separación supersónica aplicada a tratamiento de gas natural. Los resultados y conclusiones acá presentadas son sólo la base para estudios posteriores de optimización del proceso y evaluación mecánica del equipo, considerando los detalles constructivos de montaje, puesta en marcha, estabilización y operación de este en una estación de tratamiento de gas natural a futuro.

Se recomienda la implementación de un modelo de corrosión para el equipo con el fin de conocer en más detalle los efectos de la operación sobre la integridad de los materiales, esto es importante en las etapas posteriores de diseño y la construcción del equipo.

Un estudio de la respuesta dinámica del equipo para analizar las posibles estrategias de medición y control con el fin de automatizarlo deberá realizarse cuidadosamente, desafortunadamente aún no existe información en la literatura sobre la dinámica de estos equipos y deberá implementarse un modelo a escala piloto con el fin de recolectar información que permita llevar a cabo dicha etapa.

La toma de datos en campo de un equipo real en operación para retroalimentar el modelo CFD es importante para completar esta etapa de modelamiento a nivel de proceso. Adicionalmente es posible realizar mejoras en la malla del equipo para modelar con mayor detalle los efectos de la pared en el flujo de los fluidos.

Desafortunadamente las herramientas CFD disponibles fueron desarrolladas para cálculos hidráulicos en campos como ingeniería mecánica, ambiental y civil. Por tal motivo carece de herramientas termodinámicas rigurosas que permitan modelar en detalle y de forma apropiada la físicoquímica de los sistemas. Se recomienda la utilización de UDFs (User Defined Functions – Funciones Definidas por el Usuario) para considerar en detalle el comportamiento termodinámico de los fluidos involucrados en la operación del equipo.

Este tipo de modelamiento detallado y riguroso será bastante común en los próximos años y hará parte de las actividades comunes de ingeniería dentro de unos 15 años aproximadamente. Ahondar en esos temas representara una ventaja competitiva para las compañías donde se involucren procesos químicos, petroquímicos, bioquímicos, biomédicos e industriales en diversos campos. Todo esto será posible gracias a que la implementación industrial de modelos como DNS (Direct Numerical Simulation) para sistemas turbulentos (ver Anexo 4) y la consideración rigurosa de la termodinámica dentro de las simulaciones, esta implementación a escala industrial se lograra con el aumento de la capacidad de procesamiento que se duplica aproximadamente cada 18 meses (Según la ley de Moore).

Para un futuro menos próximo (dentro de unos 25 o 30 años) el surgimiento de nuevos materiales nano-estructurados, especialmente polímeros, llevara a desarrollos en el campo del modelamiento molecular para síntesis de productos y procesos, esto requerirá mayor capacidad de computo así como investigación en nuevos modelos que sean apropiados para atender la demanda creciente de este tipo de tecnologías siendo competentes en las sociedades del futuro.

REFERENCIAS

- [1]. Versteeg H, K. y Malalasekera, W., (2007). An Introduction to Computational Fluid Dynamics-The finite Volume Method. Second Edition. PEARSON Prentice Hall.
- [2]. GPSA- Gas Processors Suppliers Association Engineering. (2004). GPSA-Gas Processors Suppliers Association - Engineering Data Book. Twelfth Edition. Volumes I y II.
- [3]. Ansys Inc. Documentación tutoriales e información del portal de usuarios. 2013.
- [4]. Fletcher C.A.J, Srinivas. Computational Techniques for fluid dynamics. Springer-Verlag.
- [5]. Stanbridge D., Managing Director, Swift Technology Group, Norwich.(2011).Separating the Streams. ANSYS Advantage, Volume V(Issue 2).28-30.
- [6]. Mohammadi M., Shahhosseini S., Bayat M. (2012). Direct numerical simulation of water droplet coalescence in the oil. International Journal of Heat and Fluid Flow. Volume 36. 58–71.
- [7]. Zhongyi W., Changlong Y., Jia H., Yunliang Y.(2011). The Analysis of Internal Flow Field in Oil-Gas Separator. Processing Engineering. Volume 15. 4337-4341.
- [8]. Wang H., Jia X., Wang X., Zhou Z., Wen J., Zhang J. (2014). CFD modeling of hydrodynamic characteristics of a gas–liquid two-phase stirred tank. Applied Mathematical Modelling. Volume 38. 63-92.
- [9]. Esam Jassim, M. Abedinzadegan Abdi, Y. Muzychka. (2010). A new approach to investigate hydrate deposition in gas-dominated flowlines. Journal of Natural Gas Science and Engineering. Volume 2. 163-177.
- [10]. Douglas James, M. (1988). Conceptual Design of Chemical Processes. 163-177.McGraw-Hill, Chemical Engineering Series.
- [11]. Res. 054 de 2007. (2007). Comisión de Regulación de Energía y Gas. Min. De Minas y Energía.

- [12]. Stankiewicz, Andrzej. (2003). Reactive separations for process intensification: an industrial perspective. *Chemical Engineering And Processing*. Volume 42. 137-144.
- [13]. Genesis Oil & Gas Consultant. (2008). TECHNICAL NOTE-Final Report. Twister NGL Recovery Study. Genesis Job Number J-10205/A.
- [14]. Betting, Marco. Prast, Bart. (2009). Improved Choke Valve Design for De-Bottlenecking Gas Processing Facilities. GPA Europe. Offshore Processing and Knowledge Session.
- [15]. Kalikmanov, Vitaly. Betting, Marco. Bruining, Johannes. Smeulders, David. (2007). New Developments in Nucleation Theory and Their Impact On Natural Gas Separation. SPE-110736-PP. SPE International. Society of Petroleum Engineers.
- [16]. Machado B, Priscilla. Monteiro, Juliana G.M. Medeiros, Jose L. Epsom, Hugh D. Araujo, Ofelia Q.F. (2012). Supersonic Separation in OnShore Natural Gas Dew Point Plant. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. Volume 6. 43-49.
- [17]. Schinkelshoek, Peter. Epsom, Hugh D. (2008). Supersonic Gas Conditioning- Commercialization of Twister Technology. 87TH Annual Convection. Grapevine. Texas. USA.
- [18]. United States Patent No. US 8,398,734 B2 (Date Mar. 19, 2013).
- [19]. United States Patent Application Publication Pub. No. US 2001/0123736 A1 (Pub. Date: May 26,2011).
- [20]. Prast, Bart. Lammers, Bart. Betting, Marco. (2006). CFD for Supersonic Gas Processing. Fifth International Conference on CFD in the Process Industries. CSIRO, Melbourne, Australia. 13-15 December 2006. Twister BV, Einsteinlaan 10,2289 CC, Rijswijk, Netherdalds.
- [21]. United States Patent No. US 8,257,458 (Date Sep. 4, 2012).
- [22]. United States Patent No. US 8,226,743 (Date Jul. 24, 2012).
- [23]. United States Patent No. US 7,909,912 (Date Mar. 22, 2011).
- [24]. United States Patent No. US 7,357,825 (Date Apr. 15, 2008).
- [25]. U.S Energy Information Administration, <http://www.eia.gov/todayinenergy/detail.cfm?id=5810>.
- [26]. Heng Yeoh, Guang. Tu, Jiyuan. *Computational Techniques for Multiphase Flows*. (2010). First Edition. Elsevier.
- [27]. Jiyuan Tu, Guan Heng Yeoh, Chaoqun Liu. *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach*. (2008). First Edition. Elsevier.
- [28]. Hirsch, Charles. *Numerical Computation of Internal and External Flows*. Volume 1. *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. (2007). Second Edition. Elsevier.

- [29]. Venten, Kai. *Mathematical Modeling and Simulation, introduction for scientist and engineers*. (2009). First Edition. Wiley-VCH.
- [30]. Diario de Funciones, <http://www.diariodefusiones.com/?page=ampliada&id=245>.
- [31]. EcopetrolWebSite:<http://www.ecopetrol.com.co/especiales/estadisticas2004/internacional/consumo-mundial-gas.htm>
- [32]. OpenFoam. *Users guide – Open Foam The Open Source CFD Toolbox*. (2014). Open Foam.
- [33]. API. *Specification for Glycol-Type Gas Dehydration Units- API 12GDU*. API Specification Standards. First Edition. Dec 15, 1990.
- [34]. ANSYS INC. *Anslys Fluent Theory Guide: V 12.0*. (2009). ANSYS INC.
- [35]. Utikar, R., Darmawan, N., Tade, M., Li, Q, Evans, G., Glenny, M. and Pareek, V. (2010). *Hydrodynamic Simulation of Cyclone Separators*, Computational Fluid Dynamics, Hyoung Woo Oh (Ed.), ISBN: 978-953-7619-59-6, InTech, DOI: 10.5772/7106. Disponible en: <http://www.intechopen.com/books/computational-fluid-dynamics/hydrodynamic-simulation-of-cyclone-separators>
- [36]. CUTLER A. D. WHITE J. A. (2001). *An Experimental and CFD Study Of a Supersonic Coaxial Jet*. Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno, NV.

ANEXOS

ANEXO 1

CONDICIONES DE DISEÑO Y CÁLCULOS HIDRÁULICOS PRELIMINARES

Debido a que no se conocen los detalles geométricos del equipo se desarrolló una serie de cálculos preliminares, estos fueron realizados empleando modelos simplificados para definir las dimensiones mayores del equipo. Estos se llevaron a cabo con base en la información disponible en la literatura.

Adicionalmente fueron definidas las condiciones de diseño del equipo para llevar a cabo los cálculos que acá se muestran y las simulaciones CFD posteriores.

CONDICIONES DE DISEÑO

Con el fin de llevar a cabo los cálculos hidráulicos preliminares, para el planteamiento de las simulaciones CFD posteriores y para la elaboración de las geometrías iniciales. Fueron definidas las siguientes condiciones de diseño típicas para un pozo de gas natural del norte de Colombia:

Tabla A1-1: Condiciones de diseño para el equipo de recuperación de LGN

Condición/Propiedad	Unidades	Valor
Flujo	MMscfd	10-20
Temperatura [2]	K	290
Presión [2]	MPa	8.27
Contenido de Agua [33]	Lb Agua/MMscf	27
Contenido de CO ₂	%V/V	0
Contenido de H ₂ S	%V/V	0
Punto de rocío [2]	°F	120
Metano	%molar	93.869
Etano	%molar	3.270
Propano	%molar	0.763

Condición/Propiedad	Unidades	Valor
i-Butano	%molar	0.122
n-butano	%molar	0.153
n-pentano	%molar	0.103
C6+	%molar	0.000
Nitrógeno	%molar	1.720
Dióxido de Carbono	%molar	0.001

En este caso se asume que el gas ha sido endulzado, por este motivo el contenido de componentes ácidos típicos del gas natural es prácticamente cero. También fue considerado el gas natural con la composición mostrada en la tabla anterior, esto es válido para los cálculos preliminares debido a que es el componente que se encuentra en mayor proporción en el gas natural con valores del orden de 93 a 97 % V/V [2].

CÁLCULOS PRELIMINARES

A continuación se describen los cálculos y ajustes realizados con base en los cuales se propusieron las geometrías iniciales para las simulaciones CFD llevadas a cabo.

Debido a que la velocidad del gas natural debe alcanzar Mach 1 justo después del generador de vórtice, se estima que la velocidad en la garganta del equipo sea de 400 m/s, ya que la velocidad del sonido para la cual se tiene la condición de flujo sónico (Mach =1) es 450 m/s. La velocidad del sonido para el gas fue calculada a las condiciones de la Tabla A1-1, la ecuación empleada fue la siguiente:

$$Velocidad\ del\ Sonido = \left(r * \frac{P}{\rho} \right)^{0.5} \quad (A1 - 1)$$

Donde r es el coeficiente de expansión adiabático, P es la presión absoluta y ρ es la densidad del gas.

Por otra parte de la información disponible por parte de Twister en sus patentes [18,19,21,22,23,24] es posible plantear las siguientes consideraciones de importancia para el diseño.

- La pared se modela como condición de frontera adiabática debido a que el sistema es aislado térmicamente [20].

- El equipo se construye para flujos pequeños de gas del orden de 10-20 MMscfd debido a condiciones operativas y eventualidades en el sistema.
- La longitud del equipo es de 1.4 m aproximadamente. Esta longitud deberá ser suficiente para realizar los procesos que tienen lugar en el dispositivo supersónico [20].
- La caída de presión esperada es del 40% [20]
- Se espera que el flujo dentro del equipo tenga números de Mach de hasta 1.9 para este caso particular.
- La densidad de los hidratos de hidrocarburos es tomada como 899.3 kg/m³ [2].

Con estas consideraciones se realizaron cálculos simplificados del área transversal de flujo del gas natural para un caudal promedio con el fin de establecer una primera idea del tamaño del equipo y la proporción entre sus internos.

El caudal Q de gas natural se estimó como:

$$Q = 20 \text{ MMscfd} * \left(\frac{\rho_{op}}{\rho_{std}} \right)$$

Donde las condiciones estándar corresponden a 60 °F y 14.69 psia. Estas densidades fueron estimadas con la ecuación de estado Peng-Robinson.

$$Q = 20000000 \text{ scfd} * \frac{0.7559 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}}{79.28 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} = 190690 \frac{\text{cf}}{\text{d}}$$

$$Q = 190690 \frac{\text{cf}}{\text{d}} * \left(\frac{\text{d}}{24\text{h}} \right) \left(\frac{\text{h}}{3600\text{s}} \right) \left(\frac{\text{m}^3}{35.31\text{ft}^3} \right) = 0.0625 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$

Ahora para este caudal se estima el flujo másico W respectivo:

$$W = Q * \rho_{op} = 0.0625 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} * 79.28 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 4.955 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$$

Este valor de W será el utilizado para las simulaciones CFD a lo largo del diseño y el mejoramiento del equipo de recuperación de LGN.

Ahora con estos valores de caudal es posible estimar el área transversal de flujo para la cantidad de gas que debe ser tratada. Este cálculo se realiza empleando la ecuación de continuidad (A1-2) de la mecánica clásica de fluidos como sigue:

$$Q = V * A \quad (A1 - 2)$$

$$A = \frac{Q}{V} = \frac{0.0625 \frac{m^3}{s}}{450 \frac{m}{s}} = 1.4 \times 10^{-4} m^2$$

Este valor de área en conjunto con la ecuación (A1-3) para la sección anular puede ser utilizado para evaluar la relación de diámetros que debe existir entre el generador de flujo y el diámetro interno de la pieza sólida externa del equipo.

$$A_{anulo} = \frac{\pi}{4} * (D^2 - d^2) \quad (A1 - 3)$$

ANEXO 2

DETERMINACION DE TAMAÑO PROMEDIO DE ELEMENTO DE MALLA Y TAMAÑO DEL PASO DE TIEMPO

La determinación del tamaño promedio de elemento de la malla para un dominio puede realizarse simultáneamente con la determinación del paso del tiempo de la simulación [32]. Estos son parámetros iniciales importantes para cualquier simulación CFD en especial cuando son sistemas turbulentos ya que dependen principalmente de la velocidad del fluido de trabajo.

El tamaño del paso de tiempo y de elemento varía indirectamente con la velocidad de flujo. Por este motivo cuando el sistema tiene altas velocidades tanto el tamaño de tiempo como el tamaño promedio de elementos de la malla debes ser relativamente pequeños. Para determinar la relación que debe existir entre estos parámetros de la simulación puede utilizarse el número de Courant [1,33].

NUMERO DE COURANT

El número de Courant es un parámetro adimensional que relaciona las variables fenomenológicas con las numéricas [1,33]. Este puede ser utilizado para determinar el paso del tiempo conociendo el tamaño promedio de los elementos de la malla o viceversa. Y relaciona este con la magnitud de la velocidad de flujo.

El número de Courant se define como:

$$Co = \frac{\Delta t * U}{\Delta x}$$

Donde Δt es el paso de tiempo, U es la magnitud de la velocidad y Δx es el tamaño promedio de los elementos de la malla. Ya que este es un número adimensional las unidades de estas variables deben ser consistentes.

El valor del número de Courant debe ser pequeño, cuanto más pequeño mayor precisión tendrán los resultados de la simulación. En general se recomienda que este tenga un valor menor a 250, sin embargo se deben buscar valores más pequeños del orden de 25 [1,33].

DETERMINACION DEL TAMAÑO PROMEDIO DE ELEMENTOS DE LA MALLA Y DEL PASO DE TIEMPO DE LA SIMULACION

La forma en que se puede utilizar el número de Courant para determinar estos parámetros consiste en establecer un valor para el número de Courant dentro del rango anteriormente descrito. En este caso se prueba inicialmente con 25.

Ya que la velocidad del sonido del gas es 450 m/s (ANEXO 2):

$$Co = 25 = \frac{\Delta t * 450 \frac{m}{s}}{\Delta x}$$

Entonces es posible determinar la siguiente relación:

$$0.0556 \frac{s}{m} = \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Esta relación permite establecer el paso de tiempo o el tamaño de elemento si se conoce uno de los dos. Por lo general se define el tamaño promedio de elementos de acuerdo con la capacidad de computación que se tiene, sabiendo que la memoria RAM del equipo utilizado para el modelamiento es el principal limitante del tamaño de la malla. Elementos pequeños corresponden a una malla con muchos elementos y en promedio un elemento requiere de 1 Kb de memoria RAM esta regla de dedo gordo permite establecer inicialmente que tan fina debe ser la malla que será utilizada.

Por otra parte la limitante por parte del paso de tiempo es la capacidad de procesamiento ya que un paso de tiempo muy pequeño conlleva a tiempos demasiado largos de simulación. Existen limitantes físicos que ayudan a establecer el tamaño de elemento de malla para estos casos. Este es la suposición del continuo, ya que CFD se puede aplicar siempre y cuando se cumpla el supuesto del continuo.

Este caso particular requiere que ambas condiciones sean exigentes, un tamaño de paso de tiempo y tamaño de elemento de malla pequeños. Ya que se cuenta con suficiente memoria RAM se sabe que el equipo de cómputo puede manejar mallas de varios millones de

elementos. Se establece entonces que este caso se modelara con una malla de 2.5 millones de elementos cuanto máximo. Con base en lo anterior se puede determinar que:

$$\text{RAM} = 1 \frac{\text{Kb}}{\text{elemento}} * 2'500000 \text{ elementos} * \left(\frac{\text{Mb}}{1024\text{Kb}} \right) * \left(\frac{\text{Gb}}{1024\text{Mb}} \right) \approx 2.4 \text{ Gb de RAM}$$

Se requieren 2.4 Gb de RAM, lo cual se puede manejar fácilmente por el equipo disponible. El volumen del dominio es aproximadamente $2.5 \times 10^{-6} \text{ m}^3$, este dato comúnmente puede tomarse de la herramienta que sea utilizada para la digitalización de la geometría.

El tamaño de elemento es entonces:

$$\left(\frac{2.5 \times 10^{-6} \text{ m}^3}{2'500000 \text{ elementos}} \right)^{\frac{1}{3}} = \text{tamaño de elemento} = 1 \times 10^{-4} \text{ m}$$

Este valor corresponde a Δt estimado que es válido para el mallado, cumple con el supuesto de continuo y puede ser manejado por la máquina de la cual se dispone para la simulación.

Con el número de Courant se puede entonces estimar el tamaño del paso de tiempo:

$$\Delta t = 0.0556 \frac{\text{s}}{\text{m}} * \Delta x = 0.0556 \frac{\text{s}}{\text{m}} * 1 \times 10^{-4} \text{ m} = 5.56 \times 10^{-6} \text{ s}$$

Este paso de tiempo es muy pequeño, para simular tan solo un segundo de operación se requieren cerca de 180000 iteraciones. Con el fin de disminuir el tiempo de cálculo por cada simulación se establece un paso de tiempo un poco más grande ($1 \times 10^{-5} \text{ s}$). Este paso de tiempo requiere de 100000 iteraciones para obtener un segundo de simulación del equipo en operación.

Para verificar que la precisión del modelamiento no se vea muy afectada debe recalcularse el número de Courant:

$$\text{Co} = 25 = \frac{1 \times 10^{-5} \text{ s} * 450 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{1 \times 10^{-4} \text{ m}} = 45$$

El valor del número de Courant de 45 está dentro del rango recomendado ($\text{Co} < 250$), aunque es mayor a 25 no es lo suficientemente alto como para que se vea afectada la precisión de los resultados de las simulaciones CFD que se desarrollan en el presente trabajo.

Con base en el procedimiento descrito anteriormente se establece que las simulaciones CFD se realizarán con un paso de tiempo de 1×10^{-5} s. Por otra parte las mallas serán configuradas con un tamaño promedio de elementos de 1×10^{-4} m.

ANEXO 3

PERFILES DE PRESION TEMPERATURA Y VELOCIDAD - VALIDACION DEL MODELO DE TURBULENCIA

Con el fin de validar el modelo de turbulencia empleado para el diseño y mejoramiento del equipo de recuperación de LGN se elaboraron varios perfiles. Se desarrollaron simulaciones CFD para cada uno de los casos de los modelos y parámetros de turbulencia considerados: RSM y k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio con factores de giro (Swirl Factor) de 0.09, 0.11 y 0.15.

Los perfiles de presión, temperatura y velocidad a lo largo del equipo de recuperación de LGN se muestran para cada uno de los siguientes casos:

- RSM
- k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio - swirl factor 0.09.
- k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio - swirl factor 0.11.
- k- ϵ RNG modificado para flujo giratorio - swirl factor 0.15.

Figura A3-1: Perfil de presión a lo largo del equipo empleando los modelos de turbulencia evaluados

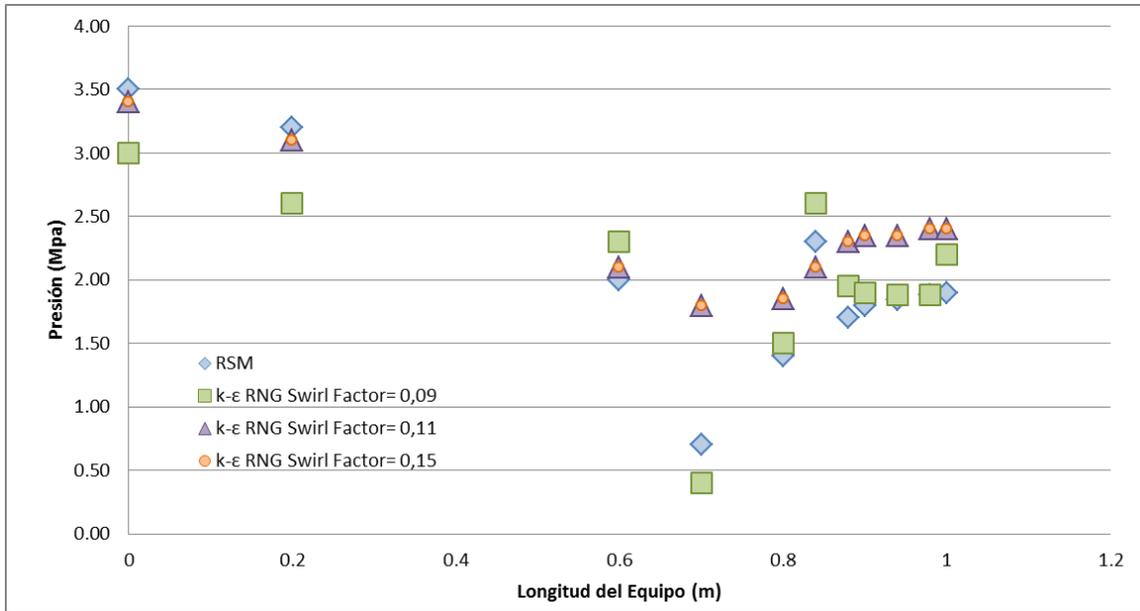


Figura A3-2: Perfil de temperatura a lo largo del equipo empleando los modelos de turbulencia evaluados

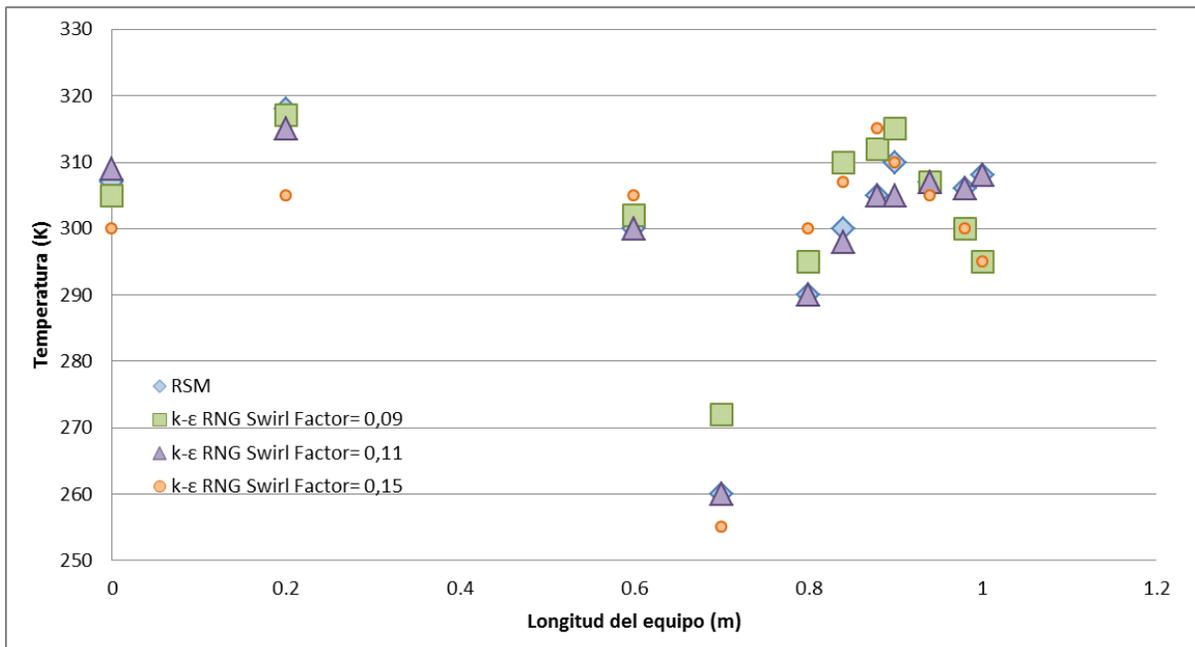
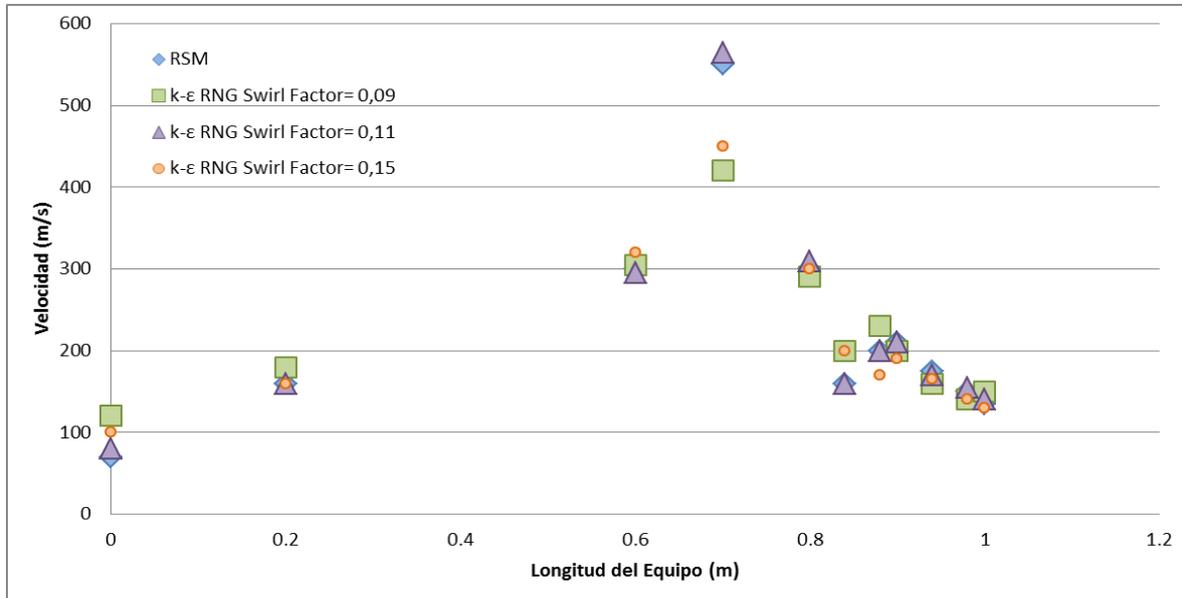


Figura A3-3: Perfil de velocidad a lo largo del equipo empleando los modelos de turbulencia evaluados



ANEXO 4

TEORIA SOBRE MODELAMIENTO CFD

CONTENIDO

INTRODUCCION	111
GENERALIDADES Y RESEÑA HISTORICA	111
METODOS DE DISCRETIZACION	113
ELEMENTOS FINITOS	113
VOLUMENES FINITOS.....	114
ECUACIONES DE NAVIER-STOKES	114
ECUACION GENERAL DE TRANSPORTE	117
TURBULENCIA	119
ENFOQUES PARA EL MODELAMIENTO DE LA TURBULENCIA	121

MODELOS RANS	121
LOS MODELOS EVM (EDDY VISCOSITY MODELS- MODELOS DE VISCOSIDAD EDDY) .	123
MODELO LES (LARGE EDDY SIMULATION)	130
DNA (DIRECT NUMERICAL SIMULATION-SIMULACIÓN NUMERICA DIRECTA)	133
MODELAMIENTO DE SISTEMAS MULTIFASE	135
FASE EULERIANA	136
MODELO VOF (VOLUME OF FLUID – VOLUMEN DE FLUIDO).....	137
MODELO MULTIFASE EULER-EULER.....	138
FASE LAGRANGIANA.....	138
MODELO DPM (DISCRETE PHASE MODEL – MODELO DE FASE DISCRETA).....	139
ALGORITMOS PARA EL ACOPLAMIENTO PRESIÓN-VELOCIDAD.....	141
FACTORES DE RELAJACION	147
ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN O DIFERENCIACIÓN	148
ESQUEMA DE DIFERENCIACION CENTRAL (CENTRAL DIFFERENCING SCHEME)	150
ESQUEMA DE DIFERENCIACION AGUAS ARRIBA (UPWIND DIFFERENCING SCHEME)	151
ESQUEMA DE LEY DE POTENCIAS (POWER LAW SCHEME).....	152
ESQUEMA DE DIFERENCIACION AGUAS ARRIBA DE SEGUNDO ORDEN (SECOND ORDER UPWIND SCHEME)	152
QUICK SCHEME	153
SOLUCION A LAS ECUACIONES DISCRETIZADAS.....	154

INTRODUCCION

La teoría detrás de un software para modelamiento CFD (como Ansys u OpenFoam) es bastante amplia, en este apartado se describen los modelos base empleados para el desarrollo de la simulación CFD que se realizó para este caso particular y los modelos para los fenómenos especiales como turbulencia y flujos multifasicos. Este desarrollo se hace con el fin de exponer los detalles del funcionamiento de este tipo de software, aunque para un caso particular puede servir como base para otras aplicaciones empleando esta poderosa herramienta.

La información acá presentada es sólo una parte de la teoría detrás del modelamiento CFD, mayor información al respecto puede encontrarse en las referencias citadas [1,26,34].

GENERALIDADES Y RESEÑA HISTORICA

La base fundamental del modelamiento CFD son las Ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales definen el comportamiento del flujo de una única fase (gas o liquido pero no las dos).

Históricamente los métodos que fueron desarrollados en principio resolvían estas ecuaciones con un gran número de simplificaciones, siendo útiles solo para ecuaciones de flujos potenciales linearizados en dos dimensiones (Dominios 2D). Estos primeros modelos no consideraban vorticidad, turbulencia ni fenómenos viscosos internos, eran incapaces de considerar sistemas con varias fases. Aunque las ecuaciones de Navier-Stokes son no lineales era posible linearizarlas cuando el sistema no tenia, o tenía muy pocas, perturbaciones en flujos subsónicos y supersónicos (no stransonicos ni hypersonicos). Estos primeros modelos fueron aplicados a aletas o alas sustentadoras de aviones (en inglés airfoil) en el año 1930.

Lewis Fry Richardson hizo uno de los primeros intentos por resolver el problema de flujo de fluidos de régimen laminar en aplicaciones meteorológicas basándose en la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes empleando diferencias finitas y una malla de elementos cuadrados en dos dimensiones, a pesar de sus esfuerzos no tuvo éxito, pero escribió un libro en el año 1922 titulado "Weather Prediction by Numerical Process". Este libro sirvió como base

para trabajos posteriores llevados a cabo en los años 1940's con equipos ENIAC (Uno de los primeros ordenadores).

Durante los años 1950's y 1960's en el laboratorio de Los Alamos National Lab en Estados Unidos, el grupo T3 Group liderado por Francis H. Harlow, quien es considerado uno de los ,as importantes pioneros del CFD, desarrolló varios modelos numéricos para simular flujo de fluidos transitorio en dos dimensiones:

- Particle-in-cell method (Harlow, 1957).
- Fluid-in-cell method (Gentry, Martin and Daly, 1966)
- Vorticity stream function method (Jake Fromm, 1963).
- Marker-and-cell method (Harlow and Welch, 1965).

El modelo de Fromm (Vorticity stream function method) funcionaba bien para dominios bidimensionales, incompresibles en estado transitorio, y fue la primera vez que se logró modelar el comportamiento de un fluido incompresible empleando las ecuaciones de Navier-Stokes [1,3].

El aumento de la capacidad de computación trajo consigo el desarrollo de modelamientos para flujo de fluidos en dominios tridimensionales. La primera publicación acerca de este tema fue hecho por Jhon Hess y A. M. O Smith de Douglas Aircraft en 1967. El método, llamado método de paneles, discretizaba las ecuaciones usando paneles para modelar el flujo de aire alrededor del fuselaje de los aviones. El primer código para este tipo de enfoque fue publicado por Paul Rubbert y Gary Saaris de Boeing en 1968. Después de esto vinieron muchos más modelos que fueron empleados en el modelamiento no solo de aire para la aerodinámica de aviones, sino también para asistir el diseño de automóviles, submarinos, turbinas eólicas, barcos, helicópteros, etc. Cabe resaltar que el aire era considerado como un pseudocomponente, no como una mezcla de varios componentes, y no era de interés desarrollar modelos termodinámicos precisos ya que esta herramienta no era de interés para el área de los procesos químicos, fue hasta hace dos décadas que empezó a verse su potencial en sistemas mecánicos e hidráulicos.

Estos desarrollos en el área de la mecánica tuvieron lugar cuando se buscó modelar flujos con las ecuaciones de Euler, que son las ecuaciones de Navier-Stokes con algunas simplificaciones pero que prometían obtener resultados de mayor precisión. Este desarrollo llevo en el año 1981

por Antony Jameson, que desarrollo un método para resolver los modelos 3D empleando las ecuaciones de Euler, con esto vinieron desarrollo hechos por la NASA que desarrollo y mejoró un código propio llamado CART3D cuya innovación se basaba en el uso de coordenadas cartesianas para generar mallas de tamaños de elementos no uniformes, permitiendo así refinar la misma en las regiones del domino donde se requiera.

El siguiente reto fue dar solución a las ecuaciones de Navier-Stokes, el desarrollo de software como ARC3D, OVERFLOW, CFL3D por parte de la NASA impulsaron el surimiento en los años 1980's de numerosos paquetes de software comercial que siguen mejorando continuamente hasta la actualidad.

METODOS DE DISCRETIZACION

La estabilidad de la discretización numérica es normalmente establecida numéricamente y no analíticamente. Esta es por lo general uno de los puntos críticos durante la ejecución de una simulación CFD ya que depende del tipo de problema y la forma con que se quiera modelar. Por ejemplo las ecuaciones de Euler y Navier-Stokes son apropiadas para modelamiento de choques, golpe de ariete y superficies de contacto [1].

Los dos métodos de discretización más recientes y utilizados en aplicaciones industriales se describen a continuación.

ELEMENTOS FINITOS

El enfoque de elementos finitos es comúnmente utilizado en análisis estructurales de sólidos. Es un enfoque que tiende a presentar problemas de precisión de los resultados cuando la dinámica del fenómeno es compleja. Aun así ha sido adaptada para modelar también problemas de flujo de fluidos con limitaciones debidas en especial a que requiere de mayor memoria y tiene una convergencia lenta en comparación con el enfoque de volúmenes finitos que se describe a continuación [1].

VOLUMENES FINITOS

El enfoque de discretización por volúmenes finitos es el más usado para CFD, tiene una ventaja en cuanto al uso de la memoria y la velocidad de la solución, especialmente para problemas grandes en donde se tienen flujos altamente turbulentos y términos fuente (Source) como en sistemas de combustión [1].

En el método de los volúmenes finitos, las ecuaciones que gobiernan el sistema, comúnmente las ecuaciones de Navier-Stokes y ecuaciones de fenómenos especiales como turbulencia. Estas ecuaciones son ajustadas para ser numéricamente resueltas sobre los volúmenes discretos de control. La discretización garantiza la conservación de los flujos a través de todos los volúmenes del sistema, a diferencia del enfoque de elementos finitos en donde las ecuaciones se resuelven sobre los nodos de la malla.

Todo este trabajo está desarrollado haciendo uso del enfoque de volúmenes finitos, ya que en este se basa el software Ansys Fluent. De la misma forma todo el contenido teórico que se expone en este documento como las ecuaciones de los modelos, su manipulación y los métodos numéricos son para ser utilizados junto con el método de discretización de volúmenes finitos [34].

ECUACIONES DE NAVIER-STOKES

Las ecuaciones de Navier-Stokes son las que gobiernan el flujo de fluidos considerando efectos viscosos y Transporte (Difusivo y Convectivo) de calor [1,3,34].

Ecuación de Movimiento: Es una ecuación Vectorial, esta es obtenida de aplicar la ley de movimiento de Newton a un volumen finito de fluido [34].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\tau) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad \text{(Ecuación. A4-1)}$$

En donde:

P= Presión estática.

τ = Tensor descrito abajo.

$\rho \vec{g}$ = Fuerza gravitacional.

\vec{F} =Son las fuerzas externas.

El tensor se define como:

$$\tau = \mu \left[(\nabla \cdot \vec{v} + \nabla \cdot \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right] \quad \text{(Ecuación. A4-2)}$$

Dónde:

μ =Viscosidad molecular.

I =tensor unitario.

T =Factor para consideración de la dilatación térmica.

Una forma de la ecuación de movimiento para las tres dimensiones en coordenadas cartesianas es la siguiente:

Ecuación de cantidad de movimiento en dirección x:

$$\begin{aligned} & \left(\rho(t) \frac{\partial v_x}{\partial t} + \rho_x v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + \rho_y v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + \rho_z v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) \\ & = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} + \rho g_x + F_x \end{aligned} \quad \text{(Ecuación. A4-3)}$$

Ecuación de cantidad de movimiento en dirección y:

$$\begin{aligned} & \left(\rho(t) \frac{\partial v_y}{\partial t} + \rho_x v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + \rho_y v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + \rho_z v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \\ & = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} + \rho g_y + F_y \end{aligned} \quad \text{(Ecuación. A4-4)}$$

Ecuación de cantidad de movimiento en dirección z:

$$\left(\rho_{(t)} \frac{\partial v_z}{\partial t} + \rho_x v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + \rho_y v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + \rho_z v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho g_z + F_z \quad \text{(Ecuación. A4-5)}$$

Las ecuaciones A4-3, A4-4 y A4-5 es posible reemplazar la expresión para el tensor de la ecuación A4-2.

Ecuación de continuidad: Es la ecuación de conservación de materia a través del mismo volumen finito usado anteriormente para definir la ecuación de cantidad de movimiento [34].

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) = S_m \quad \text{(Ecuación. A4-6)}$$

Donde se tiene que:

ρ = Densidad.

\vec{v} =Vector de velocidad.

S_m = Termino de fuente de masa (Mass Source).

Ecuación de energía: Es el balance de energía sobre el volumen finito, corresponde al principio de la conservación de la energía en el volumen finito.

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{\text{eff}} \nabla T - \sum_j h_j J_j + \tau_{\text{eff}} \vec{v} \right) + S_h \quad \text{(Ecuación. A4-7)}$$

En esta ecuación se tiene que:

k_{eff} =Conductividad térmica.

T =Temperatura.

h =Entalpia.

J =Flux difusivo de energía.

S_h =Termino de fuente de energía (Energy Source).

Donde La energía E está definida como:

$$E = h - \frac{P}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad \text{(Ecuación. A4-8)}$$

En este Documento las ecuaciones que se describen corresponden al modelo para fluidos newtonianos, en caso contrario las ecuaciones deben ser modificadas para considerar como los esfuerzos cortantes afectan la viscosidad. Las unidades que se trabaja para los cálculos en CFD durante la ejecución de los códigos corresponden a las unidades en SI (Sistema internacional), por este motivo debe entenderse que las unidades de todas las magnitudes contenidas en este apartado deben utilizarse en este sistema de unidades.

ECUACION GENERAL DE TRANSPORTE

Si se observan cuidadosamente las ecuaciones A4-1, A4-6 y A4-7, puede deducirse que tienen la misma estructura. Con base en esto es posible definir una ecuación de transporte general que describa el transporte difusivo y convectivo de cualquier propiedad así como su cambio en el tiempo y aparición o desaparición. Esta ecuación debe ser también capaz de considerar la compresibilidad del fluid de trabajo por medio de una ecuación de estado, por esta razón la densidad debe definirse como variable en el tiempo y en el espacio [34].

La forma en que funcionan los paquetes de software para CFD es por medio de una ecuación de transporte general para cualquier propiedad (φ). A continuación se muestra esa forma general de una ecuación de transporte para una propiedad o magnitud φ que puede ser: Temperatura, Concentración, Energía cinética turbulenta, Entalpía, etc.

La ecuación general de transporte en forma diferencial es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\varphi) = \nabla \cdot (\Gamma\nabla\varphi) + S_\varphi \quad \text{(Ecuación. A4-9)}$$

Dónde:

$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi)$ Es el término transitorio. Este describe cómo cambia el valor de la propiedad φ a través del tiempo.

$\nabla \cdot (\rho\vec{v}\varphi)$ Es el término convectivo. Corresponde al transporte de la propiedad φ debido al movimiento del fluido.

$\nabla \cdot (\Gamma\nabla\varphi)$ Es el término difusivo. Este término contiene la forma en que la propiedad es transportada a través del volumen de fluido del sistema por el mecanismo convectivo.

S_φ Es el término fuente (Source) de la propiedad φ . Este término describe la forma en que aparece o desaparece determinada propiedad, por ejemplo en una reacción química como se consumen los reactivos para dar lugar a la aparición de los productos.

Esta ecuación como se dijo considera de forma general todos los fenómenos que tienen lugar en el flujo de fluidos, lo cual corresponde a un flujo a través de dominio discretizado con volúmenes finitos de tamaño infinitesimal ($\Delta V \rightarrow 0$).

Es también posible representar esta ecuación general de transporte en forma integral de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V (\rho\varphi) dV + \oint_A \nabla \cdot (\rho\vec{v}\varphi) \cdot dA = \oint_A \nabla \cdot (\Gamma\nabla\varphi) \cdot dA + \int_V S_\varphi dV \quad \text{(Ecuación. A4-10)}$$

En el caso más sencillo para un flujo de fluido laminar, que corresponde al caso base para un software de CFD, esta ecuación general de transporte se resuelve para 5 variables, obteniendo así un sistema de 5 ecuaciones:

Tabla A4-1: Ecuaciones para el caso base de un simulador CFD.

ECUACION	VARIABLE
Continuidad	1
Momento-x	v_x
Momento-y	v_y
Momento-z	v_z
Energía	h

TURBULENCIA

La turbulencia es un fenómeno que no ha sido entendido totalmente, aun así se conocen características que hacen parte de su naturaleza y con base en las cuales se han planteado los modelos de turbulencia que se mencionan en este documento [1,3,34].

Una de las principales características de la turbulencia es su aleatoriedad, la cual es debida a cambios energéticos a diversas escalas durante el flujo de fluidos. Estos cambios energéticos son en buena parte causados por las interacciones viscosas de los diferentes volúmenes del fluido dentro del sistema. La descripción cuantitativa de estos cambios energéticos es la base de los modelos de turbulencia que han sido planteados. Antes de describir estos modelos vale la pena hacer claridad sobre algunos aspectos generales sobre la turbulencia.

La turbulencia es un fenómeno que tiene lugar en diversas escalas desde micro-escala (por ejemplo en micro-reactores o sistemas con micro-fluidos) hasta macro-escala (por ejemplo el flujo de gases atmosféricos de Júpiter).

Los sistemas que involucran flujos de fluidos, cualquiera que sea su tipo, presentan vórtices (también llamados recirculaciones), estos son debidos a fricción de los fluidos con superficies o con interfaces entre varios fluidos inmiscibles de diferente densidad y pueden presentarse tanto en flujos laminares como turbulentos.

En el caso de flujos turbulentos se le llama eddies a los vórtices generados debido a las interacciones viscosas y cambios energéticos que tienen lugar dentro de la turbulencia. Vale la pena hacer una distinción entre vórtices y eddies, ya que los vórtices pueden estar presentes en fluidos tanto turbulentos como laminares, pero el término de eddie hace referencia sólo a los vórtices del fenómeno turbulento. Es importante hacer notar que la turbulencia es un fenómeno tridimensional y dinámico, lo cual hace que sea necesario emplear simulaciones en estado transitorio y en dominios 3D para describir con buena precisión la turbulencia de un sistema.

Un flujo se define como turbulento según el criterio del número de Reynolds, el valor de este número es el principal criterio para definir si un flujo es turbulento o no, y si en efecto es necesario implementar un modelo de turbulencia. El criterio del número de Reynolds para determinar si el flujo es o no turbulento se describe a continuación:

En el caso de flujos externos se tiene que:

1. $R_e \geq 500000$ si el flujo se da sobre una superficie.
2. $R_e \geq 20000$ si el sistema consiste en flujo alrededor de un obstáculo.

Para el caso de flujos internos o confinados se tiene el siguiente criterio:

1. $R_e \geq 2300$ en ductos o tuberías, y otros tipos de flujos confinados.

Para cualquiera de los casos el número de Reynolds se define como: $R_e = \frac{\rho v L}{\mu}$, donde L es la magnitud de la dimensión mayor (Diámetro de tubería, Longitud, Diámetro hidráulico, etc) . Otros factores como la trayectoria, tipos de accesorios o perturbaciones pueden provocar la presencia de flujo turbulento a valores diferentes del número de Reynolds.

A continuación se describen los enfoques que existen para el modelamiento de la turbulencia y los modelos que fueron empleados durante el desarrollo del trabajo contenido en este documento.

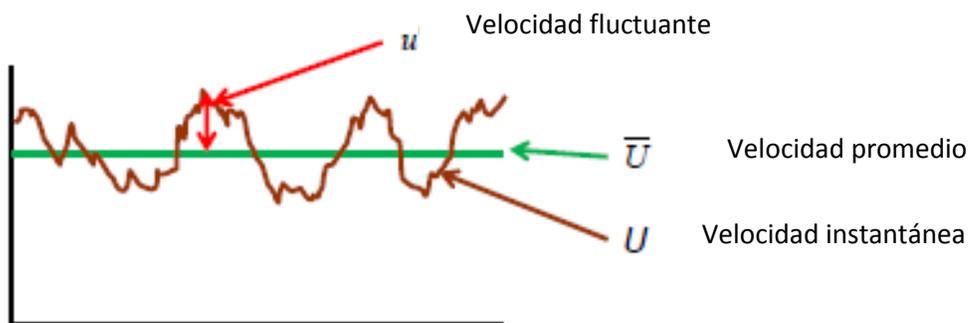
ENFOQUES PARA EL MODELAMIENTO DE LA TURBULENCIA

Para el modelamiento de la turbulencia se han desarrollado varios enfoques, estos han permitido el surgimiento de varios modelos teóricos, semi-empíricos y empíricos: [1,3,34]. En esta sección se busca describir cada uno de estos enfoques y los modelos que hacen parte de estos, haciendo énfasis en los utilizados para el desarrollo del diseño que se presenta en este documento.

Antes de entrar a discutir los tipos de modelos de turbulencia, debe definirse la velocidad media y la velocidad instantánea en un determinado punto del espacio durante la ocurrencia de un fenómeno turbulento.

Si se obtienen datos de la velocidad en un punto particular de turbulento real la velocidad instantánea U podría representarse de la siguiente forma:

Figura A4-1: Velocidades media e instantánea. Tomado de [34]



Según esto es posible definir que en cualquier punto: $U = \bar{U} + u'_{(t)}$

MODELOS RANS

Los modelos RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes Equations), se basan en dar solución de las ecuaciones de Navier Stokes descritas anteriormente cuando son promediadas en el tiempo. Estos modelos son la principal herramienta utilizada en la industria para el

modelamiento de flujos turbulentos. Debido a que sus requerimientos de capacidad de computación son pequeños en comparación con los otros tipos de modelos de turbulencia [34].

Con el fin de definir estos modelos es necesario considerar que sucede con las ecuaciones de Navier Stokes cuando se promedian en el tiempo. Para ello se define el promedio temporal como:

$$\bar{f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(x_i, t) dt \quad \text{(Ecuación. A4-11)}$$

Los campos instantáneos de velocidades y presión en el dominio se definen como:

$$p = \bar{p} + p'_{(t)} \quad \text{(Ecuación. A4-12)}$$

$$u_i = \bar{u}_i + u'_{i(t)} \quad \text{(Ecuación. A4-13)}$$

Al desarrollar el promedio en el tiempo para las ecuaciones de continuidad y movimiento en x en un sistema bidimensional, se obtienen las siguientes formas de las ecuaciones de Navier Stokes.

$$\text{continuidad: } \frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{v}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{v}_i) = 0 \quad \text{(Ecuación. A4-14)}$$

$$\begin{aligned} \text{momento } x: & \frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{v}_i) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{v}_i \bar{v}_j) \\ & = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_m}{\partial x_m} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_i u'_j}) \end{aligned} \quad \text{(Ecuación. A4-15)}$$

Donde el término $(-\rho \overline{u'_i u'_j})$ es conocido como Tensor de Esfuerzos Reynolds R_{ij} , este término aparece de forma adicional como consecuencia de expresar las ecuaciones como promediadas en el tiempo. Con base en las ecuaciones RANS hay dos tipos de modelos de turbulencia EVM (Eddy Viscosity Models) y RSM (Reynolds Stress Models).

LOS MODELOS EVM (EDDY VISCOSITY MODELS- MODELOS DE VISCOSIDAD EDDY)

Los modelos EVM asumen que el esfuerzo es proporcional a la tensión (tensión de los gradientes de velocidad). La única nueva incógnita en la que se incurre por promediar en el tiempo las ecuaciones de Navier Stokes empleando EVM es la viscosidad turbulenta (μ_t).

Los modelos EVM estiman el Tensor de esfuerzos de Reynolds de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} (-\rho \overline{u'_i u'_j}) = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \\ - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_m}{\partial x_m} \right) \end{aligned} \quad \text{(Ecuación. A4-16)}$$

Donde μ_t es la viscosidad turbulenta. La viscosidad turbulenta es similar a la viscosidad molecular en la forma como esta gobierna los efectos difusivos de momento. Debe aclararse que la viscosidad turbulenta no es una propiedad del fluido, es una característica del flujo turbulento [1,3,34]. Adicionalmente es importante considerar que los modelos EVM son los más ampliamente utilizados para modelar la turbulencia, aun así estos modelos presentan algunas limitaciones las cuales son:

2. Están planteados con base en que la turbulencia es un proceso isoentrópico. Sin embargo hay un gran número de flujos en los cuales se tiene esta condición (flujos con curvaturas aerodinámicas amplias, flujos altamente circulares, choques, etc).
3. EVM no consideran la dependencia que tienen los esfuerzos de Reynolds de las velocidades de rotación del flujo.
4. La suposición de que las escalas de los esfuerzos de Reynolds se ajustan a la magnitud de las tensiones de acuerdo a las velocidades medias no es siempre valida.
5. Una de las limitaciones más grandes de EVM es que para las ecuaciones de velocidad A4-13 se asume que $u'_{i(t)} = 0$.

Modelo Spalart-Allmaras

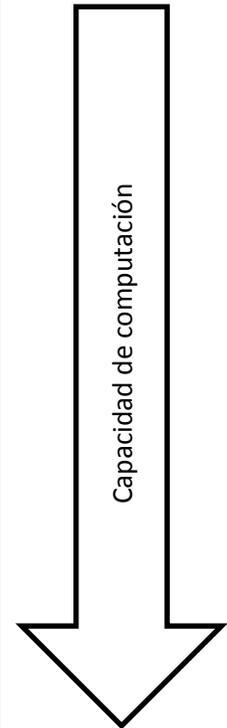
El modelo de turbulencia tipo RANS más sencillo que está disponible en el software para CFD, en particular el software Ansys Fluent es el modelo de Spalart-Allmaras. Este es un modelo de bajo costo en términos de capacidad de cómputo, funciona evaluando una ecuación de transporte para la viscosidad turbulenta como una propiedad del flujo (Ecuación A4-9). Este modelo permite predecir el valor de la viscosidad turbulenta con buena precisión incluso en las regiones cercanas a las paredes.

Es un modelo muy utilizado en aplicaciones aerodinámicas y de turbomaquinaria. Sus principales limitaciones son:

1. Su aplicabilidad es restringida, ya que la mayoría de los flujos en la industria requieren de modelos más completos y que involucren algún tipo de validación y/o ajuste empírico.
2. Los cambios energéticos propios de los flujos turbulentos son subestimados por este modelo.

Tabla A4-1: Ecuaciones para el caso base de un simulador CFD [3].

MODELO DE TURBULENCIA	TIPO DE MODELO
Modelo EVM de una Ecuación Spalart-Allmaras	Modelos-RANS
Modelo EVM de dos Ecuaciones Standard k- ϵ RNG k- ϵ Realizable k- ϵ	
Modelo EVM Standard k- ω SST k- ω	
Modelo de siete ecuaciones Reynolds Stress Model (RSM)	
k-kl- ω Transition Model SST Transition Model	
Detached Eddy Simulation	
Large Eddy Simulation	
Direct Numerical Simulation	Modelos-Large Eddy Simulation
	DNS



Modelo k- ϵ

Otro modelo tipo EVM, y tal vez el más utilizado es el modelo k- ϵ . Este modelo se basa en dos variables que hacen parte de la turbulencia, k (energía cinética turbulenta) y ϵ (velocidad de disipación de la energía).

La energía cinética turbulenta es físicamente la energía cinética media por unidad de masa asociada a los eddies en un flujo turbulento. Físicamente esta es caracterizada midiendo las raíces medias cuadradas (root-mean-square) de las fluctuaciones de la velocidad. Con base en las ecuaciones RANS k puede ser calculada como la media de los esfuerzos normales turbulentos:

$$k = \frac{1}{2} (\overline{(u'_1)^2} + \overline{(u'_2)^2} + \overline{(u'_3)^2}) \quad \text{(Ecuación. A4-17)}$$

En el modelo k-ε la variable k tiene su propia ecuación de transporte, lo cual es una ecuación diferencial parcial de transporte que resolver durante el desarrollo de una simulación CFD empleando este modelo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i k) = -\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}'_i}{\partial x_j} - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad \text{(Ecuación. A4-18)}$$

La velocidad de disipación de la energía ε, la cual es modelada fenomenológicamente (de forma semi-empírica) también requiere de una ecuación adicional:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \bar{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_1 P_k \frac{\varepsilon}{k} - C_2 \varepsilon \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad \text{(Ecuación. A4-19)}$$

Dimensionalmente ε está relacionado con k de la siguiente forma:

$$\varepsilon \sim \frac{k^3}{L_t} \quad \text{(Ecuación. A4-20)}$$

Donde L_t es la longitud de escala turbulenta.

De acuerdo a este planteamiento la viscosidad turbulenta puede ser expresada como:

$$\mu_t = \rho C_\mu L_t k^{\frac{1}{2}} = \frac{\rho C_\mu k^2}{\varepsilon} \quad \text{(Ecuación. A4-21)}$$

En el modelo k ε como se puede observar se deben discretizar y resolver dos ecuaciones de transporte adicionales (ecuaciones A4-18 y A4-19). Adicionalmente se tienen las siguientes constantes empíricas que aunque válidas para la mayoría de las aplicaciones industriales deben ser ajustadas para casos especiales.

Tabla A4-2: Constantes del modelo de turbulencia k-ε [3].

Constante	Valor
C_μ	0.09
σ_k	1.00

Constante	Valor
σ_ϵ	1.30
C_1	1.44
C_2	1.92

Modelo k- ϵ estándar

El modelo k- ϵ estándar es el modelo de turbulencia más utilizado en la industria y la academia para temas de ingeniería debido a su simplicidad. A pesar de que involucra la solución de dos ecuaciones adicionales de transporte permite obtener resultados precisos con relativamente poca capacidad de cómputo. Su precisión es buena para la mayoría de las aplicaciones industriales y es posible ajustarlo por medio de las constantes empíricas descritas anteriormente.

1. Este modelo de turbulencia tiene algunas limitaciones que deben considerarse en el momento del planteamiento de una simulación para flujos turbulentos:
2. Su desempeño no es bueno en flujos con grandes gradientes de presión, fuerte separación o bifurcaciones en el dominio, flujos altamente circulares y alrededor de curvaturas de geometrías complejas.
3. Predicciones imprecisas de flujos en impulsores jet y toberas.

Modelo realizable k- ϵ (Shih)

La velocidad de disipación de la energía (ϵ) es derivada de la fluctuación cuadrada media de la vorticidad. Esto trae consigo los siguientes beneficios para el modelamiento:

1. Predice con buena precisión la velocidad de separación en sistemas de propulsión o inyección jet en geometrías planas y redondas.
2. Tiene una mayor confiabilidad frente al modelo estándar cuando es necesario modelar flujos circulares, flujos con gradientes de presión grandes, separación y recirculación.

Modelo k-ε RNG (Yakhot y Orszag)

En este modelo las ecuaciones del modelo general k-ε son derivadas analíticamente utilizando la teoría de re-normalización de grupos, en vez de emplear parámetros empíricos. Este enfoque cambia principalmente la ecuación de la velocidad de la disipación de la energía (ε).

Este modelo permite obtener mejores resultados en el modelamiento de flujos inducidos o perturbados por esfuerzos cortantes grandes, altas velocidades que generen tensión y separación.

Modelo k-ε RNG modificado para flujo circular (Swirl Modification)

En general la turbulencia es afectada por rotación o giros en el flujo. El modelo RNG permite considerar de una forma más apropiada este tipo de efectos en los flujos turbulentos introduciendo una forma diferente de calcular la viscosidad turbulenta, esta modificación se basa en la siguiente expresión:

$$\mu_t = \mu_{t0} f\left(\alpha_s, \Omega, \frac{k}{\varepsilon}\right) \quad \text{(Ecuación. A4-22)}$$

Donde μ_t es la viscosidad turbulenta calculada utilizando la ecuación A4-21. Ω Es el “valor de giro” y α_s es el denominado factor de giro (Swirl Factor), α_s es una constante manipulable por el usuario que determina que tan dominante es el flujo giratorio en el sistema, este modelo funciona únicamente para flujos en dominios tridimensionales.

El software Ansys fluent tiene como valor por defecto para α_s 0.07 sin embargo este puede ser modificado por el usuario de acuerdo al tipo de sistema que está modelando. 0.07 corresponde a un valor medio de dominancia de los efectos giratorios del flujo, valores más altos pueden ser utilizados para considerar flujos fuertemente giratorios.

Modelo RSM (Reynolds stress Model- Modelo de Esfuerzos de Reynolds Launder 1975)

El modelo RSM (Modelo de esfuerzos de Reynolds) busca mejorar los resultados del modelamiento de flujos turbulentos para los cuales los modelos EVM (Modelos de Viscosidad Eddy). Esto se logra con un enfoque que aumenta en gran medida los costos en términos de tiempo y capacidad de computación respecto a los modelos anteriormente explicados).

RSM se basa en la deducción de las ecuaciones de transporte para los 6 diferentes componentes de los tensores de Reynolds, la forma de hacerlo es promediando los productos de las fluctuaciones de la velocidad y las ecuaciones de Navier Stokes. También es requerida la velocidad de disipación de la energía (ϵ). Esto suma un total de 7 ecuaciones adicionales a las ecuaciones de Navier Stokes representando un aumento grande en términos de requerimientos de capacidad de procesamiento, HDD y memoria RAM.

El modelo matemático se basa en el planteamiento de una ecuación de transporte individual para cada uno de los tensores de Reynolds involucrados en las ecuaciones RANS (Navier Stokes promediadas en el tiempo), $\overline{\rho u'_i u'_j}$. Los tensores de Reynolds individuales calculados con este enfoque son utilizados para obtener las ecuaciones de momento promediadas en el tiempo.

Estas ecuaciones pueden plantearse empleando la forma general de la ecuación de transporte (Ecuación A4- 9 o A4-10).

La forma exacta de la ecuación de transporte para el tensor de Reynolds $\overline{u'_i u'_j}$ es:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u'_i u'_j}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k \overline{u'_i u'_j}) \\
 & = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{\rho u'_i u'_j u'_k + p' (\delta_{ki} u'_l + \delta_{lk} u'_j)} \right] \\
 & + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{u'_i u'_j}) \right] - \rho \left(\overline{u'_i u'_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \overline{u'_j u'_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) \\
 & - \rho \beta (\overline{g_i u'_j \theta} + \overline{g_j u'_i \theta}) + p' \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right) \\
 & - 2\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \frac{\partial u'_j}{\partial x_k} - 2\rho \Omega_k (u'_j u'_m \epsilon_{ikm} + u'_i u'_m \epsilon_{ikm}) + S
 \end{aligned} \tag{Ecuación. A4-23}$$

O en la forma:

$$\begin{aligned}
 & \text{tiempo diferencial local} + C_{ij} \\
 & = D_{T,ij} + D_{L,ij} + P_{ij} + G_{ij} + \phi_{ij} - \epsilon_{ij} + F_{ij} + S
 \end{aligned} \tag{Ecuación. A4-24}$$

Donde S es el termino fuente y puede ser definido por el usuario. $D_{T,ij}$ es igual a la difusión turbulenta, $D_{L,ij}$ contiene la difusión molecular, P_{ij} es el termino de producción de esfuerzo, ϕ_{ij}

es la tensión debida a la presión, ε_{ij} es la disipación y F_{ij} es la producción de momento debida a la rotación del sistema.

El hecho de que el modelo RSM considere con mayor detalle los tensores de Reynolds lo hace apropiado para el modelamiento de flujos turbulentos altamente circulares como flujos en separadores ciclónicos, vórtices y equipos con agitación. Aun así su implementación debe considerar los altos costos en términos de máquina y tiempo.

MODELO LES (LARGE EDDY SIMULATION)

LES es un modelo de turbulencia que ha cobrado importancia. Fue inicialmente propuesto en el año 1941 basado en la teoría de Kolmogorov acerca de cómo los eddies de mayor tamaño en el flujo turbulento dependen de la escala del dominio y la malla. Esta característica permite considerar explícitamente los eddies grandes en la solución CFD del flujo y de forma implícita los eddies de menor tamaño por medio de un modelo de escala de sub-malla (Subgrid-scale model o SGS Model) [1,3,34].

Matemáticamente es posible pensar por separado en el campo de velocidad, una parte para la malla como tal empleada para la discretización del dominio y otra parte que se considera con base en la Sub-malla. La parte de la solución correspondiente al campo de velocidad de la malla representa los eddies de mayor tamaño (Large eddies), mientras que la parte que corresponde a la velocidad de la Sub-malla representa los eddies más pequeños o pequeñas escalas (small scales) cuyos efectos en el campo de solución son incluidos por medio de la utilización del modelo de Sub-malla (Subgrid model).

Es posible representar la filtración de los eddies según la escala espacial y temporal por medio de la convolución de una función con el denominado núcleo de filtración (Kernel Filterig).

Considerando el campo espacial y temporal $\phi(x, t)$:

$$\overline{\phi(x, t)} = \int \phi(x, t') G(\vec{x} - \vec{\xi}, t - t') dt' d\vec{\xi} \quad \text{(Ecuación. A4-25)}$$

Donde G es el núcleo de filtración. Esto puede ser escrito también como:

$$\bar{\phi} = G * \phi$$

El núcleo de filtración tiene un corte de escala espacial asociado (Δ) y un corte de escala temporal asociado (τ_c). Escalas más pequeñas que los valores definidos para estos parámetros son eliminadas de $\bar{\phi}$.

Utilizando este concepto de filtro matemático cualquier campo ϕ puede considerarse como la contribución de dos partes, una filtrada ($\bar{\phi}$) y una sub-filtrada (ϕ'):

$$\phi = \bar{\phi} + \phi'$$

Este principio puede ser entonces aplicado a cualquier campo ϕ para obtener las ecuaciones de transporte filtradas en escala.

Las ecuaciones de Navier Stokes filtradas para flujo incompresible se plantean de la siguiente forma de acuerdo con el enfoque del modelo LES para turbulencia:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad \text{(Ecuación. A4-26)}$$

Substituyendo $u = \bar{u}_i + u'_i$, $p = \bar{p} + p'$ y filtrando de ecuación resultante se obtiene la ecuación de movimiento para el campo solución:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\nu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad \text{(Ecuación. A4-27)}$$

En este planteamiento se asume que la operación de filtración y diferenciación son conmutativas lo cual no es siempre valido. Aun así los errores debidos a esta suposición son pequeños.

El término extra $\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}$ surge de los términos no lineales de advección, debido al hecho de que:

$$u_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \neq \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$$

$$\tau_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \overline{u_i u_j}$$

Ecuaciones de este tipo pueden ser deducidas para la escala del campo de la Sub-malla.

SGS models utilizan comúnmente la hipótesis de Boussinesq y buscan calcular el tensor SGS por medio de:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3}\tau_{kk}\delta_{ij} = -2\mu_t\overline{S_{ij}}$$

Donde $\overline{S_{ij}}$ es el tensor de la velocidad de tensión a ser resuelto para la escala definida:

$$\overline{S_{ij}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{u}_j}{\partial x_i}\right)$$

ν_t es la viscosidad turbulenta a la escala de la Sub-malla. Substituyendo esto en la Ecuación A4-26 se obtiene:

$$\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial t} + \overline{u}_j\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left((\nu + \nu_t)\frac{\partial\overline{u}_i}{\partial x_j}\right) \quad \text{(Ecuación. A4-28)}$$

Donde se ha utilizado la limitante de flujo incompresible para simplificar la ecuación y la presión es modificada para incluir el término $\frac{\tau_{kk}\delta_{ij}}{3}$.

Algunos de los modelos de escala de Sub-malla más comunes que pueden utilizarse son:

1. Smagorinsky model (Smagorinsky, 1963)
2. Algebraic Dynamic model (Germano, et. al., 1991)
3. Dynamic Global-Coefficient model (You & Moin, 2007)
4. Localized Dynamic model (Kim & Menon, 1993)
5. WALE (Wall-Adapting Local Eddy-viscosity) model (Nicoud and Ducros, 1999)
6. RNG-LES model
7. Structural modeling

DNA (DIRECT NUMERICAL SIMULATION-SIMULACIÓN NUMERICA DIRECTA)

DNS se le llama al enfoque en el cual se solucionan numéricamente las ecuaciones de Navier Stokes sin utilizar un modelo de turbulencia. Esto implica que deben considerarse todas las escalas temporales y espaciales del sistema turbulento dentro de la simulación[1,3,34].

Todas las escalas espaciales de la turbulencia del flujo en el sistema que se simula deben ser consideradas en la malla computacional, desde las escalas más pequeñas (Kolmogorov dissipative microscales), hasta las escalas más grandes o escala integral L asociadas mayormente a los movimientos relacionados con la energía cinética del fluido.

La escala de Kolmogorov es definida como:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \quad \text{(Ecuación. A4-29)}$$

Donde ν es la viscosidad cinemática y ε es la velocidad de la disipación de la energía cinética turbulenta.

La escala integral depende usualmente de las condiciones de frontera que se definen para el dominio y con base en la escala espacial.

Para poder satisfacer las condiciones de la solución, el número de puntos a lo largo de una malla dada (N), en determinada dirección con incrementos h es:

$$Nh > L$$

Esto implica que la escala integral es contenida dentro del dominio computacional, además también debe considerarse que:

$$h \leq \eta$$

Así se tiene que la escala de Kolmogorov puede ser resuelta. Se obtiene que:

$$\varepsilon \approx \frac{u'^3}{L}$$

Donde u' es la raíz cuadrada media de la velocidad (RMS), con base en esto se puede determinar el número de puntos que se requieren en la malla del dominio tridimensional:

$$N^3 \geq Re^{\frac{9}{4}}$$

Donde N^3 es el número de puntos de la malla y Re es el número de Reynolds. Como es posible observar el tamaño de malla aumenta al aumentar también el número de Reynolds haciendo que los requerimientos de memoria sean bastante grandes para llevar a cabo una simulación de este tipo.

Otra característica del modelamiento empleando DNS es que la solución numérica de la escala temporal debe realizarse con métodos explícitos, esto quiere decir que para poder obtener una buena convergencia y resultados precisos, la integración, para la mayoría de los métodos de discretización debe realizarse con valores de pasos de tiempo (Δt) lo suficientemente pequeños para que las partículas de fluido se muevan únicamente una fracción del tamaño de la malla h en cada paso de tiempo que avanza. Por medio del criterio del número de Courant para definir las escalas espaciales y temporales se puede emplear la siguiente desigualdad para definir una relación que satisface los requerimientos de una simulación empleando DNS:

$$C = \frac{u' \Delta t}{h} < 1$$

Donde C es el número de Courant.

El intervalo total de tiempo simulado es generalmente proporcional a la escala de tiempo turbulenta (escala temporal) τ :

$$\tau = \frac{L}{u'}$$

Combinando estas relaciones, y considerando que h debe ser del orden de η , el número de pasos de integración de tiempo debe ser proporcional a $\frac{L}{(C\eta)}$. Por otro lado de la definición de Reynolds, η y L es posible establecer que:

$$\frac{L}{\eta} \sim Re^{\frac{3}{4}}$$

En consecuencia el número de pasos de tiempo crece también en función del número de Reynolds. Es posible también deducir que la cantidad de operaciones de punto flotante requerida para completar la simulación aumenta con Re^3 , ya que es proporcional al número de puntos de la malla y el número de pasos de tiempo, en consecuencia y como es de esperar se requiere mayor capacidad de procesamiento.

Incluso las aplicaciones industriales más comunes con números de Reynolds relativamente bajos requieren de una capacidad de computación grande, que no está disponible en el mercado actualmente. Se podría decir que DNS representa el siguiente paso en la investigación en modelamiento computacional, y en especial en CFD, pero estos avances se encuentran limitados al avance de la tecnología.

MODELAMIENTO DE SISTEMAS MULTIFASE

El modelamiento multifase en CFD considera el comportamiento de las fases con base en DOS enfoques diferentes, dos tipos de fases.

La forma de tratar las fases de un sistema de varias fases consiste en dos tipos de fases básicos, fase euleriana y fase lagrangiana [1,3,34]. Cada uno de estos enfoques presenta sus ventajas y desventajas, así como características que resultan más adecuadas para determinado tipo de sistemas.

El concepto de un sistema multifase en CFD es diferente del que comúnmente se tiene en ingeniería Química, en CFD se tiende por fase a un estado de agregación en el cual se encuentra un fluido, esto quiere decir que hay fases sólidas, líquidas y gaseosas, que interactúan hidráulicamente como fases fluidas entre sí, pero no necesariamente intercambian masa. Esto es debido a la intención con la que se plantearon estos modelos, ya que en principio eran aplicados a temas ambientales e hidráulicos más que a problemas donde la fisicoquímica juega un papel importante.

FASE EULERIANA

Una fase euleriana es en esencia una fase continua, considera un volumen de fluido en el dominio la cual puede deformarse, romperse o coalescer y su comportamiento está regido por las ecuaciones de Navier Stokes. Este concepto implica necesariamente que por cada fase euleriana que se encuentra en el sistema deben resolverse las ecuaciones de transporte de la propiedades involucradas y al menos otra ecuación que represente la interacción entre estas (Interfase). Si el sistema es turbulento entonces deben resolverse las ecuaciones propias del modelo de turbulencia para cada fase también, solo algunos métodos permiten considerar un único sistema de ecuaciones [1,3,34].

Como ejemplo de un sistema de dos fases eulerianas se tiene un canal (Agua/aire), ya que el aire es un gas que esta sobre un cuerpo de líquido (agua). En ingeniera química un ejemplo de un sistema con fases eulerianas es una columna de destilación.

Mol modelos multifase basados en fases eulerianas funcionan bien cuando la fracción de volumen de las fases involucradas es relativamente alto, mayor a 10%, ya que si una de las fases está en menor proporción dentro del sistema la difusión numérica no hará posible definir con precisión la posición y comportamiento de la interface, en dado caso se sugiere el uso de una fase lagrangiana.

A continuación se describen dos de los modelos multifase eulerianos más comunes que son aplicables para la mayoría de los sistemas multifasicos en la industria. Cabe aclarar que estos modelos pueden considerar eventualmente fases multicompuestas y la transferencia de masa de componentes entre estas por medio de acoplamientos con modelos multicomponentes modelos de equilibrio y/o transferencia de masa disponibles en algunos de los paquetes de Software para CFD, en el caso de ser necesario estos fenómenos pueden ser considerados programando funciones de usuario con los modelos correspondientes.

MODELO VOF (VOLUME OF FLUID – VOLUMEN DE FLUIDO)

El modelo VOF es el modelo multifase euleriano más sencillo, este consiste en definir una fracción de volumen de cada fase en cada una de los volúmenes finitos de la malla del dominio, este puede ser bidimensional o tridimensional [1,3,34]. La siguiente ecuación es la ecuación de momento donde se tiene una densidad promedio ponderada según la fracción de volumen en cada elemento de la malla:

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{u}\vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \rho\vec{\nu}\tau + \vec{F} \quad \text{(Ecuación. A4-30)}$$

La densidad es el promedio ponderado según las fracciones de volumen de las fases en el volumen del dominio, donde ρ_1 y ρ_2 son las densidades de los fluidos de las fases 1 y 2 respectivamente.

$$\rho = \alpha \rho_1 + (1 - \alpha)\rho_2 \quad \text{(Ecuación. A4-31)}$$

$$\frac{\partial\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha\vec{u}) + \nabla \cdot (\alpha(1 - \alpha)\vec{u}) = 0 \quad \text{(Ecuación. A4-32)}$$

La Ecuación A4-32 es la ecuación de transporte correspondiente a la fracción de volumen de las fases en el volumen de fluido, donde α es la fracción de volumen.

El modelo VOF es un modelo euleriano por esta razón requiere que la fracción de volumen de las fases sea al menos de 10% para que los resultados sean lo suficientemente precisos. El modelo VOF permite establecer en detalle el comportamiento de la interfaz por este motivo contar con datos de la tensión superficial resulta útil para mejorar la calidad de los resultados, pero esto implica necesariamente que la malla deba refinarse para poder establecer la interfaz con suficiente claridad, incurriendo en un gasto adicional de memoria RAM y procesamiento.

Una de las ventajas más notables del modelo VOF es que no requiere integrar las ecuaciones de Navier Stokes para cada una de las fases del sistema. Las ecuaciones de los modelos de turbulencia tampoco requieren ser resueltas por cada una de las fases, ya que el enfoque de este modelo es emplear una fracción de volumen y propiedades ponderadas de acuerdo a esta

variable en cada uno de los elementos de la malla a lo largo de la integración de las ecuaciones de transporte en la escala temporal.

MODELO MULTIFASE EULER-EULER

El modelo Euler-Euler, como también se le conoce, es el modelo euleriano por excelencia, ya que considera en mayor detalle el comportamiento de las fases, su interacción en sí y los fenómenos que tienen lugar dentro de cada una.

La forma en que funciona este modelo es empleando la misma ecuación para la fracción de volumen (Ecuación A4-32), pero en este caso las ecuaciones de Navier Stokes así como las ecuaciones de transporte para cualquiera otra propiedad de interés en el modelamiento son solucionadas para cada una de las fases involucradas en el sistema [1,3,34].

Este modelo es apropiado para modelar flujos multifásicos en tuberías y equipos de proceso, mezcladores estáticos, flujos sanguíneos, etc.

La principal limitante de este enfoque es la capacidad de cómputo que aumenta considerablemente con cada fase del sistema que se está modelando.

FASE LAGRANGIANA

El enfoque lagrangiano tiende a percibirse como una gran simplificación, pero en realidad complementa bastante bien el enfoque euleriano. El enfoque lagrangiano se basa en el arrastre de partículas de una densidad definida, estas son en principio esféricas, aunque es posible introducir un factor de forma.

Este enfoque funciona muy bien cuando las fases de mayor densidad (líquidos y sólidos) están en proporciones en volumen menores a 10%, siendo muy útiles en sistemas donde el enfoque euleriano no puede aplicarse [1,3,34].

MODELO DPM (DISCRETE PHASE MODEL – MODELO DE FASE DISCRETA)

DPM es un modelo que consiste en la interacción de dos fases una continua o euleriana y otra(s) lagrangiana(s). Resulta un modelo muy útil en el modelamiento de muchos sistemas en el campo de la ingeniería como separadores ciclónicos, lechos fluidizados, aerosoles, emisiones de material particulado, etc. [1,3,34].

Las ecuaciones de transporte y Navier Stokes cuando se consideran fases lagrangianas deben incluir la interacción de la fase continua con las esferas correspondientes a la fase densa discreta, estas interacciones básicamente se basan en el arrastre.

La ecuación de continuidad puede escribirse como:

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{u}) = S_{DPM} + S_{otros} \quad \text{(Ecuación. A4-33)}$$

Donde S_{DPM} es la fuente de partículas de la fase densa discreta del sistema, estas pueden estar localizadas en cualquier lugar del dominio incluyendo las fronteras. S_{otros} es el termino fuente de materia de la fase euleriana o continua.

La ecuación de movimiento se puede escribir como:

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{u}\vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho\vec{g} + \vec{F}_{DPM} + \vec{F}_{otros} \quad \text{(Ecuación. A4-34)}$$

Donde F son las fuerzas debidas a las interacciones con las partículas que conforman la fase discreta (F_{DPM}), y los efector de fuerzas externas adicionales que interactúan con la fase continua (F_{otros}).

Debido a que el modelo implica una seria de suposiciones la ecuación de transporte de la fracción e volumen de la fase se escriben en forma general como una expansión de las Ecuaciones A4-32 y A4-33.

La ecuación para la conservación de la masa de una fase individual p es representada como:

$$\frac{\partial(a_p \rho_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (a_p \rho_p \vec{u}_p) = \sum_{k=1}^{n \text{ fases}} (\dot{m}_{qp} - \dot{m}_{pq}) \quad \text{(Ecuación. A4-35)}$$

La ecuación correspondiente a la conservación de momento. Los términos de intercambio denotados como DPM son considerados únicamente en la fase primaria.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(a_p \rho_p \vec{u}_p)}{\partial t} + \nabla \cdot (a_p \rho_p \vec{u}_p \vec{u}_p) \\ &= -a_p \nabla p + \nabla \cdot [a_p \mu_p (\nabla \vec{u}_p + \nabla \vec{u}_p^T)] + a_p \rho_p \vec{g} \\ &+ F_{\text{arrastre, corte, usuario}} + \sum_{q=1}^{n \text{ fases}} (\vec{K}_{qp} (\vec{u}_q - \vec{u}_p) \\ &+ \dot{m}_{qp} \vec{u}_{qp} - \dot{m}_{pq} \vec{u}_{pq}) + K_{DPM} (\vec{u}_{DPM} - \vec{u}_p) \\ &+ S_{DPM, \text{Explicita}} \end{aligned} \quad \text{(Ecuación. A4-36)}$$

Como resultado se tiene una ecuación de continuidad y una ecuación de movimiento por fase además de los modelos de la física de interacción de las fases como arrastre, corte, etc.

Este modelo ha tenido varias mejoras en la última década permitiendo considerar fenómenos como coalescencia o rompimiento por medio de algoritmos estocásticos y probabilísticos. Los tamaños de las partículas pueden definirse como distribuciones de diámetros de partículas Rossin-Rammler. Además se puede incluso considerar combustión y otras reacciones químicas.

En Colombia la industria ha empleado este tipo de modelos multifase en varios sectores ya que requiere una menor capacidad de computación permitiendo obtener resultados con equipos de cómputo comercialmente disponibles en un tiempo corto de simulación. En el mercado Local colombiano los mayores casos de modelamiento multifase empleando este modelo se han realizado en Skimming tank (tanques desnatadores), celdas de flotación, aplicaciones ambientales en dispersión de material particulado, sedimentadores, y ciclones.

ALGORITMOS PARA EL ACOPLAMIENTO PRESIÓN-VELOCIDAD

Si se observan cuidadosamente las ecuaciones de Navier Stokes es posible darse cuenta que existe un acoplamiento entre dos de las variables del sistema, presión y velocidad.

Para poder percibir esto es posible observar las ecuaciones de continuidad y movimiento en dos dimensiones para flujo en estado estacionario:

Ecuación de cantidad de movimiento en x:

$$\frac{\partial(\rho uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} \quad \text{(Ecuación. A4-37)}$$

Ecuación de cantidad de movimiento en y:

$$\frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} \quad \text{(Ecuación. A4-38)}$$

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad \text{(Ecuación. A4-39)}$$

Donde u es la velocidad en la dirección x y v es la velocidad en la dirección y .

En las ecuaciones A4-37, 38 y 39 es posible observar que la solución de estas requiere considerar tres problemas numéricos importantes:

1. Los términos convectivos de las ecuaciones de las ecuaciones de movimiento $\left(\frac{\partial(\rho uu)}{\partial x}, \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y}, \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} \text{ y } \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} \right)$ presentan no linealidades como productos de las velocidades en cada dirección.
2. Las 3 ecuaciones (A4-36, 37 y 38) están fuertemente acopladas, ya que cada componente de velocidad se encuentra presente en cada una de ellas.

3. La presión esta indefinida explícitamente ya que aparece en las ecuaciones de cantidad de movimiento pero no en la ecuación de continuidad, y no hay una ecuación explícita para describir el comportamiento de la presión.

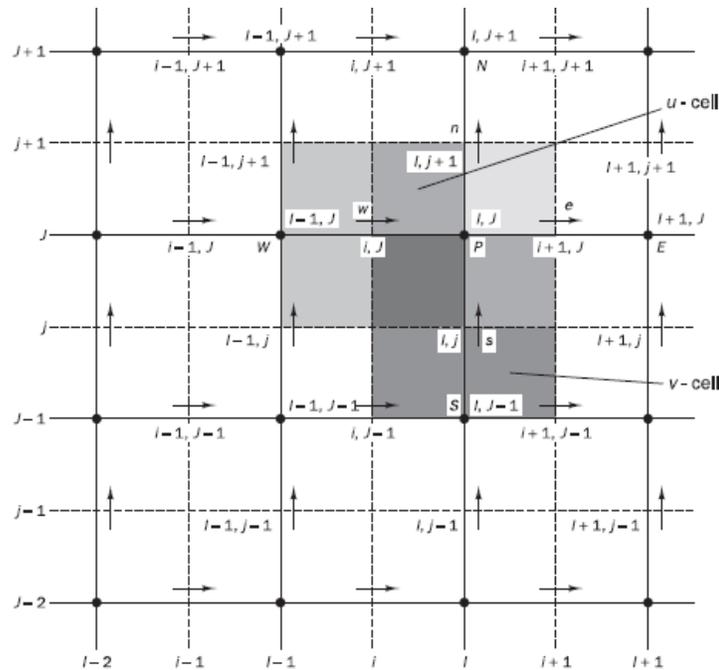
Estos problemas para solucionar las ecuaciones de Navier Stokes requieren de un planteamiento numérico especial, esto con el fin de estimar el campo de presión y velocidad del fluido en el dominio. Los enfoques que han surgido se basan en algoritmos de acoplamiento presión velocidad siendo el más común SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations).

El enfoque del método de volúmenes finitos comienza por discretizar el dominio de flujo, y con él las ecuaciones de transporte. Uno de los puntos importantes es decidir en donde se deben guardar los valores de las componentes de velocidad durante el desarrollo del algoritmo. Lo aparentemente lógico es guardar las velocidades en los mismos puntos de la malla que las cantidades escalares como la presión y la temperatura. Sin embargo, si las velocidades y presiones son guardadas en los mismos puntos de un volumen de control un campo altamente no lineal de presión puede sesgarse y actuar como un campo uniforme en las ecuaciones de cantidad de movimiento discretizadas. Es posible encontrar una demostración detallada en la referencia [1].

Si las velocidades son definidas en los mismos puntos que las variables escalares como la presión, temperatura, etc. Los efectos de la presión en el sistema no son modelados apropiadamente por las ecuaciones de cantidad de movimiento discretizadas.

La forma de superar este problema es empleando una “malla escalonada” para los componentes de velocidad. Con base en esto la idea es entonces evaluar las variables escalares en los puntos nodales ordinarios de la malla, mientras que para calcular las componentes de la velocidad se emplean los puntos medios de las caras dibujadas en los elementos de los puntos nodales para las velocidades como se muestra en la figura a continuación.

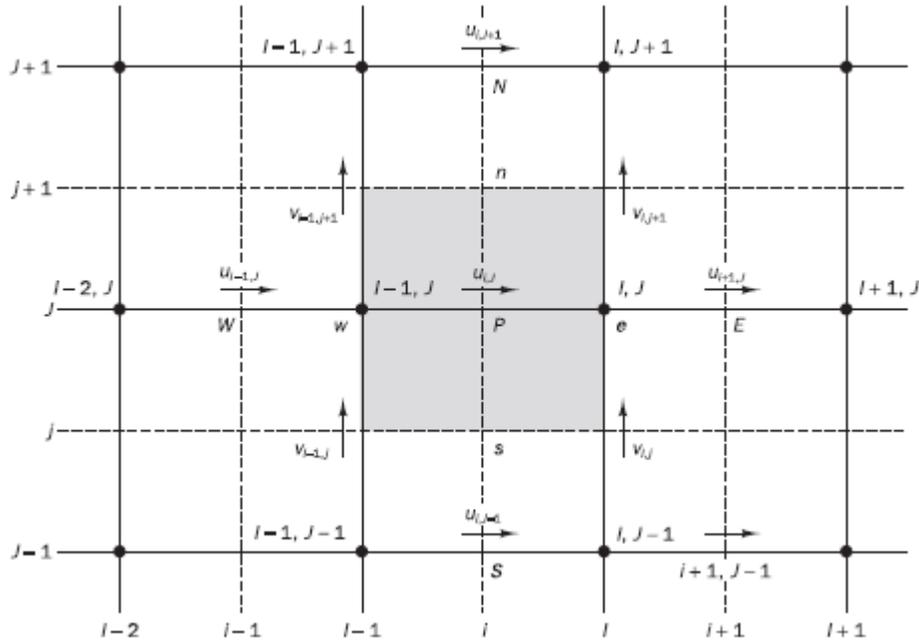
Figura A4-1: Malla escalonada para manejo de acoplamiento Presion-Velocidad , tomado de [1].



Las variables escalares incluida la presión son guardadas en los puntos \bullet . Las velocidades son definidas en las caras de las celdas escalares por medio de flechas. Las flechas de izquierda a derecha indican las ubicaciones para las velocidades u , las flechas de abajo hacia arriba indican la velocidad v . Los puntos e, w, n, s almacenan velocidades y los puntos E, W, N, S almacenan escalares. Mayores detalles pueden encontrarse en la referencia citada [1].

La siguiente figura representa el volumen de control de la componente de velocidad u y los componentes de las velocidades vecinas en un esquema de malla escalonada:

Figura A4-2: Volumen de control de la componente de velocidad u y los componentes de las velocidades vecinas en un esquema de malla escalonada, tomado de [1].



Con base en este tipo de malla escalonada para solucionar el problema de acoplamiento presión-velocidad se plantean ahora las ecuaciones de Navier-Stokes discretizadas.

Ecuación de continuidad discretizada:

$$[(\rho u A)_{i+1,j} - (\rho u A)_{i,j}] + [(\rho v A)_{i,j+1} - (\rho v A)_{i,j}] \quad \text{(Ecuación. A4-40)}$$

Ecuación de cantidad de movimiento en x discretizada:

$$a_{i,j} u_{i,j} = \sum (a_{nb} u_{nb}) - \frac{P_{i,j} - P_{i-1,j}}{\delta x_u} \Delta V_u + \bar{S} \Delta V_u \quad \text{(Ecuación. A4-41)}$$

ó

$$a_{i,j} u_{i,j} = \sum (a_{nb} u_{nb}) - (P_{i,j} - P_{i-1,j}) A_{i,j} + b_{i,j}$$

Dónde:

ΔV_u Es el volumen del elemento finito.

$b_{i,J}$ o $\bar{S}\Delta V_u$ es el término fuente de cantidad de movimiento.

$A_{i,J}$ es la cara izquierda o derecha del volumen de control.

$a_{i,J}$ y a_{nb} contienen combinaciones del flujo convectivo por unidad de masa y el flujo difusivo. Sus valores se obtienen de promediar los valores de estos en el volumen de control.

Para solucionar estas ecuaciones discretizadas se cuenta con varios algoritmos numéricos, siendo el más común, como ya se mencionó, SIMPLE. Este algoritmo fue planteado en 1972 por Patankar y Spalding. Es esencialmente un algoritmo iterativo para calcular los valores de presión y demás escalares en la malla escalonada planteada arriba.

El método define una variable de corrección ϕ' de la siguiente manera para las variables del campo:

$$p = p^* + p'$$

Donde $p' = p - p^*$ y es la variable de corrección, la diferencia entre la presión de campo p y la presión supuesta p^* .

De igual forma para las velocidades:

$$u = u^* + u'$$

$$v = v^* + v'$$

Estas expresiones son entonces reemplazadas en las ecuaciones de Navier Stokes y de transporte discretizadas, (Ver referencias [1] y [34] para mayores detalles en el desarrollo matemático).obteniendo así una ecuación de corrección de presión:

$$a_{i,J}P'_{i,J} = a_{I+1,J}P'_{I-1,J} + a_{I-1,J}P'_{I-1,J} + a_{I,J+1}P'_{I,J+1} + a_{I,J-1}P'_{I,J-1} + b'_{i,J} \quad \text{(Ecuación. A4-42)}$$

Dónde:

$$a_{I+1,J} = (\rho dA)_{i+1,J}$$

$$a_{I-1,J} = (\rho dA)_{i,J}$$

$$a_{i,j+1} = (\rho dA)_{i,j+1}$$

$$a_{i,j-1} = (\rho dA)_{i,j}$$

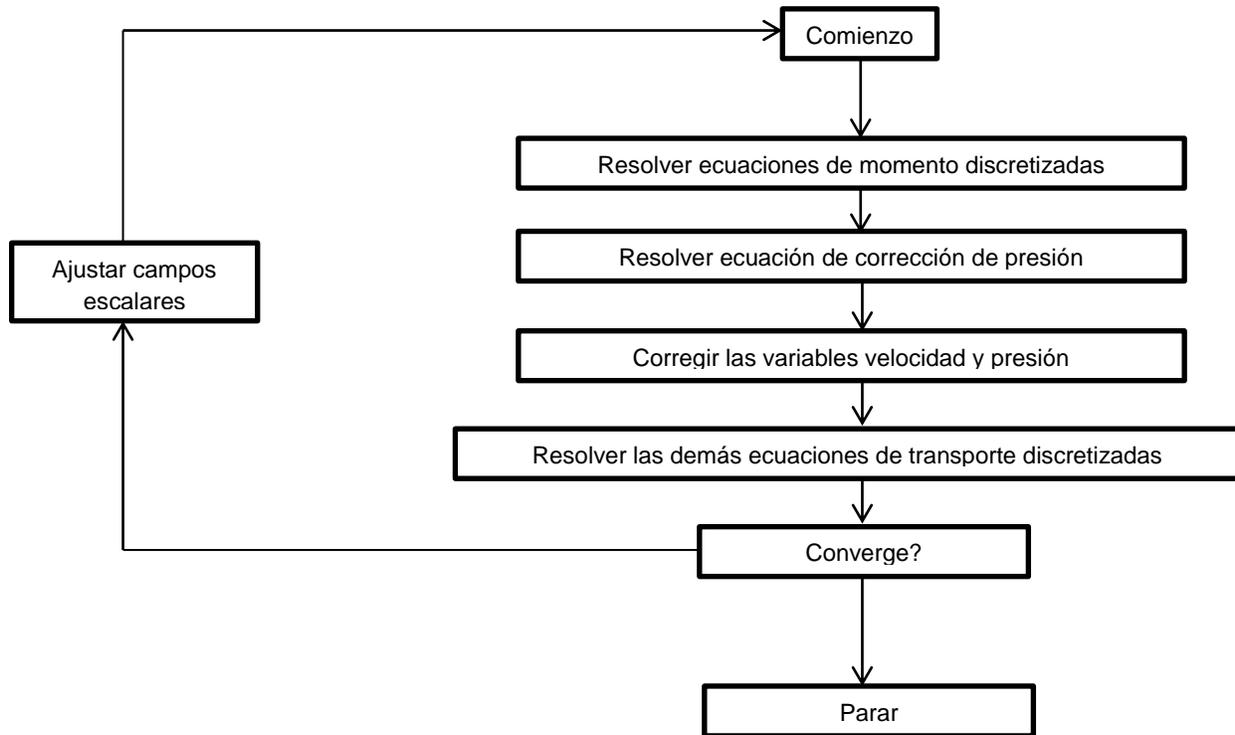
$$b'_{i,j} = (\rho u^* A)_{i,j} - (\rho u^* A)_{i+,j} + (\rho v^* A)_{i,j} - (\rho v^* A)_{i,j+1}$$

La Figura A4-3 muestra el esquema general del algoritmo SIMPLE, este consiste en suponer valores de inicialización para las variables del sistema, para así con estas evaluar las ecuaciones de momento discretizadas y la ecuación de corrección de presión de donde se obtiene la presión de corrección p' . Luego con esta se estiman las velocidades de corrección y finalmente las ecuaciones de transporte discretizadas de las demás variables del sistema. En este punto se revisa la convergencia del algoritmo si no se cumple con los criterios establecidos se lleva a cabo una nueva iteración haciendo como variables supuestas las variables corregidas con las variables de corrección calculadas, si se cumplen los criterios de convergencia se tiene entonces el campo de presión velocidad y las demás variables del sistema distribuidas de acuerdo a este campo.

Hay muchos otros algoritmos para resolver el problema numérico de acoplamiento presión velocidad en CFD empleando volúmenes finitos, algunos de los más comunes son listados a continuación:

- SIMPLER.
- SIMPLEC.
- PISO.

Todos estos algoritmos se basan en el mismo principio que consiste en corregir las variables del sistema calculando valores para las variables de corrección.

Figura A4-3: Esquema del Algoritmo SIMPLE [1].

FACTORES DE RELAJACION

La mayoría de los sistemas que son simulados empleando CFD requieren de relajación en su solución matemática, en especial los sistemas altamente turbulentos. Estos factores tienen lugar cuando se lleva a cabo la corrección de las variables del sistema durante la ejecución del algoritmo de acoplamiento presión velocidad que se esté empleando.

La forma en que operan los factores de relajación es la siguiente:

$$\phi^{nuevo} = \phi^* + u\phi'$$

Donde u es el factor de relajación, si $u > 1$ se tiene una sobre relajación, si $u < 1$ se tiene sub relajación y si $u = 1$ no hay ninguna relajación sobre la variable ϕ .

ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN O DIFERENCIACIÓN

Cuando en el sistema de análisis se da flujo de un fluido el transporte de propiedades por convección es uno de los fenómenos más importantes que deben modelarse. Esto implica solucionar las ecuaciones de Navier Stokes y las ecuaciones de transporte de las variables del sistema considerando los términos convectivos, para lo cual por medio de un enfoque de volúmenes finitos para el desarrollo de una simulación CFD deben discretizarse y esto implica una complicación debida al modelo de diferenciación numérica que se implementa.

El principal problema en la discretización de los términos convectivos es el cálculo de los valores de las propiedades transportadas en las caras del volumen de control y su flujo convectivo a través de las fronteras de los elementos de la malla.

Cuando los fenómenos que se modelan son netamente difusivos, pueden obviarse los términos convectivos, es válido emplear derivadas numéricas centradas, o también llamada esquema de diferenciación central para discretizar los términos difusivos de las ecuaciones de transporte. Sin embargo a pesar de lo que se puede pensar, emplear este mismo esquema para los términos convectivos puede no siempre ser apropiado, ya que llevaría a obtener resultados imprecisos o simplemente un campo de la propiedad con un valor uniforme de cero (para mayores detalles revisar la referencia citada [1]) en los casos en donde la intensidad de transporte convectivo es alta.

Estos errores son principalmente debidos a que los procesos de difusión afectan el valor de la variable transportada en todas las direcciones por medio de los respectivos gradientes, mientras que en el fenómeno de transporte por convección la influencia está principalmente en una dirección vectorial del campo. Esta es una diferencia fundamental que afecta no solo el tamaño de la malla sino también la forma como se discretizan los términos de las ecuaciones de transporte de acuerdo a la intensidad de los fenómenos difusivos y convectivos presentes en el sistema de análisis.

Para poder criticar las ecuaciones considerando los términos convectivos de las ecuaciones de transporte sin tener problemas de convergencia ni resultados imprecisos se emplean esquemas de discretización diferentes a los convencionales, acá se describen algunos de los más comunes.

Los esquemas de discretización en general tienen 3 características principales:

Conservatividad: Hace referencia a la conservación de la cantidad de materia y energía en el sistema en términos de fluxes, convectivos y difusivos, ya que el esquema no debe violar la primera ley de la termodinámica ni entrar en conflicto con la ecuación de continuidad.

Acotación: Es la característica que permite, y requiere, que se especifiquen las condiciones de frontera del sistema, así como también permite la consideración de fuentes de propiedades dentro del sistema, como por ejemplo consumo y generación de materia en una reacción química. Esto de forma tal que se cumpla con el criterio de Scabotough (1958) para la convergencia de los métodos de solución de los sistemas algebraicos que consisten en las ecuaciones de transporte discretizadas.

$$\frac{(\sum |\bar{a}_{nb}|)}{|a'_p|} \begin{cases} \leq 1 & \text{en todos los nodos de la malla} \\ < 1 & \text{en al menos 1 nodo de la malla} \end{cases}$$

Donde a'_p es el coeficiente neto en el centro del elemento P de la malla, y la sumatoria corresponde a la suma de los coeficientes de los elementos vecinos.

Transportabilidad: Fue inicialmente definida por Roache en 1976, esta hace referencia simplemente a cuál es el fenómeno dominante en el sistema que se está modelando, empleando como criterio el número de Peclet:

$$Pe = \frac{F}{D} = \frac{\rho u}{\Gamma} \frac{\delta x}{\delta x} \quad \text{(Ecuación. A4-43)}$$

Donde el sistema se puede caracterizar de la siguiente forma:

$Pe \rightarrow 0$ No hay convección y se tiene un problema puramente difusivo.

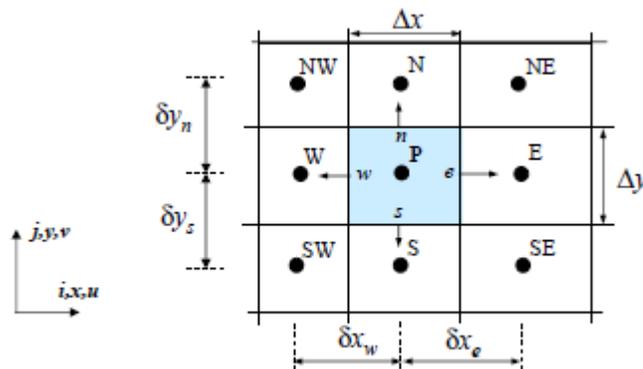
$Pe \rightarrow \infty$ No hay difusión, es un sistema puramente convectivo.

En términos estrictos ningún sistema es puramente riguroso ni puramente difusivo, siempre hay presencia de los dos fenómenos en forma simultánea. Este criterio puede ser utilizado en parte para definir el esquema de discretización adecuado para un determinado sistema.

Acá se presenta una teoría práctica muy corta y resumida sobre esquemas de discretización y sus características, las fuentes citadas contienen mucha más información y desarrollos más detallados [1],[3].

Los esquemas que se muestran a continuación están planteados de acuerdo la siguiente figura:

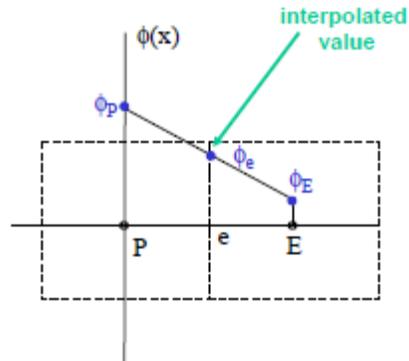
Figura A4-4: Volumen de control típico [3].



ESQUEMA DE DIFERENCIACION CENTRAL (CENTRAL DIFFERENCING SCHEME)

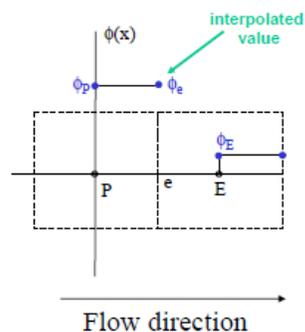
El valor de la propiedad ϕ en la cara se determina por medio de una interpolación lineal entre los valores centrales de las celdas.

Este esquema es más estable que First Order Upwind, pero puede llevar a oscilaciones en la solución o a divergencia si el número de Peclet es mayor a 2. Debido a esto es una práctica común que se utilice central y cuando y donde el número de Peclet supera el valor de 2 se cambia el esquema a First order upwind, a este enfoque se le llama esquema híbrido (hybrid differencing Scheme).

Figura A4-5: Central Differencing Scheme, tomado de [3].**ESQUEMA DE DIFERENCIACION AGUAS ARRIBA (UPWIND DIFFERENCING SCHEME)**

Este es el esquema más sencillo de todos, consiste en asumir que el valor de ϕ en la cara como el valor del centro de la celda aguas arriba.

Este esquema es fácil de implementar y es bastante estable, aunque presenta una difusión numérica considerable.

Figura A4-6: First Order Upwind Differencing Scheme, tomado de [3].

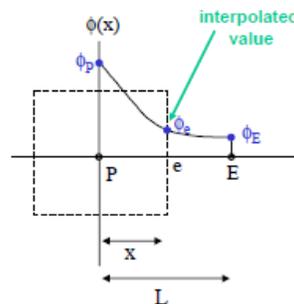
ESQUEMA DE LEY DE POTENCIAS (POWER LAW SCHEME)

Este esquema está basado en la solución analítica de una ecuación en una dimensión de convección y difusión.

El valor de la cara es determinado por medio de un perfil a través de los elementos de la malla o celdas. Este perfil adopta la siguiente forma:

$$\phi_e = \phi_p - \frac{1 - 0.1P_e}{P_e} (\phi_E - \phi_P) \quad \text{(Ecuación. A4-44)}$$

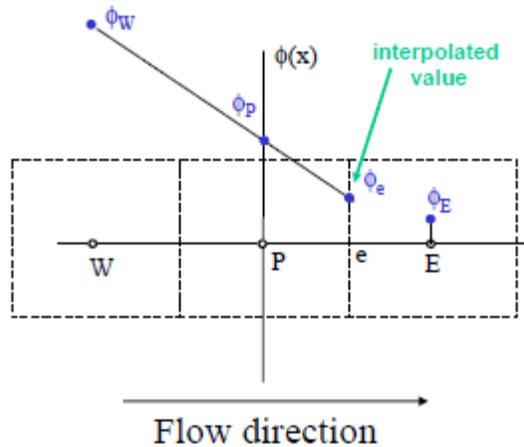
Figura A4-7: Power Law Differencing Scheme, tomado de [3].



ESQUEMA DE DIFERENCIACION AGUAS ARRIBA DE SEGUNDO ORDEN (SECOND ORDER UPWIND SCHEME)

Este esquema es una versión del First Order Upwind, solo que para considerar flujos con altas velocidades de transporte convectivo. Se basa en tomar el valor de ϕ en las caras de la celda como el valor del centro de dos celdas aguas arriba.

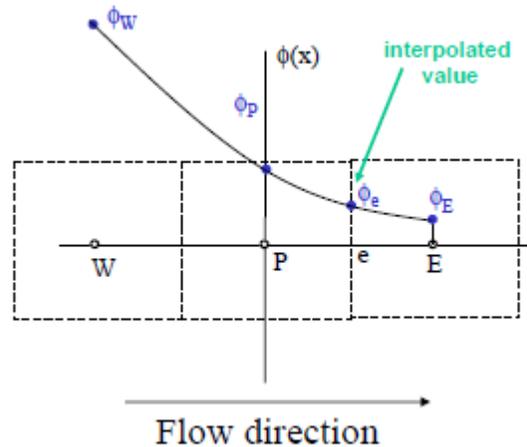
Este esquema presenta una buena combinación entre estabilidad y precisión, por esto suele ser bastante utilizado.

Figura A4-8: Second Order Upwind Differencing Scheme, tomado de [3].

QUICK SCHEME

QUICK (Quadratic Upwind Interpolation for Convective Knetics) es un método que se basa en una curva cuadrática ajustada a través de dos nodos aguas arriba y uno aguas abajo de la celda.

Es un esquema bastante preciso, pero en regiones con fuertes gradientes de presión pueden ocurrir sobresaltos. Esto provoca inestabilidad durante el cálculo.

Figura A4-9: QUICK Differencing Scheme, tomado de [3].

Los métodos de discretización o diferenciación acá descritos tienen fundamentos teóricos que pueden encontrarse en mayor detalle en las fuentes referenciadas [1,2,3].

SOLUCION A LAS ECUACIONES DISCRETIZADAS

La discretización de las ecuaciones de Navier Stokes resulta en un sistema algebraico que debe ser resuelto. El tamaño y complejidad de las ecuaciones y del sistema depende del sistema que se está modelando, ya que esto afecta el tamaño de la malla, el algoritmo de discretización, el método de acoplamiento presión velocidad y los criterios de convergencia además de los fenómenos que pueden llegar a estar presentes.

Cualquier procedimiento para resolver sistemas de ecuaciones lineales puede ser empleado, dependiendo de los recursos computacionales disponibles. Hay dos tipos de métodos para resolver este tipo de sistemas, métodos directos y métodos indirectos. Un ejemplo de método directo es el método de Cramer para invertir matrices empleando los determinantes de las matrices reducidas de la misma, o la reducción de Gauss. El número de ecuaciones es N y el número de incógnitas es N también, el almacenamiento simultaneo de los N^2 coeficientes requiere de disponibilidad de recurso en términos de memoria.

En el caso del método de volúmenes finitos es común que los sistemas que se deben resolver sean desde tridiagonales hasta pentagonales dependiendo de la complejidad del sistema, y el número de ecuaciones a resolver puede ser del orden de 100000 a 1 millón de ecuaciones en un caso de CFD realista, en este orden de ideas resulta más eficiente el uso de métodos indirectos debido a las limitantes en términos de memoria, tiempo y capacidad de procesamiento.

Thomas (1949) propuso una rápida técnica para resolver sistemas tridiagonales, este método es ahora llamado algoritmo de Thomas o TDMA (Tri-Diagonal Matrix Algorithm). TDMA es de hecho un método directo cuando se tienen modelos unidimensionales, pero puede ser aplicado de forma iterativa para resolver problemas multidimensionales, este método es ampliamente utilizado en los paquetes de software para CFD. Es un método económico en términos de capacidad de máquina con poco uso de memoria como principal ventaja.

Los métodos de Jacobi y Gauss-Seidel son métodos que consisten en algoritmos iterativos fáciles de implementar. Sin embargo la velocidad de convergencia puede ser baja cuando el sistema de ecuaciones es grande. Esto puede parecer que los hace inapropiados para ser aplicados en problemas CFD, aun así recientemente se han desarrollado importantes avances en técnicas de aceleración de multi-malla (multi-grid acceleration techniques), permitiendo tener mejoras en la velocidad de convergencia. De hecho en las últimas versiones de los paquetes de software comerciales es posible seleccionar entre todos estos métodos y modificaciones de los mismos.

Todos estos métodos de solución de sistemas algebraicos están descritos en detalle en varias fuentes a las cuales puede remitirse el lector para su estudio minucioso: [1,3,34].