

Modelización del comportamiento térmico de lechos fijos asistida por Fluidodinámica Computacional (CFD)

Mariana Teresa Zambon

**Tesis presentada para obtener el grado de
DOCTOR EN INGENIERÍA**

Director: Dr. Germán D. Mazza

Co-Director: Dr. Guillermo F. Barreto

Universidad Nacional de La Plata

Facultad de Ingeniería

Departamento de Ingeniería Química

La Plata, Marzo de 2010

*a mis padres, mi esposo
y mi hijo, Matías*

Mi agradecimiento

Al Dr. Germán Mazza, por su invaluable dirección, sugerencias y continuas enseñanzas que permitieron concretar este trabajo.

Al Dr. Guillermo Barreto, por su meticulosa revisión, por sus consejos y por el estímulo que me brindó para seguir creciendo en el camino de la investigación.

A la Mg. Francisca Barassi, por su generosa colaboración y su permanente apoyo y comprensión.

Al Ing. José Luis Aprea y a la Ing. Daniela Asensio, por su consideración y generosa ayuda.

A mi familia y a mis amigos, por acompañarme en todo momento.

A las Facultades de Ingeniería de la Universidad del Comahue y de la Universidad Nacional de la Plata.

Mariana T. Zambon

Diciembre de 2009.

ÍNDICE

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN GENERAL.....	1.3
1.1 Presentación del tema	
1.2 Objetivos del trabajo	
1.3 Descripción de los contenidos del trabajo	

CAPÍTULO II

MODELIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO TÉRMICO DE LECHOS FIJOS. REVISIÓN DE MODELOS Y ENFOQUES EXISTENTES.....	2.3
2.1. Introducción	
2.2. Modelado de <i>RCLF</i>	
2.2.1 Formulación de Modelos Pseudohomogéneos	
2.2.1.1 Modelo Unidimensional Pseudohomogéneo (<i>1P</i>)	
2.2.1.2 Modelo Bidimensional Pseudohomogéneo (<i>2P</i>)	
2.2.3 Evaluación de los parámetros de transferencia de calor	
2.3 Comportamiento de Lechos Fijos de baja relación de aspecto	
2.4 Conclusiones	

CAPÍTULO III

MODELO DE DOS ZONAS PARA EL TRANSPORTE DE CALOR EN LECHOS FIJOS DE BAJA RELACIÓN DE ASPECTO.....	3.3
3.1 Introducción	
3.2 Antecedentes	
3.3 Modelo Propuesto, MDZ	
3.4 Formulación de Balances de Energía para el MDZ	

- 3.4.1 Resolución del sistema de ecuaciones formulado
- 3.5 Conclusiones

CAPÍTULO IV

- ANÁLISIS COMPARATIVO DE LA UTILIZACIÓN DE UN MDZ FRENTE A LA ALTERNATIVA DE MODELIZACIÓN MEDIANTE UN MODELO 2P PARA LECHOS FIJOS DE BAJA RELACIÓN DE ASPECTO CON REACCIÓN QUÍMICA..... 4.3**
- 4.1 Introducción
 - 4.2 Utilización de los modelos MDZP y 2P sin reacción química para la definición de condiciones de comparación apropiadas
 - 4.3 Formulación de los modelos con reacción química
 - 4.3.1 Modelo 2P con reacción química
 - 4.3.2 Modelo de dos zonas (MDZP) con reacción química
 - 4.4 Resolución numérica de las ecuaciones de los modelos MDZP y 2P
 - 4.4.1 Modelo pseudohomogéneo bidimensional
 - 4.4.2 Modelo de dos zonas pseudohomogéneo
 - 4.4.3 Reacción química y expresión cinética utilizada en la comparación
 - 4.5 Condiciones operativas y cálculo de propiedades para la comparación
 - 4.6 Comportamiento del Modelo de Dos Zonas. Discriminación de la participación de cada zona en los perfiles radiales y axiales
 - 4.7 Análisis comparativo del comportamiento del MDZP con el modelo 2P
 - 4.7.1. Efecto de la relación de aspecto
 - 4.7.2. Efecto de Re_p
 - 4.7.3. Efecto del calor de reacción
 - 4.8 Conclusiones del estudio

CAPÍTULO V

- FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL. GENERALIDADES DE LA TÉCNICA. MODALIDADES DE UTILIZACIÓN PARA LA REPRESENTACIÓN DE LECHOS FIJOS..... 5.3**
- 5.1 Introducción
 - 5.1.1 Breve historia de la CFD

- 5.1.2 Aplicaciones de la CFD
- 5.1.3 Algunas ventajas e inconvenientes de la CFD
- 5.1.4 La CFD en la Ingeniería Química
- 5.1.5 Aplicaciones de la CFD a reactores de lecho fijo
- 5.2 Tratamiento del flujo de fluidos y modelos utilizados por la CFD
 - 5.2.1 Ecuaciones de conservación a resolver por la CFD
 - 5.2.2 Tratamiento del flujo turbulento
 - 5.2.2.1 Tratamiento de la región cercana a la pared en flujos turbulentos
- 5.3 Discretización de las ecuaciones de transporte
- 5.4 Procedimiento de resolución por CFD
 - 5.4.1 Pre-procesamiento
 - 5.4.2 Resolución
 - 5.4.3 Pos-procesamiento

CAPÍTULO VI

- APLICACIÓN DE LA CFD PARA LA OBTENCIÓN DE INFORMACIÓN SOBRE EL COMPORTAMIENTO DE LECHOS FIJOS..... 6.3**
- 6.1 Introducción
 - 6.2 Modalidad de construcción de la celda de cálculo
 - 6.2.1 Arreglo espacial del lecho de partículas
 - 6.2.2 Metodología de resolución y topología de la celda de cálculo
 - 6.2.2.1 Construcción de la celda estableciendo las condiciones de borde:
velocidad en la entrada y presión en la salida
 - 6.2.2.2 Construcción de la celda con fronteras periódicas
 - 6.2.2.3 Determinación del número de estratos de la celda de cálculo
 - 6.3 Construcción de la geometría de la celda y generación de la malla
 - 6.3.1 Validación de la malla
 - 6.4 Selección del modelo de turbulencia
 - 6.5 Principales características de la implementación de la simulación por CFD
 - 6.6 Conclusiones

APÉNDICE VI.1

Modelo de turbulencia Spalart-Allmaras

Modelo de turbulencia Estándar k-ε

CAPÍTULO VII

CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LECHOS

FIJOS: EVALUACIÓN DE LA PÉRDIDA DE CARGA..... 7.3

7.1 Introducción

7.2 Ecuaciones existentes para el cálculo de la pérdida de carga en lechos fijos

7.2.1 Efecto de la pared de tubo

7.3 Evaluación de la pérdida de carga en lechos fijos por CFD

7.4 Conclusiones

CAPÍTULO VIII

EVALUACIÓN DE PARÁMETROS DEL MDZ ASISTIDA

POR CFD PRESENTACIÓN DE RESULTADOS Y DE

CORRELACIONES FINALES..... 8.3

8.1 Introducción

8.2 Formulación de hipótesis para el cálculo de los parámetros térmicos y fluidodinámicos

8.3 Coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w

8.4 Coeficiente de transferencia de calor entre las zonas “1” y “central”, h_{1c}

8.5 Conductividad efectiva radial de la zona central, k_{er}

8.6 Relación de velocidades entre zonas, $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$

8.7 Conclusiones

APÉNDICE VIII.1

Vectores velocidad sobre los planos x-y localizados en las posiciones axiales $L_z/4$ y $L_z/2$ para los arreglos ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto.

CAPÍTULO IX

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS..... 9.3

9.1 Significación de los objetivos alcanzados

9.2 Sugerencias para la continuación los trabajos de investigación en el tema

NOMENCLATURA..... N.1

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... B.1



FACULTAD DE
INGENIERIA
DIO. INGENIERIA QUIMICA
LA PLATA

•

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN GENERAL

1.1 Presentación del tema

1.2 Objetivos del trabajo

1.3 Descripción de los contenidos del trabajo

1.1 Presentación del tema

La mayor parte de los procesos catalíticos utilizados en las industrias de procesos se llevan a cabo en reactores de lecho fijo. Desde el comienzo de su aplicación, en la década del 40, y hasta la actualidad, su desarrollo ha sido continuo. El amplio esfuerzo llevado a cabo en el estudio de estos equipos es fácilmente entendible si se repasan algunos de los procesos que en ellos se realizan: reformado catalítico de gas natural, síntesis de amoníaco, de metanol, de óxido de etileno, de ciclohexano, de estireno, oxidación de anhídrido sulfuroso, isomerización, entre otros.

Un dato importante a tener en cuenta es el gran aumento en la demanda y consecuentemente en la producción que han experimentado determinados productos químicos. Tal es el caso de las fibras sintéticas, los plásticos y los fertilizantes químicos, lo que, indudablemente, ha generado un incremento en la producción de los productos químicos básicos.

Este hecho apoyado en la economía de escala, provocó el crecimiento de las unidades de producción. Basta citar como ejemplo a un producto como el amoníaco, que se producía en la década del 50 en unidades de unas 200 Tn/día (Ondrey, 2008). En la actualidad es habitual la construcción de reactores con una capacidad de 2200 Tn/día, diez veces mayor, como los existentes en la Planta Industrial de Agua Pesada (Arroyito, Neuquén) y en la Planta Industrial de Profertil (Bahía Blanca). Datos semejantes se podrían aportar para la producción de ácido sulfúrico y metanol.

Este cambio de escala ha estado limitado por restricciones fluidodinámicas (canalizaciones, aumento de la pérdida de carga) y efectos de transmisión de calor (existencia de puntos calientes), así como por consideraciones de diseño (recipientes de elevado volumen preparados para resistir altas presiones, con grandes necesidades de intercambio de calor, etc.).

Ciertas innovaciones de diseño introducidas en los reactores de lecho fijo han permitido solucionar, en cierta medida, estos problemas. Así, en los reactores de alta producción se ha recurrido al flujo radial, que produce una menor pérdida de carga que el axial, con la repercusión correspondiente surgida del hecho de poder utilizar tamaños menores de partículas de catalizador. Esta solución se ha utilizado, entre otros procesos, en la síntesis de amoníaco y de metanol.

Adicionalmente, para llevar a cabo la síntesis de reacciones altamente exotérmicas o endotérmicas, con grandes necesidades de transferencia de calor, el reactor debe construirse con cierto número de tubos engarzados en un solo cuerpo. Tal es el caso de numerosos procesos químicos, como por ejemplo: oxidaciones (etileno, naftaleno), hidrogenaciones (nitrobenceno, fenol), deshidrogenación de ciclohexanol y reformado de gas natural (Froment y Bischoff, 1990). Dichos reactores están conformados por numerosos tubos ubicados en posición vertical, empacados con partículas catalíticas que pueden variar en tamaño y forma (cilíndricas, esféricas, etc.).

Existen dos procedimientos generales para el diseño de los reactores de lecho fijo. El diseño de tipo empírico, basado en datos experimentales obtenidos a diferentes escalas: laboratorio, planta piloto y semi-industrial, para poder extrapolar, luego, al reactor de nivel industrial. Este tipo de diseño compromete esfuerzos y costos de investigación muy elevados además de presentar una dificultad prácticamente insalvable, que reside en el cambio de escala en presencia de la reacción química, operación completamente desaconsejable sin apoyarse en una simulación confiable. El segundo procedimiento se basa en la aplicación de modelos matemáticos, más o menos complejos, que tienen en cuenta los distintos fenómenos que ocurren en el reactor: la reacción química, el transporte de materia, de energía y cantidad de movimiento. La complejidad del modelo adoptado depende de los fenómenos que se tienen en cuenta. Naturalmente, a mayor número de éstos últimos, mayor complejidad en las ecuaciones que describen el modelo y un número más elevado de parámetros en las mismas. Existe, no obstante, una regla básica que indica que, el modelo no debe ser más detallado de lo absolutamente necesario para el propósito particular que se persigue y que debe contener tan pocos parámetros como sea posible (Hofman, 1979).

Es claro el esfuerzo que en las últimas dos décadas se está dedicando al desarrollo de modelos, cuya finalidad consiste en generar las herramientas necesarias para proceder al diseño y análisis de los reactores de lecho fijo en forma rápida y ágil. Al mismo tiempo, estos modelos son utilizados para desarrollar potentes simuladores que permitan a la industria de procesos predecir el comportamiento de los reactores existentes o nuevos, ante cambios en las condiciones operativas.

La motivación fundamental de este trabajo reside en el estudio fluidodinámico y de los fenómenos de transferencia de calor en reactores de lecho fijo multitubulares altamente exigentes en lo que respecta a la transferencia de calor, con el fin de lograr,

mediante el planteo de un modelo simplificado, un método de diseño rápido y confiable y de predicción del comportamiento de estos sistemas.

1.2 Objetivos del trabajo

Se han realizado numerosos estudios y existen en la literatura gran cantidad de trabajos de investigación experimental y de modelización sobre los fenómenos involucrados en la transferencia de calor y evaluación de la pérdida de carga en lechos fijos. Sin embargo, se observa una importante dispersión entre las expresiones predictivas propuestas por diferentes autores.

En general, los estudios sobre lechos fijos (LF) y las correlaciones propuestas han sido desarrolladas para LF con alta relación de aspecto ($N = d_t/d_p$), en los que los perfiles evaluados sobre secciones transversales al flujo, son suaves y pueden ser promediados. Sin embargo, en los casos de lechos de baja relación de aspecto ($N \leq 10$) la existencia de los llamados “efectos de pared” provoca perturbaciones que se extienden sobre toda la sección transversal del LF y que deben ser especialmente consideradas.

En los LF se producen perfiles radiales de velocidad con características muy particulares en las zonas cercanas a la pared, con variaciones dependientes de magnitudes tales como la geometría del relleno y la relación de aspecto. La velocidad presenta un máximo en las cercanías de la pared puesto que es ésta una región de elevada porosidad que propicia la canalización del fluido (Negrini y colab, 1999). Este efecto, que ejerce una influencia despreciable en lechos de gran diámetro, debe ser especialmente considerado en los casos de baja relación de aspecto.

La finalidad principal de esta tesis es el planteo de un modelo matemático que permita representar el comportamiento de un lecho fijo de baja relación de aspecto, incluyendo la formulación de expresiones predictivas para sus parámetros. El énfasis del trabajo, no obstante, estará puesto en la transferencia de calor entre el LF y el medio externo. Adicionalmente, se realizará un estudio fluidodinámico con el fin proponer una metodología para la evaluación de la pérdida de carga a través del LF. El trabajo se enfoca específicamente en los casos de lechos fijos de baja relación de aspecto.

El modelo que se desarrollará en detalle en los sucesivos capítulos de esta Tesis se denomina “Modelo de Dos Zonas” (MDZ). En él, un lecho se representa como una zona anular adyacente a la pared cuyo espesor es de un radio de partícula, seguida de una segunda zona, denominada central, que constituye el seno del lecho. En ambas zonas, la porosidad será esencialmente diferente, con un elevado valor en la región periférica.

Se propondrá como metodología para la obtención de las correlaciones para la determinación de los parámetros térmicos y fluidodinámicos del modelo la utilización de la Fluidodinámica Computacional (CFD). Esta técnica constituye un valioso medio de obtención de información de alta calidad (Joshi y Ranade, 2003).

Se utilizará el programa comercial *FLUENT* para resolver las ecuaciones de cambio características del sistema, en forma rigurosa, supliendo la realización de experiencias de laboratorio y conformando una alternativa que puede denominarse experimentación virtual.

Es importante señalar que, no debe pensarse en el programa comercial adoptado como un simulador del lecho fijo por cuestiones prácticas y de demanda de tiempo para la respuesta al cálculo. El “Modelo de Dos Zonas” es el objetivo a alcanzar por su sencillez, agilidad y velocidad de respuesta. El *software FLUENT* constituye, en este caso, exclusivamente, un medio muy valioso para la obtención de información imprescindible para su formulación.

1.3 Descripción del contenido del trabajo

Con el fin de conocer los antecedentes relacionados con la modelización del comportamiento térmico de los lechos fijos, el Capítulo II contiene una revisión de los modelos y enfoques existentes. El trabajo se centra en la modelización de reactores catalíticos de lecho fijo (RCLF) que operan en régimen estacionario. Los modelos que se describen se hallan clasificados en dos grandes grupos: modelos Pseudohomogéneos y modelos Heterogéneos. En particular, se reseñan los trabajos hallados en la bibliografía referidos a la influencia de la relación de aspecto sobre el comportamiento fluidodinámico y térmico de los RCLF.

En el Capítulo III se presenta el modelo mencionado en esta Introducción para la interpretación del proceso de transferencia de calor en lechos fijos de baja relación de aspecto, denominado Modelo de Dos Zonas (MDZ). Se describen los antecedentes que permitieron alcanzar su desarrollo y se detalla su formulación general.

El Capítulo IV está destinado a presentar resultados que sustentan de manera taxativa el uso de un enfoque de dos zonas frente a la modelización clásica de estas unidades, para bajas relaciones de aspecto. Se compara el comportamiento del MDZ con un modelo bidimensional clásico en presencia de una reacción química de referencia.

En el Capítulo V se describen las características generales de la técnica de Fluidodinámica Computacional. Se presenta una breve historia de la CFD, detallándose sus potenciales aplicaciones, principales ventajas e inconvenientes. Adicionalmente, se describen antecedentes y primeras aplicaciones de la CFD desarrolladas para su utilización específica en la Ingeniería Química. Se explica el tratamiento del flujo de fluidos, a través de la resolución de las ecuaciones de conservación y los modelos específicos utilizados por la CFD. En particular, por su importancia en la aplicación a realizar, se describe el tratamiento del flujo turbulento y de la región cercana a la pared que efectúa el *software*. Finalmente se detallan los pasos a seguir durante el procedimiento de resolución por CFD.

En el Capítulo VI se realiza un análisis de las distintas alternativas disponibles para llevar a cabo la simulación por CFD, ya que, al no ser factible la simulación del lecho completo, debe acotarse la geometría del problema a tratar. Para representar la pared del tubo que contiene al lecho de partículas, se utiliza una geometría conformada por placas paralelas en lugar de un conducto circular, con el objeto de simplificar el planteo. Las simulaciones se desarrollan sobre lechos conformados por partículas esféricas y dispuestas según arreglos geométricos estructurados. Se describen dichos arreglos, se discuten distintas alternativas de aplicación de la CFD y se establecen las condiciones de contorno del problema. Se muestran las mallas generadas y se describe el proceso de validación de las mismas.

El Capítulo VII describe la evaluación de la caída de presión en lechos fijos, por medio de la técnica de CFD, para un amplio rango de condiciones operativas y para LF de baja relación de aspecto, con diferentes porosidades. Se realiza una descripción de las principales ecuaciones para la predicción de la pérdida de carga en LF existentes en

la bibliografía y se comparan los valores calculados a partir de las simulaciones con los obtenidos a partir de dichas correlaciones. Es importante señalar que la finalidad de este trabajo no reside en proponer una correlación alternativa para la evaluación de ΔP , sino en aportar información, contribuir al conocimiento y recomendar una metodología de cálculo de esta importante variable.

En el Capítulo VIII se aplica la metodología de simular una porción de lecho fijo por CFD, con el fin de generar la información necesaria (perfiles de temperatura, de presión y de velocidad, flujos másicos y de calor) para la obtención de las correlaciones de cálculo correspondientes a cada uno de los parámetros del MDZ. Asimismo, se realiza una comparación de los valores de los parámetros calculados a partir de las correlaciones halladas con correlaciones existentes en la bibliografía para el caso de los parámetros: coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w , y conductividad térmica efectiva radial, k_{er} . Se incluye una Tabla de síntesis de las correlaciones generadas para la evaluación de todos los parámetros del MDZ, rangos y condiciones de aplicación.

Por último, el Capítulo IX resume las conclusiones y observaciones generales, como así también las sugerencias para la realización de futuros trabajos tendientes a continuar la investigación relacionada con los tópicos desarrollados en esta Tesis.

Parte de los desarrollos y resultados presentados en esta Tesis han sido publicados por la autora y sus directores de trabajo, Dr. Germán Mazza y Dr. Guillermo Barreto, en los siguientes artículos:

- ✓ “Modelo de Dos Zonas para Lechos Fijos con información asistida por CFD”
Revista Ingeniería Mecánica, Tecnología y Desarrollo, 2, 123-131, 2007.
- ✓ “Estudio de la pérdida de carga en lechos de partículas mediante la utilización de CFD”
Mecánica Computacional, 26, 1075-1091, 2007.
- ✓ “Modelización de la transferencia de calor en lechos fijos asistida por fluidodinámica computacional”
Mecánica Computacional, 26, 3709-3726, 2007.

- ✓ “Análisis de perfiles radiales de temperatura para lechos fijos de baja relación de aspecto por CFD”
Mecánica Computacional, 26, 3709-3726, 2008.
- ✓ “Application of Computational Fluid Dynamics (CFD) for an Efficient Evaluation of Pressure Drop and Heat Transfer in Fixed Beds”
Récents Progrès en Génie des Procédés, 98, 2009.

y en comunicaciones a los siguientes Congresos de la Especialidad:

- XI CONGRESO LATINOAMERICANO DE TRANSFERENCIA DE CALOR Y MATERIA (*LATCyM'2006*)
- XXII INTERAMERICAN CONGRESS OF CHEMICAL ENGINEERING (*2006*)
- CONGRESO SOBRE MÉTODOS NUMÉRICOS Y SUS APLICACIONES (*ENIEF 2007, ENIF 2008*)
- VIII CONGRESO IBEROAMERICANO DE INGENIERIA MECANICA (*CIBIM8*)
- 9º CONGRESO INTERAMERICANO DE COMPUTACIÓN APLICADA A LA INDUSTRIA DE PROCESOS (*CAIP 2009*)
- CONGRÈS DE LA SOCIÉTÈ DE GÈNIE DES PROCÈDÉS (*2009*)

CAPÍTULO II

MODELIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO TÉRMICO DE LECHOS FIJOS. REVISIÓN DE MODELOS Y ENFOQUES EXISTENTES.

2.1. Introducción

2.2. Modelado de RCLF

2.2.1 Formulación de Modelos Pseudohomogéneos

2.2.1.1 Modelo Unidimensional Pseudohomogéneo (*1P*)

2.2.1.2 Modelo Bidimensional Pseudohomogéneo (*2P*)

2.2.2 Formulación de Modelos Heterogéneos

2.2.2.1 Modelo unidimensional heterogéneo (*1H*)

2.2.2.2 Modelo bidimensional heterogéneo (*2H*)

2.2.3 Evaluación de los parámetros de transferencia de calor

2.3 Comportamiento de Lechos Fijos de baja relación de aspecto

2.4 Conclusiones

2.1 Introducción

Como se ha mencionado en el capítulo introductorio, el reactor catalítico de lecho fijo (RCLF) es, probablemente, el equipo más empleado en la industria de procesos. Los RCLF, al estar rellenos con partículas de catalizador se caracterizan por la ocurrencia de fenómenos de cierta complejidad que condicionan la transferencia de materia y energía entre la corriente de fluido, la superficie de las partículas de catalizador y la estructura porosa del mismo.

Un aspecto que desde el punto de vista del modelado de un reactor aparece como fundamental es el de la existencia de transferencia de calor con el medio externo, característica que permite establecer una diferenciación entre dos formas de operación:

- **Reactores adiabáticos:** sin intercambio de calor a través de las paredes del reactor.
- **Reactores no-adiabáticos:** con intercambio de calor a través de las paredes del reactor.

Dentro de los reactores adiabáticos se pueden incluir los que comprenden un único lecho o varios en serie con intercambio de calor entre los mismos. Por otra parte dentro del conjunto de reactores no-adiabáticos se incluyen situaciones que pueden parecer disímiles, como el caso del reformador de gas natural, en el cual los tubos rellenos de catalizador son instalados dentro de un horno para ser calefaccionados, o el del reactor multitubular de oxidación parcial de hidrocarburos, con refrigeración a través de las paredes.

Sin embargo, al abordar el modelado de un reactor, es posible llevar a cabo un análisis genérico que contemple diversas condiciones operativas posibles y establecer como condición de borde la existencia o no de transferencia de calor con el medio.

Asimismo la influencia antagónica del diámetro de tubo vinculada a los valores de pérdida de carga (ΔP) y velocidad de transferencia de calor hacia el medio externo determina que la correcta evaluación de estas dos magnitudes sea un requisito de importancia fundamental en el análisis y diseño de la unidad.

Para llevar a cabo el modelado de un RCLF es necesario tener en cuenta la compleja interacción de transformaciones físicas y químicas que en él se producen. A fin de recolectar la información suficiente para desarrollar un modelo adecuado, es conveniente aislar y analizar separadamente dichas transformaciones. Para reactores

catalíticos de lecho fijo en particular, Martínez y colab. (1985) establecieron una división en tres niveles o escalas de modelización que se corresponden en forma muy cercana con la realidad física del sistema en cada escala:

- *Escala del sitio catalítico:* sobre la superficie del sólido es exactamente donde se produce la reacción química. Mediante el análisis de esta escala se incorpora en el modelo la expresión de la velocidad de reacción intrínseca y los valores de los parámetros cinéticos que la misma incluye. La información necesaria para la modelización de esta escala surge del análisis de resultados experimentales sobre la reacción en estudio.
- *Escala de la pastilla de catalizador:* en esta escala se evalúan los procesos de transporte de calor y materia que se desarrollan simultáneamente con la reacción química dentro de la pastilla de catalizador. La información requerida para evaluar los parámetros de los modelos que representan los fenómenos mencionados se obtiene experimentalmente, aunque con ensayos exclusivamente físicos (determinación de la porosidad de la pastilla, distribución de tamaño de poro, etc.) es posible alcanzar una aceptable información para evaluar los parámetros efectivos de transporte de calor y materia. Con el conocimiento de la expresión de la velocidad de reacción intrínseca es posible formular los balances de energía y materia y resolver los mismos para evaluar el factor de efectividad global. Afectando a la velocidad de reacción intrínseca, evaluada en las condiciones de la superficie de la pastilla, por el factor de efectividad, se obtiene una velocidad de reacción *efectiva*. Aunque no siempre es posible obtener una expresión analítica del factor de efectividad, existen muy buenas aproximaciones para cálculo del mismo (Gonzo y Gottifredi, 1981).
- *Escala del lecho relleno:* en esta escala se trata de establecer el modelo que vincula los procesos de transporte que ocurren en el conjunto del lecho (transporte convectivo y difusivo de calor y materia) con el medio externo, entrada y salida de la corriente de proceso y transferencia de calor a través de la pared. Para incorporar la información de lo que sucede en la pastilla de catalizador se utiliza el concepto de factor de efectividad mencionado anteriormente. Esta escala del modelado es la que puede ser más extensamente desarrollada sin recurrir a estudios experimentales sobre el reactor y la reacción química. Sin embargo, en cualquier caso de análisis las otras escalas mencionadas deben ser incorporadas.

Dado que en este trabajo se pretende analizar exclusivamente la escala del lecho relleno, se considerará que las otras escalas pueden representarse adecuadamente.

El desarrollo de un modelo de RCLF en la escala mencionada puede perseguir alguno de los siguientes objetivos señalados por Shinnar (1978):

- Un mejor conocimiento del sistema, lo cual puede conducir a mejoras en su diseño.
- Predicción de la dinámica del sistema para propósitos de control.
- Optimización de las condiciones operativas del estado estacionario.
- Análisis de la influencia de diferentes alimentaciones, catalizadores y condiciones de reacción sobre la distribución de productos.
- Cambio de escala de planta piloto a plantas de tamaño industrial.

Una vez planteada la necesidad de satisfacer alguno de los objetivos mencionados que impulsa el desarrollo de un modelo, pueden fijarse ciertas pautas para llevar a cabo esta tarea. Es previsible que un modelo más detallado brinde información más completa, pero también la requiera (mayor número de parámetros involucrados que deben evaluarse). Adicionalmente requerirá mayor esfuerzo computacional para su resolución. Hofman (1979) elaboró una guía que resume los aspectos más relevantes a tener en cuenta al desarrollar o seleccionar un modelo:

- El modelo no debe ser más detallado que lo absolutamente necesario para el propósito para el cual se lo desarrolla.
- El modelo debe contener un número tan reducido de parámetros como sea posible.
- Deben existir correlaciones confiables para calcular los parámetros del modelo seleccionado ó, en su defecto, estas deben desarrollarse ad-hoc.
- La resolución matemática de las ecuaciones del modelo debe requerir el menor esfuerzo computacional posible.

Los modelos de RCLF pueden, adicionalmente, ser clasificados en primera instancia como determinísticos o estocásticos. Estos últimos han sido escasamente descriptos y empleados en la bibliografía. Una revisión de los mismos fue presentada

por Schnitzlein y Hofmann (1987).

Los modelos *determinísticos* a su vez pueden dividirse en dos categorías: modelos discretos y modelos tipo *Fick*. Dado que en un lecho de partículas la fase sólida puede considerarse como discontinua y que el fluido no sigue líneas de corriente como en un sistema sin obstáculos, los modelos discretos consideran al lecho como compuesto por regiones elementales, que se repiten en todo el volumen del reactor. Como consecuencia de esta descripción las variables de estado no resultan en una distribución continua. Los modelos de celdas, propuestos por Deans y Lapidus (1960) y estudiados posteriormente por Hlavacek y Votruba (1977) pertenecen a esta categoría.

Los modelos tipo *Fick* han sido los estudiados más extensamente y, probablemente, son los que han sido empleados con mayor frecuencia en las aplicaciones mencionadas anteriormente como objetivos del desarrollo de un modelo. En estos modelos se considera que existe una distribución continua de velocidades del fluido de acuerdo a líneas paralelas al eje del tubo. Esto conduce a que se obtenga una variación continua de temperatura y composición y que el transporte de materia y energía pueda representarse por leyes del tipo *Fick* y *Fourier* respectivamente. El efecto de mezclado causado por las desviaciones laterales del flujo de fluido se tiene en cuenta a través de la evaluación de difusividades y conductividades térmicas efectivas del lecho (también denominados coeficientes de dispersión) de materia y calor.

El tema de estudio de este trabajo se centrará exclusivamente en los modelos determinísticos del tipo *Fick*. En la sección siguiente se describen los modelos más relevantes dentro de esta clasificación, susceptibles de ser empleados en el análisis de RCLF de flujo axial, es decir, en aquellos en los que la corriente de fluido se desplaza en el sentido del eje del tubo que conforma el reactor.

2.2 Modelado de RCLF

Se estudiará en particular la modelización de reactores químicos bajo el régimen estacionario de operación. Se pueden clasificar los modelos del tipo *Fick*, desarrollados para llevar a cabo el modelado de *RCLF*, en dos grandes grupos: modelos Pseudohomogéneos y modelos Heterogéneos.

2.2.1 Formulación de Modelos Pseudohomogéneos

2.2.1.1 Modelo Unidimensional Pseudohomogéneo (1P)

El modelo más sencillo que se puede plantear es el modelo unidimensional pseudohomogéneo (1P). Las hipótesis sobre las cuales se plantea este modelo incluyen una distribución uniforme del flujo sobre la sección del reactor. Cuando se trata de un reactor multitubular se considera que la alimentación es la misma en cada tubo, en consecuencia cada tubo es representativo del conjunto, y se adopta un perfil plano de velocidad en la dirección radial (flujo pistón) en cada uno de ellos. El modelo de flujo pistón adoptado efectúa una simplificación e idealización del movimiento del fluido, considerando que todos los elementos que componen al fluido se desplazan con velocidad uniforme a lo largo de líneas de corriente paralelas.

Por otra parte se supone que no existen gradientes radiales de temperatura ni concentración, esta hipótesis del modelo es la que le da el carácter de *unidimensional*. Además se considera que no existen gradientes de temperatura ni concentración entre el seno de la fase fluida y la superficie del sólido, en consecuencia, no es necesario plantear balances diferenciados para las fases sólida y fluida. Una única pseudo-fase representará el comportamiento del sistema.

Las ecuaciones que describen este modelo se presentan a continuación (para una única reacción):

Balance de materia:

$$\langle u \rangle \frac{d\bar{C}}{dz} = -r_L(\bar{C}, \bar{T}) \quad (2.1)$$

Balance de calor:

$$\langle u \rangle \rho C_p \frac{d\bar{T}}{dz} = -2 \frac{h_r}{R_t} (\bar{T} - T_w) + (-\Delta H) r_L(\bar{C}, \bar{T}) \quad (2.2)$$

Condiciones de contorno:

$$\text{En } z = 0 \quad \bar{C} = \bar{C}_o \quad \bar{T} = \bar{T}_o$$

Donde, $\langle u \rangle$ es la velocidad superficial del gas, \bar{C} y \bar{T} representan los valores promedio radiales de concentración del componente clave y la temperatura, respectivamente y ΔH es el calor de reacción. La velocidad de reacción, r_L , es una velocidad efectiva ya que incluye el factor de efectividad y la porosidad del lecho, ϵ .

Incorpora de esta forma el concepto de que la reacción se lleva a cabo en un medio heterogéneo como el sólido poroso. Se define r_L a partir de la ecuación:

$$r_L = \eta_T r^G (1 - \varepsilon) \quad (2.3)$$

donde r^G es la velocidad de reacción en las condiciones del seno del gas (concentración de especies, $C_{j,g}$ y temperatura, T_g) por unidad de volumen de partícula de catalizador ($r^G = r(C_{j,g}, T_g)$). El factor de efectividad global, η_T , incorpora las resistencias internas a la transferencia de materia y, eventualmente, a la transferencia de calor. Es función de la geometría, la temperatura, las resistencias internas y externas y de la cinética (Froment y Bischoff, 1990). El signo negativo de r_L en la ecuación 2.1 se debe al hecho de haber adoptado para la especie clave un coeficiente estequiométrico de (-1).

Este modelo contiene un único parámetro térmico, el coeficiente global de transferencia de calor, h_T , y las ecuaciones del modelo son ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden.

Al igual que otros modelos que se presentarán en esta sección, el modelo *IP* puede, a su vez, incluir los efectos de la dispersión axial, a través de la inclusión del coeficiente correspondiente (Froment y Bischoff, 1990).

2.2.1.2 Modelo Bidimensional Pseudohomogéneo (2P)

La hipótesis de perfiles radiales de temperatura y concentración planos es aceptable para el caso de reactores adiabáticos. Sin embargo, cuando se trata, por ejemplo, de un reactor con refrigeración a través de las paredes, dado que existe una diferencia de temperaturas entre el reactor y la pared, aceptar que el perfil es plano significa considerar que toda la resistencia a la transferencia de calor está localizada junto a la pared, lo cual no es real. Además, en el caso de RCLF, debido a la dependencia exponencial de la velocidad de reacción con la temperatura, se observa que tanto la generación de calor como las velocidades de consumo de reactivos y de generación de productos no son uniformes, lo que da lugar a la aparición de gradientes de concentración en la dirección radial (variable ρ).

Cuando se presenta una situación como la descrita suele ser necesario recurrir a un modelo que considere las variaciones de concentración y temperatura en la dirección

radial, en adición a las correspondientes a la dirección axial. El modelo bidimensional pseudohomogéneo (2P) tiene en cuenta la existencia de perfiles radiales y gradientes axiales, considerando uniformidad sólo en la dirección angular. En su formulación, este modelo presenta términos similares a los del modelo 1P en la dirección axial, que tienen en cuenta el transporte convectivo en dicha dirección, mientras que en la dirección radial los flujos de materia y calor se representan con leyes del tipo *Fick* y *Fourier* respectivamente. La difusividad y conductividad presentes en estas leyes deben incorporar las características del lecho relleno, por lo que se emplea una difusividad efectiva radial (D_{er}) y una conductividad efectiva radial (k_{er}).

La k_{er} no es uniforme en la dirección radial, ya que está fuertemente afectada por la estructura del lecho, cuya porosidad varía con el radio del tubo (Delmas y Froment, 1988). Sin embargo, dado que la principal variación de la porosidad se encuentra en la cercanía de la pared del tubo, se ha considerado factible concentrar allí toda la influencia de este efecto, mediante la inclusión de una resistencia adicional (en términos de la inversa de un coeficiente local de transferencia de calor), lo que permite emplear un valor constante de la conductividad efectiva radial. Este modelo, como su nombre lo indica, no diferencia campos de temperatura y composición en sólido y gas, de la misma forma que el modelo 1P (implica suponer velocidades muy altas de transferencia de calor y materia sólido-gas).

Las ecuaciones de balance del modelo Bidimensional Pseudohomogéneo son las siguientes:

Balance de materia:

$$\langle u \rangle \frac{\partial C}{\partial z} = D_{er} \frac{\partial(\rho \partial C / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} - r_L(C, T) \quad (2.4)$$

Balance de calor:

$$\langle u \rangle \rho_g C_p \frac{\partial T}{\partial z} = k_{er} \frac{\partial(\rho \partial T / \partial \rho)}{\partial \rho} + (-\Delta H) r_L(C, T) \quad (2.5)$$

Condiciones de contorno:

$$C = C_o \quad T = T_o \quad \text{en} \quad z = 0, \quad \forall \rho \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial C}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0 \quad \text{en } \rho = 0, \quad \forall z \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial C}{\partial \rho} = 0, \quad -k_{er} \frac{\partial T}{\partial \rho} = h_w (T - T_w) \quad \text{en } \rho = R_r, \quad \forall z \quad (2.8)$$

Las ecuaciones que se originan en el modelo son ecuaciones diferenciales a derivadas parciales, de tipo parabólico. C y T son aquí los valores locales (ρ , z) de concentración del componente clave y temperatura en la fase gaseosa. La definición de r_L establecida en la descripción del modelo *IP* es aquí válida con la consideración que antecede para C y T .

Para poder resolverlo se deben evaluar tres parámetros, la difusividad efectiva radial, D_{er} , la conductividad efectiva radial, k_{er} , y el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w . La resolución de este modelo permite obtener los perfiles axiales y radiales de composición y temperatura del reactor: $C(\rho, z)$, $T(\rho, z)$.

2.2.2 Formulación de Modelos Heterogéneos

Los sistemas constituidos por RCLF presentan características naturalmente heterogéneas. Los modelos pseudohomegáneos son aceptables siempre que se pueda considerar que no existe resistencia a la transferencia de calor y materia entre las fases o que la misma no tenga influencia apreciable sobre la velocidad de reacción. En algunos casos puede ocurrir que una errónea estimación de la temperatura a la cual se produce la reacción conduzca a calcular la misma con un error de relevancia. Por lo tanto, existen situaciones en las que es necesario plantear balances diferenciados para cada fase y de esta forma incorporar al planteo las características heterogéneas del lecho.

2.2.2.1 Modelo unidimensional heterogéneo (*IH*)

A fin de lograr una representación adecuada del proceso químico que se desarrolla en un reactor, en numerosos casos es necesario incorporar la existencia de una resistencia a la transferencia de calor y materia entre las fases presentes. El modelo unidimensional heterogéneo (*IH*) permite tratar al sistema incluyendo esta característica natural del sistema. En él se mantienen todas las hipótesis del modelo *IP* con excepción

de la que establece que no existen diferencias en los valores de las variables concentración y temperatura entre las fases. El balance de materia es similar al planteado para el modelo *IP* aunque la velocidad de reacción se debe expresar en forma diferente. Dado que la reacción se desarrolla en la fase sólida, en el balance de la fase fluida se debe incorporar simplemente el término de transferencia de materia entre ambas fases. Para realizar el balance de materia en la pastilla de catalizador se considera que no existe ningún término de acumulación por tratarse de estado estacionario, en consecuencia, toda la materia que se transfiere del fluido al sólido (o a la inversa) debe reaccionar en el mismo. En la expresión del balance de materia para la fase sólida, la velocidad de reacción, r_L , se define según la ecuación 2.3 aunque la funcionalidad con la composición y temperatura se debe evaluar para el valor medio radial de concentración del reactivo clave en el gas y el valor medio de temperatura en dicha fase.

En el planteo del balance de energía para la fase fluida el término de fuente o sumidero de calor, originado por la reacción, es reemplazado por un término de transferencia de calor sólido-fluido. Pereira Duarte y col. (1984) formularon este modelo de acuerdo a las siguientes ecuaciones:

Balance de Materia (fase fluida):

$$-\langle u \rangle \frac{\partial \bar{C}_g}{\partial z} = a_v \lambda_{gs} (\bar{C}_g - \bar{C}_s) \quad (2.9)$$

Balance de Materia (fase sólida):

$$a_v \lambda_{gs} (\bar{C}_g - \bar{C}_s) = r_L(\bar{C}_g, \bar{T}_s) \quad (2.10)$$

Balance de Energía (fase fluida):

$$\langle u \rangle \rho_g C_p \frac{d\bar{T}_g}{dz} = -\frac{2h_g}{R_t} (\bar{T}_g - T_w) - h_{gs} a_v (\bar{T}_g - \bar{T}_s) \quad (2.11)$$

Balance de Energía (fase sólida):

$$h_{gs} a_v (\bar{T}_s - \bar{T}_g) = -\frac{2h_s}{R_t} (\bar{T}_s - T_w) + (-\Delta H) r_L(\bar{C}_g, \bar{T}_s) \quad (2.12)$$

Condiciones de contorno:

$$\bar{C}_g = \bar{C}_{go}, \quad \bar{T}_g = \bar{T}_{go} \quad \text{en } z = 0 \quad (2.13)$$

Este modelo introduce cuatro parámetros: los coeficientes de transferencia de calor para el sólido y para el fluido (h_s y h_g) y los coeficientes de transferencia de calor y materia fluido-sólido (h_{gs} y λ_{gs}). Si bien el modelo está representado por ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO), al considerar la diferencia de temperatura y concentración entre las fases es necesario resolver ecuaciones algebraicas no lineales en cada altura del reactor acopladas al sistema de EDO.

La resolución del modelo no permite obtener en forma explícita los perfiles radiales de temperatura o concentración como en los modelos bidimensionales, sin embargo la mejora frente al modelo *1P* consiste en poder calcular con mayor certeza la velocidad de reacción, al estimarse las diferencias de temperatura y concentración entre las fases.

2.2.2.2 Modelo bidimensional heterogéneo (2H)

En la formulación de este modelo se consideran las características heterogéneas descritas para el modelo *1H* y adicionalmente se incorpora la existencia de gradientes radiales de temperatura y concentración, lo que confiere al modelo el carácter bidimensional (Olbrich, 1970; de Wash y Froment, 1971).

De esta forma el balance de materia queda expresado como:

Balance de Materia (fase fluida):

$$\langle u \rangle \frac{\partial C_g}{\partial z} = D_{er} \frac{\partial \left(\rho \frac{\partial C_g}{\partial \rho} \right)}{\rho \partial \rho} - a_v \lambda_{gs} (C_g - C_s) \quad (2.14)$$

Balance de Materia (fase sólida):

$$a_v \lambda_{gs} (C_g - C_s) = r_L(C_g, T_s) \quad (2.15)$$

Para el planteo del balance de energía pueden seguirse dos caminos:

- a) En el primero se utiliza un procedimiento similar al presentado para el balance de materia. El término fuente o sumidero de energía, originado por la reacción, en el modelo *2P*, es reemplazado por un término de transferencia de calor sólido-fluido, la expresión resultante constituye el balance de energía para la fase fluida. Por otra

parte se utiliza el balance de energía de una pastilla aislada para establecer el balance de energía del sólido. En consecuencia, recordando los balances del modelo $2P$ se puede escribir:

Balance de Energía (fase fluida):

$$\langle u \rangle \rho_g C_p \frac{dT_g}{dz} = k_{eg} \frac{\partial \left(\rho \frac{\partial T_g}{\partial \rho} \right)}{\rho \partial \rho} - h_{gs} a_v (T_g - T_s) \quad (2.16)$$

Balance de Energía (fase sólida):

$$h_{gs} a_v (T_s - T_g) = (-\Delta H) r_L (C_g, T_s) \quad (2.17)$$

En este caso, r_L se evalúa combinando las referencias a las variables composición y temperatura establecidas para condiciones bidimensionales (ya citadas en modelo $2P$) y heterogéneas (descriptas para el modelo $1H$).

Las condiciones de contorno para la ecuación diferencial de la fase fluida son similares a las del modelo $2P$, sin embargo existe una diferencia que se debe analizar. Al plantear el modelo $2P$ los parámetros de transferencia de calor del mismo se denominaron “efectivos”, ya que incluían los aportes del sólido y del fluido a la transferencia de calor. Esta descripción resulta totalmente razonable cuando se plantea un modelo pseudohomogéneo, que no establece diferencias explícitas entre las fases. En el modelo heterogéneo planteado el único término de transferencia radial está incluido en el balance de la fase fluida. Esta situación permite ciertas alternativas. Mc Greavy y Cresswell (1969) consideraron que el calor se transfiere radialmente sólo a través de la fase fluida, por lo tanto la conductividad que se debería emplear en la ecuación (2.16) es una conductividad de dicha fase que incluya los diferentes mecanismos que contribuyen a la transferencia de calor en la misma. Una segunda alternativa consiste en emplear directamente una conductividad efectiva, que, en forma similar a la utilizada en el modelo $2P$, incluya todos los aportes a la transferencia a través del sólido y del fluido.

Ambas alternativas han sido criticadas. De Wash y Froment (1971) al realizar una comparación de diferentes modelos concluyen que no tener en cuenta la transferencia radial de calor a través de la fase sólida no es una hipótesis realista, ya que bajo condiciones típicas de un reactor industrial, un 25% de la conducción radial de calor

ocurre a través del sólido. La segunda alternativa ha sido considerada conceptualmente errónea por Pereira Duarte y col. (1984), ya que se emplea un parámetro efectivo, que incluye las características del sólido, pero utilizando un único balance que corresponde a la fase fluida; la propuesta es plantear balances diferenciados para cada fase, que es lo que se propone en el segundo camino.

- b) En este segundo enfoque se considera al sólido como un continuo, en consecuencia existirá un término de transferencia de calor radial en el balance de energía del sólido. De esta forma el balance de energía de la fase fluida es el dado por la ecuación 2.16, donde la conductividad radial efectiva de la fase fluida agrupa un conjunto de mecanismos de transferencia, pero todos de la fase fluida. El balance de la fase sólida es:

$$h_g a_v (T_f - T_s) = k_{es} \frac{\partial \left(\rho \frac{\partial T_s}{\partial \rho} \right)}{\rho \partial \rho} + (-\Delta H) r_L (C_g, T_s) \quad (2.17')$$

donde la conductividad se denomina conductividad radial efectiva de la fase sólida.

Las condiciones iniciales y de contorno son:

$$C_g = C_{g0}, \quad T_g = T_{g0} \quad \text{en } z = 0, \quad \forall \rho \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial C_g}{\partial \rho} = \frac{\partial T_g}{\partial \rho} = \frac{\partial T_s}{\partial \rho} = 0 \quad \text{en } \rho = 0, \quad \forall z \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial C_g}{\partial \rho} = 0 \quad \text{en } \rho = R_f, \quad \forall z \quad (2.20)$$

$$-k_{eg} \frac{\partial T_g}{\partial \rho} = h_{wg} (T_g - T_w) \quad \text{en } \rho = R_f, \quad \forall z \quad (2.21)$$

$$-k_{es} \frac{\partial T_s}{\partial \rho} = h_{ws} (T_s - T_w) \quad \text{en } \rho = R_f, \quad \forall z \quad (2.22)$$

donde los coeficientes en la pared se denominan coeficiente de transferencia de calor en la pared para el sólido, h_{ws} , y para el fluido, h_{wg} .

Aunque el camino a) se encuentra en algunos textos (Carberry, 1976), la tendencia de los últimos años (Windes y col., 1982; Pereyra Duarte y col., 1984, Feyo

de Azevedo y col., 1990) ha sido emplear el planteo b) por ser considerado más razonable. Este modelo permite obtener mayor y, en principio, mejor información que el modelo $2P$, ya que se calcula un campo de temperatura y concentración para cada fase y la velocidad de reacción se estima en las condiciones de la fase sólida, que es donde la misma se lleva a cabo. El número de parámetros que incorpora el modelo se incrementa apreciablemente, ya que se necesitan dos parámetros de transferencia de materia, el coeficiente de dispersión radial de materia (D_{er}) y el coeficiente de transferencia de materia sólido-fluido (λ_{gs}), y cinco parámetros de transferencia de calor: las conductividades radiales efectivas del sólido (k_{es}) y del fluido (k_{eg}), los coeficientes de transferencia de calor en la pared para el sólido (h_{ws}) y el fluido (h_{wg}) y el coeficiente de transferencia de calor sólido-fluido (h_{gs}). En la sección siguiente se presentan las ecuaciones más utilizadas para la evaluación de los cinco parámetros de transferencia de calor.

Desde el punto de vista de la resolución de las ecuaciones del modelo, estas son del mismo tipo que las del modelo $2P$, habiéndose agregado la ecuación de balance de energía del sólido. La diferencia fundamental radica en que la evaluación de la velocidad de reacción se realiza en las condiciones de la fase sólida y, en consecuencia, se suma un término de transferencia sólido-fluido en cada ecuación. Por lo tanto habrá que resolver en forma adicional ecuaciones algebraicas no lineales, lo que implica un mayor esfuerzo desde el punto de vista computacional.

2.2.3 Evaluación de los parámetros de transferencia de calor

Para la utilización, en un caso práctico, de cualquiera de los modelos planteados es necesario disponer de valores apropiados de los parámetros de transferencia de calor. Dichos parámetros han sido obtenidos generalmente a partir de sistemas sin reacción química y se han presentado distintas metodologías para ello.

No se pretende realizar aquí una revisión detallada de los numerosos trabajos teóricos y experimentales que han estudiado el tema, a modo de ejemplo, sólo se presentan las correlaciones típicas de los cinco parámetros del modelo $2H$ por ser este el modelo que más mecanismos de transferencia involucra.

Coefficiente de transferencia de calor fluido-sólido (h_{gs}):

Wakao y colab. (1979) y más recientemente Vortmeyer (1989) analizaron los principales métodos de obtención de este coeficiente. De ambas contribuciones puede inferirse que, para $Re_p > 100$, se cuenta con correlaciones aceptables (Tabla 2.1):

Coeficiente de transferencia de calor sólido-fluido (h_{gs})
<p><u>Wakao y colab. (1979)</u></p> $Nu_{gs} = \frac{h_{gs} d_p}{\lambda_g} = 2 + 1,1 Pr^{1/3} Re_p^{0,6}$
<p><u>Gnielinski (1975)</u></p> $Nu_{gs} = [1 + 1,5(1 - \varepsilon)] \left[2 + F (Re_p / \varepsilon)^{1/2} Pr^{1/3} \right]$ $F = 0,664 \left[1 + \left[\frac{0,0557 (Re_p / \varepsilon)^{0,3} Pr^{2/3}}{1 + 2,44 (Pr^{2/3} - 1) (Re_p / \varepsilon)^{0,1}} \right]^2 \right]^{1/2}$

Tabla 2.1. Correlaciones para el cálculo de h_{gs}

Conductividad radial efectiva de la fase sólida (k_{es}):

Para el cálculo de la conductividad efectiva de la fase sólida se recurre a las expresiones de conductividad efectiva de un lecho relleno sin flujo de fluido, k_{eo} . Este parámetro también incluye la transferencia por conducción de la fase fluida, sin embargo, cuando el fluido es un gas, el aporte del mismo es pequeño, resultando $k_{eo} \cong k_{es}$ (Melanson y Dixon, 1985).

Lemcoff y colab. (1990) compararon diversas expresiones desarrolladas para calcular k_{eo} con valores experimentales obtenidos de la literatura. Las mejores respuestas se obtuvieron con las correlaciones que se presentan en la Tabla 2.2:

Correlaciones de la conductividad efectiva estanca (k_{eo})
Kunii y Smith (1960)

$$k_{eo} / k_g = \varepsilon + (1 - \varepsilon) [\phi + (2/3) \chi^{-1}]^{-1} \quad \chi = k_s / k_g$$

$$\phi = \phi_2 + (\phi_1 - \phi_2) \left(\frac{\varepsilon}{0,261} - 1 \right) \quad \text{para } 0,26 \leq \varepsilon \leq 0,476$$

$$\phi = \phi_1 \quad \text{para } \varepsilon \geq 0,476 \quad \phi = \phi_2 \quad \text{para } \varepsilon \leq 0,26$$

$$\phi_1 = \frac{0,333(1 - \chi^{-1})^2}{\log[\chi - 0,577(\chi - 1)] - 0,423(1 - \chi^{-1})} - \frac{2}{3\chi}$$

$$\phi_2 = \frac{0,072(1 - \chi^{-1})^2}{\log[\chi - 0,925(\chi - 1)] - 0,075(1 - \chi^{-1})} - \frac{2}{3\chi}$$

Bauer y Schlunder (1978)

$$k_{eo} / k_g = 1 - (1 - \varepsilon)^{0,5} + (1 - \varepsilon)^{0,5} \left[\frac{2}{1 - B_o / \chi} \right] (B_1 - B_2)$$

$$B_1 = [(1 - 1/\chi) B_o \log(\chi / B_o)] / (1 - B_o / \chi)^2$$

$$B_2 = \frac{B_o + 1}{2} + \frac{B_o - 1}{1 - B_o / \chi} \quad B_o = C_o [(1 - \varepsilon) / \varepsilon]^{10/9}$$

$$C_o = \begin{cases} 1.25 & \text{Esfera} \\ 2.5 & \text{Cilindro} \\ 2.5 [1 + (d_t / d_p)^2] & \text{Anillos Raschig} \end{cases}$$

 Tabla 2.2 . Correlaciones para el cálculo de k_{eo}
Coefficiente de transferencia de calor en la pared para la fase sólida (h_{ws}):

Este coeficiente también es evaluado a partir de la situación de fluido estanco. Realizando las mismas consideraciones que para el parámetro k_{es} , para las condiciones típicas de un reactor catalítico de lecho fijo, el valor de h_{ws} se puede asimilar al de h_{wo} ,

que agrupa el aporte de la fase sólida y un fluido estanco.

Lencoff y colab. (1990) compararon diferentes expresiones para el cálculo de este coeficiente con datos experimentales, observando una importante dispersión que se incrementa al aumentar la relación, d_t / d_p , pero resulta aceptable para relaciones de aspecto inferiores a 10. Para esta última condición, las correlaciones que mejor ajustan los datos experimentales son las que se presentan en la Tabla 2.3.

Coeficiente de transferencia de calor en la pared para la fase sólida (h_{wo})	
<u>Olbrich (1970)</u>	
$Bi_o = h_{wo} R_t / k_{eo} = 1,06 (d_t / d_p)$	
<u>Dixon (1988)</u>	
$Bi_o = 2,41 + 0,156 [(d_t / d_p) - 1]^2$	Para partículas esféricas
$Bi_o = 0,48 + 0,192 [(d_t / d_p) - 1]^2$	Para partículas cilíndricas

Tabla 2.3 . Correlaciones para el cálculo de h_{wo}

Conductividad radial efectiva de la fase fluida (k_{eg}):

Este parámetro cuantifica la contribución convectiva del fluido a la transferencia radial de calor a través del lecho. Las expresiones presentes en la literatura que permiten su evaluación son de la forma:

$$k_{eg} / k_g = \frac{Re_p Pr}{(1 + c / Re_p) Pe_\infty} \tag{2.23}$$

Para $Re_p > 100$ puede asumirse el valor $c=0$. Para el cálculo de Pe_∞ , Lemcoff y colab. (1990) propusieron, para esferas, la ecuación:

$$Pe_\infty = 8 + 155,2 (d_p / d_t)^2 \tag{2.24}$$

Una expresión alternativa fue presentada por Bauer y Schlunder (1978):

$$Pe_\infty = 8 (d_p / \delta) \left[2 - \left(1 - 2 (d_p / d_t) \right)^2 \right] \tag{2.25}$$

Con $\delta = 1,15 d_p$ para esferas y $\delta = 1,75 d_p$ para cilindros.

Coefficiente de transferencia en la pared para la fase fluida (h_{wg}):

Las correlaciones para el cálculo de este coeficiente generalmente se expresan de la forma:

$$Nu_{wg} = h_{wg} d_p / k_g = a_w Re^b Pr^p \quad (2.26)$$

En la Tabla 2.4 se presentan valores del coeficiente a_w y de los exponentes b y p de diversas correlaciones. La dispersión de resultados que arrojan estas correlaciones es muy importante, en especial para $Re_p < 1000$.

Correlaciones del coeficiente de transferencia de calor h_{wg}				
Referencia	a_w	b	p	Tipo de relleno
Yagi y Wakao (1959)	0,2	0,8	1/3	Esferas
De Wash y Froment	$0,461 d_i$	1,0	0	cilindros
Olbrich y Potter (1972)	8,9	0,34	1/3	Esferas cilindros
Specchia y colab. (1980)	0,0835	0,91	0	varios
Dixon y colab. (1984)	$1 - 1,5(d_p / d_i)^{1,5}$	0,59	1/3	esferas
Colledge y Paterson (1984)	$1 - (d_p / d_i)$	0,738	1/3	Esferas cilindros
Dixon y Labua (1985)	$1 - (d_p / d_i)$	0,61	1/3	Varios
Peters y colab. (1988)	$4,9(d_p / d_i)^{0,26}$	0,45	1/3	Esferas
Peters y colab. (1988)	$3,8(d_p / d_i)^{0,39}$	0,50	1/3	Anillos/cilindros

Tabla 2.4 . Correlaciones para el cálculo de h_{wg}

A modo de ejemplo, en la Tabla 2.5, se presentan las ecuaciones propuestas por Berto y Barreto (1992) para la obtención de los parámetros h_g y h_s del modelo $1H$, a partir de los parámetros del modelo $2H$. Con dicho enfoque, los autores deducen

parámetros que incorporan la influencia de las características de la reacción, considerando que el calor generado no es constante en la dirección radial.

$$h_g = \frac{h_{wg}(2h_T/\delta_T)}{1+Bi/4}, \quad h_s = \frac{h_{ws}(2h_T/\delta_T)}{1+Bi/4}$$

donde $\delta_T = \frac{2Bi}{4+Bi}(\bar{T}_s - T_w)D_T$, $D_T = \left. \frac{\partial \log r_G}{\partial T_s} \right|_{\bar{C}_g, \bar{T}_s}$

y $Bi = R_t(h_{wg} + h_{ws}) / (k_{eg} + k_{es})$

r_G : velocidad de reacción global expresada en términos de \bar{C}_g y \bar{T}_s

h_T se evalúa a partir de la ecuación implícita:

$$\frac{\delta_T(4+Bi)}{2Bi} = \frac{4h_T}{Bi} - \log(1-h_T) + \frac{D_{2T}(\log(1-h_T))^2}{6D_T^2}$$

donde $D_{2T} = \left. \frac{\partial^2 \log r_G}{\partial T_s^2} \right|_{\bar{C}_g, \bar{T}_s} \cong -2D_T / \bar{T}_s$

Tabla 2.5 . Parámetros h_g y h_s (Berto y Barreto, 1992)

2.3 Comportamiento de Lechos Fijos de baja relación de aspecto

Si bien el diseño y análisis del comportamiento tanto fluidodinámico como desde el punto de vista de la transferencia de calor de los RCLF ha sido un tópico intensamente estudiado en la Ingeniería de Reactores Químicos y la utilización de este tipo de reactores continua incrementándose en las aplicaciones industriales, un escaso número de trabajos han centrado su interés en la influencia de la relación de aspecto ($N=d/d_p$) sobre el comportamiento térmico y fluidodinámico del reactor. En la industria de procesos existen numerosos casos de reactores en los que la transferencia de calor cumple un rol relevante y que a fin de favorecer dicha transferencia son diseñados adoptando la conformación multitubular incluyendo múltiples tubos de baja relación de aspecto ($N < 10$). Como ejemplo, puede mencionarse el reformador de gas natural que

constituye un sistema altamente exigente en relación a la transferencia de calor y cuyos tubos presentan una relación de aspecto de 7-9.

Entre los trabajos referidos en particular a la influencia de la relación de aspecto sobre el comportamiento fluidodinámico de lechos fijos puede citarse el de Negrini y colab. (1999). Los autores llevaron a cabo experiencias con aire circulando a través de lechos fijos rellenos con partículas esféricas. Las relaciones de aspecto de dichos lechos, comprendidas entre 3 y 60, abarcaron desde aquellos lechos que refuerzan la influencia de la presencia de la pared sobre la porosidad a aquellos que minimizan dicho efecto. Las mediciones de velocidad realizadas en numerosos valores de las coordenadas radial y angular del lecho, les permitieron obtener una descripción detallada del flujo de aire que atraviesa el reactor. A partir de comparaciones efectuadas entre las mediciones experimentales y correlaciones para el cálculo de la distribución radial de la componente axial de la velocidad existentes en bibliografía (Fahien y Stankovic, 1979 y Vortmeyer y Schuster, 1983), los autores observaron que a altas relaciones de aspecto, el comportamiento de los perfiles de velocidad calculados y medidos fue similar. Cerca de la pared, donde la porosidad local es mayor, la velocidad del fluido alcanzó valores superiores a los de la región central, fenómeno al que se denomina canalización. La distribución radial de la velocidad axial fue prácticamente plana en el resto de sección transversal del lecho. Sin embargo, en los lechos experimentales con relaciones de aspecto de 3 y 4,3, las oscilaciones observadas en los perfiles de velocidad concordaron con las correspondientes a los perfiles de porosidad. No se observó la presencia del perfil plano de velocidad en la zona central del lecho característico de los casos de alta relación de aspecto. Los autores concluyeron, a partir de los diferentes comportamientos observados, que tratar al medio poroso como un medio continuo es, en principio, cuestionable para los casos de baja relación de aspecto.

Montillet y colab. (2007) estudiaron el comportamiento fluidodinámico de lechos fijos de baja relación de aspecto y propusieron una expresión para predecir la pérdida de carga a través de lechos rellenos con partículas esféricas basada en resultados experimentales que abarcan un amplio rango de Re_p ($10 < Re_p < 2.500$). En dicha expresión, la caída de presión es función de la relación de aspecto y su validez con respecto a esta variable comprende el rango: $3,5 < N < 50$.

A pesar de tratarse de un sistema que incluye una fase líquida, resulta relevante mencionar el trabajo de Mariani y colab. (2001) en esta instancia. Los autores

investigaron la transferencia de calor a través de lechos rellenos, con flujo gas-líquido cocorriente y descendente (*trickle bed*). Los lechos experimentales utilizados abarcaron relaciones de aspecto comprendidas entre 4,67 y 34,26. Aplicaron el modelo $2P$ y, mediante un análisis de regresión sobre la distribución de temperaturas medidas en una sección transversal del lecho, infirieron valores de la conductividad térmica efectiva radial (k_{er}) y del coeficiente de transferencia de calor sobre la pared (h_w). El análisis de los resultados mostró evidencias de que el modelo utilizado no resulta apropiado para lechos de baja relación de aspecto. Mientras que se observa la clásica dependencia del coeficiente h_w con Re_L^α (con $\alpha < 1$) para las relaciones de aspecto 34,26 y 17,13, el coeficiente h_w se incrementa con Re_L en forma prácticamente proporcional para las relaciones de aspecto: 8,16 y 4,67. La causa de este comportamiento, en la fundamentación presentada por los autores, puede hallarse en la hipótesis de perfil plano de velocidades planteada por el modelo. Es conocido el hecho de que la zona que se extiende desde la pared del lecho hasta aproximadamente un radio de partícula, presenta una porosidad mayor que la del resto del lecho (Mariani y colab., 1998). En consecuencia se espera un aumento del caudal líquido (o mayor permeabilidad) en dicha zona, hecho que, al menos para flujo en una sola fase, ha sido demostrado por Dixon y colab. (1984). En el trabajo se señala que el incremento del caudal sobre la pared puede ser ignorado en el modelado de reactores de escurrimiento con altas relaciones de aspecto, mientras que difícilmente pueda despreciarse a bajos valores, ya que la zona de la pared representa sólo un 5,7% del área de la sección transversal para $N=34,3$ y asciende al 38,2 % para $N=4,7$. Los autores recomiendan no utilizar el modelo $2P$ para el modelado de reactores de escurrimiento de baja relación de aspecto ya que su aplicación conduciría a la predicción de perfiles de temperatura marcadamente alejados de los valores reales.

2.4 Conclusiones

En este capítulo se efectuó una revisión de los enfoques y modelos existentes en la bibliografía para representar el comportamiento térmico de lechos fijos. El estudio se centró en los modelos Pseudohomogéneos y Heterogéneos del tipo *Fick*. En particular,

el modelo pseudohomogéneo bidimensional será utilizado en el análisis comparativo que se lleva a cabo en el Capítulo IV.

Se reseñaron los trabajos hallados en la bibliografía referidos a la influencia de la relación de aspecto sobre el comportamiento fluidodinámico y térmico de los reactores de lecho fijo. De dicho estudio se desprende que el comportamiento de la zona adyacente a la pared, en lechos de baja relación de aspecto, presenta una característica de quasi-aislamiento en relación al seno del lecho. Existe evidencia experimental al respecto y una discusión minuciosa que pone en evidencia este fenómeno se presenta, sobre la base de cálculos precisos por CFD, en capítulos posteriores. Adicionalmente resulta relevante analizar la diferencia de comportamiento entre los enfoques de “dos regiones” y de una región única e indiferenciada para todo el tubo, frente a condiciones idénticas de operación. Esta comparación, que se realizó y cuyos resultados se incluyen en el capítulo IV, permite fundamentar en adición a las razones incluidas en esta sección, la selección de un enfoque de dos regiones para la construcción del modelo que se propondrá en este trabajo de tesis. En el capítulo siguiente se aborda detalladamente la descripción y formulación del modelo propuesto, como así también su fundamentación.

CAPÍTULO III

MODELO DE DOS ZONAS PARA EL TRANSPORTE DE CALOR EN LECHOS FIJOS DE BAJA RELACIÓN DE ASPECTO

3.1 Introducción

3.2 Antecedentes

3.3 Modelo Propuesto, *MDZ*

3.4 Formulación de Balances de Energía para el *MDZ*

3.4.1 Resolución del sistema de ecuaciones formulado

3.5 Conclusiones

3.1 Introducción

En el capítulo II se han descrito los principales modelos desarrollados con el objeto de predecir el comportamiento térmico de *RCLF* hallados en la bibliografía y se analizaron, en particular, los trabajos enfocados en el análisis de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto.

En general, el modelo bidimensional pseudohomogéneo, con dos parámetros térmicos (coeficiente de transferencia de calor en la pared, h_w , y conductividad térmica efectiva, k_{er}), representa adecuadamente el comportamiento de los reactores catalíticos, con excepción de aquellos con baja relación de aspecto ($N < 10$). Como se ha descrito en el capítulo II, sección 2.3, la explicación de este comportamiento se encuentra en la influencia de la zona cercana a la pared sobre el reactor de lecho fijo. En la zona que se extiende desde la pared del tubo hasta la distancia de aproximadamente un radio de partícula, se observa una mayor porosidad que en el resto del lecho, produciéndose, en consecuencia, una mayor permeabilidad del fluido. La influencia de este fenómeno, despreciable a altos valores de N , genera la necesidad de recurrir a otro tipo de modelo.

En este capítulo se propondrá un modelo para la interpretación del proceso de transferencia de calor en lechos fijos de baja relación de aspecto denominado Modelo de Dos Zonas (MDZ) y se describirán los antecedentes que permitieron alcanzar su desarrollo y formulación general.

Adicionalmente, se desarrollará la formulación particular del modelo para la geometría simplificada que se utilizará a la largo del trabajo. Si bien en los reactores de lecho fijo el catalizador se encuentra contenido en tubos de geometría cilíndrica, en este trabajo se estudiarán lechos de partículas limitados por superficies planas. Es decir que se sacrificará la curvatura real de las paredes con el objeto de simplificar el planteo y por constituir este el primer trabajo al respecto. En consecuencia se abordará la formulación del modelo en coordenadas cartesianas, acordes a la geometría que se utilizará en las siguientes secciones. Sin embargo, en caso de requerirlo, la formulación del modelo puede fácilmente expresarse en coordenadas cilíndricas y debe señalarse que la metodología de análisis aquí propuesta es completamente aplicable a dicho caso.

3.2 Antecedentes

Uno de los primeros trabajos que puede citarse como antecedente del MDZ es el enfoque presentado por Borkink y Westerterp (1994) en el cual los autores analizaron la influencia de las variaciones radiales de porosidad y velocidad sobre las predicciones de los perfiles temperatura y concentración en lechos rellenos con transferencia de calor a través de una superficie de intercambio. Los autores aproximaron los perfiles radiales de porosidad y velocidad observados por medio de funciones escalón, dando origen al modelo que denominaron “*de dos regiones*” que incorpora dos parámetros de transferencia de calor: la conductividad térmica efectiva radial y el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared. En este trabajo se concluye que la conductividad efectiva radial puede ser considerada constante a lo largo de todo el radio, a pesar del efecto de canalización observado sobre la pared. Sin embargo, la influencia del perfil radial de velocidad sobre el término convectivo del balance de energía térmica, para el caso de lechos con baja relación de aspecto es significativa. Según se indica en esta publicación, para $Re_p < 100$ y relaciones de aspecto $N < 20$, las diferencias entre los valores de los coeficientes de transferencia de calor obtenidos con y sin considerar la influencia de la pared puede ser muy importante, hasta de un 50 %. Para valores superiores del número de Reynolds, las diferencias decrecen hasta alrededor de un 20 %.

Para el caso de reactores de escurrimiento, Mariani y colab. (2001) concluyeron que el modelo Bidimensional Pseudohomogéneo no es apropiado para interpretar la transferencia de calor en lechos de escurrimiento con bajas relaciones de aspecto. Los autores consideran que el incremento del flujo en las cercanías de la pared del lecho es el factor clave que determina las limitaciones del modelo $2P$. Atendiendo a esta situación, Mariani y colab. (2003) llevaron a cabo un trabajo que consistió en realizar mediciones de la distribución de líquido en un lecho con baja relación de aspecto. Los resultados mostraron claramente que la distribución del líquido es no-uniforme: el valor promedio del cociente entre las velocidades superficiales de pared y centro del lecho fue de 6. Con esta información y sobre la base de datos experimentales propios de transferencia de calor en lechos de escurrimiento con relaciones de aspecto comprendidas entre 4,7 y 34,3, los autores desarrollaron un modelo de dos zonas con diferentes velocidades en las regiones central y cercana a la pared para representar la

transferencia de calor desde un lecho de escurrimiento hacia la pared del tubo. Este modelo introduce tres parámetros térmicos, la conductividad térmica efectiva radial de la zona central, el coeficiente de transferencia de calor entre ambas zonas y el coeficiente de transferencia de calor entre la región cercana a la pared y la pared del tubo.

3.3 Modelo Propuesto, MDZ

En esta sección se propondrá un modelo para la interpretación de la transferencia de calor entre un lecho fijo de baja relación de aspecto y el medio que lo rodea.

El modelo que se describirá será denominado Modelo de Dos Zonas (MDZ) y constituye un modelo simple, que no requiere una excesiva cantidad de parámetros. Respetando la regla a seguir en la modelización referente a formular los modelos con la mayor sencillez posible para que la evaluación de los parámetros involucrados no sea una tarea excesivamente compleja, tal como lo requeriría un enfoque muy sofisticado con un número excesivo de parámetros de escasa viabilidad de predicción.

En este Capítulo se presentará el MDZ desde el punto de vista térmico, ignorando la existencia de reacciones catalíticas en el relleno. El caso con reacción catalítica será considerado en el Capítulo IV. El hecho de “aislar” el comportamiento térmico obedece al hecho que el MDZ está concebido para brindar una mejor cuantificación de la transferencia de calor a la pared. Los parámetros térmicos que el mismo introduce resultarán claramente identificados y los mismos se evaluarán en el Capítulo VIII con la asistencia de los resultados de CFD.

La Figura 3.1 muestra la representación del conjunto lecho-pared de acuerdo a la estructura del MDZ. Puede apreciarse la división del lecho en dos zonas, una inmediatamente adyacente a la pared del tubo (Zona “1”), de espesor igual a un radio de partícula en el sentido de la coordenada “y”, seguida por una Zona Central que se extiende a partir del límite de la Zona 1, hacia el centro del lecho.

Puede considerarse la existencia de una tercera zona (que no ha sido incluida en la Figura 3.1) que tenga en cuenta la existencia de un fluido de intercambio en la camisa del reactor (dispositivo de intercambio correspondiente).

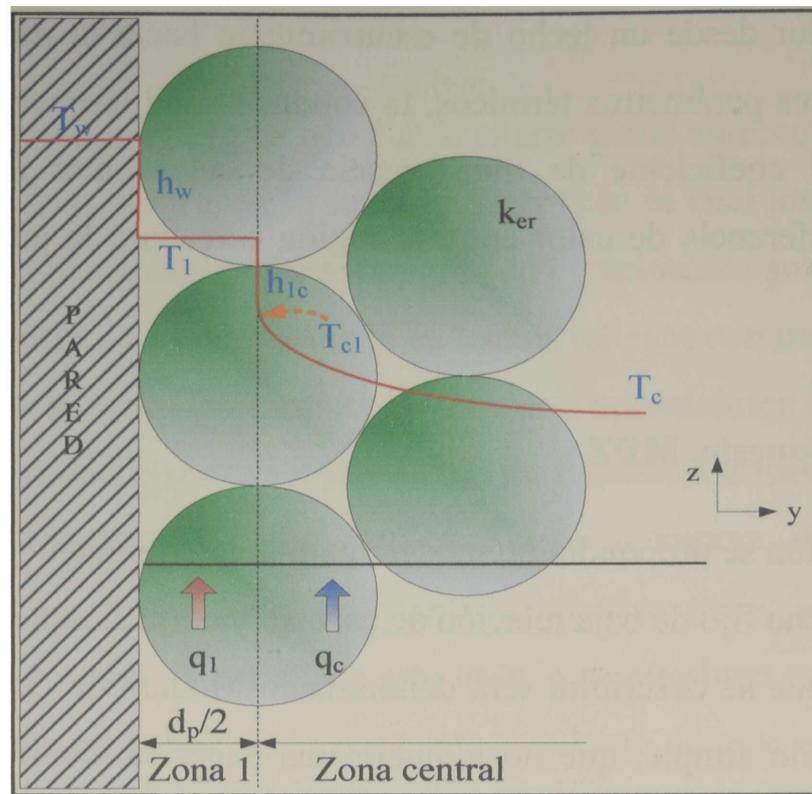


Figura 3.1. Esquema del Modelo de Dos Zonas y sus parámetros

En la Zona 1 se supone que la temperatura del fluido es uniforme en la dirección “y” normal a la pared, denotando a la misma T_1 . La velocidad superficial media es $\langle u_1 \rangle$ y el caudal volumétrico asociado es q_1 .

En la Zona Central la temperatura del fluido T_c es *distribuida*, es decir varía a lo largo de la coordenada “y”. En cambio, se supone que la velocidad superficial $\langle u_c \rangle$ es uniforme. El caudal volumétrico correspondiente es q_c (ver Figura 3.1).

Con respecto a la fase sólida, el MDZ puede plantearse en la modalidad pseudohomogénea o heterogénea (Capítulo II). En el presente trabajo de Tesis el énfasis es puesto sobre la contribución del fluido al transporte de energía y se considerará que los mecanismos correspondientes son dominantes frente a la contribución de la fase sólida. Esta situación, en la práctica, corresponde muy aproximadamente al caso de relativamente elevados valores del número de Reynolds, típicos de una importante variedad de procesos industriales. Por lo tanto, en tales condiciones la consideración de la fase sólida solo deberá ser tenida en cuenta desde el punto de vista geométrico, cuando se realicen los cálculos de CFD, y no resulta relevante discriminar entre los enfoques pseudohomogéneo y heterogéneo.

El MDZ introduce los siguientes parámetros de transferencia de calor, que por lo expuesto se encuentran asociados en este trabajo a mecanismos de transporte de la fase

fluida: el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared (h_w), la conductividad efectiva radial en Zona central (k_{er}), el coeficiente de transferencia de calor entre las zonas 1 y *central* (h_{1c}). Como parámetro fluidodinámico resulta la relación de las velocidades superficiales $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$.

De acuerdo a la descripción realizada, el flujo de calor desde la pared de tubo se puede expresar como:

$$Q_w = h_w (T_w - T_1) \quad (3.1)$$

donde T_w es la temperatura de la pared.

Entre las Zonas 1 y *central* el modelo propone la existencia de un flujo Q_{1c} que cuantifica la transferencia de calor entre ambas zonas:

$$Q_{1c} = h_{1c} (T_1 - T_{c1}) \quad (3.2)$$

donde T_{c1} es la temperatura de la Zona *central* en su frontera con la Zona 1, Figura 3.1.

3.4 Formulación de Balances de Energía para el MDZ

En la Figura 3.2a se representa el tubo de un reactor de lecho fijo. Sobre una porción del mismo se lleva a cabo la simplificación ya mencionada en la Introducción consistente en utilizar paredes planas, según se muestra en la Figura 3.2b.

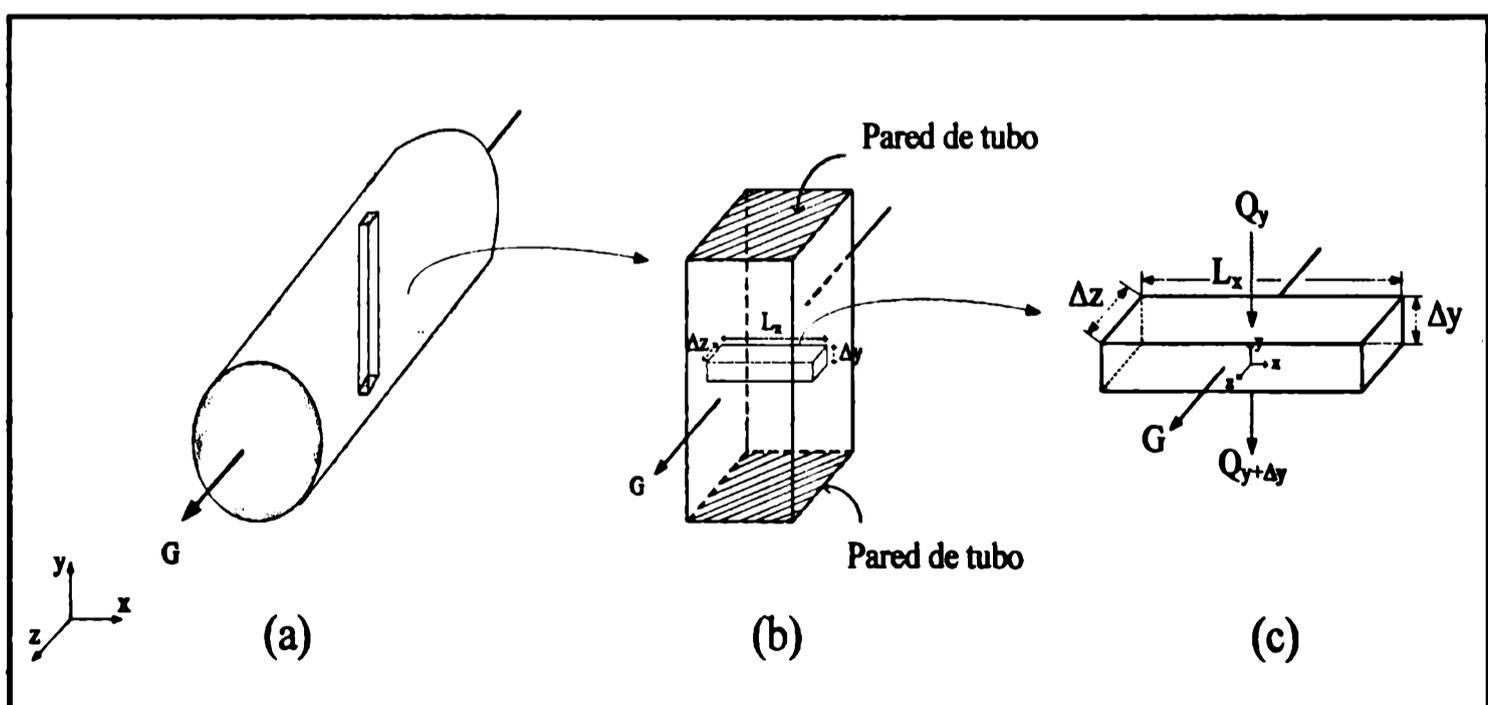


Figura 3.2. Esquema de la geometría de lecho fijo utilizada en la aplicación del MDZ

En la Figura 3.2b también se indica un elemento de volumen correspondiente a la Zona Central, que se amplía en la Figura 3.2c y que servirá como referencia para plantear el balance de energía térmica en la misma.

▪ **Balance de energía térmica para la zona 1:**

Tomando como referencia la Figura 3.1, un balance de energía térmica en estado estacionario y sin fuentes de calor se puede expresar en un segmento Δz :

$$\Delta z L_x h_w (T_w - T_1) - \Delta z L_x h_{1c} (T_1 - T_{c,1}) + \langle u_1 \rangle \left(\frac{d_p}{2} \right) L_x \rho_g C_{p1} \Delta T_1 = 0 \quad (3.3)$$

donde ΔT_1 es el incremento de T_1 en Δz , C_{p1} es el calor específico en la Zona 1 y la distancia L_x es la indicada en la Figura 3.2.

Dividiendo ambos miembros por Δz y tomando el límite para $\Delta z \rightarrow 0$

$$\boxed{h_w (T_w - T_1) - h_{1c} (T_1 - T_{c,1}) = \langle u_1 \rangle \rho_g C_{p1} \left(\frac{d_p}{2} \right) \frac{dT_1}{dz}} \quad (3.4)$$

▪ **Balance de energía térmica para la Zona Central:**

Se supone que el transporte de energía en la dirección normal a la pared se lleva a cabo mediante una expresión del tipo Fourier, $Q|_y = -k_{er} \frac{\partial T_c}{\partial y}$, donde k_{er} es la conductividad térmica efectiva transversal de la Zona *central*.

Considerando el transporte convectivo axial y el conductivo transversal, se plantea el balance térmico en estado estacionario y sin fuentes de calor (Figura 3.2c):

$$-k_{er} (L_x \Delta z) \left(\frac{\partial T_c}{\partial y} \Big|_y - \frac{\partial T_c}{\partial y} \Big|_{y+\Delta y} \right) + \langle u_c \rangle (L_x \Delta y) \rho_g C_{pc} \Delta T_{c,z} = 0 \quad (3.5)$$

$\Delta T_{c,z}$ es el incremento de T_c en Δz , C_{pc} es el calor específico en la zona central.

Dividiendo por $(L_x \cdot \Delta y \cdot \Delta z)$ y tomando el límite para $\Delta z \rightarrow 0$ y $\Delta y \rightarrow 0$:

$$\langle u_c \rangle \rho_g C_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial z} = k_{er} \frac{\partial^2 T_c}{\partial y^2} \quad (3.6)$$

Se introduce en la ecuación 3.6 la variable adimensional: $y^* = \frac{y}{L_y}$ (3.7)

donde L_y es el semi-espesor de la zona central del MDZ:

$$\boxed{\langle u_c \rangle \rho_g C_{pc} \frac{\partial T_c}{\partial z} = \frac{k_{er}}{L_y^2} \frac{\partial^2 T_c}{\partial y^{*2}}} \quad (3.8)$$

Condiciones de Borde:

✓ *Condición de simetría:*

Por simetría (Figura 3.2b), para el plano $y=0$:

$$\boxed{(\partial T_c / \partial y^*)_{y^*=0} = 0} \quad (3.9)$$

✓ *Frontera entre las dos zonas:*

$$-k_{er} \left(\frac{\partial T_c}{\partial y} \right)_{frontera} = h_{1c} (T_{cl} - T_1) \quad (3.10)$$

Introduciendo la variable adimensional y^* :

$$\boxed{-\left(\frac{\partial T_c}{\partial y^*} \right)_{y^*=1} = Bi_{1c} (T_{cl} - T_1)} \quad (3.11)$$

siendo Bi_{1c} el número de Biot, definido por: $Bi_{1c} = \frac{h_{1c} L_y}{k_{er}}$ (3.12)

3.4.1 Resolución del sistema de ecuaciones formulado

Como se detallará en el Capítulo VIII, se apelará a la CFD como herramienta para obtener la información que permita alcanzar el objetivo planteado de determinar los parámetros del MDZ que, como fuera explicado en la Sección 3.3, corresponden a los parámetros térmicos h_w , h_{1c} y k_{er} y al fluidodinámico $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$.

Para este fin resultará de suma utilidad integrar los balances de energía planteados previamente, de manera de disponer de expresiones analíticas que describan

la variación de T_1 a lo largo de z y la de T_c con z e y . Tal solución puede alcanzarse suponiendo que los parámetros y propiedades termofísicas permanecen constantes. La temperatura de pared T_w también se supondrá constante, en concordancia con las experiencias virtuales de CFD.

El conjunto de ecuaciones a resolver se compone de las ecuaciones diferenciales (3.4), (3.8) y las condiciones de borde (3.9) y (3.11), mediante las cuales luego se ajustarán los parámetros del MDZ (Capítulo VIII).

Se introducen las siguientes agrupaciones para compactar la notación:

$$w_c = \langle u_c \rangle \rho_g C_{pc} L_y \quad (3.13)$$

$$w_1 = \langle u_1 \rangle \rho_g C_{p1} (d_p / 2) \quad (3.14)$$

$$\lambda = \frac{k_{er}}{L_y} \quad (3.15)$$

y además emplearemos las diferencias:

$$\tau_c = T_c - T_w \quad (3.16)$$

$$\tau_1 = T_1 - T_w \quad (3.17)$$

Las ecuaciones (3.4), (3.8), (3.9) y (3.11) resultan:

$$\text{Zona 1:} \quad w_1 \frac{d\tau_1}{dz} = h_w (\tau_w - \tau_1) - h_{1c} (\tau_1 - \tau_c|_{y^*=1}) \quad (3.18)$$

$$\text{Zona Central:} \quad w_c \frac{\partial \tau_c}{\partial z} = \lambda \frac{\partial^2 \tau_c}{\partial y^{*2}} \quad (3.19)$$

$$\text{Condición de simetría:} \quad (\partial \tau_c / \partial y^*)_{y^*=0} = 0 \quad (3.20)$$

$$\text{Frontera } y^*=1: \quad \left(\frac{\partial \tau_c}{\partial y^*} \right)_{y^*=1} = Bi_{1c} (\tau_1 - \tau_c|_{y^*=1}) \quad (3.21)$$

Se propone para la solución de $\tau_c(z, y^*)$ una solución por separación de variables, es decir $\tau_c(z, y^*) = Z(z) Y(y^*)$. Reemplazando en (3.19) y teniendo en cuenta la condición de simetría (3.20) resulta:

$$\tau_c = C \exp(-\lambda \beta^2 z / w_c) \cdot \cos(\beta \cdot y^*) \quad (3.22)$$

con C y β constantes, que luego evaluaremos. Debe observarse que a largas distancias de la entrada, $z \rightarrow \infty$, deberá verificarse que $\tau_c \rightarrow 0$, porque la temperatura de la corriente se debe aproximar a T_w . Por lo tanto, el valor de β en (3.22) no podrá ser nulo. Debemos obtener ahora una expresión para τ_1 , para lo cual evaluamos a partir de (3.22):

$$\text{en } y^* = 1: \quad \tau_c|_{y^*=1} = \tau_{c1} = C \exp(-\lambda \beta^2 z / w_c) \cos \beta \quad (3.23)$$

$$\left. \frac{\partial \tau_c}{\partial y^*} \right|_{y^*=1} = (-C \beta) \exp(-\lambda \beta^2 z / w_c) \text{sen} \beta \quad (3.24)$$

Reemplazando en la ecuación (3.21):

$$(-C \beta) \exp(-\lambda \beta^2 z / w_c) \text{sen} \beta = Bi_{1c} (\tau_1 - C \exp(-\lambda \beta^2 z / w_c) \cos \beta) \quad (3.25)$$

despejando τ_1 y reordenando:

$$\tau_1 = C \exp(-\lambda \beta^2 z / w_c) \left[\cos \beta - \beta \frac{\text{sen} \beta}{Bi_{1c}} \right] \quad (3.26)$$

Se debe ahora determinar la condición que debe satisfacer β para ser evaluado, para lo cual empleamos la ecuación (3.18). Evaluando $d\tau_1 / dz$ a partir de la ecuación (3.26):

$$\frac{d\tau_1}{dz} = -\frac{C \lambda \beta^2}{w_c} \left[\cos \beta - \beta \frac{\text{sen} \beta}{Bi_{1c}} \right] \exp\left(-\frac{\lambda \beta^2 z}{w_c}\right) \quad (3.27)$$

Reemplazando las ecuaciones (3.23), (3.26) y (3.27) en la ec.(3.18) y reordenando:

$$\beta \text{sen} \beta \left[\beta^2 - \frac{(h_w + h_{1c})(w_c / w_1)}{\lambda} \right] - Bi_{1c} \cos \beta \left[\beta^2 - \frac{h_w(w_c / w_1)}{\lambda} \right] = 0 \quad (3.28)$$

La ecuación (3.28) puede reescribirse de la siguiente forma:

$$f(\beta) = \beta \text{sen} \beta P(\beta) - Bi_{1c} \cos \beta Q(\beta) = 0 \quad (3.29)$$

donde:

$$P(\beta) = \beta^2 - (h_{1c} + h_w) \frac{(w_c / w_1)}{\lambda} \quad (3.30)$$

$$Q(\beta) = \beta^2 - \frac{h_w (w_c / w_1)}{\lambda} \quad (3.31)$$

La ecuación (3.29) admite una serie infinita de raíces β_j , que se denominan *autovalores*. Cada autovalor genera una solución distinta en las ecuaciones (3.22) y (3.26), las que se describen en la Tabla 3.1. La función $\theta_j(y^*)$ correspondiente a β_j se denomina *autofunción*, mientras φ_j se denomina *autoconstante* (no depende de y^*).

$\tau_{1,j} = C_j \exp(-\lambda \beta_j^2 z / w_c) \varphi_j$	(3.32)
$\varphi_j = \cos \beta_j - \beta_j \frac{\text{sen} \beta_j}{Bi_{12}}$	(3.33)
$\tau_{c,j} = C_j \exp(-\lambda \beta_j^2 z / w_c) \theta_j$	(3.34)
$\theta_j = \cos(\beta_j y^*)$	(3.35)

Tabla 3.1: Expresiones de las autofunciones y autoconstantes utilizadas en la formulación de la solución del MDZ

Siendo $f(\beta)$ una función par, sus raíces resultarán simétricas respecto de $\beta = 0$. Puesto que β y $(-\beta)$ generan idénticas autofunciones y autoconstantes (ecuaciones 3.33 y 3.35) sólo se considerarán los autovalores positivos. Para un conjunto de valores de las variables w_c , w_1 , h_w , h_{12} y Bi_{1c} se verifica que:

- Si $\beta=0$, $f(0) = Bi_{1c} h_w (w_c / w_1) / \lambda$
- $Q(\beta)$ y $P(\beta)$ tienen raíces $\beta_Q = \sqrt{h_w (w_c / w_1) / \lambda}$ y $\beta_P = \sqrt{(h_{1c} + h_w)(w_c / w_1) / \lambda}$, que obviamente verifican $\beta_Q < \beta_P$.
- Las características de $Q(\beta)$, $P(\beta)$ junto con las de las funciones $\text{sen} \beta$ y $\cos \beta$ hacen que los autovalores β_i se hallen acotados de la siguiente manera:

Se define una serie de valores crecientes $\{\sigma_i\}$ con las raíces β_Q , β_P y con las raíces no negativas de $\cos(\beta)$ y de $\text{sen}(\beta)$: $(2n-1)\pi/2$ y $(n-1)\pi$, respectivamente, con n

entero (observar que el primer término de la serie es $\sigma_1 = 0$). Luego, queda definida una secuencia de intervalos contiguos $[\sigma_i, \sigma_{i+1}]$. Los autovalores β_i se encuentran en el interior de intervalos alternados, con el primero de ellos, β_1 , en el primer intervalo $[0, \sigma_2]$. La búsqueda numérica de los β_i puede realizarse con la seguridad que la función $f(\beta)$ posee distinto signo en los extremos de cada intervalo con autovalor.

Un caso particular surge si algún par de raíces coincide, es decir β_Q y/o β_P con alguna de las raíces de $\cos(\beta)$ o de $\sin(\beta)$. Se debe contabilizar, a los fines de la alternancia, un intervalo de longitud nula. Si al intervalo anterior al nulo le corresponde un β_i , al intervalo posterior le corresponderá β_{i+1} . En cambio, si al intervalo anterior no le corresponde un autovalor, al intervalo nulo le corresponde un autovalor igual al valor coincidente σ_i y en el intervalo posterior no existirá autovalor.

Resta ahora especificar las constantes C_j . A tal fin, consideramos la solución general para τ_c y τ_l a partir de sumar todas las soluciones posibles $\tau_{c,j}$, $\tau_{l,j}$ (Tabla 3.1) para el conjunto $\{\beta_i\}$. Vectorialmente puede expresarse:

$$\begin{bmatrix} \tau_c \\ \tau_l \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^{\infty} C_j \exp\left(-\frac{z\lambda\beta_j^2}{w_c}\right) \begin{bmatrix} \theta_j \\ \varphi_j \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

Para calcular los valores C_j debe hallarse una combinación lineal para los productos de autofunciones y autoconstantes que sea ortogonal (*CLO*). Tal combinación resulta ser:

$$CLO(m, n) = w_c \int_0^1 \theta_m \theta_n dy^* + w_l \varphi_m \varphi_n \quad (3.37)$$

Las variables w_c y w_l actúan como factores de ponderación en la combinación lineal. Se verifica que la $CLO(m, n) = 0$, si $m \neq n$. Para $m=n$:

$$CLO(n, n) = w_c \int_0^1 \theta_n^2 dy^* + w_l \varphi_n^2 = w_c \int_0^1 \cos^2(\beta_n y^*) dy^* + w_l \varphi_n^2 \quad (3.38)$$

Resolviendo la integral resulta:

$$CLO(n, n) = w_c \left(\frac{\beta_n + \sin\beta_n \cos\beta_n}{2} \right) + w_l \varphi_n^2 \quad (3.39)$$

Se evalúa ahora la ecuación (3.36) en la entrada al lecho, $z=0$, donde se asume que se conocen el valor $\tau_{1,0}$ y la función $\tau_{c,0}(y^*)$. Resulta:

$$\begin{bmatrix} \tau_{c,0} \\ \tau_{1,0} \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^{\infty} \mathbb{C}_j \begin{bmatrix} \theta_j \\ \varphi_j \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

multiplicando la ecuación (3.40) por el vector $\left[w_c \int_0^1 \theta_n dy^*, w_1 \varphi_n \right]$ y teniendo en cuenta la condición de ortogonalidad ($CLO(m,n) = 0$, si $m \neq n$) resulta:

$$w_c \int_0^1 \tau_{c,0} \theta_n dy^* + w_1 \tau_{1,0} \varphi_n = \mathbb{C}_n \left(w_c \int_0^1 \theta_n^2 dy^* + w_1 \varphi_n^2 \right) \quad (3.41)$$

Teniendo en cuenta (3.38),

$$\mathbb{C}_n = \frac{\left[w_c \int_0^1 \tau_{c,0} \theta_n dy^* + w_1 \tau_{1,0} \varphi_n \right]}{CLO(n,n)} \quad (3.42)$$

con lo que la solución resulta especificada.

En resumen, los elementos relevantes que describen la solución alcanzada son las expresiones (3.36) de la solución global para τ_l y τ_c , las (3.33) y (3.35) en la Tabla 3.1 para las autoconstantes φ_j y autofunciones $\theta_j(y^*)$, el procedimiento descrito para hallar los autovalores β_i en base a la ecuación 3.29 y las ecuaciones 3.39 y 3.42 para especificar las constantes \mathbb{C}_n en función de las condiciones en la alimentación de la corriente, $\tau_{1,0}$ y $\tau_{c,0}(y^*)$.

3.5 Conclusiones

En este capítulo se propuso un modelo para la interpretación de la transferencia de calor entre un lecho fijo de baja relación de aspecto y el medio que lo rodea. El modelo se ha denominado Modelo de Dos Zonas (MDZ) y constituye un modelo simple que introduce los siguientes parámetros: coeficiente de transferencia de calor sobre la pared (h_w), conductividad efectiva radial en Zona Central (k_r), coeficiente de transferencia de calor entre las zonas “1” y “central” (h_c) y como parámetro

fluidodinámico la relación de las velocidades superficiales $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$. Estos parámetros serán evaluados en el Capítulo VIII con la asistencia de los resultados de CFD.

Se desarrolló la formulación particular del modelo y se planteó la resolución del sistema de ecuaciones formulado para la geometría simplificada que se utilizará a lo largo del trabajo, en la cual el lecho de partículas se encuentra limitado por superficies planas. La formulación del modelo se abordó en coordenadas cartesianas, acordes a la geometría que se utilizará en las siguientes secciones.

CAPÍTULO IV

ANÁLISIS COMPARATIVO DE LA UTILIZACIÓN DE UN *MODELO DE DOS ZONAS* FRENTE A LA ALTERNATIVA DE MODELIZACIÓN MEDIANTE UN *MODELO PSEUDOHOMOGÉNEO BIDIMENSIONAL* PARA LECHOS FIJOS DE BAJA RELACIÓN DE ASPECTO CON REACCIÓN QUÍMICA.

4.1 Introducción

4.2 Utilización de los modelos MDZP y 2P sin reacción química para la definición de condiciones de comparación apropiadas

4.3 Formulación de los modelos con reacción química

4.3.1 Modelo 2P con reacción química

4.3.2 Modelo de dos zonas (MDZP) con reacción química

4.4 Resolución numérica de las ecuaciones de los modelos MDZP y 2P

4.4.1 Modelo pseudohomogéneo bidimensional

4.4.2 Modelo de dos zonas pseudohomogéneo

4.4.3 Reacción química y expresión cinética utilizada en la comparación

4.5 Condiciones operativas y cálculo de propiedades para la comparación

4.6 Comportamiento del Modelo de Dos Zonas. Discriminación de la participación de cada zona en los perfiles radiales y axiales

4.7 Análisis comparativo del comportamiento del MDZP con el modelo 2P

4.7.1. Efecto de la relación de aspecto

4.7.2. Efecto de Re_p

4.7.3. Efecto del calor de reacción

4.8 Conclusiones del estudio

4.1. Introducción

Como se ha expresado en la enunciación de los objetivos de este trabajo de Tesis, el desarrollo del Modelo de Dos Zonas, su formulación y la determinación de sus parámetros constituyen el eje fundamental del mismo.

Se ha mencionado la conveniencia de prestar particular atención al comportamiento de lechos de baja relación de aspecto y, como se evidenciará en diferentes capítulos de este trabajo (fundamentalmente en el Capítulo VIII, sección 8.5), un elemento esencial a considerar en estos lechos es el grado de aislamiento que condiciona el funcionamiento de la región adyacente a la pared en lo que se refiere al intercambio de materia y calor con el resto del lecho. El traslado de ese efecto al comportamiento global del reactor es de gran importancia, con consecuencias que deben analizarse, como se demostrará mediante el análisis que aquí se presenta.

Mientras que en el capítulo VIII se analizará la influencia de la fluidodinámica sobre la transferencia de calor y materia en los lechos de baja relación de aspecto, en el presente capítulo se desarrollará un estudio tendiente a comparar el comportamiento de un modelo de Dos Zonas en concepción pseudohomogénea (MDZP) y, en contraposición, el correspondiente a un modelo convencional pseudohomogéneo bidimensional (2P), ambos aplicados a un lecho donde se llevará a cabo una reacción química determinada. La comparación de resultados permitirá apreciar la diferencia de respuesta de ambos modelos y, en ese marco, establecer las bases que llevan a reconocer la conveniencia de utilización del *Modelo de Dos Zonas* en lechos de baja relación de aspecto.

Las características y formulación de los dos modelos mencionados, sobre la base de los elementos ya descritos en los capítulos II y III y las situaciones de equiparación para la comparación en condiciones válidas se presentarán en las secciones 4.2 y 4.3.

En la sección 4.4 se presentan las características de la reacción exotérmica irreversible que se utiliza en la comparación y se describe brevemente la técnica numérica utilizada en la resolución de los sistemas de ecuaciones diferenciales de cada modelo.

En la sección 4.5 se propone un caso que constituye la base del análisis, a partir del cual luego se modifican diferentes variables en pasos progresivos del estudio. Se definen las condiciones operativas, propiedades y parámetros de la condición base.

Como paso previo a la comparación del comportamiento de los dos modelos considerados en este capítulo, la sección 4.6 incluye un análisis de la influencia de cada región del MDZP en las diferentes variables fundamentales: concentración, conversión y temperatura. Los valores medios radiales de la zona central, en forma conjunta con los valores radialmente uniformes de la zona 1, son luego utilizados en la determinación de los valores medios radiales del modelo. Se presentan los perfiles axiales de las variables mencionadas y se discuten los resultados.

La sección 4.7 está destinada al análisis comparativo del comportamiento de los modelos en base al análisis de su respuesta frente a cambios en la relación de aspecto, el número de Reynolds y el calor de reacción.

Finalmente, la sección 4.8 resume las ventajas de la aplicación de un modelo de dos zonas y sintetiza las conclusiones del estudio abordado en este Capítulo.

4.2. Utilización de los modelos MDZP y 2P sin reacción química para la definición de condiciones de comparación apropiadas

En primer lugar, es necesario mencionar que en ambos casos se utilizará un enfoque pseudohomogéneo dado que el esfuerzo en el presente trabajo de Tesis se ha consagrado al estudio del comportamiento del fluido en la transferencia de calor en tubos de baja relación de aspecto. En este marco, se consideró coherente evitar la diferenciación de fases también en esta comparación.

Para la comparación con el MDZP, se utilizará el modelo bidimensional pseudo-homogéneo 2P. Este modelo incluye dos parámetros térmicos: el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared de tubo (que se identificará como h_w^{2P}) y la conductividad efectiva radial de la fase fluida, k_{er} . Con la finalidad de formular una condición comparativa válida con el MDZP, los parámetros mencionados se evaluarán mediante el procedimiento que se describe a continuación.

Las ecuaciones de balance del modelo 2P, que se han presentado en el Capítulo II, permiten escribir en ausencia de reacción química, el perfil de temperatura mediante una serie que, para el caso de perfil de temperatura a la entrada uniforme ($T=T_o$) y temperatura de pared T_w constante, se expresa como (Barreto y Martínez, 1992):

$$\frac{T(y^*, z^*) - T_w}{T_0 - T_w} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{Bi_w J_0(\beta_n y^*) \exp\left[-k_{er} L \beta_n z^* / (\langle u \rangle \rho_g C_p R_t^2)\right]}{(Bi_w^2 + \beta_n^2) J_0(\beta_n)} \quad (4.1)$$

donde $y^* = \frac{\rho}{R_t}$, $z^* = \frac{z}{L}$, ρ es la coordenada radial dimensional y β_n el n-ésimo autovalor, resultante de la raíz de la siguiente relación:

$$Bi_w J_0(\beta_n) = \beta_n J_1(\beta_n) \quad (4.2)$$

En las ecuaciones (4.1) y (4.2) J_0 y J_1 son las funciones de Bessel de orden cero y uno, respectivamente, y Bi_w , el número de Biot para transferencia de calor hacia la pared, definido por $Bi_w = R_t h_w^{2P} / k_{er}$.

A longitudes suficientemente alejadas de la entrada, el perfil de temperatura se desarrolla y sólo resulta significativo el primer término de la serie en la ecuación (4.1), correspondiente al menor autovalor β_1 :

$$\frac{T(y^*, z^*) - T_w}{T_0 - T_w} = 2 \frac{Bi_w J_0(\beta_1 y^*)}{(Bi_w^2 + \beta_1^2) J_0(\beta_1)} \exp\left[-k_{er} L \beta_1 z^* / (\langle u \rangle \rho_g C_p R_t^2)\right] \quad (4.3)$$

La ecuación (4.2) escrita expresamente para β_1 resulta:

$$Bi_w J_0(\beta_1) = \beta_1 J_1(\beta_1) \quad (4.4)$$

La velocidad de calentamiento de la corriente de fluido en una distancia diferencial (dz) se expresa como $dH = (\pi R_t^2) \langle u \rangle \rho_g C_p d\bar{T}$, donde \bar{T} es la temperatura media de mezclado en tasa, que puede evaluarse directamente de (4.1) o bien de (4.3) cuando el perfil está desarrollado. En el mismo dz la velocidad de transferencia de calor dQ puede expresarse en términos del coeficiente de transferencia de calor global hacia la pared, h_T , como: $dQ = (2 \pi R_t) dz h_T (T_w - \bar{T})$. Igualando $dH = dQ$, surge para h_T :

$$h_T = \frac{R_t \langle u \rangle \rho_g C_p}{2} \frac{d\bar{T}}{(T_w - \bar{T}) dz} \quad (4.5a)$$

Empleando (4.3) para evaluar \bar{T} y $d\bar{T}/dz$, surge

$$h_T = k_{er} \frac{R_t}{2} \beta_1 \quad (4.5b)$$

A fin de comparar el modelo MDZP con el modelo 2P se supondrá que la conductividad efectiva k_{er} de este último es igual a la de la zona central del MDZP. A tal efecto se empleará la correlación de Demirel y colab. (2000), tal como se discute en el capítulo VIII, sección 8.5.

Las correlaciones existentes en la literatura para el segundo parámetro térmico del modelo 2P, el coeficiente h_w^{2P} , ofrecen una importante dispersión, como resultado de que el mismo representa una combinación de efectos no definidos con precisión. En cambio, el modelo MDZP permite discriminar los efectos de manera físicamente satisfactoria, identificando la región de pared con diferente velocidad superficial que el resto del lecho, al introducir el coeficiente h_w como el resultado de la existencia de una capa límite localizada entre el primer estrato de partículas y la pared del recipiente y a su vez un segundo coeficiente de transferencia, h_{lc} , cuya inversa cuantifica la dificultad de intercambio convectivo entre la zona de pared y el resto del lecho, dificultad promovida por la región de baja porosidad a distancias de alrededor de un radio de pastilla.

Por lo tanto, en la presente comparación se considerará que los parámetros “reales” son los correspondientes al modelo MDZP, cuyos valores serán determinados a partir de los resultados que se exponen en el Capítulo VIII. El valor del parámetro h_w^{2P} del modelo 2P será calculado aquí mediante el criterio de igualar los coeficientes de transferencia globales de calor h_T de ambos modelos cuando el perfil de temperatura está desarrollado.

A tal efecto, se deben plantear expresiones análogas a las (4.5) para el MDZP. En el Capítulo III se plantearon las relaciones necesarias para cuantificar de acuerdo al MDZP la transferencia de calor entre la corriente de fluido y la pared del tubo a temperatura constante, pero dicho tratamiento fue planteado para un lecho confinado por paredes planas. Como fuera descrito en el Capítulo III, las expresiones equivalentes en un tubo de sección circular fueron reportadas en el trabajo de Mariani y colab. (2003) para un lecho de escurrimiento (*trickle-bed*). Las mismas no serán transcritas aquí, sino que solamente se expondrá el resultado final necesario para formular el criterio enunciado.

Para el MDZP en geometría cilíndrica resulta válida la definición (4.5a), con la temperatura promedio de mezclado de tasa, \bar{T} , definida mediante:

$$\bar{T} = \frac{w_1 T_1 + w_c \bar{T}_c}{w_1 + w_c} \quad (4.6)$$

donde $w_1 = \pi (R_1^2 - R_c^2) \langle u_1 \rangle C_{pl}$ (4.7)

$$w_c = \pi R_c^2 \langle u_c \rangle \rho C_{pc} \quad (4.8)$$

siendo $\langle u_1 \rangle$ la velocidad superficial en la zona 1, $\langle u_c \rangle$ la velocidad superficial en la zona central (supuesta uniforme) y $R_c = R_1 - (d_p/2)$.

El resultado para h_T , a partir de la formulación en Mariani y colab. (2003) también resulta expresable mediante la ecuación (4.5b), pero ahora el autovalor β_1 está definido como la menor raíz positiva de la relación:

$$Bi_{1c} J_0(\beta_1) \left(\beta_1^2 - 2R_1 h_w \frac{w_c}{w_1 k_{er}} \right) = \beta_1 J_1(\beta_1) \left(\beta_1^2 - 2(R_c h_{1c} + R_1 h_w) \frac{w_c}{w_1 k_{er}} \right) \quad (4.9)$$

donde $Bi_{1c} = R_c h_{1c} / k_{er}$.

Para que ambos modelos, MDZP y 2P, presenten el mismo valor de h_T , ecuación (4.5b), surge claramente que ambos autovalores β_1 deben ser iguales. Indicando los mismos con $\beta_{1,2P}$ y $\beta_{1,MDZP}$:

$$\beta_{1,2P} = \beta_{1,MDZP} \quad (4.10)$$

Finalmente, el criterio formulado por (4.10) se verifica ajustando el valor h_w^{2P} para el modelo 2P.

4.3. Formulación de los modelos con reacción química

4.3.1 Modelo 2P con reacción química

Tal como se incluyó en la sección 2.2.1.2 del Capítulo II, las ecuaciones a resolver son las siguientes, contemplando la ocurrencia de una reacción química única:

- **Balance de materia por componente para la especie clave k**

$$\langle u \rangle \frac{\partial C_k}{\partial z} = D_{er} \frac{\partial (\rho \partial C_k / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + r_k \quad (4.11a)$$

siendo D_{er} la difusividad efectiva radial del fluido (evaluada a partir del número de Peclet radial de masa correspondiente, $Pe_M = \langle u \rangle d_p / D_{er}$) y r_k la velocidad *net*a de

generación de la especie clave k que para una reacción única se expresa en función del coeficiente estequiométrico de la especie y de la velocidad de reacción, $r_k = \alpha_k r$.

- **Balance de energía térmica**

$$\langle u \rangle \rho_g C_p \frac{\partial T}{\partial z} = k_{er} \frac{\partial(\rho \partial T / \partial \rho)}{\partial \rho} + (-\Delta H) r \quad (4.11b)$$

donde $(-\Delta H)$ es el calor de reacción y T la temperatura de la fase pseudohomogénea considerada. El sistema (4.11) está sujeto a las condiciones de contorno siguientes:

$$\begin{aligned} \rho=0 & \quad \frac{\partial C_k}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0 \\ \rho=R_t & \quad \begin{cases} \frac{\partial C_k}{\partial \rho} = 0 \\ \frac{\partial T}{\partial \rho} = \frac{Bi_w}{R_t} (T_w - T) \end{cases} \end{aligned} \quad (4.11c)$$

4.3.2 Modelo de dos zonas (MDZP) con reacción química

En este caso, las ecuaciones de balance correspondientes a la zona central del MDZP serán análogas a las (4.11a) y (4.11b), pero contemplando la velocidad superficial de la zona y considerando condiciones de contorno diferentes a las (4.11c), generadas por la transferencia de calor y materia entre la zona *central* y la zona adyacente a la pared (identificada como zona *I*).

Ecuaciones de Balance en la zona central

- **Balance de materia por componente para la especie clave k**

$$\langle u_c \rangle \frac{\partial C_k}{\partial z} = D_{er} \frac{\partial(\rho \partial C_k / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + r_k \quad (4.12a)$$

Siendo $\langle u_c \rangle$ la velocidad superficial del fluido en la zona central del MDZP.

- **Balance de energía térmica**

$$\langle u_c \rangle \rho_g C_{pc} \frac{\partial T}{\partial z} = k_{er} \frac{\partial(\rho \partial T / \partial \rho)}{\partial \rho} + (-\Delta H) r \quad (4.12b)$$

donde $(-\Delta H)$ es el calor de reacción y T la temperatura de la fase pseudohomogénea considerada. El sistema (4.12) está sujeto a las condiciones de contorno siguientes:

$$\rho=R_t-(d_p/2) \quad \begin{cases} \frac{\partial C_k}{\partial \rho} = \frac{Bi_{m,lc}}{R_c} (C_{k,l}-C_{k,lc}) \\ \frac{\partial T}{\partial \rho} = \frac{Bi_{lc}}{R_c} (T_l-T_{lc}) \end{cases} \quad (4.12c)$$

En las ecuaciones (4.12c), el subíndice “*l*” indica magnitudes de la zona adyacente a la pared (*zona l*) mientras que “*lc*” corresponde a las variables de la zona central evaluadas en la frontera con la *zona l* ($\rho=R_t-d_p/2$).

El número de Biot correspondiente a transferencia de materia se define como $Bi_{m,lc} = R_c k_{lc} / D_{er}$, donde λ_{lc} es el coeficiente de transferencia de materia, que posee un significado análogo a h_{lc} pero para la situación de transferencia de materia y D_{er} es la difusividad efectiva radial.

Ecuaciones de Balance en la zona *l*

- **Balance de materia por componente para la especie clave *k***

$$\langle u_l \rangle \frac{dC_k}{dz} = r_k - \lambda_{lc} (C_{k,l} - C_{k,lc}) \quad (4.12d)$$

- **Balance de energía térmica**

$$\langle u_l \rangle \rho_g C_{pl} \frac{dT_l}{dz} = r (-\Delta H) - h_w \frac{2 R_t}{(R_t^2 - R_c^2)} (T_l - T_w) - h_{lc} \frac{2 R_c}{(R_t^2 - R_c^2)} (T_l - T_{lc}) \quad (4.12e)$$

El coeficiente de transferencia de materia entre las zonas *l* y *central*, λ_{lc} se calcula a partir del coeficiente análogo de transferencia de calor h_{lc} (Capítulo VIII, sección 8.4, ec. 8.10) por medio de la ecuación 4.13 (Incropera y De Witt, 1990):

$$Sh_{lc} = Nu_{lc} Sc^{1/3} Pr^{-1/3} \quad (4.13)$$

donde el número de Sherwood se define como $Sh_{lc} = \lambda_{lc} d_p / D_m$, y el correspondiente número de Schmidt $Sc = \mu_g / \rho_g D_m$. Se utilizó un valor de difusividad molecular del O_2 como valor fijo para todas las comparaciones, siendo $D_m = 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.

4.4. Resolución numérica de las ecuaciones de los modelos MDZP y 2P

4.4.1 Modelo pseudohomogéneo bidimensional

Las ecuaciones diferenciales a derivadas parciales que conforman el sistema (4.11) se resolvieron mediante el método de *colocaciones ortogonales* aplicadas a la dirección radial y utilizando el método *STIFF3* (Villadsen y Michelsen, 1978) para la resolución de los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) resultantes en la coordenada axial. Las programaciones se realizaron en lenguaje Fortran bajo plataforma *Compaq Visual Fortran 6.0*. El programa se implementó sobre la base de las subrutinas formuladas por Villadsen y Michelsen (1978), agregando las subrutinas específicas para la resolución de los balances representados por las ecuaciones (4.11a – b), sujetos a las condiciones (4.11c). Se utilizó la modalidad de cálculo por cocientes incrementales para el Jacobiano, de acuerdo a la modificación del método de Villadsen y Michelsen propuesta por Barreto y Mazza (1989). Los valores de los coeficientes de transferencia sobre la pared y de la conductividad efectiva radial se establecieron conforme al procedimiento de equivalencia para la transferencia de calor con el modelo de Dos Zonas descrito en la sección 4.2.

4.4.2 Modelo de dos zonas pseudohomogéneo

Las ecuaciones de la zona *central* se resolvieron mediante un esquema análogo al descrito para el modelo 2P, ahora definido por las ecuaciones (4.12a y 4.12b) bajo las condiciones de contorno (4.12c). En cada valor de la discretización de la variable axial z , se adicionaron las ecuaciones (4.12d-4.12e) de la zona *1* al conjunto de ecuaciones EDO resultante de la aplicación de colocaciones ortogonales en dirección radial (zona central). Para la resolución del sistema EDO se utilizó, análogamente al caso del modelo 2P, el método *STIFF3* ya mencionado.

4.4.3 Reacción química y expresión cinética utilizada en la comparación

Se consideró una reacción química irreversible del tipo $A \rightarrow P$, cuya velocidad de reacción química responde a la expresión siguiente:

$$r \left[\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \text{h}} \right] = \frac{k_1 C_k}{(1 + K_2 C_k)^{0.5}} \quad (4.14)$$

siendo $k_1 [h^{-1}] = 9,5 \cdot 10^9 e^{(-6500/T)}$; $K_2 [m^3 kmol^{-1}] = 0,4 \cdot 10^3 e^{(5100/T)}$ y C_k la concentración de la especie clave (A) expresada en $kmol m^{-3}$. La reacción es exotérmica, con un valor del calor de reacción dado en la Tabla 4.1 para el caso base del estudio.

4.5 Condiciones operativas y cálculo de propiedades para la comparación

Se partió de considerar un caso base para el análisis, resumiéndose los valores de propiedades y condiciones en las Tablas 4.1 y 4.2, respectivamente.

Propiedades del fluido y de transporte de materia	Propiedades térmicas (valores a la temperatura media del lecho)
$Pe_M = \langle u \rangle d_p / D_{er} = 8$ (Farina, Ferretti y Barreto, 1986)	$C_p [kJ m^{-3} K^{-1}] = 0,297$
$\rho_g [kg m^{-3}] = 0,78$	$(-\Delta H) [kJ kmol^{-1}] = 58.576,0$
$\mu_g [kg m^{-1} s^{-1}] = 0,256 \cdot 10^{-4}$	$k_g [W m^{-1} K^{-1}] = 0,0308$

Tabla 4.1. Propiedades utilizadas en el caso base

Los valores de los parámetros del modelo MDZP se listan en la Tabla 4.3 y cumplen las condiciones descritas en la sección 4.2 para su determinación. θ_1 y θ_c son los tiempos de residencia para las zonas *l* y *central* respectivamente. Los parámetros térmicos se calcularon mediante las correlaciones específicas desarrolladas en el Capítulo VIII, secciones 8.3 y 8.4 (ecuaciones 8.3 y 8.10) mientras que las velocidades en cada zona del MDZP se obtuvieron de la correlación (8.17) desarrollada en la sección 8.6 del Capítulo VIII. A partir del caso base se realizó el estudio comparativo que se describe en el resto de este Capítulo.

Geometría del reactor	Condiciones de alimentación	Condiciones de operación
$L [m] = 3,15$	$\langle u_o \rangle [m s^{-1}] = 0,977$	$T_w [K] = 550$
$R_f [m] = 0,02$	$T_{go} [K] = 450$	$Re_p = 300$
$N = d_i / d_p = 4$	$C_{ko} [kmol m^3] = 0,0044$	
$d_p [m] = 0,01$		

Tabla 4.2. Características geométricas del lecho y condiciones operativas (caso base)

Velocidades superficiales y tiempos de residencia resultantes por zona		Parámetros térmicos	Correlación
<i>Zona 1</i>	<i>Zona central</i>	$h_w = 158 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$	Capítulo VIII, ecuación (8.3)
$\langle u_1 \rangle [\text{m/s}] = 1,416$ $\theta_1 [\text{s}] = 2,22$	$\langle u_c \rangle [\text{m/s}] = 0,635$ $\theta_c [\text{s}] = 4,95$	$h_{1c} = 17,2 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$	Capítulo VIII, ecuación (8.10)
		$k_{er} = 0,7814 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$	Demirel y colab. (2000) ecuación (8.13)

Tabla 4.3. Parámetros del MDZP utilizados en los cálculos del caso base.

A partir de las condiciones y propiedades mencionadas en las Tablas 4.1 y 4.2 se realizaron diferentes corridas de los programas de resolución de ambos modelos. En primer lugar se llevó a cabo un análisis de los resultados del MDZP a fin de identificar el comportamiento de las variables fundamentales (temperatura, concentración y conversión) en ambas zonas. Ello permite discriminar el comportamiento de las variables en cada zona del modelo para luego observar el promedio radial correspondiente y su evolución axial. Posteriormente se realizó la comparación entre los dos modelos y un análisis paramétrico con la relación de aspecto, Re_p y el calor de reacción.

4.6 Comportamiento del Modelo de Dos Zonas. Discriminación de la participación de cada zona en los perfiles radiales y axiales.

En la Figura 4.1a se muestran los perfiles radiales de concentración del componente clave para las condiciones base de cálculo (Tablas 4.1 y 4.2) y para un número de puntos de colocación $N_c=6$. Debido a que en estas condiciones el tiempo de residencia $\theta_c = L/\langle u_c \rangle$ de la zona central es relativamente elevado, el reactivo en dicha zona se consume rápidamente. Por esto, las posiciones radiales graficadas en la figura corresponden a una posición axial $z = 0,787 \text{ m}$, un cuarto de la longitud del reactor, donde el reactivo aún posee una concentración relativamente elevada. La figura muestra el valor de concentración resultante para la zona unidimensional 1, C_{k1} (en eje vertical independiente). Pueden observarse los valores de concentración correspondientes a la zona central -muy inferiores a los de la zona 1- evidenciando la baja conversión existente en esta última. Ello obedece, principalmente, al bajo tiempo de residencia $\theta_1 = L/\langle u_1 \rangle$ en esta zona (Tabla 4.3).

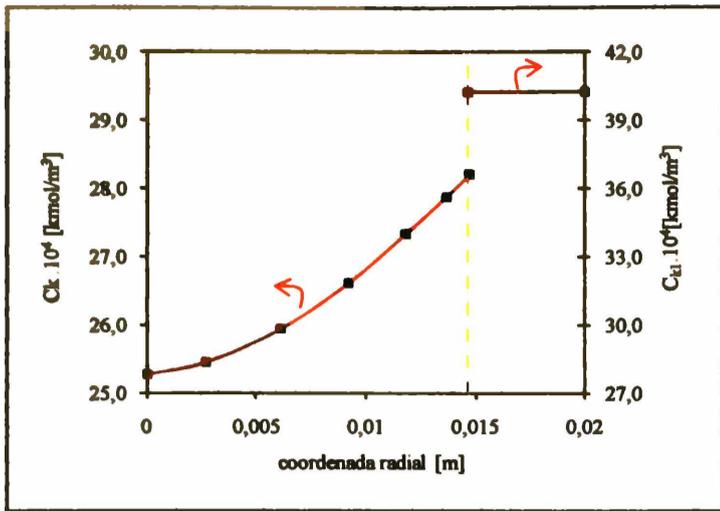


Figura 4.1a. Perfiles radiales de concentración obtenidos por MDZP. Condiciones base (Tablas 4.1-4.2). Coordenada axial $z = 0,787$ m. Los valores de los parámetros del MDZP utilizados se listan en la Tabla 4.3

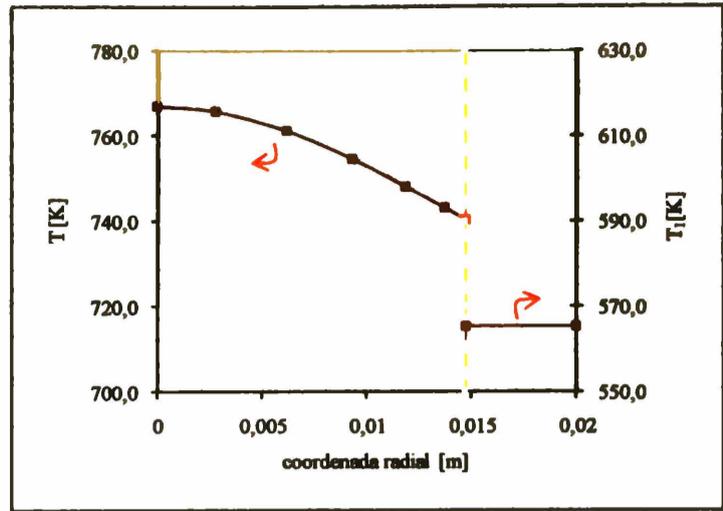


Figura 4.1b. Perfiles radiales de temperatura obtenidos por MDZP. Condiciones base (Tablas 4.1-4.2). Coordenada axial $z = 0,787$ m. Los valores de los parámetros del MDZP utilizados se listan Tabla 4.3

La Figura 4.1b presenta los valores de temperatura radial, en forma análoga a lo realizado precedentemente para C_k , para la misma posición axial. Ambos perfiles (concentración y temperatura) muestran el apartamiento del sistema de la condición de uniformidad radial de las variables y la marcada diferencia de los niveles de ambas variables en los perfiles de la zona central con el correspondiente valor en la zona I.

La Figura 4.2a muestra los perfiles axiales de concentración obtenidos con el MDZP, individualizados en sus dos curvas (una para cada zona) y el perfil promedio resultante, para el caso base. Se ha utilizado (y se lo hará en adelante para todos los perfiles axiales) la coordenada z en forma adimensional, definida como $z^* = z/L$.

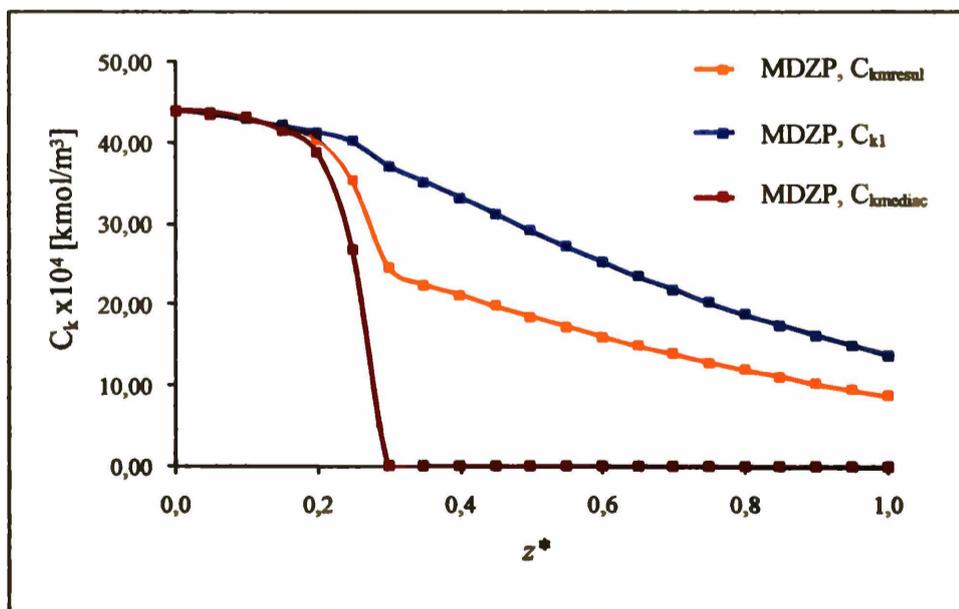


Figura 4.2a. Perfiles axiales de concentración media radial obtenidos por MDZP para las condiciones del caso base. Se incluye el perfil axial de concentración en la zona I y los perfiles de concentración media radial de la zona central y media radial resultante (efecto de ambas zonas).

El perfil abrupto que se obtiene para la zona central que se visualiza también en la Figura 4.2b para la conversión del reactivo clave que rápidamente alcanza valores cercanos a la unidad, puede interpretarse en función del tiempo de residencia, como primer factor, sobre la base de la distribución de velocidades superficiales reportadas en la Tabla 4.3.

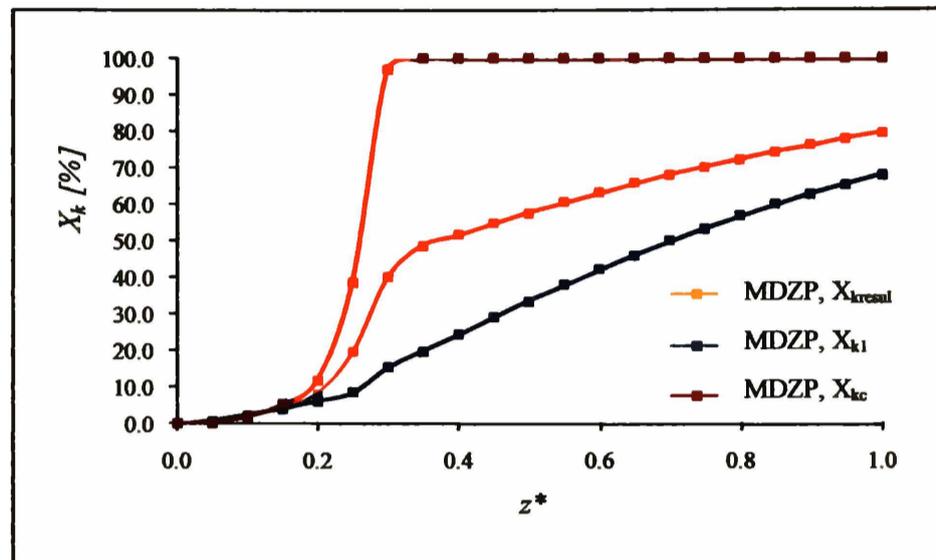


Figura 4.2b. Perfiles axiales de conversión media radial obtenidos por el MDZP para las condiciones del caso base. Curvas correspondientes a cada zona y valor promedio resultante.

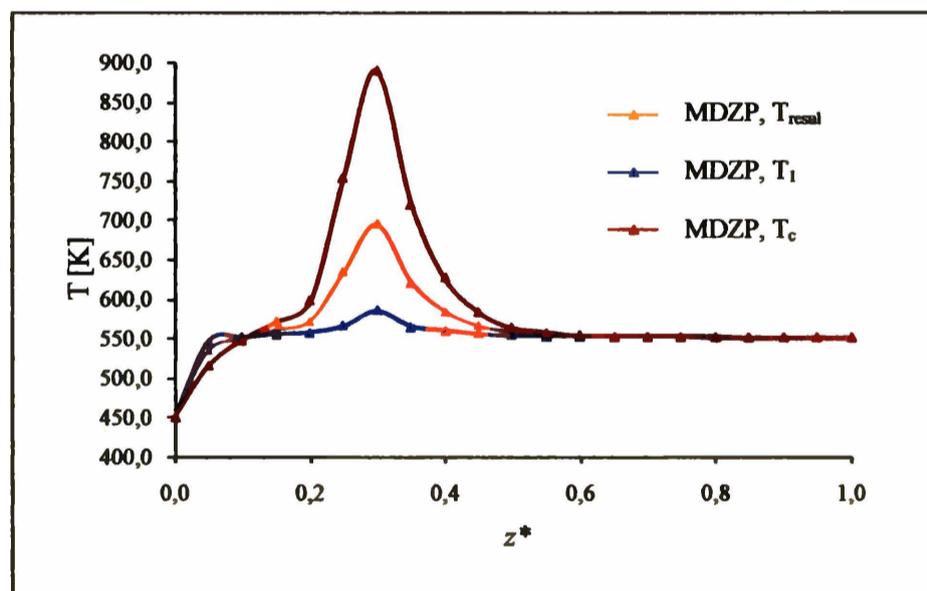


Figura 4.2c. Perfiles axiales de temperatura media radial obtenidos por el MDZP para las condiciones del caso base.

La Figura 4.2c muestra el comportamiento de la temperatura media radial de la zona *central*, de la temperatura de la zona *I* y de la temperatura media resultante (radial) para cada valor de la variable axial z . Como se observa en la Tabla 4.3 y se argumentó anteriormente para las Figuras 4.2a y 4.2b, en la condición base se establece un tiempo de residencia de la masa reaccionante en la zona *central* cuyo valor supera al doble del

correspondiente a la zona 1, con el efecto directo de generar mayor velocidad de calentamiento por la reacción (por mayor conversión). La precaria capacidad de disipación térmica en la frontera con la zona 1, representada por el coeficiente $h_{1c}=17,2$ ($W m^{-2}K^{-1}$), causa que la zona central no pueda atenuar los efectos térmicos, generándose un punto caliente de magnitud muy superior al correspondiente a la zona 1 en el mismo valor de z .

En las Figuras 4.3 y 4.4 se pretende mostrar el efecto de la relación de aspecto sobre el comportamiento del MDZP. Las mismas se obtuvieron manteniendo el número de Reynolds en el valor del caso base y también el valor del diámetro de tubo. La modificación de la relación de aspecto se llevó a cabo modificando los valores del diámetro de partículas. A fin de mantener el valor del Re_p , se modificó convenientemente la velocidad superficial de alimentación $\langle u_o \rangle$. Las relaciones de aspecto estudiadas fueron, además de $N=4$ (caso base), $N=10$ y $N=20$. La Tabla 4.4 resume los valores de velocidad superficial en cada zona para cada situación estudiada y los tiempos de residencia asociados a las mismas. Se incluye, además, la disminución porcentual del tiempo de residencia, con respecto a los valores del caso base.

$N = d_t / d_p$	Velocidad superficial [m/s]		Tiempo de residencia, θ [s]		% disminución de θ [s]	
	Zona 1 (pared)	Zona Central	θ_1 (Zona 1)	θ_c (Z. central)	θ_1 (Zona 1)	θ_c (Z. central)
4	1,416	0,636	2,22	4,95		
10	4,414	1,981	0,71	1,59	68	68
20	9,723	4,364	0,32	0,72	85,6	85,6

Tabla 4.4. Condiciones de velocidad y tiempo de residencia en las zonas del MDZP para las relaciones de aspecto estudiadas. Disminución porcentual de θ con respecto al caso base

Desde el punto de vista de la disminución de la concentración del reactivo clave con la longitud axial, la progresión de las Figuras 4.2a-4.3a-4.4a evidencia la pérdida de importancia, al incrementarse la relación de aspecto, del aporte al consumo de reactivo en la zona 1 (la variación de la conversión correspondiente se indica en las Figuras 4.2b-4.3b-4.4b). Ello es consecuencia de la disminución de la fracción de área transversal que le corresponde a la zona 1 a medida que aumenta la relación de aspecto N . También la temperatura tiende a ser más uniforme radialmente, como se observa en las Figuras 4.3c y 4.4c (progresión que continúa al caso de 4.2c), perdiendo relevancia la zona 1.

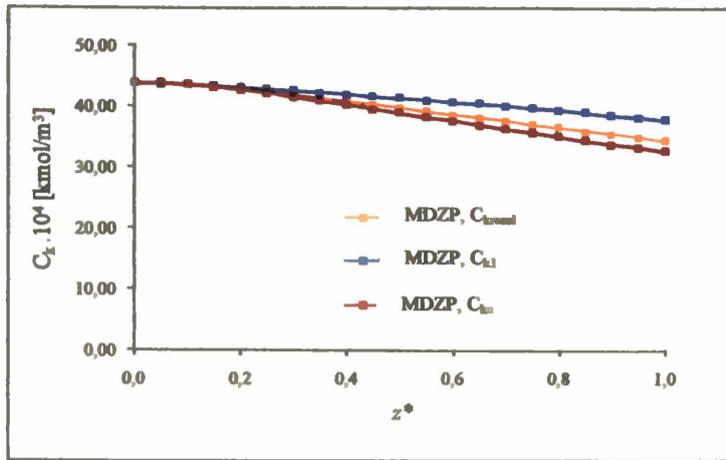


Figura 4.3a. MDZP. C_k para zonas I y central. Valor resultante (concentración media radial) en función de z . $T_w=550K$; $T_{go}=450K$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $Rep=300$, $\langle u_o \rangle=2,44$ m/s; $N = 10$; $dt= 0,04m$; $dp= 0,004$ m; $L=3,15$ m.

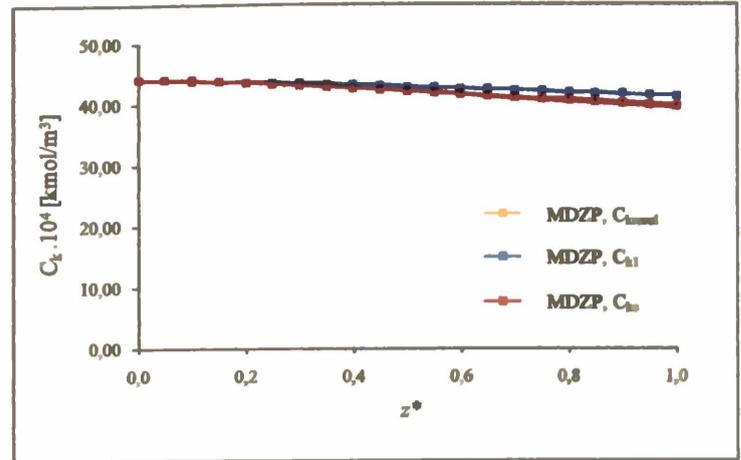


Figura 4.4a. MDZP. C_k para zonas I y central. Valor resultante (concentración media radial) en función de z . $T_w=550K$; $T_{go}=450K$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $Rep=300$; $\langle u_o \rangle= 4,88$ m/s; $N = 20$; $dt= 0,04m$; $dp= 0,002m$; $L=3,15$ m.

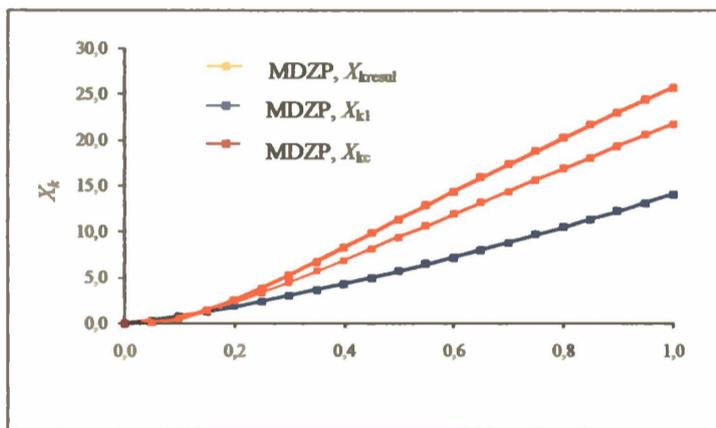


Figura 4.3b. MDZP. X_k para zonas I y central. Valor resultante (conversión media radial) en función de z . $T_w=550K$; $T_{go}=450K$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $Rep=300$; $\langle u_o \rangle=2,44$ m/s; $N = 10$; $dt= 0,04$ m; $dp= 0,004$ m; $L=3,15$ m.

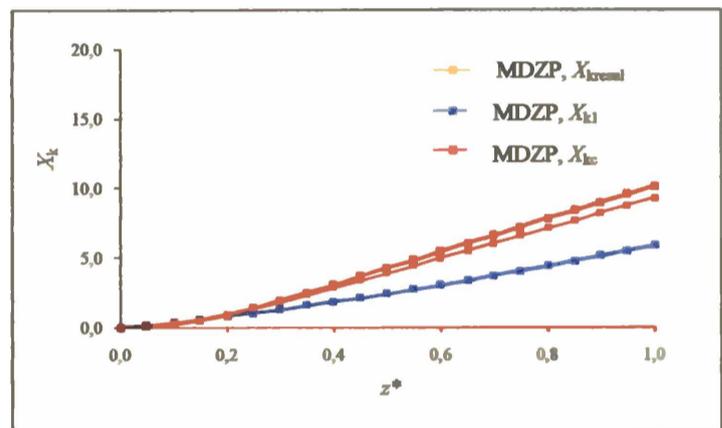


Figura 4.4b. MDZP. X_k para zonas I y central. Valor resultante (conversión media radial) en función de z . $T_w=550K$; $T_{go}=450K$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $Rep=300$, $\langle u_o \rangle= 4,88$ m/s; $N = 20$; $dt= 0,04$ m; $dp= 0,002$ m; $L=3,15$ m.

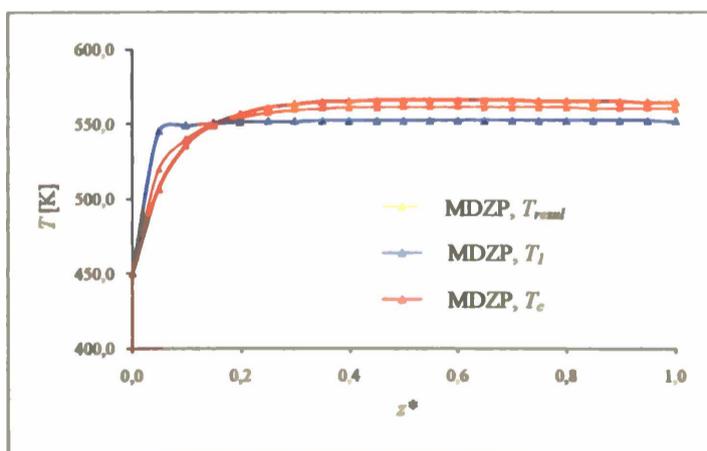


Figura 4.3c. MDZP. T para zonas I y central. Valor resultante (temperatura media radial) en función de z . $T_w=550K$; $T_{go}=450K$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $Rep=300$; $\langle u_o \rangle=2,44$ m/s; $N = 10$; $dt= 0,04m$; $dp= 0,004$ m; $L=3,15$ m.

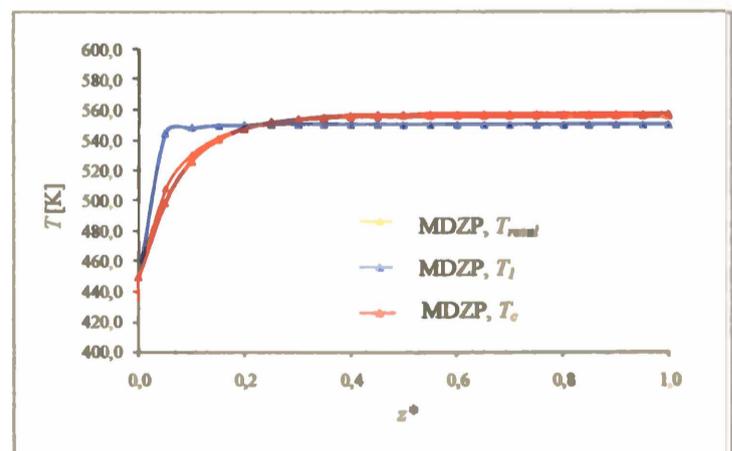


Figura 4.4c. MDZP. T para zonas I y central. Valor resultante (temperatura media radial) en función de z . $T_w=550K$; $T_{go}=450K$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $Rep=300$; $\langle u_o \rangle= 4,88$ m/s; $N = 20$; $dt= 0,04$ m; $dp= 0,002m$; $L=3,15$ m.

La disminución del diámetro se traduce en un incremento del coeficiente de transferencia de calor y del correspondiente de materia en la frontera entre zonas. Este coeficiente pasa de $h_{lc} = 17,2 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ para $N=4$ a $53,4 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ para $N=10$ y $118,2 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ para $N=20$ y, consecuentemente, provoca la atenuación ostensible de las diferencias de temperatura entre las zonas. En la Figura 4.4c, correspondiente a la mayor relación de aspecto estudiada, el perfil de temperatura media radial del MDZP es prácticamente coincidente con el de la media de la zona central (presentan una diferencia máxima de 5 grados para una posición axial cercana a $z^*=0,1$). La zona I, en este caso, ha perdido casi totalmente influencia.

En síntesis, se ha visualizado cómo, para pequeñas relaciones de aspecto, existe un efecto importante de la zona I, que permanece relativamente aislada del resto del lecho e influye en la transferencia de materia, conversión y perfil térmico de manera considerable. Además, la pérdida de significación de la zona I con el incremento de la relación de aspecto ha sido puesta en relevancia.

4.7. Análisis comparativo del comportamiento del MDZP con el modelo 2P.

4.7.1. Efecto de la relación de aspecto

Las Figuras 4.5a y 4.5b muestran los perfiles axiales de conversión media (4.5a) y temperatura media radial (4.5b) obtenidos para las condiciones del caso base, mediante ambos modelos.

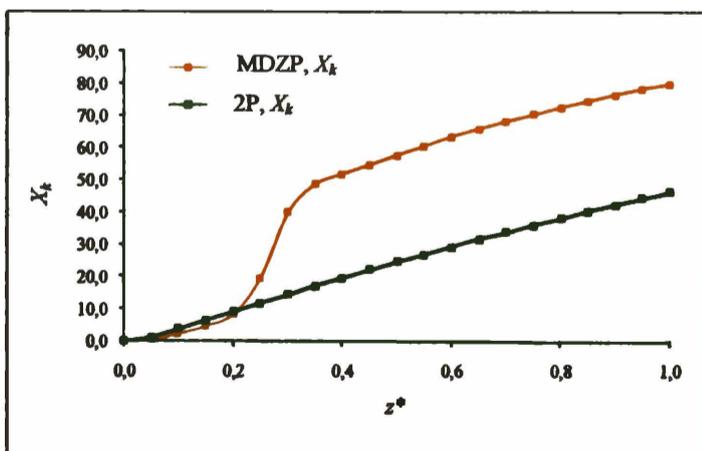


Figura 4.5a. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de conversión media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Rep=300$; $(-\Delta H)=58576,0 \text{ kJ/kmol}$; $\langle u_o \rangle=0,977\text{m/s}$, $N=4$; $d_f=0,04\text{m}$; $d_p=0,01\text{m}$; $L=3,15\text{m}$.

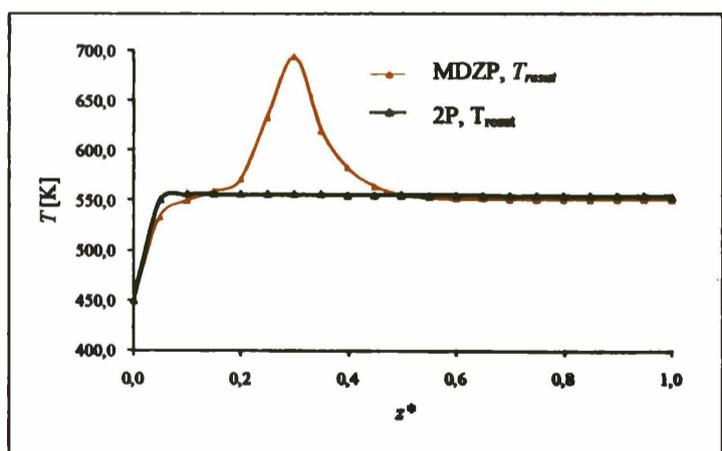


Figura 4.5b. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de temperatura media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Rep=300$; $(-\Delta H)=58576,0 \text{ kJ/kmol}$; $Rep=300$; $\langle u_o \rangle=0,977 \text{ m/s}$, $N=4$; $d_f=0,04\text{m}$; $d_p=0,01\text{m}$; $L=3,15 \text{ m}$.

Puede observarse que los apartamientos significativos entre las temperaturas analizadas en los perfiles correspondientes a ambos modelos, se producen hasta valores de profundidad de $z^*=0,5$. El tramo final de tubo, de velocidad de reacción atenuada (tanto desde los efectos térmicos como de composición) permite que los modelos arrojen valores casi coincidentes.

Con el fin de visualizar la evolución de estas diferencias, en la expectativa de que las mismas se verán atenuadas al aumentar la relación de aspecto, se obtuvieron los perfiles correspondientes a conversión y temperatura para relaciones de aspecto 10 y 20. Los resultados se pueden observar en las Figuras 4.6 (a y b) y 4.7 (a y b), respectivamente, donde se muestra una coincidencia creciente en las conversiones y temperaturas obtenidas por ambos modelos, tal como podía esperarse de acuerdo a las características ya señaladas.

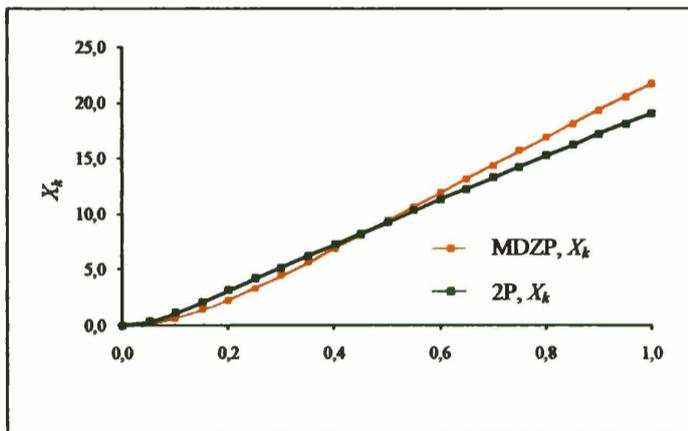


Figura 4.6a. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de conversión media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=300$; $(-\Delta H)=58576,0 \text{ kJ/kmol}$; $\langle u_o \rangle=2,44 \text{ m/s}$; $N=10$; $d_r=0,04\text{m}$; $d_p=0,004\text{m}$; $L=3,15 \text{ m}$.

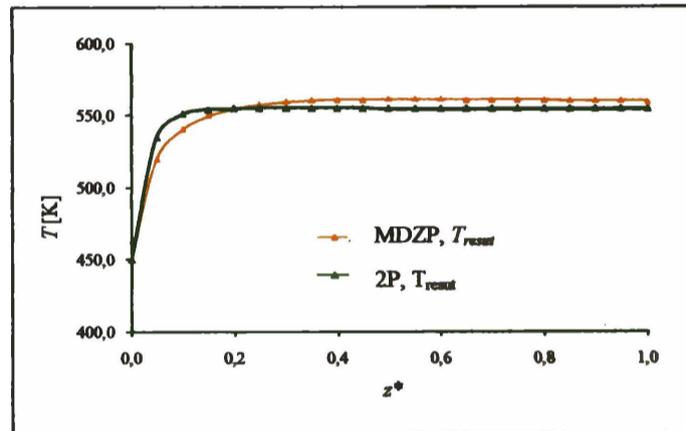


Figura 4.6b. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de temperatura media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=300$; $(-\Delta H)=58576,0 \text{ kJ/kmol}$; $\langle u_o \rangle=2,44 \text{ m/s}$; $N=10$; $d_r=0,04\text{m}$; $d_p=0,004\text{m}$; $L=3,15 \text{ m}$.

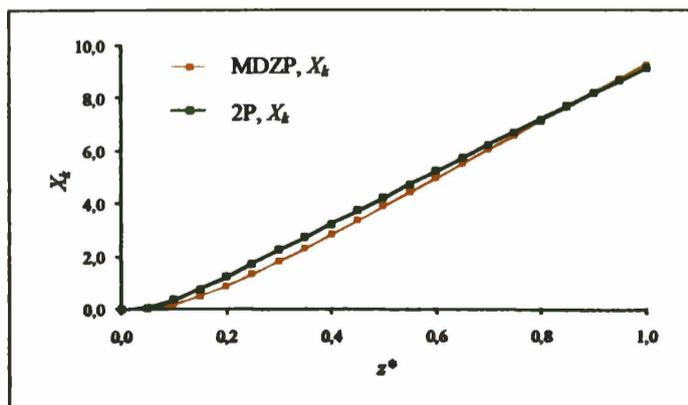


Figura 4.7a. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de conversión media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=300$; $(-\Delta H)=58576,0 \text{ kJ/kmol}$; $\langle u_o \rangle=4,88 \text{ m/s}$; $N=20$; $d_r=0,04 \text{ m}$; $d_p=0,002 \text{ m}$; $L=3,15 \text{ m}$.

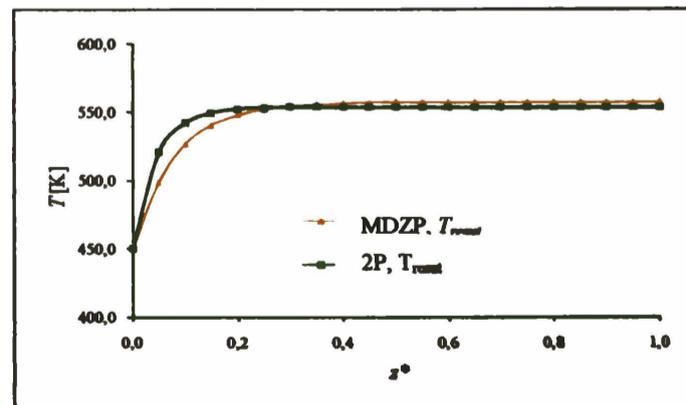


Figura 4.7b. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de temperatura media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=300$; $(-\Delta H)=58576,0 \text{ kJ/kmol}$; $\langle u_o \rangle=4,88 \text{ m/s}$; $N=20$; $d_r=0,04 \text{ m}$; $d_p=0,002 \text{ m}$; $L=3,15 \text{ m}$.

Debe recalcar que las diferencias de temperatura encontradas en los perfiles derivados de los dos modelos, para $N=4$, pueden ser muy importantes en muchas situaciones, provocando consecuencias de relevancia. Por ejemplo, frente a casos en los que se lleve a cabo el procesamiento de sistemas de reacciones competitivas, que lógicamente verán influenciado su comportamiento frente a la temperatura en forma diferente, en función de los valores de sus energías de activación. Las diferencias en los perfiles de temperatura conducirían a evaluaciones sumamente erróneas de la selectividad o rendimiento de una especie, al utilizar un modelo pseudohomogéneo en casos de baja relación de aspecto.

En adición a lo expuesto, las diferencias de perfiles obtenidos por ambos modelos se verían acentuadas cuando se considere el caso de modelización heterogénea. En el tratamiento realizado en este trabajo puede producirse una cierta atenuación en las discrepancias por tratarse de un sistema pseudohomogéneo que, por su naturaleza, enmascara los fenómenos asociados con las resistencias a la transferencia de materia y energía inter e intraparticulares.

4.7.2. Efecto de Re_p

En las Figuras 4.8a-4.8b y 4.9a-4.9b se presentan los resultados que permiten visualizar la influencia del número de Reynolds sobre los valores de conversión, y temperatura media radial. Las restantes condiciones corresponden a las del caso base, por lo que el análisis presente puede considerarse como el efecto de aumentar el valor de Re_p desde la condición de referencia ($Re_p=300$) a los valores $Re_p=426$ y $Re_p=800$.

El efecto observado es un desplazamiento del pico de temperatura y del salto en la conversión (Figuras 4.8) y luego una atenuación importante de las diferencias entre los perfiles obtenidos por el MDZP y los correspondientes al modelo 2P para valores del Re_p mayores (Figuras 4.9). Ello debe atribuirse a que la mayor turbulencia incrementa los parámetros de transporte radiales y las variables (composición y temperatura) tienden a uniformarse.

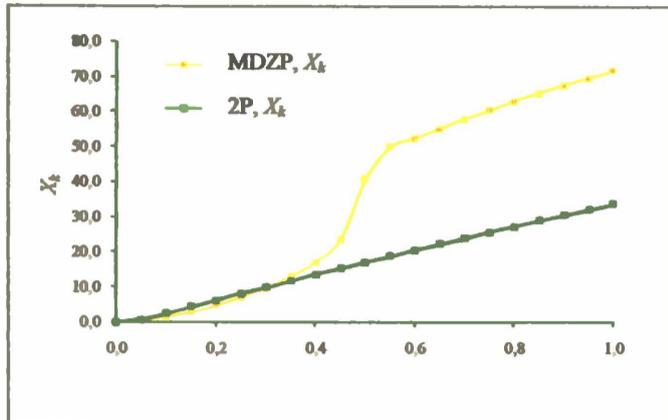


Figura 4.8a. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de conversión media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=426$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $\langle u_o \rangle=1,38$ m/s; $N=4$; $d_r=0,04$ m; $d_p=0,01$ m; $L=3,15$ m.

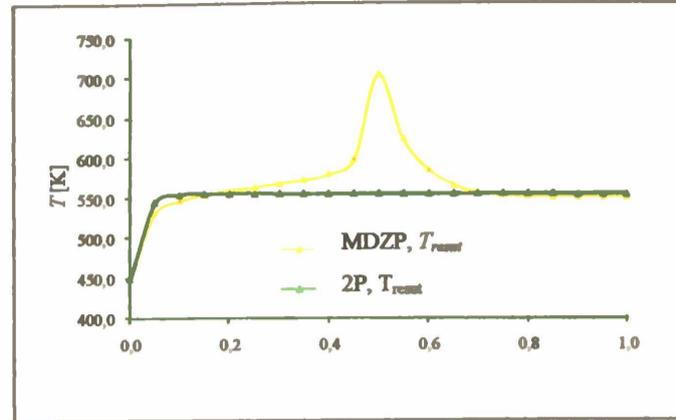


Figura 4.8b. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de temperatura media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=426$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $\langle u_o \rangle=1,38$ m/s; $N=4$; $d_r=0,04$ m; $d_p=0,01$ m; $L=3,15$ m.

Sin embargo, resultaría erróneo concluir que cuando se trabaja a altos valores de Re_p podría ser innecesario apelar a un Modelo de dos Zonas ya que otros factores provocan también que el mismo resulte necesario. En los rangos usuales de Re_p (< 500) de operación de los lechos fijos, las diferencias de comportamiento son apreciables.

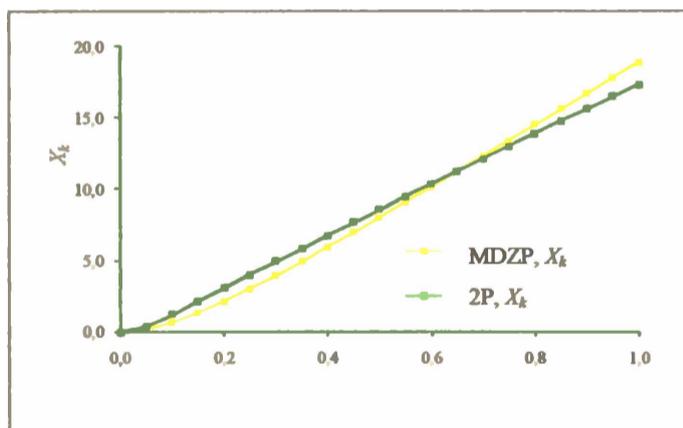


Figura 4.9a. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de conversión media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=800$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $\langle u_o \rangle=2,61$ m/s; $N=4$; $d_r=0,04$ m; $d_p=0,01$ m; $L=3,15$ m.

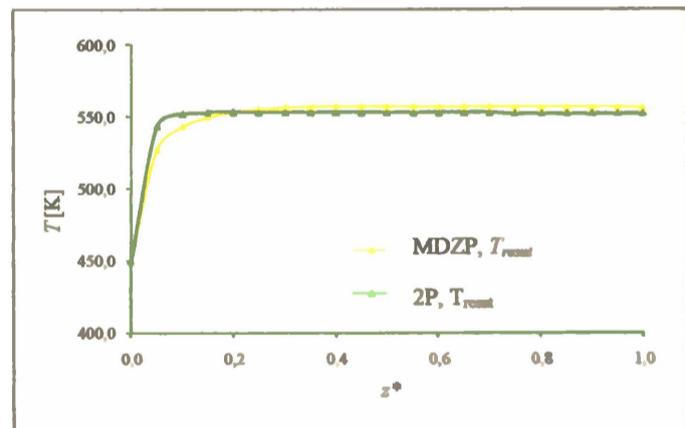


Figura 4.9b. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de temperatura media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=800$; $(-\Delta H)=58576,0$ kJ/kmol; $\langle u_o \rangle=2,61$ m/s; $N=4$; $d_r=0,04$ m; $d_p=0,01$ m; $L=3,15$ m.

La observación de los resultados ratifica que el modelo 2P no resulta apropiado para lechos de baja relación de aspecto. Sí puede serlo para los casos donde dicha relación es alta, por cuanto presentarán perfiles más suaves, matemáticamente representables por un enfoque pseudohomogéneo en todo el dominio de la variable radial y proyectado al comportamiento axial.

4.7.3. Efecto del calor de reacción

Partiendo del caso base (perfil de temperatura media radial de la Figura 4.5b) para el cual el MDZP arroja un valor de la temperatura media en el punto caliente de 694,7 K y el modelo 2P sólo alcanza un valor de 556,8 K (137,9 K de diferencia en la estimación de la temperatura máxima) se estudió la sensibilidad en el comportamiento de ambos modelos al valor del calor de reacción como parámetro. Las Figuras 4.10a y 4.10b muestran los perfiles de temperatura media radial para valores de $(-\Delta H) = 41003,2$ kJ/kmol (30% inferior al valor del caso base) y $(-\Delta H) = 67362,4$ kJ/kmol (15% superior al valor del caso base). En el caso de la Figura 4.10a, el máximo es de 577 K para el MDZP y de 554.3 K para el modelo 2P, desplazados en la coordenada axial. La diferencia absoluta es, en este caso de 22,7 K. Finalmente, la Figura 4.10b presenta la tercera situación analizada que arroja una diferencia de temperatura en los máximos de 204,9 K (763,1 K para el MDZP frente a 558,2 K del modelo 2P). Los resultados evidencian una tendencia a aumentar la diferencia entre las temperaturas predichas por ambos modelos conforme crece el valor del calor de reacción. Ello vuelve al modelo 2P poco confiable por una evidente subestimación de los efectos térmicos, que se incrementa cuando éstos son más severos.

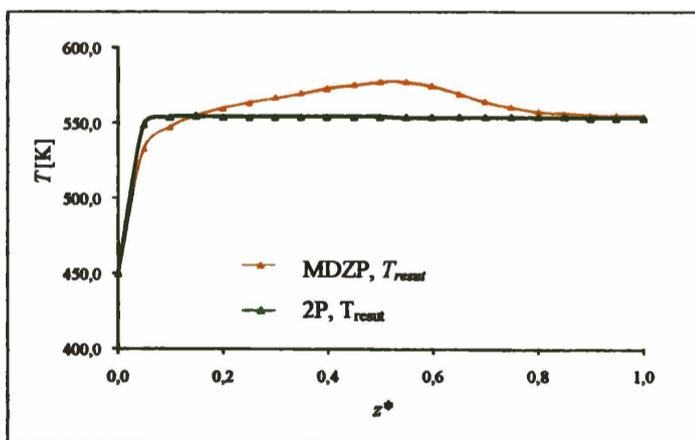


Figura 4.10a. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de temperatura media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=300$; $(-\Delta H)=41.003,2$ kJ/kmol; $\langle u_o \rangle=0.97$ m/s; $N=4$; $d_t=0,04$ m; $d_p=0,01$ m; $L=3,15$ m.

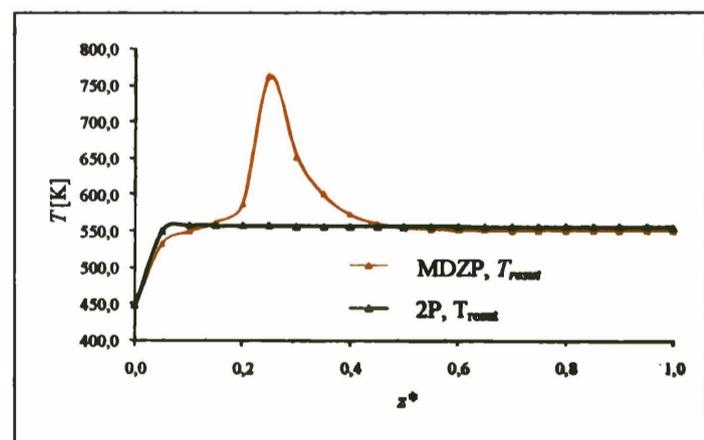


Figura 4.10b. MDZP vs. 2P. Perfiles axiales de temperatura media radial. $T_w=550\text{K}$; $T_{go}=450\text{K}$; $Re_p=300$; $(-\Delta H)=67.362,4$ kJ/kmol; $\langle u_o \rangle=0.97$ m/s; $N=4$; $d_t=0,04$ m; $d_p=0,01$ m; $L=3,15$ m.

4.7.4. Comparación de perfiles radiales generados por ambos modelos

La Figura 4.11 presenta los perfiles de temperatura obtenidos radialmente para el MDZP y el modelo 2P con el fin de visualizar en una única figura, a manera de síntesis, los perfiles de temperatura de los dos modelos en forma conjunta.

Estos perfiles fueron obtenidos para las condiciones del cálculo base (Tablas 4.1-4.2).

Puede apreciarse, además de la diferencia en los valores numéricos, el posicionamiento de los puntos de colocación diferente, en un caso para la zona central (MDZP) y en el otro (2P) para el radio de tubo completo. Conceptualmente, los perfiles siguen las características previamente discutidas.

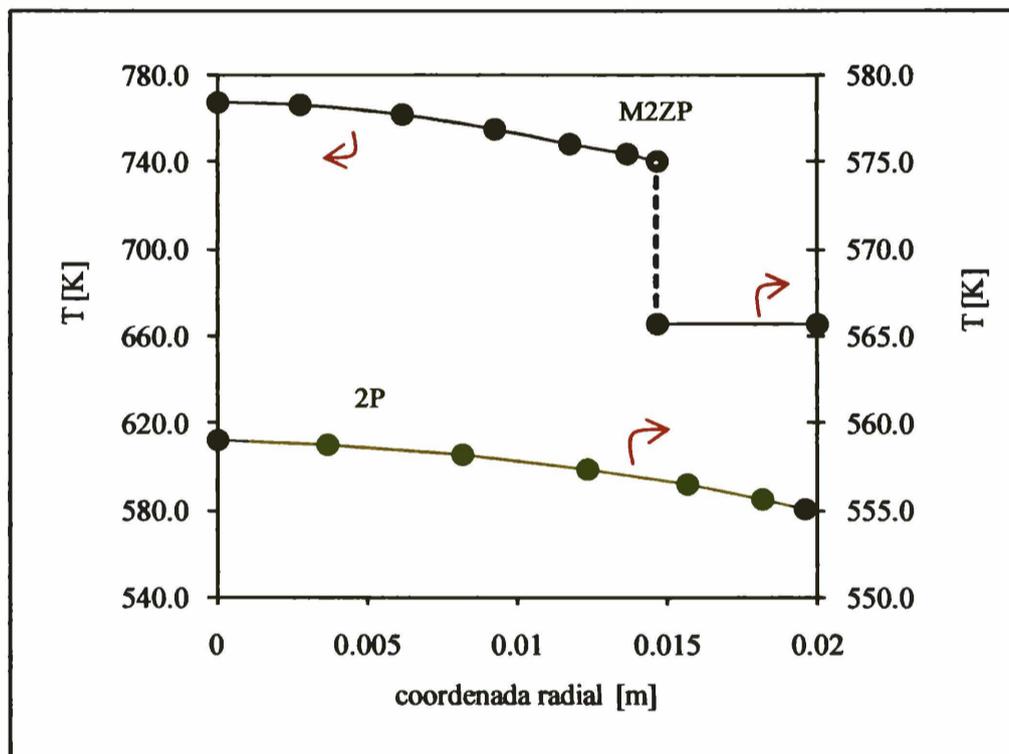


Figura 4.11. Perfiles radiales de temperatura obtenidos para los modelos MDZP y 2P. Condiciones base (Tablas 4.1-4.2). Coordenada axial $z = 0,787$ m.

4.8. Conclusiones del estudio

La contribución de cada zona del MDZ pseudohomogéneo se ha analizado y discutido sobre la base de los perfiles axiales de concentración, conversión y temperatura medias, evaluando la relevancia de cada zona en las diferentes condiciones estudiadas. Se demostró la pérdida de significación de la zona *I* para relaciones de aspecto altas y Re_p elevados (a partir de 800, para las condiciones del análisis).

La conveniencia de utilización de un modelo de dos zonas para la representación del comportamiento de un lecho de baja relación de aspecto, frente a un modelo bidimensional pseudohomogéneo se ha demostrado sobre la base de aplicar ambos al caso de una reacción irreversible con cinética no-normal. Se ha estudiado el efecto de las variables principales: relación de aspecto, número de Reynolds y calor de reacción, hallándose –para relaciones de aspecto pequeñas o moderadas- diferencias considerables en los perfiles axiales de temperatura media radial entre ambos enfoques, que se traducen luego en diferencias igualmente considerables en la composición.

CAPÍTULO V

FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL. GENERALIDADES DE LA TÉCNICA. MODALIDADES DE UTILIZACIÓN PARA LA REPRESENTACIÓN DE LECHOS FIJOS

5.1 Introducción

- 5.1.1 Breve historia de la CFD
- 5.1.2 Aplicaciones de la CFD
- 5.1.3 Algunas ventajas e inconvenientes de la CFD
- 5.1.4 La CFD en la Ingeniería Química
- 5.1.5 Aplicaciones de la CFD a reactores de lecho fijo

5.2 Tratamiento del flujo de fluidos y modelos utilizados por la CFD

- 5.2.1 Ecuaciones de conservación a resolver por la CFD
- 5.2.2 Tratamiento del flujo turbulento
 - 5.2.2.1 Tratamiento de la región cercana a la pared en flujos turbulentos

5.3 Discretización de las ecuaciones de transporte

5.4 Procedimiento de resolución por CFD

- 5.4.1 Etapa de Pre-procesamiento
- 5.4.2 Etapa de Resolución
- 5.4.3 Etapa de Pos-procesamiento

5.1 Introducción

La fluidodinámica computacional identificada usualmente por CFD (su acrónimo derivado del inglés) es una disciplina que utiliza métodos numéricos y algoritmos para resolver problemas que involucran flujos de fluidos. Emplea el equipamiento informático para llevar a cabo la simulación del movimiento de fluidos y, de ser necesario de otros fenómenos asociados, como por ejemplo: transferencia de calor y materia, reacciones químicas, arrastre de sólidos, etc. Aplicando la técnica de CFD se puede construir un modelo computacional que represente al sistema o equipo que se desea estudiar. Se incorporan al prototipo virtual las características físicas y químicas del flujo de fluido en estudio y el *software*¹ genera como respuesta una predicción de la fluidodinámica y demás procesos físicos (y químicos) involucrados. Por lo tanto puede considerarse a la CFD como una sofisticada técnica de diseño y análisis que utiliza el equipamiento computacional para desarrollar los millones de cálculos requeridos para simular la interacción de fluidos con superficies complejas como las utilizadas en ingeniería.

El campo de aplicación de la técnica de CFD como herramienta de modelado está en continua expansión. Se ha mejorado el *hardware*, la velocidad de cálculo, las capacidades de memoria, como así también los *software* empleados como herramientas de resolución. Los programas de CFD existentes en el mercado son lo suficientemente potentes y fáciles de utilizar como para que resulte rentable su empleo a nivel industrial. Sus beneficios provienen fundamentalmente de la reducción del número de ensayos experimentales necesarios y la disminución del tiempo empleado en desarrollo y diseño.

5.1.1 Breve historia de la CFD

Desde los comienzos de la civilización, el hombre ha experimentado cierta fascinación por los fluidos, ya sea que se trate del flujo de agua en un río, del viento y los gases que componen la atmósfera, de la fuerza de las corrientes oceánicas o del flujo de sangre que recorre el cuerpo humano.

Arquímedes (287-212 AC) inició el estudio y formulación de ecuaciones fundamentales de la hidrostática y desarrolló técnicas para efectuar la medición de las

¹ Por razones de claridad no se utilizará la traducción al castellano de términos que se han tomado y adoptado del inglés y cuyo uso específico no se cuestiona en la práctica.

densidades y volúmenes de los objetos. El foco de interés, en aquella época, estaba puesto en cuestiones relacionadas con el agua: acueductos, canales, posibilidades de aprovechamiento de fuentes naturales de agua.

Pero no fue hasta el Renacimiento que estas ideas resurgieron, en el sur de Europa y se comenzó a analizar al mundo natural de los fluidos y flujos nuevamente. Leonardo Da Vinci estudió estos fenómenos en detalle, reconociendo formas y estructuras y plasmándolos pictóricamente tal cual son. Leonardo diseñó y supervisó la construcción de los canales de una amplia zona del centro de Italia. Sus contribuciones a la mecánica de los fluidos fueron presentadas en un tratado (*Del moto e misura dell'acqua*) que abarca el estudio de aguas superficiales, remolinos, caídas de agua, ondas y otros numerosos fenómenos novedosos observados.



Arquímedes



Leonardo Da Vinci



Isaac Newton

Da Vinci fue seguido a fines del siglo XVII por Isaac Newton en Inglaterra. Newton intentó cuantificar y predecir el fenómeno de flujo de fluidos. Sus contribuciones a la mecánica de los fluidos incluyen su segunda ley: $F = m \cdot a$, el concepto de viscosidad Newtoniana, el principio de reciprocidad: la fuerza aplicada sobre un objeto estacionario por un fluido en movimiento es igual al cambio de momento del fluido al deflexionar alrededor del mismo y la relación entre la velocidad de las ondas sobre una superficie líquida y su longitud de onda.

Durante los siglos XVIII y XIX se llevaron a cabo importantes aportes relacionados con la descripción matemática del flujo de fluidos. Daniel Bernoulli (1700-1782) formuló su famosa ecuación y Leonhard Euler (1707-1783) propuso las ecuaciones que llevan su nombre y que describen la conservación de la cantidad de movimiento y materia para un fluido invíscido. Otras dos importantes contribuciones al campo del flujo de fluidos provienen de esta época: fueron realizadas por Claude Louis

Marie Henry Navier (1785-1836) y George Gabriel Stokes (1819-1903) quienes introdujeron el transporte viscoso en las ecuaciones de Euler, dando origen a la hoy trascendente ecuación de Navier-Stokes. Estas ecuaciones diferenciales, propuestas doscientos años atrás, constituyen la sólida base de la Fluidodinámica Computacional moderna.



Daniel Bernoulli



Claude Navier



George Stokes



Ludwig Prandtl

Otros científicos que desarrollaron teorías relacionadas con el flujo de fluidos en el siglo XIX fueron: Jean Le Rond d'Alembert, Siméon-Denis Poisson, Joseph Louis Lagrange, Jean Louis Marie Poiseuille, John William Rayleigh, M. Maurice Couette, Osborne Reynolds y Pierre Simon de Laplace.

Las ecuaciones utilizadas por la CFD incluyen expresiones para la conservación de la masa, momento, energía y especies, y ecuaciones específicas para tratar la turbulencia. Pero estas ecuaciones están acopladas y son de tan difícil resolución que no fue posible resolverlas para problemas reales de flujo en escalas de tiempo razonables hasta el advenimiento de la moderna computadora digital entre los años 60 y 70.

A comienzos del siglo XX se elaboraron numerosas y refinadas teorías sobre la capa límite y turbulencia en flujo de fluidos. Ludwig Prandtl (1875-1953) propuso una teoría de la capa límite, el concepto de longitud característica y el número de Prandtl entre otros. Theodore von Karman (1881-1963) analizó lo que hoy se conoce con el nombre de teoría de von Karman sobre vórtices. Geoffrey I. Taylor (1886-1975) propuso un tratamiento estadístico para la turbulencia y la llamada "microescala de Taylor". Andrey Nikolaevich Kolmogorov (1903-1987) y George Keith Batchelor (1920-2000) realizaron posteriores contribuciones a la teoría necesaria para la interpretación de la turbulencia en el flujo de fluidos.



Lewis Fry Richardson

No existe opinión unánime acerca de quién fue el primero en realizar cálculos de CFD (en el sentido moderno). Lewis Fry Richardson (1881-1953), en Inglaterra, desarrolló el primer sistema numérico de predicción del clima cuando dividió el espacio físico en celdas de una

grilla y utilizó el método de aproximaciones por diferencias finitas de Bjerknes's. Su intento de predecir el clima por un simple período de ocho horas tomó seis semanas de tiempo real y finalizó en un rotundo fracaso. El enorme requerimiento de cálculos de su modelo llevó a Richardson a proponer la solución que él denominó *forecast-factory*. Dicha solución hubiera demandado llenar un vasto estadio con 64.000 personas, cada una equipada con una calculadora mecánica que llevaría a cabo parte del cálculo del flujo. Un líder en el centro, utilizando luces de señalización de colores y comunicaciones telegráficas, coordinaría la operación. Lo que Richardson estaba proponiendo puede ser considerado como un muy rudimentario e incipiente intento de cálculo de CFD.

La primera solución numérica para un flujo circulando alrededor de un cilindro fue desarrollada por Thom en 1933 y reportada en Inglaterra. Kawaguti obtuvo una solución similar en Japón en 1953 utilizando una calculadora mecánica de escritorio y trabajando veinte horas por semana... durante 18 meses!

En la década del 60, la división de teoría de la *National Aeronautics and Space Administration* de Estados Unidos (NASA), contribuyó con numerosos métodos numéricos que aún hoy son utilizados en CFD: *Particle-in-cell*, *Marker and cell*, *Vorticity-Stream function methods*, *Arbitrary Lagrangian-Eulerian methods*, *k-ε turbulence model*.

En la década del 70, el grupo dirigido por D. Brian Spalding, en el Imperial College de Londres, desarrolló el algoritmo SIMPLE, el programa TEACH y, entre otros, la formulación que actualmente se utiliza del modelo de turbulencia k-ε (Spalding y Launder, 1972).

Otro evento clave para el desarrollo de la fluidodinámica computacional se produjo en el año 1980 cuando Suhas V. Patankar publicó "*Numerical Heat Transfer*

and Fluid Flow”, probablemente el libro con más influencia en la Fluidodinámica Computacional y a partir del cual se desarrollaron numerosos programas de CFD.

A comienzos de la década del 80, los *software* comerciales de CFD comenzaron a surgir y ocupar una plaza importante del mercado. Las compañías más grandes alrededor del mundo eligieron esta opción, frente a la posibilidad de continuar desarrollando *software* propios. Los programas comerciales están basados en conjuntos de expresiones matemáticas no-lineales que representan las ecuaciones fundamentales de flujo de fluidos y ecuaciones de transporte de energía y materia. Estos sistemas de ecuaciones se resuelven iterativamente utilizando complejos algoritmos incorporados al programa de CFD. En forma simplificada puede considerarse que dichos programas le permiten al usuario modelar computacionalmente cualquier campo de flujo siempre y cuando la geometría del objeto a modelar sea conocida, se haya caracterizado al problema desde el punto de vista físico y químico y se puedan indicar las condiciones iniciales o de borde del flujo. Las salidas de un *software* de CFD pueden ser presentadas como gráficos, por ejemplo de vectores de velocidad, contornos de presión, diagramas X-Y o como datos numéricos.

A la fluidodinámica computacional se la reconoce actualmente como parte del espectro de herramientas perteneciente a la “Ingeniería asistida por computadoras” (*computer-aided engineering*) y su capacidad para simular los fenómenos relacionados con flujos de fluidos les permiten a los Ingenieros de diseño e investigadores disponer de una herramienta que en muchos casos reemplaza, y en otros complementa, la usualmente costosa instancia experimental.

5.1.2 Aplicaciones de la CFD

Como resultado de la aplicación de esta técnica se obtiene información sobre el movimiento y la presión del fluido del sistema simulado. Adicionalmente puede obtenerse información sobre la transferencia de materia y energía, las variaciones de las propiedades, las fuerzas que ejerce el fluido sobre los sólidos adyacentes, etc.

Algunos de los campos de aplicación actual de la CFD son:

- Aerodinámica de vehículos terrestres, aviones, entrada y salida de la atmósfera de vehículos espaciales.

- Diseño de motores de combustión, calderas y turbomáquinas.
- Refrigeración de equipos eléctricos y electrónicos.
- Equipos que incorporan procesos físicos y químicos: reactores, sedimentadores, mezcladores, granuladores, intercambiadores de calor, eyectores, etc.
- Desarrollo de sistemas de ventilación, calefacción y aire acondicionado.
- Predicción meteorológica.
- Influencia del viento sobre el comportamiento de edificios, puentes, etc.
- Dispersión de contaminantes en la atmósfera, ríos y mares.
- Biomedicina: respiración y circulación de la sangre.
- Hidrología y oceanografía: corrientes en ríos, estuarios y océanos.
- Hidrodinámica de buques.

En general la CFD es de gran utilidad en aquellos casos en los que resulta necesario analizar detalladamente la dinámica de fluidos para obtener los resultados buscados. Sin embargo es importante señalar que, incluso actualmente, la complejidad de los cálculos y las limitaciones de los equipos de computación más potentes, hacen que sea absurdo intentar utilizar las técnicas de CFD en los casos en los que otras técnicas han logrado simplificaciones adecuadas, como el caso del cálculo de pérdidas de carga en tuberías y canales, golpe de ariete, diseño de sistemas neumáticos, etc. También la CFD resulta inaplicable para procesos muy extensos, como puede ser la simulación global de una planta industrial, un reactor químico, una columna de destilación o incluso un motor de explosión o una turbina de gas en su conjunto (sí se pueden estudiar por partes), debido a los altos requerimientos computacionales que demandarían estas simulaciones.

Pese a la profusa información que permanentemente se difunde (sobre todo en sitios específicos de la web) con respecto al potencial y capacidad de la CFD en la simulación de estos sistemas, cuando se construyen simuladores de unidades tales como reactores químicos o equipos de operaciones unitarias, la CFD misma se aplica sobre la base de modelos fluidodinámicos y no sobre la resolución de las ecuaciones microscópicas elementales. Como se ha dicho, la resolución de las ecuaciones de cambio elementales en todos los puntos del dominio de un equipo completo es, por el momento, impracticable.

5.1.3 Algunas ventajas e inconvenientes de la CFD

En la actualidad, si bien los ensayos experimentales siguen siendo necesarios, los continuos avances en el equipamiento informático y algoritmos a aplicar, han permitido una reducción importante en el número de ensayos requeridos. Por ejemplo, el diseño típico de un modelo de ala de avión, se lleva a cabo ahora con 3 a 4 ensayos en túnel de viento, en lugar de los 10 ó 15 que eran necesarios anteriormente.

Las ventajas que proporciona el análisis por CFD se pueden resumir en:

- Reducción sustancial de tiempos y costos en los nuevos diseños
- Posibilidad de analizar sistemas o condiciones muy difíciles de simular experimentalmente: velocidades muy elevadas, temperaturas muy altas o bajas, movimientos relativos, etc.
- Capacidad de estudiar sistemas bajo condiciones peligrosas o más allá de sus condiciones límite de funcionamiento, por ejemplo accidentes.
- Nivel de detalle prácticamente ilimitado. Los métodos experimentales son tanto más caros cuanto mayor es el número de puntos de medida, mientras que los programas de CFD pueden generar un gran volumen de resultados sin costo añadido y resulta muy sencillo realizar estudios paramétricos.

No obstante, la aplicación de las técnicas de CFD tiene asociados costos significativos. En primer lugar, se requieren computadoras de gran capacidad de cálculo y un *software* cuyo precio no es accesible al gran público. En segundo lugar, se necesita personal calificado que esté en condiciones de hacer funcionar los programas y analizar adecuadamente los resultados.

Los mayores inconvenientes de la CFD consisten en que no siempre es posible llegar a obtener resultados suficientemente precisos y la facilidad con que, en ocasiones, se pueden cometer errores groseros. Esto se debe a:

- La necesidad de simplificar el fenómeno a estudiar para que el *hardware* y el *software* sean capaces de tratarlo. El resultado será tanto más preciso cuando más adecuadas hayan sido las hipótesis y simplificaciones realizadas.
- Las limitaciones de los modelos existentes para tratar la turbulencia, el flujo bifásico, la combustión, etc.

5.1.4 La CFD en la Ingeniería Química

Con el desarrollo de equipos informáticos de alta performance y los avances en técnicas numéricas y desarrollos de nuevos algoritmos, los ingenieros químicos comenzaron a explotar el potencial de las herramientas de CFD.

Numerosos programas permiten trabajar en un amplio rango de aplicaciones de interés en la Ingeniería Química y que involucran operaciones físicas del tipo de procesos de mezclado, transferencia de calor u operaciones de separación.

Las primeras aplicaciones de CFD desarrolladas para una utilización específica de la Ingeniería Química fueron sobre mezclado de fluidos. Actualmente los *software* de CFD son capaces de predecir cuantitativamente el comportamiento de flujos de fluidos laminares y turbulentos alrededor de cuerpos sumergidos, las pérdidas de carga debidas a cambios de dirección, la presencia de puntos calientes en una geometría con transferencia de calor, también resultan útiles para analizar la performance de las válvulas y medidores de caudal dentro de la configuración de una instalación específica y se han hecho importantes avances en el modelado de equipos rotativos como bombas centrífugas y turbinas.

En el campo del diseño de equipos, una de las utilidades que los Ingenieros Químicos dan a los programas de CFD es la posibilidad de desarrollar modelos que les permitan predecir la performance de nuevos diseños a partir del conocimiento de la geometría y los parámetros de operación. Esta capacidad permite el análisis de diseños que en otras ocasiones hubiesen quedado relegados por falta de recursos para los ensayos experimentales requeridos.

Finalmente, varios paquetes comerciales han incorporado las reacciones químicas en sus programas, permitiendo un rápido progreso del uso de la CFD dentro del campo de la Ingeniería de las Reacciones Químicas (Ranade, 2002).

5.1.5 Aplicaciones de la CFD a reactores de lecho fijo

En el campo del modelado de lechos fijos existen dos enfoques diferentes en lo referente a la simulación por medio de técnicas de CFD. En el primero de ellos el lecho es representado por un medio poroso efectivo, con parámetros agrupados (*lumped*) de dispersión y transporte de calor. Las reacciones que tienen lugar en las partículas porosas de catalizador son representadas por términos fuentes o sumideros en las

ecuaciones de balance de energía (Ranade, 2002). El campo de velocidad puede ser obtenido a través de una ecuación de balance de momento modificada (Bey y Eigenberger, 1997). Este enfoque suministra un campo de velocidad promedio, presentado generalmente en función de la variación radial de la componente axial de la velocidad, lo que representa una mejora frente al clásico enfoque de flujo pistón (flujo unidireccional constante). Una de las desventajas de esta modalidad es el agrupamiento de los procesos de transporte que no permite analizar la base física del modelo y la necesidad de introducir una viscosidad efectiva para el lecho con el objeto de lograr que los perfiles de velocidad calculado y experimental concuerden.

En el segundo enfoque no se realiza la simplificación de la geometría del lecho fijo reemplazándolo por un medio poroso efectivo como en el caso precedente y en consecuencia, la generación de la grilla se convierte en un paso considerablemente más complejo. Se utilizan las ecuaciones de balance en su forma más simple pero el aplicarlas sobre una grilla de complejidad superior conduce a un significativo incremento de la demanda computacional. Debido a estos requerimientos este enfoque puede ser aplicado sólo a pequeñas regiones del lecho y en muchas ocasiones a fin de reducir la geometría del sistema a simular, tanto como lo permita la identidad del sistema, se aplican fronteras periódicas como condiciones de borde. Posteriormente esta modalidad se explicará en detalle.

Este último enfoque, por lo tanto, es utilizado principalmente como herramienta de estudio y análisis. A partir de estas simulaciones es posible estudiar los patrones de flujo a través de la estructura de un lecho de partículas y comprender su influencia sobre el transporte de materia y energía. Los resultados de estas simulaciones “rigurosas” pueden ser luego utilizados para realizar simplificaciones físicamente justificadas que puedan ser aplicadas en modelos simples que permitan simular al lecho, e incorporando las reacciones químicas al reactor, en su conjunto.

Los antecedentes más importantes sobre simulación de partículas discretas por la técnica de CFD fueron reseñados por Nijemeisland y Dixon (2004). Uno de los primeros trabajos mencionados corresponde a Sorensen y Stewart (1974), quienes estudiaron la transferencia de calor partícula-fluido bajo la condición de flujo reptante en un arreglo cúbico tridimensional de partículas esféricas. Dalman y colab. (1986), investigaron el comportamiento del flujo en un plano axisimétrico radial con dos esferas, obteniendo el primer estudio detallado del patrón de flujo en lechos fijos. Este

estudio demostró la presencia de remolinos entre las esferas que generan regiones de baja transferencia de calor. Lloyd y Boehm (1994), realizaron un estudio muy similar en dos dimensiones (2D) con 8 partículas alineadas. En este trabajo se estudió la influencia de la separación de las partículas sobre los coeficientes de arrastre. También se demostró que el calor transferido desde las esferas decrecía al disminuir la separación entre partículas.

Con las mejoras introducidas a los desarrollos de programas de CFD comerciales y conjuntamente con el incremento de la capacidad del *hardware*, las posibilidades de simular sistemas más complejos se incrementaron sensiblemente. Logtenberg y Dixon (1998) llevaron a cabo una de las primeras simulaciones en tres dimensiones (3D) consistente en un lecho conformado por dos estratos transversales de cuatro partículas esféricas cada uno, con una relación de aspecto $N=2,43$. Posteriormente, desarrollaron un modelo con diez partículas y $N=2,68$, que incorporaba la existencia de puntos de contacto entre las partículas y entre partículas y pared (Logtenberg y colab., 1999). Estos trabajos estaban enfocados en la obtención del número de Nusselt de pared (Nu_w). Según resultados reportados, obtuvieron una buena concordancia con las determinaciones experimentales. Nijemeisland y Dixon (2001), utilizando el paquete comercial *FLUENT*, simularon un lecho conformado por 44 esferas que fue utilizado para validar los resultados de la aplicación de técnica de CFD a lechos rellenos, por medio de la comparación de los perfiles de temperatura radial arrojados por la simulación, con los medidos en un equipo experimental con la misma disposición geométrica de partículas. Dicho trabajo muestra una buena concordancia entre los datos experimentales y los obtenidos por CFD. Más recientemente, Nijemeisland y Dixon (2004), realizaron un estudio de la influencia de los patrones locales de flujo sobre el transporte térmico, en las zonas cercanas a la pared del tubo de lechos fijos de partículas esféricas con $N=4$. En el estudio los autores concluyen que los patrones de las velocidades de transferencia de calor locales no se correlacionan estadísticamente con los patrones de flujo locales. En las siguientes contribuciones Nijemeisland y colab. (2004) y Dixon y colab. (2005) aplicaron la técnica de CFD en estudios de transferencia de calor en lechos fijos de baja relación de aspecto con el objeto de evaluar diversos diseños de catalizadores. También analizaron la inclusión del fenómeno de conducción del calor en la pared del tubo, para el caso particular del

reformado de gas natural con vapor, con el objeto de predecir la distribución de temperaturas en la pared cuya influencia sobre la vida útil del tubo es significativa.

Dixon y colab. (2008) continuaron con el estudio de lechos fijos enfocándose en el análisis de la influencia de la geometría de las partículas de catalizador sobre la temperatura de la pared del tubo. El estudio fue realizado sin considerar las reacciones químicas con el objeto de analizar el fenómeno de transferencia de calor en forma aislada. Trabajaron sobre partículas cilíndricas con uno, tres y cuatro orificios de tamaños diversos. En los lechos conformados por partículas de mayor porosidad (orificios múltiples) los autores notaron, al trabajar bajo la condición de pérdida de carga constante, una reducción sustancial de la temperatura del lecho y de la pared del tubo, lo que prolonga la vida útil del tubo. Los autores señalan que el efecto del tamaño de los orificios, analizado para los casos de uno y cuatro orificios, fue despreciable en los casos investigados en esta contribución.

Calis y colab. (2001) utilizaron el *software* comercial CFX-5.3 para llevar a cabo la simulación del comportamiento de lechos fijos. Modelaron diversos tipos de lechos estructurados de partículas esféricas, con relaciones de aspecto comprendidas entre 1 y 2. Los autores reportan una buena concordancia entre los perfiles de velocidad calculados por CFD y los medidos con LDA (anemómetro de efecto Doppler). Adicionalmente, con el objeto de validar los resultados de pérdida de carga obtenidos a partir de las simulaciones, contrastaron dichos valores con datos experimentales propios. Los autores concluyen que el *software* de CFD utilizado es una herramienta válida para el cálculo de la caída de presión en lechos fijos de baja relación de aspecto, presentando un error promedio con respecto a las mediciones realizadas del 10%, lo que consideran aceptable para aplicaciones de diseño de equipos. Las simulaciones con flujo turbulento se efectuaron utilizando los modelos *Standard k-ε* y *Reynolds-Stress Model* (RSM). Los resultados obtenidos con ambos modelos de turbulencia fueron muy similares.

Posteriormente, Romkers y colab. (2003) analizaron la capacidad del programa comercial CFX-5.3 para predecir la velocidad de transferencia de calor de las partículas de catalizador de un lecho fijo hacia el fluido circulante. Trabajaron con lechos estructurados conformados por partículas esféricas, con relaciones de aspecto bajas ($1 \leq N \leq 2$). Los autores señalan que fue factible realizar la evaluación del número de Nusselt a partir de la información generada por CFD con un error promedio del 15%

con respecto a valores experimentales. Se propone en la publicación una correlación para el cálculo del número de Nusselt en función de los números adimensionales: Reynolds y Prandl.

Guardo y colab. (2005) utilizaron el paquete FLUENT para efectuar una comparación de la performance de la estimación de la pérdida de carga y de los parámetros de transferencia de calor, aplicando cinco diferentes modelos de turbulencia *Reynolds-averaged Navier-Stokes* (RANS) a un modelo de lecho fijo, en 3D, compuesto por 44 partículas esféricas. En esta contribución los autores señalan que, de los modelos de turbulencia analizados, *Spalart-Allmaras* es el que presenta la mayor concordancia con los valores de referencia y recomiendan su aplicación en simulaciones con este tipo de flujo. Coussirat y colab (2007), continuaron dicho estudio, incorporando nuevas simulaciones basadas en los modelos de turbulencia *Spalart-Allmaras*, *Standard k-e* y *Reynolds stress model* (RSM). Con el objeto de evaluar la performance de estos modelos calcularon el número de Nusselt (coeficiente de transferencia de calor partícula-fluido) y la caída de presión a partir de la información generada por CFD y compararon estos valores con los obtenidos de correlaciones existentes en la bibliografía. Los autores observaron en los resultados una leve mejora al utilizar el modelo RSM. Sin embargo señalan que no se justifica su aplicación posterior en la simulación de lechos fijos, como consecuencia de la demanda de esfuerzo computacional considerablemente mayor que el modelo introduce.

5.2 Tratamiento del flujo de fluidos y modelos utilizados por la CFD

Para poder desarrollar las simulaciones que se presentan en este trabajo se utilizó la licencia académica del *software* comercial de CFD, *FLUENT 6.3.26* y su generador de mallas *GAMBIT 2.4.6*, ambos provistos por la firma ANSYS INC.

Este programa fue seleccionado en base a las experiencias previas de Nijemeisland y Dixon (2001), Dixon y colab. (2004) y Guardo y colab. (2005) quienes para llevar a cabo el estudio fluidodinámico y de transferencia de calor de lechos fijos aplicaron la técnica de fluidodinámica computacional a través de las versiones académicas del *software FLUENT*.

El análisis riguroso de los procesos de flujo que realiza el programa *FLUENT* se basa en la aplicación de las leyes de conservación de la materia, cantidad de

movimiento y energía. En las siguientes secciones se describen las ecuaciones básicas de conservación que utiliza el programa, derivadas para sistemas de flujo que involucran una única fase.

5.2.1 Ecuaciones de conservación a resolver por la CFD

Ecuación de conservación de la materia

La ecuación de conservación de la materia, o ecuación de continuidad, puede ser escrita de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g u) = S_m \quad (5.1)$$

donde ρ es la densidad del fluido y u el vector velocidad. La ecuación 5.1 es válida tanto para flujos compresibles como incompresibles. El término S_m representa la masa incorporada a la fase continua proveniente de una segunda fase dispersa (ej. vaporización de gotas de líquido) o alguna otra fuente definida por el usuario. En los desarrollos que se presentarán en este trabajo este término será igual a cero.

Ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento

La ecuación general de conservación de la cantidad de movimiento para un marco de referencia inercial (sin aceleración) está dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g u) = -[\nabla \cdot \rho_g u u] - \nabla p + [\nabla \cdot \tau] + \rho_g g + F \quad (5.2)$$

donde p es la presión estática, τ es el tensor esfuerzo de corte y, por último, los términos (ρg) y F representan la fuerza gravitatoria que actúa sobre el cuerpo y las fuerzas externas aplicadas al mismo (ej.: fuerzas de interacción entre fases), respectivamente.

El tensor esfuerzo de corte, τ , puede escribirse de la siguiente forma:

$$\tau = \mu \left[(\nabla u + \nabla u^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot u I \right] \quad (5.3)$$

donde μ es la viscosidad molecular del fluido, I es el tensor unitario y el segundo término del lado derecho de la ecuación representa los efectos de dilatación

volumétrica.

Para un fluido newtoniano con densidad y viscosidad constantes la ec. (5.2) puede simplificarse incorporando la ecuación de continuidad, $(\nabla \cdot u) = 0$, para obtener:

$$\rho_g \frac{\partial u}{\partial t} = -\rho_g [\nabla \cdot uu] - \nabla p + \mu \nabla^2 u + \rho_g g \quad (5.4)$$

La ecuación (5.4) es la conocida ecuación de Navier-Stokes, obtenida inicialmente por Navier en Francia, en 1822 (Bird y colab. 1998).

Ecuación de balance de energía térmica

La expresión general del balance de energía que emplea el programa *FLUENT* (Fluent User's Guide, 2006) está dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g E) + \nabla \cdot (u(\rho_g E + p)) = \nabla \cdot \left(k_e \nabla T - \sum_j h_j J_j + (\tau_e \cdot u) \right) + S_h \quad (5.5)$$

donde k_e es la conductividad efectiva ($k + k_t$, donde k_t es la conductividad térmica turbulenta definida según el modelo de turbulencia que se esté utilizando) y J_j es el flujo difusivo de las especies j . Los tres primeros términos del lado derecho de la ecuación (5.5) representan la energía transferida por conducción, difusión de especies y disipación viscosa, respectivamente. S_h incluye el calor de reacción y cualquier otra fuente de calor volumétrica existente. En la ecuación (5.5),

$$E = h - \frac{p}{\rho_g} + \frac{u^2}{2} \quad (5.6)$$

donde la entalpía sensible, h , es definida para fluidos incompresibles como:

$$h = \sum_j x_j h_j + \frac{p}{\rho_g} \quad (5.7)$$

En la ecuación (5.7) x_j es la fracción másica de las especies j , y $h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j} dT$, donde T_{ref} es 298.15 K.

5.2.2 Tratamiento del flujo turbulento

Un flujo de fluido se denomina turbulento cuando es irregular, rotacional, intermitente y altamente desordenado. El flujo turbulento es inherentemente no-estacionario y tridimensional. La visualización de flujos turbulentos revela la presencia de estructuras rotacionales de flujo (denominadas torbellinos turbulentos), con un amplio rango de escalas de longitud. Los torbellinos mismos así como las interacciones entre torbellinos de diferentes escalas conducen a un efectivo mezclado entre moléculas del fluido que originalmente se encontraban separadas por una gran distancia. Como consecuencia, en el flujo turbulento, las transferencias de calor, materia y momento se tornan altamente efectivas.

En el flujo turbulento se observa la presencia de campos de velocidad fluctuantes y dichas fluctuaciones se trasladan afectando también a las restantes variables de transporte. La simulación numérica directa (DNS, por sus siglas en inglés) realizada resolviendo las ecuaciones de conservación descritas en la sección 5.2.1 demandaría un tiempo de cómputo prohibitivo, en virtud de la frecuencia de estas fluctuaciones, que suelen ser de escala pequeña y alta frecuencia. Las diferencias en tamaño y en escala de tiempo de los torbellinos presentes en el flujo turbulento pueden ser de varios órdenes de magnitud, por esta razón las soluciones por DNS demandan mallas tridimensionales muy finas y tiempos de cómputo muy prolongados. Con las computadoras actuales no es factible aún aplicar el método DNS a la resolución de problemas prácticos de interés en ingeniería. Sin embargo, la DNS puede suministrar información muy valiosa sobre la interacción entre torbellinos de distinta escala. También puede ser utilizada para validar otros modelos de turbulencia más simples.

En las últimas décadas, para salvar este inconveniente se han desarrollado una gran cantidad de modelos que permiten a la CFD tratar los flujos turbulentos. Los enfoques de estos modelos pueden clasificarse en dos grupos que se describen en los siguientes párrafos.

El primer enfoque denominado *Simulación de remolinos grandes* (LES, por sus siglas en inglés), se basa en la hipótesis de que las diversas escalas de torbellinos pueden ser clasificadas en dos grupos: de escala grande y de escala pequeña (inferior al tamaño de la grilla utilizada). La técnica LES resuelve los torbellinos de escala grande rigurosamente mientras que modela los de escala pequeña. La suposición básica que

realiza esta técnica es que los remolinos turbulentos más pequeños son isotrópicos, es decir, que considera que son independientes de la orientación del sistema de coordenadas y que siempre se comportan de manera estadísticamente similar y predecible, cualquiera sea el campo de flujo turbulento. En comparación con la DNS, el método LES demanda una cantidad de recursos computacionales considerablemente menor. Pese a esto, la técnica LES resulta es aún excesivamente exigente desde dicho punto de vista para la mayor parte de los requerimientos de simulación de la ingeniería química.

El segundo enfoque consiste en modelar todos los torbellinos turbulentos no estacionarios con algún tipo de modelo de turbulencia y se denomina *Reynolds-averaged Navier-Stokes Equations* (RANS). Se basa en considerar que el valor instantáneo de cada variable puede ser descompuesto en un valor medio, obtenido promediando sobre un intervalo de tiempo apropiado, y una componente fluctuante:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (5.8)$$

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi dt \quad (5.9)$$

donde $\bar{\phi}$ y ϕ' denotan promedio temporal y componente fluctuante respectivamente.

Las componentes de la velocidad fluctúan, con lo que pueden descomponerse en la suma de velocidad media, \bar{u}_i , y velocidad fluctuante, u'_i , como puede observarse en la Figura 5.1:

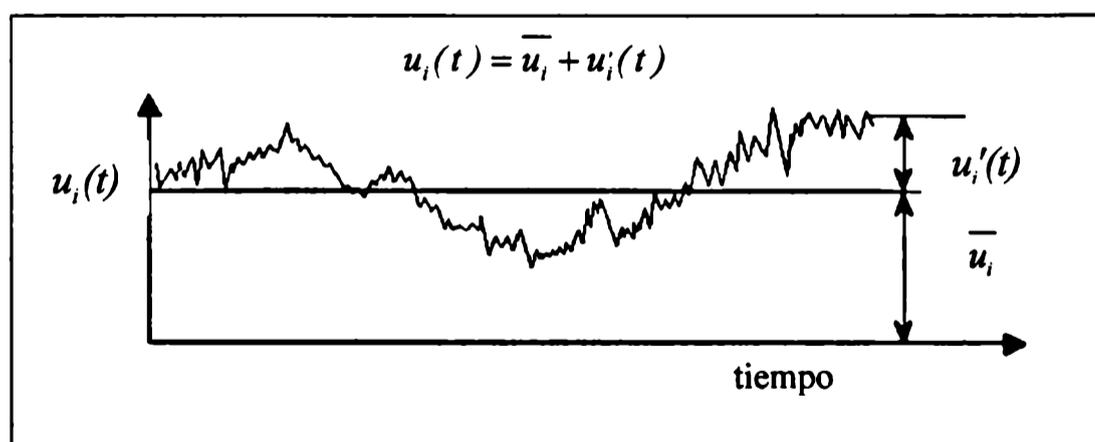


Figura 5.1. Componentes de la velocidad en un flujo turbulento y fluctuaciones temporales (Fluent, 2006)

Sustituyendo las variables de flujo en las ecuaciones de continuidad y conservación de la cantidad de movimiento, por expresiones del tipo de la ecuación (5.8) y tomando la media temporal, se obtienen las ecuaciones de tiempo ajustado de

continuidad y cantidad de movimiento también denominadas ecuaciones de *Reynolds-averaged Navier-Stokes* (RANS):

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \bar{\mathbf{u}}) = 0 \quad (5.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \bar{\mathbf{u}}) = - \left[\nabla \cdot \rho_g \overline{\mathbf{u}\mathbf{u}} + \rho_g \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} \right] - \nabla \bar{p} + \left[\nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} \right] + \rho_g \mathbf{g} + \bar{\mathbf{F}} \quad (5.11)$$

El término adicional presente en la ecuación (5.11), $\rho_g \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}$, representa el efecto de la turbulencia y se denomina *densidad de flujo turbulento de cantidad de movimiento* o *tensor esfuerzos de Reynolds*. Estos esfuerzos deben ser modelados a fin de poder resolver la ec. (5.11). Un método muy difundido consiste en emplear la hipótesis de Boussinesq (Fluent User's Guide, 2006) para relacionar los esfuerzos de Reynolds con los gradientes de velocidad media:

$$-\rho_g \overline{u'_i u'_i} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho_g k + \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \quad (5.12)$$

La hipótesis de Boussinesq es utilizada por el modelo de turbulencia de Spalart-Allmaras, por los modelos $k - \varepsilon$ y por los modelos $k - \omega$. La ventaja de este enfoque es que requiere un esfuerzo computacional relativamente bajo, asociado con el cálculo de la viscosidad turbulenta, μ_t . En el caso del modelo Spalart-Allmaras sólo se resuelve una ecuación de transporte adicional (que permite calcular μ_t). En los casos de los modelos $k - \varepsilon$ y $k - \omega$ se resuelven dos ecuaciones adicionales (para el cálculo de la energía cinética turbulenta, k , y la velocidad de disipación turbulenta, ε , o la velocidad de disipación específica, ω) y μ_t es calculada como una función de k y ε ó ω . La desventaja de la hipótesis de Boussinesq es que asume que μ_t es un escalar isotrópico, lo cual no es exactamente cierto.

Un tratamiento alternativo al empleo de la hipótesis de Boussinesq es el denominado *Reynolds Stress Transport Model* (RSM) que consiste en resolver las ecuaciones de transporte para cada uno de los términos del tensor simétrico esfuerzos de Reynolds. También se requiere una ecuación adicional (generalmente para el cálculo de ε). Esto significa que se emplearán siete ecuaciones de transporte adicionales para la resolución de un problema en 3D.

En muchos casos, los modelos basados en la hipótesis de Boussinesq alcanzan un buen desempeño y no se justifica el costo computacional adicional del modelo RSM. Sin embargo el modelo RSM es claramente superior en situaciones en que la anisotropía de la turbulencia tiene un efecto dominante sobre el flujo.

En la Figura 5.2 se muestra un esquema con los modelos de turbulencia mencionados, en el cual se diferencian 3 versiones del modelo $k-\epsilon$, agrupados en orden descendente de tiempo de cómputo requerido para su aplicación y en la Tabla 5.1 se presenta un cuadro comparativo de las características y aplicaciones de los modelos RANS.

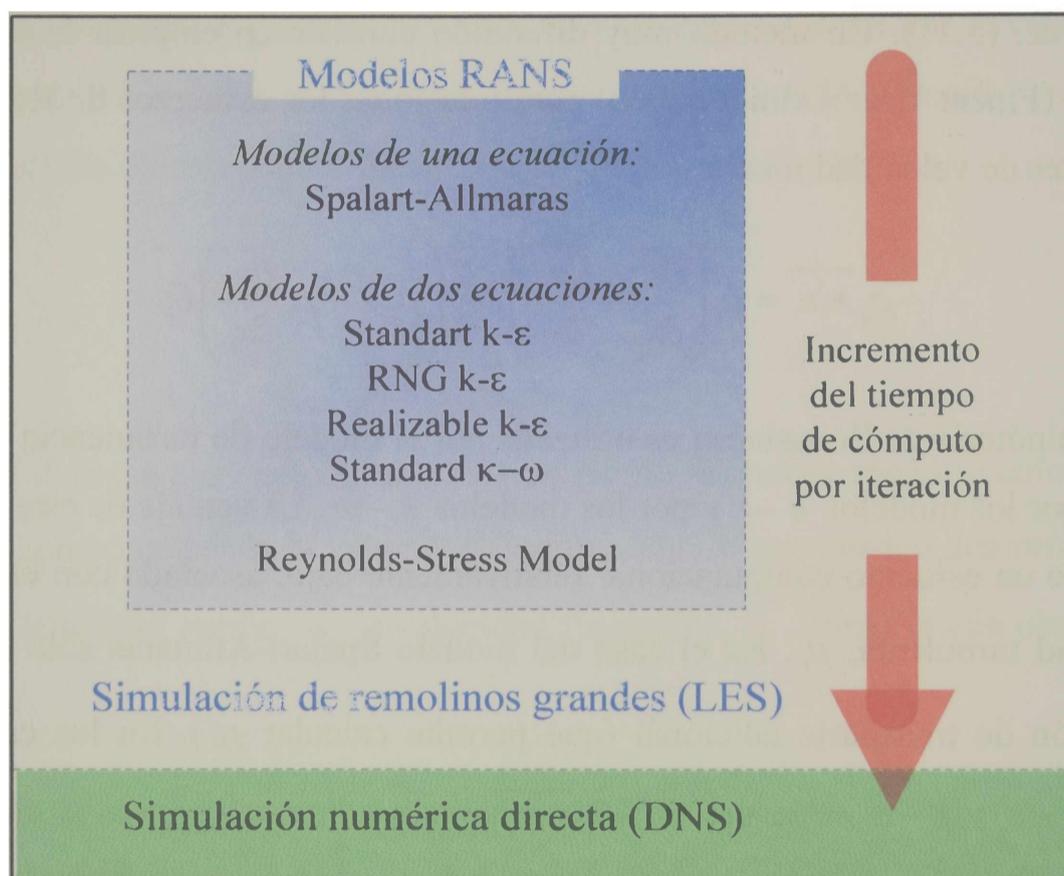


Figura 5.2. Modelos de turbulencia

La elección del modelo de turbulencia dependerá de las consideraciones que se realicen, referidas fundamentalmente a las condiciones físicas del flujo de fluido, la capacidad de cálculo computacional y el tiempo disponible para realizar la simulación.

La selección del modelo de turbulencia utilizado en este trabajo se detalla en la sección 6.4 del capítulo VI.

Modelo	Características y Aplicaciones
Spalart-Allmaras	Económico y preciso para flujos limitados por paredes y flujos con leve separación de capa límite y recirculación. Relativamente nuevo, desarrollado originalmente para aplicaciones aerodinámicas y de turbomáquinas.
Estándar k-ε	Robusto y razonablemente preciso para un amplio rango de Re turbulentos. Muy difundido en simulaciones de aplicaciones industriales de flujo y transferencia de calor. Desempeño pobre para flujos complejos que involucran gradientes de presión severos y fuertes curvaturas en las líneas de flujo.
RNG k-ε	Adecuado para flujos complejos, con presencia de vórtices y de flujos secundarios (Ej. de aplicaciones: separación de capa límite, flujo en difusores, ventilación, etc.)
Realizable k-ε	Ofrece los mismos beneficios y tiene aplicaciones similares al modelo RNG k-ε. En ocasiones es más preciso y presenta mejor convergencia que dicho modelo.
Estándar k-ω	Respuesta apropiada para flujos rodeados por paredes y bajos números de Re. Adecuados para flujos complejos, bajo gradientes adversos de presión (Ej. turbomáquinas)
Reynolds Stress	Adecuado para flujos complejos en 3D, con líneas de corriente con fuertes curvaturas y rotaciones (Ej. ductos curvos, ciclones, flujos rotacionales, etc.)

Tabla 5.1. Comportamiento y utilización de los modelos de turbulencia RANS

5.2.2.1 Tratamiento de la región cercana a la pared en flujos turbulentos

Los flujos turbulentos se ven perturbados significativamente por la presencia de paredes. Los perfiles de velocidad son afectados por la condición de no-deslizamiento que debe satisfacerse sobre la pared, sin embargo, la presencia de paredes ejerce una influencia no trivial sobre la turbulencia. En la zona muy cercana a la pared el amortiguamiento viscoso reduce las fluctuaciones de la velocidad tangencial, mientras que el bloqueo cinemático reduce las fluctuaciones normales. Hacia la parte externa de la región cercana a la pared, sin embargo, la turbulencia se incrementa rápidamente por la producción de energía cinética turbulenta debida a los elevados gradientes de la velocidad media (Fluent User's Guide, 2006).

El modelado de la región cercana a la pared impacta significativamente en la exactitud de las soluciones numéricas, ya que las paredes son la causa principal de generación de vórtices y turbulencia. En esta zona es donde las variables del flujo de fluido presentan elevados gradientes y donde el transporte de cantidad de movimiento se produce con mayor intensidad. Por lo tanto, con una precisa representación del flujo en la región cercana a la pared se tienen buenas posibilidades de alcanzar predicciones

exitosas de flujos turbulentos limitados por paredes.

Los modelos $k-\varepsilon$, RSM y LES son válidos, en principio, para flujos turbulentos distanciados de las paredes. Cuando se trabaja en la región cercana a la pared es necesario tener en cuenta una serie de consideraciones, de manera tal de lograr que el modelo se pueda aplicar. Los modelos Spalart-Allmaras y $k-\omega$ fueron diseñados para ser aplicados en toda la capa límite, siempre que la malla sea lo suficientemente refinada en la región cercana a la pared.

Numerosos experimentos han demostrado que la región cercana a la pared puede ser subdividida en tres capas (Ranade, 2002). En la capa interna, denominada *subcapa viscosa*, el flujo es prácticamente laminar y la viscosidad molecular juega un rol dominante en la transferencia de momento, calor o materia. Como puede observarse en la Figura 5.3 la velocidad media adimensional, \bar{u}_i/u_τ , presenta en esta región un perfil lineal.

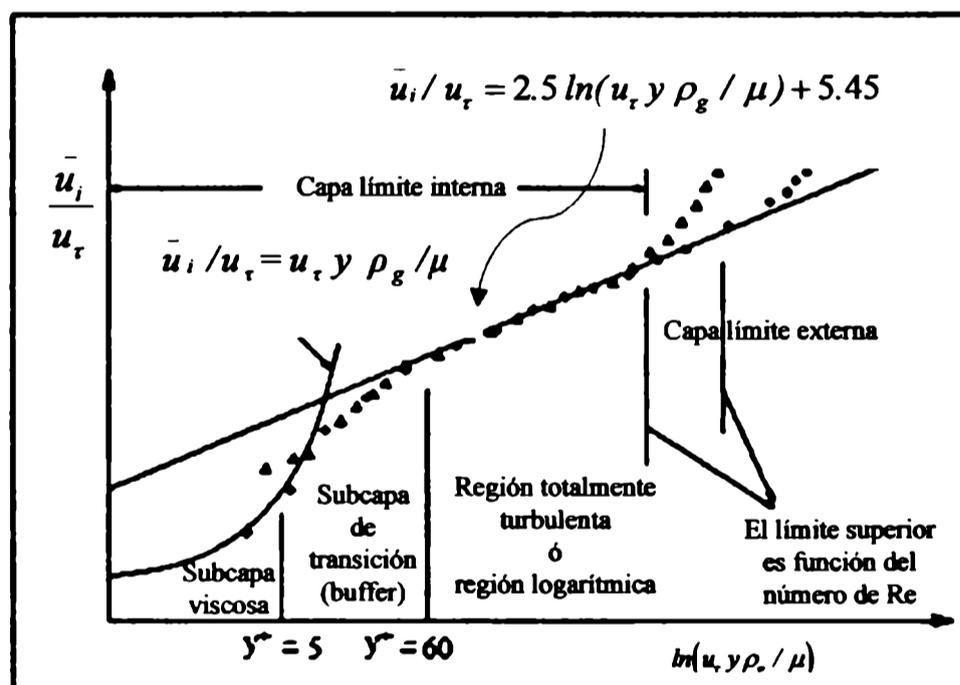


Figura 5.3. Subcapas presentes en la región cercana a la pared (Fluent, 2006)

En la capa externa, denominada *subcapa completamente turbulenta*, la turbulencia juega el rol principal. A esta zona también se la denomina región logarítmica. Finalmente, existe una *subcapa intermedia* entre la *subcapa viscosa* y la *subcapa turbulenta*, en donde los efectos de la viscosidad molecular y la turbulencia, poseen una relevancia semejante. En la Figura 5.3 se ilustran las subdivisiones presentes

en la región cercana a la pared en un gráfico semi-logarítmico de la distribución de la velocidad media adimensional, donde u_τ es la *velocidad característica sobre la pared*,

definida como: $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho_g}$ e $y^+ = \frac{\rho_g u_\tau y}{\mu}$ es la distancia adimensional normal a la pared, donde y es la distancia normal a la pared.

Tradicionalmente, se utilizan dos enfoques para modelar la región cercana a la pared. En uno de ellos, la región interna (*subcapa viscosa y subcapa intermedia*) no se resuelve. Se emplean formulas semi-empíricas denominadas *funciones de pared* (“*wall function*”), que son utilizadas para vincular la región afectada por la viscosidad con la pared con la región de flujo totalmente turbulento. La utilización de las *funciones de pared* evita la necesidad de modificar los modelos de turbulencia para considerar los efectos de la presencia de una pared.

En el segundo enfoque, denominado *modelo de las cercanías de la pared* (“*near-wall model*”), los modelos de turbulencia son modificados de manera tal que, a partir de una malla suficientemente fina, pueda resolverse la región cercana a la pared incluyendo la *subcapa viscosa*.

Estos dos enfoques son esquematizados en la Figura 5.4 donde también se resumen sus principales características y campo de aplicación.

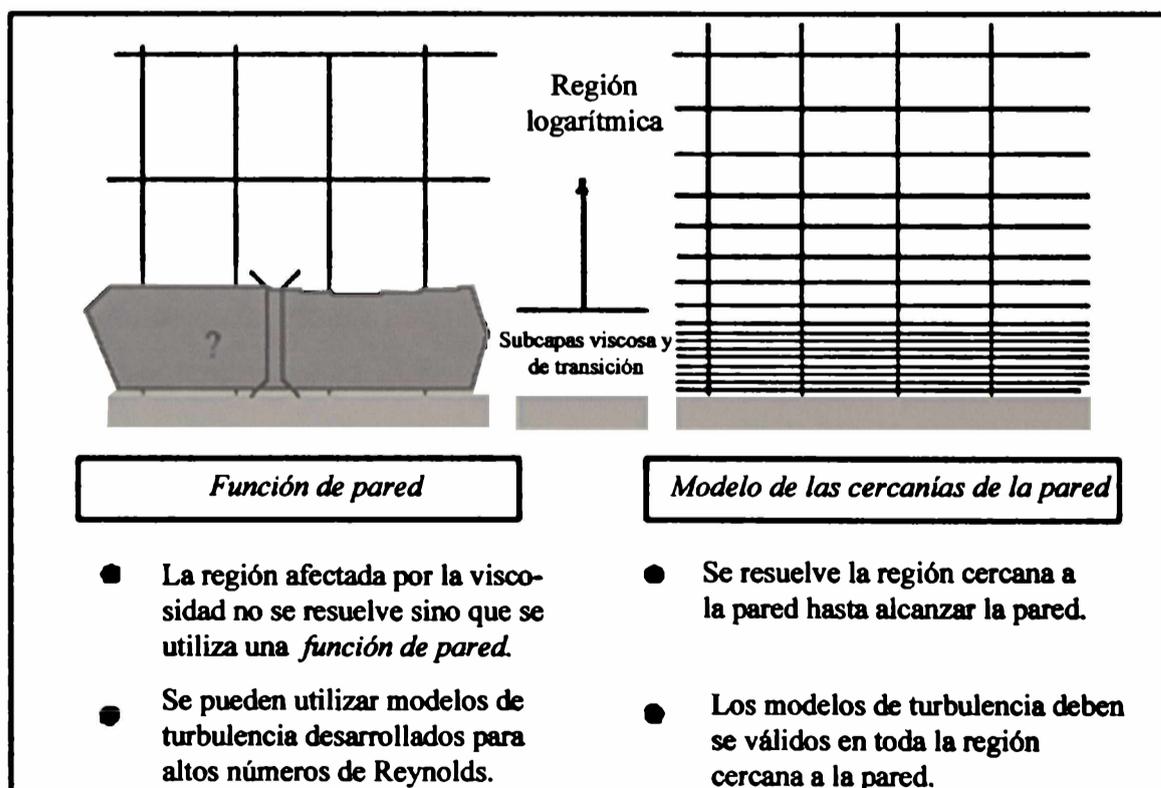


Figura 5.4. Tratamiento de la zona cercana a la pared (Fluent, 2006)

En la mayoría de los flujos con elevados números de Reynolds, las funciones de pared, aproximan correctamente las condiciones de flujo en la región cercana a la pared. La aplicación de las funciones de pared está muy difundida debido a las soluciones rápidas, consistentes y de gran precisión que el método genera. Esto las convierte en una opción práctica para el tratamiento de la zona cercana a la pared, en simulaciones de flujo industrial.

Sin embargo, las funciones de pared, son inadecuadas en aquellas situaciones donde dominan los bajos números de Reynolds, con lo cual las hipótesis consideradas en su formulación dejan de ser válidas. Estas situaciones requieren ser tratadas por medio del enfoque *near-wall modeling*.

5.3 Discretización de las ecuaciones de transporte

Para que un programa de CFD pueda resolver las ecuaciones diferenciales que describen a un flujo de fluido, éstas deben ser transformadas en expresiones algebraicas. Dicha transformación se denomina proceso de discretización numérica. Existen varias técnicas de discretización, dependiendo de los principios en que se basen. Las más utilizadas son: diferencias finitas (DF), volúmenes finitos (VF), y elementos finitos (EF). Los primeros programas de CFD utilizaron DF. La mayor desventaja de este método es que está limitado a grillas estructuradas, las cuales son difíciles de aplicar a sistemas con geometrías complejas. Los métodos de VF y EF soportan tanto grillas estructuradas como no-estructuradas y por lo tanto pueden ser aplicados a geometrías más complejas. El método de EF es en general más preciso que el de VF, pero el de VF aplica la ecuación de continuidad a cada volumen de control, resultando en un balance de materia más exacto. VF es más apropiado para flujos de fluidos, mientras que EF es utilizado extensamente en cálculos de sistemas sometidos a tensión, donde satisfacer la ecuación de continuidad en forma local es menos importante.

Al realizar una simulación es imprescindible volcar en el modelo los detalles de la geometría a estudiar. Los casos de lechos fijos de partículas esféricas presentan una complejidad tal que sólo es posible utilizar grillas del tipo no-estructurado para su descripción.

El *software FLUENT* utilizado en este trabajo se basa en el método numérico de los volúmenes finitos. En el método de VF, el dominio se divide en un determinado

número de volúmenes de control y las ecuaciones diferenciales de transporte se integran sobre cada uno de dichos volúmenes. Luego, se define la fórmula de interpolación entre dos puntos sucesivos de la grilla y se discretizan las ecuaciones para generar un sistema de ecuaciones algebraicas (Patankar, 1980). Las ecuaciones discretizadas obtenidas de esta forma expresan el principio de conservación, para cada variable analizada, en un volumen de control finito, del mismo modo que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen de control infinitesimal. Finalmente, las ecuaciones algebraicas son resueltas numéricamente para generar el campo de solución de las variables del sistema en estudio. Una de las características más interesantes de esta formulación es que la solución resultante implica que las integrales de las ecuaciones de conservación de variables tales como materia, momento y energía son satisfechas exactamente sobre todo el grupo de volúmenes de control y, por supuesto, sobre todo el dominio de cálculo. Esta característica se verifica para grillas con cualquier número de puntos, por lo tanto, aun las soluciones basadas en grillas poco refinadas obtienen balances integrales exactos.

5.4 Procedimiento de resolución por CFD

El *software FLUENT* está conformado por diferentes módulos, que ejecutan las distintas etapas de la simulación como puede observarse en la Figura 5.5.

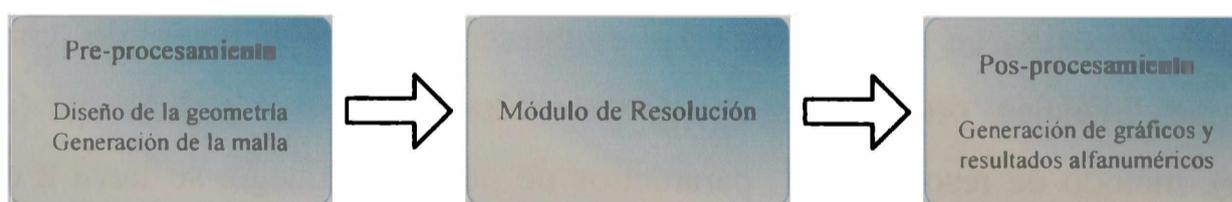


Figura 5.5. Estructura del paquete de CFD comercial

5.4.1 Etapa de Pre-procesamiento

Esta etapa incluye la creación o importación (desde un programa de diseño gráfico) de la geometría del problema a tratar y la generación de la malla correspondiente. La creación de la malla es una de las etapas más importantes de la simulación ya que su refinamiento (cantidad y distribución de los volúmenes de control que la componen) definirá la precisión de la simulación.

Más allá del tipo de malla seleccionada (estructurada o no-estructurada, cuadrilátera o triangular, etc.) es imprescindible lograr una buena calidad de la malla para obtener soluciones confiables en la CFD.

Existen casos en los que es necesario realizar un refinamiento local de la grilla. Por ejemplo en regiones tales como los puntos de contacto de las partículas de un lecho con la pared del tubo que las contiene o en cercanías de los puntos de contacto partícula-partícula, la malla debe ser más fina que en las regiones alejadas donde las zonas de pasaje de flujo son considerablemente más abiertas.

Cuando se trabaja con el paquete *FLUENT*, tanto la geometría del sistema a simular como la grilla pueden ser generadas en el ámbito del programa de pre-procesamiento *GAMBIT*. Este software contiene herramientas automáticas y semiautomáticas para la creación de geometría y malla. También permite al usuario construir, importar y modificar geometrías generadas en otros *software*.

Una vez generada la malla, se la exporta en el formato específico correspondiente al módulo de resolución que se utilizará para desarrollar la simulación de CFD (programa *FLUENT*, en este trabajo).

5.4.2 Etapa de Resolución

Luego de completada la etapa de generación de la malla puede comenzarse la fase de resolución propiamente dicha.

Inicialmente, en esta etapa, se establecen las condiciones de contorno, condiciones iniciales, propiedades de los materiales, modelo de turbulencia (o flujo laminar), método de resolución y parámetros de iteración. Luego, se lleva a cabo la simulación, que finaliza cuando el proceso iterativo alcanza la convergencia.

Establecer las condiciones de contorno consiste en fijar los valores de ciertas variables en los límites del dominio. Existen diversos tipos de condiciones de frontera disponibles en el programa *FLUENT*. La Tabla 5.2 describe las principales características de las condiciones de contorno utilizadas con mayor frecuencia.

Con respecto al dominio, se define en el módulo de resolución de *FLUENT* el tipo de zona que caracteriza al mismo. Es posible distinguir una o más zonas con comportamientos diferentes dentro de una única celda de cálculo. En la Tabla 5.3 se presenta una descripción de dichas zonas.

<p>Fronteras de entrada y salida de flujo:</p> <p>FLUENT permite definir diez tipos diferentes de fronteras para la especificación de flujos que ingresan o salen del sistema. Las utilizadas con mayor frecuencia son:</p> <p><i>Velocidad en la entrada:</i> es utilizada para definir la velocidad y propiedades del flujo de fluido en la frontera de entrada al sistema.</p> <p><i>Presión en la entrada:</i> es utilizada para definir la presión absoluta y propiedades del flujo de fluido en la frontera de entrada al sistema.</p> <p><i>Presión en la salida:</i> se utiliza para definir la presión en la frontera de salida del sistema.</p>
<p>Paredes y fronteras repetitivas:</p> <p><i>Paredes:</i> estas fronteras son utilizadas para limitar regiones sólidas y fluidas. A este tipo de fronteras se les puede ingresar información sobre condiciones térmicas, movimiento o rotación, rugosidad, presencia de reacciones químicas, entre otras.</p> <p><i>Fronteras simétricas:</i> son utilizadas cuando tanto la geometría del sistema de interés como los patrones de flujo y térmico esperados para la solución, presentan simetría especular.</p> <p><i>Fronteras periódicas:</i> son utilizadas cuando tanto la geometría del sistema de interés como los patrones de flujo y térmico esperados para la solución, presentan una naturaleza repetitiva de tipo periódico.</p>
<p>Fronteras internas:</p> <p>Este tipo de fronteras se definen sobre las caras de los volúmenes de control, lo que significa que no poseen un espesor finito. Permiten introducir un cambio abrupto en las propiedades del fluido. Se las utiliza generalmente para implementar modelos para la simulación de ventiladores y membranas porosas delgadas.</p>

Tabla 5.2. Condiciones de borde disponibles en el programa FLUENT

Adicionalmente deben establecerse las condiciones iniciales, para simulaciones en estados transitorios o, para el caso de simulaciones estacionarias, es preciso introducir valores iniciales de las variables al programa, a partir de los cuales comenzará el proceso iterativo. A fin de obtener soluciones rápidas y estables es recomendable contar con valores iniciales lo más cercanos a la solución final que sea posible.

También se especifican las propiedades físicas de todos los fluidos y sólidos que intervienen en la simulación.

Finalmente, se fijan los parámetros de iteración. Existen dos parámetros fundamentales de iteración cuyos valores deben establecerse antes de comenzar la simulación. Uno de ellos es el factor de relajación que determina el ajuste sobre la solución luego de cada paso de iteración y el restante es el valor de corte del residuo de cada variable que fija el criterio de finalización de las iteraciones.

Zonas: fluido, sólido y medio poroso

Fluido: una zona definida como fluido es un grupo de volúmenes de control para los cuales todas las ecuaciones previamente activadas son resueltas. Se debe indicar de qué material está constituido.

Sólido: una zona sólida es un grupo de volúmenes de control para los cuales sólo se resuelve la ecuación de transferencia de calor por conducción. No se calcula ninguna ecuación de flujo. Se debe indicar de qué material está constituido.

Medio poroso: es posible definir una zona sobre la cual se aplicará el modelo de medio poroso. Puede ser utilizado para simular una gran variedad de problemas incluyendo flujos a través de lechos fijos, platos perforados, distribuidores de flujo, papeles filtrantes y bancos de tubos.

Tabla 5.3. Zonas disponibles en el programa FLUENT

Para efectuar las simulaciones se utilizó el algoritmo de cálculo provisto por *FLUENT* denominado *pressure-based solver*. En este algoritmo, que se basa en la técnica numérica de los volúmenes finitos, las ecuaciones de transporte se resuelven secuencialmente.

Debido a que las ecuaciones a resolver son no-lineales y se encuentran acopladas, el proceso de cálculo para alcanzar la solución es iterativo. Cada iteración abarca los pasos que se ilustran en la Figura 5.6 y se describen a continuación:

1. Actualización de las propiedades del fluido tales como, densidad, viscosidad, calor específico, en base a la última solución hallada (si el cálculo recién

comienza, las propiedades del fluido se actualizan en base a los valores de inicialización).

2. Resolución secuencial de las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento, utilizando los valores recientemente actualizados de presión y flujos másicos, a fin de obtener los campos de velocidad u_x , u_y y u_z .
3. Debido a que las velocidades obtenidas en el paso anterior pueden no satisfacer la ecuación de continuidad localmente, se lleva a cabo la resolución de la *ecuación de corrección de presión* derivada de la ecuación de continuidad, lo que permitirá luego efectuar la corrección de los campos de flujo.
4. Corrección de los flujos másicos y campos de presión y velocidad utilizando la corrección de presión obtenida en el paso 3.
5. Resolución de las ecuaciones de escalares adicionales, si existiera alguna, tales como variables de turbulencia, energía, especies e intensidad de radiación, utilizando los valores corregidos de las variables calculadas.
6. Chequeo de la convergencia de los valores obtenidos.

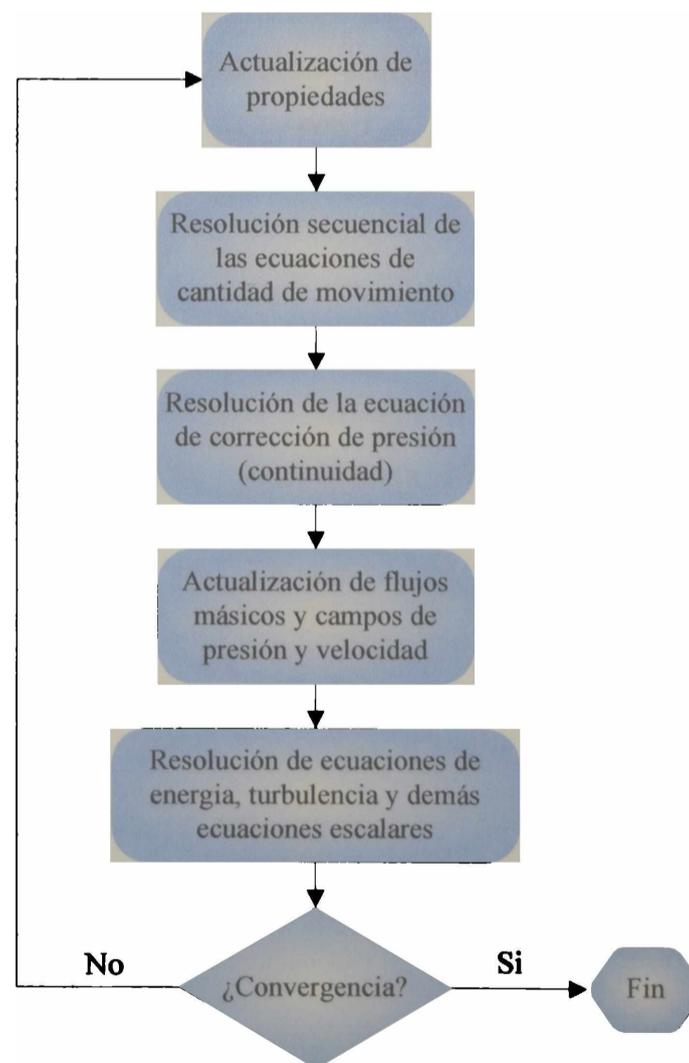


Figura 5.6. Diagrama de flujo del algoritmo de cálculo *Pressure-based*

5.4.3 Etapa de Pos-procesamiento

Cuando la simulación ha convergido, el último conjunto de datos obtenido es almacenado como solución final. Para poder interpretar los resultados es necesario ordenarlos y reducirlos a información compacta que resulte más fácilmente comprensible (por ejemplo, valores “promedio” sobre superficies determinadas o sobre direcciones definidas, gráficos parciales, etc.). Este tratamiento sobre los datos finales, que hace posible la comparación entre distintas simulaciones y con datos externos, se denomina pos-procesamiento.

El programa *FLUENT* está acompañado de un *software* pos-procesador para el análisis de los resultados, que incluye como opciones estándar de visualización, gráficos de contorno, de vectores, diagramas XY, histogramas y líneas de trayectoria.

También el *software* provee herramientas para el cómputo y presentación de cantidades integradas de las variables sobre superficies y fronteras. Estas herramientas permiten encontrar, por ejemplo, el valor del caudal másico, la velocidad de transferencia de calor o las fuerzas y momentos sobre las fronteras del sistema.

Finalmente, es posible exportar los datos numéricos en diferentes formatos, lo que facilita su utilización en distintas aplicaciones externas. También es factible exportar los resultados en el formato ASCII para su tratamiento posterior.

CAPÍTULO VI

APLICACIÓN DE LA CFD PARA LA OBTENCIÓN DE INFORMACIÓN SOBRE EL COMPORTAMIENTO DE LECHOS FIJOS

6.1 Introducción

6.2 Modalidad de construcción de la celda de cálculo

6.2.1 Arreglo espacial del lecho de partículas

6.2.2 Metodología de resolución y topología de la celda de cálculo

6.2.2.1 Construcción de la celda estableciendo las condiciones de borde: *velocidad en la entrada y presión en la salida*

6.2.2.2 Construcción de la celda con fronteras *periódicas*

6.2.2.3 Determinación del número de estratos de la celda de cálculo

6.3 Construcción de la geometría de la celda y generación de la malla

6.3.1 Validación de la malla

6.4 Selección del modelo de turbulencia

6.5 Principales características de la implementación de la simulación por CFD

6.6 Conclusiones

APÉNDICE VI.1

Modelo de turbulencia Spalart-Allmaras

Modelo de turbulencia Estándar k- ϵ

6.1 Introducción

Como se ha descrito en el Capítulo III, se utilizará la CFD como herramienta para la obtención de la información necesaria para la formulación de las expresiones predictivas de los parámetros del MDZ (que se desarrollará en el Capítulo VIII). Adicionalmente, se completará el estudio con el análisis de la pérdida de carga del lecho, a partir del campo de presiones obtenido por CFD (que se realizará en el Capítulo VII).

En el presente capítulo se lleva a cabo un análisis de las distintas alternativas disponibles para efectuar la simulación por CFD, ya que al no ser factible la simulación del lecho completo, debe acotarse la geometría del problema a tratar. Adicionalmente, se establecen las condiciones de borde del problema.

Las simulaciones se desarrollarán sobre lechos estructurados conformados por partículas esféricas y dispuestas según arreglos geométricos determinados. En la sección 6.2 se describen dichos arreglos, se analizan distintas alternativas de resolución por CFD y se establecen las condiciones de contorno de la celda a simular.

En la sección 6.3 se detalla la geometría de la celda, se muestran las mallas generadas y se describe el proceso de validación de dichas mallas.

En la sección 6.4 describe el proceso de selección del modelo de turbulencia más adecuado para realizar las simulaciones que requieran ese tratamiento.

Finalmente, en la sección 6.5 se describen las principales características de la implementación de las simulaciones en el programa FLUENT.

6.2 Modalidad de construcción de la celda de cálculo

La simulación de un lecho fijo requiere, secuencialmente, de la adopción de un esquema estructural (geométrico) para el lecho y de la definición de una alternativa metodológica específica, que incluye la determinación de las condiciones de borde, para su resolución por CFD.

6.2.1 Arreglo espacial del lecho de partículas

En general las partículas están dispuestas aleatoriamente en los lechos reales. La simulación de estructuras de partículas con disposición aleatoria requiere de la

utilización de un software específico para establecer la distribución espacial de las partículas. Alternativamente, pueden analizarse diferentes arreglos regulares para luego extraer conclusiones con respecto a la influencia de la distribución de los sólidos en el lecho, sobre el comportamiento fluidodinámico y térmico del mismo.

Se simularon lechos conformados por partículas esféricas regulares, dispuestas en diversos arreglos geométricos estructurados, que permitieron representar lechos fijos de diferentes porosidades.

Cada arreglo, y además la ubicación del mismo en relación a la pared y a la dirección de flujo de gas, da lugar a las “configuraciones” que pueden apreciarse en la Figura 6.1.

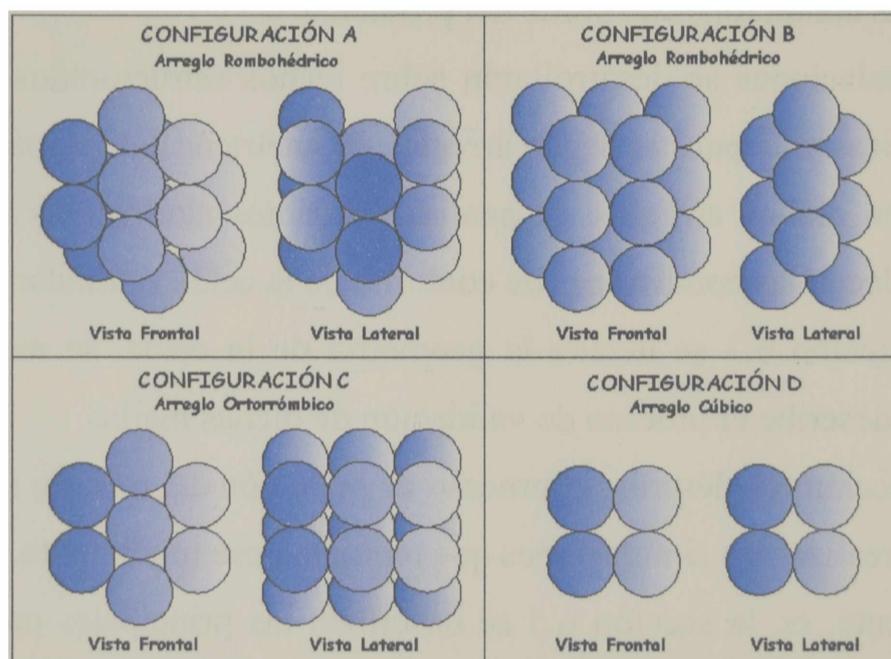


Figura 6.1. Arreglos espaciales de partículas esféricas

En cada caso, se designa como *vista frontal* a la cara del conjunto en contacto con la pared y como *vista lateral* a la correspondiente a la posición perpendicular al flujo de gas. El arreglo “romboédrico, configuración B” es habitualmente llamado arreglo “cúbico compacto”, denominación que se adoptará en las secciones siguientes. Al arreglo “romboédrico, configuración A”, se lo mencionará como arreglo “romboédrico” simplemente.

En la Tabla 6.1 se presentan los parámetros estructurales que caracterizan a cada una de las configuraciones: la porosidad mínima que el arreglo permite, ε_{min} (que corresponde a la situación en que las esferas están en contacto, luego se considerará la

posibilidad de que exista una separación homogénea entre las partículas) y la distancia entre centros pertenecientes a dos estratos adyacentes de partículas, Δ .

Configuración	ε_{min}	Δ
A	0.2595	$0.816495 d_p$
B	0.2595	$0.7071012 d_p$
C	0.3954	d_p
D	0.4760	d_p

Tabla 6.1. Parámetros estructurales de las configuraciones dadas en la Figura 6.1

Para representar la pared del tubo que contiene al lecho de partículas, se utilizó una geometría conformada por placas paralelas en lugar de un conducto circular, tal como se señaló en la sección 3.1. Esta alternativa es estrictamente apropiada si el radio de tubo es suficientemente mayor que el diámetro de partícula utilizado. En los restantes casos constituye una simplificación para el cálculo.

6.2.2 Metodología de resolución y topología de la celda de cálculo

Para llevar a cabo la adopción de una metodología de resolución se consideraron dos posibles enfoques. El primero de ellos basado en la simulación de una porción de lecho acompañado por dos zonas denominadas “de calma”, libres de partículas, localizadas antes del ingreso del flujo de gas al lecho fijo y al finalizar éste. Como condiciones de borde se definen: la velocidad superficial del flujo de entrada de gas y la presión de salida en las fronteras correspondientes. El segundo enfoque, que consiste en la aplicación de un tipo de fronteras disponibles en el programa *FLUENT* denominadas *periódicas*, prescinde de la incorporación de las zonas “de calma” mencionadas.

6.2.2.1 Construcción de la celda estableciendo las condiciones de borde: *velocidad en la entrada y presión en la salida*

Si bien posteriormente se estudiarán otros arreglos regulares (como medio para analizar el efecto de la porosidad en el estudio) en esta etapa de definición y análisis

preliminar, se adoptó el arreglo romboédrico (configuración A). Esta elección se basó en la existencia de evidencia experimental sobre la excelente concordancia de las porosidades locales evaluadas para este arreglo y los valores experimentales. Para las diferentes configuraciones dadas en la Figura 6.1, es factible obtener los perfiles teóricos de porosidad local, ε_{local} , a partir de un valor dado de porosidad en el seno del lecho (Mazza y colab., 1991). En la Figura 6.2 se graficaron dichos perfiles y los resultados experimentales de Roblee y colab. (1958) y Benenatti y Brosilow (1962), en función de la distancia en la dirección normal a la pared, para un valor de porosidad en el seno del lecho de 0.39. Adicionalmente, se incluyó en la figura el perfil resultante de la correlación de Cohen y Metzner (1981).

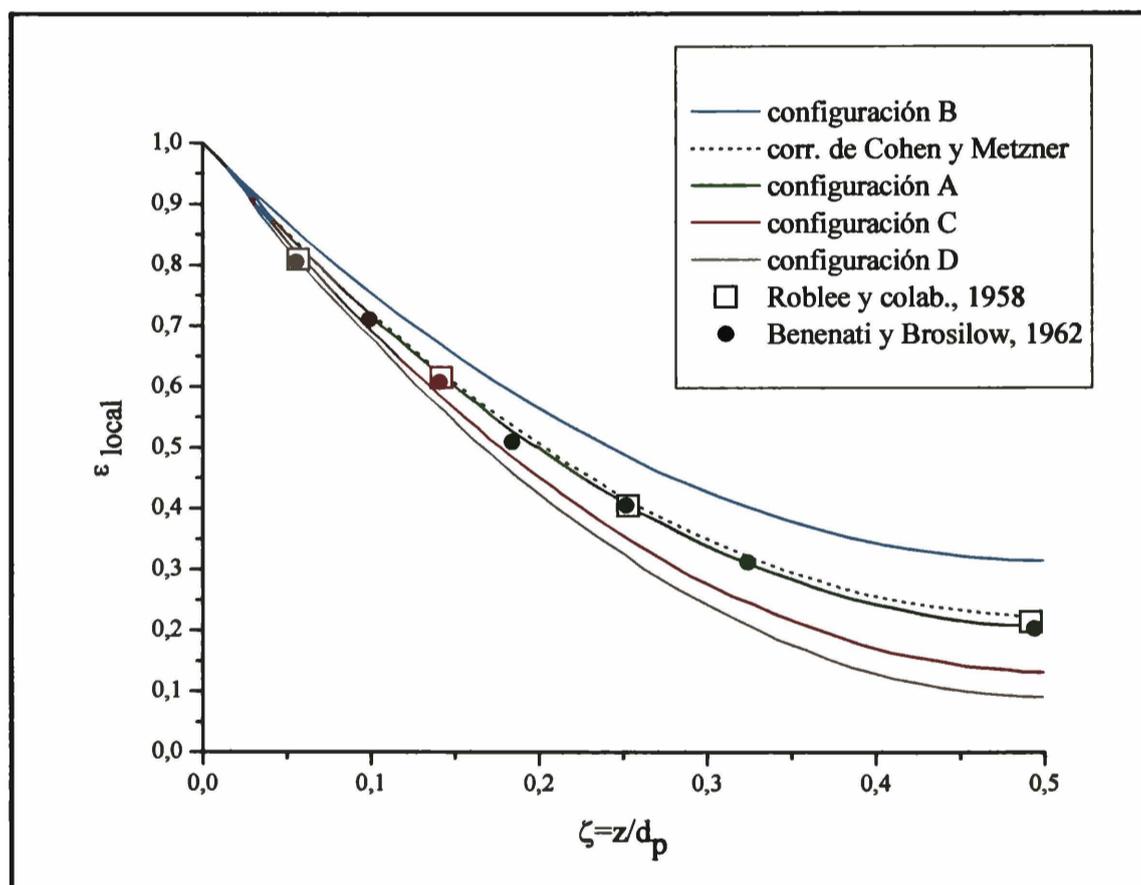


Figura 6.2. Variación de la porosidad local con la coordenada ζ

Como puede observarse en la Figura 6.2, la concordancia entre los resultados experimentales y los valores de ε_{local} correspondientes a la configuración A es excelente; la misma conclusión es aplicable cuando se comparan éstos últimos con los valores de ε_{local} evaluados a partir de la correlación de Cohen y Metzner.

En consecuencia, se construyó un lecho fijo conformado por partículas sólidas posicionadas de acuerdo al arreglo espacial mencionado (romboédrico, configuración

A) entre dos paredes de temperatura constante T_{w1} y T_{w2} . A través del lecho se hizo fluir una corriente de gas de caudal másico G_m , ingresando a la temperatura T_{go} .

Se estudió la respuesta del sistema variando la profundidad del lecho de partículas en la dirección del flujo de gas, respetando el arreglo geométrico, con el fin de determinar si las variables lograban desarrollarse en tiempos de cómputo razonables. En todos los casos se utilizaron dos estratos de partículas en la dirección “y” (entre los planos de temperatura predeterminada).

Inicialmente se trabajó con una profundidad de 4 partículas en la dirección “z” (16 partículas totales en el lecho), incrementando la misma gradualmente hasta 8 partículas en la dirección “z” (32 partículas totales en el lecho). Las zonas de calma I y II se generaron con una longitud equivalente a 3 y 7 diámetros de partícula respectivamente. La convergencia en este último caso se obtuvo luego de superadas 72 horas de cómputo. En la Figura 6.3 se muestran dos lechos construidos con las profundidades de 4 y 8 partículas. Las secciones de entrada del flujo de gas se muestran en color azul y las de salida en color rojo.

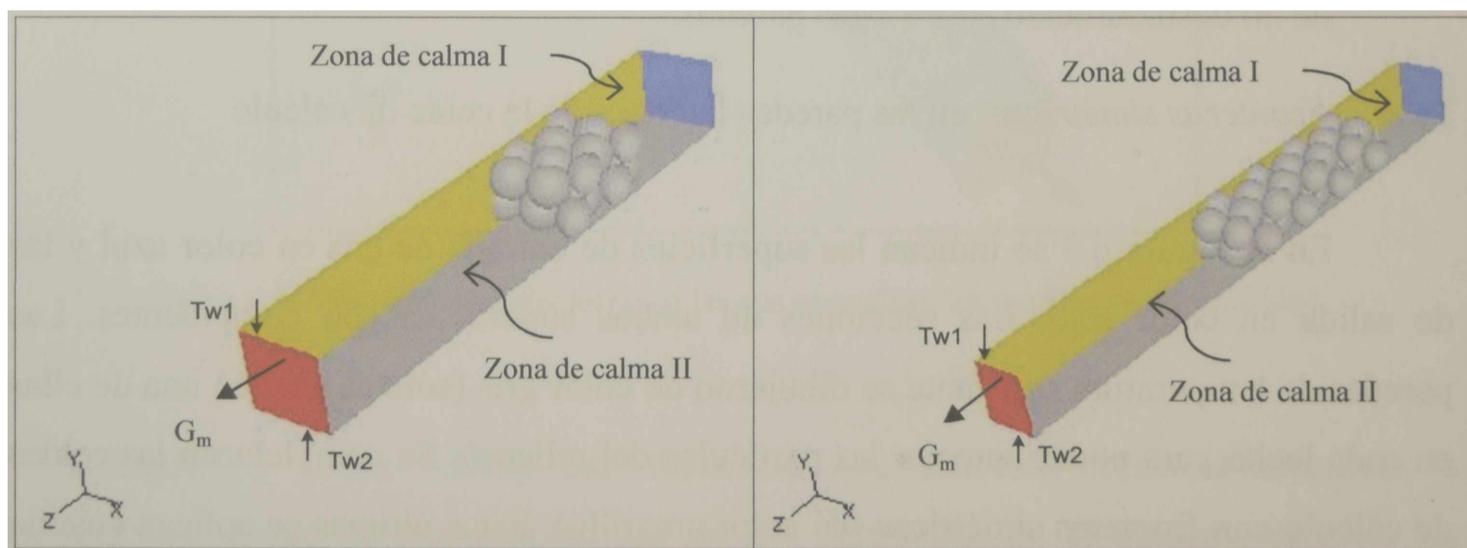


Figura 6.3. Visualización de lechos con distinta profundidad

En las simulaciones, se fijaron las condiciones operativas tomando como referencia las correspondientes al reformado de gas natural con vapor de agua, proceso en el que la transferencia de calor desempeña un rol fundamental, dada la endotermicidad global del sistema de reacciones involucrado. La Tabla 6.2 resume las

condiciones de operación utilizadas en los cálculos. Las simulaciones se desarrollaron para $Re_p = 1000$.

Temperatura de alimentación [K], T_{go}	727
Presión de alimentación [MPa]	2.5
Temperaturas de Pared (T_{w1} , T_{w2}) [K]	963
Fluido	aire

Tabla 6.2. Condiciones operativas utilizadas en los cálculos

En esta modalidad de cálculo es necesario establecer las siguientes condiciones de contorno:

- *Velocidad en la entrada:* velocidad superficial y temperatura del fluido en la frontera de entrada de gas ($\langle u \rangle = 0.75 \text{ m s}^{-1}$ y $T_{go} = 727 \text{ K}$).
- *Paredes de temperatura constante:* en las superficies planas inferior y superior ($T_w = 963 \text{ K}$). Se cumple la condición de no deslizamiento.
- *Presión en la salida:* presión relativa en la superficie de salida del gas, $P = 0 \text{ Pa}$ (referida a la presión de operación, $P = 2.5 \text{ MPa}$).
- *Paredes adiabáticas:* sobre las superficies de las esferas. Se cumple la condición de no deslizamiento sobre estas paredes.
- *Fronteras simétricas:* en las paredes laterales de la celda de cálculo

En la Figura 6.3 se indican las superficies de entrada de gas en color azul y las de salida en color rojo. Las secciones de ambas superficies son coincidentes. Las paredes de temperatura constante se dibujaron de color gris (sólo se graficó una de ellas en cada lecho para poder apreciar las partículas del relleno). Se completaron las celdas de cálculo con fronteras simétricas (de color amarillo). Estas últimas se aplican cuando tanto la geometría de interés como los patrones de flujo y térmico de la solución esperada, presentan simetría especular.

Sobre la geometría descrita se construyó la grilla de cálculo siguiendo la metodología que se detalla en la sección 6.3.

Las Figuras 6.5, 6.6 y 6.7 muestran, para una simulación realizada sobre el sistema de 8 partículas en la dirección z, los resultados de las componentes de la velocidad: u_z , u_y y u_x , respectivamente. Las diferentes curvas, identificadas por colores, corresponden a los perfiles de velocidad obtenidos para el lugar geométrico de los

puntos que definen cuatro rectas en la dirección “y” perpendiculares al flujo de gas, convenientemente espaciadas y seleccionadas para que correspondan a posiciones donde es esperable la periodicidad en las variables (posiciones geoméricamente equivalentes). La coordenada x seleccionada (1/2 del espesor de la celda de cálculo) fue la misma en todas las rectas (Figura 6.4). La forma asimétrica de las curvas (Figuras 6.5-6.7) responde a la posición de las esferas del segundo estrato (ubicadas conforme al arreglo romboédrico), que impide la coincidencia de los puntos de contacto sobre ambos planos de temperatura fija.

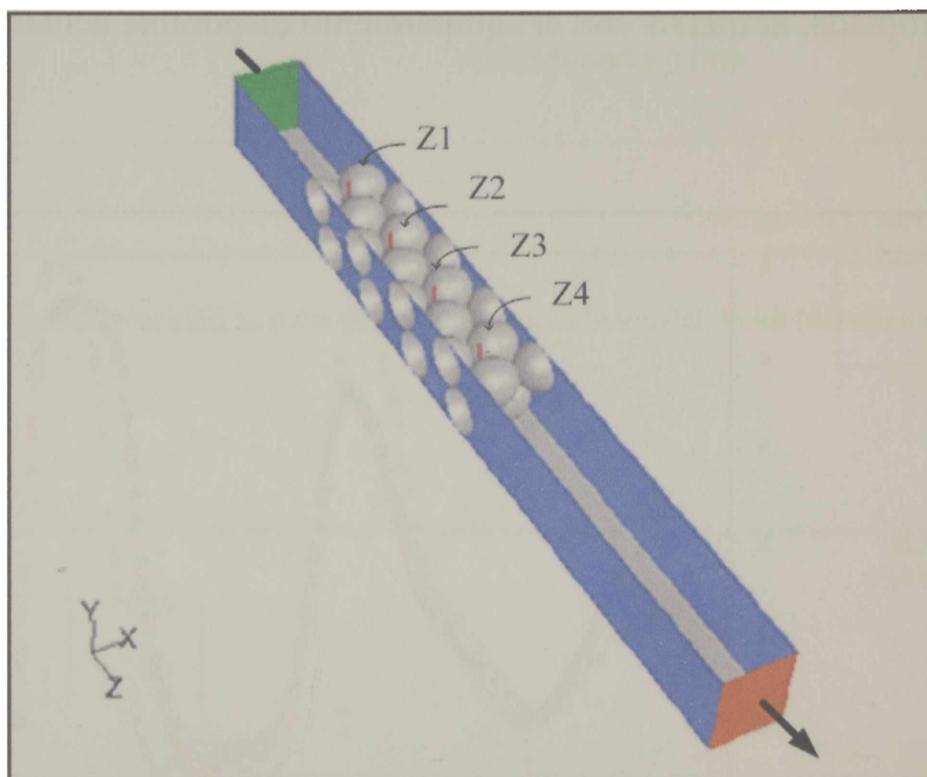


Figura 6.4. Profundidades del lecho en las que se evalúan los perfiles de la velocidad

Guardo y colab. (2005) han reportado que sistemas similares alcanzan la periodicidad luego de una profundidad de 2-3 partículas. En el presente estudio, las curvas coincidentes de u_z (Figura 6.5), parecen alcanzar dicha condición a partir del perfil correspondiente a la posición “z₂”, sin embargo al analizar los perfiles de las restantes componentes de la velocidad, en especial u_x (Figura 6.7), no se observa esa coincidencia. Por lo tanto puede concluirse que una profundidad de 8 partículas en el lecho a simular no resulta suficiente para lograr alcanzar la condición de periodicidad en lo referente al balance de cantidad de movimiento.

Adicionalmente, con respecto al balance de calor, la condición de periodicidad tampoco se obtiene para la cantidad de partículas mencionada, como puede observarse en la [Figura 6.9](#). En este último caso no se esperaba una superposición de los perfiles de temperatura, sino la existencia de curvas proporcionales (condición que no se verificó) que pusieran de manifiesto el aumento de temperatura del fluido al circular por el lecho. El agregado de un mayor número de partículas en el sentido z no resulta conveniente porque en las condiciones analizadas el tiempo de cómputo supera las 72 horas (dependiendo del refinado de la malla). De esta manera, para las condiciones operativas representativas de los casos de interés, los resultados muestran que esta modalidad de cálculo no es apropiada, al menos con el equipamiento disponible actualmente.

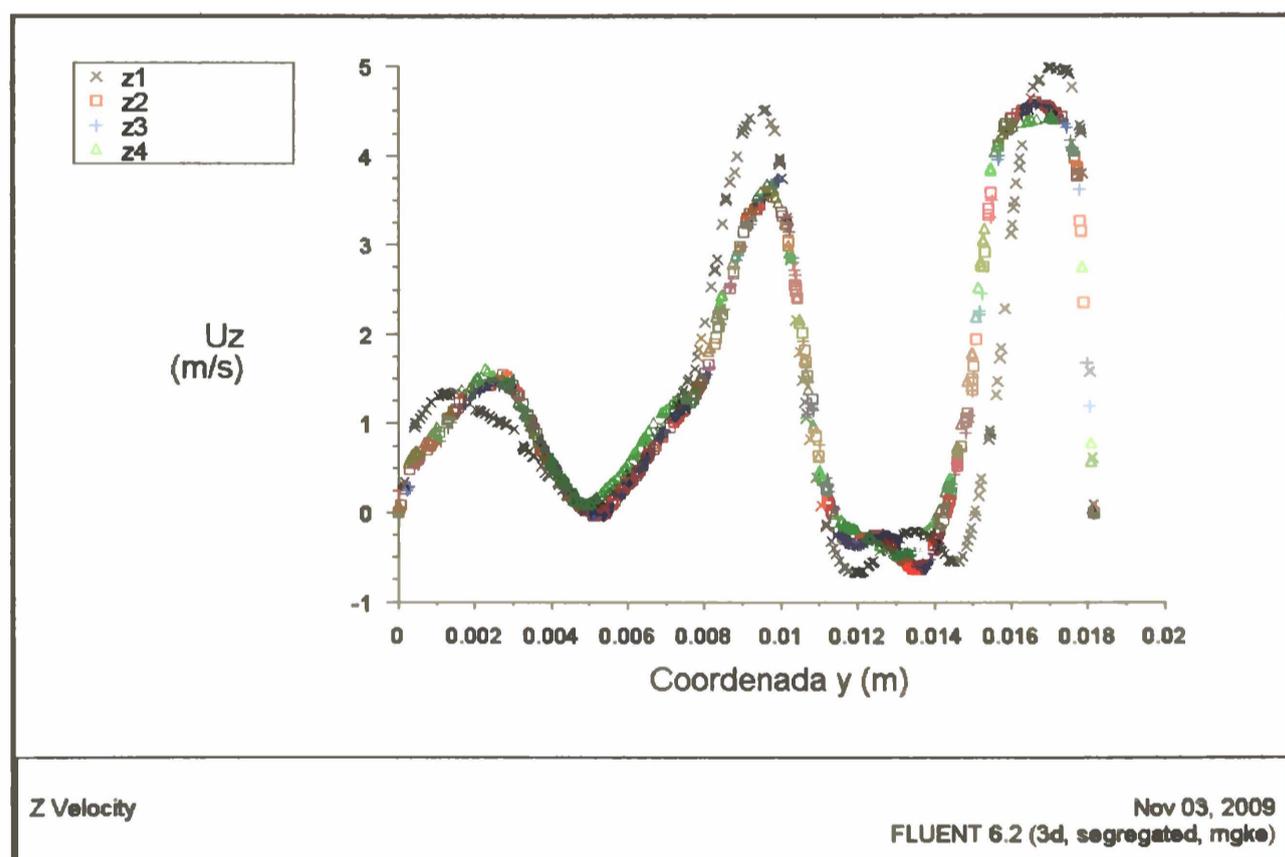


Figura 6.5. Perfiles de velocidad u_z para distintas profundidades del lecho (coordenada z), $d_p=0.01$ m

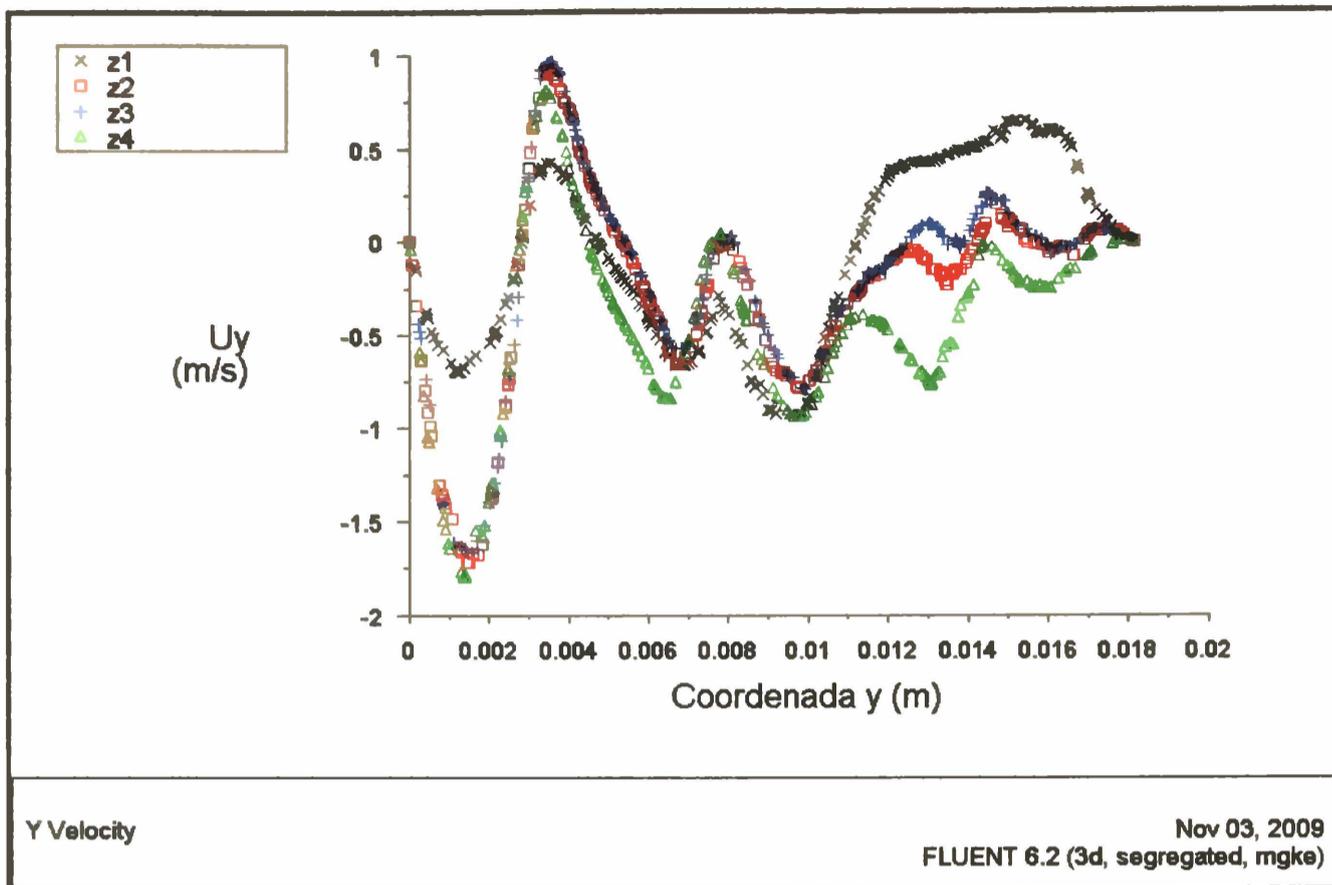


Figura 6.6. Perfiles de velocidad u_y para distintas profundidades del lecho (coordenada z), $d_p=0.01$ m

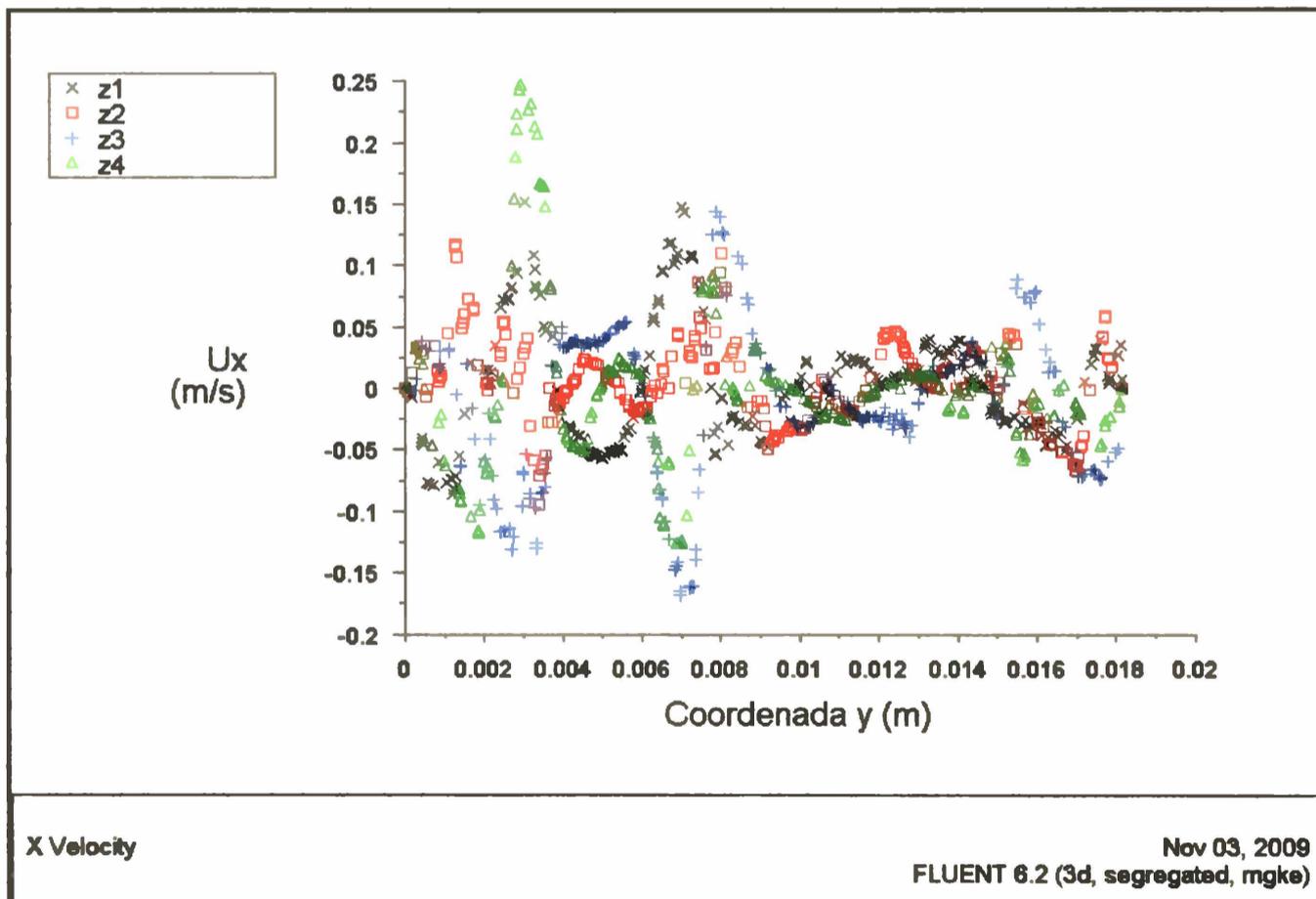


Figura 6.7. Perfiles de velocidad u_x para distintas profundidades del lecho (coordenada z), $d_p=0.01$ m

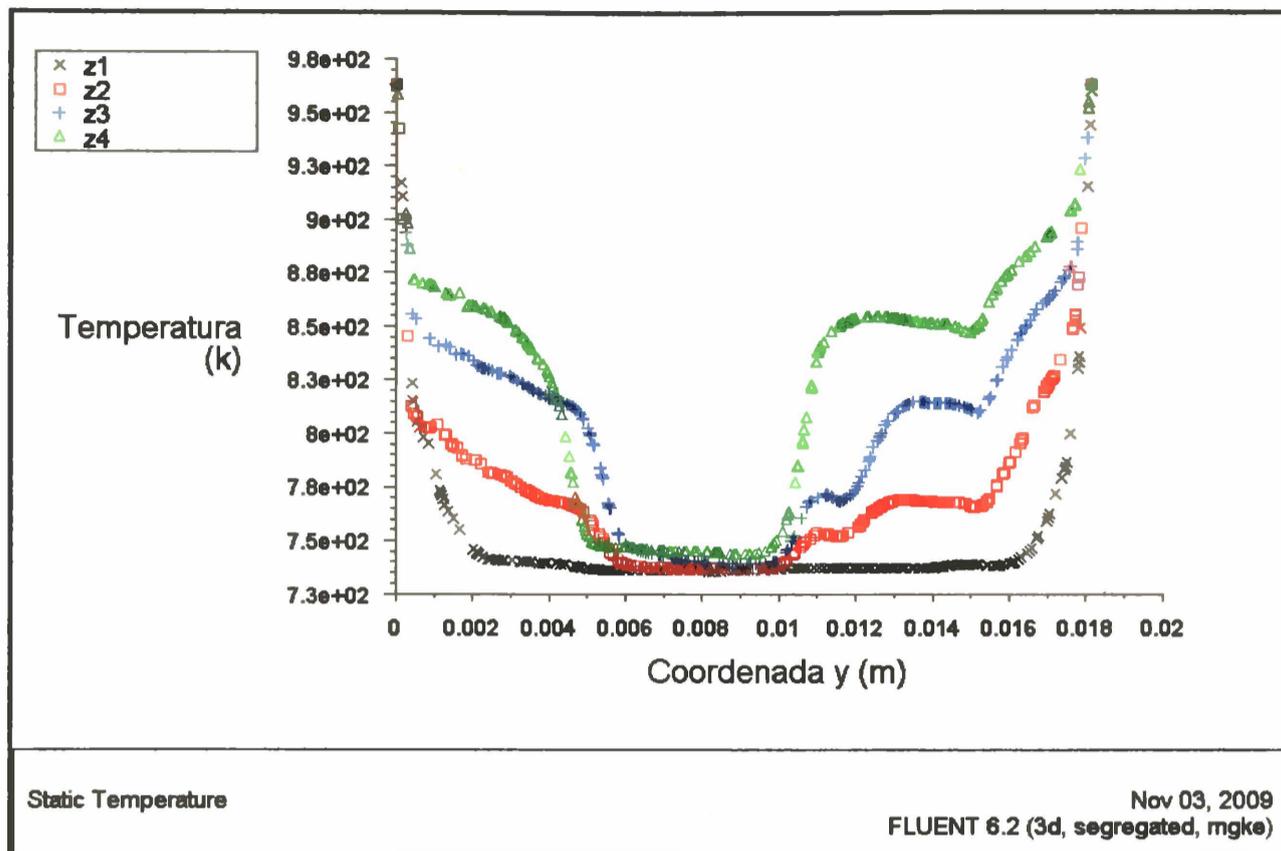


Figura 6.8. Perfiles de Temperatura para distintas profundidades del lecho (coordenada z), $d_p=0.01$ m

6.2.2.2 Construcción de la celda con fronteras periódicas

Como alternativa al método de resolución analizado en la sección precedente se analizó la posibilidad de construir la celda de cálculo utilizando fronteras *periódicas*. Esta alternativa es viable cuando el interés no se centra en la región de entrada sino en el análisis de la situación donde el perfil ya se haya desarrollado. En esta modalidad el sistema de ecuaciones se resuelve por CFD en un volumen limitado por dos planos perpendiculares al eje z (dirección axial) en los que la estructura del lecho presenta periodicidad en los valores de velocidad y temperatura. Estos planos conformarán las fronteras *periódicas* (*FP*). La utilización de *FP* se sustenta en detectar las posiciones en el lecho donde las variables deben adoptar valores periódicos y construir la celda de periodicidad consecuentemente.

Los dos planos que conforman las *FP* sustituyen funcionalmente a las condiciones iniciales y finales que se establecieron en el primer enfoque analizado (sección 6.2.2.1) y su utilización reduce notablemente el tiempo de cálculo, facilitando, en la mayoría de los casos, la obtención de la convergencia. La condición de periodicidad implica que los componentes de la velocidad se repiten, en sus valores en el espacio, de la siguiente

forma (Fluent User's Guide, 2006):

$$u_i(\vec{r}) = u_i(\vec{r} + \vec{L}) = u_i(\vec{r} + 2\vec{L}) = \dots \quad (6.1)$$

donde u_i representa las componentes del vector velocidad, (\vec{r}) es el vector posición y (\vec{L}) es el vector de longitud periódica del dominio considerado. En la Figura 6.9 se esquematiza el concepto de periodicidad siendo (A), (B) y (C) los puntos de periodicidad que ejemplifica la ecuación 6.1.

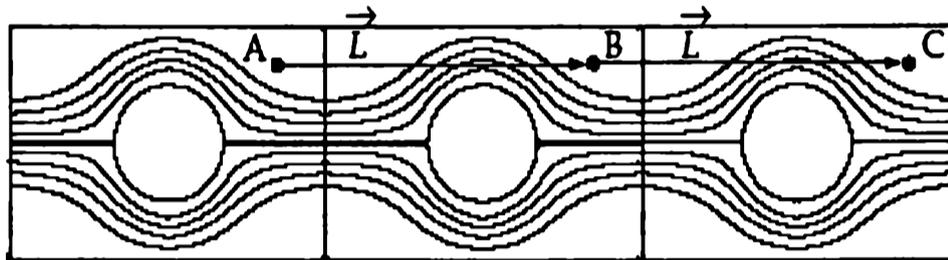


Figura 6.9. Ejemplo de geometría periódica (Fluent, 2006)

Para fluidos viscosos, la presión no es periódica en el sentido de la ecuación 6.1. Sin embargo, sí lo es la pérdida de carga a través de cada módulo repetitivo en la dirección del flujo:

$$\Delta P = P(\vec{r}) - P(\vec{r} + \vec{L}) = P(\vec{r} + \vec{L}) - P(\vec{r} + 2\vec{L}) = \dots \quad (6.2)$$

El gradiente local de presión puede ser descompuesto en dos partes: el gradiente de la fluctuación local, $\nabla \tilde{P}(\vec{r})$, y el gradiente de la componente de variación lineal, $\beta \frac{\vec{L}}{|\vec{L}|}$:

$$\nabla P(\vec{r}) = \beta \frac{\vec{L}}{|\vec{L}|} + \nabla \tilde{P}(\vec{r}) \quad (6.3)$$

donde $\beta \frac{\vec{L}}{|\vec{L}|}$ es la componente de variación lineal de la presión. Esta última representa a la fuerza que actúa sobre el fluido en la ecuación de balance de cantidad de movimiento. Como β no es conocido a priori, debe iterarse hasta que el flujo másico alcance el valor fijado en la simulación por el usuario. Esta corrección de β se conoce como “paso de corrección de presión” en el algoritmo de resolución del *software FLUENT*.

La ventaja de estos flujos periódicos reside en la posibilidad de restringir el modelo numérico a un módulo simple de una longitud periódica.

Cuando el fluido está en contacto con paredes a temperatura constante, el campo de temperatura (una vez escalada de manera apropiada) se desarrolla también de manera periódica.

A medida que, limitado por paredes de temperatura constante, T_w , el fluido atraviesa el dominio periódico en la dirección “z”, su temperatura se aproxima a la de la pared. Es factible, en forma consistente, escalar dicha temperatura para forzarla a adoptar un comportamiento periódico. El escalado se lleva a cabo por medio de la expresión siguiente, donde θ es la temperatura escalada:

$$\theta = \frac{T(\vec{r}) - T_w}{\bar{T}_0 - T_w} \quad (6.4)$$

mientras que la temperatura media en la en sección de entrada \bar{T}_0 , se define como:

$$\bar{T}_0 = \frac{\int_A T |\rho_g u \cdot dA|}{\int_A |\rho_g u \cdot dA|} \quad (6.5)$$

En la ecuación 6.5, A representa el área sobre la frontera periódica de entrada que constituye el dominio en el cual deben evaluarse las integrales. El comportamiento como variable periódica a lo largo del dominio de longitud L (dirección “z”) corresponde a la temperatura escalada, θ .

La utilización de la modalidad *FP* impone algunas restricciones: en primer lugar, este enfoque permite llevar a cabo las simulaciones sólo con fluidos incompresibles. Adicionalmente, el uso de *FP* no permite expresar las propiedades físicas del fluido en función de la temperatura (requiere valores medios obligatorios). Finalmente, una de las más importantes limitaciones reside en no permitir llevar a cabo la resolución del balance de calor con valores de temperaturas diferentes en ambos planos paralelos ($z-x$). De tal manera, se debe trabajar con $T_{w_1} = T_{w_2}$ y una temperatura distinta en la corriente del fluido.

Sin embargo, estas limitaciones se ven atenuadas por la importancia y utilidad de la información que se obtiene por este medio en relación al esfuerzo aportado.

6.2.2.3 Determinación del número de estratos de la celda de cálculo

Para poder “aislar” el proceso de transferencia de calor sobre una de las paredes de temperatura constante (que constituye el fenómeno de interés) y garantizar la no influencia del número de estratos de partículas que la separan de la otra pared (a la misma temperatura) se trabajó en la forma siguiente: se analizó el comportamiento del sistema aumentando el número de estratos de partículas que se ubican entre los planos $z-x$ de temperatura constante. Se comienza con un estrato y se incrementa progresivamente dicho número de a dos estratos cada vez. El valor del coeficiente será el deseado cuando entre un resultado de la condición (k) en número de estratos y la condición ($k+1$) no se produzca un cambio significativo en el coeficiente de transferencia de calor h_w .

Se utilizó en todo el cálculo un número impar de estratos de partículas entre los planos de temperatura predeterminada, T_w , para mantener la simetría en la dirección “y” de la celda. Se construyeron celdas de 1, 3, 5, 7 y 9 estratos ubicados entre las “paredes” de temperatura T_w . Todas las simulaciones realizadas con el objeto de definir el número de estratos de la celda se realizaron al valor constante de $Re_p = 1000$. A partir de las condiciones de caudal másico y temperaturas T_w y T_{g0} se obtuvieron por CFD los valores del flujo de calor sobre la pared de interés, Q_w , de la temperatura T_1 de la zona I (calculada según se detalla en la Sección 8.3) y caudal volumétrico de la zona cercana a la pared:

$$q_I = \frac{\int_{V_I} u_z dV}{L} \quad (6.6)$$

donde V_I es el volumen de la celda comprendido entre la pared de temperatura constante y un plano paralelo a ella ubicado a la distancia $d_p/2$ en la dirección “y” y L es la longitud de la celda en la dirección axial.

Los coeficientes de transferencia de calor sobre la pared se evaluaron a partir de la ecuación 3.1: $h_w = Q_w / (T_w - T_1)$.

Los cálculos se realizaron utilizando el método de resolución *pressure-based* (Fluent User’s Guide, 2006), con simple precisión en todos los casos. En la sección 6.5 se describe en detalle el esquema de discretización empleado en las simulaciones del

programa *FLUENT*, los factores de sub-relajación utilizados y el seguimiento de los residuos realizado con el objeto de verificar la convergencia del método numérico.

El cálculo del flujo de fluidos en lechos fijos para $Re_p \geq 300$, corresponde a la condición de turbulento (Bird y colab., 1998) y, en consecuencia, debe utilizarse un modelo de turbulencia en el tratamiento de las ecuaciones de cantidad de movimiento. En la sección 6.4 se detallará el método seleccionado.

En las simulaciones se utilizaron los siguientes datos de ingreso: $T_w = 963$ K, $T_{g0} = 727$ K, $Re_p = 1000$ (flujo turbulento), $G = 4.203$ kg m⁻² s⁻¹. La Tabla 6.3 resume los valores obtenidos de Q_w , T_l , q_l y h_w para las diferentes celdas de cálculo analizadas.

Número de estratos	q_l [m ³ s ⁻¹]	T_l [K]	Q_w [W m ²]	h_w [Wm ⁻² K ⁻¹]	$\Delta h\%$ (Ec. 6.7)
1	3,92E-06	750,00	84.634,30	397,35	
3	9,91E-06	932,08	15.938,30	515,56	-29,75
5	1,97E-05	946,91	8.588,01	533,74	-3,53
7	2,93E-05	951,6	6.123,54	537,02	-0,61
9	No convergencia				

Tabla 6.3. Determinación del número de estratos para el cálculo de h_w ,

La diferencia ($\Delta h\%$) que se reporta en la Tabla 6.3 es la que se obtiene al pasar de calcular el coeficiente h_w en un sistema con k estratos a un sistema con $k+2$ estratos, definido como:

$$\Delta h\% = \frac{|h_{w(k)} - h_{w(k+2)}|}{h_{w(k)}} \quad (6.7)$$

con $k = 1, 3, 5, 7$, dado que se trabajó con incrementos impares del número de estratos.

En los resultados presentados en la Tabla 6.3 puede apreciarse que hasta alcanzar el número de 5, la modificación del número de estratos no permite lograr “aislar” la transferencia de calor sobre la pared a T_w del efecto del número de estratos, observándose un cambio considerable en el valor del coeficiente de transferencia de calor y en la temperatura de la región adyacente a la pared. Al pasar de 5 a 7 estratos el

error % en h_w es de 0.61%, valor que resulta sumamente razonable. El tiempo de cómputo para 7 estratos es de 46 horas. Para 9 estratos la convergencia se ve dificultada y el tiempo de cómputo excede las 72 horas.

En consecuencia, se adoptó una celda de 7 estratos para realizar las simulaciones conformada como se muestra en la Figura 6.10.

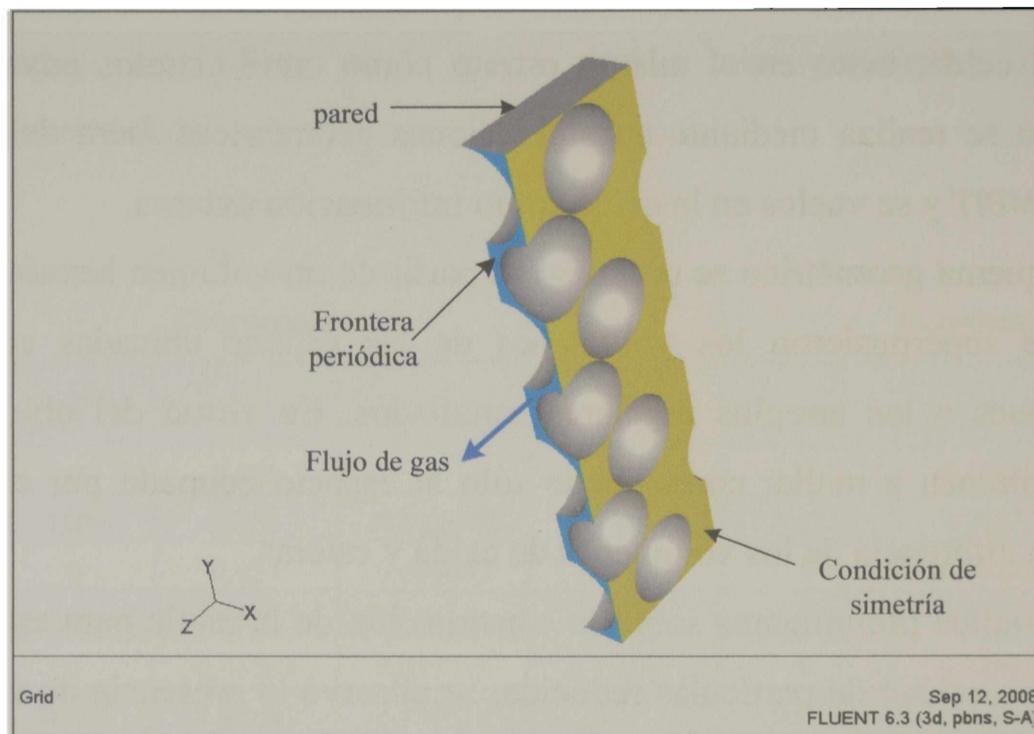


Figura 6.10. Condiciones de borde en la celda de cálculo seleccionada (7 estratos)

6.3 Construcción de la geometría de la celda y generación de la malla

Para poder llevar a cabo las simulaciones se construyeron celdas de cálculo de geometría tridimensional en base a las consideraciones ya analizadas. El segmento de lecho fijo fue modelado por medio de una celda conformada por dos paredes planas a temperatura constante con siete estratos de partículas en su interior. Con el objeto de representar distintas porosidades del lecho, como se indicó en la sección 6.2.1, se trabajó con cuatro arreglos geométricos distintos.

Para definir el tamaño de la celda a simular (cantidad de partículas requeridas), se analizó para cada arreglo geométrico la periodicidad de la estructura, buscando representar al lecho real con la menor cantidad posible de partículas.

Una vez definida la geometría completa para cada arreglo, el paso siguiente, y posiblemente uno de los más importantes en un cálculo por CFD, es la generación de la

malla que definirá cada uno de los volúmenes de control en los que se calcularán las variables de flujo en todo el dominio computacional.

La malla de cálculo se genera a partir del *software GAMBIT, versión 2.4.6* y debe construirse con suma precaución, teniendo en cuenta que una malla muy refinada permitirá obtener una elevada precisión en el cálculo pero incrementará sensiblemente el tiempo de cómputo. Un aspecto crítico para la posterior utilización del programa *FLUENT* es la determinación exacta de los puntos de contacto de las esferas que componen la celda, tanto en el mismo estrato como entre estratos adyacentes. Esta determinación se realiza mediante consideraciones geométricas fuera del entorno del programa *GAMBIT* y se vuelca en la celda como información externa.

El esquema geométrico se construyó a partir de un volumen hexaédrico regular, al que se le superpusieron los volúmenes de las esferas ubicadas en posiciones correspondientes a los arreglos regulares estudiados. En virtud del objetivo de este trabajo, el volumen a mallar corresponde sólo al espacio ocupado por el fluido y se obtiene como diferencia de los volúmenes de celda y esferas.

En estudios preliminares sobre la construcción de la malla para esta geometría, pero con una cantidad de partículas reducida, se observó la presencia de volúmenes de control sumamente distorsionados en las zonas que rodean a los puntos de contacto partícula-partícula y partícula-pared, lo que conduce a mallas de muy baja calidad. Para salvar este inconveniente se modificó la geometría original (donde las partículas se encontraban en contacto entre ellas y con las paredes) realizándose una disminución del 1% del diámetro de las esferas, pero manteniendo su ubicación en la celda. Con este procedimiento se generaron pequeños espacios donde antes existían puntos de contacto entre superficies. De esta forma se eliminaron los puntos como tales, logrando evitar las dificultades que ellos generaban. Otros autores han reportado procedimientos similares para tratar los puntos de contacto entre superficies (Nijemeisland y Dixon, 2001; Guardo y colab., 2005).

A pesar de lo descrito, una vez eliminados los puntos de contacto, las zonas donde ellos se hallaban fueron consideradas críticas en la realización del mallado, ya que en esos sectores la sección de pasaje del fluido se estrecha de manera considerable. En tales regiones resulta necesario refinar la malla, mientras que, una malla más abierta puede considerarse aceptable en posiciones alejadas de las superficies. Se calculó la ubicación geométrica de todos los puntos críticos para la generación de la malla y se

volcó esta información en el pre-procesador *GAMBIT* a través de la incorporación de nodos que fueron utilizados para guiar el refinado de la malla. En todos los casos se utilizaron mallas no estructuradas conformadas por volúmenes tetraédricos.

Para construir la geometría de la celda se calculó previamente la ubicación de cada partícula dentro de la celda. En la Tabla 6.4 se presentan las coordenadas de los centros de las esferas utilizadas en la construcción de la geometría y en la Tabla 6.5 las coordenadas provenientes de los cálculos realizados para localizar los puntos críticos o nodos utilizados para refinar de la malla, ambas correspondientes al caso de la configuración romboédrica.

Estrato N°	Coordenadas			Estrato N°	Coordenadas		
	x	y	z		x	y	z
1	0	0,025	0	5	0	0,18829	0
	0,025	0,025	0,043301		0,025	0,18829	0,043301
	0	0,025	0,086602		0	0,18829	0,086602
2	0,025	0,06582	0,014434	6	0,025	0,22912	0,014434
	0	0,06582	0,057735		0	0,22912	0,057735
	0,025	0,06582	0,101036		0,025	0,22912	0,101036
3	0	0,10665	0	7	0	0,26995	0
	0,025	0,10665	0,043301		0,025	0,26995	0,043301
	0	0,10665	0,086602		0	0,26995	0,086602
4	0,025	0,14747	0,014434				
	0	0,14747	0,057735				
	0,025	0,14747	0,101036				

Tabla 6.4. Coordenadas centros de esferas utilizadas en la construcción de la celda. Arreglo romboédrico.

Debido a errores producidos por el programa *GAMBIT* durante la generación de las mallas como consecuencia del tamaño de la celda de cálculo (rellena con partículas esféricas de sólo 0,01 m de diámetro), se debió realizar un escalado de la geometría de la celda y efectuar el mallado para un sistema de mayor tamaño (se trabajó con esferas de 0.05 m de diámetro). Luego, en el programa *FLUENT*, previo al desarrollo de la simulación, se realizó un nuevo escalado para retornar a la grilla a su tamaño real con las partículas de 0.01 m de diámetro.

Ubicación de los nodos	Coordenadas			Ubicación de los nodos	Coordenadas		
	x	y	z		x	y	z
Estrato N° 1	0,024875	0,025	0,0866	Estrato N° 4/ Estrato N° 5	0,0125	0,16564835	0,0866
	0,0125	0,025	0,06495185		0,0125	0,1678864	0,0793855
	0,000125	0,025	0,0433012		0,025	0,1678864	0,05773505
	0,0125	0,025	0,02165055		0,0125	0,1678864	0,0360844
	0,024875	0,025	0		0	0,1678864	0,01443375
Estrato N° 1/ Estrato N° 2	0,0125	0,04765	0,0866	Estrato N° 5	0,0125	0,16564835	0
	0,0125	0,0454124	0,0793855		0,024875	0,188299	0,0866
	0,025	0,0454124	0,05773505		0,0125	0,188299	0,06495185
	0,0125	0,0454124	0,0360844		0,000125	0,188299	0,0433012
	0	0,0454124	0,01443375		0,0125	0,188299	0,02165055
	0,0125	0,04765	0		0,024875	0,188299	0
Estrato N° 2	0,000125	0,0658247	0,0721688	Estrato N° 5/ Estrato N° 6	0,0125	0,21094965	0
	0,0125	0,0658247	0,05051815		0	0,2087111	0,01443375
	0,024875	0,0658247	0,0288675		0,0125	0,2087111	0,0360844
	0,0125	0,0658247	0,00721685		0,025	0,2087111	0,05773505
Estrato N° 2/ Estrato N° 3	0,0125	0,0839988	0	Estrato N° 6	0,0125	0,2087111	0,0793855
	0	0,0862371	0,01443375		0,0125	0,21094965	0,0866
	0,0125	0,0862371	0,0360844		0,000125	0,22912375	0,0721688
	0,025	0,0862371	0,05773505		0,0125	0,22912375	0,05051815
	0,0125	0,0862371	0,0793855		0,024875	0,22912375	0,0288675
	0,0125	0,0839988	0,0866		0,0125	0,22912375	0,00721685
Estrato N° 3	0,024875	0,1066495	0,0866	Estrato N° 6/ Estrato N° 7	0,0125	0,24709785	0
	0,0125	0,1066495	0,06495185		0	0,24953575	0,01443375
	0,000125	0,1066495	0,0433012		0,0125	0,24953575	0,0360844
	0,0125	0,1066495	0,02165055		0,025	0,24953575	0,05773505
	0,024875	0,1066495	0		0,0125	0,24953575	0,0793855
Estrato N° 3/ Estrato N° 4	0,0125	0,1293001	0,0866	Estrato N° 7	0,0125	0,24709785	0,0866
	0,0125	0,1270617	0,0793855		0,024875	0,2699485	0,0866
	0,025	0,1270617	0,05773505		0,0125	0,2699485	0,06495185
	0,0125	0,1270617	0,0360844		0,000125	0,2699485	0,0433012
	0	0,1270617	0,01443375		0,0125	0,2699485	0,02165055
	0,0125	0,1293001	0		0,024875	0,2699485	0
Estrato N° 4	0,000125	0,1474742	0,0721688	Estrato N°7/ Pared superior	0,025	0,000125	0,0433012
	0,0125	0,1474742	0,05051815		0	0,000125	0,0866024
	0,024875	0,1474742	0,0288675		0	0,000125	0
	0,0125	0,1474742	0,00721685		0,025	0,2948235	0,0433012
			Estrato N°1/ Pared inferior	0	0,2948235	0,0866024	
				0	0,2948235	0	

Tabla 6.5. Coordenadas de nodos utilizados para guiar el refinado de la malla. Arreglo romboédrico.

6.3.1 Validación de la malla

En esta sección se describirá detalladamente el proceso de construcción y validación de la grilla para el arreglo espacial romboédrico. Para las restantes configuraciones estudiadas se aplica la misma metodología.

Una malla de alta calidad es imprescindible para alcanzar una solución precisa utilizando CFD. Una malla de baja calidad o mala resolución puede dar lugar a una solución incorrecta. Por esta razón es importante verificar la independencia de la solución del problema de la malla utilizada. El método estándar de comprobación de la independencia de la malla, también denominado validación de la malla, consiste en incrementar la resolución (en un factor de 2 en todas las direcciones, si es posible) y repetir la simulación. Si los resultados no cambian de manera considerable es probable que la malla original sea adecuada. Si, por el contrario, surgen diferencias importantes entre las dos soluciones, la malla original es considerada una resolución inadecuada. En ese caso debe probarse con una malla aún más fina hasta que se resuelva de manera satisfactoria. Este método de probar la independencia insume gran cantidad de tiempo y esfuerzo y, además, no siempre es factible de ser aplicado (tal como en numerosos casos de aplicaciones de ingeniería en 3D), debido a los altos requerimientos computacionales. Para flujos tridimensionales, duplicar el número de intervalos en cada dirección incrementa la cantidad de volúmenes de control en un factor de $2^3 = 8$. Es posible ver como los estudios de validación de la malla superan con facilidad los límites de capacidad de memoria de los equipos de computación. Cuando no es posible seguir este procedimiento, una buena regla empírica es la que consiste en incrementar el número de intervalos en por lo menos un 20% en todas las direcciones para probar la independencia de la malla (Cengel y Cimbala, 2006).

Las validaciones de las mallas utilizadas en este trabajo se efectuaron siguiendo esta última recomendación. Para la configuración romboédrica se ensayaron mallas con distinto grado de refinamiento (desde 651.339 a 3.273.384 volúmenes de control) para un valor de número de Reynolds constante ($Re_p=1000$), hasta identificar la de menor tamaño que lograba reproducir adecuadamente los parámetros definidos como referencia para la validación: *pérdida de carga* y *flujo de calor* a través de las superficies de temperatura constante. Se adoptó como situación de referencia la malla de 3.273.384 volúmenes de control (malla A en la Tabla 6.3). Con la misma se calcula

el flujo de calor total sobre la pared, Q_{REF} , y la pérdida de carga, ΔP_{REF} , que se utilizarán como criterio para la aceptación de mallas menos refinadas (mallas B-E, Tabla 6.6), a fin de realizar las simulaciones definitivas.

Malla	Número de elementos	Tamaño inicial	Velocidad de crecimiento	Tamaño límite	$Q [J s^{-1}]$	Error Q %	$\Delta P [Pa m^{-1}]$	Error ΔP %
A	3.273.384	0,00020	1,2	0,00075	0,82788		6.048,60	
B	2.331.396	0,00025	1,2	0,0009	0,81738	1,27	5.982,34	1,09
C	2.004.899	0,00025	1,2	0,001	0,802679	3,04	5.861,75	3,08
D	1.171.954	0,00030	1,2	0,0012	0,775321	6,34	5.710,79	5,58
E	651.339	0,00030	1,2	0,0015	0,726481	12,24	5.616.81	7,13

Tabla 6.6. Validación de la malla. Arreglo romboédrico

Las mallas se construyeron a través del ingreso de información al *software GAMBIT*, esencialmente a través de las *funciones de tamaño (size function)*, que manejan el tamaño de los elementos en que se divide el volumen para su tratamiento numérico posterior. La función de tamaño varía de acuerdo a tres parámetros: el *tamaño inicial (start size)*, que determina el tamaño de partida para el mallado en los puntos de la geometría que requieren de una malla más refinada, la *velocidad de crecimiento (growth rate)* que determina cómo los elementos van aumentando en su tamaño a partir de la célula inicial, y el *tamaño límite (size limit)* que impedirá la construcción de elementos de volumen de mayor tamaño que el especificado (Fluent, Inc., *Gambit Modeling Guide, 2006*). Los valores de los parámetros adoptados en este caso se muestran en la Tabla 6.6. Las funciones de tamaño se aplican a los nodos dibujados sobre la geometría de la celda, listados en la Tabla 6.5 para el arreglo romboédrico. El *software GAMBIT* se programa para que, a partir de ellos, se construya la grilla en tres dimensiones con el refinamiento concentrado en dichos nodos y una malla con volúmenes de control de mayor tamaño en las zonas menos críticas.

Siguiendo estos pasos se creó la malla y se efectuó la simulación para la situación de referencia que corresponde a la malla A. Luego, se ensayaron mallas de menor densidad (B-E en la Tabla 6.6) y se evaluó en cada caso el valor del flujo de

calor y la pérdida de carga. La Tabla 6.6 resume los resultados, incluyendo el error relativo a Q_{REF} y a ΔP_{REF} obtenido en cada caso.

En los valores que se muestran en la Tabla 6.6 se observa que el error aumenta al utilizar mallas más abiertas. Se adoptó como malla de trabajo la conformada por 2.331.396 volúmenes de control (Figura 6.11), que permite obtener el flujo de calor con un error menor que 1,3% y la pérdida de carga con un error inferior a 1,1%.

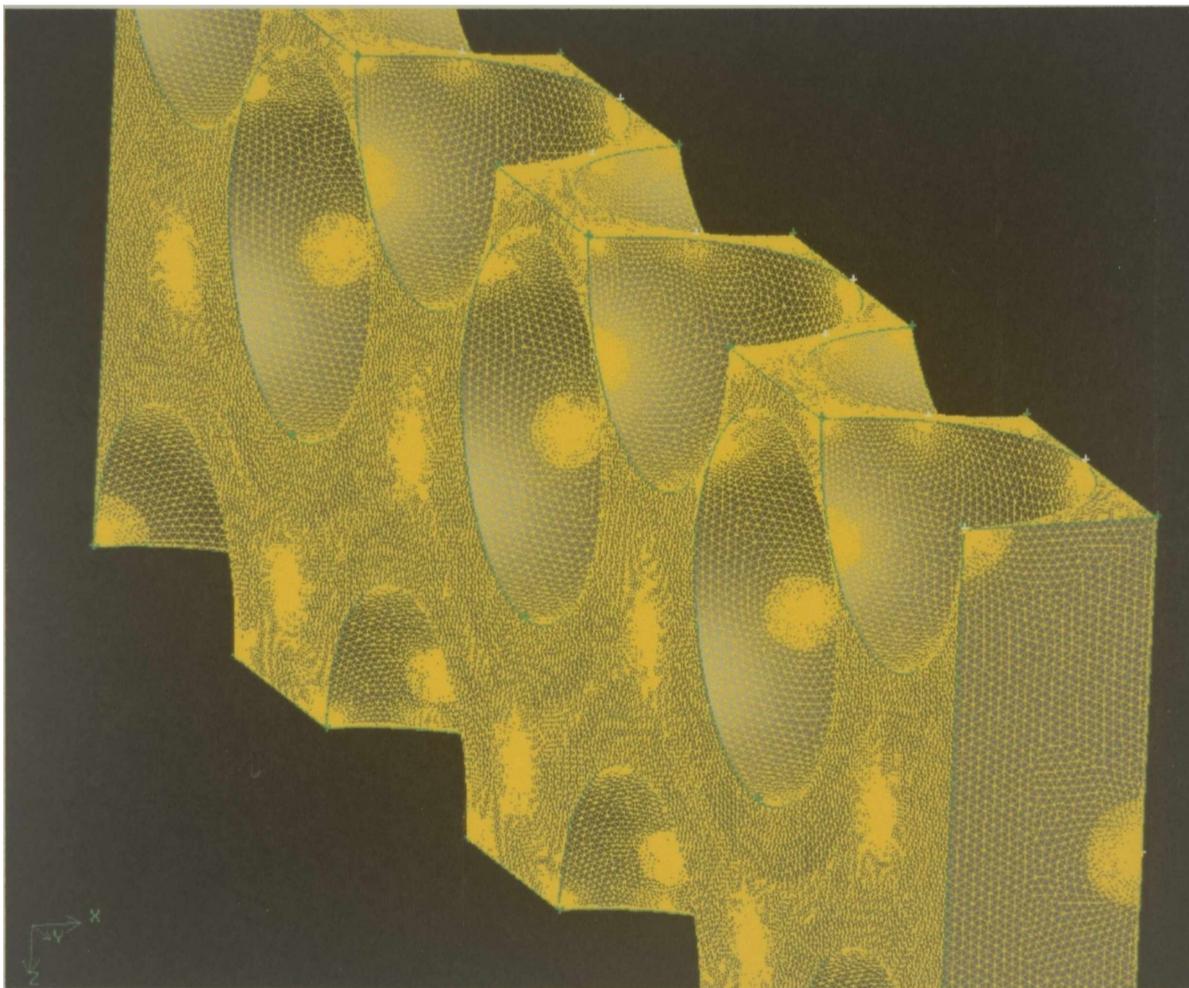


Figura 6.11. Malla para el arreglo romboédrico de 2.331.396 volúmenes de control.

El proceso descrito de construcción de la celda de cálculo y generación de la malla, se repitió para los arreglos ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto. En la Tabla 6.7 se resumen los tamaños de las grillas obtenidas y en las Figuras 6.12, 6.13 y 6.14 se muestran las mallas correspondientes a cada arreglo mencionado.

Con el objeto de mostrar la disposición de las partículas en la celda de cálculo y las zonas críticas donde fue necesario refinar la malla, se muestran las grillas sobre las superficies de las partículas y no se han incluido las correspondientes a las zonas por las que circula el fluido.

Arreglo geométrico	Nº volúmenes de control
Romboédrico	2.331.396
Ortorrómico	2.144.676
Cúbico	2.455.829
Cúbico compacto	2.349.359

Tabla 6.7. Cantidad de volúmenes de control en las grillas utilizadas en las simulaciones

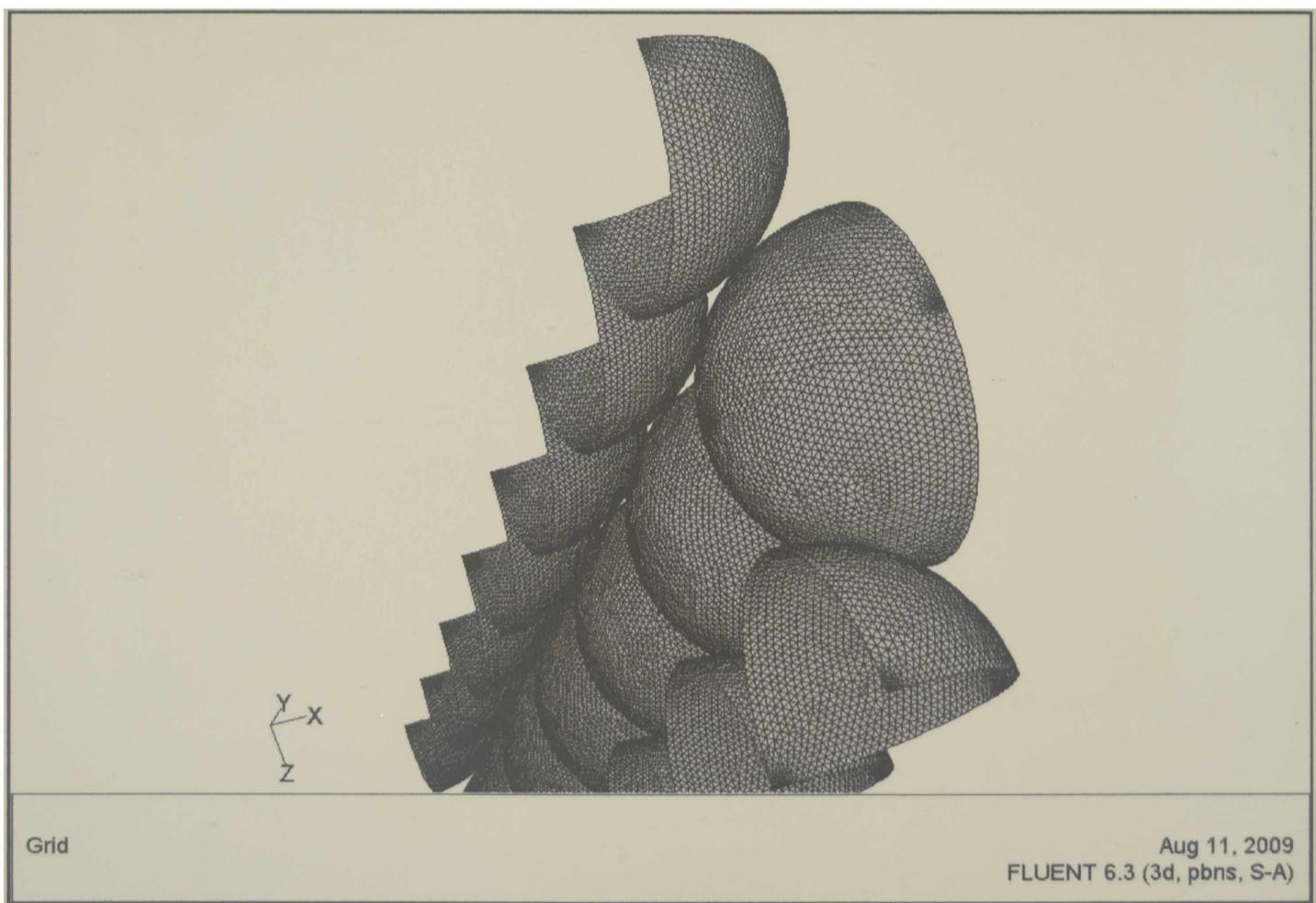


Figura 6.12. Malla para el arreglo Ortorrómico

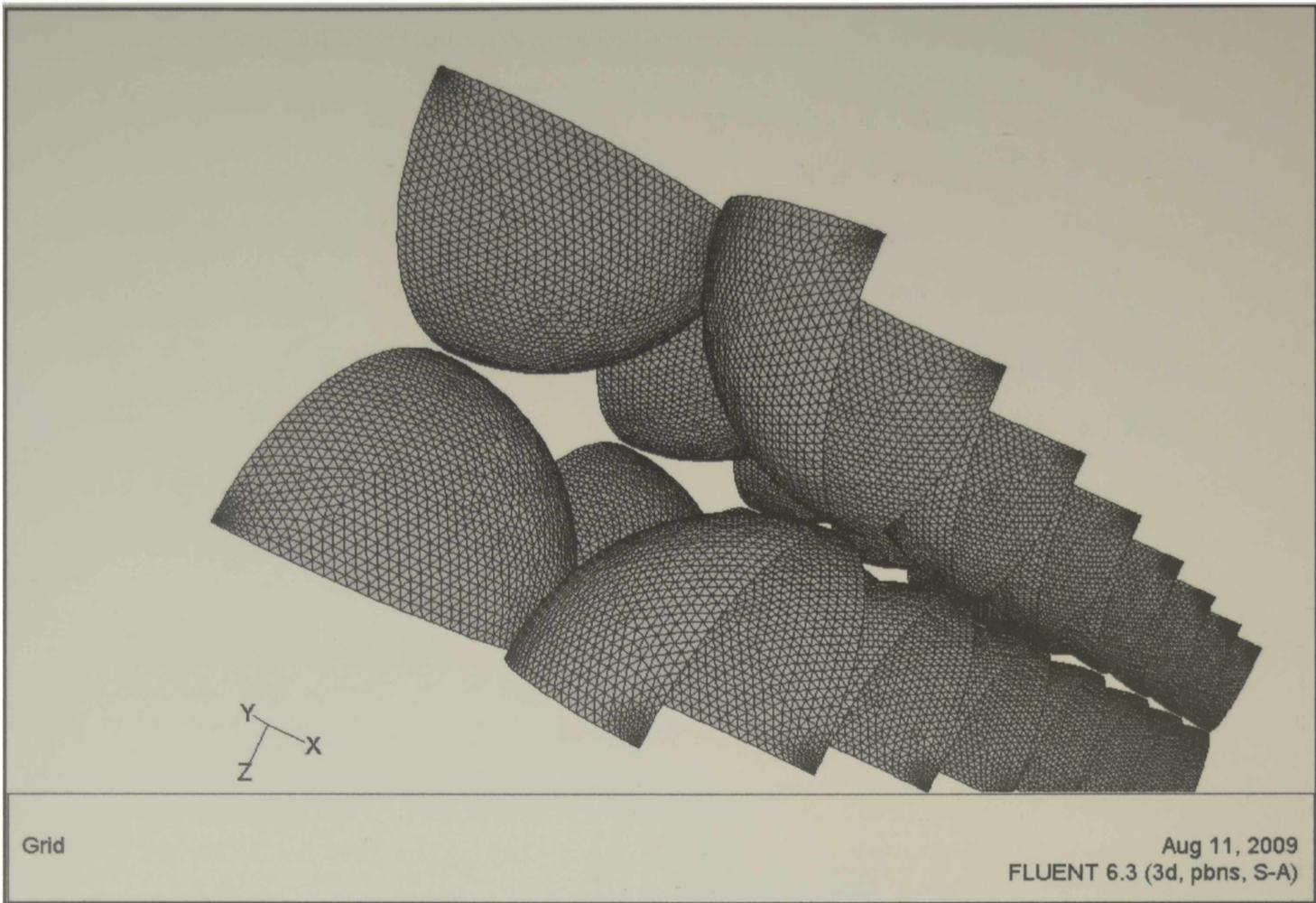


Figura 6.13. Malla para el arreglo Cúbico

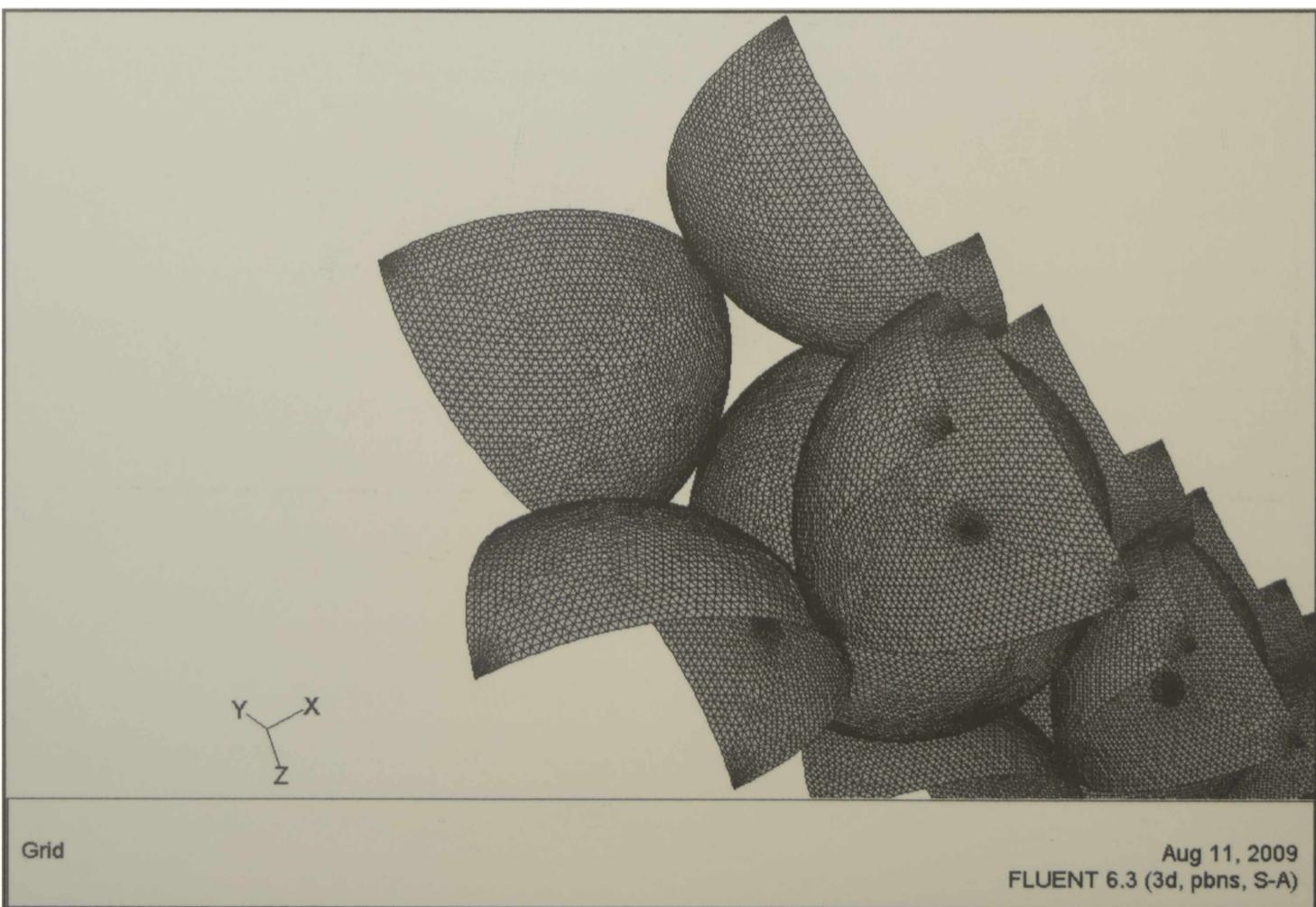


Figura 6.14. Malla para el arreglo Cúbico Compacto

Una vez construida la malla es importante verificar el valor del parámetro y^+ , distancia adimensional de la grilla a la pared, definido en el Capítulo V, sección 5.2.2.1. El valor requerido de este parámetro depende del tratamiento de la turbulencia en las zonas cercanas a las paredes que realice el modelo de turbulencia seleccionado. Tal como se explicará en la sección siguiente, para el modelo de turbulencia utilizado el Manual del Usuario (Fluent, 2006) recomienda cumplir con alguna de las siguientes restricciones en los valores del parámetro y^+ :

$$y^+ < 5 \quad (A1)$$

$$30 < y^+ < 300 \quad (A2)$$

Es importante señalar que y^+ no es una magnitud geométrica fija, sino que su valor depende de la solución de la simulación. Por lo tanto su valor sólo puede conocerse luego de realizada la simulación con el programa *FLUENT*.

Debido a la presencia en la geometría de las celdas de cálculo de zonas de pasaje de fluido sumamente estrechas entre partículas y entre las partículas y la pared, no es posible construir grillas que cumplan con la condición $30 < y^+ < 300$, ya que al menos es necesario contar con un volumen de control en la zona donde se hubiesen hallado efectivamente los puntos de contacto partícula-partícula y partícula-pared.

Por dicha razón, las celdas de cálculo construidas para los cuatro arreglos geométricos deberían, en principio, haberse mallado con grillas lo suficientemente refinadas como para cumplir con la recomendación $y^+ < 5$.

En tal sentido, se verificó que en las condiciones operativas de menores valores del número de Reynolds ($Re_p < 1000$), en general, se satisface la restricción dada por la inecuación (A1). No obstante, al aumentar el Re_p se alcanzan valores máximos de y^+ cercanos a diez en algunos de los arreglos geométricos estudiados.

La única alternativa para solucionar este inconveniente consiste en aumentar aún más el refinamiento de la malla. En los intentos realizados, se incrementó el refinamiento de la malla y consecuentemente el tiempo de cálculo sin observarse mejoras importantes en los valores de y^+ . Refinamientos mayores de la grilla conducirían a un incremento en los requerimientos de capacidad de cómputo (el tamaño de la grilla está directamente relacionada con el requerimiento de memoria RAM

disponible) y a tiempos de simulación excesivamente grandes que superarían la capacidad de los recursos disponibles. Ante esta situación el consultor técnico de *FLUENT (ANSYS)* indicó que es factible utilizar una grilla con las características mencionadas siempre y cuando la zona afectada por valores elevados de y^+ no sea demasiado extensa.

A fin de dar mayor sustento a la aplicación se analizó la evidencia disponible en la bibliografía. Para sistemas constituidos por lechos fijos rellenos con partículas esféricas, Guardo y colab. (2004), Guardo y colab. (2005) y Coussirat y colab. (2007) informaron coincidentemente en sus publicaciones la imposibilidad de cumplir con el rango recomendado para el parámetro y^+ (inecuación A1 o A2). Los autores utilizaron en sus simulaciones el modelo de turbulencia de Spalart-Allmaras.

Por lo expuesto, se decidió la utilización de mallas validadas que, si bien no cumplen en todo el rango de caudales simulados con la recomendación original del *software FLUENT*, presentan sólo zonas puntuales y de área no demasiado extensa, afectadas por valores de $y^+ > 5$. Tal como puede observarse en la Tabla 6.8 en ningún caso el valor *promedio* del parámetro y^+ supera el límite recomendado de 5.

Re_p		Romboédrico	Ortorrómico	Cúbico	Cúbico Compacto
250	$y^+ \text{ máximo}$	2,95	2,28	1,67	2,77
	$y^+ \text{ medio}$	1,05	0,91	0,49	0,98
500	$y^+ \text{ máximo}$	4,72	3,76	2,73	4,32
	$y^+ \text{ medio}$	1,78	1,57	0,91	1,49
750	$y^+ \text{ máximo}$	5,98	4,89	3,70	5,75
	$y^+ \text{ medio}$	2,37	2,01	1,27	2,05
1000	$y^+ \text{ máximo}$	6,90	5,85	4,68	6,87
	$y^+ \text{ medio}$	2,91	2,57	1,59	2,42
1250	$y^+ \text{ máximo}$	7,83	6,76	5,01	7,31
	$y^+ \text{ medio}$	3,31	3,02	1,75	2,84
1500	$y^+ \text{ máximo}$	8,58	7,26	5,97	8,46
	$y^+ \text{ medio}$	3,66	3,31	2,16	3,30
1750	$y^+ \text{ máximo}$	9,79	7,92	6,39	9,49
	$y^+ \text{ medio}$	4,01	3,69	2,41	3,56
2000	$y^+ \text{ máximo}$	10,70	8,81	6,61	9,935
	$y^+ \text{ medio}$	4,31	3,98	2,52	3,89

Tabla 6.8. Valores máximos y promedio del parámetro y^+ en función de Re_p

En las Figuras 6.15, 6.16, 6.17 y 6.18 se muestran diagramas de contorno del parámetro y^+ para los arreglos de partículas romboédrico, ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto, respectivamente. En estos gráficos, y^+ fue evaluado en la condición más desfavorable que corresponde a $Re_p=2000$ (el mayor valor utilizado).

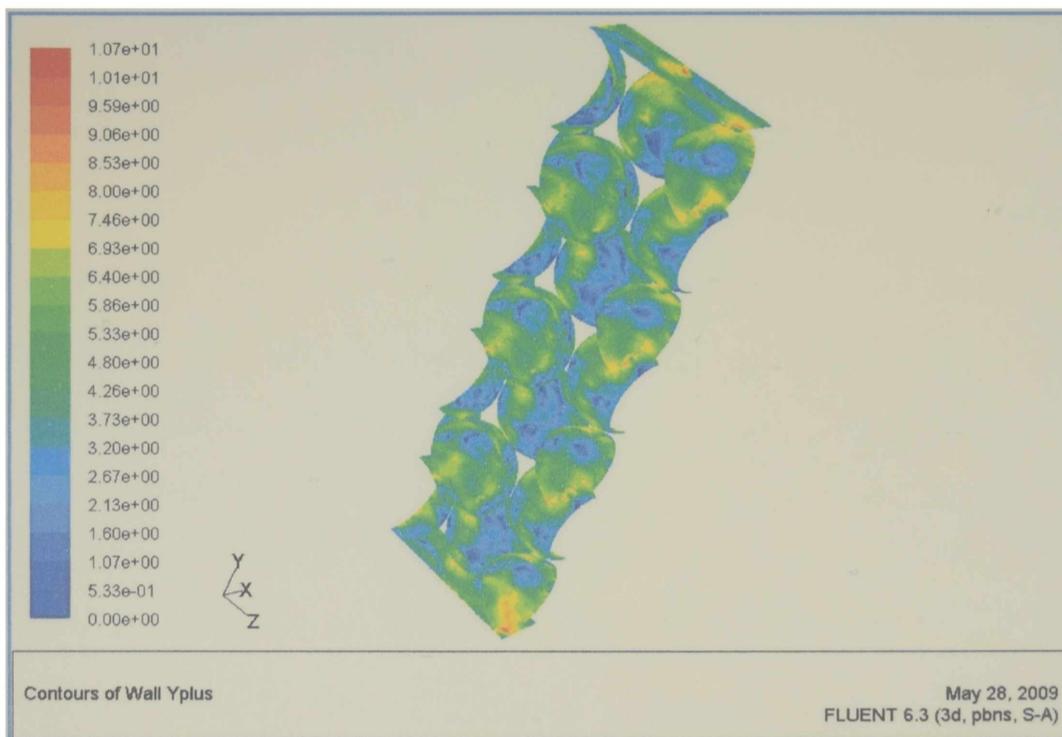


Figura 6.15. Valores del parámetro y^+ Arreglo romboédrico. $Re_p=2000$.

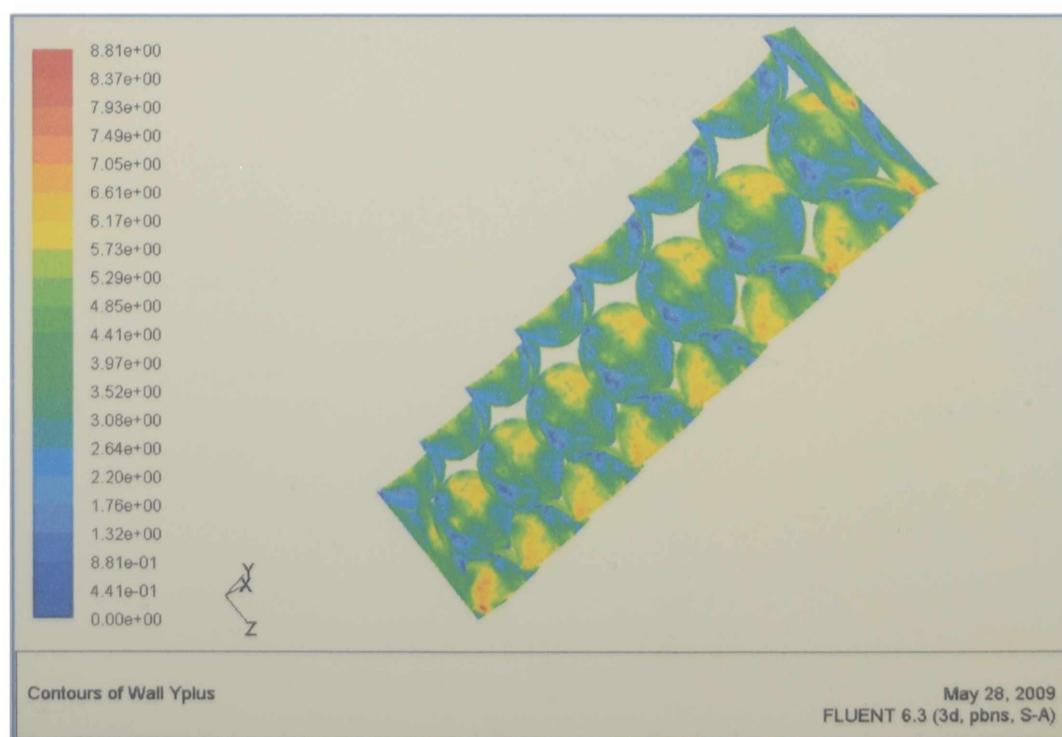


Figura 6.16. Valores del parámetro y^+ . Arreglo ortorrómbico. $Re_p=2000$.

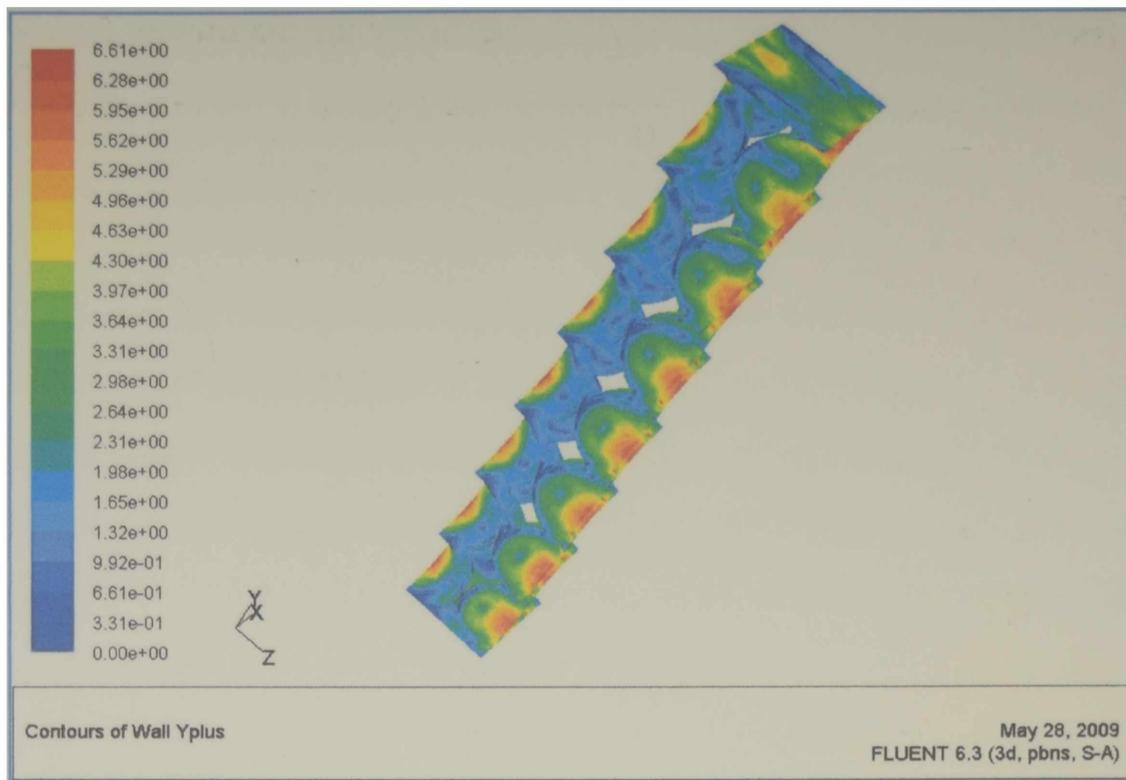


Figura 6.17. Valores del parámetro y^+ Arreglo cúbico. $Re_p=2000$.

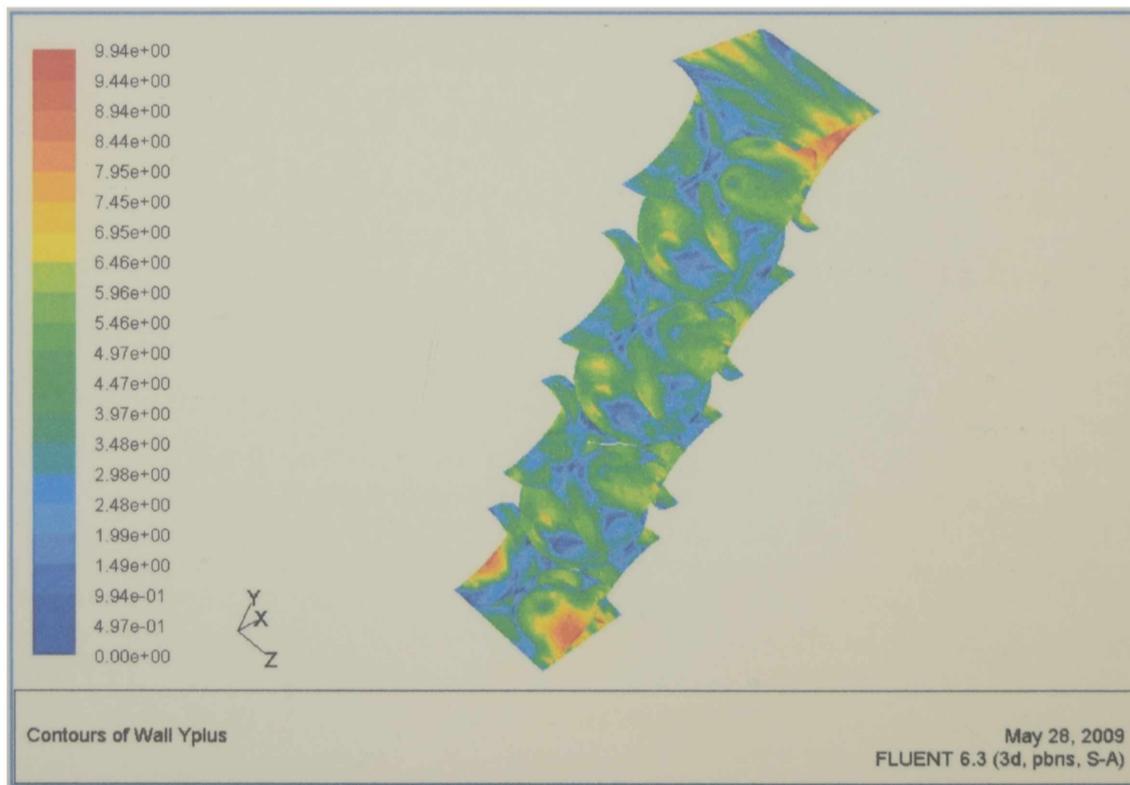


Figura 6.18. Valores del parámetro y^+ . Arreglo cúbico compacto. $Re_p=2000$.

6.4 Selección del modelo de turbulencia

Actualmente, no existe ningún modelo de turbulencia universalmente aceptado como óptimo para la resolución de problemas de ingeniería. Como se mencionó en el Capítulo V, la elección del modelo de turbulencia dependerá fundamentalmente de las

de las condiciones físicas y de las características del flujo de fluido a simular, de la capacidad de cálculo computacional y del tiempo disponible para realizar la simulación.

En la primera etapa de este estudio se realizaron simulaciones preliminares empleando los modelos de turbulencia más difundidos: Estándar k- ϵ , RNG k- ϵ y Spalart-Allmaras. Los dos primeros modelos se ensayaron utilizando las distintas alternativas de *funciones de pared* disponibles para ser seleccionadas por el usuario en el programa *FLUENT*: Estándar (*Standard wall functions*), No-equilibrio (*Non-equilibrium wall functions*) y Mejorado (*Enhanced wall treatment*). El modelo Spalart-Allmaras si bien incluye dos alternativas para el tratamiento de la zona cercana a la pared, selecciona en forma automática la opción más adecuada en función del valor del parámetro y^+ (Apéndice VI.1)

En los resultados de estas simulaciones pudo observarse que los valores calculados de pérdida de carga a través del lecho son similares para todos los modelos utilizados. Sin embargo, se observó que sólo con el modelo Spalart-Allmaras se logra una convergencia aceptable para el balance de energía. Con las distintas variantes del modelo de turbulencia k- ϵ se obtuvieron errores que en algunos casos llegaron al 20%. El error del balance de energía utilizando el modelo Spalart-Allmaras fue en todos los casos inferior al 5%.

También es importante señalar que, tal como se detalló en la sección anterior, los valores obtenidos del parámetro y^+ se encuentran en el rango $0 < y^+ < 10$. Esta situación impide realizar una selección adecuada de la alternativa para modelar de la turbulencia en la zona cercana a la pared cuando se utilizan los métodos Estándar k- ϵ , y RNG k- ϵ , para los cuales se recomienda emplear *Standard wall functions* ó *Non-equilibrium wall functions* cuando $30 < y^+ < 300$ y *Enhanced wall treatment* para $y^+ < 5$. Para $0 < y^+ < 10$ se debería seleccionar uno de los tratamientos mencionados aún sabiendo que se trabajará fuera del rango recomendado y sin un criterio formado. Una de las ventajas del modelo Spalart-Allmaras radica en que, a diferencia de los modelos citados anteriormente, selecciona automáticamente el tipo de tratamiento a aplicar para tratar la turbulencia en las zonas cercanas a las paredes.

Adicionalmente, para realizar la selección del modelo de turbulencia a utilizar se consideró el estudio reportado por Guardo y colab. (2005). En dicha publicación se analizan los modelos de turbulencia utilizados en este trabajo (Estándar k- ϵ y Spalart-

Allmaras) y, adicionalmente, los modelos RNG k- ϵ , Reliazable k- ϵ y Estándar k- ω , que fueron mencionados en el Capítulo V. Los autores concluyen que el modelo Spalart-Allmaras muestra mejor concordancia (con respecto a correlaciones empíricas de uso habitual) que el resto de los modelos ensayados, tanto para la evaluación de la pérdida de carga como para la estimación de los parámetros de transferencia de calor.

En virtud de la discusión que antecede, se seleccionó el modelo Spalart-Allmaras, para llevar a cabo las simulaciones completas en régimen turbulento. Para la evaluación de la pérdida de carga, exclusivamente, se efectuaron en casos puntuales, simulaciones utilizando el modelo Estándar k- ϵ con el objeto de analizar la influencia del modelo de turbulencia.

En los Apéndices VI.1 y VI.2 se describen las principales características de los modelos de turbulencia Spalart-Allmaras y Estándar k- ϵ respectivamente.

6.5 Principales características de la implementación de la simulación por CFD

A continuación se describe la metodología seguida en la implementación de las simulaciones en el programa *FLUENT*:

- Se utilizó el método *Pressure based* de resolución, que consiste en resolver las ecuaciones de gobierno discretizadas en forma secuencial (segregada) en cada ciclo de iteración. De los tres algoritmos disponibles para el método *Pressure based* se trabajó con el denominado SIMPLE. Se trabajó con simple precisión, ya que ensayos de prueba demostraron la inconveniencia de utilizar doble precisión (se incrementa el tiempo de cálculo sin lograr una mejora apreciable en la calidad de los resultados).
- Todas las simulaciones en el programa *FLUENT* se realizaron en dos etapas, inicialmente se resolvieron los balances de materia, cantidad de movimiento y ecuaciones de turbulencia, y una vez lograda la convergencia, en una segunda etapa, se continuó la simulación a fin de alcanzar la solución del balance de energía.
- En todos los casos las iteraciones se realizaron inicialmente con esquemas de discretización de primer orden, para luego pasar a esquemas de segundo orden que arrojan resultados más precisos. Sólo estrictamente bajo este modo de operación se logró alcanzar la convergencia, particularmente para valores elevados de Re_p .

- En las simulaciones se modificaron gradualmente los factores de sub-relajación durante las iteraciones iniciales, con discretizaciones de primer orden. Una vez alcanzados valores bajos de los residuos y una tendencia adecuada resulta factible pasar a trabajar con discretizaciones de segundo orden, siendo luego innecesario modificar estos factores. En todos los casos se trabajó con factores de sub-relajación finales de 0,7 para la presión, 0,3 para cantidad de movimiento y 0,95 para el balance de energía térmica. En los casos de simulaciones con flujos turbulentos los factores de sub-relajación de las variables que controlan la turbulencia adoptaron valores finales de 0,88.
- La convergencia numérica del modelo fue evaluada en base a la disminución de los residuos normalizados de las variables calculadas. El programa *FLUENT* presenta permanentemente gráficos de los residuos que permiten realizar su seguimiento durante el desarrollo del cálculo. Adicionalmente se monitorearon las tendencias de las variables pérdida de carga y flujo de calor sobre las dos superficies de temperatura constante. Se consideraron finalizadas las simulaciones, para cantidad de movimiento y turbulencia, cuando se alcanzaron valores de los residuos del orden de 10^{-5} , verificándose, además, que el valor de la pérdida de carga permaneciese invariable. Para los cálculos del balance de energía térmica, se trabajó con valores de los residuos del orden de 10^{-8} y también se requirieron valores constantes de los flujos de calor sobre las paredes de temperatura constante, que fueron permanentemente monitoreados.
- El tiempo de cómputo para cada simulación estuvo comprendido entre 36 y 48 horas, en función de la malla utilizada y del Re_p correspondiente. Para alcanzar la convergencia se requirieron entre 11.000 y 15.000 iteraciones.

6.6 Conclusiones

En este capítulo se llevó a cabo el análisis de las distintas alternativas disponibles para efectuar las simulaciones por CFD.

Para representar la pared del tubo que contiene al lecho de partículas, se decidió utilizar una geometría conformada por placas paralelas en lugar de un conducto circular. Se resolvió que la celda de cálculo estará limitada por dos paredes planas, dos fronteras

simétricas y fronteras periódicas en las secciones de entrada y salida del flujo de gas. El lecho estará conformado por partículas esféricas regulares dispuestas en diversos arreglos geométricos estructurados (romboédrico, ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto), lo que permitirá representar lechos fijos de diferentes porosidades.

Con el objeto de poder “aislar” para su análisis el proceso de transferencia de calor sobre una de las paredes de temperatura constante, se resolvió construir las celdas con siete estratos de partículas entre las dos placas planas de temperatura constante.

Se detalló en este capítulo el proceso de generación y validación de las mallas correspondientes a los cuatro arreglos de partículas utilizados.

Además, se seleccionó como modelo de turbulencia para llevar a cabo las simulaciones completas en régimen turbulento (incluyendo fluidodinámica y transferencia de calor) al modelo de Spalart-Allmaras.

Finalmente, se describieron las principales características de la implementación de las simulaciones por CFD utilizando el programa *FLUENT*.

APÉNDICE VI.1

Modelo de turbulencia Spalart-Allmaras

El modelo de Spalart-Allmaras es un modelo relativamente simple que, tal como se explicó en el Capítulo V, sección 5.2.4, está basado en la hipótesis de Boussinesq. Fue diseñado específicamente para aplicaciones aeroespaciales con flujos limitados por paredes y ha demostrado tener buenos resultados en la simulación de capas límites sometidas a gradientes de presión adversos. Pertenece a una clase relativamente nueva de modelos de una ecuación, en los que no es necesario que el usuario calcule la escala de longitud relativa y^+

En su forma original, este modelo es efectivo a bajos números de Reynolds, requiriendo que la región afectada por la viscosidad en la capa límite sea correctamente resuelta (malla muy refinada en las zonas cercanas a las paredes). Sin embargo, la implementación de este modelo en *FLUENT*, permite el uso de mallas más abiertas y no presenta restricciones en el número de Reynolds.

Este modelo exhibe varias características numéricas favorables. Su resolución es “local”, lo que significa que la ecuación en un punto no depende de la solución en otros puntos, por consiguiente, puede ser fácilmente implementado en grillas tanto estructuradas como no-estructuradas. Además es robusto, converge rápidamente y requiere sólo un refinado moderado de la grilla en la zona cercana a la pared.

Como desventaja puede mencionarse que el modelo es relativamente nuevo y no ha sido probado aun en algunos tipos de flujos complejos que se presentan en ciertos sistemas ingenieriles.

El problema central, en los modelos de turbulencia RANS que emplean el enfoque de Boussinesq, es cómo evaluar la viscosidad turbulenta, tal como se detalló en la sección 5.2.4 del Capítulo V. La variable de transporte que calcula el modelo de Spalart Allmaras, $\tilde{\nu}$, es idéntica a la viscosidad turbulenta cinemática, excepto en la zona cercana a la pared.

La viscosidad turbulenta cinemática, ν_t , es calculada como:

$$\nu_t = \tilde{\nu} f_{\nu_t} \quad (\text{AVI.1})$$

donde, la función de amortiguamiento viscoso, f_{v1} , está dada por:

$$f_{v1} = \frac{\chi^3}{\chi^3 + C_{v1}^3} \quad (\text{AVI.2})$$

y

$$\chi \equiv \frac{\tilde{\nu}}{\nu} \quad (\text{AVI.3})$$

donde C_{v1} es una constante.

La ecuación de transporte para $\tilde{\nu}$ es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \tilde{\nu}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho_g \tilde{\nu} u_i) = G_\nu + \frac{1}{\sigma_{\tilde{\nu}}} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ (\mu + \rho_g \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right\} + C_{b2} \rho_g \left(\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right)^2 \right] - Y_\nu + S_{\tilde{\nu}} \quad (\text{AVI.4})$$

donde G_ν , es la generación de viscosidad turbulenta e Y_ν es la destrucción de viscosidad turbulenta que ocurre en la región cercana a la pared debido a los efectos viscosos y al bloqueo producido por la pared. $\sigma_{\tilde{\nu}}$ y C_{b2} son constantes y μ es la viscosidad molecular. $S_{\tilde{\nu}}$ es un término fuente definido por el usuario.

El termino de generación, G_ν , es calculado como,

$$G_\nu = C_{b1} \rho_g \tilde{S} \tilde{\nu} \quad (\text{AVI.5})$$

donde,

$$\tilde{S} = S + \frac{\tilde{\nu}}{\kappa^2 d^2} f_{v2} \quad (\text{AVI.6})$$

$$f_{v2} = 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}} \quad (\text{AVI.7})$$

C_{b1} y κ son constantes, d , es la distancia a la pared, y S es una medida escalar del tensor de deformación. Por defecto, en *FLUENT*, al igual que en el modelo original propuesto por Spalart y Allmaras, S está basado en la magnitud de la vorticidad:

$$S = \sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}} \quad (\text{AVI.8})$$

donde Ω_{ij} es el tensor de velocidad de rotación medio y está definido por:

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{AVI.9})$$

La adopción de la expresión para el cálculo de S , se justifica porque para los flujos limitados por paredes, que constituían el interés principal cuando se formulo el modelo, se encuentra turbulencia sólo como consecuencia de la vorticidad generada por la cercanía de las paredes. Sin embargo, estudios posteriores realizados han demostrado que también es necesario tener en cuenta el efecto de las tensiones en la producción de turbulencia, con lo cual se ha propuesto una modificación al modelo que fue incorporada al programa *FLUENT*.

La modificación planteada combina medidas de los tensores de rotación y tensión en la definición de S :

$$S = |\Omega_{ij}| + C_{prod} \min(0, |S_{ij}| - |\Omega_{ij}|) \quad (\text{AVI.10})$$

donde,

$$C_{prod} = 2.0, \quad |\Omega_{ij}| = \sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}}, \quad |S_{ij}| = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (\text{AVI.11})$$

con la razón de tensiones promedio, S_{ij} , definida como:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (\text{AVI.12})$$

Al incluir los efectos de los tensores de rotación y tensión, se reduce la producción de viscosidad turbulenta y se obtiene una predicción más exacta sobre los efectos de rotación en la turbulencia. Al considerar el tensor de rotación solamente, se tiende a predecir sobreestimando la producción de la viscosidad turbulenta y por lo tanto la viscosidad turbulenta misma en ciertas circunstancias.

El término de destrucción de viscosidad turbulenta, Y_ν , es calculado de la siguiente manera:

$$Y_\nu = C_{w1} \rho_g f_w \left(\frac{\bar{v}}{d} \right)^2 \quad (\text{AVI.13})$$

donde

$$f_w = g \left[\frac{1 + C_{w3}^6}{g^6 + C_{w3}^6} \right]^{1/6} \quad (\text{AVI.14})$$

$$g = r + C_{w2} (r^6 - r) \quad (\text{AVI.15})$$

$$r \equiv \frac{\tilde{v}}{\tilde{S} \kappa^2 d^2} \quad (\text{AVI.16})$$

C_{w1} , C_{w2} , C_{w3} y κ son constantes y \tilde{S} esta dado por la ecuación 6.13.

Las constantes del modelo, C_{b1} , C_{b2} , $\sigma_{\tilde{v}}$, C_{v1} , C_{w1} , C_{w2} , C_{w3} y κ , poseen los siguientes valores por defecto (Fluent User's Guide, 2006):

$$\left. \begin{aligned} C_{b1} = 0,1355, \quad C_{b2} = 0,622, \quad \sigma_{\tilde{v}} = \frac{2}{3}, \quad C_{v1} = 7,1 \\ C_{w1} = \frac{C_{b1}}{\kappa^2} + \frac{(1+C_{b2})}{\sigma_{\tilde{v}}}, \quad C_{w2} = 0,3, \quad C_{w3} = 2,0, \quad \kappa = 0,4187 \end{aligned} \right\} \quad (\text{AVI.17})$$

Modelado de la transferencia de calor:

En el programa *FLUENT*, el transporte de calor turbulento utilizando el modelo de Spalart-Allmaras es modelado según la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g E) + \frac{\partial}{\partial x_i} [u_i (\rho_g E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(k + \frac{c_p \mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial T}{\partial x_j} + u_i (\tau_{ij})_{eff} \right] + S_h \quad (\text{AVI.18})$$

donde k , es la conductividad térmica, E es la energía total, S_h es un término fuente definido por el usuario y $(\tau_{ij})_{eff}$ es el tensor esfuerzo, definido en términos de la viscosidad turbulenta como:

$$(\tau_{ij})_{eff} = \mu_{eff} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \mu_{eff} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \delta_{ij} \quad (\text{AVI.19})$$

el término que involucra $(\tau_{ij})_{eff}$ representa el calentamiento viscoso. δ_{ij} es un tensor unitario (1 en la diagonal y 0 en las demás posiciones) y μ_{eff} es la viscosidad efectiva.

El valor por defecto para el número de Prandtl turbulento, Pr_t , es 0,85. Este valor puede ser modificado por el usuario.

Condiciones de borde sobre paredes:

Sobre paredes que limiten el flujo, la viscosidad turbulenta modificada, $\tilde{\nu}$, toma el valor cero. Cuando la malla es suficientemente fina como para resolver la subcapa laminar, se obtiene el esfuerzo de corte sobre la pared, τ_w , a partir de la relación:

$$\frac{u}{u_\tau} = \frac{\rho_g u_\tau y}{\mu} \quad (\text{AVI.20})$$

donde y es la distancia normal a la pared, u es la *velocidad paralela a la pared* y u_τ es la *velocidad característica sobre la pared*, definida como: $u_\tau = \sqrt{\tau_w / \rho_g}$ (Ranade, 2002).

Si la malla es demasiado abierta como para resolver la subcapa laminar, se supone que el centroide de la celda cercana a la pared cae dentro de la región logarítmica de la capa límite y se utiliza la *ley de la pared*:

$$\frac{u}{u_\tau} = \frac{1}{k} \ln \left[E \left(\frac{\rho_g u_\tau y}{\mu} \right) \right] \quad (\text{AVI.21})$$

donde k la constante de von Kármán ($k=0,4187$) y $E=9,793$.

El *software FLUENT* emplea como valor de transición el punto de intersección entre los dos tratamientos descriptos (ecuaciones AVI.20 y AVI.21), que ocurre en $y^+=11.225$.

Recomendaciones para el mallado en zonas cercanas a paredes:

El modelo de Spalart-Allmaras en su formulación original fue desarrollado para ser utilizado con mallas que permitieran resolver adecuadamente la región cercana a la pared. Por lo tanto para obtener el máximo beneficio de este modelo, la malla de la zona cercana a la pared debía ser tal que los valores de la variable y^+ (definida en el Capítulo

V, sección 5.2.4.2) se acercaran a la condición: $y^+ = 1$.

Sin embargo, las condiciones de borde del modelo de Spalart Allmaras, como se mencionó en la sección anterior, han sido implementadas en *FLUENT* de forma tal que el modelo de turbulencia funcione adecuadamente con mallas menos refinadas, tales como las utilizadas en el enfoque *funciones de pared*.

De esta forma, para obtener buenos resultados con el modelo de Spalart-Allmaras, se recomienda utilizar o una malla muy refinada cerca de la pared ($y^+ < 5$) o una malla más abierta tal que $30 < y^+ < 300$ como las requeridas para aplicar las *funciones de pared* con modelos tales como Estándar k - ϵ . Se recomienda que las mallas sean lo suficientemente abiertas o lo suficientemente finas como para evitar que las celdas cercanas a la pared se localicen en la subcapa de transición o *buffer* ($y^+ = 5 \sim 30$).

No obstante, es importante recordar que al aplicar el modelo de turbulencia de Spalart Allmaras no debe optarse por un tratamiento específico sobre la pared (como ocurre con Estándar k - ϵ), sino que es definido automáticamente por el software.

Modelo de turbulencia Estándar k - ϵ

El modelo Estándar k - ϵ es un modelo semi-empírico basado en el enfoque de Boussinesq, que evalúa la viscosidad turbulenta basándose en ecuaciones de transporte modeladas para el cálculo de la energía cinética turbulenta, k , y su tasa de disipación, ϵ .

En el desarrollo del modelo Estándar k - ϵ se asumió que el flujo es totalmente turbulento y que los efectos de la viscosidad molecular son insignificantes. De esta manera, este modelo tiene validez solo para flujos totalmente turbulentos.

La viscosidad turbulenta, μ_t , se calcula combinando k y ϵ como se indica en la siguiente ecuación:

$$\mu_t = \rho_g C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (\text{AVI.22})$$

donde C_μ es una constante.

La energía cinética turbulenta, k , y su tasa de disipación, ε , se obtienen a partir de las siguientes ecuaciones de transporte:

$$\frac{\partial(\rho_g k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_i k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + G_k + G_b - \rho_g \varepsilon - Y_M + S_k \quad (\text{AVI.23})$$

$$\frac{\partial(\rho_g \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_g u_i \varepsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + (C_{3\varepsilon}) G_b) - C_{2\varepsilon} \rho_g \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (\text{AVI.24})$$

En estas ecuaciones, G_k es la generación de energía cinética turbulenta, debida a los gradientes de la velocidad media, y es definida por:

$$G_k = -\rho_g \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (\text{AVI.25})$$

G_b es la generación de energía cinética turbulenta debida al empuje:

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (\text{AVI.26})$$

Pr_t es el número de Prandtl turbulento, que por defecto adopta el valor 0,85 (este valor puede ser modificado por el usuario); g_i es la componente del vector gravedad en la dirección i y β es el coeficiente de expansión térmico definido como:

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho_g}{\partial T} \right)_p \quad (\text{AVI.27})$$

Y_M representa la contribución de la dilatación fluctuante para turbulencia compresible, a la tasa de disipación global. $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ y $C_{3\varepsilon}$ son constantes. σ_k y σ_ε son los números de Prandtl turbulentos para k y ε respectivamente. S_k y S_ε son términos fuente definidos por el usuario (Fluent User Guide, 2006, Cap. 11).

Constantes del modelo:

Las constantes del modelo tienen, por defecto, los siguientes valores:

$$C_{1\varepsilon} = 1,44 \quad C_{2\varepsilon} = 1,92 \quad C_\mu = 0,099 \quad \sigma_k = 1,0 \quad \sigma_\varepsilon = 1,3$$

Estos valores han sido establecidos a partir de datos tomados de experiencias efectuadas con aire y agua. Si bien se ha probado su validez para un amplio rango de condiciones de flujo, es factible la modificación de las mismas por el usuario.

Modelado de la transferencia de calor:

En el programa *FLUENT*, el transporte de calor turbulento utilizando el modelo Estándar $k-\varepsilon$ es modelado según la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_g E) + \frac{\partial}{\partial x_i} [u_i (\rho_g E + p)] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial x_j} + u_i (\tau_{ij})_{\text{eff}} \right) + S_h \quad (\text{AVI.28})$$

donde E es la energía total k_{eff} es la conductividad térmica efectiva y $(\tau_{ij})_{\text{eff}}$ es el tensor esfuerzo, definido como:

$$(\tau_{ij})_{\text{eff}} = \mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \mu_{\text{eff}} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \delta_{ij} \quad (\text{AVI.29})$$

el término que involucra $(\tau_{ij})_{\text{eff}}$ representa el calentamiento viscoso.

La conductividad térmica efectiva está dada por:

$$k_{\text{eff}} = k + \frac{c_p \mu_t}{Pr_t} \quad (\text{AVI.30})$$

donde k es la conductividad térmica molecular.

Recomendaciones para el mallado en zonas cercanas a paredes:

El modelo Estándar $k-\varepsilon$ es originalmente válido para regiones de flujo alejadas de las paredes. Por dicha razón requiere que el usuario defina el tipo de tratamiento a aplicar en la zona cercana a la pared (“*wall functions*” ó “*enhanced wal treatment*”).

Para seleccionar el tipo de tratamiento es importante considerar las siguientes recomendaciones, basadas en los valores de la variable y^+ (definida en el Capítulo V, sección 5.2.2.1):

- Para aplicar las funciones de pared estándar y de no-equilibrio, el centroide de cada una de las celdas adyacentes a la pared debe estar localizado dentro de la capa de variación logarítmica, donde se cumple que $30 < y^+ < 300$.
- Siempre que sea posible, la malla debe ser tal que las celdas adyacentes a la pared no se localicen dentro de la capa de amortiguación ó *buffer* ($y^+ = 5 \sim 30$).
- Para utilizar el tratamiento “*enhanced wall*” el parámetro y^+ en la zona adyacente a la pared debe tomar valores cercanos a 1. Sin embargo, son aceptables valores hasta $y^+ < 5$. Se recomienda situar al menos 10 celdas dentro de la zona cercana a la pared, afectada por la viscosidad, para que se pueda resolver la velocidad media y las variables turbulentas en dicha región.

CAPÍTULO VII

CARACTERIZACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LECHOS FIJOS: EVALUACIÓN DE LA PÉRDIDA DE CARGA

7.1 Introducción

7.2 Ecuaciones existentes para el cálculo de la pérdida de carga en lechos fijos

7.2.1 Efecto de la pared de tubo

7.3 Evaluación de la pérdida de carga en lechos fijos por CFD

7.4 Conclusiones

7.1 Introducción

La determinación de la pérdida de carga (ΔP) es un aspecto de gran importancia en el análisis de los *RCLF*, ya que su evaluación confiable se relaciona directamente con el cálculo correcto de los costos de compresión o impulsión, permitiendo, además, visualizar la factibilidad de operación con diámetros compatibles con una apropiada transferencia de calor hacia el exterior del tubo.

Los estudios y correlaciones sobre pérdida de carga en lechos fijos han sido generalmente desarrollados para lechos con alta relación de aspecto, donde los perfiles de velocidad son suaves y pueden adoptarse valores promedio. Sin embargo, en el caso de tubos con baja relación de aspecto ($N \leq 10$) la presencia de efectos de pared y las perturbaciones que se generan sobre toda la sección transversal del tubo ejercen una influencia que debe tenerse en cuenta al desarrollar expresiones predictivas.

En este capítulo la CFD es utilizada para evaluar la caída de presión en lechos fijos, para un amplio rango de condiciones operativas, en particular para casos de baja relación de aspecto. Tal como se describió detalladamente en el capítulo VI, para llevar a cabo las simulaciones se adoptó una geometría de celda de cálculo conformada por paredes planas y siete estratos de partículas distribuidas según los arreglos geométricos romboédrico, ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto. Las distintas configuraciones permiten simular lechos fijos de diferentes porosidades.

En la sección 7.2 se realiza una descripción de las principales ecuaciones existentes en la bibliografía para la predicción de la pérdida de carga en *LF*. A pesar de haberse publicado un conjunto importante de trabajos sobre el tema, evidenciando que la pérdida de presión en lechos fijos ha sido extensamente estudiada por diferentes autores y con concepciones diferentes, existe una significativa dispersión de resultados en cuanto a la generación de expresiones predictivas y correlaciones propuestas para la evaluación de ΔP . Gran parte de la información existente no es reproducible o no resulta apropiada para la derivación de una correlación consistente (Montillet y colab., 2007). Investigaciones recientes han considerado nuevamente aspectos tales como la relación entre la estructura del lecho y el comportamiento del fluido en su movimiento a través del mismo y los mecanismos actuantes para provocar las pérdidas de energía por términos viscosos e inerciales. Estos tópicos han sido re-analizados con nuevos aportes de información que permiten llevar a cabo estudios comparativos de interés en la

predicción de ΔP (Niven, 2002; Montillet, 2004; Montillet y colab., 2007).

En la sección 7.3 se presenta el análisis de los resultados obtenidos. Se comparan los valores calculados a partir de las simulaciones con correlaciones obtenidas de bibliografía y con valores reportados por otros autores para todos los casos y condiciones operativas estudiadas.

Es importante señalar que la finalidad de este trabajo no reside en proponer correlaciones alternativas para la evaluación de ΔP , sino que los resultados de pérdida de carga obtenidos por CFD para los sistemas de lecho fijo mencionados, se comparan con los reportados por otros autores, fundamentalmente con los más recientes, a fin de aportar información y contribuir al conocimiento y validación de diversas alternativas para la evaluación del ΔP . Se propone una de las correlaciones analizadas como alternativa válida y de elevada confiabilidad para la evaluación del ΔP en lechos de baja relación de aspecto y en un amplio rango de Re_p .

Finalmente, se sintetizan los aspectos de mayor interés de trabajos hallados en la bibliografía, realizados con el objeto de evaluar la pérdida de carga en lechos fijos, aplicando la CFD.

7.2 Ecuaciones existentes para el cálculo de la pérdida de carga en lechos fijos

Se han llevado a cabo numerosos estudios experimentales y desarrollos teóricos sobre el flujo de fluidos a través de medios porosos a fin de establecer el régimen de flujo y evaluar la pérdida de carga. Los diferentes regímenes de flujo que se presentan pueden describirse, en general, de la siguiente forma: para muy bajos valores de Re_p se desarrolla el régimen laminar o de Darcy donde el flujo es dominado por fuerzas viscosas y el gradiente de presión es proporcional al caudal de fluido que atraviesa el lecho; para valores superiores de Re_p se reconoce claramente la existencia de una situación de transición en el flujo, denominada régimen de Forchheimer, donde los términos de inercia comienzan a ser relevantes luego de superado el régimen puramente viscoso o reptante. Finalmente, al aumentar aún más la velocidad del fluido se alcanza el extremo turbulento, altamente inestable y caótico. Una discusión del efecto del cambio de régimen ha sido presentada por Montillet (2004).

En la Figura 7.1 se presenta un gráfico de los tres regímenes mencionados en

función de la porosidad del lecho, ε , y del número de Reynolds, definido como:

$$Re_p = \rho_g \langle u \rangle d_p / \mu .$$

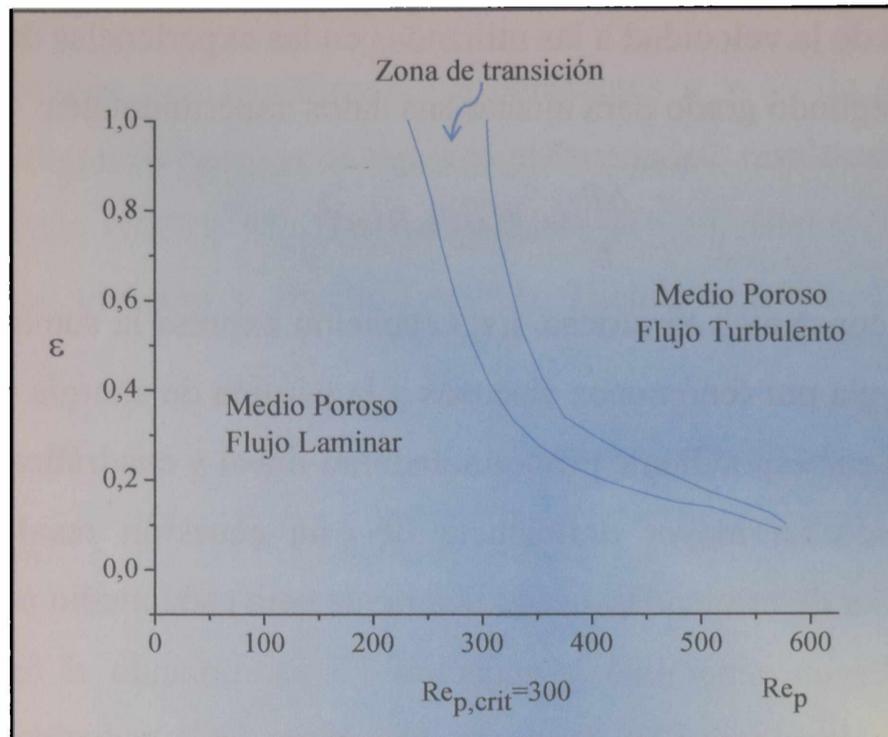


Figura 7.1. Regímenes de flujo en lechos fijos. (M. de Lemos, 2006)

Los primeros estudios sobre el flujo laminar a través de lechos porosos fueron desarrollados por Darcy en 1856. El autor investigó el flujo de agua a través de estratos arenosos y la filtración que se producía en ellos. Encontró que, bajo ciertas condiciones operativas, el caudal volumétrico de agua era proporcional al gradiente negativo de la presión. Esta relación, hoy conocida como ley de Darcy se expresa, para flujo unidimensional, como:

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\mu}{K} \langle u \rangle \quad (7.1)$$

donde $\Delta P / L$ es la caída de presión por unidad de longitud axial, $\langle u \rangle$ es la velocidad superficial, K es la permeabilidad y μ es la viscosidad del fluido (Fand y colab, 1987). Para calcular la permeabilidad puede utilizarse la siguiente ecuación semi-empírica, para un lecho conformado por partículas esféricas de tamaño uniforme:

$$K = \left(k \frac{6}{d_p} \alpha \right)^{-1} \quad \alpha = \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \quad (7.2)$$

donde ε es la porosidad, d_p el diámetro de partículas y k una constante adimensional

determinada experimentalmente llamada constante de Kozeny-Carman.

Ya en 1901, Forchheimer sugirió la existencia de una relación no lineal entre el gradiente de presión y la velocidad del fluido que atraviesa en lecho de partículas para valores superiores de la velocidad a las utilizadas en las experiencias de Darcy. Propuso una ecuación de segundo grado para ajustar sus datos experimentales:

$$\frac{\Delta P}{L} = A \langle u \rangle + B \langle u \rangle^2 \quad (7.3)$$

donde A y B son constantes empíricas. Esta ecuación expresa la suma de dos términos: la pérdida de energía por fenómenos viscosos y la pérdida de energía cinética (pérdidas inerciales), con la correspondiente proporcionalidad lineal y cuadrática con la velocidad superficial del fluido. La mayor deficiencia de esta ecuación reside en que dichas constantes deben ser determinadas específicamente para cada medio poroso.

En 1952 Ergun generalizó la ecuación 7.3 examinando el fenómeno desde el punto de vista de la independencia de la influencia de la velocidad del flujo y las propiedades del fluido, porosidad, orientación y tamaño y forma de la matriz porosa. Sus estudios partieron de considerar al lecho relleno como constituido por un conjunto de tubos tortuosos de sección caprichosa, no conectados entre sí. Ergun (1952) estableció, para el cálculo de la pérdida de carga, la siguiente relación:

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \langle u \rangle}{D_p^2} + 1.75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{\rho_g \langle u \rangle^2}{D_p} \quad (7.4)$$

donde D_p es un diámetro equivalente definido según la ecuación:

$$D_p = 4 R_h = 6 / S_v \quad (7.5)$$

S_v es la superficie específica (superficie total de las partículas/volumen de las partículas). Para el caso particular de partículas esféricas, $S_v=6/d_p$, por lo tanto la ecuación 7.4 se expresa:

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu \langle u \rangle}{d_p^2} + 1.75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{\rho_g \langle u \rangle^2}{d_p} \quad (7.6)$$

La expresión equivalente, en términos del correspondiente factor de fricción es,

$$\frac{\Delta P}{L} = f \cdot \frac{\rho_g \langle u \rangle^2}{d_p} \quad (7.7)$$

donde

$$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right] \quad (7.8)$$

y $a=1,75$, $b=150$

Algunos autores han modificado las constantes a y b , de acuerdo a ajustes realizados sobre conjuntos propios de datos experimentales, resultando las expresiones de Handley y Heggs (1968), Mc Donald y colab. (1979), Hicks (1970), Tallmadge (1970) (citadas por Froment y Bischoff, 1990). Dichas ecuaciones y parámetros se resumen en la Tabla 7.1.

<i>Autores y referencia</i>	<i>Ecuación propuesta</i>	<i>Observaciones</i>
Ergun (1952)	$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right]$ Ec. (7.8)	$a=1,75$; $b=150$
Handley y Heggs, (1968)	$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right]$ Ec. (7.8)	$a=1,24$; $b=368$
Mc Donald y colab., (1979)	$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right]$ Ec. (7.8)	$a=1,8, 4$; $b=180$
Tallmadge, (1970)	$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right]$ Ec. (7.8)	$a=1,75$; $b=4,2 Re_p^{5/6}$ $0.1 \leq Re_p \leq 100.000$
Montillet y colab. (2007); Montillet (2004)	$f = a \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \left[\frac{d_t}{d_p} \right]^{0.2} [1000 Re_p^{-1} + 60 Re_p^{-0.5} + 12]$ Ec. (7.12)	$3,8 \leq d_t/d_p \leq 40-50$ $-10 < Re_p < 2500$
Mehta y Hawley (1969)	$f = M \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \left[\frac{150(1-\varepsilon)M}{Re_p} + 1,75 \right]$ Ec. (7.11)	$M = 1 + \frac{4 d_p}{6 d_t(1-\varepsilon)}$
Hicks, (1970)	$f = 6.8 \frac{(1-\varepsilon)^{1.2}}{\varepsilon^3} Re_p^{-0.2}$ Eq. (7.13)	<i>Para esferas</i> $500 \leq Re_p \leq 60.000$

Tabla 7.1: Correlaciones para ΔP propuestas por diferentes autores

En cuanto al rango de validez de las ecuaciones del tipo Forchheimer (Ergun, Mc. Donald y colab., Handley y Heggs), a pesar de ser mencionado explícitamente en la formulación de cada una de ellas en los trabajos originales, se ha observado que

presentan dificultades para representar correctamente la pérdida de carga en lechos fijos, en especial para valores altos de Re_p (Montillet y colab., 2007).

7.2.1 Efecto de la pared de tubo

Un aspecto que no ha sido considerado en numerosas correlaciones es el efecto de la pared del tubo sobre la pérdida de carga resultante. Mehta y Hawley (1969) han propuesto tener en cuenta dicho efecto mediante una modificación del radio hidráulico en la deducción de la ecuación de Ergun (ec. 7.4). En la derivación de la ecuación el radio hidráulico es introducido como una longitud característica del lecho fijo. Cuando el diámetro del recipiente (d_t) sea mucho mayor que el diámetro de la partícula (d_p), la pared tendrá un efecto despreciable sobre la longitud característica. Sin embargo, para relaciones de aspecto menores la longitud característica debería considerar los efectos de la pared. La modificación propuesta por los autores consiste en formular un término de corrección del radio hidráulico efectivo, que incluya la relación (d_t/d_p):

$$R_h = \frac{\varepsilon d_p}{6(1-\varepsilon)M} \quad (7.9)$$

donde el término de corrección resultante es:

$$M = 1 + \frac{4 d_p}{6 d_t (1-\varepsilon)} \quad (7.10)$$

para una columna (recipiente o tubo) de diámetro d_t relleno con partículas de diámetro d_p . La ecuación obtenida a partir de la modificación, expresada en términos de factor de fricción es:

$$f = M \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \left[\frac{150 (1-\varepsilon) M}{Re_p} + 1.75 \right] \quad (7.11)$$

Los autores concluyen que los efectos de pared dejan de ser importantes para relaciones de aspecto superiores a 50. Por su parte, Fand y Thinakaran (1990) proponen un valor límite de 40 para ignorar la influencia de la pared.

Recientemente, los efectos de pared también han sido considerados en la expresión propuesta por Montillet y colab. (2007) y Montillet (2004), basada en la

forma de una correlación pre-existente, ajustando datos experimentales propios y de otros autores (Fand y colab., 1987). En los trabajos de, Montillet (2004) y Montillet y colab. (2007), los autores proponen la siguiente correlación que explícitamente incluye los efectos de pared,

$$\frac{\Delta P}{L} = a \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \left[\frac{d_t}{d_p} \right]^b \frac{\rho_g \langle u \rangle^2}{d_p} \left[1000 Re_p^{-1} + 60 Re_p^{-0,5} + 12 \right] \quad (7.12)$$

con $a = 0,061$ para un empaquetamiento compacto del lecho y $a = 0,4-0,45$ para el caso de lecho diluido. La constante b adopta el valor 0,20 para ambos casos. La ecuación de Montillet ha sido desarrollada para predecir pérdidas de carga a través de lechos de partículas esféricas con el siguiente rango de aplicabilidad:

$$3,8 \leq d_t / d_p \leq 40-50 \quad \sim 10 \leq Re_p \leq \sim 2500$$

Los autores, si bien proponen la inclusión de tres términos en el segundo miembro de la ecuación 7.12, reconocen que la aparición del término en el cual Re_p se eleva a la potencia (-0,5) no responde a una formulación teórica que arroje dicho exponente como resultado. La existencia del término en sí da cuenta, si los restantes se asignan a los regímenes viscoso y puramente turbulento, de la presencia del régimen intermedio (en el cual tienen importancia los efectos inerciales y de inestabilidad laminar, para velocidades de flujo correspondientes a $50 \leq Re_p \leq 600$).

7.3 Evaluación de la pérdida de carga en lechos fijos por CFD

En el capítulo VI se describió en detalle el método utilizado en la generación de las celdas de cálculo y las grillas correspondientes en el pre-procesador *GAMBIT*, para cada una de las configuraciones geométricas de partículas estudiadas con el objeto de evaluar la pérdida de carga en lechos de distintas porosidades. También se describieron los modelos y parámetros adoptados para llevar a cabo las simulaciones en *FLUENT*.

En las Figuras 7.2, 7.3, 7.4 y 7.5 se presentan los valores de pérdida de carga obtenidos por CFD, evaluados por unidad de longitud de lecho, en función de Re_p , para lechos con arreglo romboédrico, ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto, respectivamente; conjuntamente con los valores de $\Delta P/L$ calculados a partir de las correlaciones citadas en la Tabla 7.1.

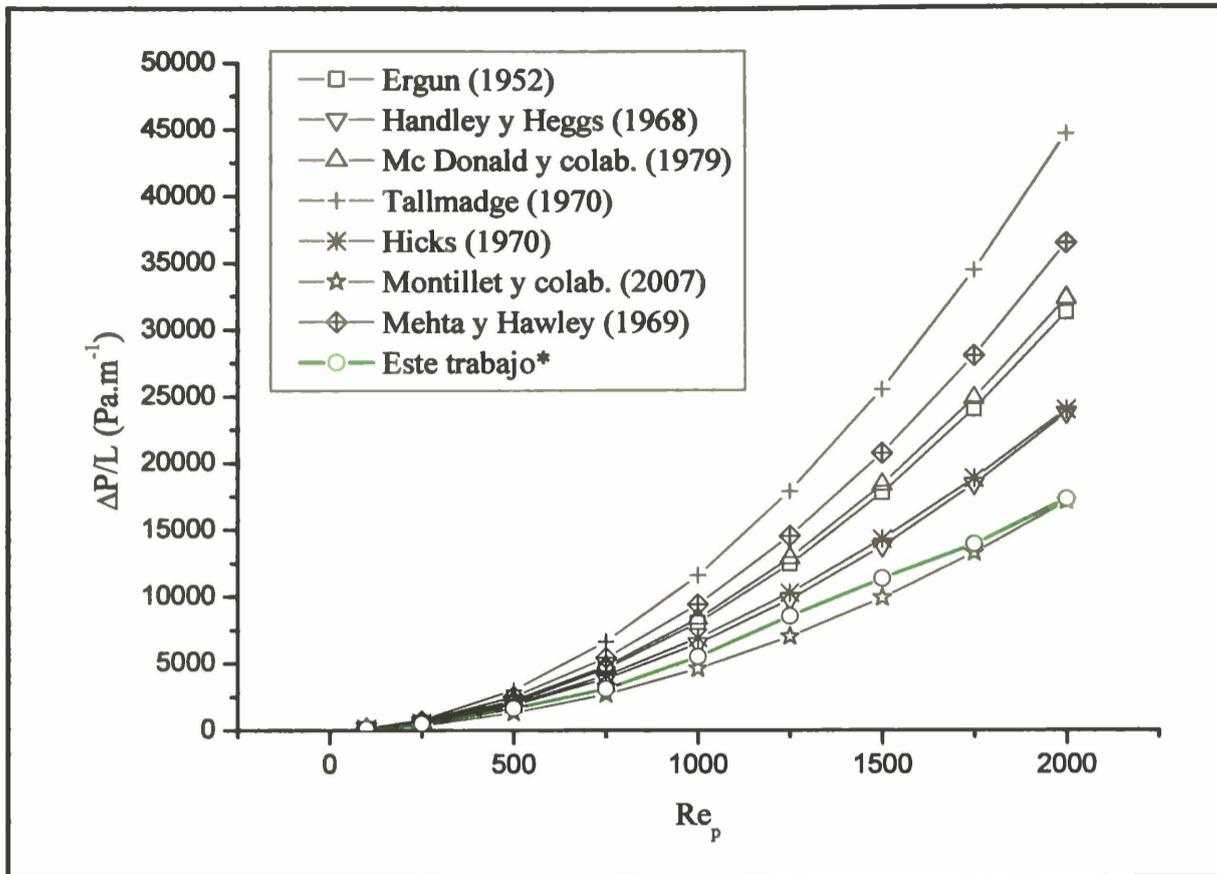


Figura 7.2. Comparación de resultados de $\Delta P / L$ con las expresiones de la Tabla 7.1 Arreglo romboédrico ($\epsilon = 0.304$). *: Modelo de turbulencia: Spalart Allmaras

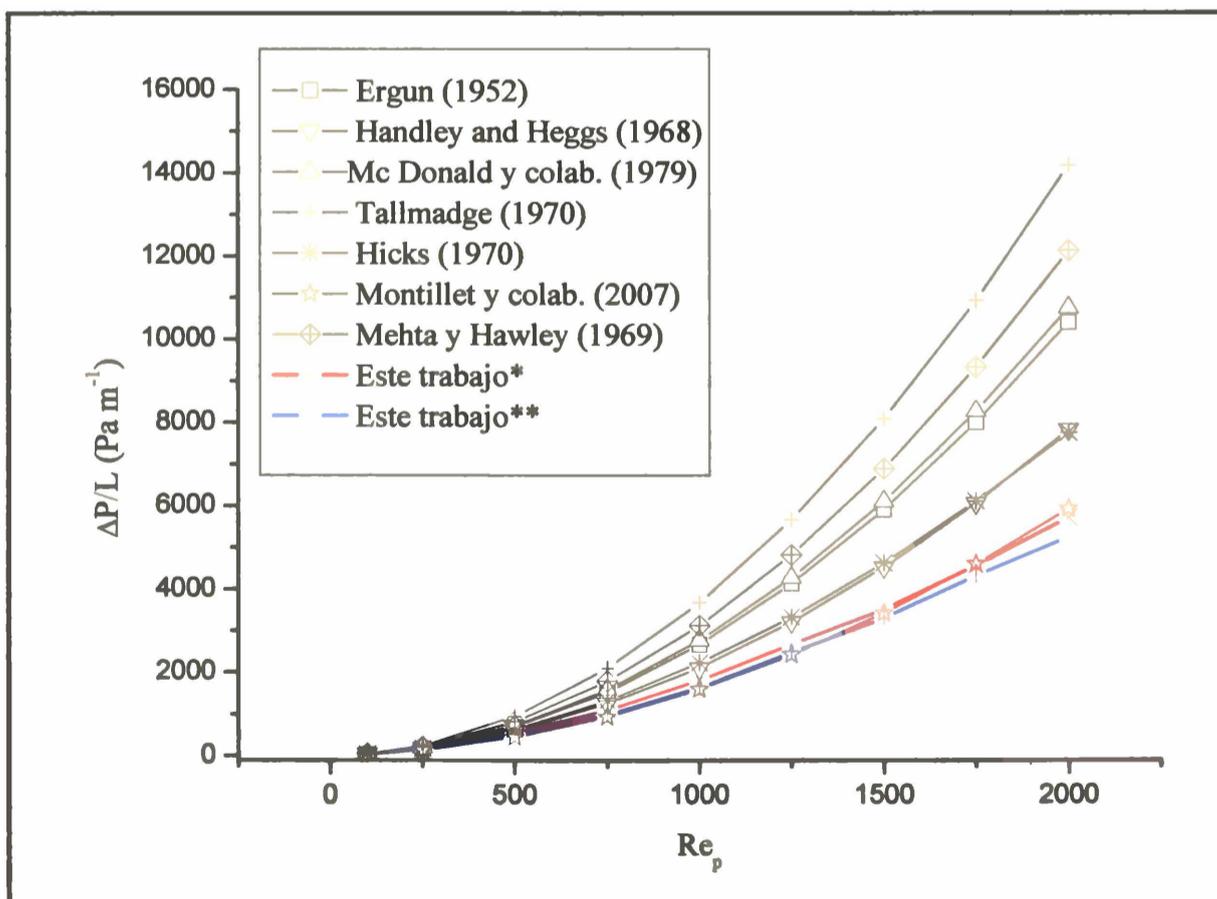


Figura 7.3. Comparación de resultados de $\Delta P / L$ con las expresiones de la Tabla 7.1 Arreglo ortorrómbico ($\epsilon: 0.413$). *: Modelo de turbulencia Spalart Allmaras, **: Modelo de turbulencia Estándar k- ϵ

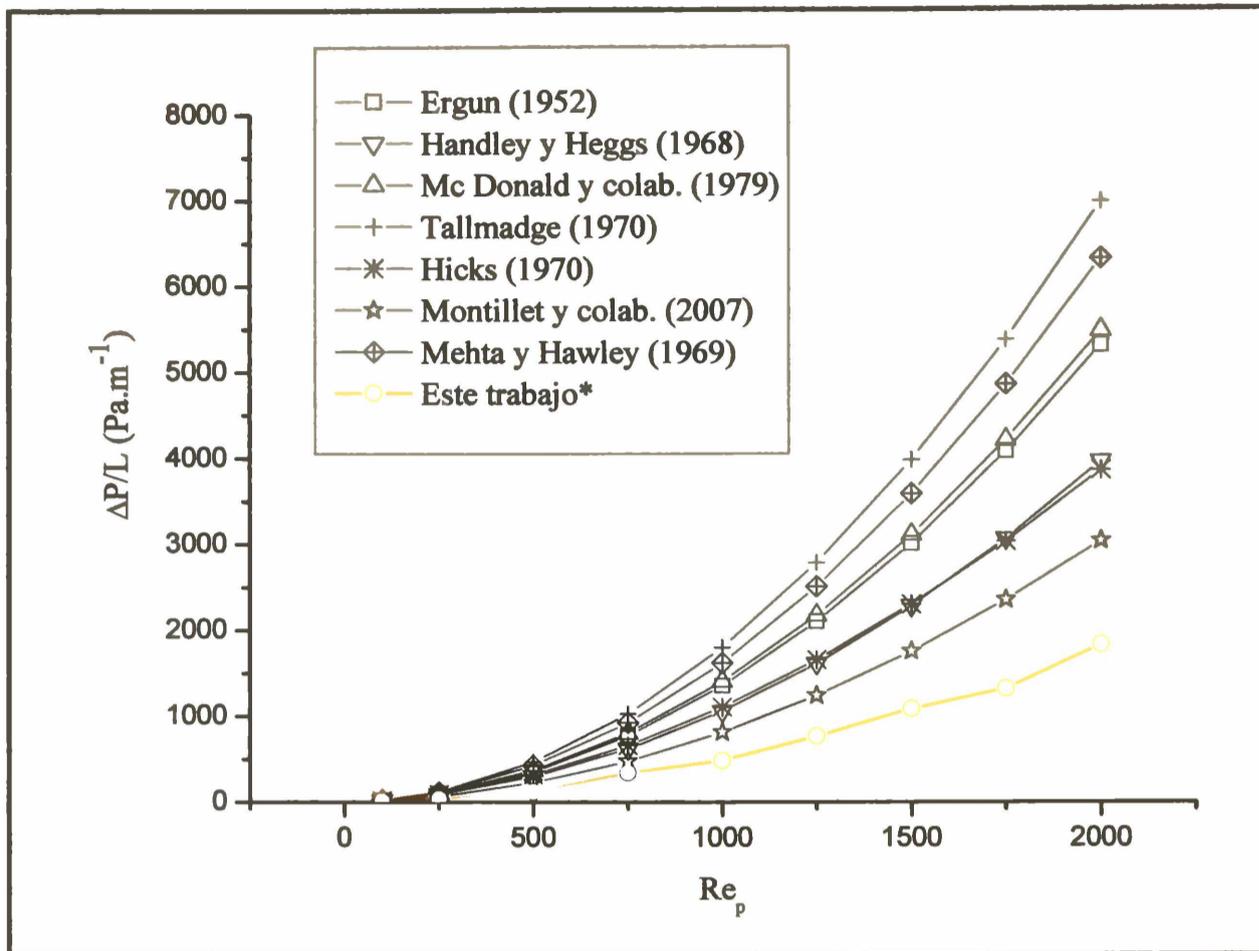


Figura 7.4. Comparación de resultados de $\Delta P / L$ con las expresiones de la Tabla 7.1 Arreglo cúbico ($\epsilon = 0.492$). *: Modelo de turbulencia: Spalart Allmaras

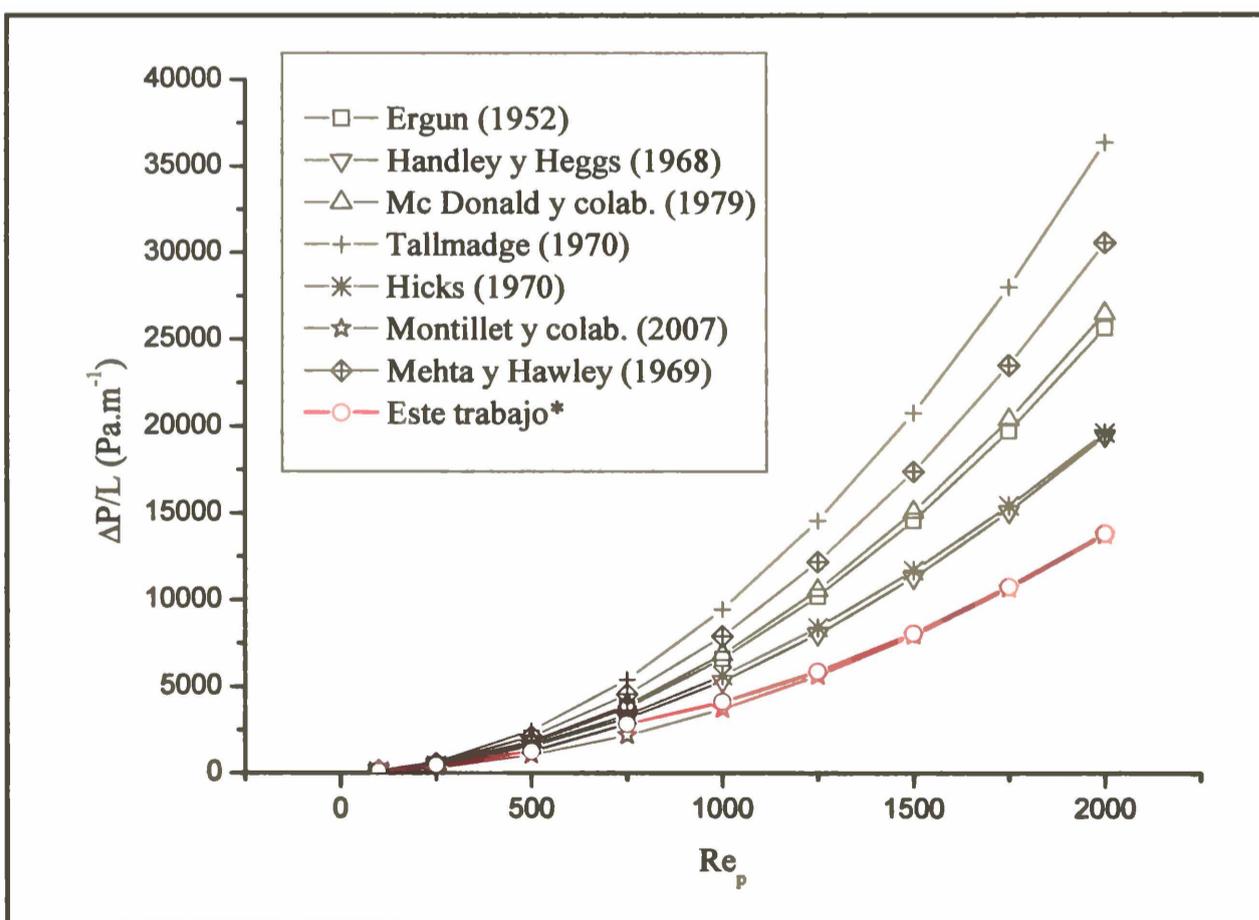


Figura 7.5. Comparación de resultados de $\Delta P / L$ con las expresiones de la Tabla 7.1 Arreglo cúbico compacto ($\epsilon = 0.322$). *: Modelo de turbulencia: Spalart Allmaras

Sólo para el caso de la configuración geométrica ortorrómbica se efectuaron las simulaciones en el *software FLUENT* utilizando dos modelos de turbulencia diferentes: Spalart-Allmaras y Estándar k-ε. Como se mencionó en el capítulo VI existieron dos razones para seleccionar el modelo de Spalart-Almaras, la primera de ellas, relacionada con problemas de convergencia en el balance de energía y la segunda debida a la imposibilidad de obtener valores del parámetro y^+ dentro del rango recomendado para el uso de las funciones de pared. Sin embargo, es importante señalar que se encontraron en la bibliografía situaciones similares con respecto al parámetro y^+ , en donde los autores a pesar de no cumplir con el rango especificada para dicho parámetro, emplearon el modelo de turbulencia Estándar k-ε (Guardo y colab. 2005 y Nijemeisland, 2003) en simulaciones de lechos de partículas esféricas. En la Figura 7.3 puede observarse que los valores de pérdida de carga obtenidos con los dos modelos de turbulencia son muy similares, siendo la diferencia promedio, calculada según la

$$\text{ecuación: } error(\%) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{(\Delta P_{i,SA} - \Delta P_{i,k-\epsilon})}{\Delta P_{i,SA}} \right|, \text{ del } 7,77 \%.$$

Para todos los lechos, en las simulaciones con $Re_p = 100$ se utilizó la opción de flujo laminar disponible en *FLUENT* y para Re_p superiores se especificó el modelo de turbulencia.

Las Figuras 7.2 a 7.5 evidencian una tendencia análoga para el comportamiento de la pérdida de carga en relación a Re_p cuando se calcula para los distintos arreglos geométricos de partículas.

Un primer análisis de los resultados obtenidos permite afirmar que para los valores calculados por CFD, tal como es previsible, se produce una disminución de la pérdida de carga con la porosidad, siendo, para un mismo Re_p , el menor valor de ΔP_{CFD} el correspondiente a la Figura 7.4 (arreglo cúbico).

Se puede constatar el crecimiento de la diferencia ($\Delta P_{Ec.Tabla7.1} - \Delta P_{CFD}$) a medida que se abandona el régimen estrictamente laminar y se avanza en los valores de Re_p hacia la condición de turbulento.

Para la correlación de Mehta y Hawley (1969), que enfatiza el valor de la pérdida de carga al sumar las paredes en la definición del R_h (con respecto a un sistema que sólo considere el arreglo de partículas) y lo aplica luego a la ecuación de Ergun, es

lógico esperar una mayor desviación que se evidencia en las Figuras 7.2, 7.3, 7.4 y 7.5 con respecto a los valores de ΔP_{CFD} .

La concordancia entre los valores obtenidos de pérdida de carga ΔP_{CFD} y los correspondientes a la correlación de Montillet y colab., 2007 puede considerarse muy buena para un rango de Re_p que abarca los regímenes desde laminar hasta turbulento. Adicionalmente, se trata de una correlación basada en un amplio conjunto de datos experimentales propios y de otros autores (Fand y colab., 1987) y que incluye explícitamente en su formulación la relación de aspecto, abarcando especialmente rangos de valores bajos de dicha variable.

Se observa en las Figuras 7.2, 7.3, 7.4 y 7.5 una desviación ligeramente superior de los valores obtenidos por CFD con respecto a la correlación de Montillet (ecuación 7.11) para los arreglos de mayores porosidades.

En la Figura 7.6 se aprecian cuatro valores de ΔP_{CFD} obtenidos para diferentes porosidades y $Re_p=1000$, graficados simultáneamente con los valores generados a partir de la ecuación 7.6. Es importante señalar la desviación sistemática de los valores de pérdida de carga calculados con los correspondientes a la correlación de Ergun, ecuación 7.6, para números de Reynolds $Re_p > 500$ y relaciones de aspecto bajas como las empleadas en los cálculos realizados ($N=5.98$ a 7).

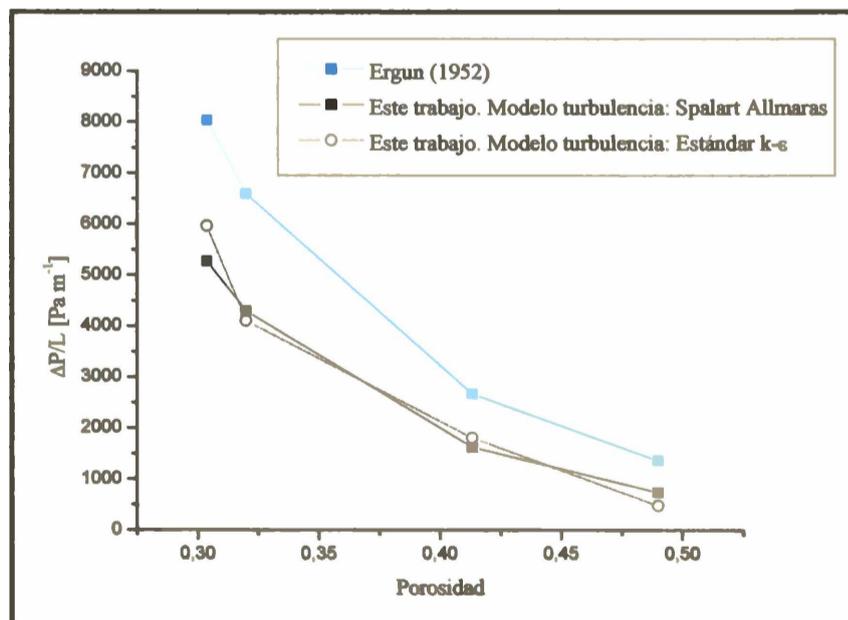


Figura 7.6. Valores de $\Delta P_{CFD} / L$ y Ecuación de Ergun vs. porosidad del lecho. $Re_p=1000$.

La porosidad en la Figura 7.6 se varió cambiando los arreglos (del conjunto de la Figura 6.1) desde el más compacto hasta el más diluido (cúbico). Las simulaciones se

llevaron a cabo utilizando dos modelos de turbulencia: Spalart-Allmaras y Estándar k- ϵ . Como puede observarse en la Figura 7.6 los valores de ΔP_{CFD} resultan siempre menores que los correspondientes a la ecuación 7.6. Si bien el uso de la ecuación de Ergun está muy difundido, es claro que presenta algunas deficiencias. Ergun (1952) se basó en un rango estrecho de porosidades y el resultado, es una funcionalidad de ΔP con la porosidad muy débil. No obstante, en todos los casos el signo de la diferencia de $\Delta P_{Ec.(7.6)}$ con respecto a ΔP_{CFD} se mantuvo. Esta observación es coincidente con la reportada por Montillet y colab. (2007). Estos autores informan una considerable desviación entre sus resultados (ecuación 7.12, Tabla 7.1) y la correlación de Ergun para las bajas relaciones de aspecto estudiadas y para Re_p a partir de 100-200.

La Figura 7.7 muestra los errores relativos obtenidos para cada arreglo con las distintas correlaciones y por CFD con el modelo de turbulencia de Spalart-Allmaras, siendo el promedio de los mismos en todas las condiciones del 77,22%.

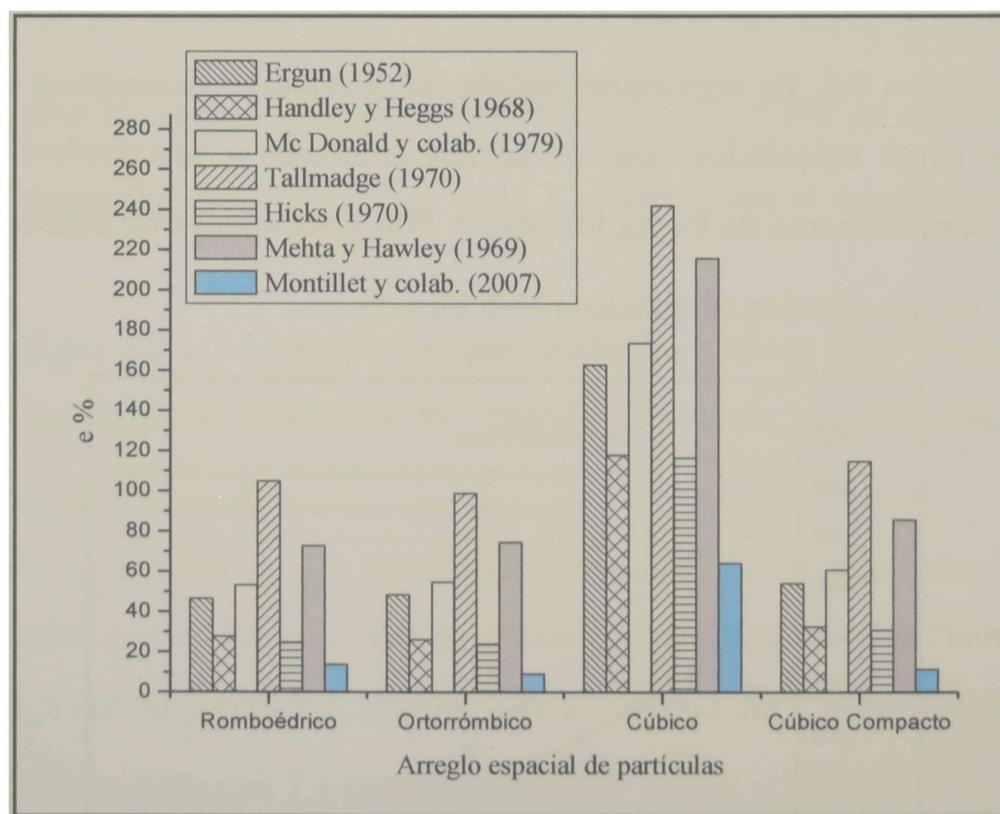


Figura 7.7. Errores relativos a $\Delta P_{CFD} / L$ de las correlaciones de la Tabla 7.1. $Re_p=1000$.

Se destaca el bajo error de la correlación de Montillet: 9,16 % para el arreglo ortorrómbico, 13,80 % para el arreglo romboédrico, 11,53 % para el arreglo cúbico compacto. Para el arreglo cúbico, el error, si bien es menor que el obtenido con las restantes correlaciones, presenta un valor muy superior a los mencionados

anteriormente: 64,16 %.

Entre las correlaciones con desviación muy elevada con respecto a los cálculos de CFD puede mencionarse a las de Talmadge y Mehta y Hawley con 140,06 % y 112,15 % de error promedio, respectivamente.

En la [Figura 7.8](#) se grafican los valores de $\Delta P_{i,j}$, donde “j” representa cada una de las condiciones (caudales, arreglos estructurales, porosidades) calculadas con cada correlación de la [Tabla 7.1](#) (subíndice “i”), en función del valor de $\Delta P_{j,CFD}$ obtenido con el programa *FLUENT* en las mismas condiciones. El error promedio puede expresarse como:

$$e(\%) = \left(\frac{1}{NTC} \right) \sum_{i=1}^{NTC} \left(\frac{1}{NDJ} \right) \sum_{j=1}^{NDJ} \frac{|\Delta P_{i,j} - \Delta P_{j,CFD}|}{\Delta P_{j,CFD}} \quad (7.14)$$

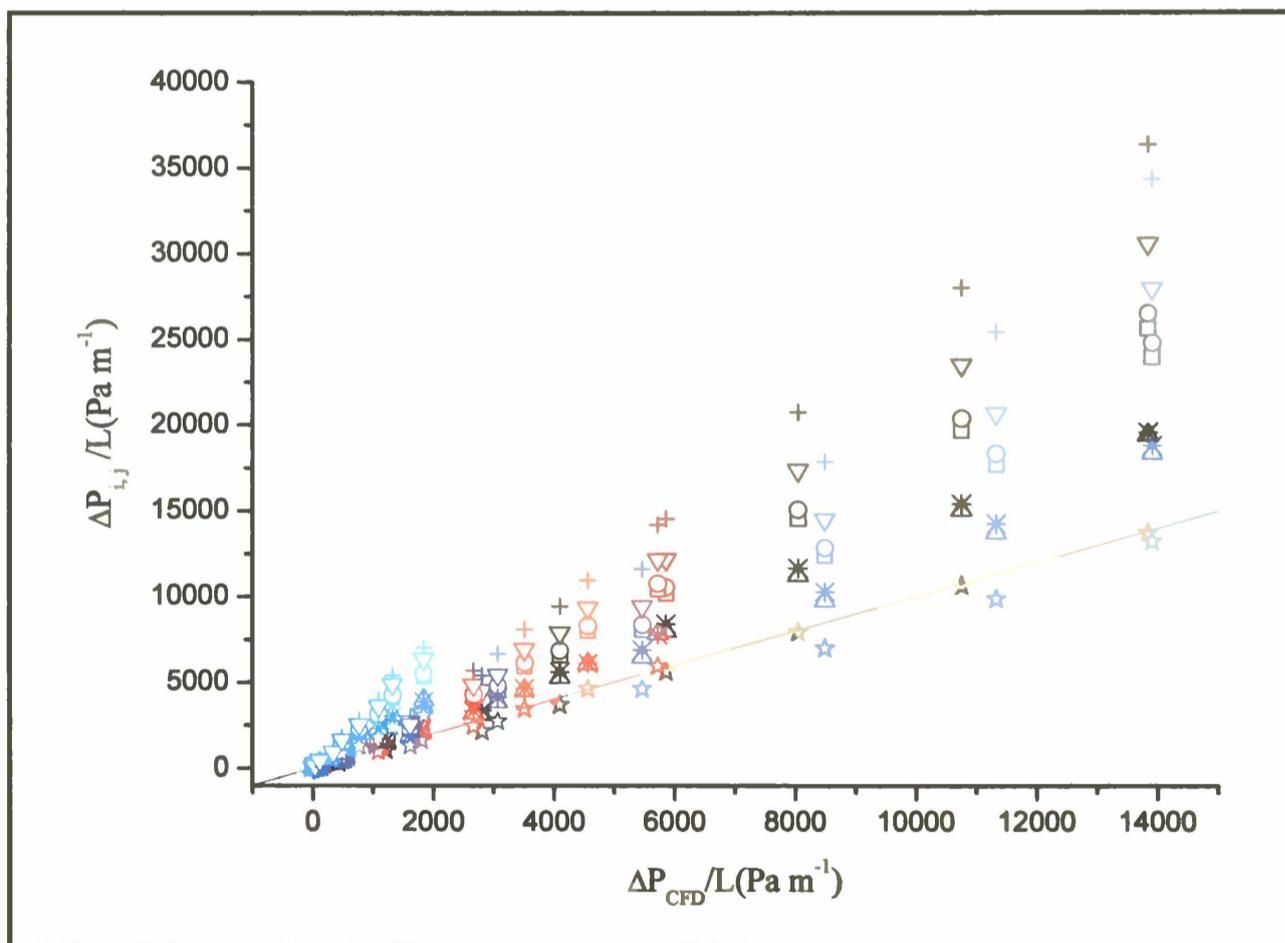


Figura 7.8. $\Delta P_{i,j} / L$ vs. $\Delta P_{CFD} / L$

□	Ergun, Cub. Comp.
△	Handley y Heggs, Cub. Comp.
○	Mc Donald y colab., Cub. Comp.
+	Tallmadge, Cub. Comp.
✱	Hicks, Cub. Comp.
★	Montilet y colab., Cub. Comp.
▽	Mehta y Hawley, Cub. Comp.
□	Ergun, Ortorrómbico
△	Handley y Heggs, Ortorrómbico
○	Mc Donald y colab., Ortorrómbico
+	Tallmadge, Ortorrómbico
✱	Hicks, Ortorrómbico
★	Montilet y colab., Ortorrómbico
▽	Mehta y Hawley, Ortorrómbico
□	Ergun, Romboédrico
△	Handley y Heggs, Romboédrico
○	Mc Donald y colab., Romboédrico
+	Tallmadge, Romboédrico
✱	Hicks, Romboédrico
★	Montilet y colab., Romboédrico
▽	Mehta y Hawley, Romboédrico
□	Ergun, Cúbico
△	Handley y Heggs, Cúbico
○	Mc Donald y colab., Cúbico
+	Tallmadge, Cúbico
✱	Hicks, Cúbico
★	Montilet y colab., Cúbico
▽	Mehta y Hawley, Cúbico

En la ecuación 7.14, NTC es el número total de correlaciones utilizadas y NDJ el número de puntos (condiciones) en los que se realizó la comparación de ΔP_{CFD} . Para $NTC=7$ y $NDJ=36$, se obtiene $e (\%) = 77,2$. Debido a que se analizó el caso de lechos de baja relación de aspecto, se advierte que, gran parte de las correlaciones existentes no reproducen los valores de ΔP_{CFD} que, por su rigurosidad, pueden aceptarse como sustitutivos de determinaciones experimentales. Las razones de este resultado pueden residir en la diversidad de condiciones en las que se han generado las correlaciones existentes, la ausencia de información complementaria y la carencia,

de fundamentaciones fenomenológicas en una gran parte de los trabajos existentes. Los cálculos realizados abarcan rangos de Re_p entre 100 y 2000 y $0,3 \leq \varepsilon_{celda} \leq 0,5$.

Adicionalmente, se estudió la influencia sobre la pérdida de carga, de la orientación del arreglo relativa al plano perpendicular al flujo. Las configuraciones A y B de la [Figura 6.1](#) están basadas en el mismo arreglo pero con orientaciones distintas sobre los planos paralelos que definen la celda a simular. Se efectuaron las simulaciones de ambas configuraciones para obtener las pérdidas de carga $\Delta P_{CFD}|_A$ y $\Delta P_{CFD}|_B$. Por ejemplo, para $Re_p=1000$, los valores obtenidos de $\Delta P_{CFD}|_B$ fueron 24,9 % menores que los de $\Delta P_{CFD}|_A$. Los valores de $(\Delta P_{CFD})|_B$, en consecuencia, se alejan aun más de los predichos por la ecuación 7.6. Es importante señalar que la porosidad de la celda para las configuraciones A y B ([Figura 6.1](#)), si bien es conceptualmente la misma (idéntico arreglo, $\varepsilon = 25,95$), resulta, por razones constructivas, ligeramente diferente al delimitar los cortes de las esferas en la celda, con planos diferentes. En las celdas de cálculo simuladas en *FLUENT* las porosidades de las celdas alcanzan los siguientes valores: $\varepsilon_A = 0,30386$ (configuración A) y $\varepsilon_B = 0,3216$ (configuración B). Calculando para

ambos valores el factor $(1 - \varepsilon)/\varepsilon^3$, se observa que, de la diferencia total mencionada en el valor de ΔP (24,9 %), un 17,8 % se debe a la diferencia en la porosidad y que el 7,1 % restante es consecuencia del cambio de orientación experimentado por las partículas. Esta situación concuerda cualitativamente con las observaciones reportadas por Martin y colab. (1951) sobre la importancia del efecto de la orientación del arreglo sobre la pérdida de carga. Estos autores llevaron a cabo un análisis centrado en el efecto de la orientación del arreglo de partículas sobre la pérdida de carga a través del lecho. En dicho trabajo se señala que arreglos de igual porosidad, igual diámetro y geometría de partículas, pero con diferente orientación, arrojan valores distintos de ΔP .

Es importante mencionar, en adición a lo expuesto, que se ha encontrado una buena concordancia con respecto a las conclusiones basadas en datos experimentales y de CFD reportadas por Bai y colab. (2009). Los autores llevaron a cabo experiencias de laboratorio y simulaciones con CFD incluyendo arreglos de partículas estructurados y no-estructurados con relaciones de aspecto $N < 4$ y partículas esféricas y cilíndricas. Uno de los casos simulados es un lecho no estructurado compuesto por 153 partículas esféricas de 10 mm de diámetro y $N=2,67$. Los autores reportan muy buena concordancia entre los resultados experimentales y los obtenidos por CFD y un error promedio del 61,5 % con respecto a la ecuación de Ergun que sobre predice la pérdida de carga. Estas experiencias fueron llevadas a cabo a valores altos de Re_p , superiores a 2000.

Otros autores que evaluaron la pérdida de carga en lechos de partículas esféricas a partir de simulaciones por CFD fueron Calis y colab. (2001) y Guardo y colab. (2005). El primero de ellos realizó una validación experimental de la pérdida de carga en lechos fijos con relaciones de aspecto comprendidas entre 1 y 4, encontrando una buena concordancia entre los valores experimentales y los obtenidos por CFD. También efectuó una comparación con los valores de caída de presión predichos por la ecuación de Ergun, encontrando que esta última sobre-predice los valores experimentales en un valor promedio del 80%. Guardo y colab. (2005) simularon un lecho con relación de aspecto de 3,923 y Re_p comprendidos entre 100 y 1000. Utilizaron y compararon el comportamiento de los modelos de turbulencia Spallart Allmaras, Estándar k- ε , RNG k- ε y *Realizable* k- ε , cuyos resultados contrastaron con los valores obtenidos a partir de la ecuación de Ergun. Los autores observaron que los valores de pérdida de carga

calculados por CFD son ligeramente superiores a los que arroja la ecuación de Ergun para los mismos números de Re_p , obteniéndose resultados muy similares con todos los modelos de turbulencia utilizados. Esta conclusión contrasta con los resultados reportados por Calis y colab. (2001) y Bai y colab. (2009) quienes reportaron una marcada discrepancia con la ecuación de Ergun (obtuvieron, en todos los casos analizados, valores de ΔP_{CFD} inferiores a los obtenidos a partir de la ecuación de Ergun). La misma discrepancia se observa al comparar los resultados presentados en las Figuras 7.2, 7.3, 7.4 y 7.5 con la ecuación de Ergun y con los datos reportados por Guardo y colab. (2005).

Finalmente, en base a los resultados de CFD obtenidos y al análisis presentado puede identificarse a la ecuación de Montillet y colab. (2007) como una alternativa rápida y de buena confiabilidad para la evaluación de la pérdida de carga en lechos fijos de baja relación de aspecto, en el amplio rango de Re_p que abarca regímenes desde el laminar hasta el caótico o turbulento de altos Re_p .

7.4 Conclusiones

En este capítulo la CFD fue utilizada para evaluar la caída de presión en lechos fijos de baja relación de aspecto, para un amplio rango de condiciones operativas.

Se han presentado resultados que evidencian los efectos de diversas variables, fundamentalmente la velocidad del fluido, el régimen de operación y el arreglo utilizado, aplicando los modelos de turbulencia de Spalart Allmaras y Standard $k-\epsilon$.

Se realizó el estudio con diferentes valores de porosidad, generados por el cambio del arreglo geométrico adoptado.

En todos los casos estudiados, se observa un apartamiento sistemático con respecto a los valores arrojados por la ecuación de Ergun y correlaciones derivadas y una concordancia muy buena con la correlación generada por información experimental de Montillet y colab (2007). Esto permite reconocer a dicha ecuación como una alternativa rápida y de elevada confiabilidad para la evaluación del ΔP en este tipo de lechos y en un amplio rango de Re_p .

CAPÍTULO VIII

EVALUACIÓN DE PARÁMETROS DEL MDZ ASISTIDA POR CFD. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS Y DE CORRELACIONES FINALES

8.1 Introducción

8.2 Formulación de hipótesis para el cálculo de los parámetros térmicos y fluidodinámicos

8.3 Coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w

8.4 Coeficiente de transferencia de calor entre las zonas “1” y “central”, h_{1c}

8.5 Conductividad efectiva radial de la zona central, k_{er}

8.6 Relación de velocidades entre zonas, $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$

8.7 Conclusiones

APÉNDICE VIII.1

Vectores velocidad sobre los planos x - y localizados en las posiciones axiales $L_z/4$ y $L_z/2$ para los arreglos ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto.

8.1 Introducción

Para poder cuantificar la velocidad de transferencia de calor a través de la pared del tubo, el modelo de Dos Zonas formulado en el Capítulo III requiere información sobre las características del sistema, representada por los parámetros térmicos: h_w , h_{lc} , k_{er} y la relación de velocidades superficiales, $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$.

Las correlaciones existentes para el cálculo de la transferencia de calor en lechos fijos convencionales no reflejan, generalmente, la presencia de fenómenos localizados en la zona de la pared del tubo. Consecuentemente, el desarrollo de correlaciones específicas para lechos de baja relación de aspecto es un tópico necesario y de gran interés por su posible aplicación industrial en la simulación rápida.

En este trabajo se aplica la metodología de simular una porción de un lecho fijo representativa del lecho completo, por Fluidodinámica Computacional, con el fin de generar los perfiles de temperatura, de presión y de velocidad, flujos másicos y de calor, para la formulación de las correlaciones de cálculo correspondientes a cada uno de los parámetros del MDZ.

En la sección 8.2, se detallan las hipótesis formuladas para poder llevar a cabo el cálculo de los parámetros del modelo.

En las secciones 8.3, 8.4, 8.5 y 8.6 se describe la metodología adoptada para evaluar los parámetros h_w , h_{lc} , k_{er} y $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$ respectivamente, a partir de la información generada por CFD. En dichas secciones se presentan gráficos y tablas con los valores hallados para diferentes valores del caudal de gas a través del lecho fijo y correlaciones para el cálculo de cada uno de los parámetros contemplando la influencia del régimen de flujo, del efecto ordenador de la pared y del fluido utilizado.

Adicionalmente, se realiza una comparación de los valores de los parámetros calculados a partir de las correlaciones propuestas con correlaciones existentes en la bibliografía para el caso de los parámetros h_w y k_{er} . Los dos parámetros restantes, h_{lc} y $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$, son específicos del modelo propuesto y, por lo tanto, no es posible efectuar la comparación con otras correlaciones. Para los parámetros h_w y h_{lc} se efectúa un análisis comparativo de los valores obtenidos a distintos Re_p y para distintas configuraciones geométricas del lecho.

Finalmente, en la sección 8.7, se vuelcan las conclusiones obtenidas y se

resumen las correlaciones propuestas para el cálculo de los parámetros del MDZ.

8.2 Formulación de hipótesis para el cálculo de los parámetros térmicos y fluidodinámicos

Para poder efectuar las simulaciones en el programa *FLUENT* cuyos resultados permitieran obtener las correlaciones para el cálculo del MDZ, se adoptó un conjunto de hipótesis y simplificaciones que permitieron desarrollar adecuadamente la simulación en 3D de un sistema tan complejo estructuralmente como el constituido por un lecho relleno. Si bien algunas de ellas ya fueron mencionadas en el Capítulo VI, a continuación se describen todas las hipótesis y simplificaciones adoptadas:

- ✓ Se construyó la geometría y se malló sólo una porción del lecho, considerando que dicha porción es representativa del lecho completo.
- ✓ Se trabajó con partículas esféricas de 0,01 m de diámetro distribuidas según arreglos estructurados, en reemplazo de la distribución aleatoria típica de los lechos fijos reales. Se simularon cuatro arreglos estructurados diferentes: romboédrico, ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto (Sección 6.2.1, Capítulo VI), lo que permitió trabajar con distintas porosidades del lecho y estudiar la influencia de la estructura del mismo sobre los procesos de transporte. Asimismo, la utilización de arreglos estructurados permitió la aplicación de fronteras periódicas, lo que disminuyó considerablemente el tamaño de las mallas y consecuentemente el tiempo de cómputo.
- ✓ Se consideró que la pared del tubo se encuentra a una temperatura constante T_w (963 K en los cálculos). La celda de cálculo construida consta de dos paredes planas (una superior y otra inferior) que representan a la pared del tubo. La condición de borde adoptada para esas paredes fue, temperatura constante y velocidad de flujo nula (Figura 6.10).
- ✓ No se consideró, para la simulación en CFD, la existencia de reacciones químicas en el lecho por tratarse de un estudio exclusivo del fenómeno de transferencia de calor. Metodológicamente, se plantea que es posible analizar en forma aislada los distintos fenómenos que se presentan en un LF, como es el caso de la transferencia de calor.

- ✓ Se centró el estudio en la componente convectiva del gas, dominante en estos sistemas. Las partículas que conforman el lecho fueron consideradas sólidos de muy baja conductividad, con una participación en el fenómeno de transferencia de calor despreciable. En las simulaciones, como condición de contorno, se estableció que las superficies de las esferas son paredes con flujo de calor nulo (adiabáticas). Esta hipótesis es la que permitió mallar sólo la zona intersticial (por la que circula el fluido) ya que no fue necesario generar una grilla en el interior de los sólidos.
- ✓ Se analizaron regímenes de flujo que van desde laminar hasta turbulento, en el rango $100 \leq Re_p \leq 2000$. Para $Re_p=100$ las simulaciones se efectuaron considerando régimen laminar y para $Re_p \geq 250$ régimen turbulento. Para el caso particular de $Re_p=250$ se realizaron simulaciones con las dos condiciones de flujo pero con la opción de flujo laminar el *software FLUENT* no logró alcanzar la condición de convergencia.
- ✓ Se seleccionó el modelo de turbulencia Spalart-Allmaras para realizar las simulaciones a partir de las cuales se evaluarían los parámetros del MDZ, ya que, como se mencionó en el Capítulo VI, no se pudo alcanzar la convergencia del balance de energía con el modelo Estándar k-ε.

8.3 Coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w

Se realizaron las simulaciones por CFD con el fin de generar los campos de temperatura y velocidad correspondientes a diversas condiciones de flujo. A partir de los dominios de las variables así determinados, para las distintas configuraciones y situaciones de flujo, se obtuvieron los valores del parámetro h_w por medio de la ecuación 3.1:

$$Q_w = h_w (T_w - T_I) \quad (3.1)$$

donde T_w es la temperatura de la pared; T_I es la temperatura de la zona “I” que, según se planteó en la formulación del MDZ (Capítulo III), varía unidimensionalmente en la dirección axial. T_I se calcula como la temperatura de mezclado de taza evaluada sobre el volumen correspondiente a la zona “I”, por medio de la expresión:

$$T_l = \frac{\int_{V_l} T u_z dV}{\int_{V_l} u_z dV} \quad (8.1)$$

donde V_l es el volumen de la región l , limitado por la pared de temperatura constante y por un plano localizado a la distancia $d_p/2$ en la dirección “y”.

El flujo de calor desde la pared del tubo, Q_w , se obtiene como reporte alfanumérico de las simulaciones del *software FLUENT*. El programa lo calcula por medio de la siguiente expresión:

$$Q_w = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^n Q_{wi} \cdot A_i \quad (8.2)$$

donde Q_{wi} es el flujo de calor sobre la cara de área A_i de cada volumen de control localizado sobre la superficie a temperatura constante y A es el área total de la superficie considerada.

Se llevaron a cabo numerosas simulaciones en el programa *FLUENT*, sobre la celda adoptada de siete estratos, variando la porosidad del lecho y el número de Reynolds. En la Figura 8.1 se muestra el perfil de distribución de temperatura en la celda periódica producto de la simulación de una celda con arreglo romboédrico y $Re_p=1000$.

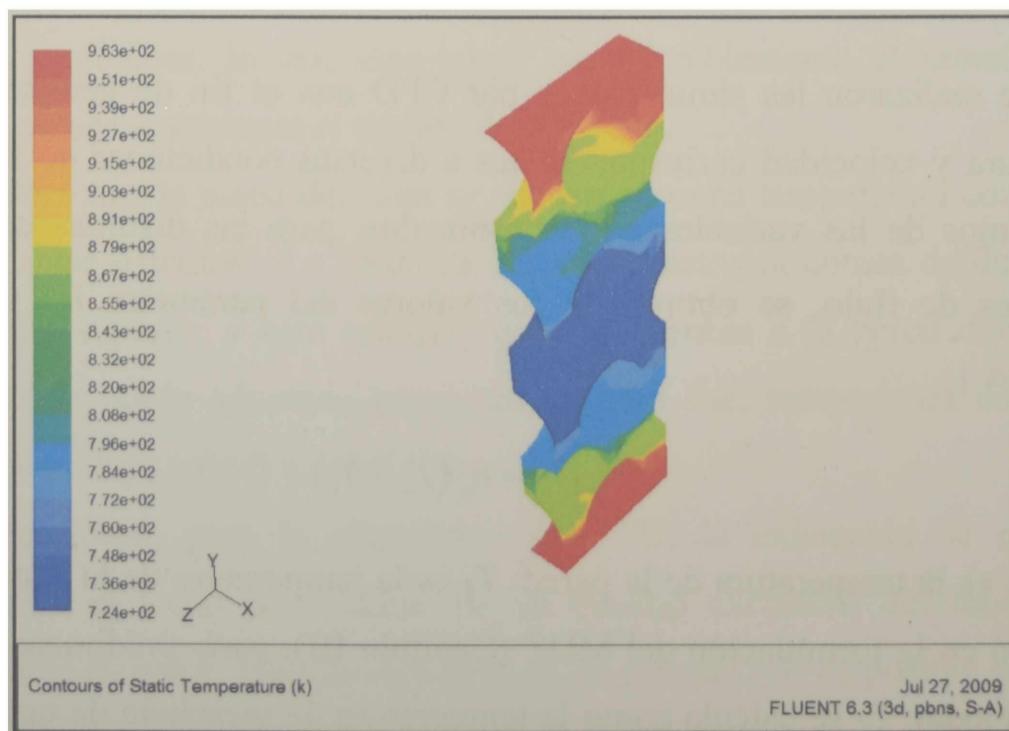


Figura 8.1. Perfil de temperaturas sobre las fronteras de la celda.

La distribución de temperatura que se observa en la figura es la esperada para un sistema con ambas paredes a la misma temperatura y una corriente de fluido de menor temperatura.

En la Figura 8.2 se presenta el mapa de flujo de calor sobre la superficie a temperatura T_w para la misma simulación. Como dato de interés, es importante mencionar que el mapa de flujo de calor es coincidente en presentar la forma de herradura, reportada en la bibliografía (Nijemeisland y Dixon, 2004), para las regiones de mayor espesor de gas entre la pared y la partícula.

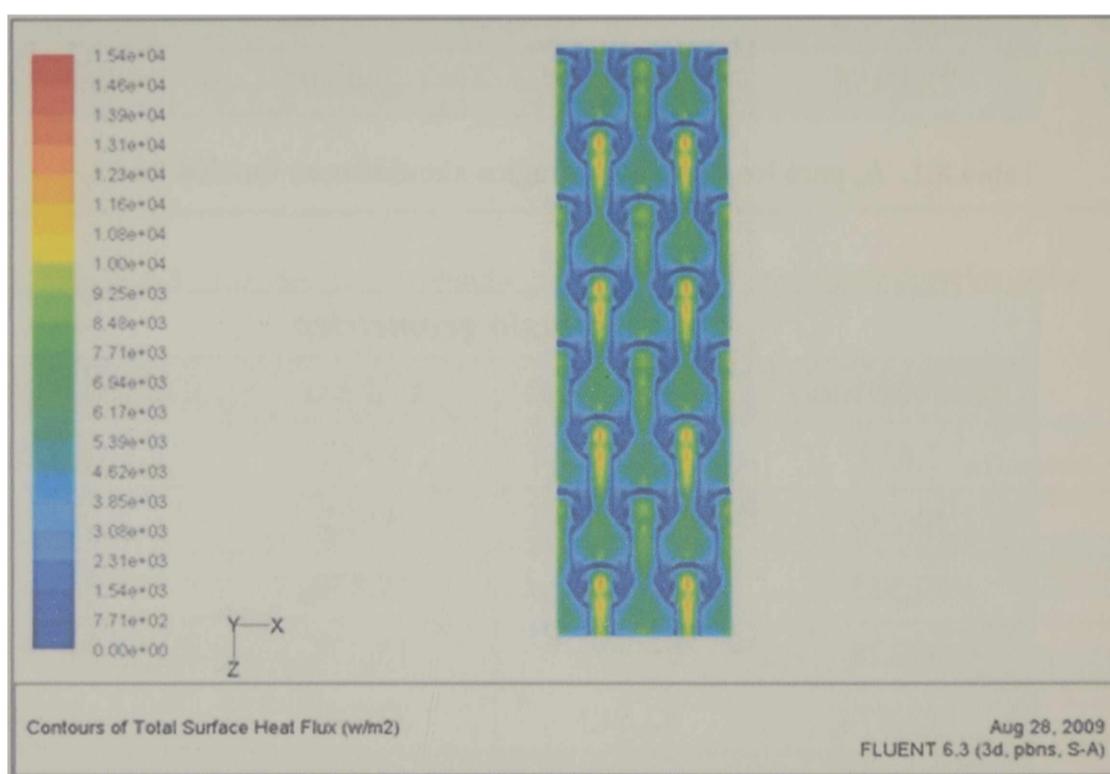


Figura 8.2. Mapa de Flujo de Calor sobre la pared de la celda (temperatura T_w), en $W m^{-2}$

En las Tablas 8.1 y 8.2 se presentan los resultados obtenidos del parámetro h_w y del correspondiente número de Nusselt ($Nu_w = h_w d_p / k_g$) en función del número de Reynolds, para los distintos arreglos simulados.

Adicionalmente, los resultados obtenidos de Nu_w se muestran en la Figura 8.3, conjuntamente con los valores obtenidos a partir de las expresiones predictivas de otros autores (detallados en la Tabla 8.3) y con los resultados reportados por Guardo y colab. (2005) obtenidos por CFD utilizando cuatro modelos de turbulencia diferentes (Estándar $k-\epsilon$, Spalart-Allmaras, $RNG k-\epsilon$ y $k-\omega$) y bajo condiciones operativas similares a las adoptadas en este trabajo.

Re_p	<i>Arreglo geométrico</i>			
	Romboédrico	Ortorrómico	Cúbico	Cúbico Compacto
100	14,892	40,167	27,370	38,924
250	227,886	153,807	50,530	84,722
500	393,686	295,491	84,001	132,904
750	539,861	378,429	104,063	196,540
1000	643,208	467,864	131,625	224,104
1250	679,950	514,356	161,385	262,628
1500	701,583	524,455	184,451	361,508
1750	766,426	585,341	215,003	384,169
2000	783,458	605,888	260,591	459,231

 Tabla 8.1. h_w para los diferentes arreglos simulados en función de Re_p

Re_p	<i>Arreglo geométrico</i>			
	Romboédrico	Ortorrómico	Cúbico	Cúbico Compacto
100	2,629	7,092	4,832	6,873
250	40,239	27,158	8,922	14,959
500	69,515	52,176	14,832	23,467
750	95,326	66,821	18,374	34,704
1000	113,574	82,613	23,241	39,571
1250	120,062	90,822	28,496	46,373
1500	123,882	92,605	32,569	63,833
1750	135,332	103,356	37,964	67,835
2000	138,339	106,984	46,014	81,088

 Tabla 8.2. Nu_w para los diferentes arreglos simulados en función de Re_p

En la Figura 8.3 puede observarse que los valores de Nu_w obtenidos para el arreglo romboédrico presentan una buena concordancia con los reportados por Guardo y colab. (2005) utilizando el modelo de turbulencia de Spalart-Allmaras. Si bien en la publicación mencionada no se reporta la porosidad del lecho, es importante señalar que la distribución de las partículas sobre la pared del tubo es idéntica a la del arreglo romboédrico y que en dicho trabajo los autores utilizaron como fluido aire, con un número de Prandtl cercano a 1.

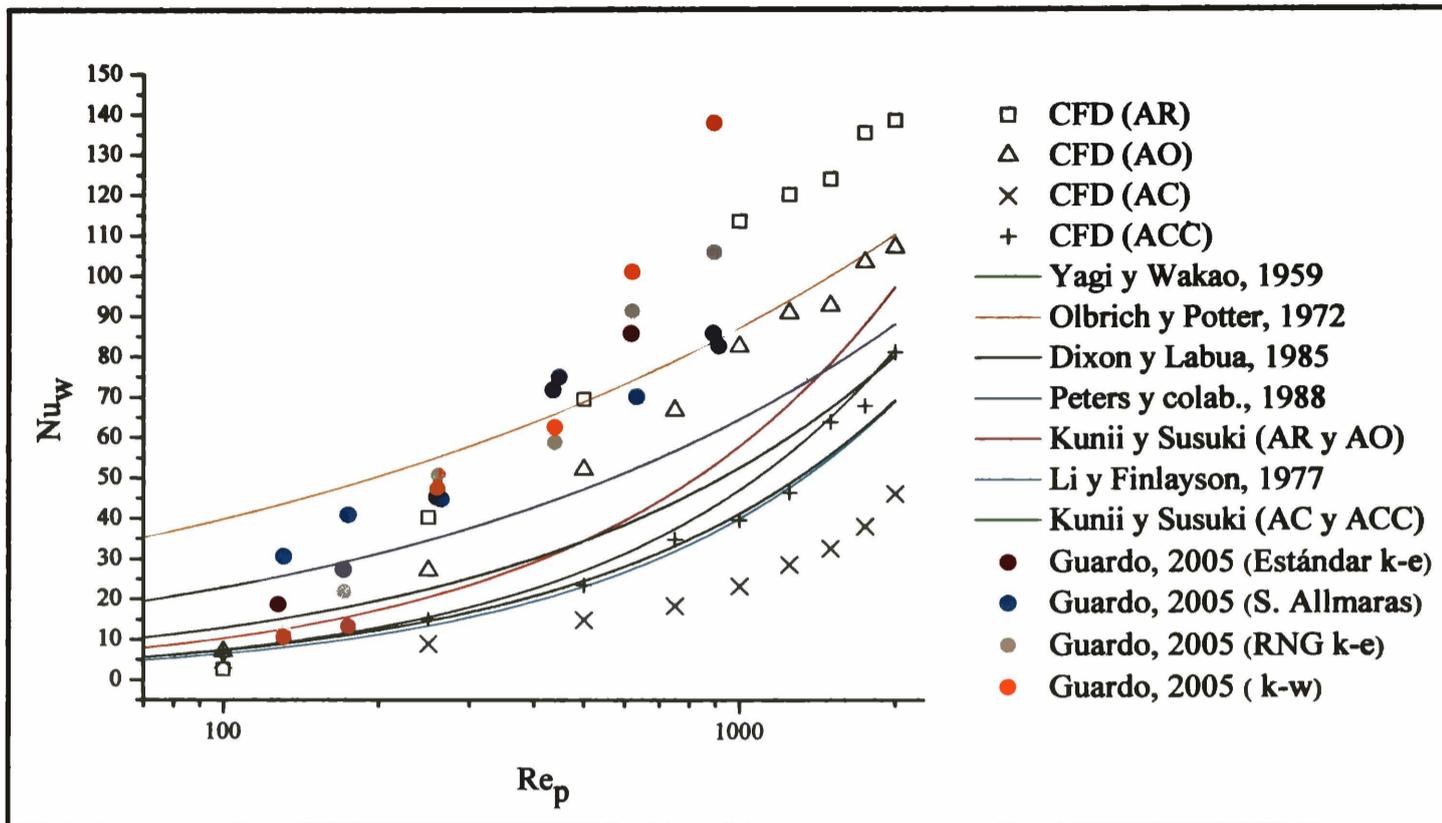


Figura 8.3 . Nu_w Vs. Re_p evaluados según distintos modelos y correlaciones.

Referencia	a	β	γ	Geometría de las Partículas
Yagi y Wakao (1959)	0,2	0,80	1/3	esférica
Olbrich y Potter (1972)	8,9	0,34	1/3	esférica y cilíndrica
Li y Finlayson (1977)	0,17	0,79	0	esférica
Dixon y Labua (1985)	$1 - (d_p / D_t)$	0,61	1/3	diversas geometrías
Kunii y Suzuki (1968)	$0,06 / (\epsilon_w)^2$	0,75	1/3	esférica
Peters y colab. (1988)	$4,9 (d_p / D_t)^{0,26}$	0,5	1/3	esférica

Tabla 8.3. Correlaciones de Nu_w , basadas en la ecuación: $Nu_w = a Re_p^\beta Pr^\gamma$

A partir de los resultados obtenidos por CFD y de su comparación con las correlaciones citadas en la Tabla 8.3, puede considerarse que la metodología desarrollada permite obtener adecuadamente el valor del coeficiente de transferencia de calor en la pared para las condiciones analizadas. Por otra parte es necesario remarcar que las correlaciones previas reportadas en la bibliografía, tales como las graficadas en la Figura 8.3, no pueden reproducir adecuadamente el parámetro Nu_w para lechos fijos de baja relación de aspecto y diferentes porosidades. Cabe destacar que, de las correlaciones aplicadas, sólo la de Kunii y Suzuki (1968) incorpora una funcionalidad

con la porosidad sobre la pared. Para los arreglos estudiados, la distribución de las partículas y por lo tanto la porosidad sobre la pared es equivalente en los arreglos siguientes: romboédrico/ortorrómbico y cúbico/cúbico compacto. Por esta razón, en la Figura 8.3 se trazaron dos curvas diferentes para la correlación de Kunii y Suzuki (1968). Aún así, de la observación de la Figura 8.3, se desprende que esta funcionalidad no es suficiente para describir la variación del parámetro Nu_w en lechos de baja relación de aspecto.

En consecuencia, con el objeto de poder evaluar el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, requerido por el MDZ, se efectúa una regresión con el *software* *ATHENA 12.0*. La expresión obtenida, con un valor del coeficiente de correlación de $R^2 = 0,96122$, es función de la porosidad de la zona 1, ε_1 , del número de Reynolds de dicha zona, Re_{p1} y del número de Prandtl. Se utilizaron para el cálculo de Pr las propiedades del aire en las condiciones de trabajo pero su coeficiente no fue ajustado, sino que se adoptó el efecto usual del número de Prandtl en correlaciones de este tipo, asignándole el valor $\gamma = 1/3$:

$$Nu_w = A \cdot \varepsilon_1^\alpha \cdot Re_{p1}^\beta \cdot Pr^\gamma \quad (8.3)$$

donde

$$A = 9,59E^{-03} \pm 7,523 \cdot 10^{-03} \quad \alpha = -5,62 \pm 6,543 \cdot 10^{-01} \quad \beta = 0,584 \pm 7,047 \cdot 10^{-02} \quad \gamma = 1/3$$

En la Figura 8.4 se graficaron los valores de Nu_w obtenidos a partir de las simulaciones efectuadas con *FLUENT* conjuntamente con los valores calculados como resultado de la aplicación la correlación 8.3. Para Re_p muy bajos, como puede observarse en la Figura 8.4, la correlación obtenida no logra un buen ajuste, razón por la cual se acota su validez al rango: $250 \leq Re_p \leq 2000$.

A fin de efectuar un análisis de los resultados, se presentan, en la Tabla 8.4, las porosidades y relaciones de velocidades superficiales de las configuraciones geométricas estudiadas, donde $\langle u_1 \rangle$ es la velocidad superficial de la Zona 1 y $\langle u_c \rangle$ la de la zona central. Para cada arreglo, se presentan los valores de $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$ promedio de las simulaciones efectuadas para $100 \leq Re_p \leq 2000$.

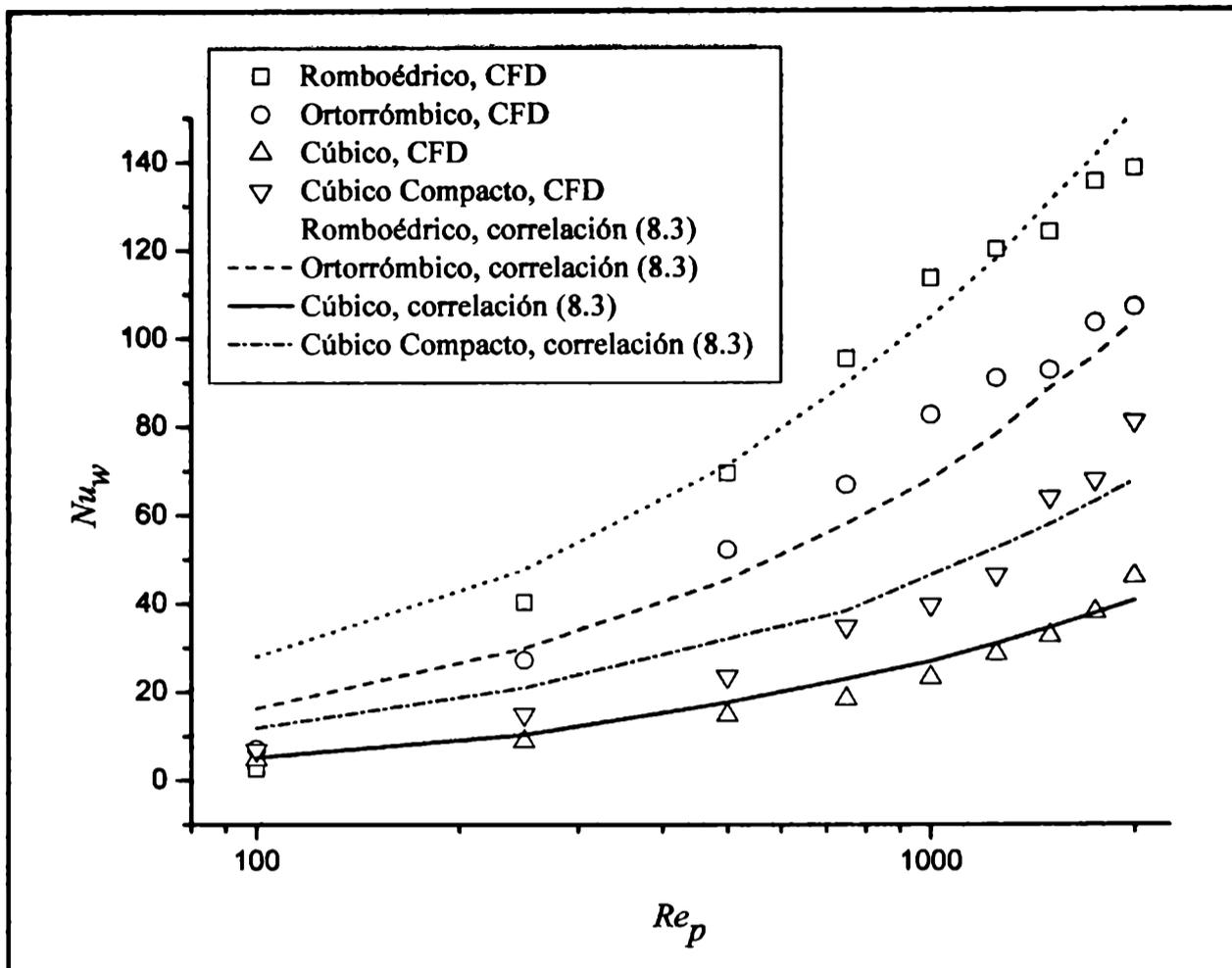


Figura 8.4. Nu_w Vs. Re_p evaluados para distintos arreglos de partículas

Como puede observarse, los arreglos romboédrico y ortorrómbico, presentan los valores más elevados de Nu_w mientras que los arreglos cúbico y cúbico compacto arrojan valores inferiores. Este comportamiento puede asociarse a la distribución de las partículas sobre la pared. El fluido que circula por dicha zona, en los arreglos romboédrico y ortorrómbico, encuentra partículas que le obstruyen el flujo (Figura 6.1, Capítulo VI), alterando la capa límite y produciendo, en consecuencia, un mezclado que favorece la transferencia de calor. Sin embargo, en el caso de los arreglos cúbico y cúbico compacto el fluido encuentra un camino más directo, sin lateralizaciones en la dirección x y desarrolla, por lo tanto, una capa límite de mayor espesor. Las similitudes en la distribución de las partículas sobre la pared de los arreglos romboédrico-ortorrómbico por un lado y cúbico-cúbico compacto por otro lado, se ven reflejadas en las porosidades de la zona 1, ε_1 . En la Tabla 8.4, puede observarse que el valor de ε_1 para los arreglos romboédrico y ortorrómbico es de 0,41, mientras que para los arreglos cúbico y cúbico compacto alcanza el valor de 0,49.

En cada uno de los dos grupos señalados, el arreglo con mayor relación

$\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$ arroja los valores más altos de Nu_w . Esto es razonable, ya que un valor de $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$ elevado indica que el caudal se canaliza por la zona cercana a la pared, favoreciendo el fenómeno de transferencia de calor por el mecanismo convectivo. Por ejemplo este efecto puede observarse entre los arreglos romboédrico y ortorrómbico, ambos con porosidad volumétrica $\varepsilon_1 = 0,41$, y con relaciones $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$ diferentes. El valor de la relación de velocidades para el arreglo ortorrómbico (0,877) es menor que el correspondiente al arreglo romboédrico (2,243), lo que se traduce en valores de los coeficientes de transferencia de calor sobre la pared superiores para este último arreglo. El mismo fenómeno puede observarse al comparar los Nu_w obtenidos para los arreglos cúbico y cúbico compacto.

Arreglo	ε_{celda}	ε_1	$\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$
Romboédrico	0,3038	0,4118	2,243
Ortorrómbico	0,4133	0,4138	0,877
Cúbico	0,4923	0,4923	0,976
Cúbico Compacto	0,3216	0,4922	3,753

Tabla 8.4. Porosidades y relación de caudales para distintos arreglos de partículas[^]

8.4 Coeficiente de transferencia de calor entre las zonas “1” y “central”, h_{1c}

Entre las Zonas “1” y “central” se produce la transferencia de calor, cuantificada por el flujo Q_{1c} . Tal como se señaló en el Capítulo III, Q_{1c} se expresa mediante:

$$Q_{1c} = h_{1c} (T_1 - T_{c1}) \quad (3.2)$$

donde T_{c1} es la temperatura de la Zona “central” en su frontera con la zona “1”.

En esta sección se presenta la metodología de evaluación del parámetro h_{1c} y se muestran y analizan los resultados obtenidos.

Para poder obtener los valores del parámetro h_{1c} fue necesario recurrir a la formulación del MDZ presentada en el Capítulo III. En la sección 3.4.1 de dicho

capítulo se desarrolló el método de resolución del sistema de ecuaciones formulado, resta ahora describir su implementación efectuada en el *software ATHENA 12.0*.

La ecuación (3.29), ecuación característica del sistema a resolver, admite una serie infinita de raíces β_j , que se denominan *autovalores*:

$$\boxed{f(\beta) = \beta \operatorname{sen}\beta P(\beta) - Bi_{1c} \cos \beta Q(\beta) = 0} \quad (3.29)$$

donde
$$Bi_{1c} = \frac{h_{1c} L_y}{k_{er}} \quad (3.12)$$

Sin embargo, para el caso de flujo totalmente desarrollado (característica del flujo en estudio), sólo es necesario calcular el primer autovalor debido a que los términos restantes de la solución, dependientes de los demás autovalores, resultan despreciables. Una vez obtenido este valor, quedan definidas las expresiones que permiten calcular los perfiles de temperatura de las zonas “1” y “central” a partir de las ecuaciones presentadas en la Tabla 3.1:

$$T_1(z) = C \exp(-\lambda \beta^2 z / w_c) \left[\cos \beta - \beta \frac{\operatorname{sen}\beta}{Bi_{1c}} \right] + T_w \quad (8.4)$$

$$T_c(z, y^*) = C \exp(-\lambda \beta^2 z / w_c) \cos(\beta y^*) + T_w \quad (8.5)$$

donde, tal como se indico en la sección 3.4 del Capítulo III, y^* es una variable adimensional definida como: $y^* = y/L_y$ donde L_y es el semi-espesor de la zona central del MDZ.

Si se tiene en cuenta, tal como se observa luego en los resultados obtenidos, que el fluido no incrementa significativamente su temperatura a lo largo de la longitud de la celda de cálculo, los términos exponenciales de las ecuaciones 8.4 y 8.5 con “z” en el argumento no varían y por lo tanto pueden ser incorporados dentro de la constante, obteniéndose las expresiones:

$$T_1 = C' \left[\cos \beta - \beta \frac{\operatorname{sen}\beta}{Bi_{1c}} \right] + T_w \quad (8.6)$$

$$T_c(y^*) = C' \cos(\beta y^*) + T_w \quad (8.7)$$

El flujo de calor sobre la pared está dado por la ecuación: $Q_w = h_w (T_w - T_1)$, por lo tanto puede utilizarse la expresión 8.6 para calcular la constante C' :

$$C' = -\frac{Q_w}{h_w \left[\cos \beta - \beta \frac{\text{sen} \beta}{Bi_{1c}} \right]} \quad (8.8)$$

El valor de Q_w es extraído como resultado de las simulaciones efectuadas con el programa *FLUENT*, por lo tanto, la ecuación 8.8 permite determinar la constante de manera tal que el MDZ satisfaga exactamente el valor del flujo de calor transferido.

Finalmente, es posible calcular la temperatura de la zona “*central*” reemplazando la expresión 8.8 en la ecuación 8.7:

$$T_c(y^*) = \frac{-Q_w \cos(\beta y^*)}{h_w \left[\cos \beta - \beta \frac{\text{sen} \beta}{Bi_{1c}} \right]} + T_w \quad (8.9)$$

La ecuación 8.9 permite obtener el perfil de temperatura en la región “*central*” del lecho, de acuerdo al MDZ.

Se llevó a cabo la regresión, por mínimos cuadrados, de los perfiles de temperatura generados para la zona central. De esta forma, los perfiles obtenidos por CFD permitieron ajustar los parámetros h_{1c} y k_{er} contenidos en la expresión (8.9) del MDZ, en el número de Biot (ecuación 3.12).

Los coeficientes h_{1c} obtenidos (Tabla 8.5) se expresan en función de los correspondientes números de Nusselt, como: $Nu_{1c} = h_{1c} d_p / k_g$, cuyos valores se vuelcan en la Tabla 8.6 para los diferentes arreglos estudiados y para $100 \leq Re_p \leq 2000$.

El procedimiento seguido para llevar a cabo la extracción de los valores de los perfiles de temperatura de la zona central consiste en dividir el volumen de dicha zona mediante planos $y=\text{constante}$, con el objeto de obtener diez regiones volumétricas. Luego, en cada una de ellas se evalúa la temperatura de mezclado de taza obteniendo así el perfil requerido.

Re_p	<i>Arreglo geométrico</i>			
	Romboédrico	Ortorrómico	Cúbico	Cúbico Compacto
100	6.869	3.779	7.149	11.558
250	32,880	12,557	18,422	43,410
500	84,841	18,684	51,201	93,389
750	137,697	30,820	73,801	157,431
1000	155,599	37,796	101,645	217,858
1250	201,024	51,851	114,427	251,380
1500	232,550	55,670	126,850	338,891
1750	238,710	76,141	155,695	365,270
2000	262,501	90,755	169,011	447,158

 Tabla 8.5. h_{lc} para los diferentes arreglos simulados en función de Re_p

Re_p	<i>Arreglo geométrico</i>			
	Romboédrico	Ortorrómico	Cúbico	Cúbico Compacto
100	1.213	0.667	1.262	2.041
250	5,805	2,217	3,252	7,665
500	14,980	3,299	9,040	16,490
750	24,314	5,442	13,031	27,798
1000	27,475	6,674	17,948	38,468
1250	35,496	9,155	20,205	44,387
1500	41,062	9,829	22,398	59,839
1750	42,148	13,444	27,492	64,497
2000	46,351	16,025	29,843	78,957

 Tabla 8.6. Nu_{lc} para los diferentes arreglos simulados en función de Re_p

En la Figura 8.5 se grafican los valores de Nu_{lc} obtenidos en función de Re_p . Adicionalmente, se incluyen los valores de Nu_w , calculados en la sección 8.3 para los arreglos geométricos y Re_p correspondientes.

En la Figura 8.5 se observa, en particular para los arreglos ortorrómico y romboédrico, una acentuada diferencia entre los valores Nu_{lc} y Nu_w . Ello es debido a la diferencia de mecanismos que cuantifica cada coeficiente de transferencia. Mientras que Nu_w resulta de la habilidad de la corriente que circula por la zona I de intercambiar calor con la pared, como fuera descrito previamente, Nu_{lc} cuantifica la velocidad de

intercambio de calor entre la corriente de la zona 1 y el fluido que circula a distancias de la pared superiores a $d_p/2$ (el límite de la zona 1). Dicho intercambio debe producirse a través de las aberturas originadas por el acomodamiento de las pastillas del primer estrato, cuya área transversal mínima se produce a la distancia $d_p/2$ de la pared (Figura 8.6).

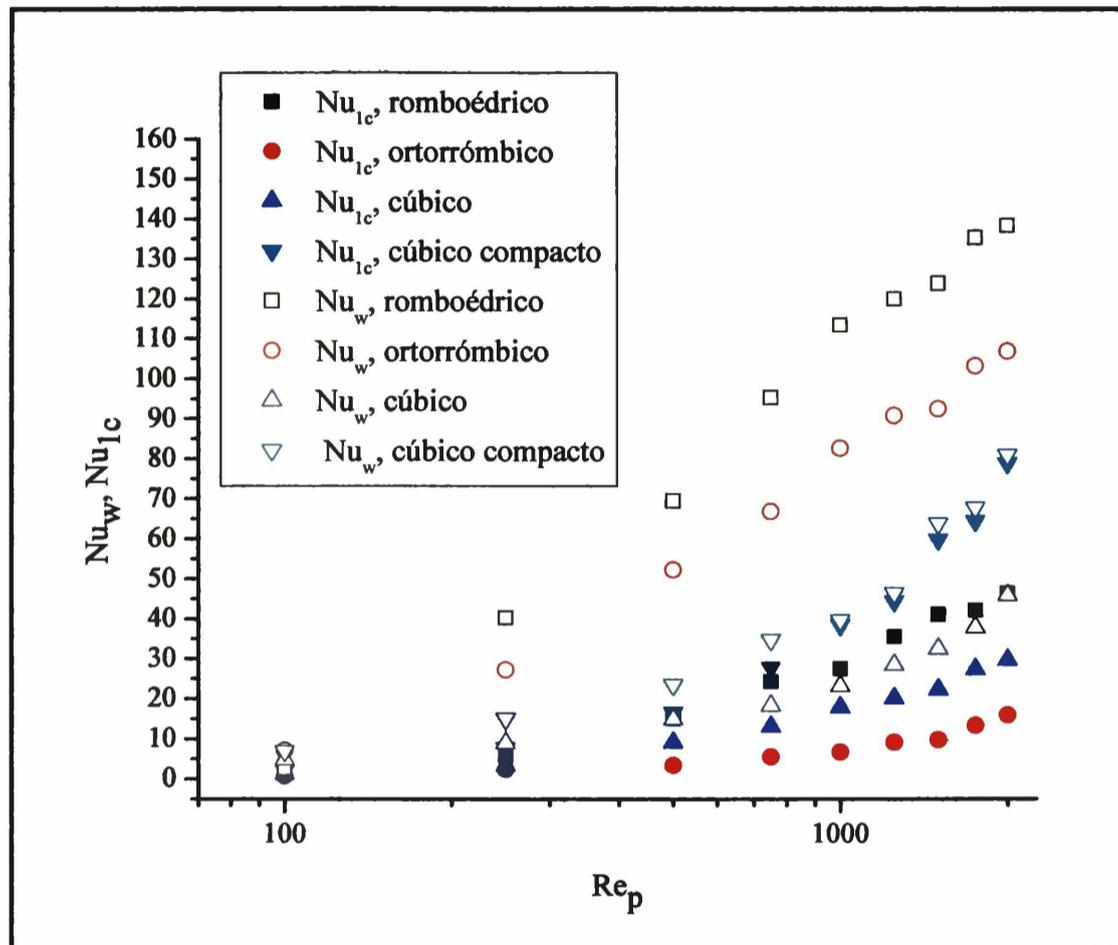


Figura 8.5. Nu_{1c} y Nu_w Vs. Re_p

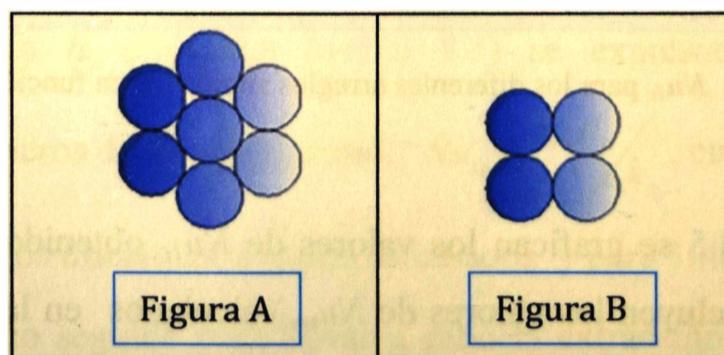


Figura 8.6. Aberturas originadas en el primer estrato. A: arreglos romboédrico y ortorrómbico. B: arreglos cúbico y cúbico compacto

Por lo tanto, esta distancia determina la sección de mayor dificultad para el intercambio. De esta manera, mientras que la disposición de las pastillas de la primera capa de los arreglos ortorrómbico y romboédrico resulta satisfactoria para arrojar altos

//

valores de Nu_w , el área mínima de las aberturas es muy pequeña, resultando significativamente inferior a la que presentan los arreglos cúbico y cúbico compacto.

Existe un segundo efecto que condiciona el valor de Nu_{lc} . Para el intercambio de calor a través de las aberturas se pueden considerar mecanismos de tipo conductivo y convectivo. Este último se verá incrementado por el aumento en la turbulencia del sistema, lo que *per se* justificaría el incremento de Nu_{lc} con Re_p . Por otro lado, se debe contemplar un efecto geométrico ocasionado por la posición relativa de las pastillas contiguas del primer y segundo estrato. Si el arreglo geométrico es tal que las pastillas del segundo estrato se enfrenten con las del primer estrato (caso de los arreglos ortorrómbico y cúbico), las líneas de flujo en la región que se extiende entre $d_p/2$ y $\frac{3}{2}d_p$ de la pared resultarán casi rectilíneas y muy concentradas a distancias de alrededor de $1d_p$, debido a que en esta región se genera un canal con alta porosidad y prácticamente libre de obstrucciones. De esta manera, la mayor proporción del fluido circula relativamente lejos de la sección crítica de mínima área a $d_p/2$ de la pared. Por el contrario, para los arreglos romboédrico y cúbico compacto las partículas de la segunda capa se enfrentan con los huecos de la primera y se acomodan parcialmente en los mismos. En consecuencia, el canal previamente descrito no tiene lugar, las líneas de flujo dejan de ser rectilíneas y se aproximan mucho más a la sección de mínima área, facilitando el intercambio a través de las mismas.

A partir de esta descripción cualitativa surge que el arreglo con menor valor de Nu_{lc} deberá ser el ortorrómbico, dado que simultáneamente presenta un valor pequeño del área mínima y permite la formación de canales con flujo rectilíneo. Por otro lado, ambos efectos contrapuestos se presentan para el arreglo cúbico compacto y como consecuencia resultan los mayores valores de Nu_{lc} (Figura 8.5).

A fin de correlacionar los resultados presentados en la Figura 8.5, se consideró que el valor del área mínima de las aberturas del primer estrato tiene que guardar estrecha relación con el valor de la porosidad de la zona 1, ε_1 . Por otro lado, la posibilidad que las partículas de la segunda capa se acomoden o no en los huecos del primer estrato estará relacionada con la diferencia de valores de porosidad de la zona 1 y de la región que se extiende entre $\frac{1}{2}d_p$ y $1d_p$. Este último se denota ε_2 y se reporta junto a ε_1 en la Tabla 8.7. Teóricamente, ambos valores ε_1 y ε_2 debieran resultar iguales para los arreglos cúbico y ortorrómbico. Las pequeñas diferencias en la Tabla

8.7 se deben a que los mismos fueron calculados numéricamente por el propio *FLUENT*. No obstante, en el caso de un lecho real, el valor ε_2 no se podrá predecir con facilidad, resultando mucho más accesible el valor de la porosidad global, que referido a las presentes simulaciones corresponden a la porosidad global de la celda de trabajo, ε_{celda} , también informado en la Tabla 8.7. En la misma se aprecia que los valores ε_2 y ε_{celda} resultan efectivamente similares.

Arreglo	ε_{celda}	ε_1	ε_2
Romboédrico	0,3041	0,4118	0,3118
Ortorrómico	0,4138	0,4138	0,4149
Cúbico	0,4923	0,4923	0,4948
Cúbico Compacto	0,3216	0,4922	0,3134

ε_1 : porosidad en la zona 1; ε_2 : porosidad en zona comprendida entre $\frac{1}{2} dp$ y $1 dp$

Tabla 8.7. Porosidades y relación de caudales para distintos arreglos de partículas

En consecuencia, para la correlación que se expresa en la ecuación (8.10) se empleó la diferencia $\varepsilon_1 - \varepsilon_{celda}$ para cuantificar el efecto aludido de canalización en la región del segundo estrato. Con respecto al tipo de fluido utilizado se consideraron las propiedades del aire a la temperatura promedio de trabajo y se adoptó el valor de 1/3 como exponente para el número de Prandtl. El rango de validez de la ec. (8.10) es $100 \leq Re_p \leq 2000$.

$$Nu_{1c} = Re_p (A \varepsilon_1^\alpha + B ((\varepsilon_1 - \varepsilon_{celda}) / \varepsilon_1^\beta)) Pr^\gamma \quad (8.10)$$

donde $A = 0,366 \pm 2,017 \cdot 10^{-1}$ $B = 4,85 \cdot 10^{-2} \pm 2,854 \cdot 10^{-3}$ $\alpha = 4,347 \pm 7,553 \cdot 10^{-1}$

$$\beta = 1,5 \pm 6,876 \cdot 10^{-1} \quad \gamma = 1/3$$

con $R^2=0,98911$.

En la expresión 8.10 el primer término entre paréntesis tiene en cuenta el efecto del tamaño de las aberturas del primer estrato en contacto con la pared y el segundo

término el efecto de la disposición de las partículas del segundo estrato con respecto a las del primero.

En la Figura 8.7 se graficaron los valores de Nu_{lc} obtenidos conjuntamente con los valores calculados como resultado de la aplicación de la correlación 8.10.

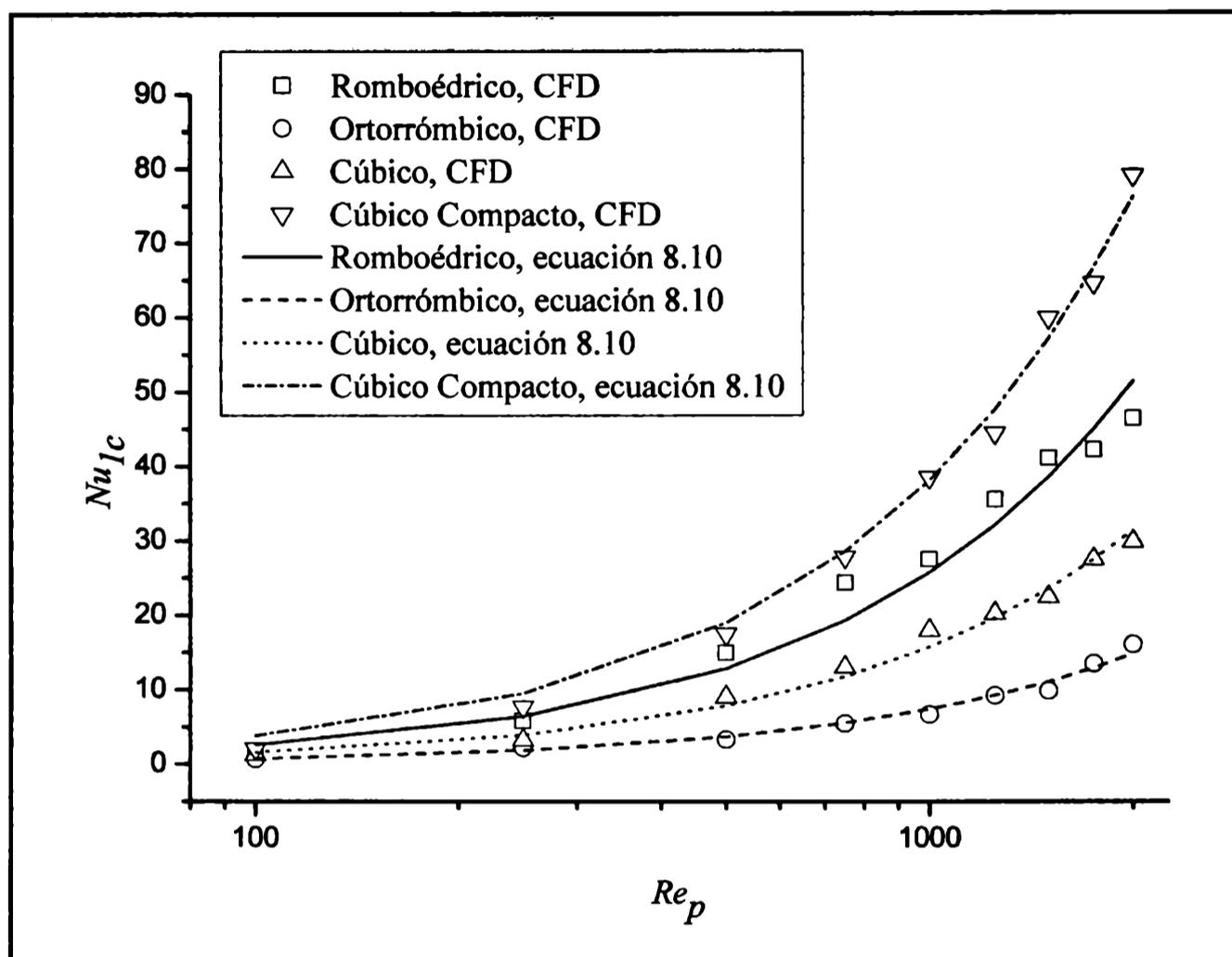


Figura 8.7. Nu_{lc} vs. Re_p , evaluados para distintos arreglos de partículas

8.5 Conductividad efectiva radial de la zona central, k_{er}

Tal como se detalló en la sección anterior, la información generada por las simulaciones en CFD se utiliza como ingreso al programa de regresión desarrollado en el software *ATHENA*, con el objeto de obtener como resultado los parámetros k_{er} y h_{lc} del MDZ. Este procedimiento se repitió para cada situación de arreglo geométrico y flujo considerada.

La conductividad efectiva radial es un parámetro que considera en forma unificada la acción conjunta de los mecanismos de transporte de calor intervinientes en el seno del lecho fijo. Esencialmente, este parámetro contempla la adición de diferentes

componentes, representando la convección transversal (radial), el aporte conductivo del gas estanco, el de las partículas y, eventualmente, el mecanismo radiante. Estos dos últimos no se tienen en cuenta en este trabajo en virtud de la decisión de focalizar este estudio en el análisis exhaustivo de la convección y su contribución al transporte de calor, exclusivamente.

Expresada en términos de los mecanismos precedentes, la conductividad efectiva radial puede escribirse como:

$$k_{er} = k_{eg} + k_{es} \quad (8.11)$$

donde k_{eg} es la conductividad efectiva del gas, que es la suma de la conducción en el gas intersticial ($\varepsilon \cdot k_g$) y de un término $k_{eg,conv}$ que representa el transporte de calor originado por las deflexiones que sufre el flujo de gas, con respecto a su dirección principal, para sortear el obstáculo que significan las partículas del lecho fijo (ecuación 8.12) que, lógicamente, será función de Re_p :

$$k_{eg} = \varepsilon k_g + k_{eg,conv} \quad (8.12)$$

La conductividad efectiva estanca, k_e^0 , permite agrupar todos los procesos conductivos que ocurren cuando, en el medio de partículas, no se tiene movimiento de fluido. k_e^0 se calcula a partir de la siguiente relación:

$$k_e^0 = \varepsilon k_g + k_{es} \quad (8.13)$$

Por lo tanto, la conductividad efectiva radial puede expresarse, reemplazando cada componente en la expresión 8.11, como:

$$k_{er} = k_e^0 + k_{eg,conv} \quad (8.14)$$

La conductividad efectiva radial calculada por el programa *ATHENA* es equivalente a k_{eg} , ya que en la simulación por CFD del lecho fijo se consideró a las partículas como adiabáticas y se estudió, exclusivamente, el aporte del gas.

En la bibliografía, existen numerosas correlaciones para el cálculo de la conductividad térmica efectiva. En la Tabla 8.8 se muestran las más difundidas (citadas por Wen y Ding, 2006) con el objeto de contrastar los valores calculados a partir de

ellas, con los resultados obtenidos en este trabajo. Con relación a la correlación de Bey y Eigenberger (2001) debe mencionarse que el término correspondiente a $k_{eg,conv}$ corresponde estrictamente a la formulación propuesta por Yagi y Kunii (1957).

Referencia	Conductividad térmica radial efectiva	Condiciones experimentales
Brunell y colab. (1949)	$k_{er} = k_g (5,0 + 0,061 Re_p)$ (8.15)	Esferas de vidrio
Bey y Eigenberger (2001)	$k_{er} = k_g \left(\frac{k_e^o}{k_g} + 0,1 Re_p Pr_r \right)$ (8.16)	Esferas de vidrio y cerámica $3,3 < d_t/d_p < 11$
Demirel y colab. (2000)	$k_{er} = k_g (10,433 + 0,0481 Re_p)$ (8.17)	Esferas de poliestireno $4,5 < d_t/d_p < 7,5$

Tabla 8.8. Correlaciones para k_{er} utilizadas en la comparación con los valores de CFD

A pesar de que las ecuaciones halladas en la bibliografía (que siguen la forma de la Ec. 8.14) incluyen el aporte del sólido a la conductividad efectiva, k_{es} , la comparación propuesta se considera válida teniendo presente que el aporte del sólido es despreciable frente al aporte convectivo.

En la Figura 8.8 se graficaron los valores de k_{er} obtenidos por el procedimiento descrito junto con los valores calculados a partir de las correlaciones citadas en la Tabla 8.8.

Si bien la ecuación de Brunell y colab. (1977) no especifica para su aplicación un rango de validez para la relación de aspecto del lecho, las ecuaciones de Demirel y colab. (2000) y Bey y Eigenberger (2001) sí indican haber sido desarrolladas, específicamente, para lechos de baja relación de aspecto con $4,5 < N < 7,5$ y $3,3 < N < 11$, respectivamente. Se utilizó la ecuación de Krupiczka (1967) para estimar la conductividad k_e^o en la correlación de Bey y Eigenberger, (2001):

$$\frac{k_e^o}{k_g} = \left(\frac{k_s}{k_g} \right)^n \quad (8.18)$$

donde k_s es la conductividad térmica del sólido y n es una constante experimental relacionada con la porosidad del lecho (ε) y con las conductividades térmicas de la partícula y del fluido, según:

$$n = 0,28 - 0,757 \log(\varepsilon) - 0,057 \log(k_s / k_g) \quad (8.19)$$

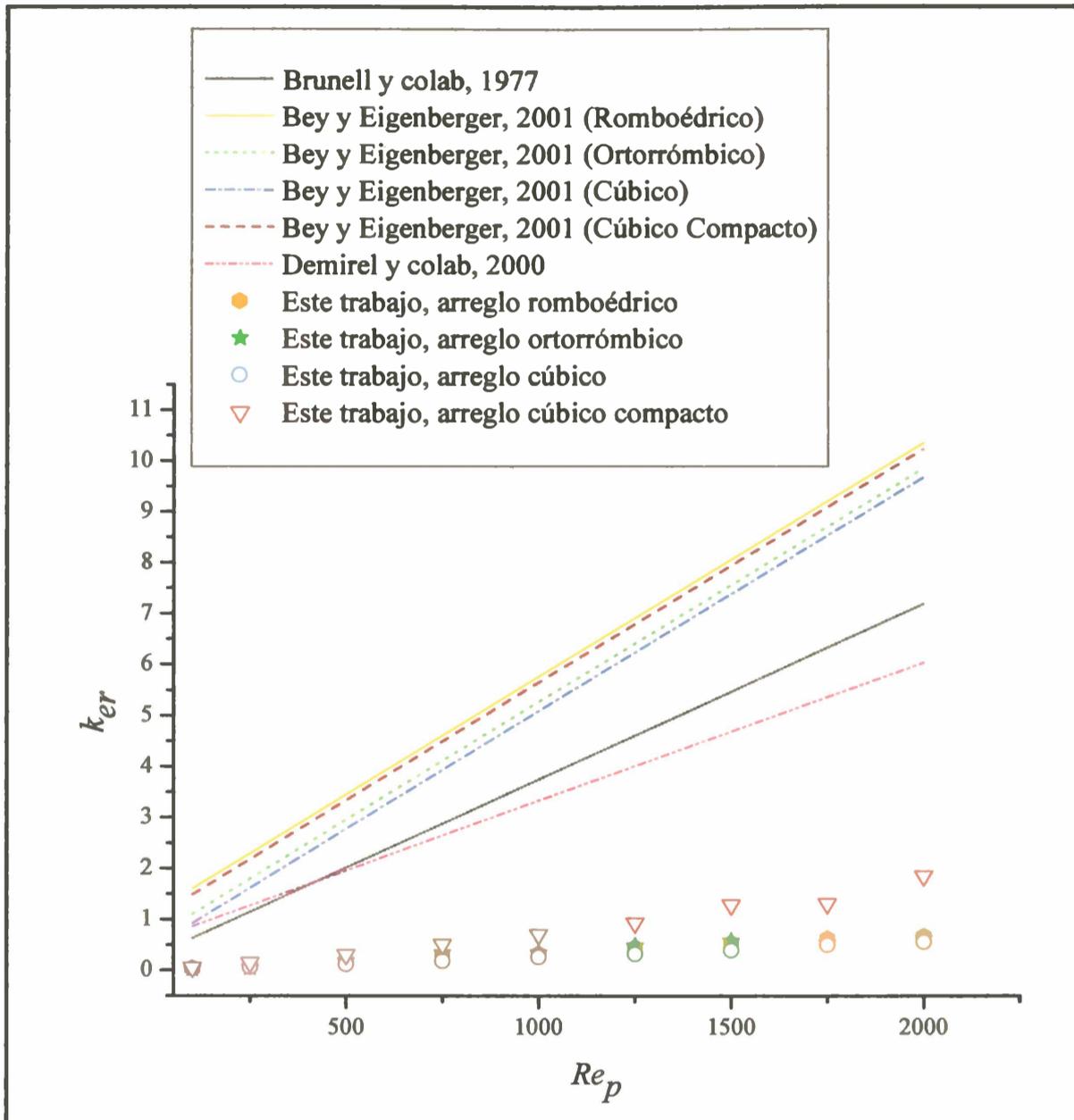


Figura 8.8. $k_{er,c}$ vs. Re_p evaluadas por CFD y según correlaciones de Tabla 8.8

En la [Figura 8.8](#) puede observarse que la conductividad efectiva radial que ajusta los perfiles de temperatura calculados en las simulaciones es sistemáticamente menor que el valor correspondiente calculado a partir de las correlaciones de la [Tabla 8.8](#). Aún en el caso de las correlaciones que específicamente fueron desarrolladas para representar el comportamiento de lechos de bajas relaciones de aspecto, se obtienen valores de conductividades mucho mayores que las obtenidas en los cálculos por CFD.

Al analizar esta notoria discrepancia debe remarcarse que el ordenamiento de las partículas generado por la pared, se atenúa gradualmente alrededor del centro de un lecho real, aun de baja relación de aspecto, generando posiciones relativas de las partículas que no responden a la estructura de un arreglo regular. El transporte de calor por el mecanismo de convección debido al movimiento lateral en la dirección “y”

perpendicular al flujo principal, constituye el aporte más importante a la conductividad efectiva radial. Tales lateralizaciones del flujo ocurren por la obstrucción impuesta por la presencia de las partículas. En los arreglos regulares, las partículas se ordenan en estratos paralelos y, en consecuencia, la presencia de las lateralizaciones de flujo es poco importante, resultando las líneas de flujo confinadas a la región demarcada por cada estrato.

En la Figura 8.9 se muestra la celda de cálculo construida para el arreglo romboédrico y en las Figuras 8.10 y 8.11 se presentan los vectores velocidad sobre dos planos x - y localizados en la posición axial $L_z/4$ y $L_z/2$ (Figura 8.9), donde L_z es la longitud de la celda de cálculo utilizada en la simulación. Los vectores han sido coloreados según la magnitud de la componente v_y de la velocidad intersticial.

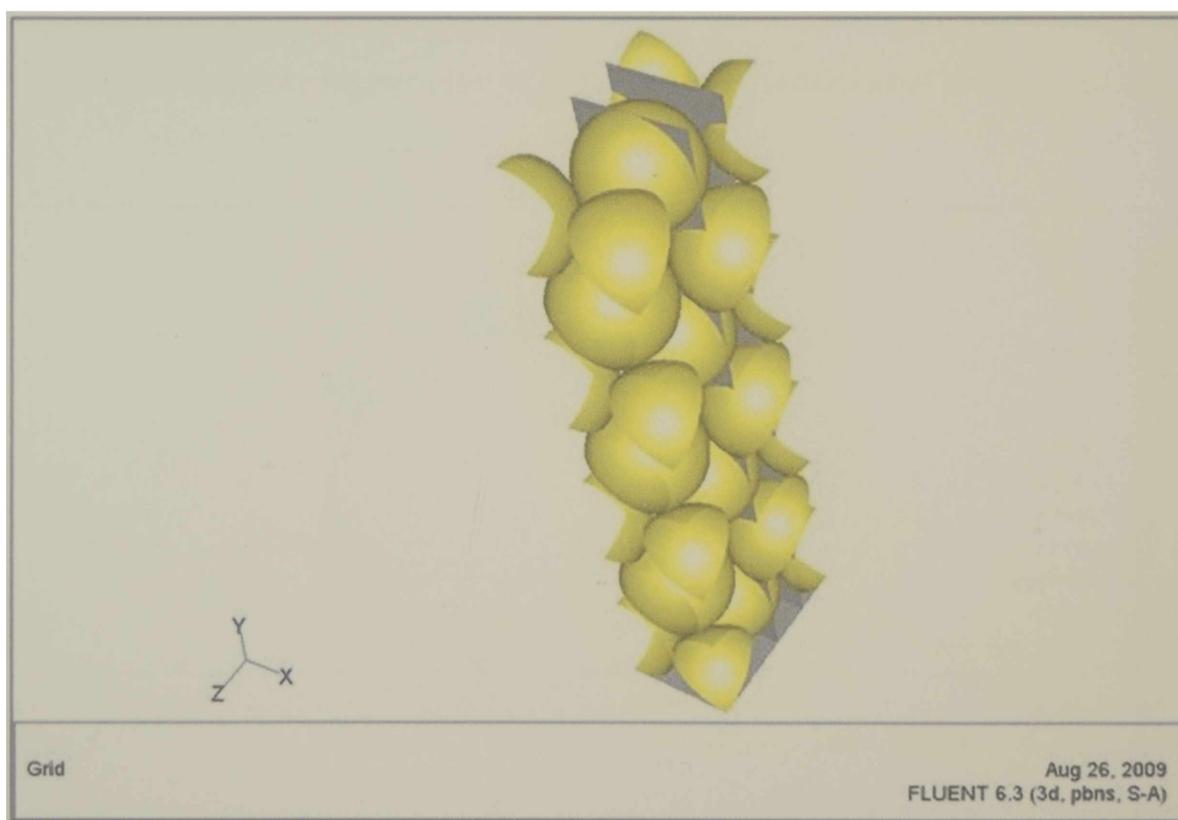


Figura 8.9. Celda de cálculo para el arreglo romboédrico. Planos $z=L_z/4$ y $z=L_z/2$

En las Figuras 8.10 y 8.11 puede observarse, para $Re_p=1000$, un predominio de los valores bajos, muy cercanos a cero, de la componente “y” de la velocidad intersticial.

En el Apéndice VIII.I se muestran, para los arreglos ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto, los gráficos de los vectores velocidad evaluados sobre planos x - y (localizados en posiciones axiales equivalentes a las presentadas para el arreglo romboédrico). En dichas figuras se observa, al igual que en el caso del arreglo romboédrico, una baja densidad de vectores de velocidad en la dirección “y”.

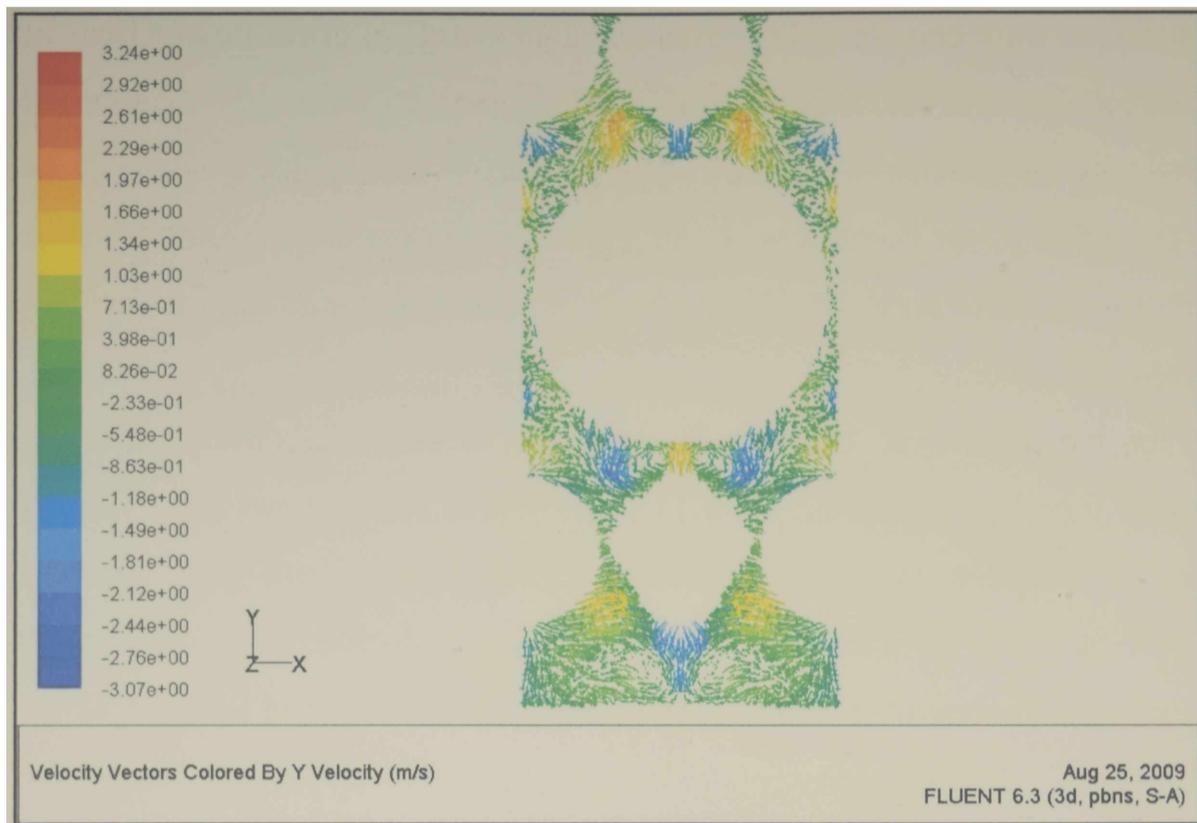


Figura 8.10. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/4$, para arreglo romboédrico y $Re_p = 1000$

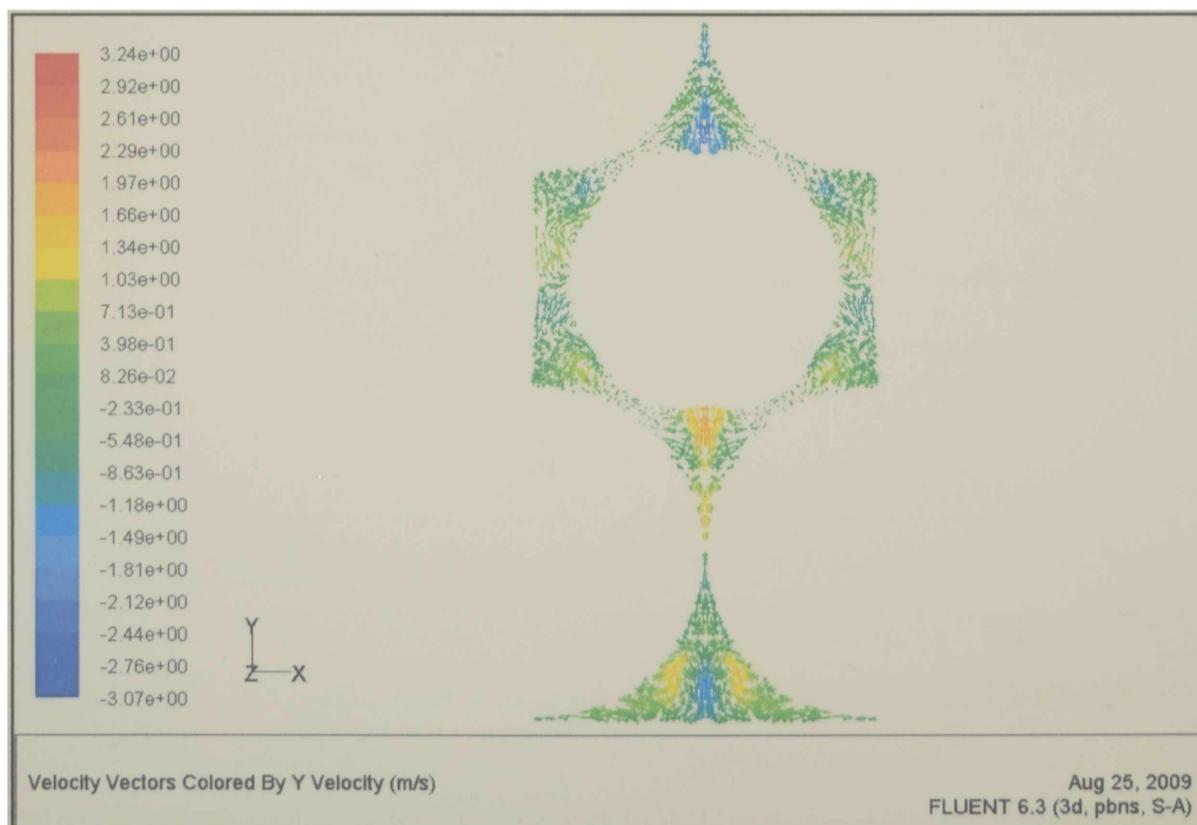


Figura 8.11. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/2$, para arreglo romboédrico y $Re_p = 1000$

El fenómeno descrito es indicativo de la pobre interacción lateral generada por los arreglos regulares. De esta manera, la conductividad del lecho en la zona central, calculada sobre la base de cualquiera de los arreglos estructurales regulares (que pueden tratarse con la metodología propuesta en este trabajo por CFD) difiere sensiblemente de

la esperada para un lecho real, de estructura aleatoria. Con el fin de verificar mediante otro procedimiento que el razonamiento descrito justifica los resultados obtenidos para k_{er} , se realizó un estudio adicional sobre una nueva celda. Esta celda se construyó adoptando una posición “rotada” de un arreglo regular que ofrezca partículas que impidan la canalización y, consecuentemente, permitan la deflexión lateral del flujo en mayor medida. A tal fin, se realizó el análisis del comportamiento del arreglo cúbico compacto girado de tal forma que las capas de pastillas antes paralelas a la pared (plano $x-z$) se llevaron al plano perpendicular al flujo de gas ($y-x$) conforme la celda de la Figura 8.12.

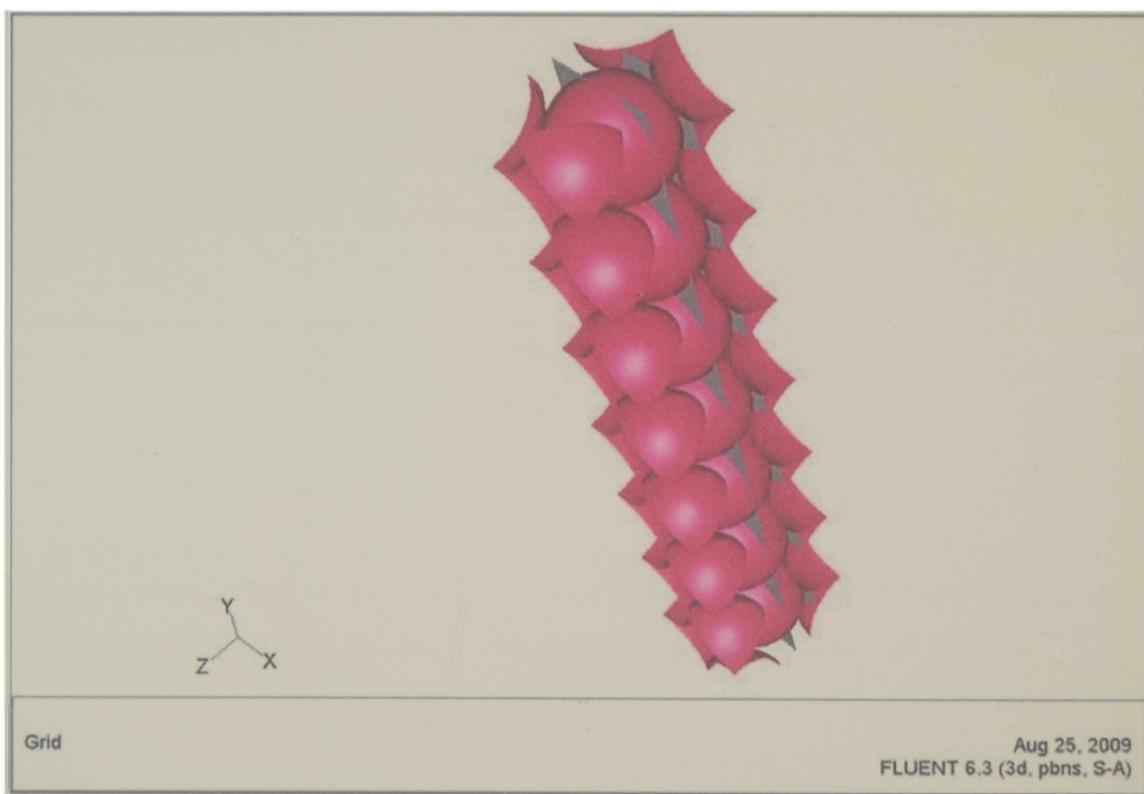


Figura 8.12. Celda de cálculo para el arreglo romboédrico girado. Planos $z=L/4$ y $z=L/2$

Los vectores de velocidad (evaluados sobre dos planos análogos a los del caso presentado anteriormente, graficados en la Figura 8.12) permiten analizar cualitativamente la influencia de los estratos paralelos de partículas presentes en los arreglos regulares. En las Figuras 8.13 y 8.14 puede observarse, efectivamente, una densidad notablemente superior de los vectores velocidad en la dirección “ y ”, para $Re_p=1000$.

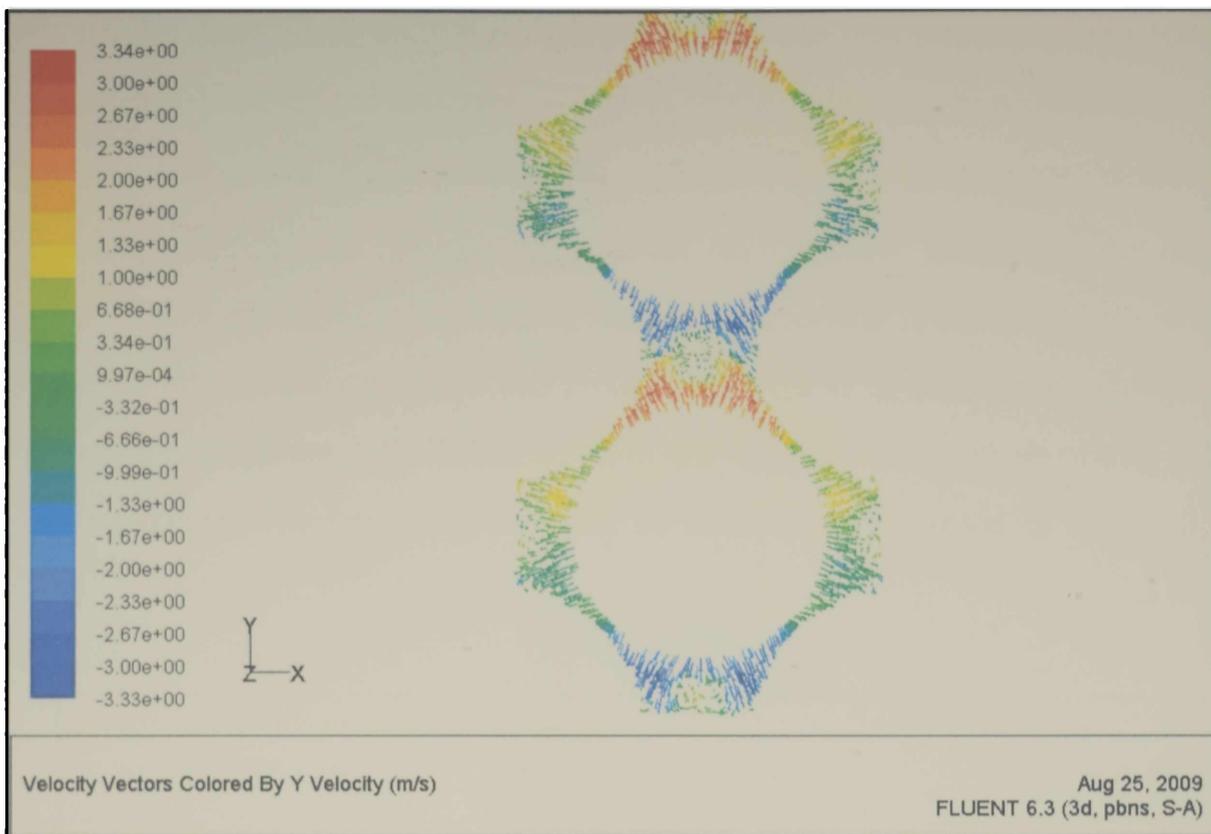


Figura 8.13. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/4$ para arreglo romboédrico girado y $Re_p=1000$

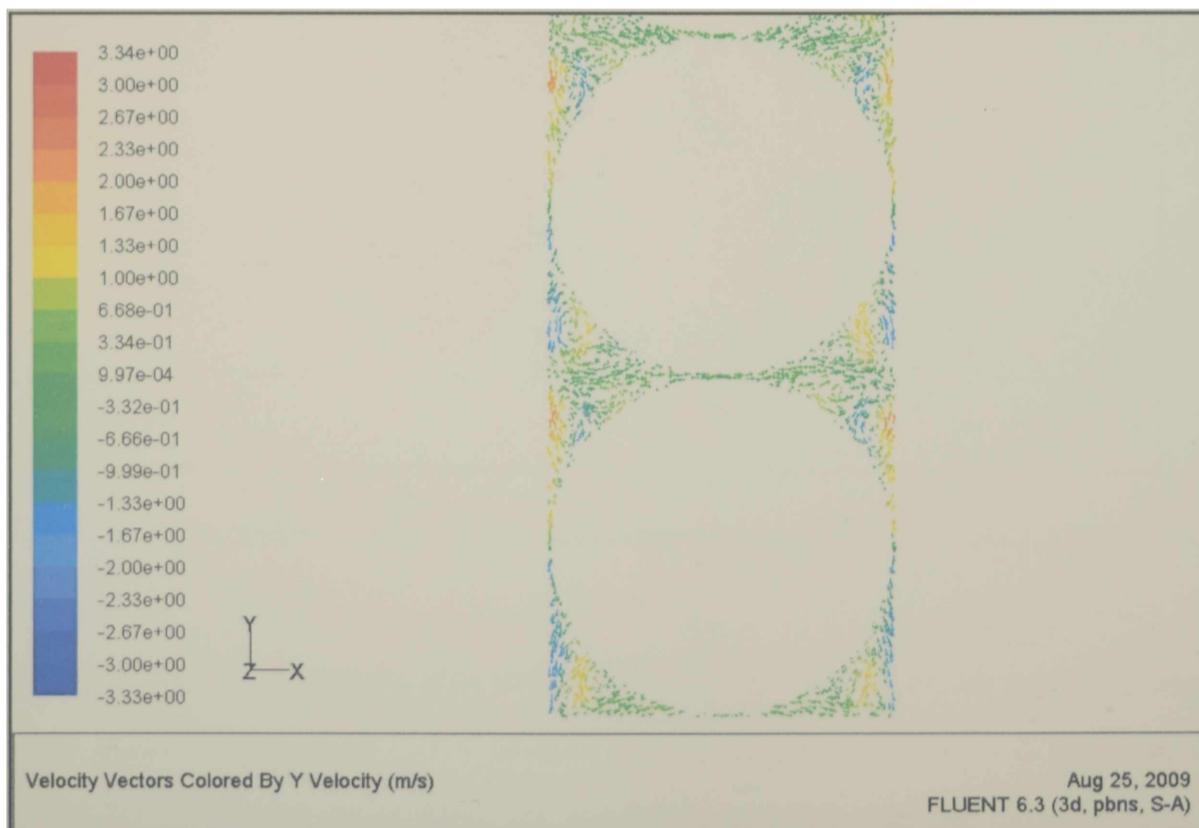


Figura 8.14. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/4$ para arreglo romboédrico girado y $Re_p=1000$

Los valores correspondientes de conductividad calculados con el programa *ATHENA*, previa extracción de la información de las simulaciones efectuadas con *FLUENT*, se listan en la Tabla 8.9. Dado que el comportamiento del flujo lateral en este arreglo regular rotado sería más cercano al real, las conductividades efectivas obtenidas

se aproximan notablemente a los valores predichos a partir de correlaciones existentes en la bibliografía. Inclusive, para $Re_p > 1000$, los valores calculados son prácticamente coincidentes con las predicciones de la correlación de Demirel y colab. (2000). Aunque las conductividades calculadas son sensiblemente menores que las obtenidas a partir de la correlación de Bey y Eigenberger (2001), como puede observarse en la Tabla 8.9, conservan el orden de magnitud.

Por lo tanto, teniendo en cuenta los cálculos descritos en esta sección, basados en arreglos regulares analizados por CFD para todo el lecho, debe señalarse que los perfiles de temperatura obtenidos a nivel de la zona central serán ligeramente más pronunciados que los reales, que estarían acordes con conductividades efectivas mayores.

Re_p	k_{er}^{CFD} [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$k_{er}^{(1)}$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$k_{er}^{(2) (*)}$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$k_{er}^{(3)}$ [W m ⁻¹ K ⁻¹]
1000	1.93	3.31	5,45	3,73
1250	3,1	3,99	6,60	4,60
1500	4,92	4,68	7,75	5,46
1750	5,10	5,36	8,91	6,33

Tabla 8.9. Arreglo cubico compacto con plano rotado paralelo a la pared. Valores de k_{er}^{CFD} Comparación con expresiones existentes: (1): Demirel y colab. (2000); (2): Bey y Eigenberger (2001); (3): Brunell y colab. (1949). (*): k_e^o calculado por la expresión de Krupizka (1967).

De esta manera, se verificó que con la metodología propuesta se obtienen valores muy bajos de k_{er} , como consecuencia de la influencia de la geometría ordenada utilizada en las simulaciones implementadas que, en la zona central, difiere en mayor grado del carácter aleatorio de los lechos reales de partículas.

En base al análisis desarrollado y a las razones previamente expuestas, se sugiere utilizar la correlación de Demirel y colab. (2000) para el cálculo de la conductividad efectiva radial de la zona central del lecho, para la aplicación del MDZ.

8.6 Relación de velocidades entre zonas, $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$

El MDZ posee un parámetro fluidodinámico a determinar: la relación entre las velocidades superficiales correspondientes a la zona 1, $\langle u_1 \rangle$, y zona “central”, $\langle u_c \rangle$

(véase descripción en Capítulo III, sección 3.3). Estas velocidades se pueden calcular a partir de la información obtenida sobre los caudales máxicos de cada zona, con las ecuaciones:

$$\langle u_1 \rangle = \frac{G_1}{\rho_g A_{z1}} \quad \text{y} \quad \langle u_c \rangle = \frac{G_c}{\rho_g A_{zc}} \quad (8.20)$$

donde G_1 y G_c son los caudales máxicos de las zonas “1” y “central”, respectivamente. A_{z1} es la superficie perpendicular al flujo principal en la zona cercana a la pared, que se extiende desde la pared y hasta de distancia de $\frac{1}{2} d_p$ en la dirección y . A_{zc} es la superficie perpendicular al flujo principal en la zona central, comprendida entre $\frac{1}{2} d_p$ y el eje de simetría de la celda de cálculo.

En la Tabla 8.10 se presentan los valores de las velocidades calculadas para ambas zonas y para cada uno de los arreglos estudiados. Además, mediante un proceso de regresión, se obtuvo la correlación 8.21 para el cálculo del parámetro fluidodinámico $\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$, en función de la porosidad de la zona “1”, ϵ_1 , de la porosidad de la zona “central”, ϵ_c y de Re_p :

$$\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle = A \epsilon_1^\alpha \epsilon_c^\beta Re_p^\gamma \quad (8.21)$$

donde

$$A = 1,75 \pm 3,82 \cdot 10^{-1}$$

$$\alpha = 3 \pm 3,203 \cdot 10^{-1},$$

$$\beta = -2,37 \pm 1,759 \cdot 10^{-1}$$

$$\gamma = -0,02 \pm 2,608 \cdot 10^{-2}$$

El valor alcanzado por el coeficiente de correlación correspondiente fue de: $R^2 = 0,98205$.

Re_p	Romboédrico		Ortorrómico		Cúbico		Cúbico Compacto	
	$\langle u_1 \rangle$	$\langle u_c \rangle$						
100	0,07973	0,03323	0,03180	0,04273	0,02392	0,04406	0,09865	0,02707
250	0,19916	0,08296	0,08963	0,10489	0,07730	0,08901	0,25790	0,06489
500	0,39331	0,16631	0,18364	0,20863	0,19057	0,17272	0,53407	0,12438
750	0,58149	0,25115	0,27907	0,31174	0,29895	0,25764	0,73351	0,20264
1000	0,75828	0,33880	0,36589	0,41643	0,39982	0,34345	1,00509	0,26120
1250	0,92659	0,42556	0,46391	0,51803	0,50096	0,51372	1,24017	0,32926
1500	1,10912	0,51249	0,57394	0,61821	0,60756	0,61471	1,46075	0,40557
1750	1,26014	0,60377	0,65511	0,72321	0,71409	0,71673	1,68816	0,47841
2000	1,41815	0,69349	0,75284	0,82532	0,80978	0,81981	1,91443	0,54657

Tabla 8.10. Velocidades superficiales de zonas 1 y “central” calculadas por CFD para los arreglos romboédrico, ortorrómico, cúbico y cúbico compacto.

La porosidad de la zona central está relacionada con la porosidad de la zona *l* y con la del lecho, ε_{celda} , por medio de la siguiente ecuación:

$$\varepsilon_{celda} = \frac{\varepsilon_1 A_{z1} + \varepsilon_c A_{zc}}{A_z} \quad (8.22)$$

donde A_z es la superficie total de la sección perpendicular al flujo principal.

8.7 Conclusiones

En este capítulo se ha desarrollado una metodología para la obtención de las correlaciones de cálculo de los parámetros del MDZ, a partir de los perfiles de temperatura y velocidad y de los flujos de energía obtenidos como resultado de las simulaciones efectuadas por CFD.

Para el cálculo del coeficiente h_w , la expresión alcanzada es función de la porosidad de la zona *l*, ε_1 , del número de Reynolds de dicha zona, Re_{p1} y del número de Prandtl.

Para el coeficiente de transferencia de calor entre las zonas *l* y *central*, h_{lc} , se propuso una correlación en función del Re_p , del número de Prandtl, de la porosidad ε_1 y de la porosidad de la celda, ε_{celda} .

En cuanto al parámetro k_{er} , se observó que con la metodología propuesta se obtienen valores muy bajos de este parámetro como consecuencia de la influencia de la geometría ordenada utilizada en las simulaciones que, especialmente en la zona central, difiere del carácter aleatorio de los lechos reales de partículas. Como resultado del análisis desarrollado, se sugiere utilizar la correlación de Demirel y colab. (2000) para el cálculo de la conductividad efectiva radial de la zona central del lecho.

Finalmente, para el cálculo del parámetro fluidodinámico del MDZ, $\langle u_l \rangle / \langle u_c \rangle$, se obtuvo una correlación en función de la porosidad de la zona “*l*”, ε_1 , de la porosidad de la zona “central”, ε_c y de Re_p .

En la Tabla 8.11 se presenta una síntesis de las ecuaciones para el cálculo de los parámetros del MDZ propuestas en este capítulo.

Parámetro	Ecuación	Observaciones
Nu_w	$Nu_w = A \cdot \varepsilon_1^\alpha \cdot Re_1^\beta \cdot Pr^\gamma \quad (8.3)$ $A = 9,59E^{-03} \pm 7,523 \cdot 10^{-03} \quad \alpha = -5,62 \pm 6,543 \cdot 10^{-01}$ $\beta = 0,584 \pm 7,047 \cdot 10^{-02} \quad \gamma = 1/3$	$250 \leq Re_p \leq 2000$
Nu_{1c}	$Nu_{1c} = Re_p (A \varepsilon_1^\alpha + B ((\varepsilon_1 - \varepsilon_{celda}) / \varepsilon_1^\beta)) Pr^\gamma \quad (8.10)$ $A = 0,366 \pm 2,017 \cdot 10^{-1} \quad B = 4,85 \cdot 10^{-2} \pm 2,854 \cdot 10^{-3}$ $\beta = 1,5 \pm 6,876 \cdot 10^{-1} \quad \gamma = 1/3 \quad \alpha = 4,347 \pm 7,553 \cdot 10^{-1}$	$100 \leq Re_p \leq 2000$
k_{er}	$k_{er} = k_g (10,433 + 0,0481 Re_p) \quad (8.17)$	Esferas $4.5 < d_t/d_p < 7.5$
$\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle$	$\langle u_1 \rangle / \langle u_c \rangle = A \varepsilon_1^\alpha \varepsilon_c^\beta Re_p^\gamma \quad (8.21)$ $A = 1,75 \pm 3,82 \cdot 10^{-1} \quad \alpha = 3 \pm 3,203 \cdot 10^{-1},$ $\beta = -2,37 \pm 1,759 \cdot 10^{-1} \quad \gamma = -0,02 \pm 2,608 \cdot 10^{-2}$	$100 \leq Re_p \leq 2000$

Tabla 8.11. Síntesis de las ecuaciones obtenidas para el cálculo de los parámetros del MDZ

Arreglo Cúbico:

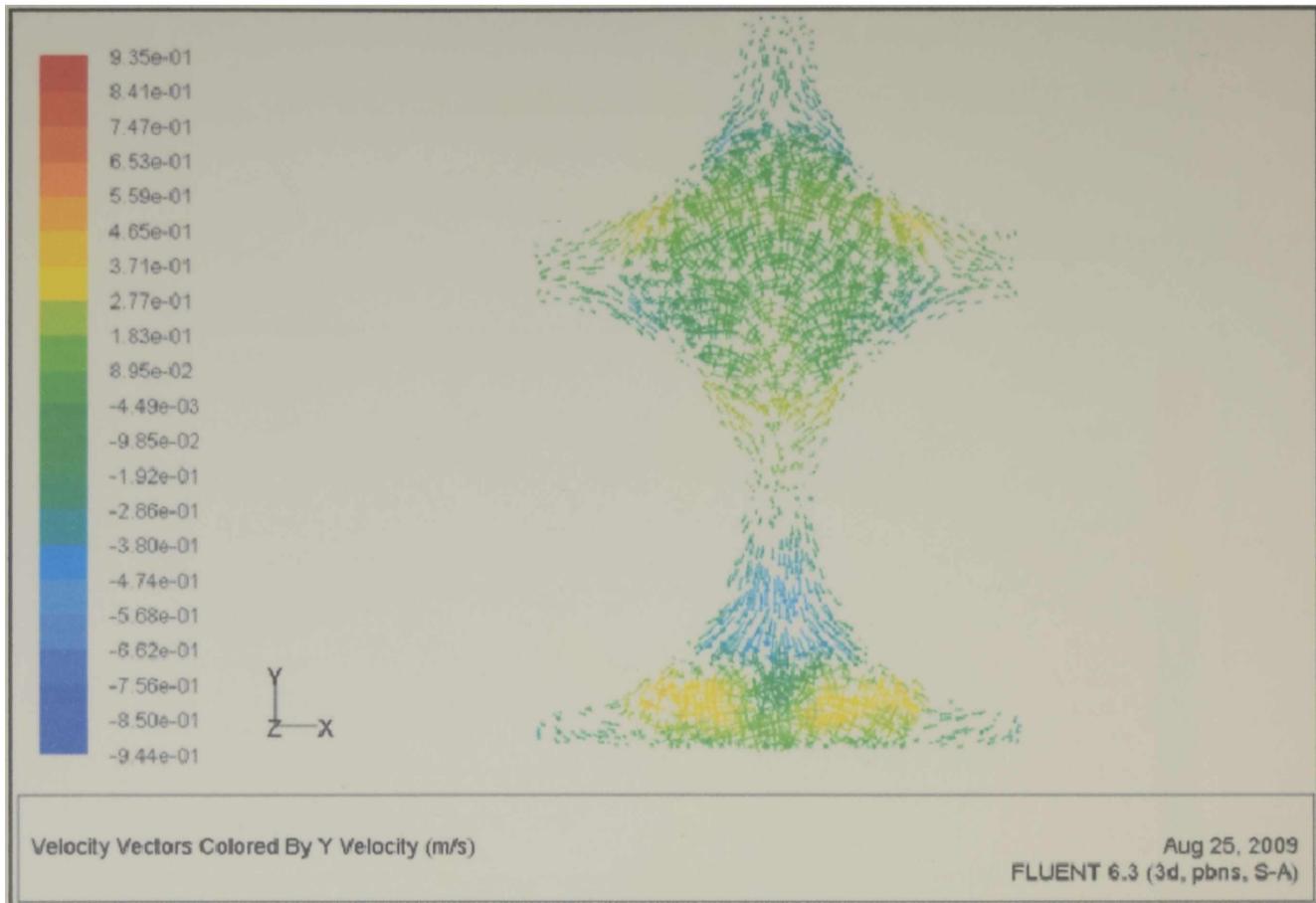


Figura AVIII.3. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/4$, para arreglo cúbico y Re_p 1000

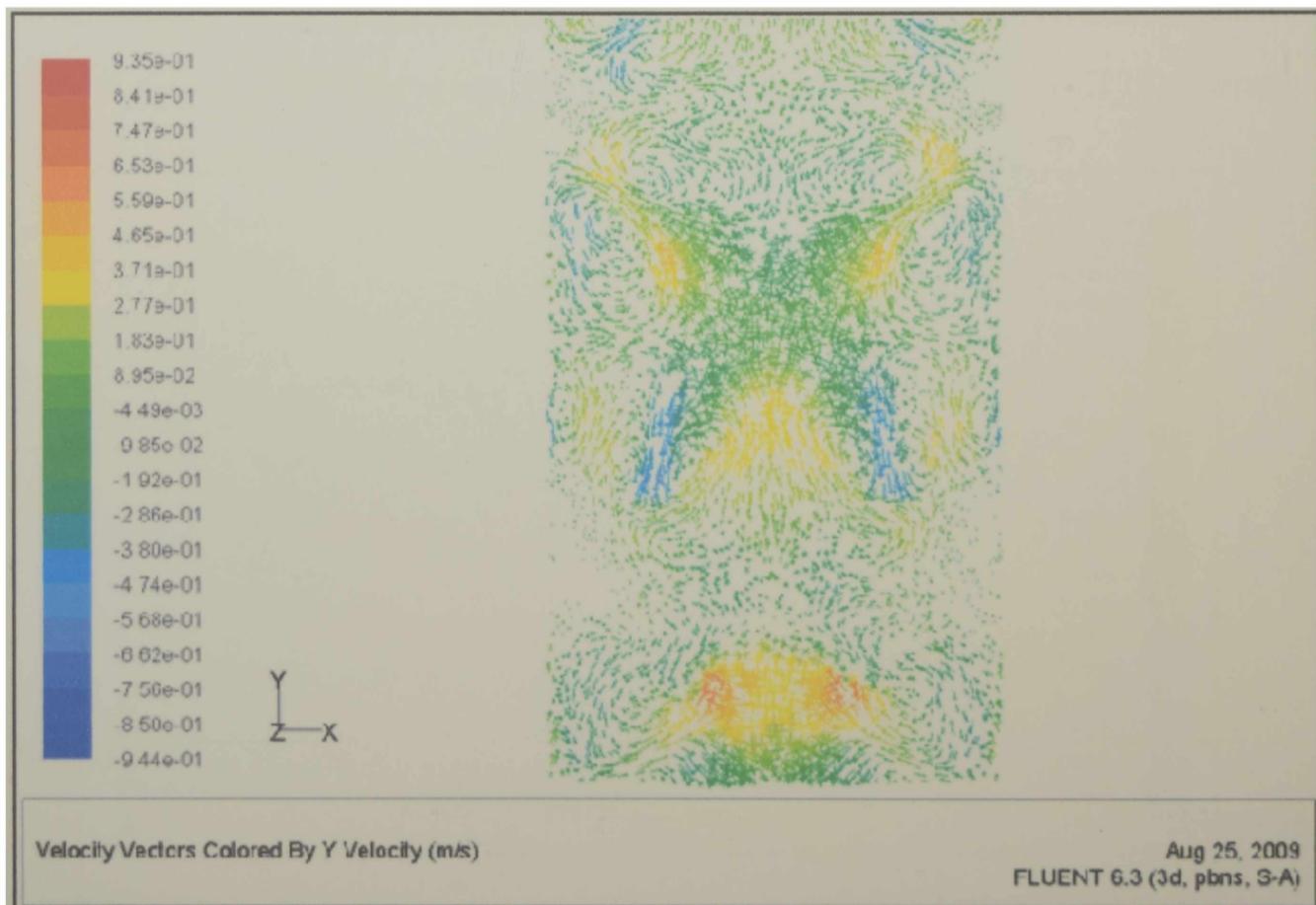


Figura AVIII.4. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/2$, para arreglo cúbico y Re_p 1000

APÉNDICE VIII.1

Vectores velocidad sobre los planos x - y localizados en las posiciones axiales $L_z/4$ y $L_z/2$ para los arreglos ortorrómbico, cúbico y cúbico compacto.

Arreglo Ortorrómbico:

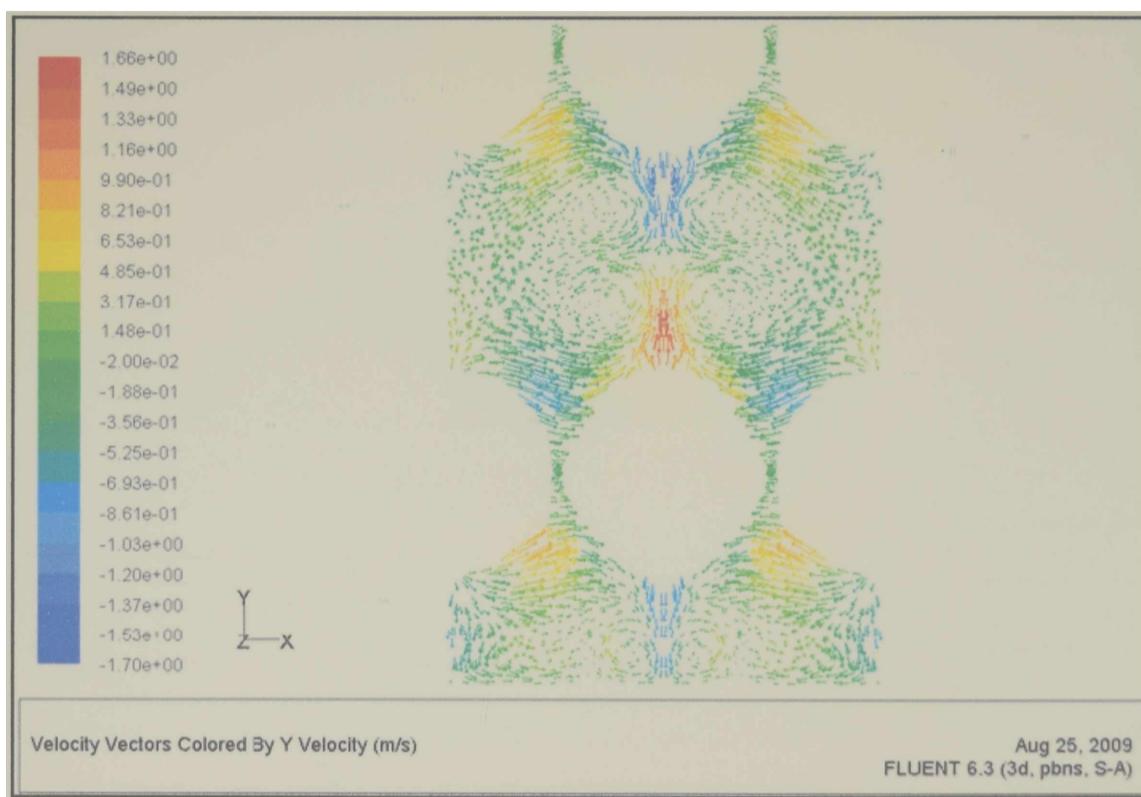


Figura AVIII.1. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/4$, para arreglo ortorrómbico y Re_p 1000

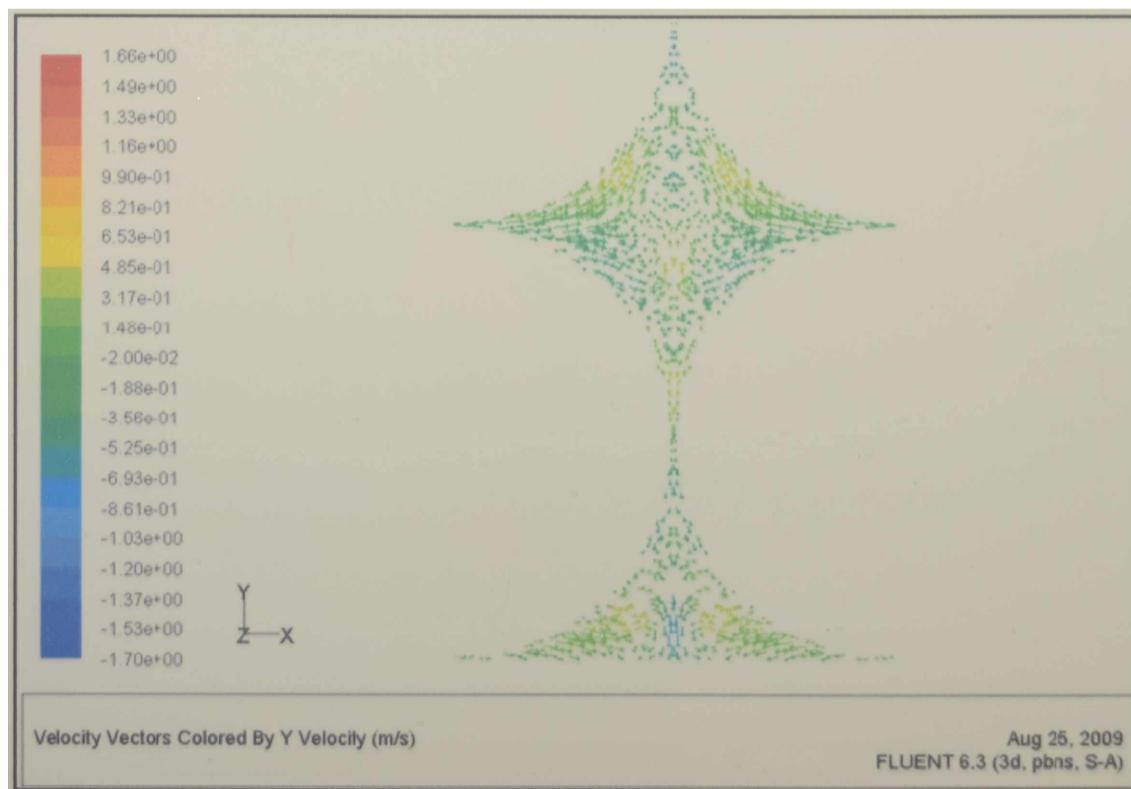


Figura AVIII.2. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/2$, para arreglo ortorrómbico y Re_p 1000

Arreglo Cúbico Compacto:

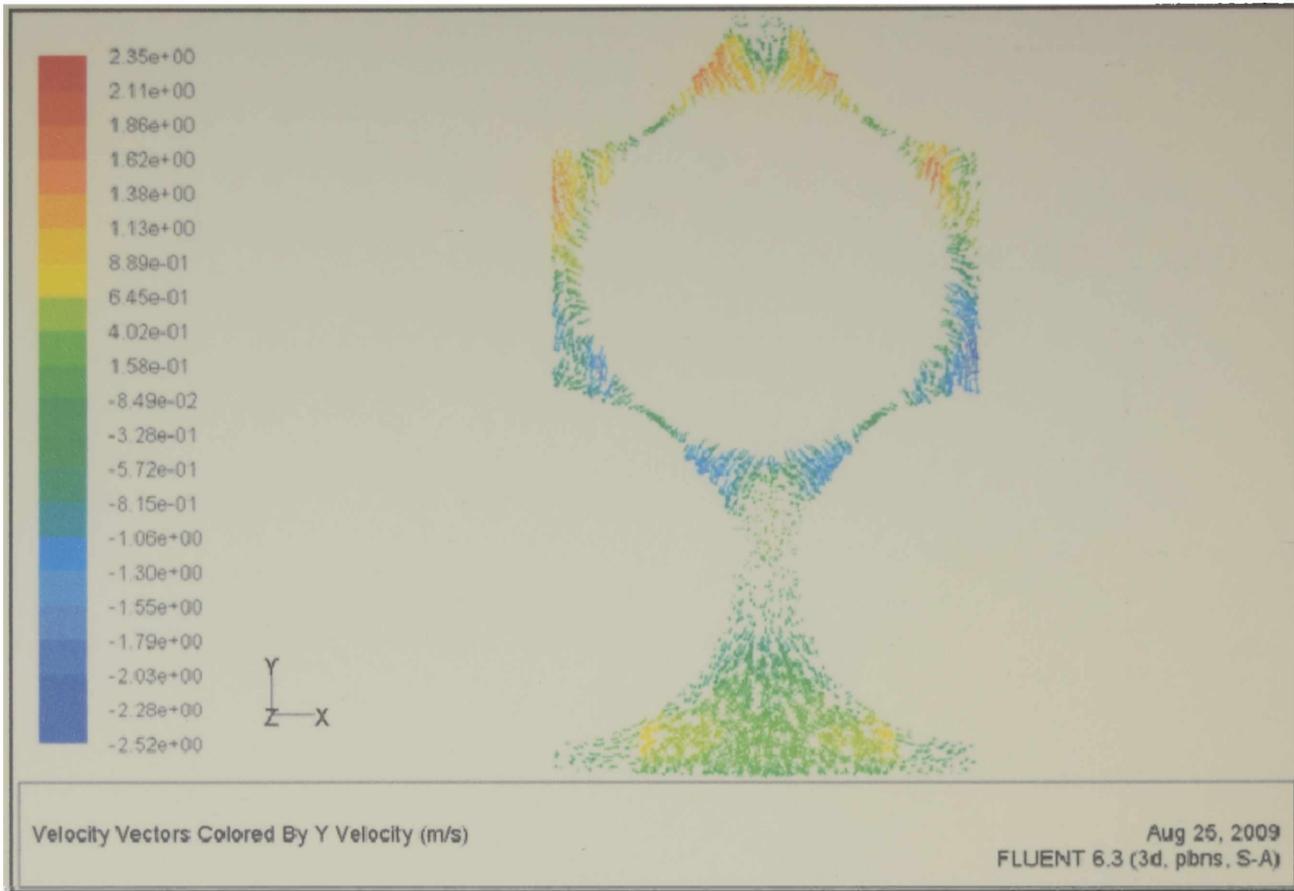


Figura AVIII.5. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/2$, para arreglo cúbico compacto y Re_p 1000

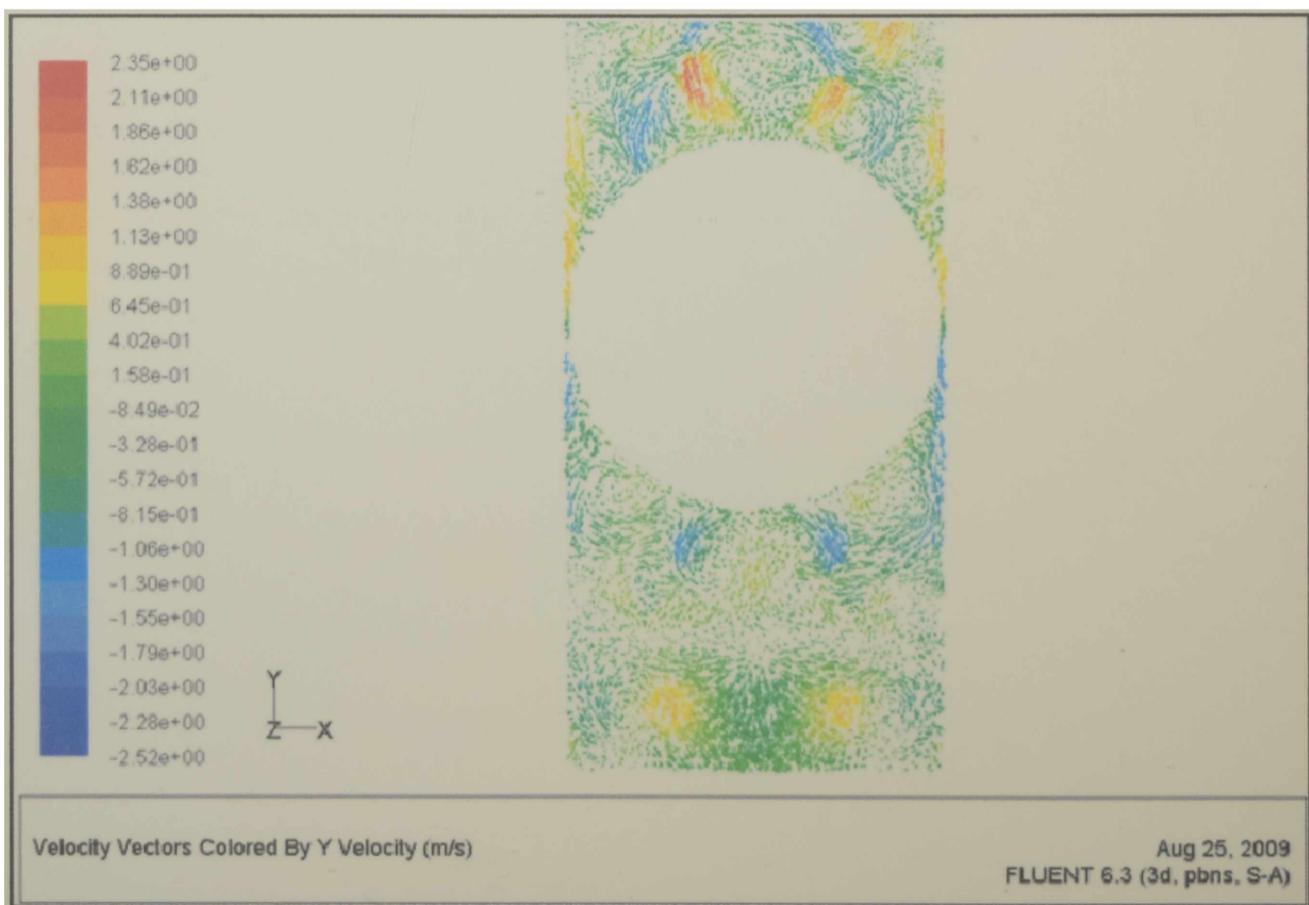


Figura AVIII.6. Vectores velocidad sobre el plano $z=L_z/2$, para arreglo cúbico compacto y Re_p 1000

CAPÍTULO IX

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

9.1 Significación de los objetivos alcanzados

9.2 Sugerencias para la continuación de los trabajos de investigación en el tema

9.1 Significación de los objetivos alcanzados

En este trabajo se llevó a cabo el estudio del comportamiento de lechos fijos de baja relación de aspecto desde el punto de vista fluidodinámico y térmico. **El estudio se enfocó al análisis del comportamiento del fluido.** A tal fin se llevó a cabo la formulación completa de un modelo mecanístico, proponiéndose correlaciones para la evaluación de los parámetros que el mismo involucra. El modelo matemático, denominado Modelo de Dos Zonas, MDZ, es una alternativa válida y sencilla para la simulación del fenómeno de transferencia de calor en lechos fijos y constituye un método rápido y simplificado de diseño y de predicción del comportamiento de los reactores catalíticos de lecho fijo.

Se utilizó la técnica de fluidodinámica computacional como un valioso medio de obtención de información de alta precisión a fin de asistir a la formulación de correlaciones para la determinación de los parámetros fluidodinámicos y térmicos del modelo e inclusive, alcanzar conclusiones acerca del cálculo de la pérdida de carga en este tipo de unidades. En este contexto la CFD suple la realización de experiencias, conformando una *experimentación virtual*.

El trabajo presenta un conjunto de resultados significativos para la representación del funcionamiento de los lechos fijos de baja relación de aspecto, para lo cual, se ha puesto en evidencia en diferentes capítulos (IV, VII y VIII), el rol crítico de la zona adyacente a la pared. En este sentido, se ha individualizado y caracterizado el comportamiento de esta zona en lo referente al caudal que circula por la misma y a los condicionamientos severos que la misma impone a la transferencia de calor. Ello hace a un modelo como el propuesto, especialmente apto para la utilización en estos reactores.

Se demostró la gran diferencia del comportamiento del MDZ frente a un modelo bidimensional clásico resolviendo ambos para la situación de una reacción catalítica única, analizando las diferencias de perfiles de temperatura y composición en función de la relación de aspecto. Se evidenció que, conforme la misma aumenta, resulta posible la aplicación de un modelo bidimensional de zona única, pero ello no resulta apropiado a bajas relaciones de aspecto.

En el estudio de pérdida de carga, se compararon los valores de caída de presión obtenidos en las simulaciones con los calculados a partir de correlaciones disponibles en la literatura y se concluyó que la expresión propuesta por Montillet y colab. (2007),

sobre la base de experimentación y modelización, es la alternativa más confiable y rápida para la evaluación del ΔP en lechos fijos de baja relación de aspecto. El apartamiento de los resultados del enfoque clásico de la ecuación de Ergun fue discutido exhaustivamente, con atención a los regímenes y fenómenos que se presentan para diferentes rangos de valores del número de Reynolds.

Se calculó el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w , a partir de la información generada por CFD y se lo expresó en la forma habitual de número de Nusselt. De la comparación de dichos valores con los obtenidos partir de correlaciones presentes en la bibliografía, se concluyó que las ecuaciones existentes no son adecuadas para predecir el valor de Nu_w en LF de baja relación de aspecto. En consecuencia, se desarrolló una correlación para su predicción en función del número de Prandtl, de la porosidad de la zona “1”, ε_1 , y del número de Reynolds de dicha zona.

A fin de obtener una correlación para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor entre zonas, h_{1c} , se llevó a cabo, para cada arreglo y Re_p simulado, la regresión por mínimos cuadrados del perfil de temperatura (generado por CFD) para la zona central del lecho. De esta forma, se obtuvo el parámetro h_{1c} correspondiente a cada perfil de temperatura. Los valores hallados, expresados en función del correspondiente número de Nusselt (Nu_{1c}), se correlacionaron en función de Pr , Re_p y porosidades de la zona “1” y “central”. En este caso, no fue posible efectuar una comparación con correlaciones existentes en la literatura por ser este parámetro característico y particular del modelo propuesto.

Para el cálculo de la conductividad efectiva de la zona central, k_{er} , se llevó a cabo inicialmente un análisis similar al descrito para el coeficiente h_{1c} . Sin embargo, al contrastarse los valores obtenidos de k_{er} , con los calculados a partir de correlaciones existentes en la bibliografía, se observó una importante discrepancia, siendo los primeros considerablemente inferiores. En el Capítulo VIII, se demostró que esto ocurre como consecuencia de la influencia de la geometría ordenada utilizada en las simulaciones implementadas que, en la zona central, difiere sustancialmente del carácter aleatorio de los lechos reales de partículas. Finalmente se propuso la aplicación de la correlación de Demirel y colab. (2000) para el cálculo de k_{er} .

La relación de velocidades superficiales entre las zonas “1” y “central” se correlacionó en función de valores locales de porosidad ε_1 , ε_c y Re_p , utilizando los

valores de velocidades en cada zona obtenidos por CFD.

A modo de resumen, se puntualizan las distintas etapas cumplidas:

- ✓ Revisión, estudio y clasificación de los principales modelos existentes en la bibliografía con el objeto de representar el comportamiento de los reactores de lecho fijo. Revisión de trabajos citados en la literatura, enfocados en el análisis fluidodinámico y térmico de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto. El análisis y la revisión correspondiente se vuelcan en el Capítulo II.
- ✓ Planteo y formulación del “Modelo de Dos Zonas” para el transporte de calor en lechos fijos de baja relación de aspecto. Presentación de antecedentes y elementos del modelo. Los contenidos del Capítulo III muestran el trabajo realizado.
- ✓ Análisis comparativo del comportamiento del MDZ suponiendo comportamiento pseudohomogéneo frente a un modelo bidimensional con la misma característica en presencia de una reacción química de referencia, con el objeto de sustentar el uso de un enfoque de dos zonas frente a la modelización clásica, para el caso particular de reactores de baja relación de aspecto (Capítulo IV).
- ✓ Descripción de generalidades de la técnica de CFD, análisis de los modelos disponibles en el *software FLUENT* para el tratamiento del flujo turbulento y revisión de aplicaciones de CFD a la simulación de lechos fijos presentes en la literatura (Capítulo V).
- ✓ Desarrollo de una metodología para la evaluación de la transferencia de calor y pérdida de carga por medio de la técnica de CFD. Definición de la geometría de las celdas a simular (reemplazo de la pared del tubo por placas planas y utilización de fronteras periódicas). Desarrollo del proceso de validación de mallas y selección del modelo de turbulencia utilizado (Capítulo VI).
- ✓ Evaluación de la caída de presión en lechos fijos, para un amplio rango de condiciones operativas y para distintas porosidades. Comparación de los valores calculados a partir de las simulaciones con correlaciones obtenidas de la bibliografía y con valores reportados por otros autores (Capítulo VII).

- ✓ Formulación de correlaciones para el cálculo de los parámetros del MDZ, a partir de la información generada por CFD. En el Capítulo VIII se presentan las hipótesis planteadas para el cálculo de dichos parámetros y se exponen los resultados y correlaciones finales.

9.2 Sugerencias para la continuación de los trabajos de investigación en el tema

En base al análisis y conclusiones presentadas en las secciones anteriores pueden señalarse algunos aspectos que podrían constituir la esencia de futuras actividades.

Un tópico importante que podría abordarse es la simulación de lechos con partículas distribuidas en arreglos no estructurados. En ese sentido deben generarse arreglos aleatorios mediante programación específica del programa y luego realizar el replanteo del análisis por CFD con la exclusión evidente de la modalidad de fronteras periódicas. Un interés particular revestiría el análisis de otras geometrías para las partículas, tal como la geometría cilíndrica. También se considera para una etapa futura la posibilidad de incorporar la conducción de las partículas en la simulación, para lo cual sería necesario efectuar el mallado de los sólidos.

Adicionalmente, sería deseable desarrollar las simulaciones mencionadas en CFD mediante la adaptación de la metodología planteada en esta tesis a la curvatura real de la pared del tubo.

Las sugerencias mencionadas permitirían ampliar la aplicabilidad de las correlaciones a diferentes condiciones geométricas, estructurales y operativas del lecho.

NOMENCLATURA

a_v	área interfacial gas-sólido por unidad de volumen del lecho, m^{-1}
A_{z1}	superficie perpendicular al flujo principal en la zona 1, m^2
A_{zc}	superficie perpendicular al flujo principal en la zona <i>central</i> , m^2
A_z	superficie total perpendicular al flujo principal de la celda, m^2
Bi_{1c}	$= \frac{h_{1c} L_y}{k_{er}}$, número de Biot para el MDZ
C	concentración molar de la especie clave reaccionante, mol m^{-3}
\bar{C}	concentración molar media radial de la especie clave reaccionante, mol m^{-3}
$C_{j,g}$	concentración molar de las especies reaccionantes en el gas, mol m^{-3}
C_p	calor específico a presión constante, $\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$
D_{er}	coeficiente de dispersión radial de materia, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
D_m	difusividad molecular, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
D_p	diámetro equivalente, m
d_p	diámetro de partícula, m
d_t	diámetro del tubo o recipiente, m
E	energía total, J
G	caudal másico, kg s^{-1}
h_{1c}	coeficiente de transferencia de calor entre las dos regiones del MDZ, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
h_g	coeficiente global de transferencia de calor del fluido, $\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}$
h_{gs}	coeficiente de transferencia de calor fluido-sólido, $\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}$
h_j	entalpía de la especie j , J kg^{-1}
h_s	coeficiente global de transferencia de calor del sólido, $\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}$
h_T	coeficiente global de transferencia de calor para el modelo pseudohomogéneo, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
h_w	coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
h_{wg}	coeficiente de transferencia de calor en la pared para el fluido, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$
h_{ws}	coeficiente de transferencia de calor en la pared para el sólido, $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$

J	flujo de difusión, $\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
k	energía cinética turbulenta, J/kg
k_{er}	conductividad térmica efectiva radial, $\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$
k_{eg}	conductividad térmica efectiva radial del gas, $\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$
k_{es}	conductividad térmica efectiva radial del sólido, $\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$
k_g	conductividad térmica del gas, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
k_s	conductividad térmica del sólido, $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
L	longitud de reactor, m
L_y	distancia medida en la dirección y , comprendida entre la interfase entre las zonas 1 y 2 y el centro del lecho de partículas con paredes planas (celda de cálculo por CFD), m
N	$= d_t / d_p$, relación de aspecto
Nu	$= h d_p / k_g$, número de Nusselt
P	presión, Pa
Pe_M	$= \langle u \rangle d_p / D_{er}$, Número de Peclet radial de materia
Pe_∞	valor asintótico del número de Peclet radial
Pr	$= C_p \mu / k_g$, número de Prandtl
q	caudal volumétrico del fluido, $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
q_1	caudal volumétrico del fluido en la zona "1" del MDZ, $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
q_c	caudal volumétrico del fluido en la zona central del MDZ, $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
Q	densidad de flujo de calor, $\text{J s}^{-1} \text{m}^{-2}$
Q_w	densidad de flujo de calor sobre la pared, $\text{J s}^{-1} \text{m}^{-2}$
Q_{1c}	densidad de flujo de calor transferido entre la zona "central" y la zona "1", $\text{J s}^{-1} \text{m}^{-2}$
Re_p	$= \rho_g \langle u \rangle d_p / \mu$, número de Reynolds de partícula
r_L	velocidad de reacción global definida según la ecuación 2.3, $\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$
R_t	radio del tubo, m
R_h	radio hidráulico, m
T	temperatura, K (°C cuando se indica específicamente)

\bar{T}	temperatura media radial evaluada en los modelos unidimensionales, K (°C cuando se indica específicamente)
T_{c1}	temperatura de la zona “central” en su frontera con la zona “1”, K (°C cuando se indica específicamente)
T_{go}	temperatura inicial del gas, K (°C cuando se indica específicamente)
T_w	temperatura de la pared del tubo, K (°C cuando se indica específicamente)
u	vector velocidad del fluido, m s ⁻¹
u_i	componente del vector velocidad del fluido, m s ⁻¹
u_x	componente x del vector velocidad del fluido, m s ⁻¹
u_y	componente y del vector velocidad del fluido, m s ⁻¹
u_z	componente z del vector velocidad del fluido, m s ⁻¹
u_{z1}	velocidad superficial del fluido en la zona “1” del MDZ, m s ⁻¹
u_{zc}	velocidad superficial del fluido en la zona “central” del MDZ, m s ⁻¹
u_τ	$= \sqrt{\tau_w / \rho_g}$, velocidad característica sobre la pared, m s ⁻¹
$\langle u \rangle$	velocidad superficial del fluido, m s ⁻¹
$\langle u_i \rangle$	componente i (con $i = x, y, z$) de la velocidad superficial del fluido, m s ⁻¹
V	volumen, m ³
y^*	$= y/L_y$, longitud adimensional del lecho en la zona central
y^+	$= \rho_g u_\tau y / \mu$, donde y es la distancia adimensional normal a la pared

Símbolos griegos

β	autovalores resultantes de la resolución de la ecuación 3.28
χ	relación de conductividades térmicas: λ_s / λ_g
ε	porosidad volumétrica del lecho, adimensional
ε	velocidad de disipación turbulenta, m ² s ⁻³
η_T	factor de efectividad global
λ_g	coeficiente de transferencia de materia fluido-sólido, m s ⁻¹
μ	viscosidad del gas, kg m ⁻¹ s ⁻¹
μ_t	viscosidad turbulenta del gas, kg m ⁻¹ s ⁻¹

ρ	coordenada radial, m
ρ_g	densidad del gas, kg m^{-3}
τ	tensor esfuerzo, Pa
ν	viscosidad cinemática, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
ΔH	calor de reacción, J mol^{-1}
ΔP	Pérdida de carga, Pa

Subíndices

c	región central en el MDZ
g	fase gaseosa
k	fluido de intercambio, especie clave (en capítulo IV)
s	fase sólida
w	pared
o	de alimentación
l	región adyacente a la pared en el MDZ
lc	frontera entre las regiones 1 y central del MDZ

Acrónimos

AC	Arreglo cúbico
ACC	Arreglo cúbico compacto
AO	Arreglo ortorrómbico
AR	Arreglo romboédrico
CFD	Fluidodinámica computacional
CLO	Combinación lineal ortogonal
DF	Diferencias finitas
DNS	Simulación numérica directa
EDO	Ecuaciones diferenciales ordinarias
EF	Elementos finitos
FP	Fronteras periódicas
LES	Simulación de remolinos grandes

LF	Lecho fijo
MDZ	Modelo de dos zonas
RANS	<i>Reynolds-averaged Navier Stokes</i>
RCLF	Reactor catalítico de lecho fijo
VF	Volúmenes finitos

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Barreto, G. F. y G.D. Mazza. On the use of incremental quotients in Michelsen's method for stiff ordinary differential equations, *Computers and Chem. Eng.*, 13, 967-971, 1989.
- Barreto, G.F. y O.M. Martinez, Prediction of overall heat transfer coefficients for the simulation of multitubular catalytic fixed bed reactors, *Trends in Heat & Momentum Transfer*, 2, 1-33, 1992.
- Bai, H., J. Theuerkauf y P. Gillis, A coupled DEM and CFD simulation of flow field and pressure drop in fixed bed reactor with randomly packed catalyst particles, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 48, 4060-4074, 2009.
- Bauer R. y E.U. Schlunder, Effective radial thermal conductivity of packing in gas flow. Part II: Thermal conductivity of the packing fraction without gas flow, *Int. Chem. Eng.*, 18, 2, 189-204, 1978.
- Benenati, R.F. y C.B. Brosilow, Void fraction distribution in beds of spheres, *AIChE J.*, 8, 3, 359, 1962.
- Berto C.A. y G.F. Barreto, The relevance of overall heat transfer coefficients in the simulation of catalytic fixed bed reactors with the heterogeneous one-dimensional model, *Appl. Math. Modeling*, 16, 520-533, 1992.
- Bey, O. y G. Eigenberger, Fluid flow through catalyst filled tubes. *Chem. Eng. Sci.*, 52, 1365-1376, 1997.
- Bird, R.B, Stewart, W.E. y E.N.Lightfoot, Fenómenos de transporte, *Editorial Reverté, México*, 1998.
- Borkink, J.G.H. y K.R. Westerterp, Significance of the radial porosity profile for the description of heat transport in wall-cooled packed beds, *Chem. Eng. Sci.*, 49, 863-876, 1994.

- Brunell, D. G., Irvin, H.B., Olson, R.W. y J.M. Smith, Effective thermal conductivities in gas-solid systems, *Industrial and Engineering Chemistry Research & Development*, 41, 1977-1998, 1949.
- Calis, H.P., Nijenhuis, J., Paikert, C., Dautzenberg, F.M. y C.M. van den Bleek, CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing, *Chem. Eng. Sci.*, 56, 1713-1720, 2001.
- Carberry, J.J., Chemical and catalytic reaction engineering, *McGraw-Hill, Nueva York*, 1976.
- Cengel, Y.A. y J.M. Cimbala, Mecánica de fluidos, fundamentos y aplicaciones, *Mc Graw-Hill, México*, 2006.
- Cohen Y. y A.B. Metzner, Wall effects in laminar flow of fluids through packed beds, *AIChE J.*, 27, 5, 705-715, 1981.
- Coussirat, M., Guardo A., Mateos, B. y E. Egusquiza, Performance of stress-transport models in the prediction of particle-to-fluid heat transfer in packed beds, *Chem. Eng. Sci.*, 62, 6897-6907, 2007.
- Dalman, M.T., Merkin, J.H. y C. McGreavy, Fluid flow and heat transfer past two spheres in a cylindrical tube, *Computers & Fluids*, 14, 267-281, 1986.
- De Lemos, M.J.S., Turbulence in porous media, Modeling and Applications, *Elsevier, Reino Unido*, 2006
- de Wash, A.P. y G. F. Froment, A two dimensional heterogeneous model for fixed bed catalytic reactors, *Chem. Eng. Sci.*, 26, 629-634, 1972.
- Deans, H.A. y L. Lapidus, A computational model for predicting and correlating the behavior of fixed-bed reactors: I. Derivation of model for nonreactive system, II. Extension to chemically reactive system, *AIChE J.*, 6,656-663, 1960.
- Delmas, H. y G.F. Froment, A simulation model accounting for structural radial nonuniformities in fixed bed reactors, *Chem. Eng. Sci.*, 43, 2281-2287, 1988.

- Demirel, Y., Sharma, R.N. y H.H. Al-Ali, On the effective heat transfer parameters in a packed bed, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43, 327-332, 2000.
- Dixon, A.G., Dicostanzo, M.A. y B.A. Soucy, Fluid-phase radial transport in packed beds on low tube-to-particle diameter ratio, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 27, 1707-1713, 1984.
- Dixon, A.G. y L.A. Labua, Wall-to-fluid coefficients for fixed bed heat and mass transfer, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 28, 4, 879-881, 1985.
- Dixon A.G., Correlations for wall and particle shape effects on fixed bed bulk voidage, *Can. J. Chem. Eng.*, 66, 705, 1988.
- Dixon, A.G., Nijemeisland, M. y E.H. Stitt, , CFD study of heat transfer near and at the wall of a fixed bed reactor tube- Effect of wall conduction, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44, 6342-6353, 2005.
- Dixon, A.G., Taskin, M., Nijemeisland, M. y E.H. Stitt, Wall-to-particle heat transfer in steam reformers tubes: CFD comparison of catalyst particles, *Chem. Eng. Sci.*, 63, 2219-2224, 2008.
- Ergun S., Fluid flow through packed columns, *Chem. Eng. Progress*, 48, 2, 89–94, 1952.
- Fand, R. M., Kim, K., Lam, A.C.C. y Phan, R.T., Resistance to the flow of fluids through simple and complex porous media whose matrices are composed of randomly packed spheres, *J. Fluids Eng.*, 109, 268-274, 1987.
- Fand, R. M. y R. Thinakaran, The influence of the wall on flow through pipes packed with spheres, *J. Fluids Eng.*, 112, 84-88, 1990.
- Fahien, R.W. e I.M. Stankovic, An equation for the velocity profile in packed columns, *Chem. Eng. Sci.*, 34, 1350, 1979.
- Foyo de Azevedo, S., Romero-Ogawa, M.A. y A.P. Wardle, Modelling of tubular fixed-bed catalytic reactors: a brief review, *Trans. IChemE.*, 68, Parte A, 483-502, 1990.

- Fluent Inc., *Fluent 6.3 User's Guide*, *Fluent Inc.*, 2006.
- Fluent Inc., *Gambit 2.4.6 Modeling Guide*, *Fluent Inc.*, 2006.
- Froment, G.F. y K.B. Bischoff, *Chemical reactor analysis and design*, *John Wiley & Sons*, 2nd Edition, *Nueva York*, 1990.
- Gnielinski, V., *Forsch. Ing.-Wes.*, 41, 1, 8–16, 1975, citado por Barreto y Martínez, 1992.
- Gonzo, E.E. y J.C. Gottifredi, Rational Approximations of effectiveness factor and general diagnostic criteria for heat and mass transport limitations, *Catal. Rev. Sci. Eng.*, 25, 119-140, 1983.
- Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M.A. , Recasens, F. y E. Egusquiza, Influence of the turbulence model in CFD modeling of wall-to-fluid heat transfer in packed beds, *Chem. Eng. Sci.*, 60, 1733-1742, 2005.
- Handley, D. y P.J. Heggs, Momentum and heat transfer mechanism in regular shaped packing, *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 46, 251-264, 1968.
- Hofmann, H., *Ger. Chem. Eng.*, 2, 258-267, 1979, citado por Barreto y Martínez, 1992.
- Hicks, R.E., Pressure drop in packed beds of spheres, *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 9, 3, 500-502, 1970.
- Hlavacek, V. y J. Votruba, Steady-state operation of fixed-bed reactors and monolithic structures, *Prentice-Hall*, *Nueva York*, 1977.
- Incropera F.P. y D.P. De Witt, *Fundamentals of heat and mass transfer*, *John Wiley & Sons*, *Nueva York*, 1990.
- Joshi, J. y V. Ranade, Computational fluid dynamics for designing process equipment: expectations, current status and path forward, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 42, 1115-1128, 2003.
- Krupiczka, R., Analysis of thermal conductivity in granular materials, *International Journal of Chemical Engineering*, 7, 122-144, 1967.

- Kunii, D. y J.M. Smith, Heat transfer characteristics of porous rocks, *AIChE J.*, 6, 71-78, 1960.
- Kunii, D. y M. Suzuki, Paper presented at the Symposium of Heat and Mass Transfer, *Minsk, USSR*, 1968.
- Launder, B.E. y D.B. Spalding, Lectures in mathematical models of turbulence, *Academic Press, Londres*, 1972.
- Lemcoff, N.O., Pereira Duarte, S.I. y O.M. Martinez, Heat transfer in packed beds, *Reviews in Chem. Eng.*, 6, 229-292, 1990.
- Lloyd, B. y R. Boehm, Flow and heat transfer around a linear array of spheres, *Numerical Heat Transfer Part A—Applications*, 26, 237–252, 1994.
- Li, C. and B.A. Finlayson, “Heat transfer in packed beds—a reevaluation”, *Chem. Eng. Sci.*, 32, 1055-1066, 1977.
- Logtenberg, S.A. y A.G. Dixon, Computational fluid dynamics studies of the effects of temperature-dependent physical properties on fixed-bed heat transfer, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 37, 739-747, 1998.
- Logtenberg, S.A., Nijemeisland, A.G. y A.G. Dixon, Computational fluid dynamics simulations of fluid flow and heat transfer at the wall-particle contact points in a fixed-bed reactor, *Chem. Eng. Sci.*, 54, 2433-2439, 1979.
- Mariani, N.J., Mazza, G.D., Martinez, O.M., Cukierman, A.L. y G.F. Barreto, On the influence of liquid distribution on heat transfer parameters in trickle bed systems, *The Canadian Journal of Chem. Eng.*, 81, 814-820, 2003.
- Mariani, N.J., Mazza, G.D., Martinez, O.M. y G.F. Barreto, The distribution of particles in cylindrical packed beds. *Trends in Heat, Mass and Momentum Transfer*, 4, 95–114, 1998.
- Mariani, N.J., Martinez, O.M. y G.F. Barreto, Evaluation of heat transfer parameters in packed beds with concurrent downflow of liquid and gas, *Chem. Eng. Sci.*, 56, 5995-6001, 2001.

- Martin, J. J., Mc Cabe, W. L. y C.C. Monrad, Pressure drop through stacked spheres, effect of orientation, *Chem. Eng. Prog.*, 47, 91-93, 1951.
- Martinez, O., Pereira Duarte, S. y N. Lemcoff, Modeling of fixed bed catalytic reactors, *Comp. Chem. Eng.*, 9, 535-545, 1985.
- Mazza, G. Berto, C. y G. Barreto, Evaluation of radiative heat transfer properties in dense particulate media, *Powder Technology*, 67, 137-144, 1991.
- Macdonald, I.F., El-Sayed, M.S., Mow, K. y F.A. Dullien, Flow through porous media – the Ergun equation revisited, *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 18, 199-208, 1979.
- Mc Greavy, C. y D.L. Cresswell, Lumped parameter approximation to a general model of catalytic reactor, *Can. J. Chem. Eng.*, 47, 583–589, 1969.
- Melanson, M.M. y A.G. Dixon, Solid conduction in low d_t/d_p beds of spheres, pellets and rings, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 28, 383-394, 1985.
- Mehta, D. y M.C. Hawley, Wall effect in packed columns, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 8, 280-282, 1969.
- Montillet, A., Flow through a finite packed bed of spheres: A note on the limit of applicability of the Forchheimer-Type equation, *J. Fluids Eng.*, 126, 139-143, 2004.
- Montillet, A., Akkari E. y J. Comiti, About a correlating equation for predicting pressure drops through packed beds of spheres in a large range of Reynolds numbers, *Chem. Eng. Process.*, 46, 329-333, 2007.
- Negrini, A.L., Fuelber, A., Freire, J.T. y J.C. Thoméo, Fluid dynamics of air in a packed bed: velocity profiles and the continuum model assumption, *Brazilian Journal of Chem. Eng.*, 16, 421-432, 1999.
- Nijemeisland, M. y A.G. Dixon, Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed, *Chem. Eng. J.*, 3767, 1-16, 2001.

- Nijemeisland, M., Influences of catalyst particle geometry on fixed bed reactor near-wall heat transfer using CFD, *Ph. D. Thesis, Worcester Polytechnic Institute, USA*, 2003.
- Nijemeisland, M. y A.G. Dixon, CFD Study of Fluid Flow and Wall Heat Transfer in a Fixed Bed of Spheres, *AIChE J.*, 50, 906-921, 2004.
- Nijemeisland, M., Dixon, A.G. y E. Hugh Stitt, Catalyst design by CFD for heat transfer and reaction in steam reforming, *Chem. Eng. Sci.*, 59, 5185-5191, 2004.
- Niven, R. K., Physical insight into the Ergun and Wen & Yu equations for fluid flow in packed and fluidized beds, *Chem. Eng. Sci.*, 57, 527-534, 2002.
- Olbrich, W.E., A two phase diffusional model to describe heat transfer processes in a non adiabatic packed tubular bed, *Proc. Chemeca '70 Conf., Londres*, 101-119, 1970.
- Olbrich, W. y O. Potter, Mass transfer from the wall in small diameter packed beds, *Chem. Eng. Sci.*, 27, 1733-1743, 1972.
- Ondrey, G, Spotlight on ammonia and urea, *Chem. Eng.*, 10, 28-31, 2008
- Patankar, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, *Taylor and Francis Ed., USA*, 1980.
- Pereira Duarte, S.I., Martinez, O.M., Ferretti, O.A. y N.O. Lemcoff, Theoretical prediction of heterogeneous one-dimensional heat transfer coefficients for fixed-bed reactors, *ACS Symp. Ser.*, 237, 239-254, 1984.
- Peters, P. E., Schiffino, R. S. y P. Harriot, Heat transfer in packed-tube reactors, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 27, 226-233, 1988.
- Ranade, V., Computational flow modeling for chemical reactor engineering, *Academic Press, Londres*, 2002.
- Roblee, L.H.S., Baird, R.M. y J.W. Tierney, Radial porosity variations in packed beds, *AIChE J.*, 4, 4, 461-464, 1958.

- Romkers, S., Dautzenberg, F., Van den Bleek, C. y H. Calis, CFD modeling and experimental validation of particle-to-fluid mass and heat transfer in a packed bed at very low channel to particle diameter ratio. *Chem. Eng. J.*, 96, 3-13, 2003.
- Spalding, D.B. y B.E. Launder, Mathematical models of turbulence, *Journal of Sound and Vibration*, 25, 4, 651-651, 1972.
- Schnitzlein, K. y H. Hofmann, An alternative model for catalytic fixed bed reactors, *Chem. Eng. Sci.*, 42, 2569-2577, 1987.
- Shinnar, R. , Chemical reactor modeling-The desirable and the achievable, Luss, D. & Weekman Ed., *ACS Symp. Ser.*, 72, 1-36, 1978.
- Sorensen, J.P. y W.E. Stewart, Computational of forced convection in slow flow through ducts and packed beds, III. Heat and mass transfer in a simple cubic array of spheres, *Chem. Eng. Sci.* 29, 827-832, 1974.
- Tallmadge, J.A., Packed bed pressure drop – an extension to higher Reynolds number, *AIChE J.*, 16, 6, 1092-1093, 1970.
- Villadsen, J. y M.L. Michelsen, Solution of differential equations models by polynomial approximation, *Prentice-Hall, New Jersey*, 1978.
- Vortmeyer, D. y J. Schuster, Evaluation of steady flow profiles in rectangular and cylindrical packed beds by a variational method. *Chem. Eng. Sci.* 38, 1691, 1983.
- Vortmeyer, D., Packed bed thermal dispersion models and consistent sets of coefficients, *Chem. Eng. Process*, 26, 263-268, 1989.
- Wakao, N., Kaguei, S. y T. Funazkri, Effect of fluid dispersión coefficient in packed beds, *Chem. Eng. Sci.*, 34, 325-336, 1979.
- Wen, D. y Y. Ding, Heat transfer of gas flow through a packed bed, *Chem. Eng. Sci.*, 61, 3532-3542, 2006.
- Windes, L.C., Schwedock, M.J. y W.H. Ray, *AIChE Meeting*, Los Angeles, U.S.A., 1982.

- **Yagi, S. y D. Kunii, Studies on effective thermal conductivities in packed beds, *AIChE J.*, 3, 373-381, 1957.**
- **Yagi, S. y N. Wakao, Heat and mass transfer from wall to fluid in packed beds, *AIChE J.*, 5, 79-85, 1959.**