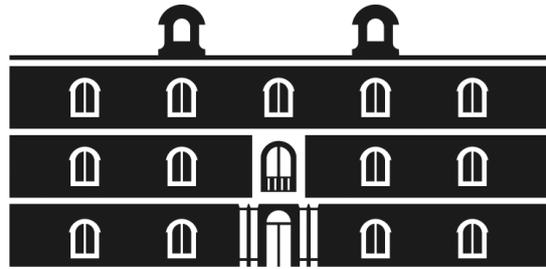




Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

Avances en la simulación numérica de reactores de flujo oscilatorio

Titulación: Ingeniería Industrial
Intensificación: Mecánica y Fabricación
Alumno: Héctor Martínez Rodríguez
Director: Juan Pedro Solano Fernández

Cartagena, 4 de Julio de 2012.

Resumen.

En este Proyecto Fin de Carrera se analizan el patrón de flujo y las estructuras de mezclado en un reactor de flujo oscilatorio con orificios deflectores (*oscillatory baffled reactor, OBR*). Se obtienen las soluciones numéricas del campo de velocidades del flujo oscilatorio incompresible usando el método de volúmenes finitos para las configuraciones de oscilación del fluido y oscilación de los discos, bajo la hipótesis de flujo neto nulo. Se establecen condiciones de operación de elevado número de Reynolds oscilatorio y reducido número de Strouhal, no reproducidas en ningún estudio numérico previo, con frecuencias de oscilación de 2, 1 y 0,5 Hz y amplitud de oscilación de 28 mm. Para la configuración de oscilación del fluido se realiza una simulación completa, con flujo en desarrollo sobre un dominio computacional de ocho pasos espaciales, y se validan las condiciones de contorno periódicas con una simulación periódica sobre un dominio computacional de un único paso espacial. Se efectúan simulaciones 2D axil-simétricas, resueltas con el modelo de turbulencia $k-\omega$, y simulaciones 3D, resueltas con el modelo LES. El mecanismo de mezcla que se desarrolla bajo las condiciones de operación simuladas se compara con los mecanismos descritos por otros autores, con números de Strouhal próximos a la unidad, y se analiza la influencia del número de Reynolds oscilatorio sobre las estructuras generadas. Para las simulaciones 3D se aplica la técnica del promediado en fase (*phase-locked average, PLA*) sobre diez ciclos de oscilación con el fin de caracterizar el comportamiento fluctuante y caótico del flujo, encontrándose una interesante tendencia hacia el comportamiento axil-simétrico de la solución 3D. Para la configuración de oscilación de los discos se realiza por primera vez la simulación completa 2D del flujo, aplicando un mallado dinámico con discos móviles. Para todas las simulaciones se presentan las evoluciones temporales de los perfiles radiales axial y de los contornos de velocidad a lo largo de un ciclo de oscilación, complementadas con animaciones en vídeo de los resultados numéricos obtenidos.

Abstract.

The present thesis analyzes the flow pattern and mixing structures in an oscillatory baffled reactor (OBR). Numerical solutions of the velocity field for incompressible oscillatory flow are obtained with the finite volumes method for both fluid oscillation and baffled oscillation configurations under the assumption of zero net flow. High oscillatory Reynolds number and low Strouhal number operating conditions, not reproduced in any previous numerical study, are set, with oscillation frequencies of 2, 1 and 0.5 Hz and oscillation amplitude of 28 mm. At fluid oscillation configuration a full simulation, with developed flow over an eight cells computational domain, is performed and the periodic boundary conditions are validated with a periodic simulation over a single cell computational domain. 2D axi-symmetrical simulations, solved with $k-\omega$ turbulence model, and 3D simulations, solved with LES model, are performed. The mixing mechanism developed under the simulated operating conditions is compared to the mechanisms described by other authors for Strouhal number close to unity, and the influence of the oscillatory Reynolds number on the generated structures is discussed. A phase-locked average (PLA) strategy is used for data reduction of the 3D simulations over ten oscillation cycles, in order to characterize the fluctuating and chaotic behavior of the flow. An interesting tendency to axi-symmetric's behavior in the 3D solution is found. At baffled oscillation configuration a full simulation of the 2D flow is realized for the first time, applying a dynamic mesh with moving baffles. For every simulation, the radial profiles and contours of velocity along an oscillation cycle are shown and complemented with video animations of the obtained numerical results.

CAPÍTULO 1.	
INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS	1
1.1. REACTORES DE FLUJO OSCILATORIO	2
1.1.1. Terminología.....	2
1.1.2. Ventajas y aplicaciones	5
1.1.3. Mecanismo de mezcla	6
1.2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA	8
1.2.1. Trabajos previos, desde la década de los 90 hasta hoy.....	8
1.2.2. Columnas de flujo oscilatorio. Aportaciones de Xiong-Wei Ni	9
1.2.3. Problema térmico y otros autores	11
1.3. DEFINICIÓN DEL PROBLEMA	13
1.3.1. Condiciones de operación	13
1.3.2. Grupos adimensionales	14
1.3.3. Bloque I. Oscilación del fluido	15
1.3.4. Bloque II. Oscilación de los discos	16
1.4. OBJETIVOS DEL PROYECTO	17

BLOQUE I. OSCILACIÓN DEL FLUIDO.

CAPÍTULO 2.	
ESTUDIO DE LA MALLA EN EL MODELO 2D	18
2.1. DEFINICIÓN DEL DOMINIO COMPUTACIONAL	19
2.1.1. Paso espacial	19
2.1.2. Tipología de mallado	20
2.1.3. Distribución espacial de los nodos.....	21
2.2. ESTUDIO DE SENSIBILIDAD DE MALLA.....	26
2.2.1. Introducción	26
2.2.2. Hipótesis de simulación	26
2.2.3. Variables testigo y zonas de evaluación iniciales.....	27
2.2.4. Construcción de las mallas.....	28
2.2.5. Resultados iniciales.....	31
2.2.6. Perfiles radiales de presión estática y velocidad axial	32
2.2.7. Gradiente de presión.....	36
2.2.8. Selección de la malla óptima.....	36
2.2.9. Aspectos constructivos de la malla óptima en GAMBIT	38
CAPÍTULO 3.	
SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL MODELO 2D	43
3.1. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN	44
3.1.1. Simulación estacionaria.....	44
3.1.2. Simulación no estacionaria	44
3.1.3. Periodicidad temporal.....	47
3.1.4. Periodicidad espacial	48

	Página
3.2. SIMULACIÓN COMPLETA	50
3.2.1. Hipótesis de simulación	50
3.2.2. Simulación de casos sucesivos mediante fichero <i>Journal</i>	50
3.2.3. Periodicidad espacial de la simulación estacionaria.....	50
3.2.4. Periodicidad temporal de la simulación no estacionaria	52
3.2.5. Periodicidad espacial de la simulación no estacionaria	55
3.3. SIMULACIÓN PERIÓDICA	59
3.3.1. Hipótesis de simulación	59
3.3.2. Simulación de casos sucesivos mediante fichero <i>Journal</i>	59
3.3.3. Periodicidad espacial de la simulación estacionaria.....	59
3.3.4. Periodicidad temporal de la simulación no estacionaria	61
3.3.5. Periodicidad espacial de la simulación no estacionaria	63
3.3.6. Conclusiones del análisis de periodicidad	66
3.4. RESOLUCIÓN DEL CAMPO DE VELOCIDADES	67
3.4.1. Presentación de resultados	67
3.4.2. Perfiles radiales de velocidad	68
3.4.3. Contornos de velocidad	72
3.4.4. Influencia del número de Reynolds oscilatorio	74
3.4.5. Análisis local de la capa límite en el hueco del disco.....	79
CAPÍTULO 4.	
ESTUDIO DE LA MALLA EN EL MODELO 3D	82
4.1. DEFINICIÓN DEL DOMINIO COMPUTACIONAL	83
4.1.1. Paso espacial	83
4.1.2. Construcción del mallado 3D en GAMBIT	83
4.2. ESTUDIO DE SENSIBILIDAD DE MALLA.....	89
4.2.1. Introducción e hipótesis de simulación	89
4.2.2. Variables testigo y zonas de evaluación.....	89
4.2.3. Construcción de las mallas.....	89
4.2.4. Resultados y selección de la malla óptima	91
CAPÍTULO 5.	
SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL MODELO 3D	93
5.1. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN	94
5.1.1. Simulación estacionaria.....	94
5.1.2. Simulación no estacionaria	94
5.1.3. Periodicidad temporal.....	96
5.1.4. Periodicidad espacial	97
5.2. SIMULACIÓN PERIÓDICA	100
5.2.1. Hipótesis de simulación	100
5.2.2. Simulación de casos sucesivos mediante fichero <i>Journal</i>	100
5.2.3. Periodicidad espacial de la simulación estacionaria.....	100
5.2.4. Periodicidad temporal de la simulación no estacionaria	102
5.2.5. Periodicidad espacial de la simulación no estacionaria	105
5.2.6. Conclusiones del análisis de periodicidad	106
5.2.7. Análisis de la simetría angular.....	106

	Página
5.3. RESOLUCIÓN DEL CAMPO DE VELOCIDADES	109
5.3.1. Presentación de resultados	109
5.3.2. Perfiles radiales de velocidad	110
5.3.3. Contornos de velocidad	114
5.3.4. Contornos de velocidad normal al plano	116
5.3.5. Influencia del número de Reynolds oscilatorio	117
5.4. PROMEDIADO EN FASE	123
5.4.1. Justificación	123
5.4.2. Perfiles radiales de velocidad promediados y desviación estándar ..	123
5.4.3. Contornos de velocidad promediados	125
5.4.4. Contornos de velocidad normal al plano promediados	126

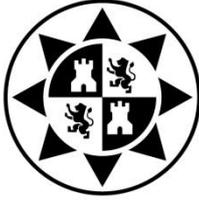
BLOQUE II. OSCILACIÓN DE LOS DISCOS.

CAPÍTULO 6.	
MALLADO DINÁMICO	128
6.1. ESTUDIO DE LA MALLA EN EL MODELO 2D	129
6.1.1. Definición del dominio computacional.....	129
6.1.2. Construcción de la malla.....	130
6.2. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN	132
6.2.1. Simulación estacionaria y simulación no estacionaria	132
6.2.2. Periodicidad temporal.....	134
6.2.3. Periodicidad espacial	135
6.3. SIMULACIÓN COMPLETA	140
6.3.1. Hipótesis de simulación	140
6.3.2. Simulación de casos sucesivos mediante <i>UDF</i>	140
6.3.3. Definición de la malla dinámica en FLUENT	141
6.3.4. Periodicidad espacial de la simulación estacionaria.....	146
6.3.5. Periodicidad temporal de la simulación no estacionaria	146
6.3.6. Periodicidad espacial de la simulación no estacionaria	149
6.3.7. Conclusiones del análisis de periodicidad	152
6.4. RESOLUCIÓN DEL CAMPO DE VELOCIDADES	153
6.4.1. Presentación de resultados	153
6.4.2. Perfiles radiales de velocidad	154
6.4.3. Contornos de velocidad	160
6.4.4. Influencia del número de Reynolds oscilatorio	163

CONCLUSIONES DEL ESTUDIO171

ANEXOS.

A. MODELOS DE TURBULENCIA Y RESTRICCIONES SOBRE y^+	172
B. PRESIÓN BAJO CONDICIONES PERIÓDICAS	182
C. DISCRETIZACIÓN TEMPORAL CON PASO FIJO Y CON PASO VARIABLE.....	186
D. GUÍA PRÁCTICA DE MANEJO DE TECPLOT.....	190
E. USER-DEFINED FUNCTIONS. CONFIGURACIÓN DEL COMPILADOR	205
Referencias bibliográficas.....	211
Agradecimientos	214



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

BLOQUE I. OSCILACIÓN DEL FLUIDO.

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS.

1.1. REACTORES DE FLUJO OSCILATORIO.

1.1.1. Terminología.

Considérese inicialmente un flujo en un conducto liso de sección transversal circular, caracterizado por la velocidad media del flujo u , el diámetro interior del conducto D , y la viscosidad cinemática del fluido ν . Se denomina **flujo oscilatorio puro** (*pure oscillatory flow, POF*) a la superposición de un movimiento oscilatorio sobre dicho flujo [47]. Para caracterizar un *POF* se requiere, además de los parámetros anteriores, un parámetro adicional: la velocidad de oscilación $u_0 = x_0\omega$, siendo x_0 la amplitud de oscilación y ω la frecuencia angular de oscilación. Insertando en el conducto una serie de elementos equiespaciados se obtiene un **flujo oscilatorio con orificios deflectores** (*oscillatory baffled flow, OBF*). En la caracterización de un *OBF* intervienen, además de los parámetros anteriores, dos parámetros geométricos: el diámetro interior del elemento deflector D_0 y la distancia entre elementos deflectores L .

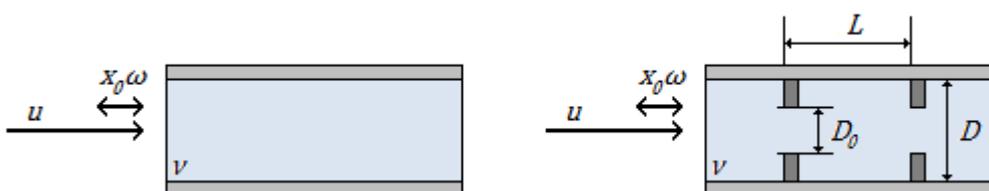


Figura 1.1. Parámetros de caracterización del flujo oscilatorio. Izquierda, flujo oscilatorio puro (POF). Derecha, flujo oscilatorio con orificios deflectores (OBF).

Los dispositivos de mezcla que generan en su interior un *OBF* se conocen como **columnas de flujo oscilatorio con orificios deflectores** (*oscillatory baffled column, OBC*). Por lo tanto, son dos los aspectos que están siempre presentes en estos equipos de mezcla tubulares:

- Presencia de elementos insertados espaciados uniformemente.
- Existencia de un flujo oscilatorio sobre un flujo neto.

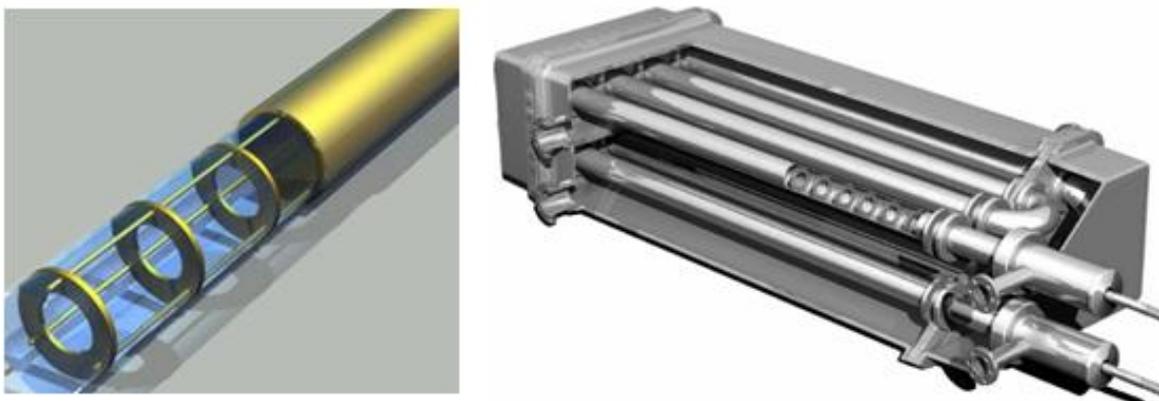


Figura 1.2. Izquierda, forma típica de una columna de flujo oscilatorio con orificios deflectores, OBC [1]. Derecha, vista del equipo completo.

En la figura anterior se muestra la forma típica de un *OBC*, en el que los **elementos insertados** son discos con un único orificio central. Otros elementos que pueden ser también utilizados son discos con múltiples orificios, muelles helicoidales, láminas alabeadas, mallados de alambre (tipo HiTran), etc. [3, 4].

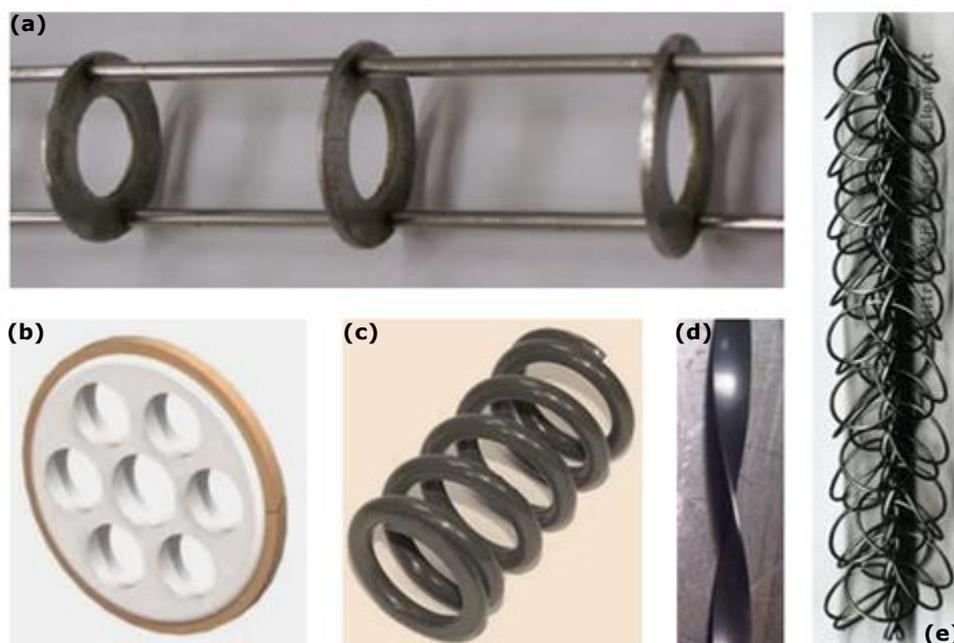


Figura 1.3. Otros elementos insertados. Disco con un único orificio (a), disco con múltiples orificios (b), muelle helicoidal (c), lámina alabeada (d), mallado de alambre HiTran (e).

Estos elementos insertados dan lugar a una aceleración local del flujo por la reducción de sección transversal de paso, que se cuantifica a través del ratio de constricción (*constriction ratio*, CR):

$$CR = \frac{A_{def}}{A_t} \quad (\text{ec.1.1})$$

donde A_{def} es el área de la sección transversal obstruida por el deflector, y A_t es el área de la sección transversal total.

En el caso de columnas cilíndricas con discos insertados de un único orificio, el ratio de constricción toma la forma siguiente:

$$CR = 1 - \left(\frac{D_0}{D}\right)^2 \quad (\text{ec.1.2})$$

siendo D_0 el diámetro interior del disco y D el diámetro interior de la columna.

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

$$u_{osc} = 2\pi f x_0 \cos(2\pi f t) \quad (\text{ec.1.3})$$

$$u(t) = u_{net} + u_{osc} \quad (\text{ec.1.4})$$

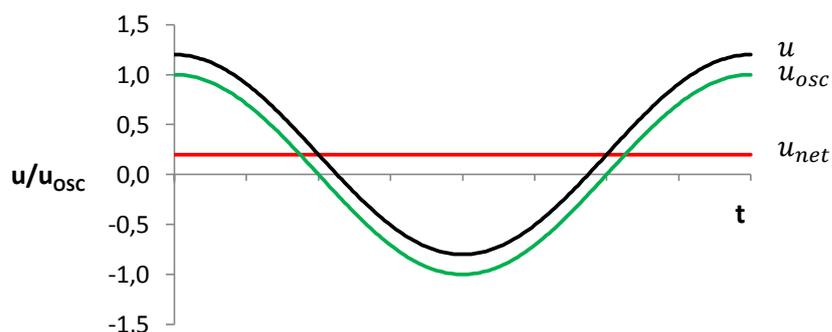


Figura 1.4. Flujo neto y flujo oscilatorio superpuesto.

La entrada de flujo se efectúa perpendicularmente a la columna, tal y como se observa en la *Figura 1.2* (derecha). La componente oscilatoria se consigue por medio de pistones, diafragmas o fuelles que actúan en la dirección axial de la columna, y que se sitúan en uno o en ambos extremos. Existen dos posibles configuraciones para la actuación de los pistones:

- Oscilación del fluido: el pistón actúa directamente sobre el flujo.
- Oscilación de los deflectores: el pistón desplaza a los elementos insertados.

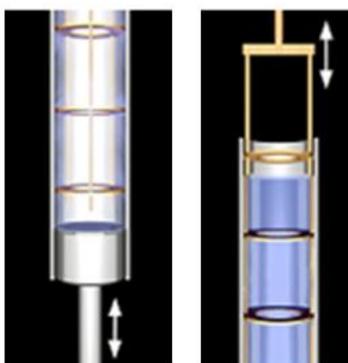


Figura 1.5. Configuración de los pistones. Izquierda, oscilación del fluido. Derecha, oscilación de los deflectores [51].

Aquellos dispositivos *OBC* en los que durante el proceso de mezcla se producen además reacciones químicas son conocidos como **reactores de flujo oscilatorio con orificios deflectores** (*oscillatory baffled reactor, OBR*). El amplio abanico de configuraciones posibles para estos dispositivos de mezcla se engloban bajo la denominación genérica de **reactores de flujo oscilatorio** (*oscillatory flow reactor, OFR*). Se distinguen dos modos de funcionamiento [2]:

- Modo por lotes (*batch oscillatory baffled reactor, BOBR*).
- Modo continuo (*continuous oscillatory baffled reactor, COBR*).

1.1.2. Ventajas y aplicaciones.

Los reactores de flujo oscilatorio *OBR* ofrecen interesantes ventajas respecto a los procesos tradicionales de mezclado en tanques de agitación, como son una distribución más uniforme de la fase dispersa en la fase acuosa [5, 6], una mejora de la transferencia de calor y masa [7, 8], una estrecha distribución del tiempo de residencia de las partículas [9, 10, 11, 12, 13] y un preciso control de las condiciones de mezcla [14]. A diferencia del reactor tubular convencional, en el que se requiere una elevada velocidad superficial para obtener una buena mezcla, el *OBR* puede proporcionar un comportamiento de flujo pulsante en régimen de flujo laminar. Además, un *OBR* es ideal para la realización de reacciones largas, ya que la mezcla conseguida es independiente del gasto másico. Esto permite convertir en continuos a aquellos procesos en modo por lotes que requieren un elevado tiempo de residencia, y que obligan a diseños con alto ratio longitud-diámetro si son ejecutados con reactores convencionales [15].

El empleo de estos reactores de flujo oscilatorio se da, principalmente, en las industrias químicas, bioquímicas y farmacéuticas. Algunas de las aplicaciones donde actualmente se emplean *OBR* son la polimerización, la fermentación, la síntesis orgánica, el procesamiento o la dispersión. Quizás la aplicación más relevante sea la fabricación de polímeros mediante **polimerización en suspensión**. En este proceso se mezcla una fase acuosa, generalmente agua, con una cierta cantidad de monómero insoluble, dando lugar a la formación de gotas de monómero en la fase acuosa. El *OBR* permite obtener una distribución adecuada y uniforme del tamaño de las partículas de polímero a través de control óptimo de las condiciones de mezcla, especialmente de la temperatura, así como evitar la fusión de las gotas de monómero durante la reacción. Con la polimerización en suspensión se producen polímeros como el cloruro de polivinilo, el poliestireno o las resinas de intercambio de cationes y aniones, y más recientemente el metacrilato de metilo, la acrilamida y el estireno [5].

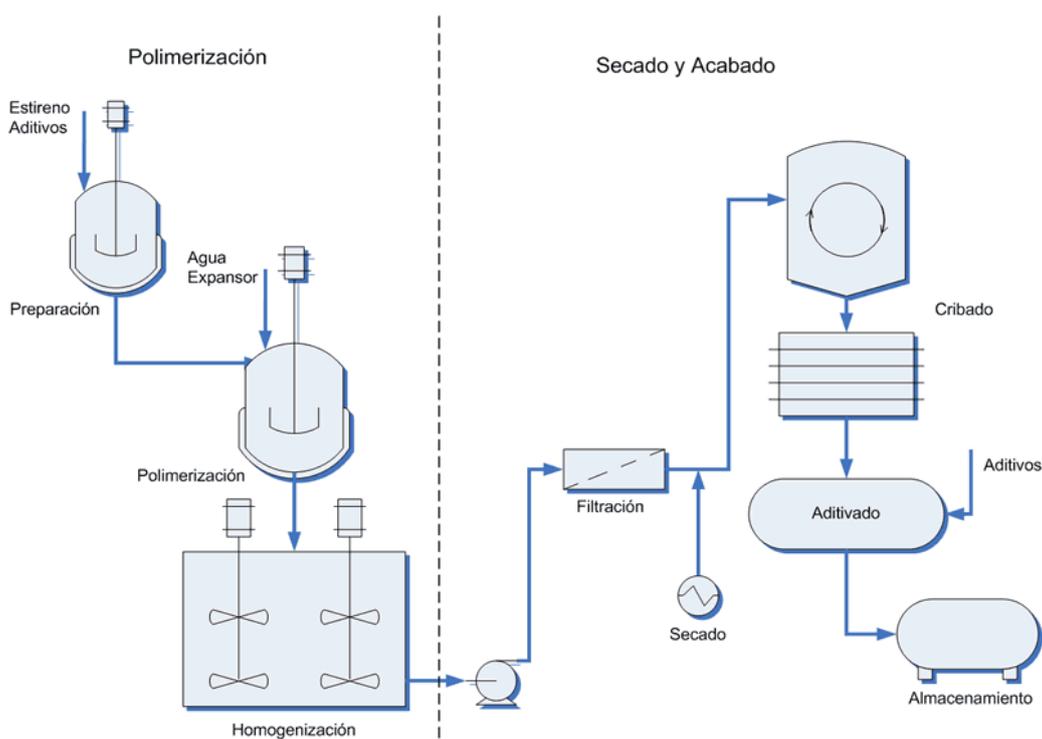


Figura 1.6. Esquema del proceso de polimerización en suspensión. Fabricación de estireno.

Una de las aplicaciones potenciales más atractivas para los reactores de flujo oscilatorio es la **producción de biocarburantes**. El empleo de reactores tipo tanque de agitación es una tecnología suficientemente conocida, y cuya eficiencia es ya difícilmente mejorable. Por ello se trabaja actualmente en el desarrollo de reactores intensificados: reactores estáticos, reactores con micro-canales, reactores con cavitación, reactores rotativos y reactores de flujo oscilatorio. Estos dispositivos están caracterizados por la miniaturización de los equipos tubulares, un mayor grado de conversión y una menor cantidad de catalizador, el uso de condiciones de proceso más suaves, la reducción de los costes energéticos asociados y el aumento de la capacidad de producción [16]. En última instancia, estas nuevas tecnologías permitirán aumentar la competitividad de las instalaciones de producción de biodiesel.

Recientemente se ha demostrado la viabilidad del *OBR* para la producción mejorada de biodiesel a partir de semillas oleaginosas, como la *jatropha curcas*, y para la fermentación de bioalcoholes a partir de materias primas lignocelulósicas [17,18].



Figura 1.7. Plantación de *jatropha curcas* en Melbourne, Australia.

El nuevo **Plan de Energías Renovables 2011-2020** estima un aumento en la producción nacional de biocarburantes del 80 % durante la presente década, a través de una estrategia doble: desarrollar una normativa inequívoca para la comercialización de mezclas etiquetadas de biocarburantes (biodiesel y bioetanol) en estaciones de servicio, y adoptar las propuestas de la Iniciativa Industrial Europea sobre Bioenergía (EIBI). Estas propuestas se basan en el desarrollo de nuevas tecnologías termoquímicas para la transformación de materia prima vegetal en biocarburantes, y está apoyado por la creación de un Programa Nacional de Desarrollo Tecnológico en Biocarburantes y un Plan Nacional de Desarrollo Agroenergético [19].

1.1.3. Mecanismo de mezcla.

El patrón de movimiento del flujo en el interior de un *OBR* es generado por el efecto combinado de la presencia de elementos insertados y la existencia de flujo oscilatorio superpuesto. El flujo se acelera y se desacelera según una ley sinusoidal para la velocidad en función del tiempo. Con cada aceleración del flujo se forman anillos de vorticidad aguas abajo de los deflectores. Cuando el flujo se desacelera se forman nuevos anillos de vorticidad en el lado opuesto de los deflectores que, a su vez, desplazan a los anillos formados durante la aceleración hacia la región entre los deflectores.

La interacción entre los anillos de vorticidad creados durante la aceleración y desaceleración del flujo da lugar a complejas estructuras vorticales que intensifican el proceso de mezcla. En la *Figura 1.8* se muestra esquemáticamente este mecanismo:

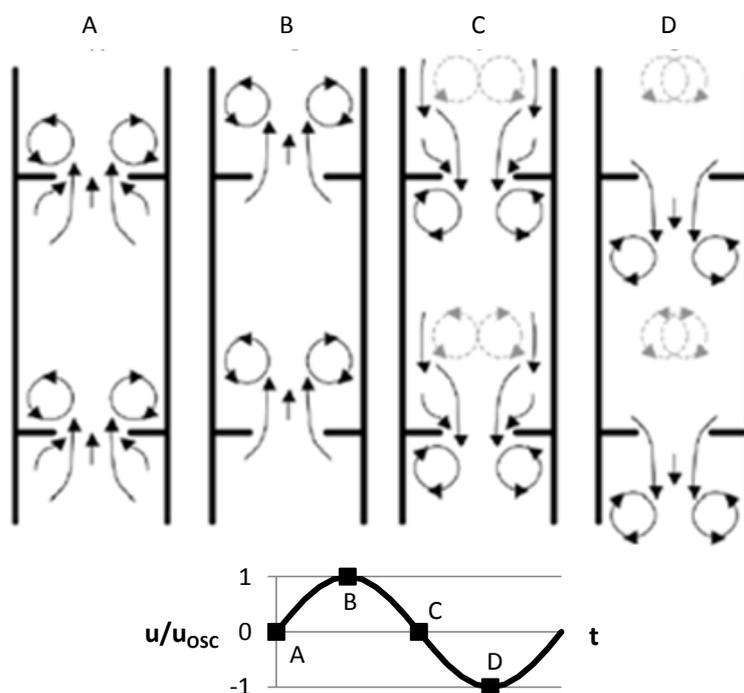


Figura 1.8. Esquema del mecanismo de mezcla en reactores de flujo oscilatorio.

Con la repetición sucesiva de ciclos de formación de anillos de vorticidad, la elevada componente de velocidad radial que se alcanza genera una mezcla uniforme en cada región entre deflectores, que se acumula a lo largo de la longitud del reactor [9, 12, 13]. Este mecanismo de mezcla posee, por tanto, **periodicidad espacial** y **periodicidad temporal**, ya que las estructuras vorticales son las mismas en cada una de las regiones entre deflectores, y se repiten con cada ciclo velocidad-tiempo. En la *Figura 1.9* se muestra una visualización de este mecanismo de mezcla [52]:

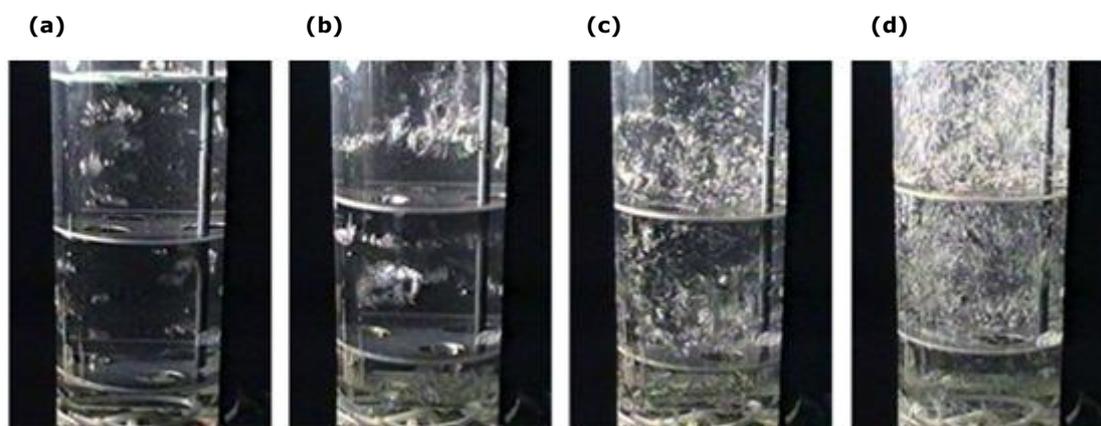


Figura 1.9. Visualización del mecanismo de mezcla. Sin oscilación (a). Comienzo de la oscilación (b). Tras un ciclo completo de oscilación (c). Tras varios ciclos completos de oscilación (d).

1.2. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.

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

Si bien es cierto que es partir de los años 90 cuando crece el interés por el desarrollo tecnológico de los reactores de flujo oscilatorio, es relevante destacar la labor de aquellos investigadores que se adelantaron en el estudio del flujo oscilatorio. Por ejemplo, ya en el año 1983, Hwang y Dybbs se ocuparon de la transferencia de calor en este tipo de flujo, presentando datos para diferentes amplitudes de oscilación [20]. También en 1983, Sobey analizó el tiempo de residencia en flujos oscilatorios [21].

Uno de los investigadores pioneros en el estudio del flujo oscilatorio en tubos con orificios deflectores insertados fue Howes, que en 1988 publicó un trabajo acerca de la dispersión en *OBF*, apoyado en simulaciones numéricas [11]. En 1989 Brunold *et al.* presentaron uno de primeros modelos de flujo experimentales para *OBF* [9]. Ese mismo año, Dickens *et al.* caracterizaron experimentalmente el comportamiento de la mezcla en reactores de flujo oscilatorio convencionales, a través de la evaluación de la distribución del tiempo de residencia mediante inyección de trazador [10]. En 1990, Howes y Mackley [22] continúan con el estudio de la dispersión en *OBF*. También en 1990, Mackley *et al.* publicaron datos de la transferencia de calor en un mezclador con los que demostraron que un flujo oscilatorio superpuesto proporciona un **aumento significativo de la transferencia de calor** con respecto al mismo gasto másico en un tubo liso. Pusieron de manifiesto que tanto la oscilación del flujo como los orificios deflectores tienen que estar presentes para producir este efecto [23].

A partir de entonces, el número de trabajos acerca del flujo oscilatorio en reactores químicos aumenta muy considerablemente. Las áreas de investigación científica han incluido, entre otras, modelos de flujo (Mackley y Ni, en 1991 [12] y 1993 [13]), perfiles locales de velocidad y distribución de esfuerzo cortante (Ni *et al.*, en 1995 [24]), distribución del tiempo de residencia (Mackley y Ni, en 1991 [12] y 1993 [13]; Ni, en 1994 [25]), dispersión (Mackley y Ni, en 1991 [12] y 1993 [13]; Ni, en 1995 [24]), transferencia de calor (Mackley y Stonestreet, en 1995 [7]), transferencia de masa (Hewgill *et al.*, en 1993 [26]; Ni *et al.*, en 1995 [24]; Ni y Gao, en 1996 [27, 28]), mezcla y separación de partículas (Mackley *et al.*, en 1993 [29]), perfiles de velocidad de partículas (Liu *et al.*, en 1995 [30]), reacción (Ni y Mackley, en 1993 [31]), correlaciones de escalado (Ni y Gao, en 1996 [27, 28]), deflectores oscilantes en flujo oscilatorio (Baird y Rama Rao, en 1995 [32]; Stonestreet, en 1995 [33]) o parámetros adimensionales de caracterización del flujo (Zhao y Cheng, en 1995 [34]).

Ante el elevado número de estudios existentes, diferentes autores efectúan una labor de revisión y compilación de la bibliografía. Por ejemplo, en el año 2002, Ni *et al.* realizaron una detallada descripción de los trabajos previos acerca de simulación numérica en reactores de flujo oscilatorio con orificios deflectores, publicados hasta mediados de 1990 [35]. En 2003, Ni *et al.* presentaron una completa revisión de las aplicaciones de la tecnología de flujo oscilatorio hasta la fecha [36]. En este último trabajo además se llevó a cabo una de las primeras simulaciones numéricas 3D en CFD del flujo oscilatorio en una columna con deflectores.

En cuanto a los trabajos más recientes, cabe destacar la presentación, en 2005, de los perfiles de temperatura experimentales del flujo oscilante, en pared y fluido, en diferentes condiciones de oscilación [37], por parte de Bouvier *et al.* También en 2005, Jian y Ni publican un estudio numérico del **comportamiento del escalado** en las columnas oscilatorias con deflectores en modo por lotes, en el que se demuestra que el escalado de un *OBC* puede ser tratado como lineal [38].

En los últimos años, tiene una especial importancia el desarrollo de reactores de flujo oscilatorio con orificios deflectores en **meso-escala**, para el análisis de procesos en laboratorio. Son dispositivos con volúmenes del orden de mililitros, normalmente en torno a 5 mm de diámetro D , y con secciones transversales de diámetro D_0 , considerablemente menores que en los diseños convencionales de *OBR*. En 2005, Reis *et al.* presentaron un novedoso meso-reactor de flujo, compuesto por tubos lisos con constricciones periódicas, demostrando con estudios experimentales y numéricos que es posible alcanzar una buena mezcla con este tipo de dispositivos [39]:

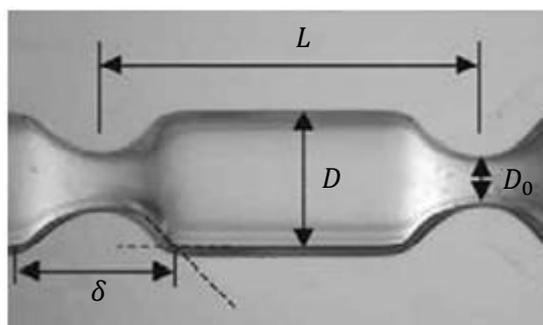


Figura 1.10. Meso-reactor de flujo oscilatorio. $D=4.4$ mm, $L=13$ mm, $\delta=6$ mm, $D_0=1.6$ mm.

Como mostraron Harvey *et al.* en 2003 [40] y Reis *et al.* en 2006 [41], estos meso-reactores pueden funcionar a velocidades de flujo más bajas que los reactores de flujo oscilatorio convencionales (desde l/min a ml/min), y permiten reducir la cantidad de materia prima requerida en el proceso y los materiales de desecho generados. Más recientemente, autores como Phan y Harvey, en 2010 [42] y 2011 [43], y Phan *et al.* en 2011 [44], han puesto de manifiesto la viabilidad del escalado directo de estos sistemas, desde la escala de laboratorio hasta escala industrial, así como la posibilidad de utilizarlos como plataformas de producción a pequeña escala.

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

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

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

En 2001, Ni y Pereira presentan una investigación experimental de la **distribución del tamaño de gota** en un reactor de flujo oscilatorio con orificios deflectores, operando en modo continuo, en la que reflejan la importancia de los parámetros de amplitud y frecuencia de oscilación en la mezcla [6]. En este trabajo se evalúa el número mínimo de gotas necesarias para obtener una muestra representativa de la distribución del tamaño, y se establece la correspondencia de dicha distribución con una función gaussiana. Asimismo se pone de manifiesto que, para un tamaño medio de gota dado, el modo de funcionamiento continuo requiere una menor potencia de entrada que el modo por lotes en la columna.

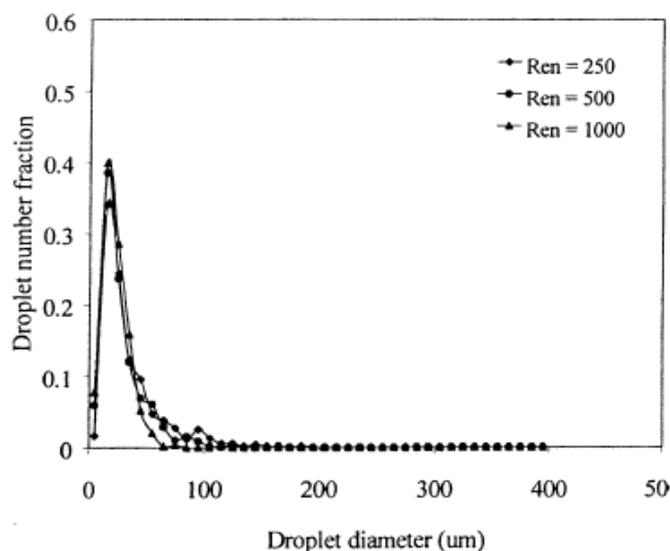


Figura 1.11. Típica forma gaussiana de la distribución del tamaño de gota en un reactor de flujo oscilatorio [6].

En 2002, Ni *et al.* analizan el efecto de la densidad en la dispersión axial en una columna de flujo oscilatorio con orificios deflectores funcionando en modo por lotes [45], midiendo experimentalmente los perfiles locales de concentración y determinando los coeficientes de dispersión axial. Si bien es cierto que entre los objetivos del Proyecto no se han considerado la obtención numérica de la distribución del tamaño de gota ni de los perfiles de concentración, sí pueden ser éstas líneas de investigación interesantes para futuros trabajos.

También en 2002, Ni *et al.* realizan la **primera simulación numérica en 3D** con CFD de los patrones de flujo en régimen asimétrico en una columna de flujo oscilatorio con orificios deflectores [2]. Hasta este trabajo, todos los datos publicados se centraban en la región de formación de remolinos de manera simétrica a lo largo de la línea central de la *OBC*. En 2003, Ni *et al.* aplican, por primera vez de manera conjunta, la simulación numérica y la técnica de velocimetría digital de imágenes para cuantificar las propiedades turbulentas del flujo oscilatorio en una *OBC*: disipación de energía cinética turbulenta, tasa de energía cinética turbulenta, escala de longitud integral turbulenta y escala de tiempo de Kolmogorov [4].

En 2005, Jian y Ni publican un estudio numérico acerca del comportamiento del escalado en tres columnas oscilatorias con orificios deflectores, con diámetros de 50, 100 y 200 mm respectivamente [38]. Demuestran que el aumento de escala es lineal y que las condiciones mecánicas del fluido en términos de ratios de velocidad son independientes del **factor de escala**.

Ese mismo año, Ni participa en una investigación experimental y numérica sobre el **efecto de la viscosidad** de la mezcla en una *OBC* [46]. Se revela que, tanto en fluidos newtonianos como no-newtonianos, a medida que la viscosidad aumenta, el flujo se vuelve más simétrico y centralizado en el orificio, empobreciendo el mezclado.

Pero además de los trabajos experimentales y numéricos de Ni, resulta interesante rescatar una discusión acerca de los **grupos adimensionales** que gobiernan el comportamiento del flujo oscilatorio en un conducto con orificios deflectores que fue publicada en 1997 [47]. Tradicionalmente los parámetros considerados para definir los grupos adimensionales han sido la velocidad media del flujo u , el diámetro interior del conducto D , la viscosidad cinemática del fluido ν , la amplitud de oscilación x_0 y la frecuencia angular de oscilación ω (los grupos adimensionales se definen en el *Apartado 1.3.2*). En este trabajo, Ni plantea la necesidad de modificar dichos grupos, generalmente aceptados, para tener en cuenta además el diámetro interior del elemento deflector D_0 , y deja abierta a debate la consideración o no de la distancia entre elementos deflectores L (véase la *Figura 1.1*).

1.2.3. Problema térmico y otros autores.

Aunque la resolución del problema térmico del flujo oscilatorio no se plantea en el presente Proyecto, sí se ha realizado una breve revisión bibliográfica introductoria al mismo. El objeto de esta introducción ha sido conocer mejor el complejo comportamiento del flujo en los reactores de flujo oscilatorio, y ofrecer así un enfoque más completo del problema mecánico y su solución.

Stephens y Mackley abordan, en el año 2001, el problema de la **transferencia de calor** en los reactores de flujo oscilatorio que operan por lotes, y demuestran que este modo de funcionamiento en *OBR* es energéticamente eficiente y viable desde el punto de vista térmico [14]. Se presentan resultados experimentales para las dos configuraciones posibles en modo por lotes: oscilación del fluido y oscilación de los deflectores. En este trabajo se resume la determinación de los coeficientes de transmisión de calor y del número de Nusselt a partir de los perfiles de temperatura de la pared y el fluido.

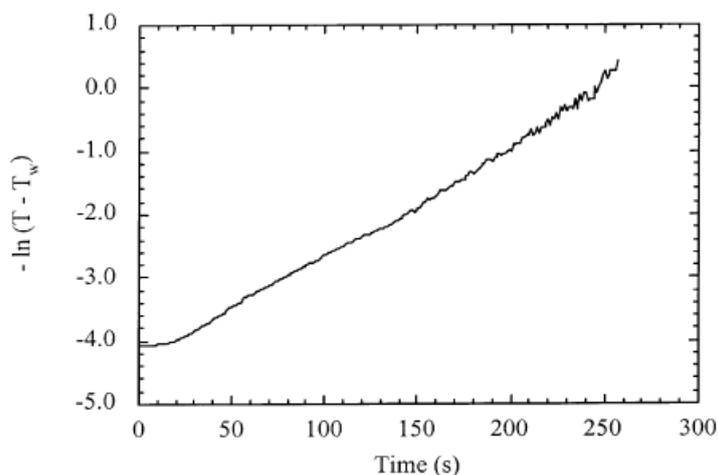


Figura 1.12. Típico gráfico logarítmico de temperatura para la determinación del coeficiente de transmisión de calor en flujo oscilatorio [14].

J. P. Solano, director de este Proyecto Fin de Carrera, junto con otros autores, presenta en 2011 un estudio numérico sobre el modelo de flujo y las características de transferencia de calor en reactores de flujo oscilatorio con **muelles helicoidales insertados** [48,49]. En él se muestra el efecto beneficioso de la inserción del muelle en la transferencia de calor en el flujo y se plantea la necesidad de ampliar los grupos adimensionales comúnmente evaluados para proporcionar una mayor comprensión del problema térmico. De dicho estudio se deriva la metodología de trabajo que se ha seguido en el presente Proyecto, y se sientan las bases a futuras investigaciones en el campo de la dinámica de fluidos computacional aplicada a los reactores de flujo oscilatorio.

La conclusión más inmediata a la que se llega después de una revisión de la bibliografía publicada es que quedan aún muchos interrogantes por resolver en el comportamiento del flujo en los reactores oscilatorios. El trabajo publicado por Muñoz y Sanmiguel en 2011, acerca de la simulación numérica del flujo laminar en un tubo con muelle insertado, es una muestra de ello [50]. En este estudio, en el que se analiza el comportamiento del **factor de fricción de Fanning** en función del número de Reynolds, se propone una interesante discusión sobre las regiones de validez de las condiciones de contorno aplicadas en la simulación numérica: simulación completa y simulación periódica (véase la *Figura 1.13*). Muñoz y Sanmiguel ponen de manifiesto que existe un número de Reynolds crítico, por encima del cuál la simplificación de simulación periódica no sería válida y describen hasta cuatro regiones de comportamiento diferente para el factor de fricción. Este concepto podría obligar a revisar los modelos numéricos empleados en las simulaciones publicadas hasta la fecha, si bien es cierto que estos autores limitaron su análisis a los resultados obtenidos con un modelo de flujo laminar.

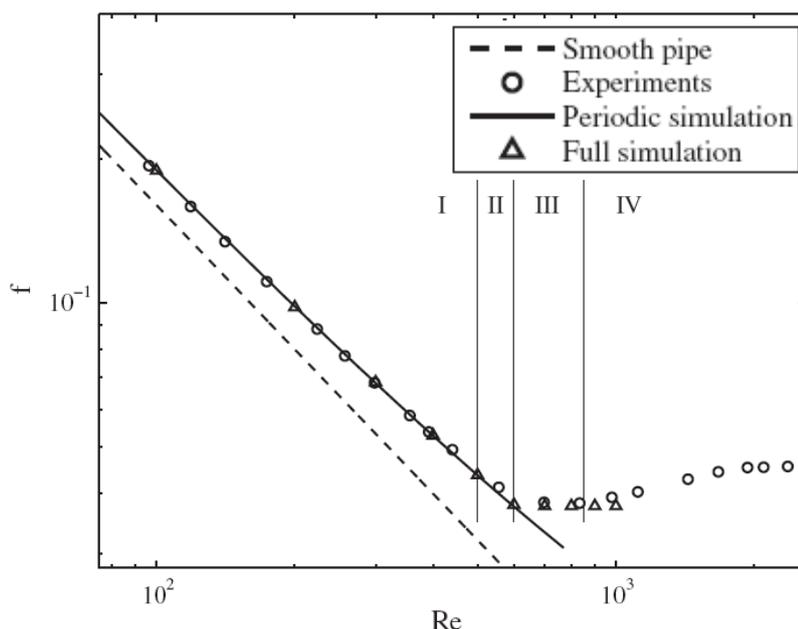


Figura 1.13. Diferentes regiones de comportamiento del factor de Fricción de Fanning en función del número de Reynolds [50].

1.3. DEFINICIÓN DEL PROBLEMA.

1.3.1. Condiciones de operación.

El problema fluidodinámico que se plantea en este Proyecto Fin de Carrera es la resolución del campo de velocidades en un reactor de flujo oscilatorio (*oscillatory baffled reactor, OBR*). El estudio se centra en el problema mecánico del flujo oscilatorio, sin abordar el problema térmico.

El Proyecto se articula en dos bloques que cubren las dos configuraciones posibles para la actuación de los pistones en un *OBR*:

- En el primer bloque, **oscilación del fluido**, se aborda la configuración en la que el fluido es oscilado axialmente por acción directa del pistón, permaneciendo fijos los orificios deflectores.
- En el segundo bloque, **oscilación de los discos**, se estudia la configuración en la que la oscilación es ejercida sobre los orificios deflectores, que son desplazados axialmente por la actuación del pistón.

Para ambos bloques la geometría del reactor está formada por un conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25.0 \text{ mm}$, en el que se insertan, separados una distancia $L = 18.0 \text{ mm}$, una serie de discos con orificio, de diámetro interior $D_0 = 11.5 \text{ mm}$ y espesor $e = 1.5 \text{ mm}$. El ratio de constricción para esta geometría es $CR = 0.79$ (ecuaciones ec.1.1 y ec.1.2 en el Apartado 1.1.1).

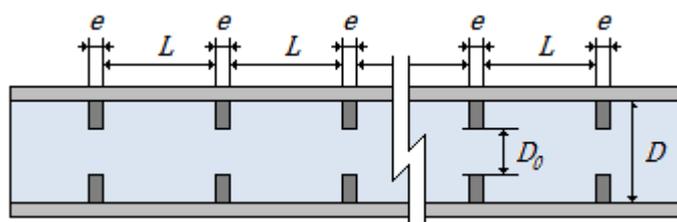


Figura 1.14. Geometría del reactor de flujo oscilatorio.

El fluido de trabajo es agua, de densidad $\rho = 998,2 \text{ kg/m}^3$, viscosidad dinámica $\mu = 0,001003 \text{ kg/ms}$ y viscosidad cinemática $\nu = 1,004809 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$. Las condiciones de operación simuladas vienen definidas los **parámetros de funcionamiento del pistón**: amplitud de oscilación x_0 y frecuencia de oscilación f , siendo la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$. Nótese que la frecuencia de oscilación f se relaciona con la frecuencia angular de oscilación ω a través de $\omega = 2\pi f$. El valor de dichos parámetros se muestran en la *Tabla 1.1*.

Condición de operación	x_0 (mm)	f (Hz)	u_0 (m/s)
1	28	0,5	0,088
2	28	1	0,176
3	28	2	0,352

Tabla 1.1. Condiciones de operación del reactor de flujo oscilatorio. Amplitud de oscilación, frecuencia de oscilación y velocidad de oscilación.

1.3.2. Grupos adimensionales.

El problema fluidomecánico del flujo oscilatorio en un *OBR* se caracteriza tradicionalmente por dos **grupos adimensionales**: el número de Reynolds oscilatorio Re_o y el número de Strouhal St . El número de Reynolds oscilatorio describe la intensidad de la mezcla, mientras que el número de Strouhal mide la propagación efectiva de vórtices. La caracterización de las condiciones de operación según estos grupos adimensionales se recoge en la *Tabla 1.2*.

$$Re_o = \frac{2\pi f x_0 \rho D}{\mu} \quad (\text{ec.1.5})$$

$$St = \frac{D}{4\pi x_0} \quad (\text{ec.1.6})$$

Condición de operación	Re_o	St
1	2.189	0,071
2	4.377	0,071
3	8.754	0,071

Tabla 1.2. Condiciones de operación. Número de Reynolds oscilatorio y número de Strouhal.

Los tres valores del **número de Reynolds oscilatorio** propuestos son, en general, muy superiores a los presentados en los estudios numéricos del flujo oscilatorio por otros autores (véase la *Tabla 1.3*), que se centran en el comportamiento del flujo en régimen laminar. Para las tres condiciones de operación evaluadas en el presente Proyecto, el flujo se encuentra en claro régimen turbulento, lo que supone una dificultad añadida a la resolución del problema. Si bien es cierto que Jian y Ni [38] estudian valores de Re_o similares a los aquí planteados, estos autores trabajan con un **número de Strouhal** igual o superior a la unidad, por lo que las condiciones de operación no son comparables. Por otra parte, Reis *et al.* [39] sí utilizan un Strouhal del mismo orden que el propuesto en este estudio, pero con un Reynolds oscilatorio muy inferior, no siendo tampoco comparables las condiciones de operación. En conclusión, las condiciones de operación simuladas en este Proyecto, caracterizadas por un elevado número de Reynolds oscilatorio y un reducido número de Strouhal, no han sido reproducidas por ningún otro estudio numérico del flujo oscilatorio en *OBR*.

Autores	Re_o	St
A. Fitch, H. Jian, X. Ni. 2005 [46]	6 – 1.257	1,0
N. Reis <i>et al.</i> 2005 [39]	12 – 556	0,032 – 0,571
J. Solano <i>et al.</i> 2011 [48]	186; 372	0,398
X. Ni, H. Jian, A. Fitch. 2002 [2]	312; 1.250	0,995; 1,989
X. Ni, H. Jian, A. Fitch. 2003 [5]	1.250	0,995
H. Jian, X. Ni. 2005 [38]	1.257; 3.142; 8.043	0,995; 1,592; 2,487

Tabla 1.3. Condiciones de operación evaluadas por otros autores.

Permítase en este punto recuperar la **discusión** publicada por Ni y Gough en 1997 [47] acerca de los grupos adimensionales que gobiernan el flujo oscilatorio, y que ha sido ya presentada en el *Apartado 1.2.2*. En ella, los autores proponen, por un lado, la modificación de los dos grupos adimensionales anteriores, Re_o y St , para tener en cuenta el diámetro interior del deflector D_0 y, por otro lado, la consideración de un nuevo grupo adimensional, el número de Stroke Sr , para considerar la distancia entre deflectores L .

A continuación se aplican estas ideas para definir también las condiciones de operación simuladas. Las definiciones propuestas por Ni y Gough tienen la forma siguiente:

$$\beta = \frac{D_0}{D} \quad (\text{ec.1.7})$$

$$Re_o^* = \frac{Re_o}{\beta} = \frac{D^2 x_0 \omega}{D_0 \nu} \quad (\text{ec.1.8})$$

$$St^* = 4\beta St = \frac{D_0}{\pi x_0} \quad (\text{ec.1.9})$$

$$Sr = \frac{2x_0}{L} \quad (\text{ec.1.10})$$

Las condiciones de operación, en base a estas definiciones, vendrían dadas por los siguientes valores:

Condición de operación	β	Re_o^*	St^*	Sr
1	0,460	4.758	0,131	3,111
2	0,460	9.516	0,131	3,111
3	0,460	19.031	0,131	3,111

Tabla 1.4. Condiciones de operación. Discusión sobre grupos adimensionales.

1.3.3. Bloque I. Oscilación del fluido.

En este primer bloque se aborda la configuración en la que el fluido es oscilado axialmente por acción directa del pistón, permaneciendo fijos los orificios deflectores. Para este estudio numérico, la componente oscilatoria del flujo se superpone sobre un **flujo neto nulo**: en la práctica, la magnitud de la componente oscilatoria es muy superior a la magnitud de la componente neta. Esta hipótesis es aplicada por los investigadores cuando el estudio numérico se enfoca a la resolución del problema fluidomecánico, como es el caso de este trabajo, ya que permite evaluar el patrón de movimiento haciendo la solución independiente del flujo neto. Cuando el objetivo del estudio es la resolución del problema térmico o la evaluación de los tiempos de residencia, se emplea flujo neto no nulo.

Bajo la hipótesis de flujo neto nulo, el movimiento de oscilación del fluido en el interior de la columna del *OBR* se rige por las siguientes leyes temporales sinusoidales:

$$x(t) = x_0 \text{sen}(2\pi ft) \quad (\text{ec.1.11})$$

$$u(t) = \frac{dx}{dt} = 2\pi f x_0 \cos(2\pi ft) \quad (\text{ec.1.12})$$

$$\dot{m}(t) = \rho A u(t) = \rho \left(\frac{\pi D^2}{4} \right) 2\pi f x_0 \cos(2\pi ft) \quad (\text{ec.1.13})$$

1.3.4. Bloque II. Oscilación de los discos.

En este segundo bloque se estudia la configuración en la que la oscilación es ejercida sobre los orificios deflectores, que son desplazados axialmente por la actuación del pistón. Al igual que para la oscilación del fluido, se aplica la hipótesis de **flujo neto nulo**; en este caso la componente oscilatoria del flujo no existe y son las leyes de desplazamiento de los deflectores (*baffles*) las que gobiernan el movimiento:

$$x_b(t) = L_0 - L_0 \cos(2\pi ft) \quad (\text{ec.1.14})$$

$$u_b(t) = \frac{dx_b}{dt} = 2\pi f L_0 \text{sen}(2\pi ft) \quad (\text{ec.1.15})$$

Nótese que, a priori, la amplitud de oscilación de los deflectores L_0 y la amplitud de oscilación del fluido x_0 son parámetros de funcionamiento diferentes. A efectos prácticos, en este estudio se consideran iguales con el fin de reproducir las mismas condiciones de operación, tanto con la oscilación del fluido como con la oscilación de los deflectores, para la posterior comparación de resultados.

$$L_0 = x_0 \quad (\text{ec.1.16})$$

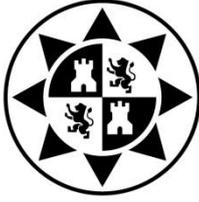
1.4. OBJETIVOS DEL PROYECTO.

El presente Proyecto Fin de Carrera recoge el trabajo realizado por D. Héctor Martínez Rodríguez, alumno de 5º curso de Ingeniería Industrial en la Universidad Politécnica de Cartagena, en el seno de la línea de investigación sobre técnicas activas de mejora termohidráulica que se viene desarrollando en el Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos. La situación de partida del autor del trabajo es la especialización previa adquirida durante el desarrollo de una Beca de Colaboración con el Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos de dicha universidad para la iniciación en tareas de investigación, concedida por el Ministerio de Educación, Cultura y Deporte para el curso académico 2011-2012.

El Proyecto Fin de Carrera está dirigido por el profesor Juan Pedro Solano Fernández, del Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos de la Universidad Politécnica de Cartagena. Se cuenta también con el asesoramiento del Profesor Xiong-Wei Ni, del *Chemical Engineering and Physical Sciences Department* de la *Heriott-Watt University* (Edimburgo, Escocia).

Los objetivos que se pretenden alcanzar con la realización de este Proyecto Fin de Carrera son los siguientes:

- Desarrollar una metodología de trabajo para la simulación numérica del flujo en reactores de flujo oscilatorio.
- Realizar la simulación numérica del flujo 2D con oscilación del fluido aplicando modelo de turbulencia RANS.
- Realizar la simulación numérica del flujo 3D con oscilación del fluido aplicando modelo de turbulencia LES.
- Realizar la simulación numérica del flujo 2D con oscilación de los discos aplicando modelo de turbulencia RANS con mallado dinámico.
- Describir el campo de velocidades y las estructuras de mezclado que se obtienen en cada una de las tres simulaciones anteriores.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

BLOQUE I. OSCILACIÓN DEL FLUIDO.

CAPÍTULO 2. ESTUDIO DE LA MALLA EN EL MODELO 2D.

2.1. DEFINICIÓN DEL DOMINIO COMPUTACIONAL.

2.1.1. Paso espacial.

La geometría del problema a resolver está compuesta por un conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25 \text{ mm}$ en el que se insertan, equiespaciados una distancia $L = 37,5 \text{ mm}$, una serie de discos con orificio de diámetro interior $D_0 = 11,5 \text{ mm}$ y espesor $e = 1,5 \text{ mm}$.

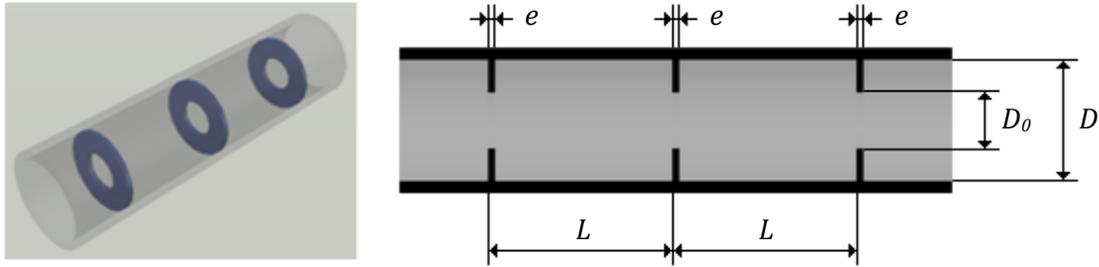


Figura 2.1. Geometría del reactor de flujo oscilatorio.

La periodicidad geométrica que existe en dirección longitudinal permite definir un **paso espacial** como la región de conducto de longitud L centrada en torno a uno de los discos insertados. El criterio de diseño es $L = 1,5D$.

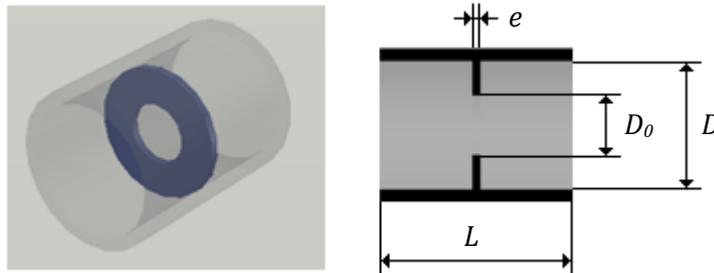


Figura 2.2. Paso espacial en el reactor de flujo oscilatorio.

En el modelo 2D, gracias a la simetría axial de la geometría, el dominio computacional se reduce a la mitad de la sección longitudinal de un paso espacial.

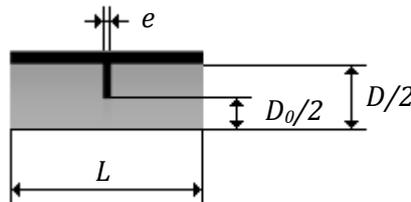


Figura 2.3. Dominio computacional del modelo 2D.

2.1.2. Tipología de mallado.

Los autores consultados durante la fase de revisión bibliográfica, previa a la realización del presente Proyecto, proponen mayoritariamente, para geometrías similares a la presentada aquí, la selección de un mallado no estructurado [2, 5, 38, 39, 46]. Esta tipología de malla presenta, frente a la malla estructurada, la ventaja de requerir un menor número de celdas para cubrir el dominio computacional. Esto es así porque con una malla no estructurada se puede colocar un número de nodos diferente en aristas paralelas, mientras que con una malla estructurada el número de nodos ha de coincidir.

Para ilustrar cualitativamente esta diferencia, se muestra a continuación un hipotético mallado del dominio computacional con ambas tipologías (véanse la *Figura 2.4* y la *Figura 2.5*). Obsérvese que el número de nodos en las paredes del conducto y del disco es igual, mientras que difiere en las secciones de entrada y salida, y en el eje. En este ejemplo se obtiene un incremento de un 15 % en el número de total de celdas al utilizar una malla estructurada frente a una malla no estructurada, que se traduce en un mayor tiempo de cálculo.

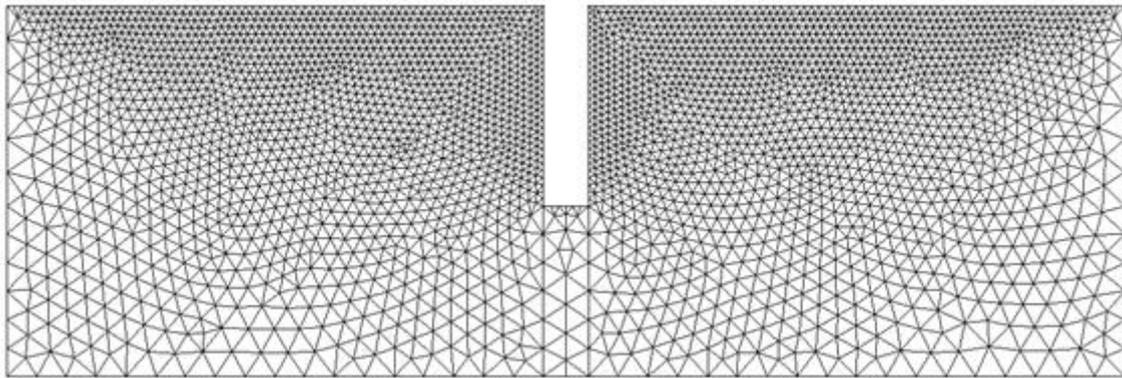


Figura 2.4. Ejemplo de mallado no estructurado en el dominio computacional.

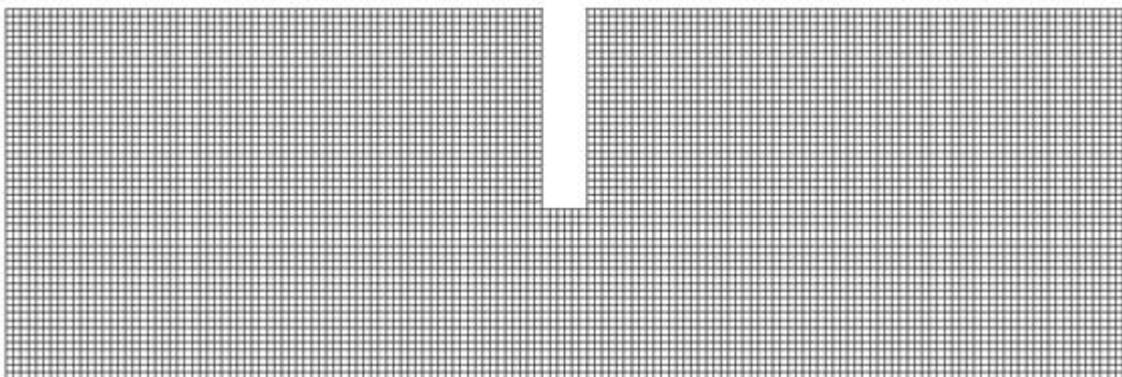


Figura 2.5. Ejemplo de mallado estructurado en el dominio computacional.

Sin embargo, por contra, en este estudio se plantea la idea de que un **mallado estructurado** se adecúa mejor a la geometría y naturaleza del problema que se analiza. Esta aseveración se basa en tres argumentos:

- En primer lugar, con una malla estructurada se tiene **control total sobre el tamaño de las celdas** en las regiones en contacto con las paredes del conducto y del disco. Este hecho es fundamental a la hora de aplicar adecuadamente un modelo de turbulencia para resolver el dominio computacional.
- En segundo lugar, la complejidad del flujo altamente turbulento que se genera con las condiciones de operación estudiadas, aconseja una **elevada resolución espacial en todo el dominio**, ya que de otra manera se corre el riesgo de no captar el desarrollo de posibles estructuras turbulentas en el interior.
- Por último, y de cara a la posterior aplicación de un mallado dinámico en el que los discos se desplacen longitudinalmente, una malla estructurada se adapta mejor a la **aparición y desaparición de celdas** a través de las fronteras del dominio computacional.

De esta manera, la elección de la tipología de mallado se decanta por malla estructurada, frente a malla no estructurada, y se descarta la posibilidad de una malla híbrida.

2.1.3. Distribución espacial de los nodos.

La elección de una malla estructurada permite satisfacer el requisito principal que se marca para la distribución espacial de los nodos: conocer con precisión las coordenadas de los nodos contiguos a las paredes del conducto y del disco. De esta distancia entre el primer nodo y la pared, depende el cálculo del parámetro y^+ , cuya definición es la siguiente [62]:

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu} \quad (\text{ec.2.1})$$

siendo u_τ la velocidad de fricción, y la distancia a la pared y ν la viscosidad cinemática del fluido. El valor de y^+ a lo largo de todas las paredes en el dominio computacional resulta clave, ya que la correcta aplicación de un modelo de turbulencia requiere mantener acotado dicho parámetro. Una explicación detallada de la relación entre el modelo de turbulencia e y^+ es plasmada en el *Anexo A*.

Nótese que la distancia máxima al primer nodo para mantener y^+ acotado es diferente para cada una de las paredes del dominio: pared horizontal del conducto, pared vertical del disco, pared horizontal del disco. Para facilitar la determinación exacta de estas distancias, se divide la pared vertical del disco en dos aristas iguales, que se mallan de forma independiente (véase la *Figura 2.6*).

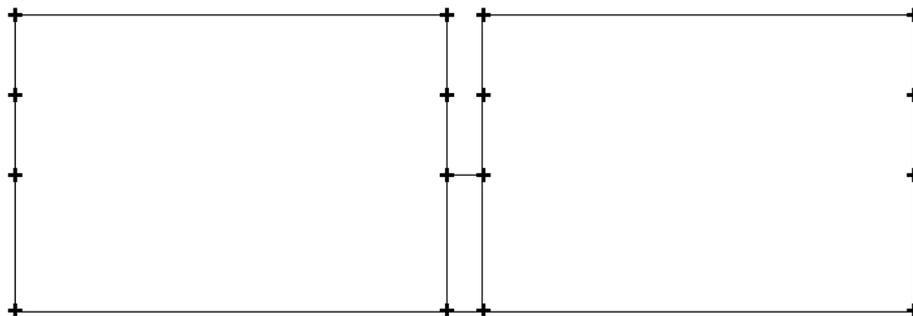


Figura 2.6. Distribución de las aristas en el dominio computacional.

Por lo tanto, la distribución espacial de los nodos dentro del dominio computacional se realiza de manera que exista una elevada densidad de nodos en las proximidades de las paredes del conducto y del disco, con objeto de reproducir adecuadamente la **capa límite** que se genera (véase la *Figura 2.7*). Aguas arriba y aguas abajo del disco, los gradientes de las magnitudes fluidas se relajan, permitiendo una menor densidad de nodos en dichas regiones.

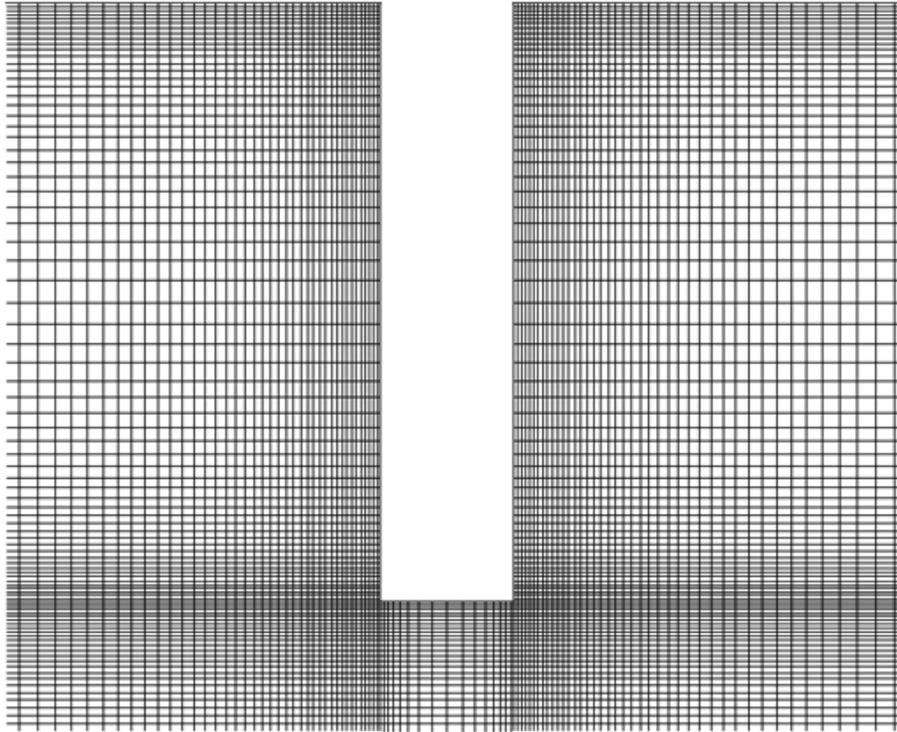


Figura 2.7. Distribución de los nodos en las paredes del conducto y el disco.

Sería deseable que esta relajación de los nodos fuera uniforme conforme el flujo se aleja de las paredes, sin embargo, la elección de una malla estructurada obliga a tener **regiones de elevada densidad** de nodos en las prolongaciones de las paredes del disco, tanto en dirección radial como en dirección axial (véase la *Figura 2.8*).

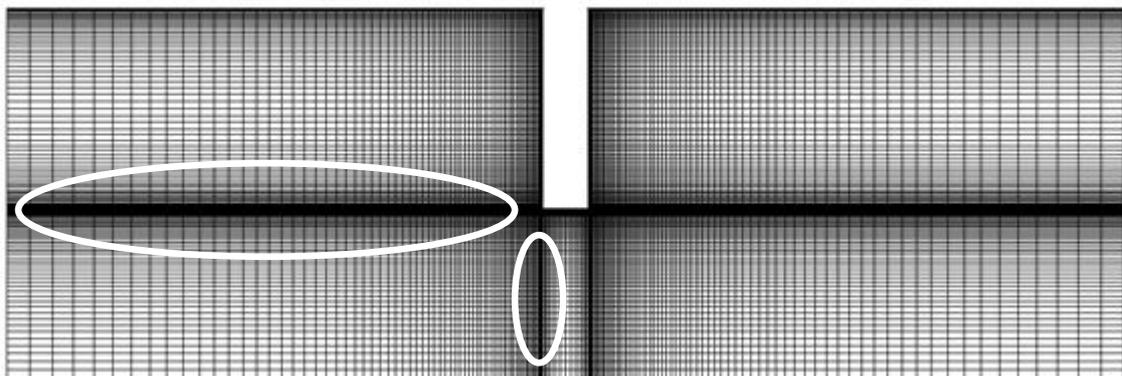


Figura 2.8. Distribución de los nodos en las prolongaciones de las paredes del disco.

El tamaño de las regiones de alta densidad que aparecen en las prolongaciones de las paredes del disco es un aspecto relevante en la distribución de los nodos. Como ya se ha justificado, estas regiones son intrínsecas al uso de una malla estructurada, pero su espesor depende de la restricción del modelo de turbulencia sobre el parámetro y^+ . A priori podría considerarse que en la pared del conducto, por situarse en la dirección principal del flujo, la restricción sobre y^+ es más importante que en las paredes del disco. Bajo esta hipótesis sería lógico relajar la densidad de los nodos cerca del disco, y obtener así un espesor bajo en las zonas de alta densidad que salen del mismo. En la *Figura 2.9* se propone una distribución de nodos con relajación cerca de las paredes del disco (la línea de trazos marca cualitativamente el espesor de la región de alta densidad).

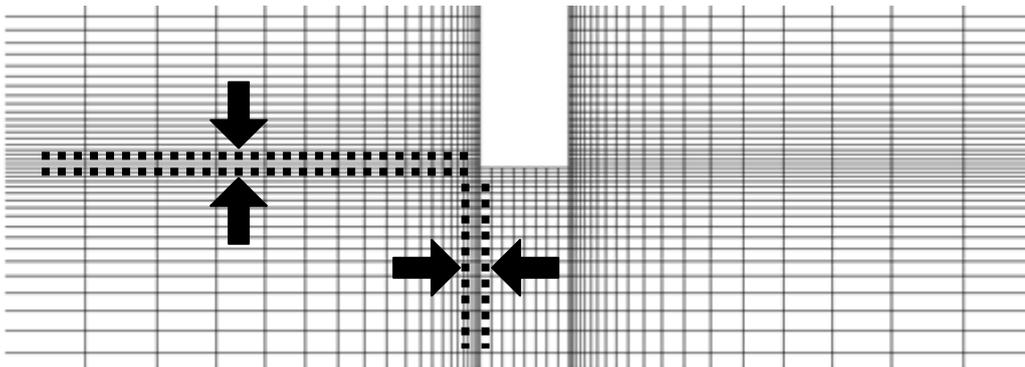


Figura 2.9. Distribución de los nodos con relajación cerca de las paredes del disco. Arriba, dominio computacional completo. Abajo, zoom del disco.

La relajación de la restricción sobre y^+ en el disco conseguiría una transición suave en el tamaño de los nodos y reduciría también el número de nodos necesarios. Sin embargo, esta relajación no está justificada: los requerimientos del modelo de turbulencia sobre y^+ resultan críticos tanto en la pared vertical del disco como en la pared horizontal. Téngase en cuenta que bajo ésta última se desarrolla una capa límite y se producen los mayores gradientes en las magnitudes fluidas, por el estrechamiento de la sección de paso. Por lo tanto, los requerimientos sobre y^+ se han de respetar en todas las paredes del dominio computacional, dando lugar obligadamente a **zonas anchas de alta densidad de nodos** en las prolongaciones de las paredes del disco, como se ilustra en la *Figura 2.10*.

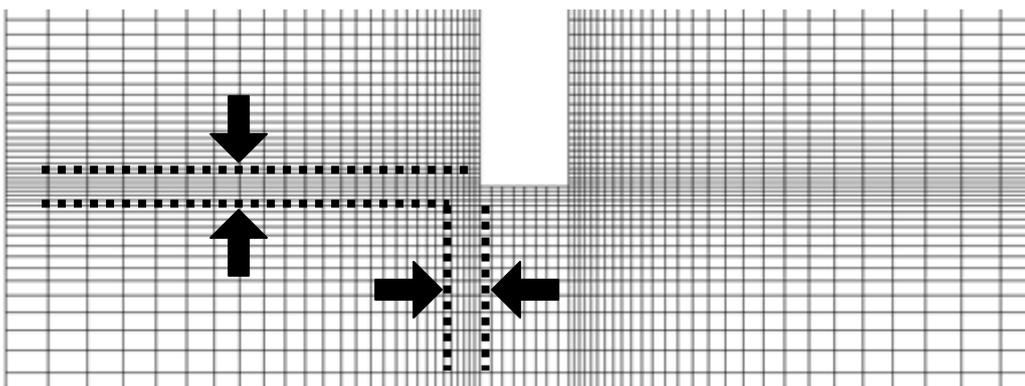


Figura 2.10. Distribución de los nodos sin relajación cerca de las paredes del disco. Arriba, dominio computacional completo. Abajo, zoom del disco.

Se ha evaluado en profundidad, además, la cuestión de cómo realizar la transición, desde las zonas de alta densidad hacia las zonas de baja densidad, en la distribución espacial de los nodos. En concreto, se ha analizado el **gradiente del tamaño de las celdas en dirección axial**, en las proximidades de la pared vertical del disco. En la *Figura 2.11* se observa que el tamaño axial de las celdas se reduce bruscamente cerca del disco, obteniéndose un gradiente de tamaño alto (la línea de trazos marca cualitativamente la región en la que el tamaño de las celdas es más reducido). Con este tipo de mallados se han detectado problemas de convergencia en la solución sobre el dominio computacional. Por el contrario, en la *Figura 2.12* se observa que el tamaño disminuye de manera más progresiva, dando como resultado un gradiente de tamaño menor. Aplicando este concepto en aquellas mallas en las que se encontraron problemas de convergencia, dichos problemas fueron subsanados.

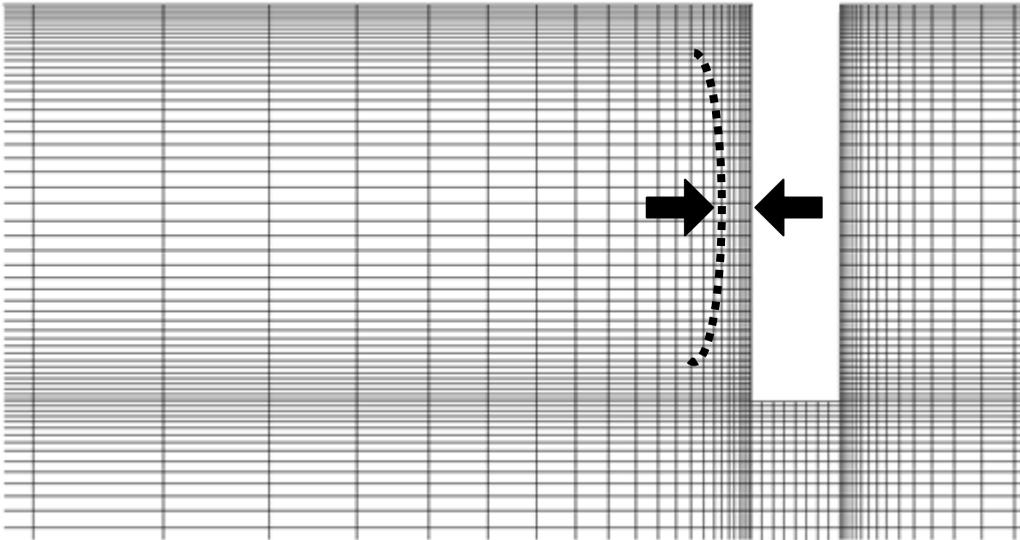


Figura 2.11. Distribución de los nodos en la pared vertical del disco. Reducción brusca del tamaño axial de las celdas.

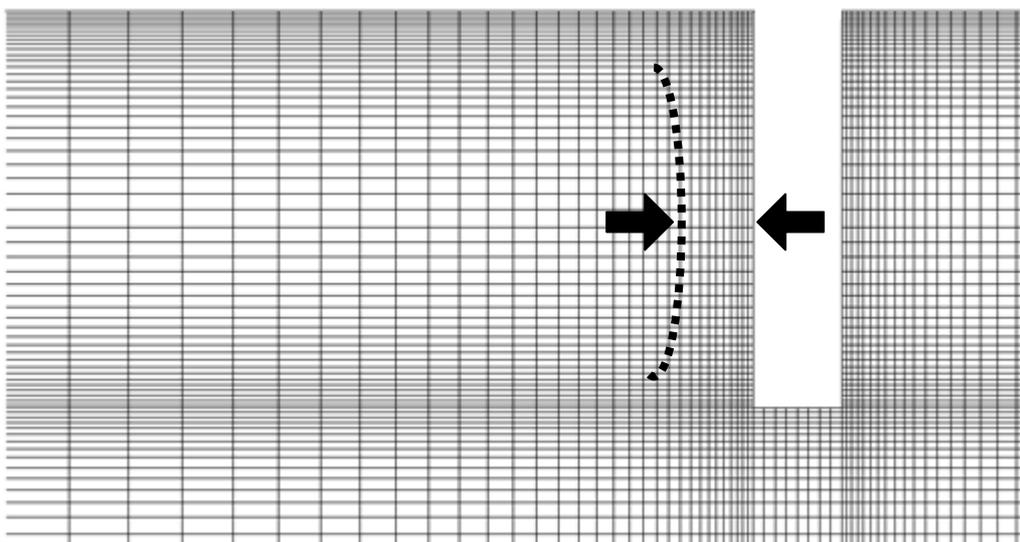


Figura 2.12. Distribución de los nodos en la pared vertical del disco. Reducción progresiva del tamaño axial de las celdas.

Tras el análisis de diferentes distribuciones espaciales de nodos en esta región, se llega a la conclusión de que la convergencia de la solución en el dominio computacional se alcanza más fácilmente si el gradiente del tamaño de las celdas en dirección axial, en las proximidades de la pared vertical del disco, es pequeño.

Por último, nótese que se ha puesto especial cuidado en respetar la **continuidad en la distribución de nodos**, en la transición desde una arista hacia la adyacente. Es decir, se ha mantenido el mismo tamaño para aquellas celdas que, siendo contiguas, pertenecen a aristas diferentes (véanse las Figuras 2.14 y 2.15). La denominación de las aristas es la siguiente:

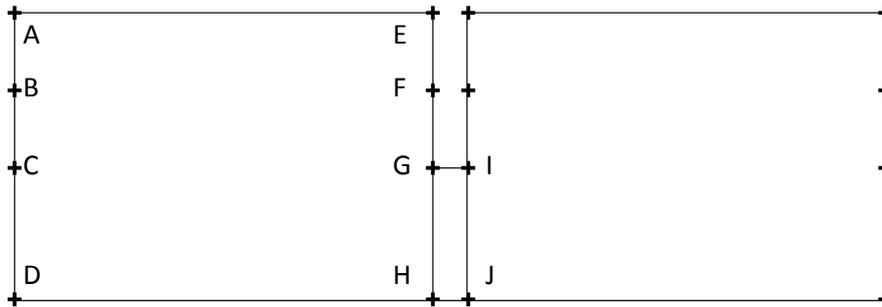


Figura 2.13. Denominación de las aristas en el dominio computacional.

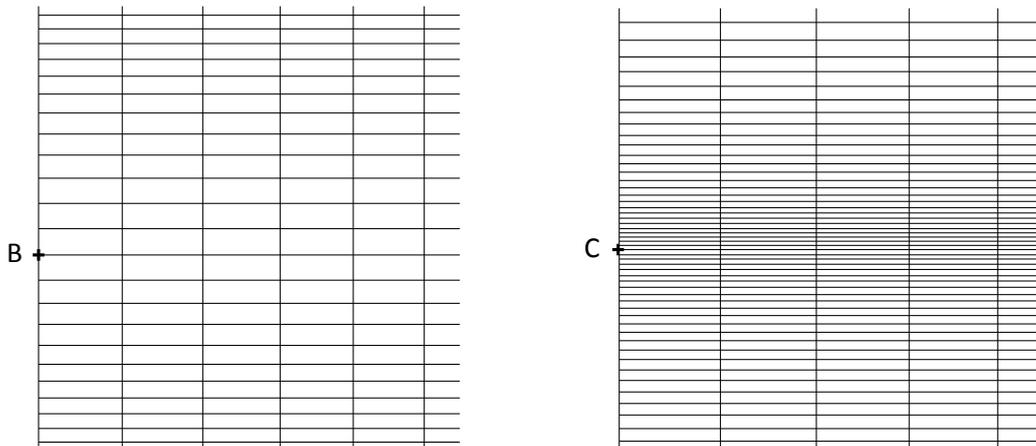


Figura 2.14. Transición en la distribución de nodos. Izquierda, desde la arista AB a la arista BC. Derecha, desde la arista BC a la arista CD.

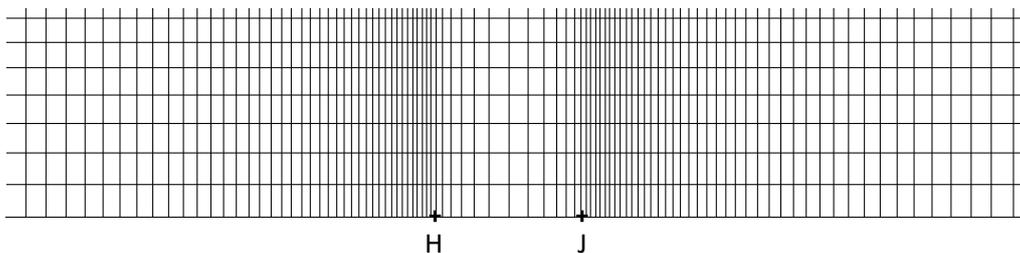


Figura 2.15. Transición en la distribución de nodos desde la arista DH a la arista HJ.

2.2. ESTUDIO DE SENSIBILIDAD DE MALLA.

2.2.1. Introducción.

Los valores obtenidos, mediante simulación numérica, para las diferentes variables fluidas que intervienen en un problema de Mecánica de Fluidos dependen de manera directa del mallado utilizado. Por tanto, para obtener unos resultados válidos en la simulación con CFD, se ha de crear un mallado que cumpla con dos requisitos:

- 1) La malla debe ser adecuada para el problema concreto estudiado. En el apartado anterior se ha justificado convenientemente la **distribución espacial de los nodos** que se emplea dentro del dominio computacional.
- 2) La **solución** obtenida ha de ser **independiente del número de celdas** del mallado utilizado. A tal efecto, se presenta a continuación un exhaustivo estudio de sensibilidad de malla.

El objetivo de este estudio es la determinación del número óptimo de celdas en la malla, que ha de ser una solución de compromiso entre la precisión de los resultados obtenidos y el tiempo de cálculo requerido.

2.2.2. Hipótesis de simulación.

- Simulación: periódica.
Véase la descripción completa en el *Apartado 3.1.4 del Capítulo 3*.
- *Solver: Pressure Based.*
Por tratarse de flujo incompresible.
- *Time: Steady.*
- Modelo de turbulencia: $k-\omega$ SST, opción *Transitional Flows*.
Previamente se aplicó el modelo $k-\omega$ Standard, encontrándose problemas de convergencia inesperados en algunas de las mallas.
- Ecuación de la energía: no resuelta.
La resolución del problema térmico no se aborda en este Proyecto.
- Contribución de la gravedad: no considerada.
- Fluido: agua.
- Propiedades del fluido: valores constantes.
Densidad $998,2 \text{ kg/m}^3$, viscosidad dinámica $0,001003 \text{ kg/m}\cdot\text{s}$.
- Gasto másico de entrada: $0,17240718 \text{ kg/s}$.
Correspondiente al máximo valor de gasto másico, alcanzado para una frecuencia de 2 Hz (véanse las condiciones de operación en el *Apartado 1.3.1 del Capítulo 1*).
- *Pressure-Velocity Coupling: SIMPLE.*
Con el esquema *PISO*, la convergencia no ha sido posible. El esquema *SIMPLEC* ofrece los mismos resultados que el *SIMPLE*.
- Discretización: primer orden.
Las variaciones respecto a la discretización de segundo orden no son relevantes y, puesto que el tiempo de cálculo con la discretización de primer orden es menor, esta elección queda justificada para estudiar la sensibilidad de la malla.
- Números de pasos espaciales = 2.
Se utilizan dos pasos, en lugar de uno, con el fin de estudiar la sección transversal que equidista entre dos discos consecutivos con independencia de la sección de entrada/salida del paso espacial.

2.2.3. Variables testigo y zonas de evaluación iniciales.

Como variables testigo, representativas del problema, se seleccionan tres variables fluidas: presión estática, velocidad axial y velocidad radial. Como zonas de evaluación se establecen, en principio, cuatro puntos (*Figura 2.16*):

- **Punto P1:** situado sobre el eje y en la sección transversal equidistante entre discos, es representativo del movimiento principal en la región de desaceleración del flujo.
- **Punto P2:** situado sobre el eje y en la sección transversal del disco, es representativo del movimiento principal en la región de aceleración del flujo.
- **Punto P3:** contiguo a la pared del conducto y en la sección transversal equidistante entre discos, es representativo de la recirculación en la región de desaceleración del flujo.
- **Punto P4:** próximo a la pared del conducto y a la pared del disco, es representativo de la recirculación en la región de aceleración del flujo.

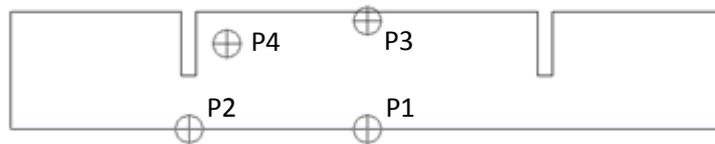


Figura 2.16. Situación de los puntos P1, P2, P3, P4 en el dominio computacional.

Téngase en cuenta que en los dos puntos situados sobre el eje, la componente radial de la velocidad es obviamente despreciable frente a la componente axial. Por lo tanto, la evaluación de la velocidad radial en P1 y P2 no es relevante. En consecuencia, se dispone de un total de 10 variables testigo:

Variable testigo	Variable fluida	Punto de evaluación
1	Presión estática	P1
2	Velocidad axial	P1
3	Presión estática	P2
4	Velocidad axial	P2
5	Presión estática	P3
6	Velocidad axial	P3
7	Velocidad radial	P3
8	Presión estática	P4
9	Velocidad axial	P4
10	Velocidad radial	P4

Tabla 2.1. Variables testigo del estudio de sensibilidad de malla.

2.2.4. Construcción de las mallas.

La construcción de los sucesivos mallados sobre los que se efectúa el estudio de sensibilidad parte de una malla inicial, malla 1, en la que se aplican las directrices que, en los apartados anteriores, se dan acerca de la tipología de mallado y la distribución espacial de los nodos en el dominio computacional (véanse los *Apartados 2.1.2 y 2.1.3*). El número de divisiones en cada una de las aristas de esta malla inicial se establece según la experiencia adquirida durante el estudio del mallado, y la construcción de cada malla se realiza incrementando en un 10 % el número de nodos en todas las aristas de la malla precedente.

Se han construido un total de 16 mallas, de las que la malla 1 es la más gruesa, y la malla 16 es la más fina. Sobre éstas, el **criterio de selección** de la malla óptima es alcanzar un valor asintótico para todas las variables testigo, de forma que los resultados obtenidos con la malla óptima no difieran en más de **1 %** respecto a la malla siguiente. El elevado número de mallas estudiadas se debe a la dificultad que se ha encontrado para alcanzar dicho valor asintótico, como se detalla en los siguientes apartados.

El número de divisiones en cada arista, para cada una de las mallas, se recoge en la *Tabla 2.2*.

Malla	Arista AB	Arista BC	Arista CD	Arista AE	Arista GI
1	20	21	32	48	8
2	22	23	35	53	10
3	24	26	39	59	12
4	27	29	43	65	14
5	30	32	48	72	16
6	33	35	53	79	18
7	36	39	58	87	20
8	40	43	64	96	22
9	44	47	70	106	24
10	48	52	77	117	26
11	53	57	85	129	28
12	59	63	94	141	32
13	65	69	103	155	36
14	71	76	114	171	40
15	78	84	125	188	44
16	86	92	138	207	48

Tabla 2.2. Mallas del estudio de sensibilidad de malla.

A continuación se muestran las mallas 1, 5, 10 y 16 (*Figuras 2.17, 2.18, 2.19 y 2.20*) como ejemplo del procedimiento de refinamiento que se ha seguido para construir todas las mallas.

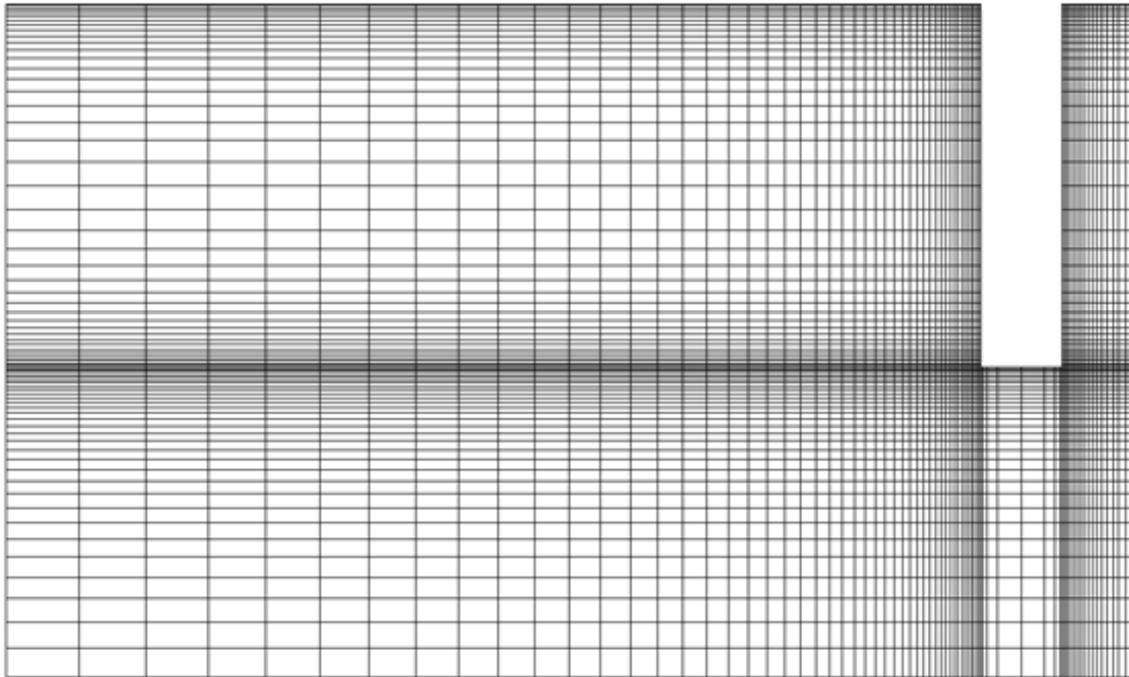


Figura 2.17. Refinamiento del mallado en el estudio de sensibilidad. Malla 1.

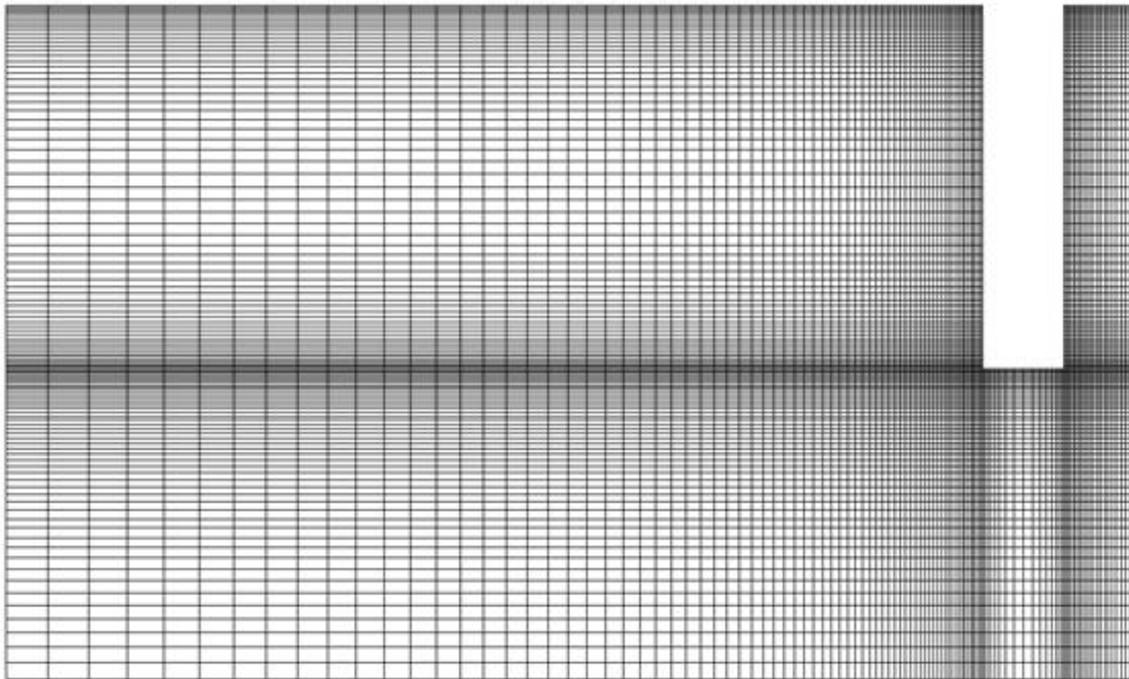


Figura 2.18. Refinamiento del mallado en el estudio de sensibilidad. Malla 5.

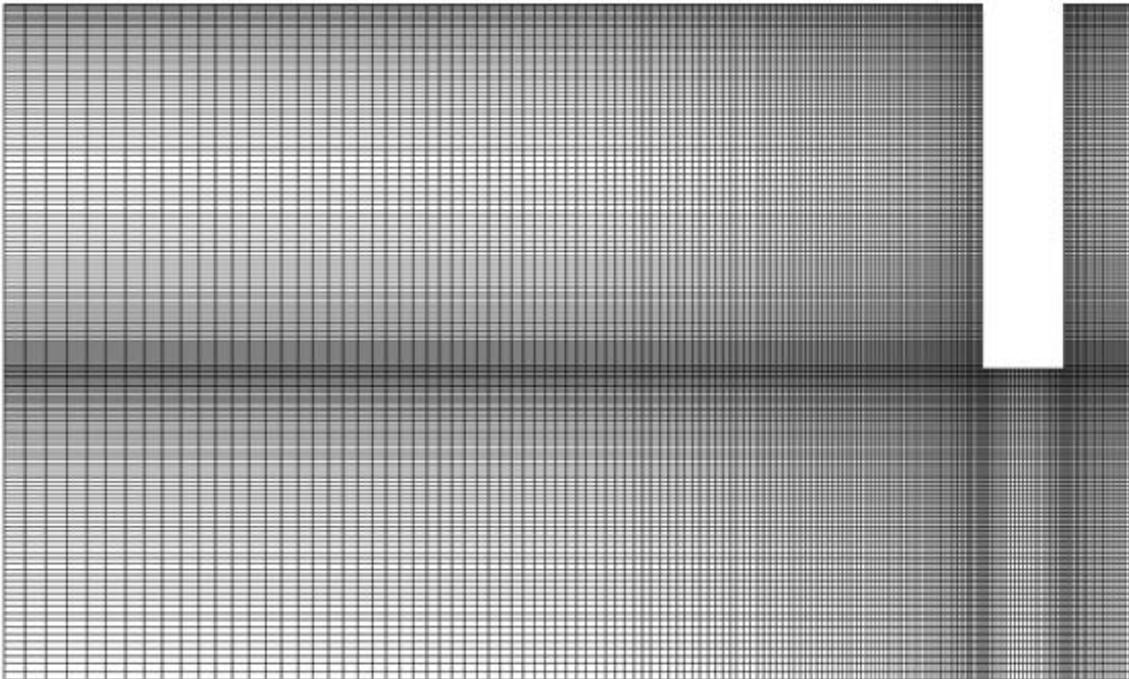


Figura 2.19. Refinamiento del mallado en el estudio de sensibilidad. Malla 10.

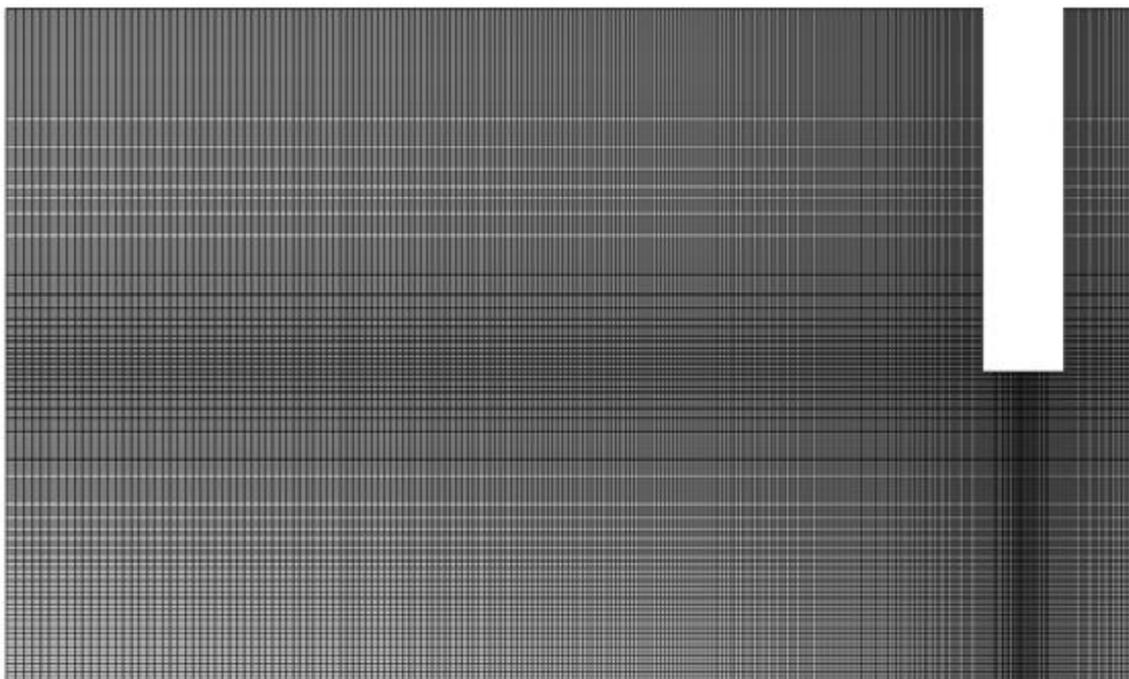


Figura 2.20. Refinamiento del mallado en el estudio de sensibilidad. Malla 16.

2.2.5. Resultados iniciales.

A continuación se detallan los resultados desprendidos de la evaluación de las 10 variables testigo definidas en el *Apartado 2.2.3*:

En el **punto P4**, próximo a las paredes del conducto y del disco, la presión estática se resuelve con precisión desde la malla 1 (error inferior al 0,5 %). Con la velocidad radial no se alcanza asíntota pero se mantiene el error por debajo del 2 % con la malla 5 (*Figura 2.21*). En velocidad axial sí se alcanza valor asíntótico, siendo el error que se comete con la malla 5 inferior al 1 % (*Figura 2.22*).

En el **punto P3**, contiguo a la pared del conducto y en la sección transversal equidistante entre discos, sí se alcanzan valores asíntóticos para las tres variables. El error cometido con la malla 5 está en por debajo del 2 % para la velocidad radial (*Figura 2.23*) y por debajo del 2,5 % para la presión estática (*Figura 2.24*). La velocidad axial se resuelve con precisión desde la malla 1 (error inferior al 0,4 %).

En el **punto P2**, situado sobre el eje y en la sección transversal del disco, tanto para la presión estática como para la velocidad axial, el error cometido ya con la malla 1 es despreciable (errores inferiores al 0,5 % y al 0,1 % respectivamente).

En el **punto P1**, situado sobre el eje y en la sección transversal equidistante entre discos, se observa que el error en velocidad axial es despreciable desde la malla 1 (inferior al 0,2 %). Sin embargo, para la presión estática se han detectado problemas para cumplir con un error inferior al 1 % (*Figura 2.25*): este resultado ha motivado la construcción del elevado número de mallas analizadas, 16 en total. Para esta variable se intuye un valor asíntótico a partir de la última malla, pero con errores que no son asumibles (desde un 12 hasta un 18 %).

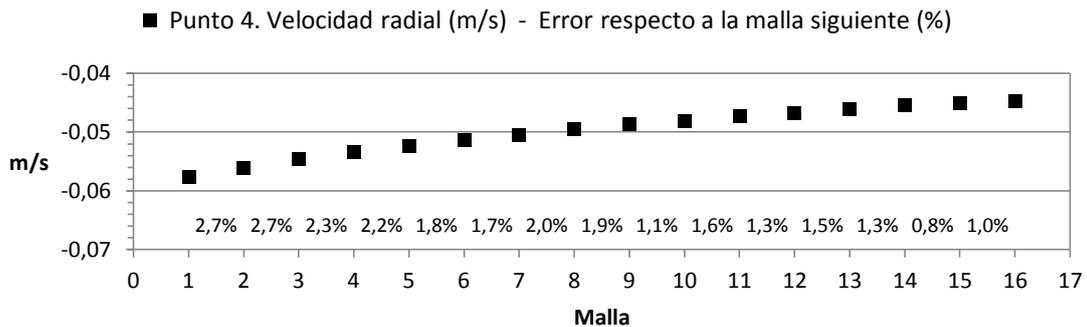


Figura 2.21. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 10.

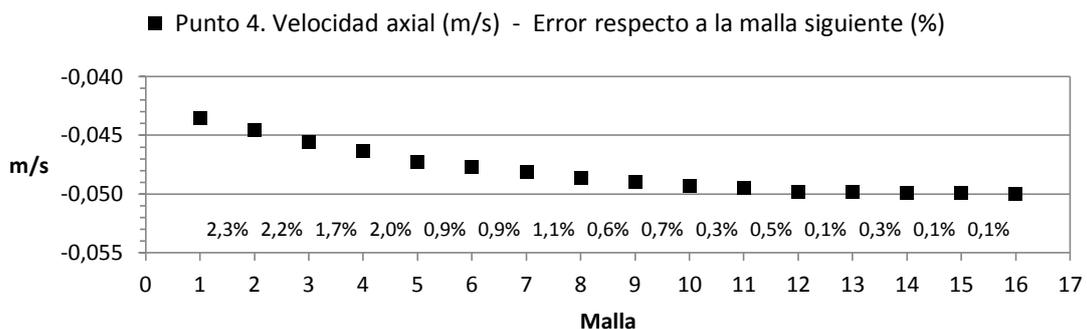


Figura 2.22. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 9.

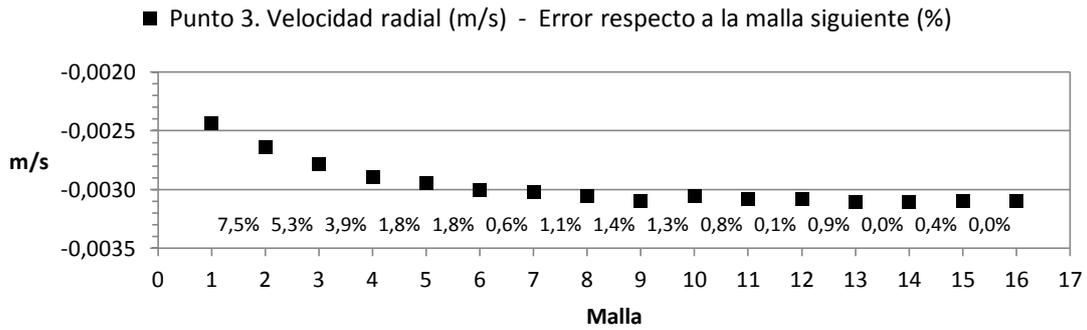


Figura 2.23. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 7.

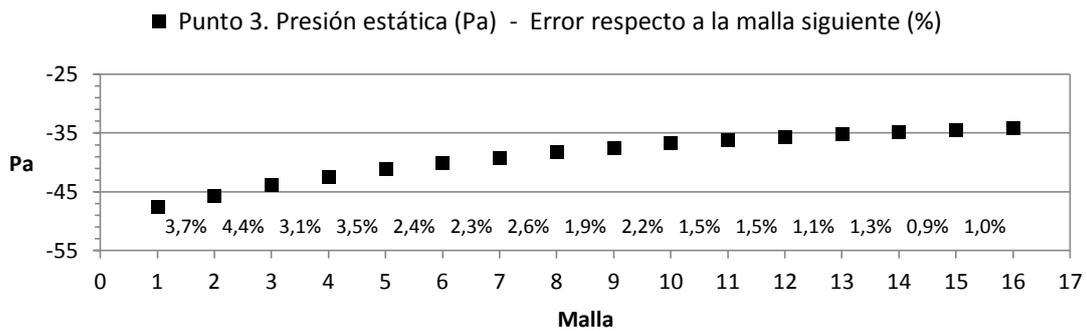


Figura 2.24. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 5.

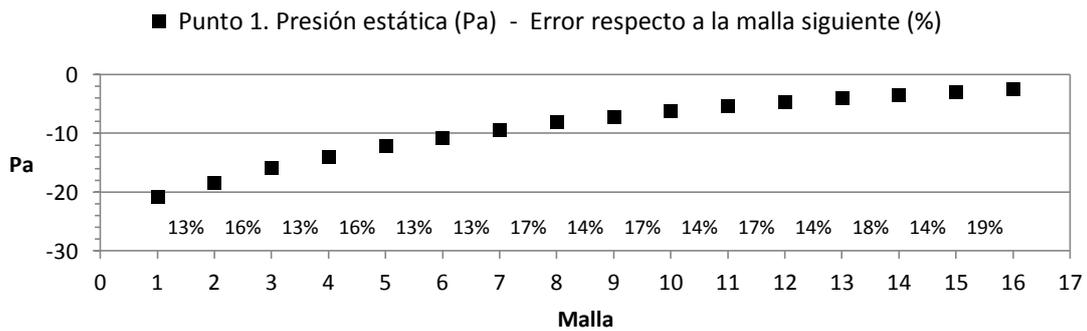


Figura 2.25. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 1.

2.2.6. Perfiles radiales de presión estática y velocidad axial.

Dada la complejidad del flujo que se está resolviendo, y en vista de los resultados del apartado anterior, queda de manifiesto que la elección de puntos discretos donde evaluar las variables testigo puede no ser una estrategia adecuada para estudiar la sensibilidad de la malla. Por ello se plantea a continuación el establecimiento de dos nuevas zonas de evaluación de las variables testigo:

- **Línea L1:** sección transversal equidistante entre ejes (por P1).
- **Línea L2:** sección transversal del disco (por P2).

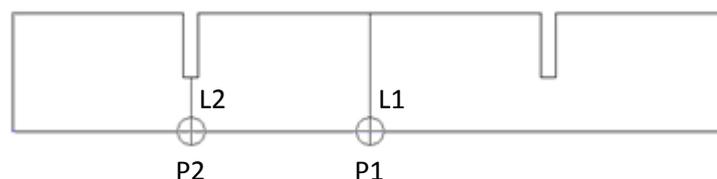


Figura 2.26. Situación de las líneas L1, L2 en el dominio computacional.

En ambas secciones transversales, la magnitud de la componente radial de la velocidad es despreciable frente a la magnitud de la componente axial (véase la *Tabla 2.3*). De esta manera se evalúan el **perfil radial de la presión estática y el perfil radial de la velocidad axial**, dando lugar a cuatro nuevas variables testigo (*Tabla 2.4*). Analizando la información del apartado anterior, se presume que la elección de la malla óptima no ha de ser una malla superior a la 5, puesto que el error que se comete con ella está en torno al 2 % en los puntos P2, P3 y P4. Por ello, los perfiles radiales de presión estática y velocidad axial se obtienen en las mallas 3, 4, 5 y se comparan con los perfiles de la malla 16.

Punto de evaluación	Velocidad axial (m/s)	Velocidad radial (m/s)
P1	2,05	0,0002
P2	2,10	-0,0005
P3	-0,30	-0,003

Tabla 2.3. Magnitud de las componentes axial y radial de la velocidad.

Variable testigo	Variable fluida	Línea de evaluación
11	Presión estática	L1
12	Velocidad axial	L1
13	Presión estática	L2
14	Velocidad axial	L2

Tabla 2.4. Variables testigo del estudio de sensibilidad de malla. Ampliación.

Se observa que la **línea L2**, sección transversal del disco, se resuelve con garantías. Para la velocidad axial, el error de las mallas 3, 4 y 5 respecto a la malla 16 es despreciable cerca del eje de simetría, e inferior al 2 % en las proximidades del disco (*Figura 2.27*). En el caso de la presión estática, el error está también acotado por debajo del 2%, excepto en las proximidades del eje de simetría, donde se supera el 4 % localmente (*Figura 2.28*).

En la **línea L1**, sección transversal equidistante entre ejes, con la velocidad axial sí se consigue un error inferior al 2%, llegando incluso al 1 % con la malla 5 (*Figura 2.29*). Sin embargo, en la presión estática el error es desmesurado e inasumible (*Figura 2.30*), análogamente a lo observado en el punto P1.

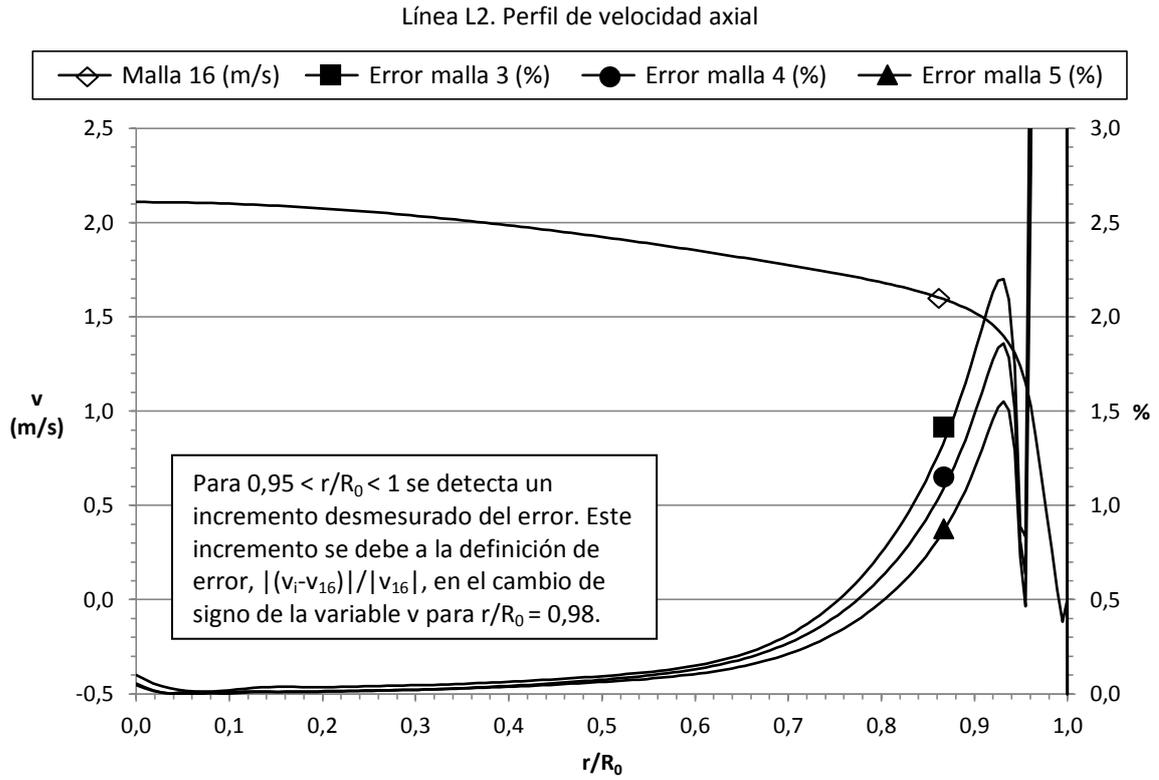


Figura 2.27. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 14.

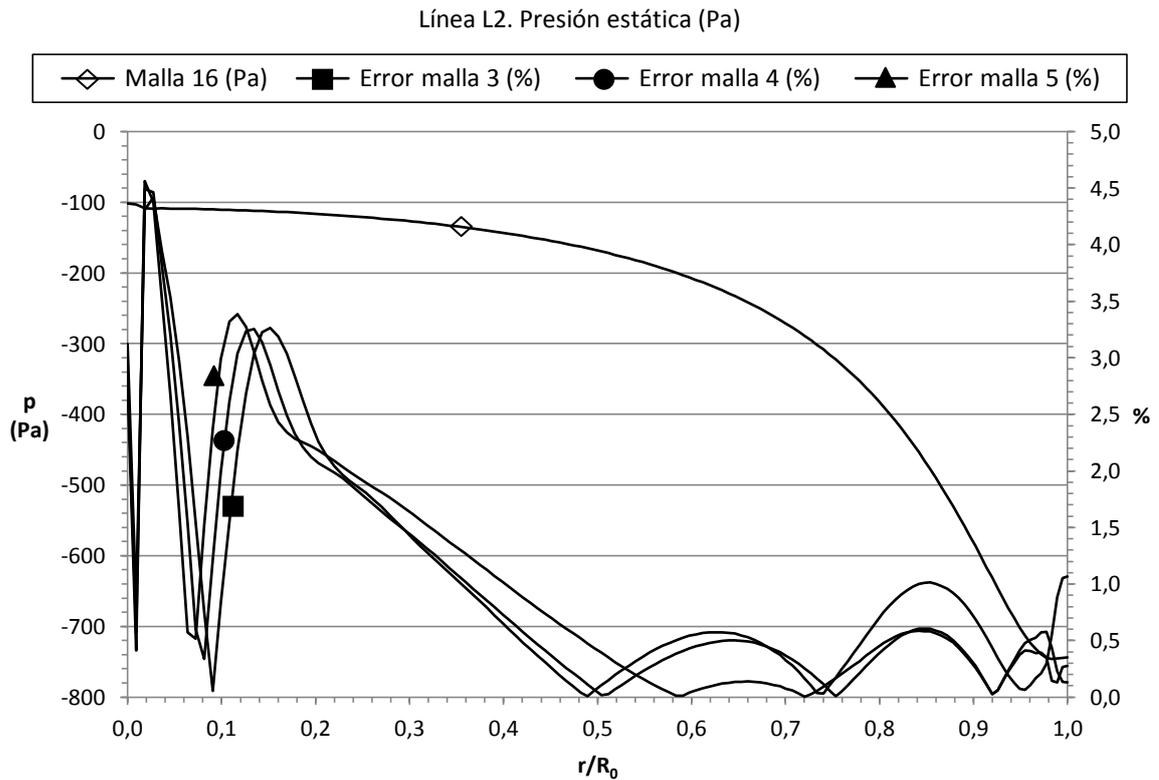


Figura 2.28. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 13.

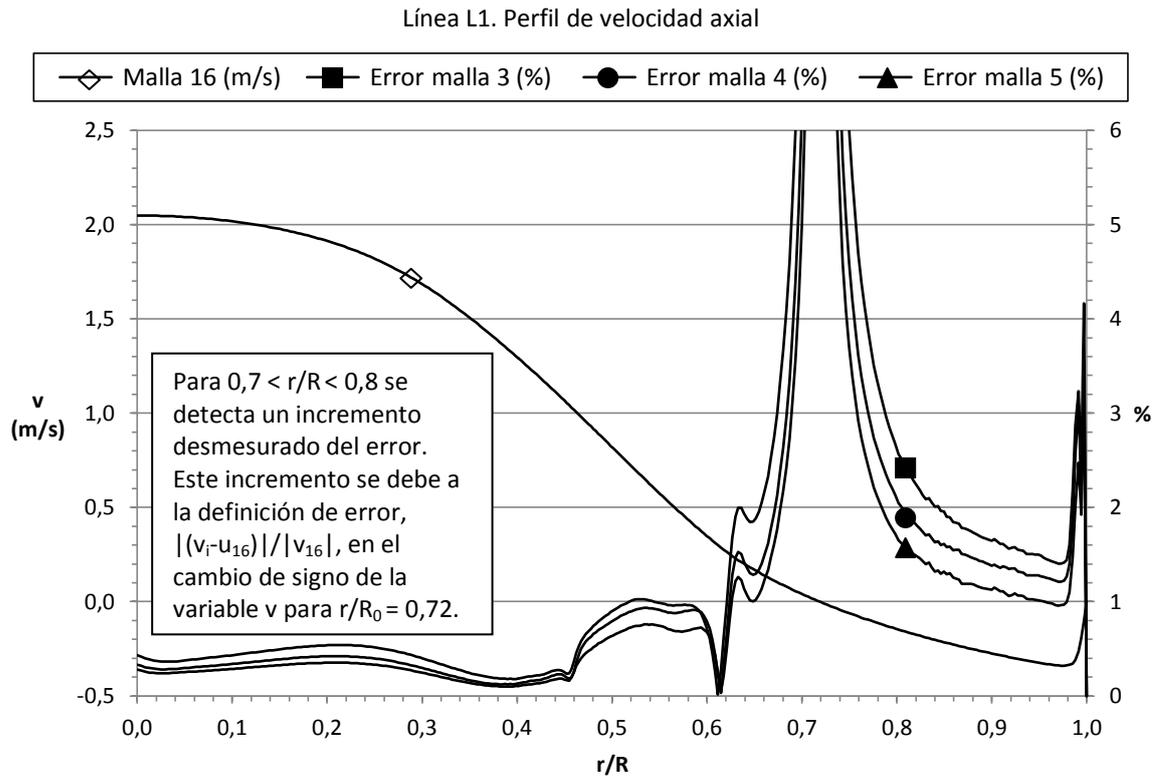


Figura 2.29. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 12.

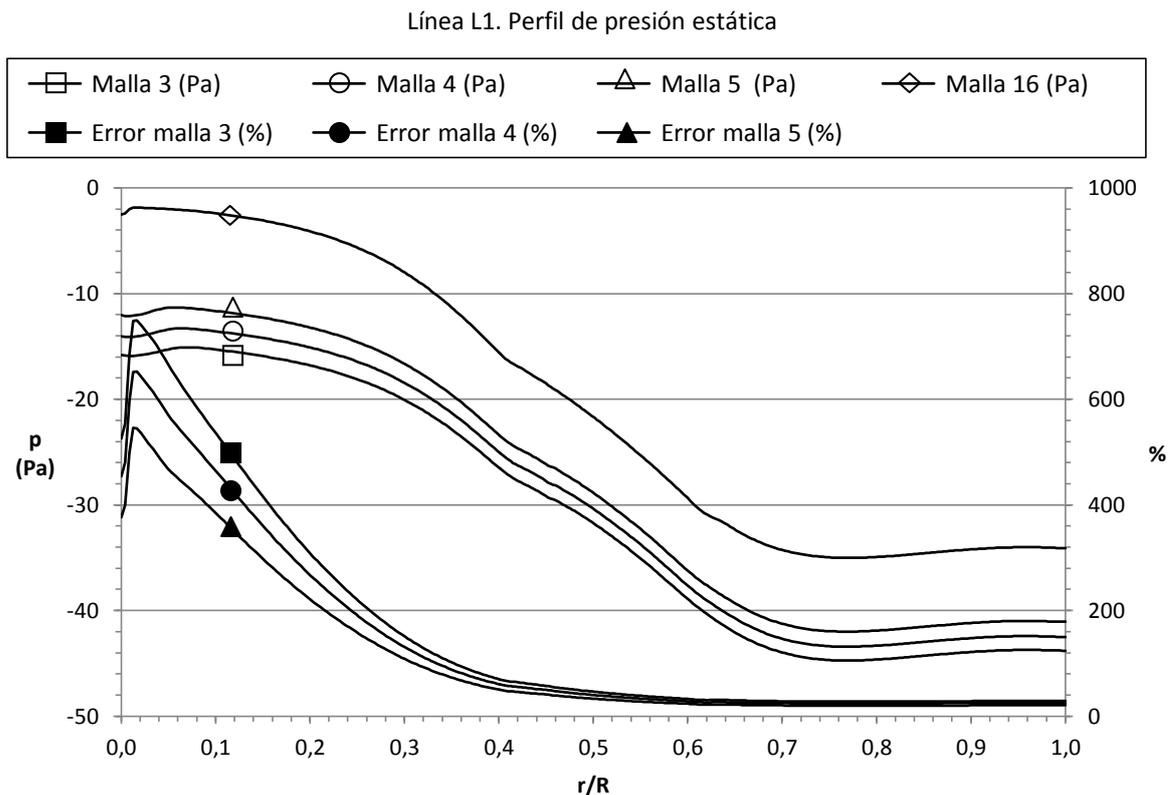


Figura 2.30. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 11.

2.2.7. Gradiente de presión.

Queda ya demostrado en apartados anteriores que el campo de velocidades se resuelve adecuadamente con cualquiera de las mallas 3, 4 y 5, con independencia del elevado error que se comete en la resolución del campo de presiones. Este hecho obliga a replantear la validez de la presión estática como variable representativa del fenómeno físico. Por tratarse de flujo incompresible se establece que es el gradiente de presión, por unidad de longitud, entre la entrada y la salida del dominio, y no el campo de presiones, es la magnitud fluida de presión que realmente influye en la resolución del problema. En el *Anexo B* se justifica convenientemente esta hipótesis.

Por tanto, la elección definitiva de la malla se debe realizar también en base a la sensibilidad de malla del **gradiente de presión por unidad de longitud**. Como se comprueba en la *Figura 2.31*, se alcanza asíntota con las 16 mallas propuestas, y se observa que el error cometido respecto a este valor asíntótico se encuentra por debajo del 2 % para las mallas 3, 4 y 5, siendo para la malla 5 de tan sólo un 1,4 %.

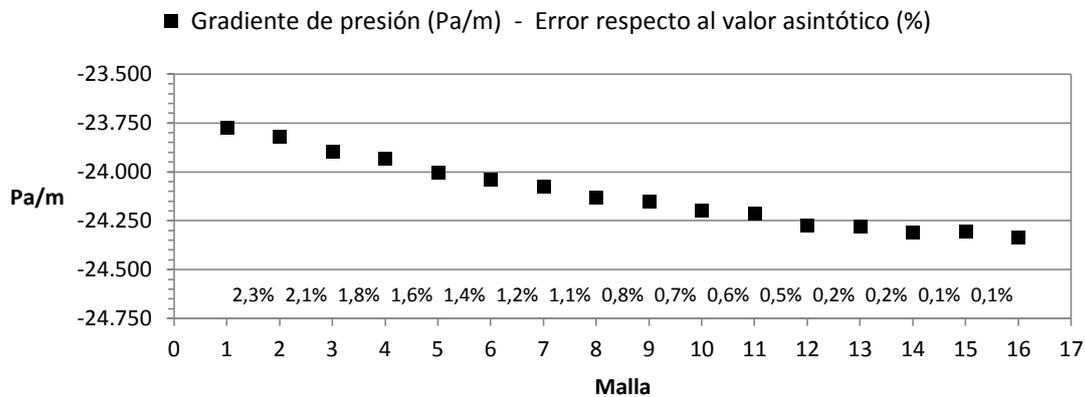


Figura 2.31. Resultados del estudio de sensibilidad. Gradiente de presión.

2.2.8. Selección de la malla óptima.

A continuación se muestra un resumen de los errores calculados en apartados anteriores para la velocidad axial y para el gradiente de presión, con las mallas 3, 4 y 5 (*Tabla 2.5*). Los valores de velocidad axial mostrados son valores promediados a lo largo de las dos secciones transversales en las que se definen los perfiles radiales, mientras que los valores del gradiente de presión son los valores puntuales presentados en el apartado anterior.

Error (%)	Malla 3	Malla 4	Malla 5
Velocidad axial	1,6	1,4	1,2
Gradiente de presión	1,8	1,6	1,4

Tabla 2.5. Resultados del estudio de sensibilidad. Resumen de los errores.

En vista de estos resultados se concluye que la **mallá 5** se adecúa correctamente al requisito inicial de asegurar un **error inferior al 1 %** en la resolución del problema, pese a no cumplirlo estrictamente, y se establece ésta como mallá óptima. No se contempla la posibilidad de seleccionar una mallá más fina debido al aumento de coste computacional que ello conlleva.

A continuación se muestra en detalle la distribución espacial de los nodos en la mallá óptima (*Figuras 2.33 y 2.34*), así como el número de divisiones, nodos, celdas y caras de la misma.

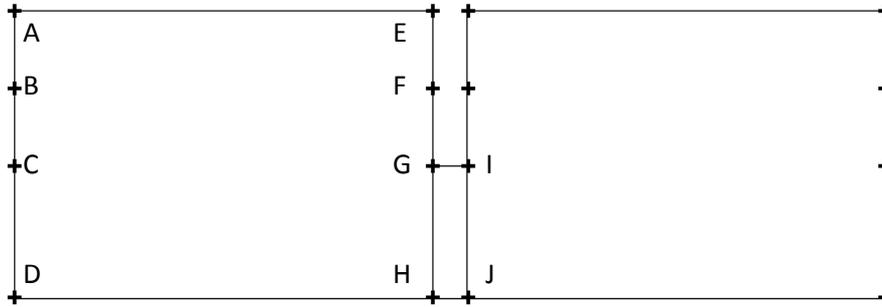


Figura 2.32. Denominación de las aristas en el dominio computacional.

Malla 5	Arista AB	Arista BC	Arista CD	Arista AE	Arista GI
Divisiones	30	32	48	72	16

Nodos	11.240
Celdas	10.970
Caras	22.120

Tabla 2.6. Número de divisiones, nodos, celdas y caras de la mallá óptima en 1 paso espacial.

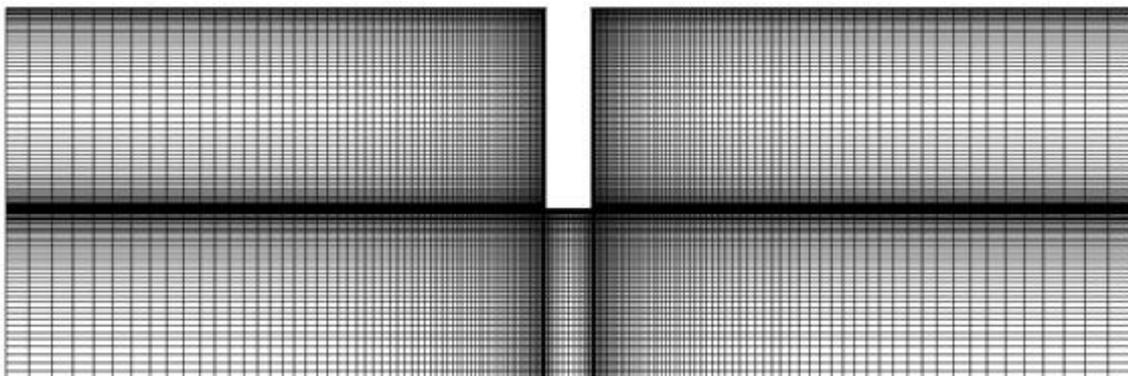


Figura 2.33. Mallá óptima. Dominio computacional.

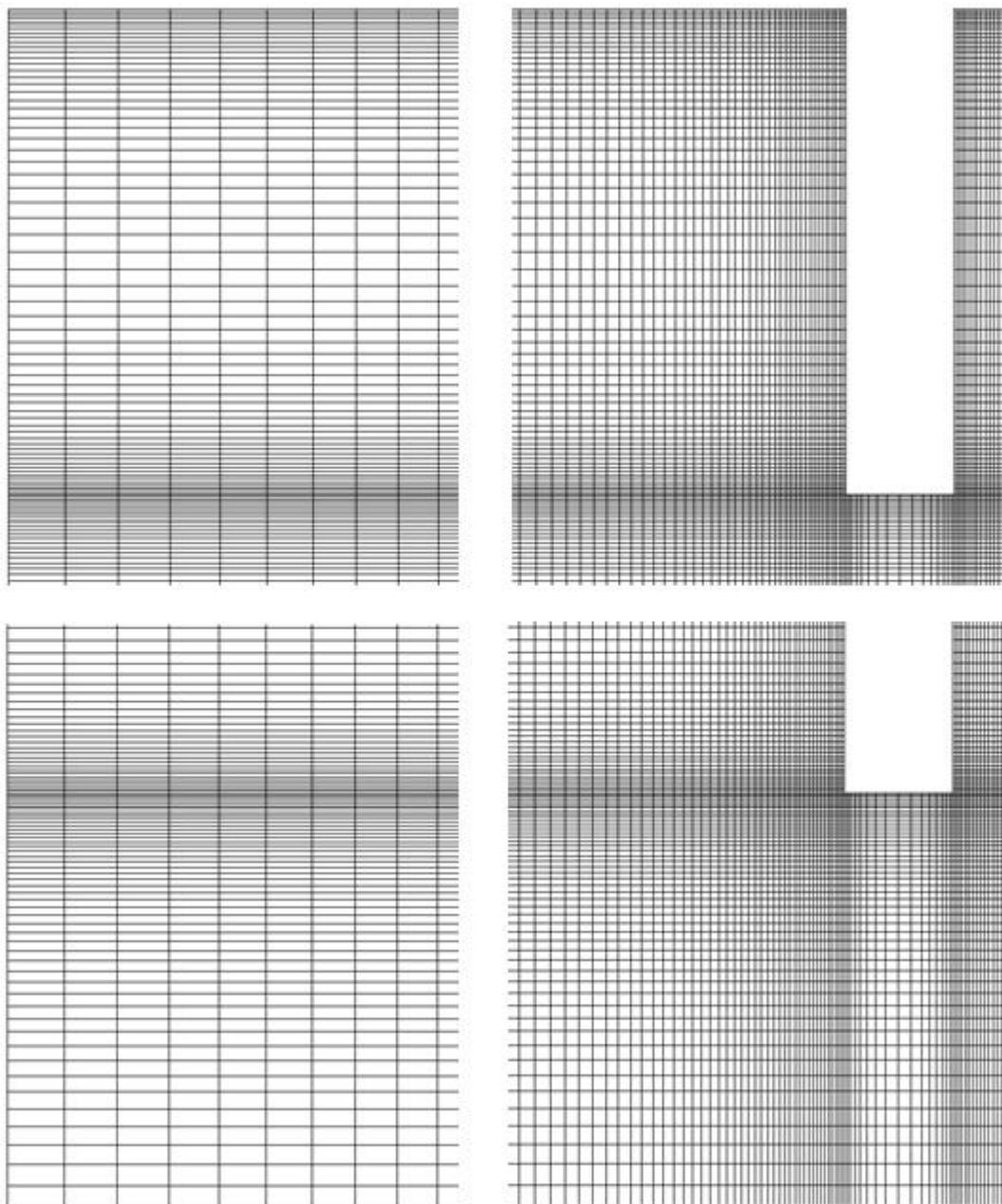


Figura 2.34. Malla óptima. Zoom del dominio computacional.

2.2.9. Aspectos constructivos de la malla óptima en GAMBIT.

Como se describe en el *Apartado 2.1.3* de este capítulo, el principal requisito para la distribución espacial de los nodos dentro del dominio computacional es conocer con precisión las coordenadas de los nodos contiguos a las paredes del conducto y del disco, con el objetivo de mantener en éstas el valor de $y^+ = 1$ (véase la justificación de dicho valor en el *Anexo A*). Este requisito se traduce en poder situar el primer nodo sobre las aristas AB, CD y AE (véase la *Figura 2.32*) a una distancia y de la pared tal que se verifique $y^+ = 1$. Para ello se valida el algoritmo de distribución de nodos sobre aristas del software de pre-procesamiento GAMBIT, y se correlaciona la relación existente entre y^+ e y .

Un **algoritmo de distribución de nodos** (*mesh grading schemes*) en GAMBIT permite establecer d divisiones, proporcionales entre sí, de tamaño Δx_i sobre una arista de longitud l :

$$R = \frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i-1}} = cte \quad (\text{ec.2.2})$$

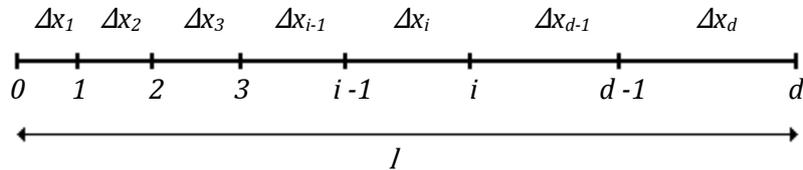


Figura 2.35. Algoritmo de distribución de nodos en GAMBIT.

De las diferentes opciones que ofrece GAMBIT se selecciona la variante *exponent*, cuyo algoritmo depende de un parámetro, ratio r , y que según el manual de FLUENT [55] se describe por la ecuación ec.2.3. Sin embargo, esta ecuación no es correcta; de hecho, en el propio manual se presenta el siguiente ejemplo, que la contradice [55]:

$$R = e^{(r-0,5)\frac{l}{d}} \quad (\text{ec.2.3})$$

Ejemplo. Sea una arista de longitud $l = 15$ en la que se desean establecer $d = 4$ divisiones de tamaños $\Delta x = [1\ 2\ 4\ 8]$. Según ec.2.3, para $r = 0,685$ se obtendría el valor $R = 2$ deseado. Sin embargo, para $r = 0,685$ realmente se obtiene $R = 1,580$ (Figura 2.36).

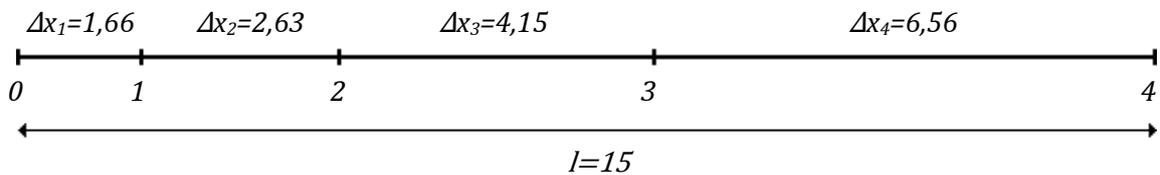


Figura 2.36. Incorrección del algoritmo de distribución de nodos *exponent*.

Por lo tanto la ecuación ec.2.3 del algoritmo *exponent* no es correcta y es preciso redefinirla como sigue:

$$a = \frac{r - 0,5}{\left(\frac{d}{10}\right)} \quad (\text{ec.2.4})$$

$$b = \sum_{i=1}^d e^{a(i+1)} \quad (\text{ec.2.5})$$

$$\Delta x_i = \frac{l}{b} e^{a(i+1)} \quad (\text{ec.2.6})$$

$$R = e^a \quad (\text{ec.2.7})$$

Ejemplo. Sea una arista de longitud $l = 15$ en la que se desean establecer $d = 4$ divisiones de tamaños $\Delta x = [1 \ 2 \ 4 \ 8]$. Según las ecuaciones ec.2.4 a ec.2.7, el valor $R = 2$ deseado se obtiene para $r = 0,777$ (Figura 2.37).

Una vez establecidas las ecuaciones del algoritmo de distribución de nodos sobre aristas, el problema a resolver es el siguiente:

Problema. Sea una arista de longitud l (aristas AB, CD y AE) en la que se desean establecer d divisiones. Obtener el valor del ratio r que cumple que la distancia Δx_1 del primer nodo de la arista a la pared del dominio coincida con un valor dado y , siendo y tal que $y^+ = 1$.

Nótese que, conocido y , la resolución de problema no es directa y es preciso abordarla mediante un **proceso iterativo** de búsqueda de ceros. En el presente trabajo se emplea la función "Buscar objetivo" de la hoja de cálculo EXCEL por su comodidad.

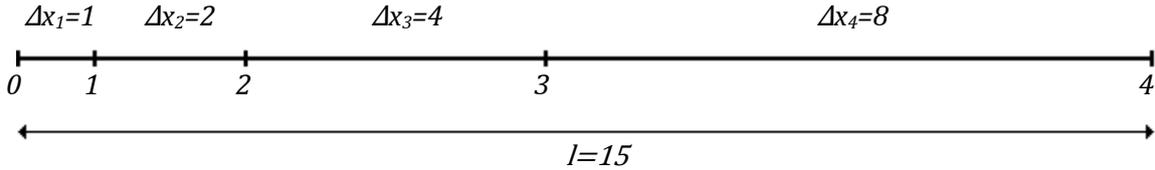


Figura 2.37. Redefinición del algoritmo de distribución de nodos *exponent*.

Finalmente se establece la **correlación entre y^+ e y** para las aristas AB, CD y AE, con las mismas condiciones de operación que se utilizan en el estudio de sensibilidad. Para ello se resuelven numéricamente tres mallas diferentes con valores de y conocidos y se evalúa y^+ en cada una de las paredes del dominio computacional (véanse las Figuras 2.39, 2.40 y 2.41).

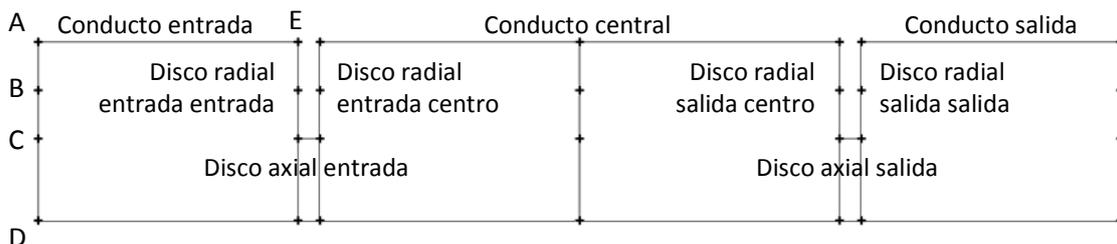


Figura 2.38. Denominación de las paredes en el dominio computacional.

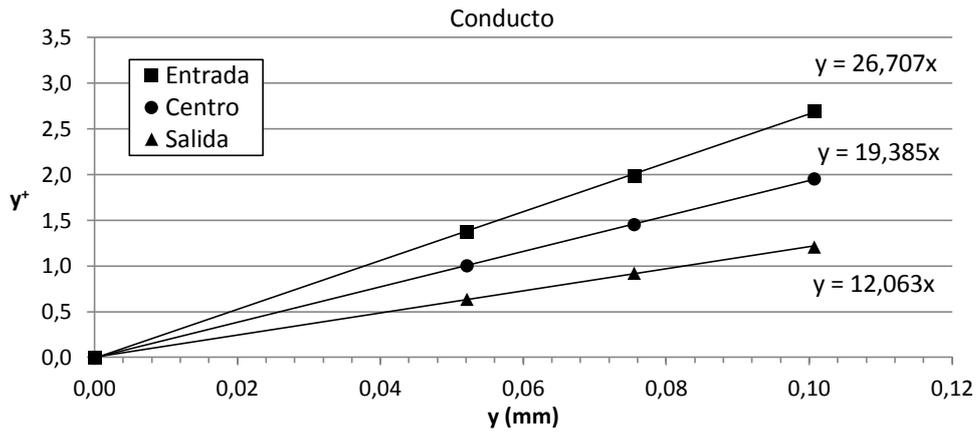


Figura 2.39. Correlación entre y^+ e y para la pared del conducto.

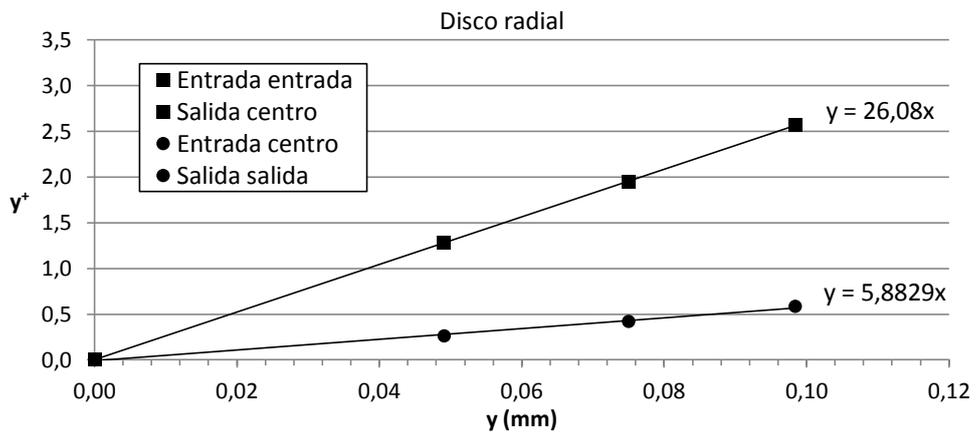


Figura 2.40. Correlación entre y^+ e y para la pared radial del disco.

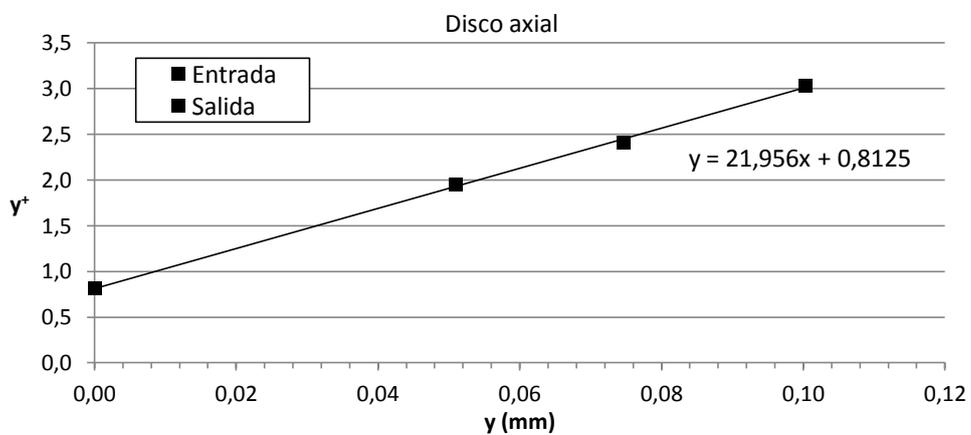


Figura 2.41. Correlación entre y^+ e y para la pared axial del disco.

Con objeto de respetar la **simetría del mallado** se selecciona en cada una de las tres gráficas el mínimo valor de y para $y^+ = 1$ y se mantiene éste en las demás paredes de la gráfica.

A partir de los resultados obtenidos se realiza el mallado del dominio computacional en GAMBIT. Para la malla óptima, los valores de los parámetros requeridos son los siguientes:

Malla 5	Arista AB	Arista BC	Arista CD	Arista AE	Arista GI
Longitud (mm)	3,375	3,375	5,75	18	1.5
Divisiones	30	32	48	72	16
<i>Interval size</i>	0,1125	0,1055	0,1198	0,2500	0,0938
<i>Ratio</i>	0,6942	0,7109	0,7257	0,8023	0,6684
Restricción	$y^+ = 1$	Continuidad en el tamaño de las celdas	$y^+ = 1$	$y^+ = 1$	Continuidad en el tamaño de las celdas

Tabla 2.7. Parámetros de construcción de la malla óptima en GAMBIT.

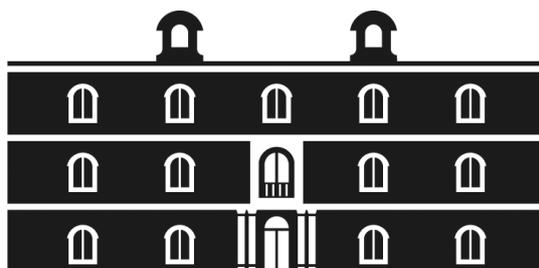
Nótese que GAMBIT no trabaja directamente con el número de divisiones sobre la arista, sino con el tamaño de intervalo, *interval size*:

$$IS = \frac{l}{d} \quad (\text{ec.2.8})$$

Con esta distribución de nodos para la malla óptima, se obtiene un valor máximo para la **relación de aspecto** de las celdas (*aspect ratio*) de 30, que se sitúa en la prolongación de la pared axial del disco, en el entorno del vértice C (véase la *Figura 2.38*).



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

**BLOQUE I.
OSCILACIÓN DEL FLUIDO.**

**CAPÍTULO 3.
SIMULACIÓN NUMÉRICA
DEL MODELO 2D.**

3.1. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN.

3.1.1. Simulación estacionaria.

En la metodología de simulación que se lleva a cabo para abordar la resolución del campo de velocidades en un *OBR* es preciso distinguir entre simulación estacionaria y simulación no estacionaria. El problema del flujo oscilatorio es inherentemente no estacionario puesto que las leyes de gobierno del movimiento del fluido son leyes sinusoidales temporales (véase el *Apartado 1.3.3*). En la expresión general *ec.3.1* es necesario establecer el **caso de inicio del ciclo** a través de la fase φ , es decir, fijar el gasto másico.

$$\dot{m}(t) = \dot{m}_0 \text{sen}(2\pi ft + \varphi) \quad (\text{ec.3.1})$$

Para la oscilación del fluido, y siguiendo el ejemplo de los autores consultados durante la fase de revisión bibliográfica [2, 5, 38, 39, 46], se inicia el ciclo de oscilación en el punto de **máximo gasto másico**, es decir, para $\varphi = \pi/2$ (la elección de este punto se justifica convenientemente en el *Apartado 3.1.3*). Así, la ley temporal sinusoidal para el gasto másico se expresa como:

$$\dot{m}(t) = \rho \left(\frac{\pi D^2}{4} \right) 2\pi f x_0 \cos(2\pi ft) \quad (\text{ec.3.2})$$

En la *Figura 3.1* se representa la evolución del gasto másico, partiendo del caso estacionario con gasto másico constante:

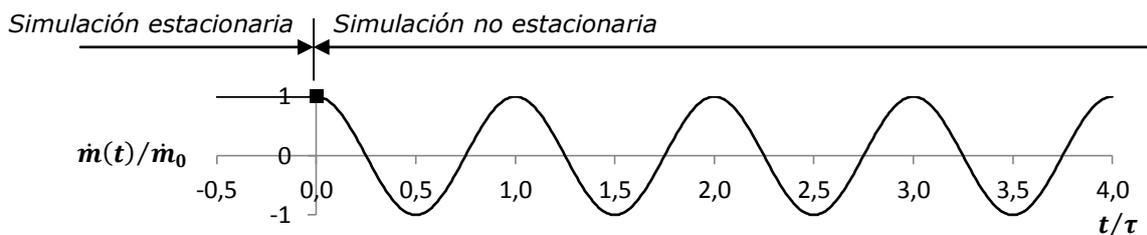


Figura 3.1. Caso de inicio del ciclo en la oscilación del fluido.

3.1.2. Simulación no estacionaria.

A partir del caso de inicio del ciclo comienza la simulación no estacionaria, con gasto másico variable en el tiempo. Para ello es preciso discretizar la ecuación *ec.3.2* imponiendo un paso de tiempo en el eje temporal, que se obtiene mediante la **condición de Courant-Friedrich-Levy** (condición CFL), y que para el caso de n dimensiones toma la forma:

$$\Delta t \sum_{i=1}^n \frac{u_{xi}}{\Delta x_i} \leq C \quad (\text{ec.3.3})$$

siendo Δt el paso de tiempo, Δx_i el tamaño de la celda en la dirección i , u_{xi} la velocidad en la celda de tamaño Δx_i y C el número de Courant.

Matemáticamente, la condición CFL es una condición de **convergencia** para ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Para esquemas explícitos es $C = 1$, mientras que para esquemas implícitos es $C = \infty$. Nótese que la aplicación en FLUENT del *solver Pressure Based*, por tratarse de flujo incompresible, conlleva obligatoriamente el uso de un esquema implícito, por lo que a priori el requisito de CFL no sería de aplicación en el presente Proyecto. Sin embargo, desde el punto de vista de la **estabilidad** de la solución, sí existen recomendaciones acerca de la limitación del número de Courant. Para las simulaciones no estacionarias efectuadas en el presente Proyecto se establece como valor máximo $C = 30$, de acuerdo con el rango $20 \leq C \leq 40$ que se recomienda en la bibliografía [53].

Un análisis cualitativo del contorno de velocidades en el dominio computacional para el caso de inicio del ciclo muestra que las máximas velocidades se dan aguas abajo del disco, en las proximidades del eje, y con clara componente axial (véase la *Figura 3.2*). Esto permite asumir la simplificación unidimensional de la condición CFL:

$$\Delta t \frac{v}{\Delta x} \leq C \quad (\text{ec.3.4})$$

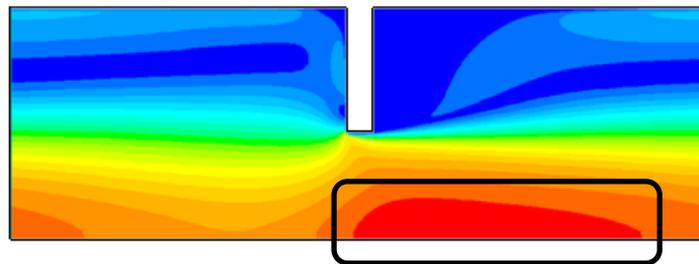


Figura 3.2. Contorno de velocidad axial en el dominio computacional. Análisis cualitativo.

Atendiendo a la ecuación ec.3.4, y para facilitar el cálculo del paso de tiempo Δt , se supone que la máxima velocidad se alcanza en el eje. Representando la evolución de la velocidad axial v y del tamaño de celda Δx a lo largo del eje, para la condición de operación del estudio de sensibilidad, se obtiene:

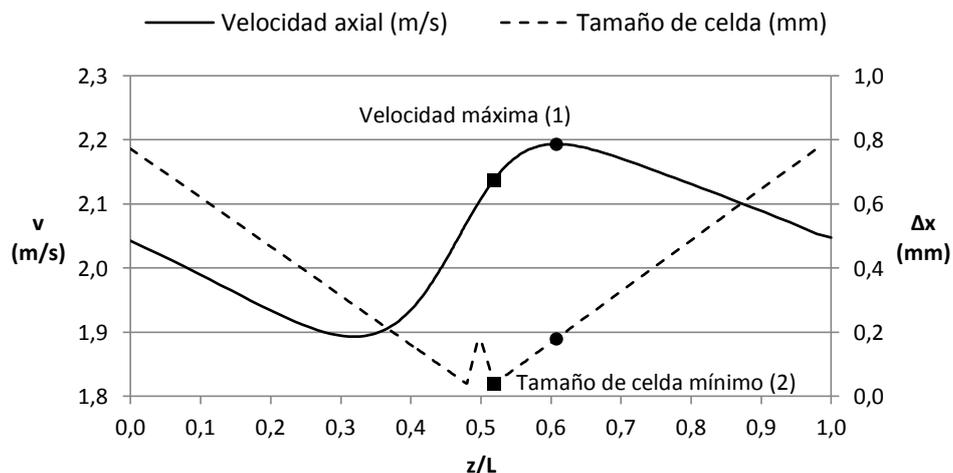


Figura 3.3. Evolución de la velocidad axial y del tamaño de celda axial a lo largo del eje.

En la *Figura 3.3* se distinguen dos puntos críticos: punto (1) de máxima velocidad y punto (2) de mínimo tamaño de celda. Para cada punto, el paso de tiempo obtenido es el siguiente:

$$\Delta t_1 = C \frac{\Delta x_{(1)}}{v_{(1)}} = 30 \times \frac{0,000180 \text{ m}}{2,193415 \text{ m/s}} = 0,002462 \text{ s} \quad (\text{ec.3.5})$$

$$\Delta t_2 = C \frac{\Delta x_{(2)}}{v_{(2)}} = 30 \times \frac{0,000040 \text{ m}}{2,137975 \text{ m/s}} = 0,000561 \text{ s} \quad (\text{ec.3.6})$$

El orden de magnitud del paso de tiempo 1 está de acuerdo con lo referido por los autores consultados durante la fase de revisión bibliográfica [2, 5, 38, 39, 46]. Aplicar el paso de tiempo 2 supondría multiplicar por un factor de 4.4 el número de puntos de la discretización, lo que conlleva un incremento en el tiempo de cálculo. Por lo tanto se selecciona un paso de tiempo $\Delta t_1 = 0,002462 \text{ s}$, y se asume que en la región anexa al disco no se verificará la condición CFL (véase la *Figura 3.4*). Nótese además que, desde el punto de vista de la resolución del campo de velocidades, esta región no es tan crítica como puedan serlo las zonas aguas abajo del disco, ya que el flujo es predominantemente axial y no hay lugar a recirculaciones ni anillos de vorticidad.

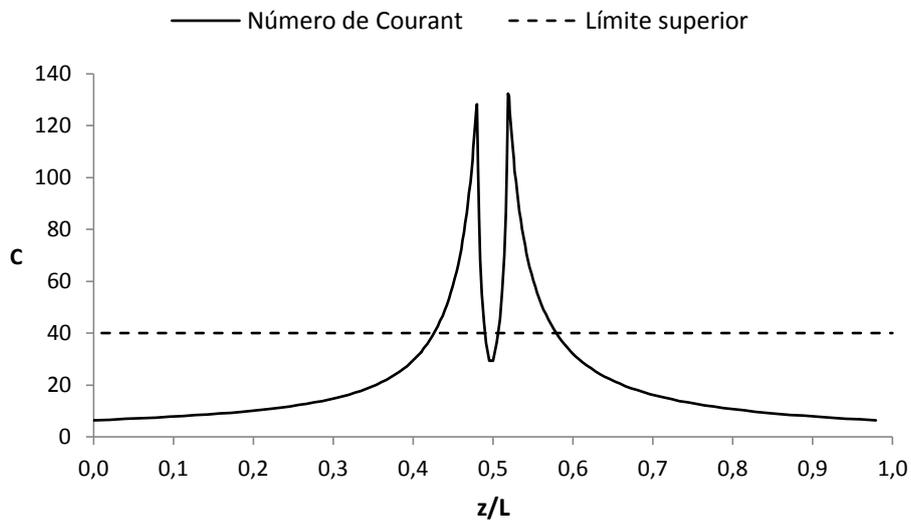


Figura 3.4. Evolución del número de Courant de la condición CFL a lo largo del eje.

Una vez fijado el paso de tiempo Δt , el número total de casos n en los que se discretiza un ciclo de la ley sinusoidal depende de la frecuencia de oscilación f . Dado que el paso de tiempo es bajo, el número de casos n que se requiere resolver por ciclo es muy elevado. Para reducir el volumen de datos generado se opta por guardar en cada ciclo, no el número total de casos resueltos n , sino un número de casos menor $n_0 = 64$ suficientemente representativo.

$$n = \frac{1}{f\Delta t} \quad (\text{ec.3.7})$$

En consecuencia, el cálculo del paso de tiempo definitivo se realiza según:

$$n' = \frac{1}{f\Delta t_1} \quad (\text{ec.3.8})$$

$$n = \text{ent} \left(\frac{n'}{n_0} \right) n_0 \quad (\text{ec.3.9})$$

$$\Delta t = \frac{1}{nf} \quad (\text{ec.3.10})$$

En definitiva, a partir del paso de tiempo Δt_1 que satisface la condición CFL se calcula el número de casos a resolver n para cada una de las condiciones de operación (véase el *Apartado 1.3.1*), de los cuales sólo se guardan n_0 casos. A partir de n se recalcula el paso de tiempo definitivo Δt .

Condición de operación	Δt_1 (s)	f (Hz)	n'	n_0	n	Δt (s)
1	0,002462	0,5	812	64	768	0,002604
2	0,002462	1	406	64	384	0,002604
3	0,002462	2	203	64	192	0,002604

Tabla 3.1. Condiciones de operación, número de casos y paso de tiempo para la discretización.

Con el paso de tiempo $\Delta t = 0,002604 \text{ s}$ aplicado se ha conseguido una simulación no estacionaria satisfactoria con FLUENT, con **residuos de convergencia** inferiores a 1×10^{-7} .

Nótese que a lo largo de todo el ciclo temporal se aplica un **paso de tiempo fijo** $\Delta t = \text{cte}$, siendo esta metodología de discretización empleada por la totalidad de los autores consultados [2, 5, 38, 39, 46]. En el *Anexo C* del presente Proyecto se discute la posibilidad de aplicar a la discretización un **paso de tiempo variable** a lo largo del ciclo $\Delta t = \Delta t(t)$.

3.1.3. Periodicidad temporal.

En la simulación no estacionaria, que comienza a partir del caso inicial de la simulación estacionaria, se produce un transitorio que ha de superarse hasta alcanzar una solución periódica en el tiempo. Es decir, existe un número determinado de ciclos temporales al comienzo de la simulación no estacionaria en los que la solución difiere de un ciclo a otro. Este periodo se denomina **simulación transitoria** y su duración está condicionada por la fase del ciclo que se elija para iniciar la ley sinusoidal temporal (véase el *Apartado 3.1.1*). Siguiendo el ejemplo de los autores consultados durante la fase de revisión bibliográfica [2, 5, 38, 39, 46], se inicia el ciclo en el punto de máximo gasto másico por considerarse que la mayor inercia del flujo en este punto contribuye a una extinción más rápida del transitorio. Una vez superado el transitorio se alcanza la periodicidad temporal, comenzando el periodo denominado **simulación periódica temporal**. Para identificar cuántos ciclos tarda en aparecer este periodo se compara la solución en sucesivos ciclos de oscilación hasta encontrar una diferencia despreciable entre un ciclo y el siguiente.

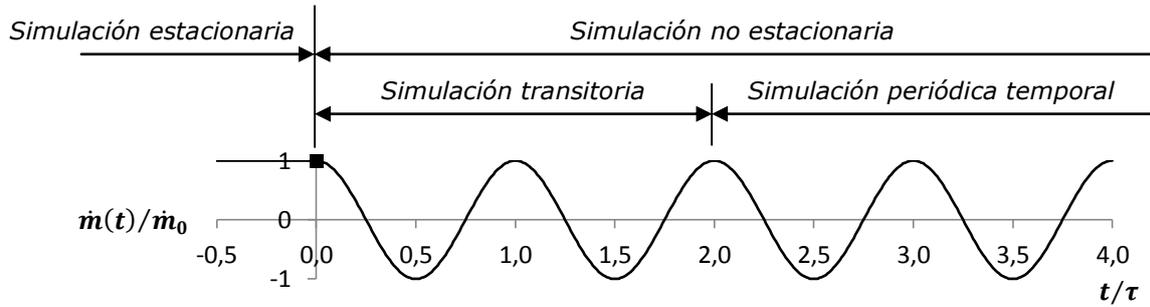


Figura 3.5. Ejemplo de simulación estacionaria, simulación no estacionaria, simulación transitoria y simulación periódica temporal.

En la práctica no es viable comparar la solución entre dos ciclos consecutivos en todos y cada uno de los casos (64 casos guardados de 192 resueltos para la condición de operación 3; véase la *Tabla 3.1*). Se recurre por ello a 4 casos representativos del ciclo, coincidiendo con las **4 fases de oscilación** siguientes, siendo $\theta = 2\pi ft$:

$$\theta_1 = 0 ; \theta_2 = \pi/2 ; \theta_3 = \pi ; \theta_4 = 3\pi/2$$

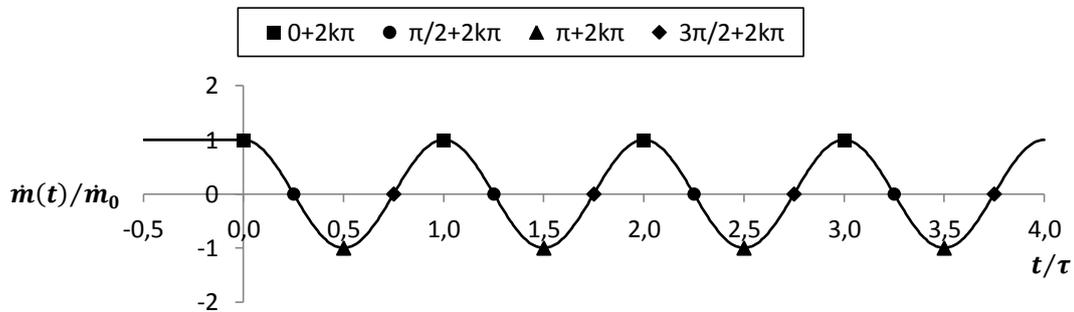


Figura 3.6. Fases de oscilación para la comprobación de la periodicidad temporal.

Para comprobar la periodicidad temporal se estudia el perfil de velocidad axial, para las 4 fases de oscilación anteriores, en tres regiones diferentes del dominio computacional (véanse las *Figuras 3.7 y 3.8*):

- A lo largo del eje de simetría.
- En la sección transversal equidistante entre dos discos consecutivos, en uno de los pasos centrales del dominio computacional.
- En la sección transversal del orificio del disco, en uno de los pasos centrales del dominio computacional.

3.1.4. Periodicidad espacial.

La geometría del reactor de flujo oscilatorio se compone de un determinado número de pasos espaciales consecutivos, centrados en los discos insertados (véase el *Apartado 2.1.1*). Esta **periodicidad geométrica** se traduce en una periodicidad espacial de la solución numérica dentro del dominio computacional, ya que el patrón de movimiento del flujo ha de ser el mismo en cada uno de los pasos espaciales, salvando las inestabilidades propias de la turbulencia.

El **fenómeno físico** que ocurre en el reactor consiste en una carga de fluido por la sección de entrada y una descarga de fluido por la sección de salida. Este modelo se reproduce mediante una **simulación completa** que reproduce un dominio computacional con un cierto número de pasos espaciales. Puesto que los pasos próximos a la sección de entrada y a la de salida son perturbados por los efectos de entrada y salida del fluido respectivamente, el número de pasos ha de ser suficiente para que se alcance la periodicidad espacial en los pasos centrales. Para estas simulaciones completas se emplea un total de **8 pasos espaciales**.



Figura 3.7. Dominio computacional de 8 pasos espaciales para la simulación completa.

Dada la periodicidad espacial del patrón de movimiento del flujo, existe la posibilidad de reproducir la misma solución obtenida en los pasos espaciales centrales de la simulación completa de 8 pasos con un modelo de un único paso, aplicando condiciones de contorno periódicas. Así, la **simulación periódica** sobre un dominio computacional de **1 paso espacial** permite resolver el mismo problema fluidodinámico con un menor coste computacional. En el *Anexo B* se discuten los aspectos prácticos de las condiciones de contorno de ambas simulaciones.



Figura 3.8. Dominio computacional de 1 paso espacial para la simulación periódica.

La comprobación de la periodicidad espacial se basa, al igual que para la periodicidad temporal (*Apartado 3.1.3*), en el estudio del perfil de velocidad axial a lo largo del eje de simetría, en la sección transversal equidistante entre dos discos consecutivos y en la sección transversal del orificio del disco. Se evalúan las mismas 4 fases de oscilación para comprobar que la periodicidad espacial se mantiene a lo largo de todo el ciclo de oscilación. Nótese que la periodicidad espacial puede darse también en los ciclos de simulación transitoria, siendo su estudio irrelevante, ya que la **solución** buscada ha de ser **periódica en el tiempo y en el espacio**. Por ello la periodicidad espacial sólo se estudia en el ciclo que asegura existencia de periodicidad temporal, es decir, una vez superado el transitorio (compárense las *Figuras 3.6* y *3.9*).

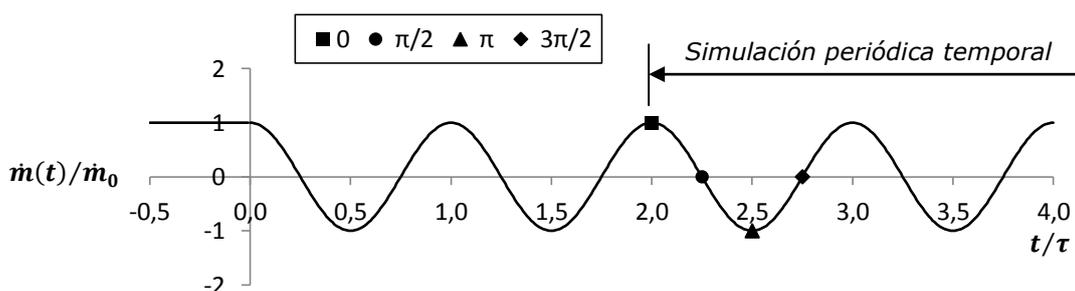


Figura 3.9. Ejemplo de fases de oscilación para la comprobación de la periodicidad espacial.

3.2. SIMULACIÓN COMPLETA.

3.2.1. Hipótesis de simulación.

- Simulación: completa.
Sección entrada: *Mass Flow Inlet*. Sección salida: *Pressure Outlet*.
- *Solver*: *Pressure Based*.
- *Time*:
Simulación estacionaria: *Steady*.
Simulación no estacionaria: *Unsteady*.
- Modelo de turbulencia: $k-\omega$ SST, opción *Transitional Flows*.
- Ecuación de la energía: no resuelta.
- Contribución de la gravedad: no considerada.
- Fluido: agua.
- Propiedades del fluido: valores constantes.
Densidad $998,2 \text{ kg/m}^3$, viscosidad dinámica $0,001003 \text{ kg/m}\cdot\text{s}$.
- Gasto másico de entrada: $0,17240718 \text{ kg/s}$.
Condición de operación 3, frecuencia 2 Hz.
- *Pressure-Velocity Coupling*: *SIMPLE*.
- Discretización: segundo orden.
- Números de pasos espaciales = 8.

3.2.2. Simulación de casos sucesivos mediante fichero *Journal*.

La discretización del ciclo temporal implica la resolución numérica de un elevado número de casos (un total de 768 casos para la condición de operación 1; véase la *Tabla 3.1*). A partir de la simulación estacionaria del caso inicial, cada nuevo caso se obtiene **actualizando el gasto másico** y aplicando al caso que le precede un **paso de tiempo** $\Delta t = 0,002604 \text{ s}$. Las hipótesis de simulación se mantienen, cambiando únicamente del modelo estacionario al modelo no estacionario. Para la simulación completa, el software FLUENT permite realizar el cambio de gasto másico de un caso al siguiente de manera cómoda y automática, mediante una función definida por el usuario (*User-Defined Function, UDF*). Sin embargo, estas *UDFs* no están disponibles para la simulación periódica, siendo necesario programar este cambio de gasto en un **fichero *Journal***, que recoge las líneas de comandos escritas manualmente en la interfaz de usuario, siguiendo el método propuesto por Ni [2, 5, 38, 46]. Para validar el correcto funcionamiento del fichero *Journal* creado, se aplica este procedimiento tanto a la simulación completa como a la simulación periódica.

3.2.3. Periodicidad espacial de la simulación estacionaria.

Directamente se observa que la velocidad axial en el eje está muy condicionada por el efecto de entrada al reactor en los pasos espaciales 1, 2 y 3 (*Figura 3.10*). Al superponer los pasos se comprueba que este efecto de salida también perturba los pasos 4 y 5, mientras que el paso 8 sufre un leve efecto de salida (*Figura 3.11*). Se corrobora la periodicidad espacial en el eje, a partir del paso 6, con un perfil de velocidad axial que se repite en los pasos 6 y 7 con un error inferior al 0,2 % (*Figura 3.12*). Un análisis análogo en la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 3.13*) y en la sección transversal del disco (*Figura 3.14*) ofrece los mismos resultados, quedando validada la **periodicidad espacial entre los pasos 6 y 7**.

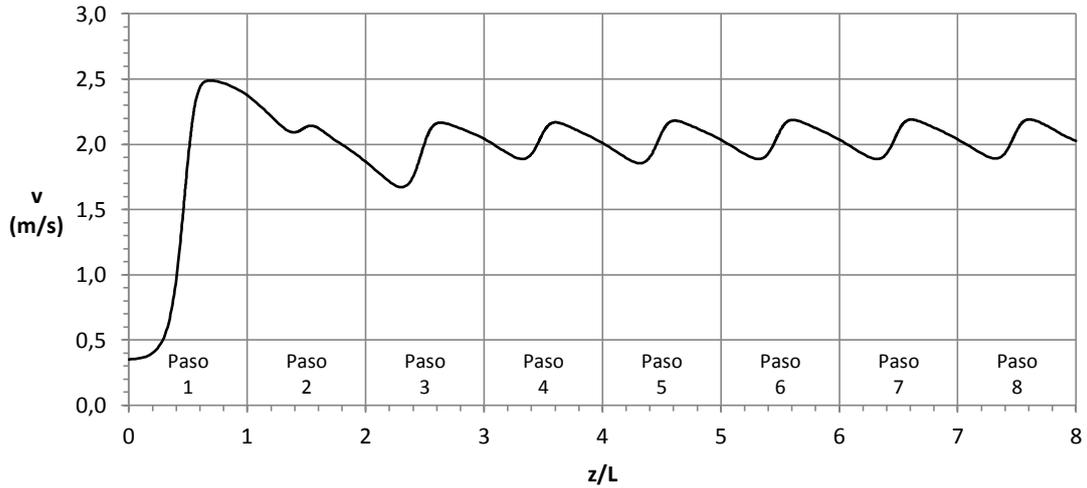


Figura 3.10. Perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 1 a 8.

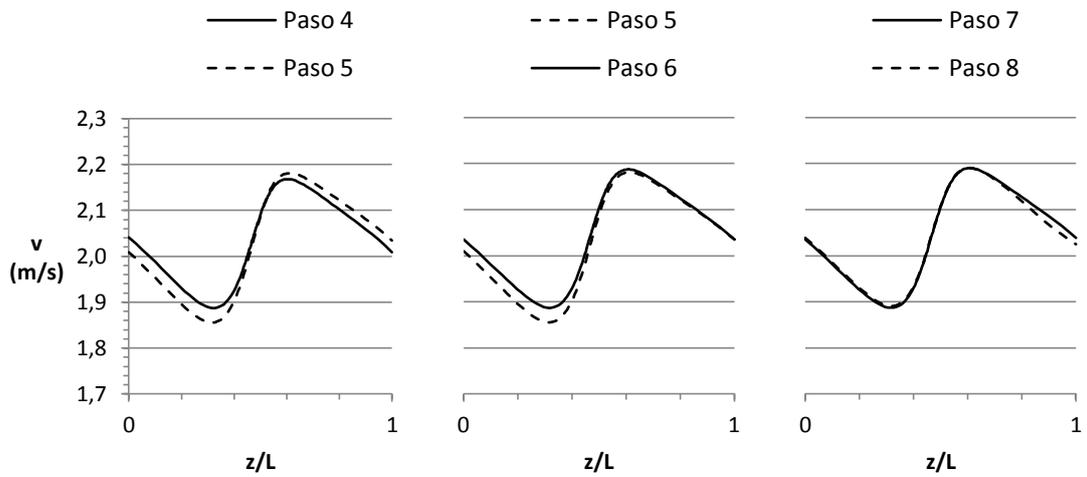


Figura 3.11. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 4, 5 y 6. Pasos 7 y 8.

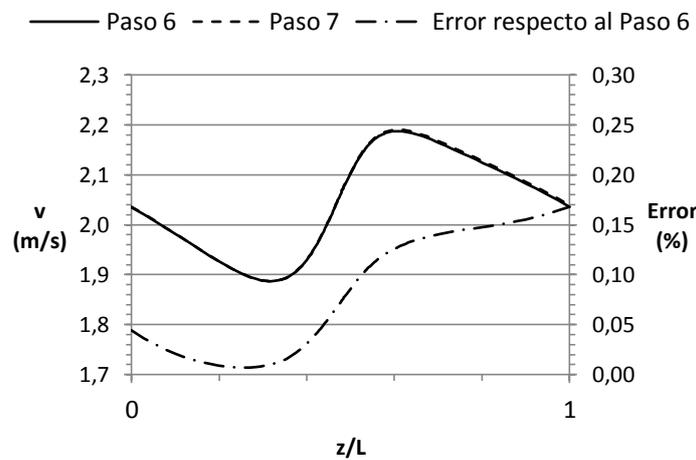


Figura 3.12. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 6 y 7.

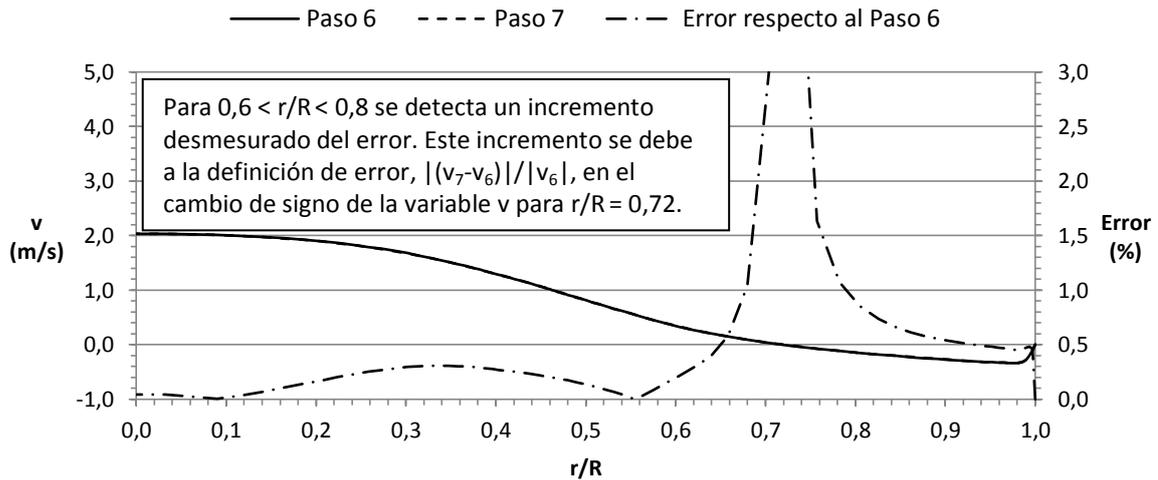


Figura 3.13. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Pasos 6 y 7.

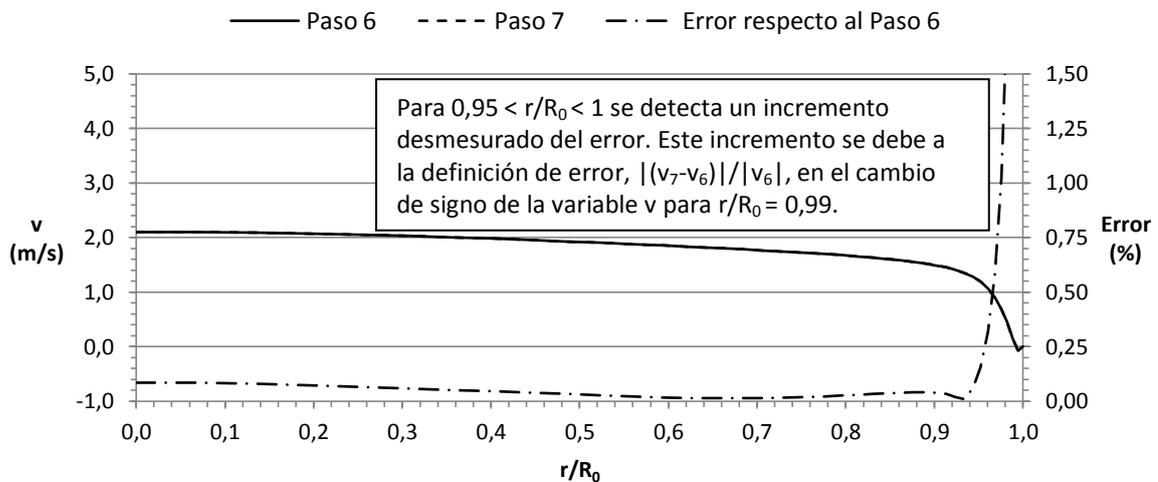


Figura 3.14. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Pasos 6 y 7.

3.2.4. Periodicidad temporal de la simulación no estacionaria.

El estudio de la periodicidad temporal se particulariza en el paso espacial 6, ya que la periodicidad espacial de la simulación estacionaria ha sido evidenciada entre los pasos 6 y 7 (véase el *Apartado 3.2.3*).

3.2.4.1. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

En el perfil de velocidad axial a lo largo del eje, el error del ciclo 1 respecto al ciclo 2 alcanza el 12 %. Este error se reduce a menos del 0,5 % si se compara el ciclo 2 con el ciclo 3 (*Figura 3.15*). En el caso de la sección transversal equidistante entre discos, el error del ciclo 2 respecto al ciclo 3 es del 2 % en las proximidades de la pared del conducto, llegando a superar el 4 % localmente. El error es nulo entre los ciclos 3 y 4 (*Figura 3.16*). En la sección transversal del disco, el error entre el ciclo 1 y el ciclo 2 supera el 9 %, mientras que entre el ciclo 2 y el ciclo 3 es inferior al 0,3 % (*Figura 3.17*).

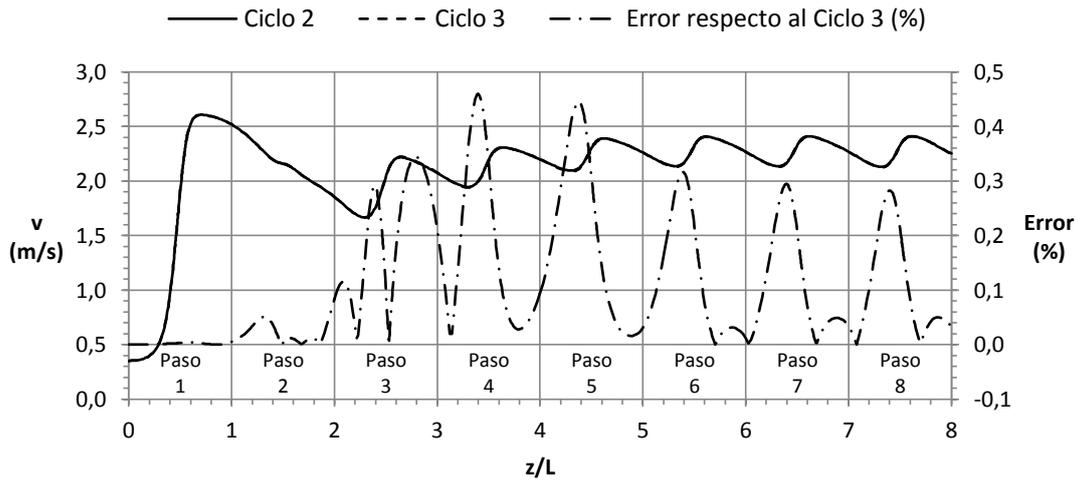


Figura 3.15. Perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 1 a 8. Ciclos 2 y 3. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

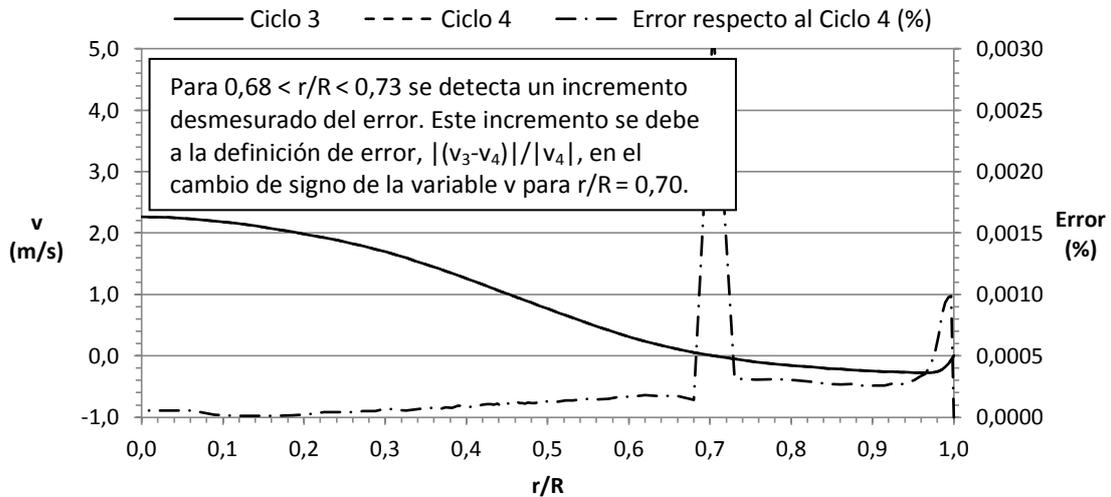


Figura 3.16. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Paso 6. Ciclos 3 y 4. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

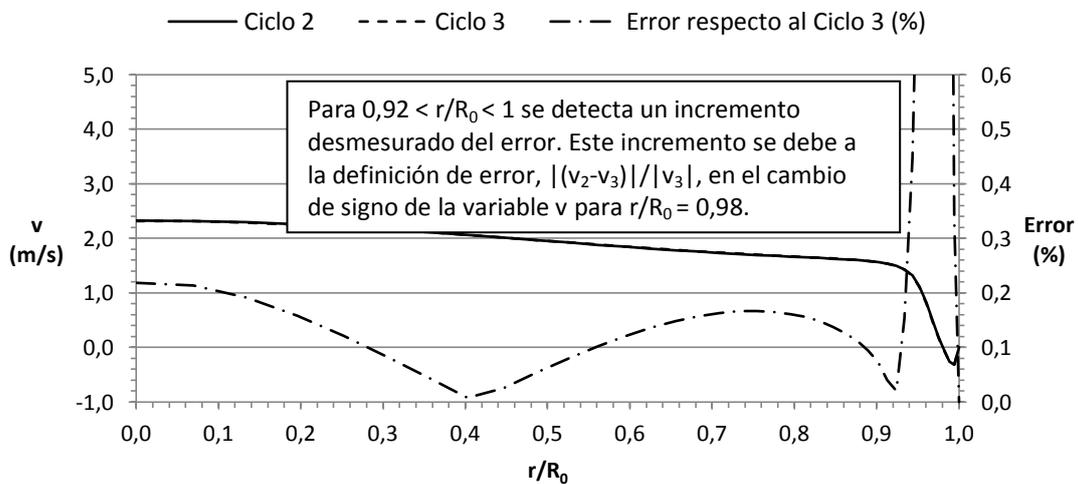


Figura 3.17. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Paso 6. Ciclos 2 y 3. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

3.2.4.2. Fases $\theta_2 = \pi/2 + 2k\pi$, $\theta_3 = \pi + 2k\pi$ y $\theta_4 = 3\pi/2 + 2k\pi$.

En el apartado anterior se concluye que, en la fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$, la **periodicidad temporal** se alcanza a partir del **ciclo de oscilación 3**, formando parte los ciclos 1 y 2 del periodo transitorio. Dado que la fase θ_1 , junto con la fase θ_3 , posee la máxima inercia del flujo en el ciclo, el análisis del número de ciclos transitorios en el resto de fases ofrece las mismas conclusiones. Y tal y como ocurre para la fase θ_1 (Figura 3.16), la región más restrictiva en el resto de fases a la hora de establecer la periodicidad temporal es la sección transversal equidistante entre discos (Figuras 3.18, 3.19 y 3.20). Por lo tanto se concluye que, para la simulación completa, la solución para el ciclo de oscilación 3 es periódica en el tiempo.

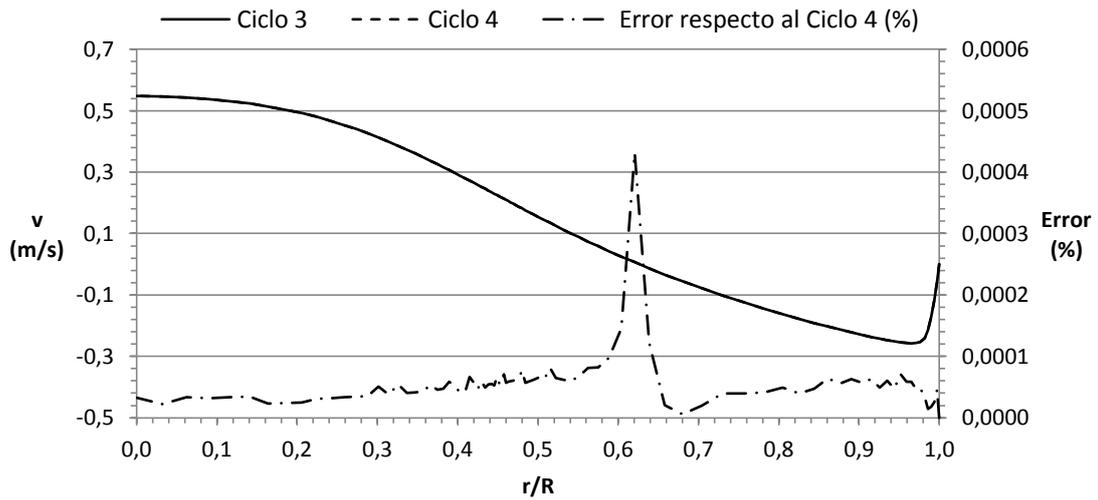


Figura 3.18. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Paso 6. Ciclos 3 y 4. Fase $\theta_2 = \pi/2 + 2k\pi$.

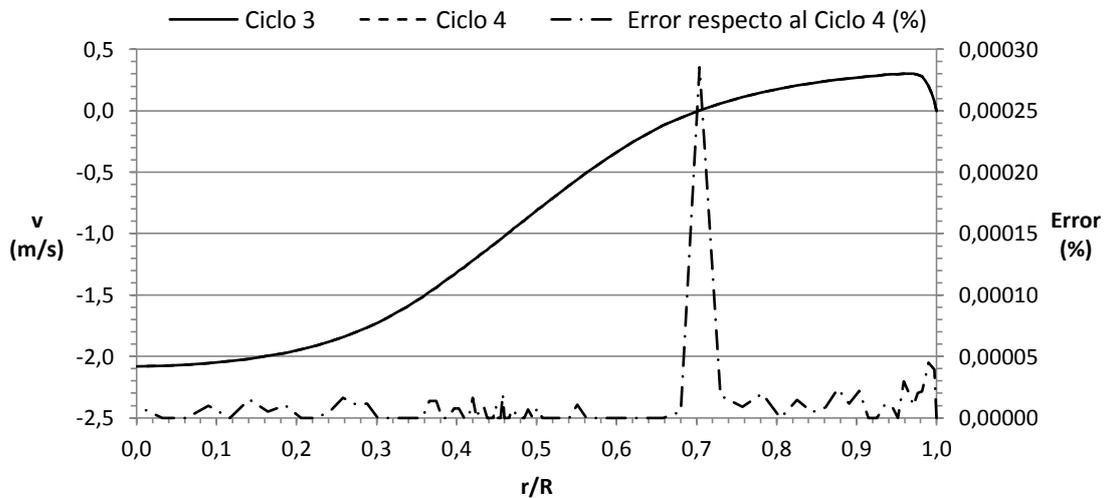


Figura 3.19. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Paso 6. Ciclos 3 y 4. Fase $\theta_3 = \pi + 2k\pi$.

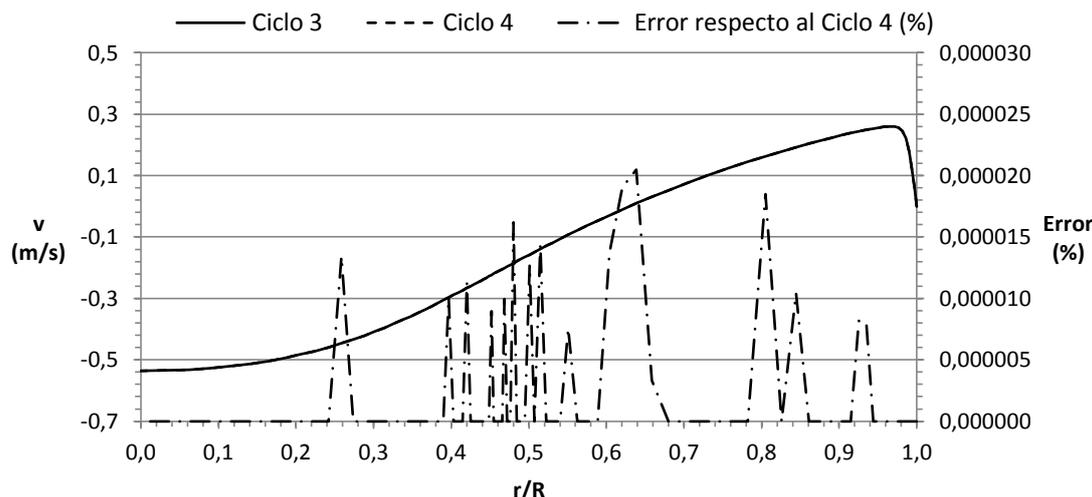


Figura 3.20. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Paso 6. Ciclos 3 y 4. Fase $\theta_4 = 3\pi/2 + 2k\pi$.

3.2.5. Periodicidad espacial de la simulación no estacionaria.

El estudio de la periodicidad espacial se realiza en el ciclo de oscilación 3, a partir del cual se asegura la existencia de periodicidad temporal (véase el *Apartado 3.2.4*). Téngase en cuenta que durante el avance del ciclo temporal se produce la **inversión del gasto másico** de manera que los efectos de entrada (salida) del flujo afectarán durante el semi-ciclo de gasto másico positivo a los pasos situados a la derecha (izquierda) del dominio computacional, y durante el semi-ciclo negativo a los pasos situados a la izquierda (derecha). Teniendo en cuenta que la periodicidad espacial de la simulación estacionaria se produce en los pasos 6 y 7, y no en los pasos 4 y 5 (véase el *Apartado 3.2.3*), la consecuencia es que en la simulación no estacionaria la periodicidad espacial se detectará en **pasos espaciales diferentes**, según la fase de oscilación.

3.2.5.1. Fase $\theta_1 = 0$.

Directamente se observa que la velocidad axial en el eje está muy condicionada por el efecto de entrada al reactor en los pasos espaciales 1, 2, 3 y 4 (*Figura 3.21*). Al superponer los pasos se comprueba que este efecto de salida también perturba el paso 5, mientras que el paso 8 sufre un leve efecto de salida (*Figura 3.22*). Se corrobora la periodicidad espacial en el eje, a partir del paso 6, con un perfil de velocidad axial que se repite en los pasos 6 y 7 con un error inferior al 0,35 % (*Figura 3.23*). Un análisis análogo en la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 3.24*) y en la sección transversal del disco (*Figura 3.25*) ofrece los mismos resultados, quedando validada la **periodicidad espacial entre los pasos 6 y 7**.

Como cabía esperar, el estudio de la periodicidad espacial en la fase $\theta_1 = 0$ del ciclo 3 de la simulación no estacionaria ofrece resultados totalmente análogos al estudio de dicha periodicidad en la simulación estacionaria (véase el *Apartado 3.2.3*).

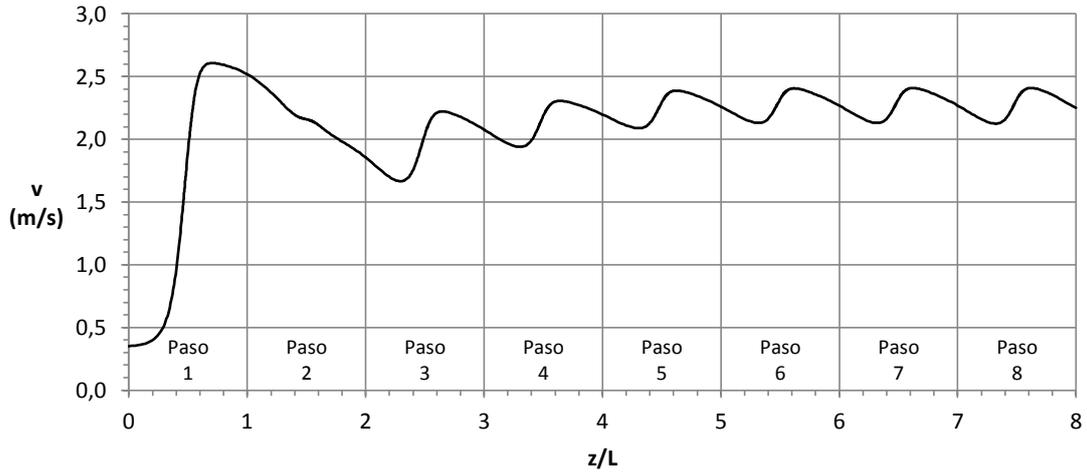


Figura 3.21. Perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 1 a 8. Ciclo 3. Fase $\theta_1 = 0$.

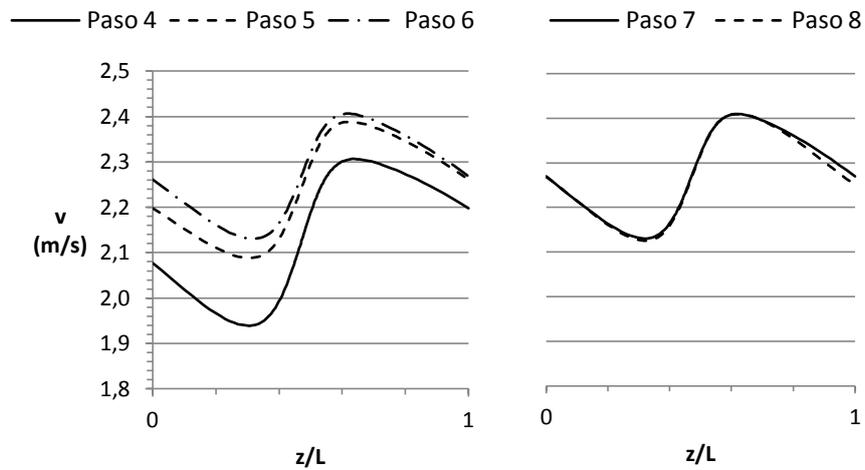


Figura 3.22. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 4, 5 y 6. Pasos 7 y 8. Ciclo 3. Fase $\theta_1 = 0$.

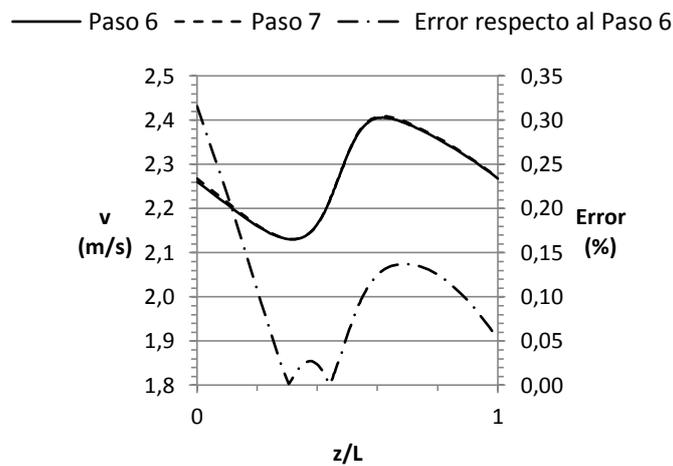


Figura 3.23. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 6 y 7. Ciclo 3. Fase $\theta_1 = 0$.

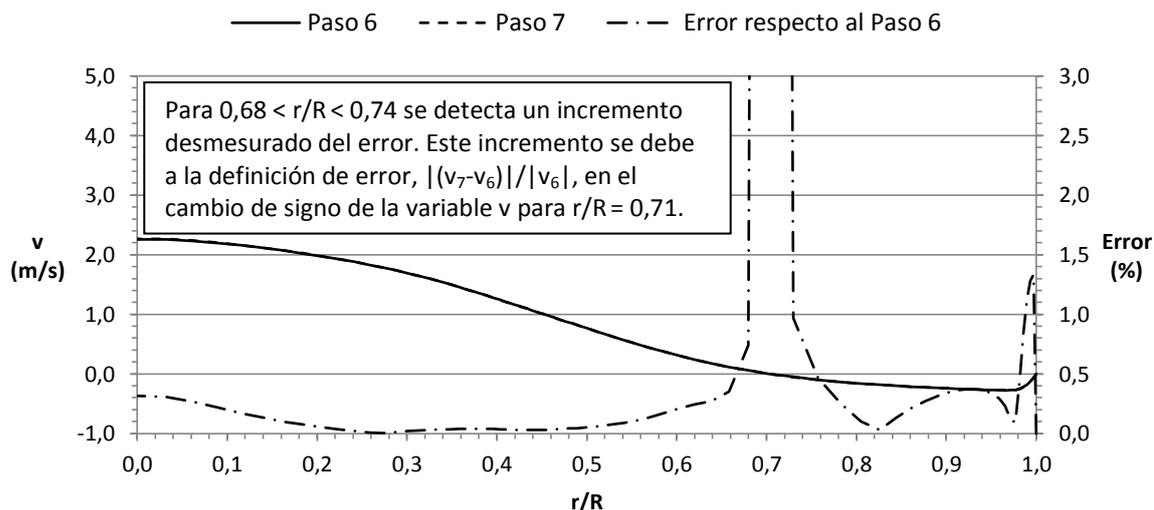


Figura 3.24. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Pasos 6 y 7. Ciclo 3. Fase $\theta_1 = 0$.

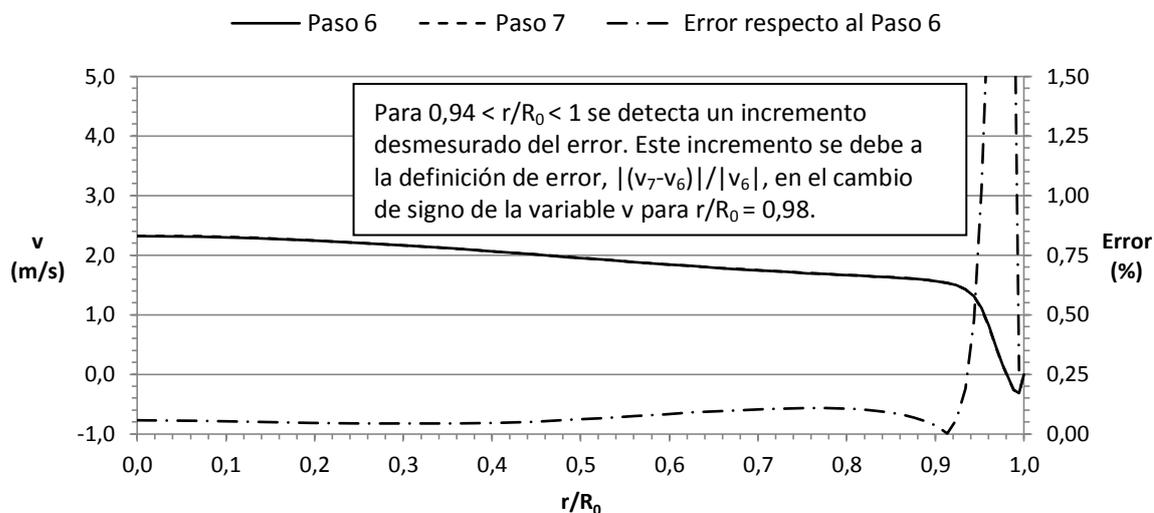


Figura 3.25. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Pasos 6 y 7. Ciclo 3. Fase $\theta_1 = 0$.

3.2.5.2. Fases $\theta_2 = \pi/2$, $\theta_3 = \pi$ y $\theta_4 = 3\pi/2$.

Análogamente a la fase $\theta_1 = 0$ analizada en el apartado anterior, para la fase $\theta_2 = \pi/2$ se observa que la velocidad axial en el eje está condicionada por el efecto de entrada en los pasos espaciales 1, 2, 3, 4 y 5, mientras que el paso 8 sufre efecto de salida. Un análisis análogo en la sección transversal equidistante entre discos y en la sección transversal del disco ofrece los mismos resultados. Así, queda comprobada la **periodicidad espacial entre los pasos 6 y 7** durante el **semi-ciclo de gasto másico positivo** (Figura 3.26).

Para la fase $\theta_3 = \pi$ y la fase $\theta_4 = 3\pi/2$ se obtienen conclusiones totalmente equivalentes: efecto de entrada en los pasos 8, 7, 6, 5 y 4; efecto de salida en el paso 1. Queda también comprobada la **periodicidad espacial entre los pasos 2 y 3** durante el **semi-ciclo de gasto másico negativo** (Figura 3.27 y 3.28).

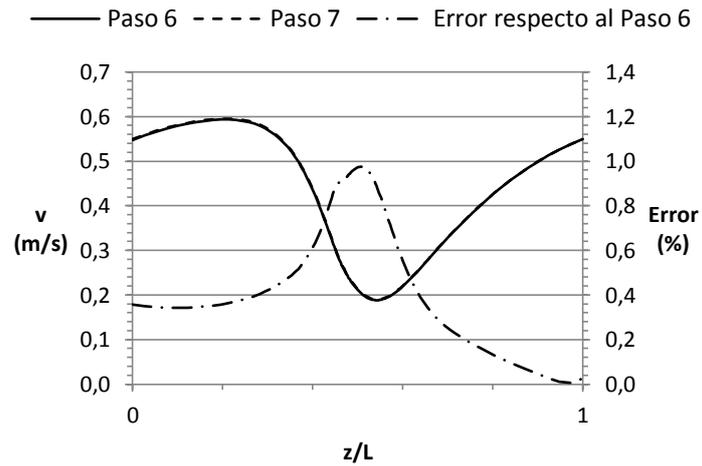


Figura 3.26. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 6 y 7. Ciclo 3. Fase $\theta_2 = \pi/2$.

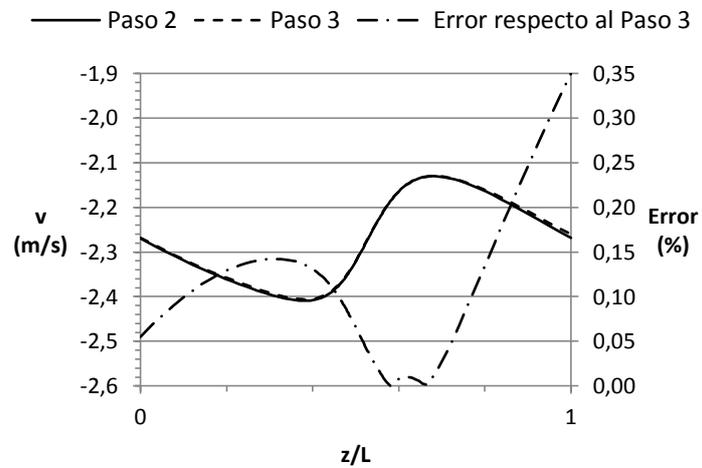


Figura 3.27. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 2 y 3. Ciclo 3. Fase $\theta_3 = \pi$.

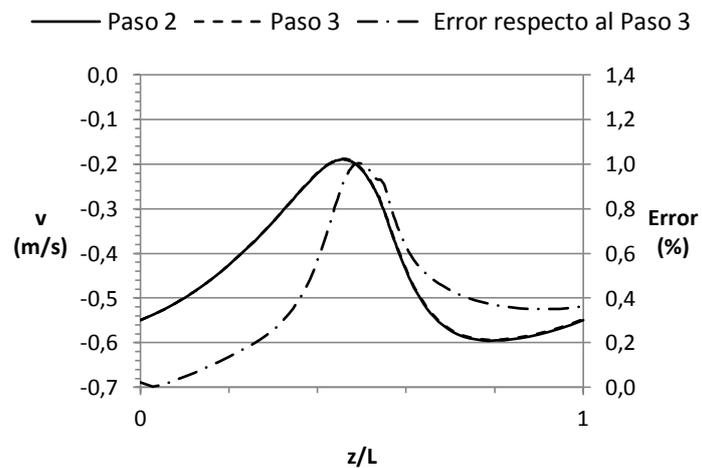


Figura 3.28. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 2 y 3. Ciclo 3. Fase $\theta_4 = 3\pi/2$.

3.3. SIMULACIÓN PERIÓDICA.

3.3.1. Hipótesis de simulación.

- Simulación: periódica.
Sección de entrada y salida: *Periodic Conditions*.
Type: Specify mass flow.
- *Solver: Pressure Based*.
- *Time:*
Simulación estacionaria: *Steady*.
Simulación no estacionaria: *Unsteady*.
- Modelo de turbulencia: $k-\omega$ SST, opción *Transitional Flows*.
- Ecuación de la energía: no resuelta.
- Contribución de la gravedad: no considerada.
- Fluido: agua.
- Propiedades del fluido: valores constantes.
Densidad $998,2 \text{ kg/m}^3$, viscosidad dinámica $0,001003 \text{ kg/m-s}$.
- Gasto másico: $0,17240718 \text{ kg/s}$.
Condición de operación 3, frecuencia 2 Hz.
- *Pressure-Velocity Coupling: SIMPLE*.
- Discretización: segundo orden.
- Números de pasos espaciales = 1.

3.3.2. Simulación de casos sucesivos mediante fichero *Journal*.

La discretización del ciclo temporal implica la resolución numérica de un elevado número de casos (un total de 192 casos para la condición de operación 3; véase la *Tabla 3.1*). A partir de la simulación estacionaria del caso inicial, cada nuevo caso se obtiene **actualizando el gasto másico** y aplicando al caso que le precede un **paso de tiempo** $\Delta t = 0,002604 \text{ s}$. Las hipótesis de simulación se mantienen, cambiando únicamente del modelo estacionario al modelo no estacionario. Para la simulación periódica, a diferencia de para la simulación completa, el software FLUENT no permite utilizar funciones definidas por el usuario (*User-Defined Function, UDF*) para realizar el cambio de gasto másico de un caso al siguiente. Por tanto es necesario programar este cambio de gasto en un **fichero *Journal***, que recoge las líneas de comandos escritas manualmente en la interfaz de usuario.

3.3.3. Periodicidad espacial de la simulación estacionaria.

Comparando los perfiles de velocidad axial obtenidos en la simulación estacionaria completa, para el paso 6, (véase el *Apartado 3.2.3*) con los obtenidos en la simulación estacionaria periódica, se concluye que la periodicidad espacial que se detecta con condiciones de contorno de carga y descarga de fluido en un dominio computacional de **8 pasos** es reproducida con exactitud con condiciones de contorno periódicas en un dominio computacional de **1 paso**.

El error que se comete es inferior al 0,6 % en el eje (*Figura 3.29*), inferior al 2 % en la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 3.30*) e inferior al 0,3 % en la sección transversal del disco (*Figura 3.31*).

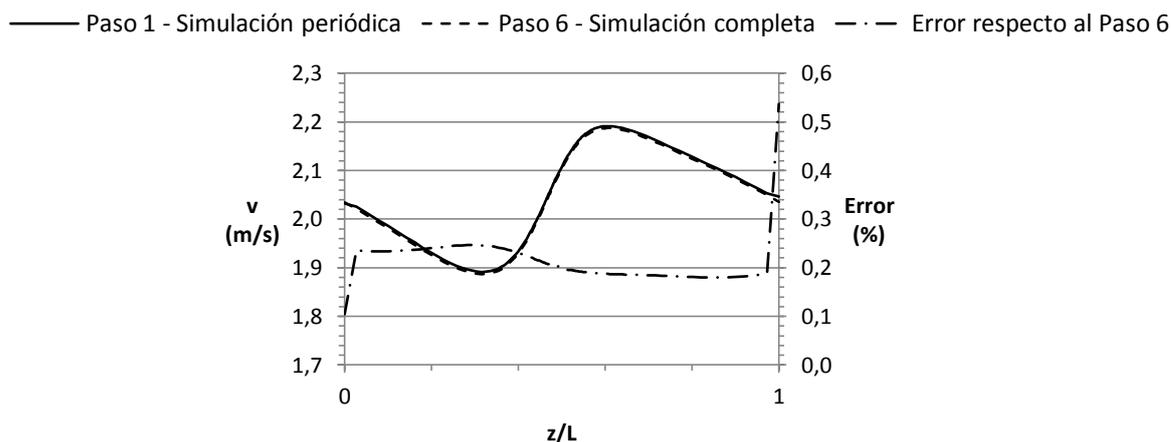


Figura 3.29. Perfil de velocidad axial en el eje. Comparación entre simulación estacionaria periódica y simulación completa.

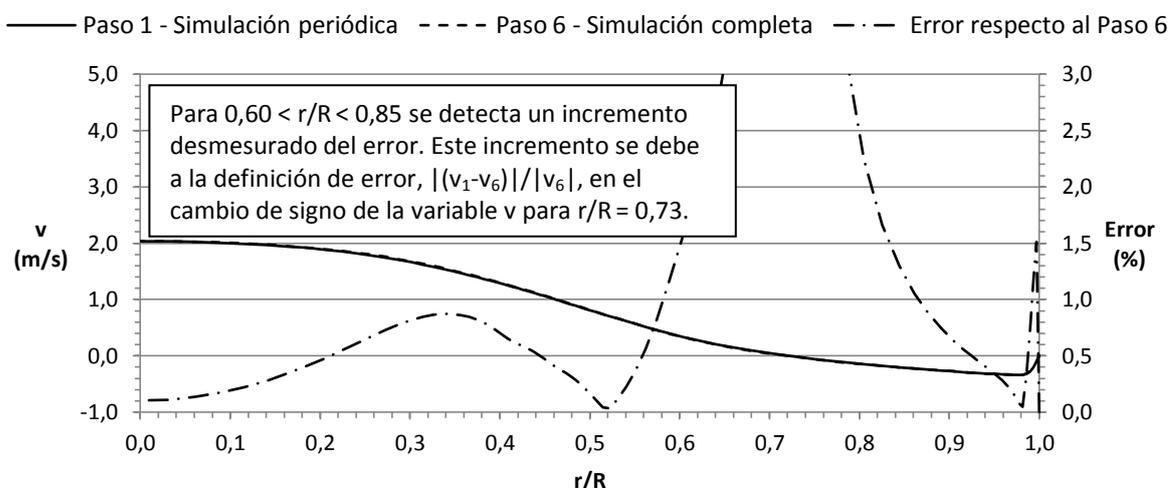


Figura 3.30. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Comparación entre simulación estacionaria periódica y simulación completa.

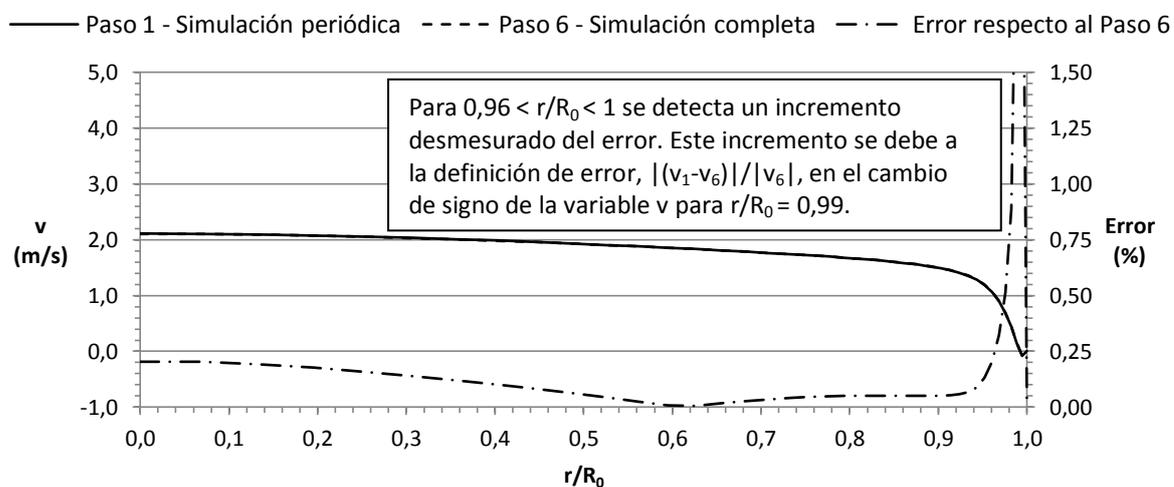


Figura 3.31. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Comparación entre simulación estacionaria periódica y simulación completa.

3.3.4. Periodicidad temporal de la simulación no estacionaria.

3.3.4.1. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

En el perfil de velocidad axial a lo largo del eje, el error del ciclo 1 respecto al ciclo 2 alcanza el 14 %. Este error es despreciable si se compara el ciclo 2 con el ciclo 3 (Figura 3.32). En el caso de la sección transversal equidistante entre discos, el error del ciclo 1 respecto al ciclo 2 es muy elevado, llegando a superar el 12 % localmente. El error está por debajo del 0,3 % entre los ciclos 2 y 3 (Figura 3.33). En la sección transversal del disco, el error entre el ciclo 1 y el ciclo 2 supera el 10 %, mientras que entre el ciclo 2 y el ciclo 3 es nulo (Figura 3.34).

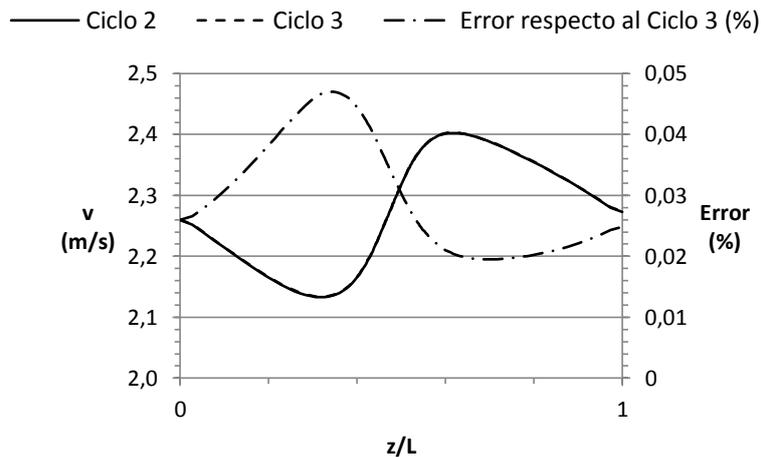


Figura 3.32. Perfil de velocidad axial en el eje. Paso 1. Ciclos 2 y 3. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

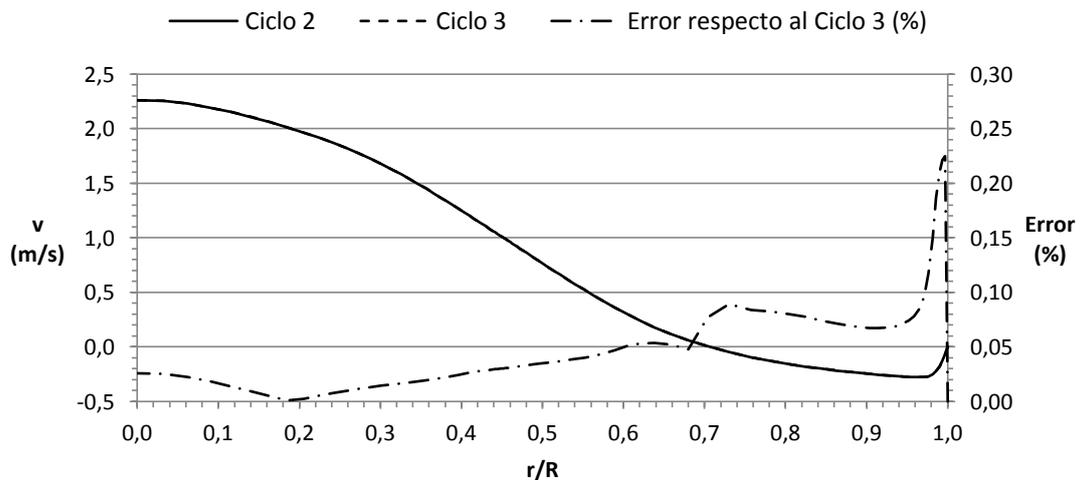


Figura 3.33. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Paso 1. Ciclos 2 y 3. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

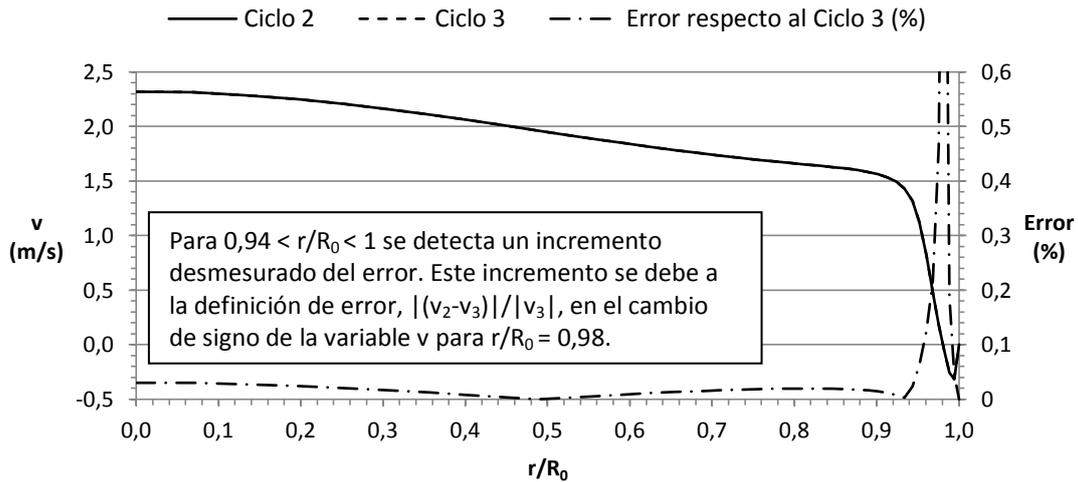


Figura 3.34. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Paso 1. Ciclos 2 y 3. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

3.3.4.2. Fases $\theta_2 = \pi/2 + 2k\pi$, $\theta_3 = \pi + 2k\pi$ y $\theta_4 = 3\pi/2 + 2k\pi$.

En el apartado anterior se concluye que, en la fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$, la **periodicidad temporal** se alcanza a partir del **ciclo de oscilación 2**, estando el periodo transitorio formado sólo por el ciclo 1. Nótese que para la simulación completa se concluye que la periodicidad en el tiempo se alcanza un ciclo más tarde, a partir del ciclo 3 (véase el *Apartado 3.2.4.2*).

Dado que la fase θ_1 , junto con la fase θ_3 , posee la máxima inercia del flujo en el ciclo, el análisis del número de ciclos transitorios en el resto de fases ofrece las mismas conclusiones. Y tal y como ocurre para la fase θ_1 (*Figura 3.33*), la región más restrictiva en el resto de fases a la hora de establecer la periodicidad temporal es la sección transversal equidistante entre discos (*Figuras 3.35, 3.36 y 3.37*). Por lo tanto se concluye que, para la simulación periódica, la solución para el ciclo de oscilación 2 es periódica en el tiempo.

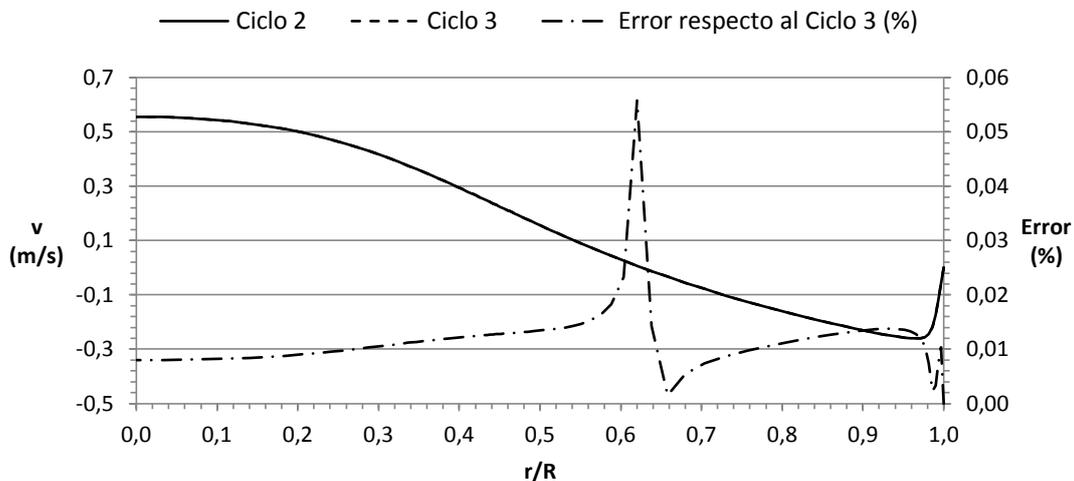
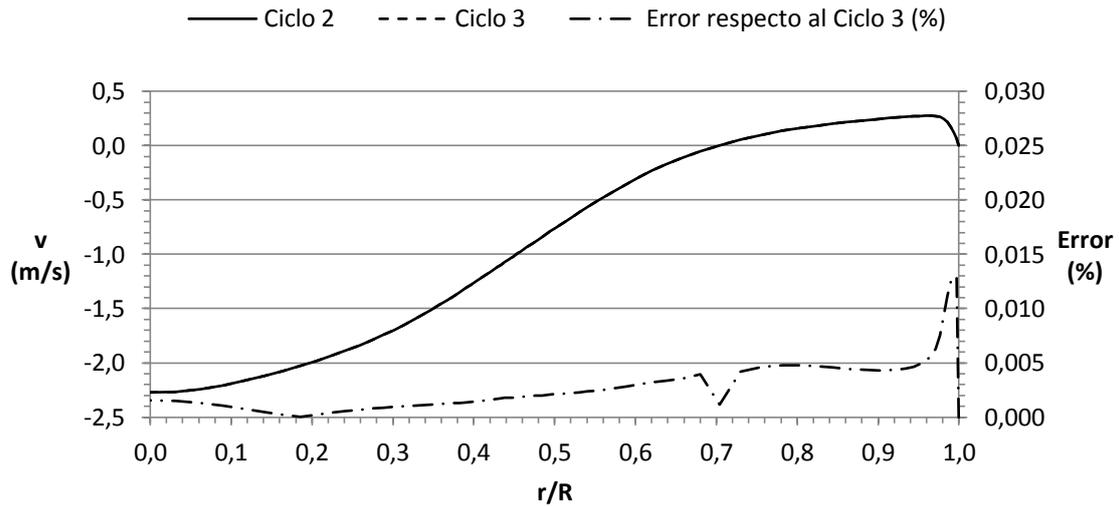
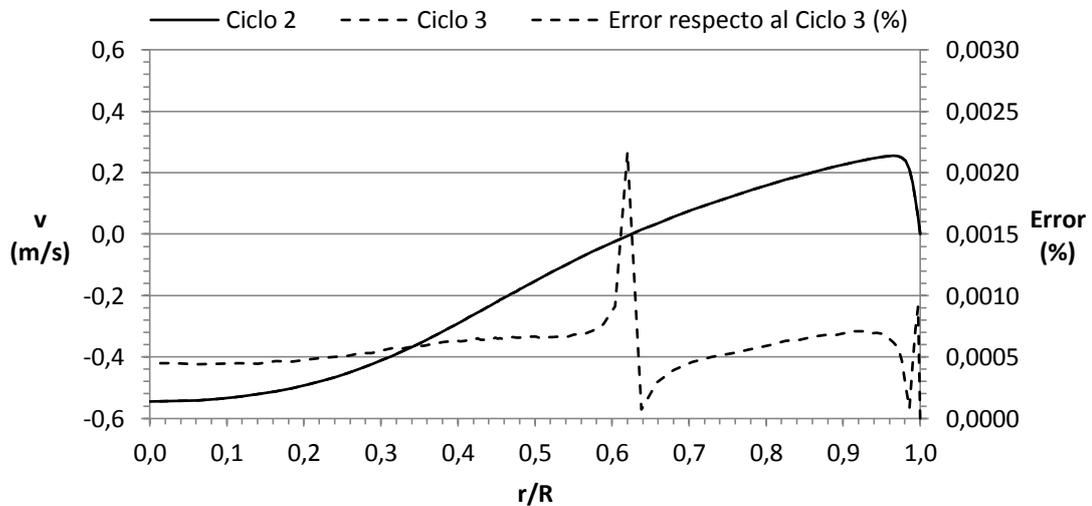


Figura 3.35. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Paso 1. Ciclos 2 y 3. Fase $\theta_2 = \pi/2 + 2k\pi$.



**Figura 3.36. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos.
 Paso 1. Ciclos 2 y 3. Fase $\theta_3 = \pi + 2k\pi$.**



**Figura 3.37. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos.
 Paso 1. Ciclos 3 y 4. Fase $\theta_4 = 3\pi/2 + 2k\pi$.**

3.3.5. Periodicidad espacial de la simulación no estacionaria.

Comparando los perfiles de velocidad axial obtenidos en la simulación completa, para el ciclo de oscilación 3, (paso espacial 6 en las fases $\theta_1 = 0$ y $\theta_2 = \pi/2$; paso espacial 3 en las fases $\theta_3 = \pi$ y $\theta_4 = 3\pi/2$) con los obtenidos en la simulación periódica, para el ciclo de oscilación 2, se concluye que la periodicidad espacial que se detecta con condiciones de contorno de carga y descarga de fluido en un dominio computacional de **8 pasos** es reproducida con exactitud con condiciones de contorno periódicas en un dominio computacional de **1 paso**, tanto en la simulación estacionaria (véase el Apartado 3.3.3) como en la simulación no estacionaria (véanse los apartados siguientes).

3.3.5.1. Fase $\theta_1 = 0$.

El error que se comete es inferior al 0,3 % en el eje (Figura 3.38), inferior al 1 % en la sección transversal equidistante entre discos (Figura 3.39) e inferior al 0,2 % en la sección transversal del disco (Figura 3.40).

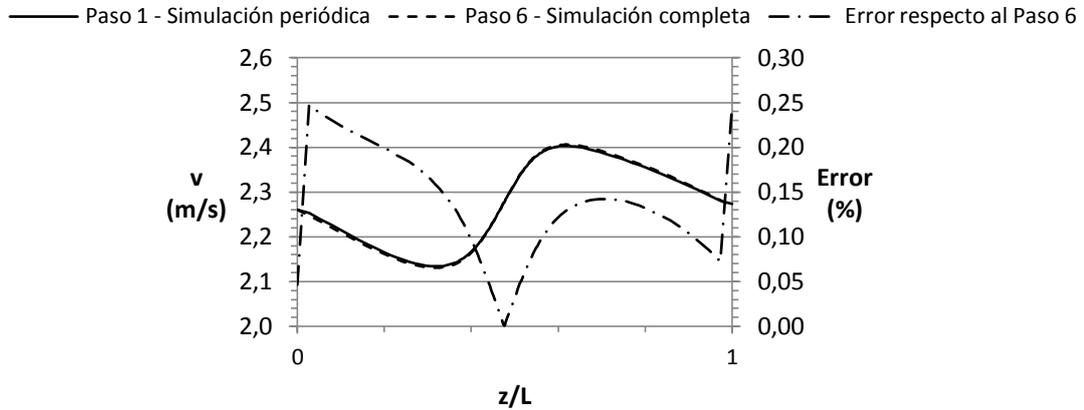


Figura 3.38. Perfil de velocidad axial en el eje. Comparación entre simulación no estacionaria periódica y simulación completa. Fase $\theta_1 = 0$.

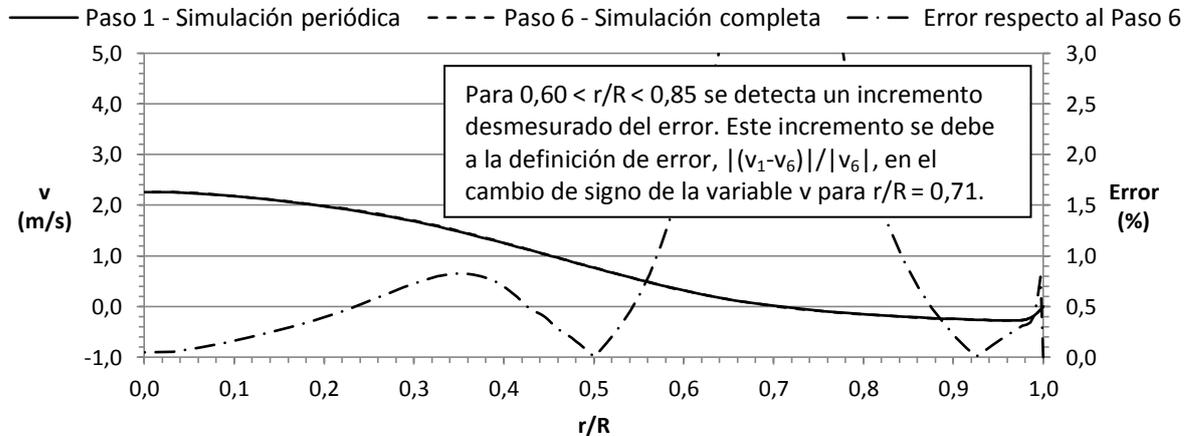


Figura 3.39. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Comparación entre simulación no estacionaria periódica y simulación completa. Fase $\theta_1 = 0$.

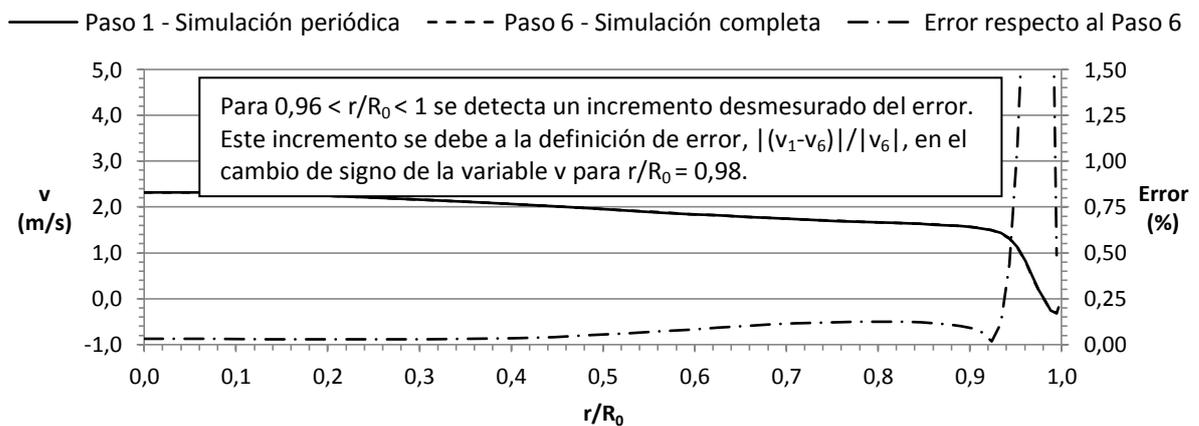


Figura 3.40. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Comparación entre simulación no estacionaria periódica y simulación completa. Fase $\theta_1 = 0$.

3.3.5.2. Fases $\theta_2 = \pi/2$, $\theta_3 = \pi$ y $\theta_4 = 3\pi/2$.

La igualdad entre los perfiles de velocidad axial de las simulaciones completa y periódica que se comprueba en el apartado anterior para la fase $\theta_1 = 0$ se obtiene también para el resto de las fases (Figuras 3.41, 3.42 y 3.43).

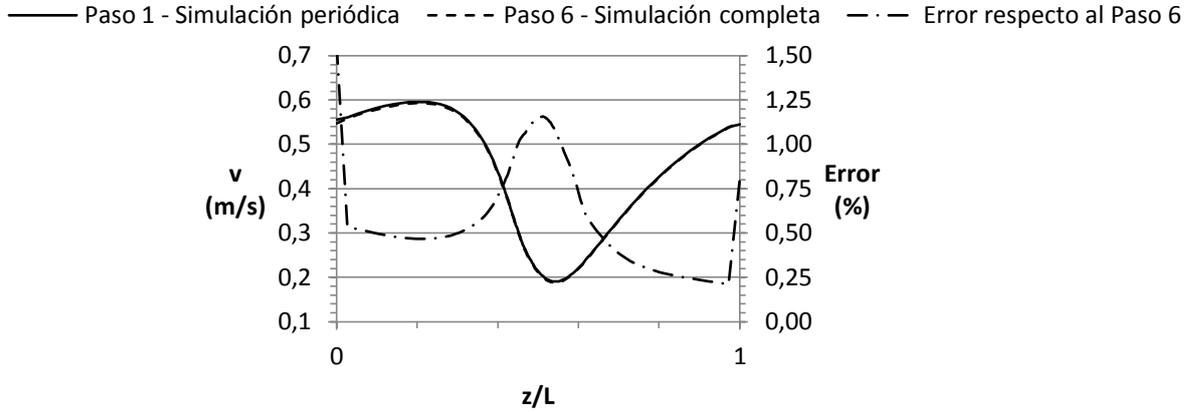


Figura 3.41. Perfil de velocidad axial en el eje. Comparación entre simulación estacionaria periódica y simulación completa. Fase $\theta_2 = \pi/2$.

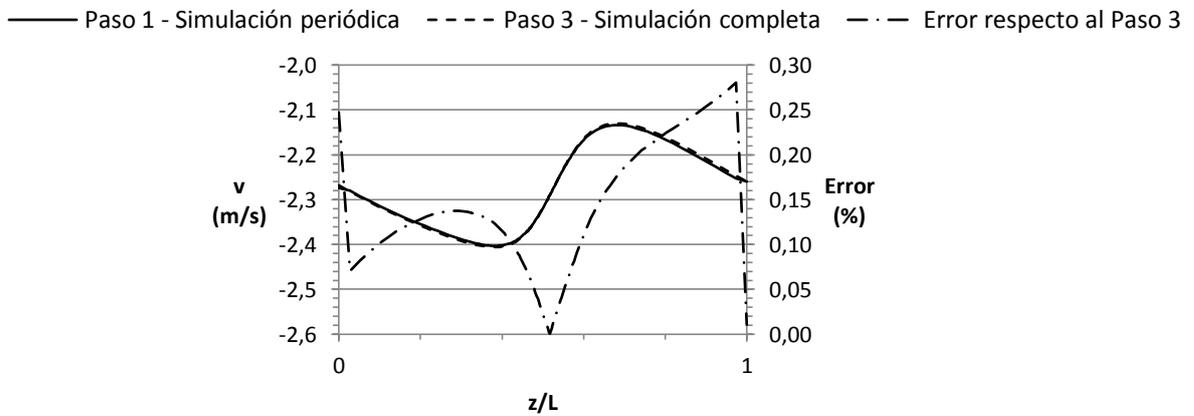


Figura 3.42. Perfil de velocidad axial en el eje. Comparación entre simulación estacionaria periódica y simulación completa. Fase $\theta_3 = \pi$.

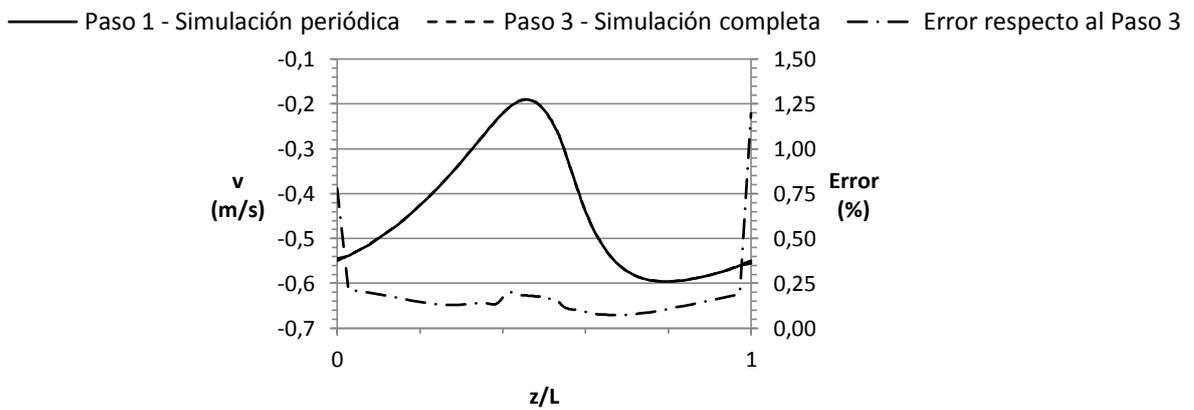


Figura 3.43. Perfil de velocidad axial en el eje. Comparación entre simulación estacionaria periódica y simulación completa. Fase $\theta_4 = 3\pi/2$.

3.3.6. Conclusiones del análisis de periodicidad.

Del análisis de periodicidad espacial y temporal realizado para las simulaciones completa y periódica del flujo oscilatorio en un *OBR* con el modelo 2D se concluye:

- La simulación completa estacionaria (con flujo en desarrollo) es espacialmente periódica a partir del paso espacial 6.
- La simulación completa no estacionaria (con flujo en desarrollo) es temporalmente periódica desde el tercer ciclo de oscilación y espacialmente periódica, a partir del paso espacial 6 para el semi-ciclo de gasto másico positivo, y a partir del paso espacial 3 para el semi-ciclo de gasto másico negativo.
- La simulación periódica estacionaria, espacialmente periódica por definición, reproduce con exactitud los resultados de la simulación completa estacionaria.
- La simulación periódica no estacionaria, espacialmente periódica por definición, es temporalmente periódica desde el segundo ciclo de oscilación y reproduce con exactitud los resultados de la simulación completa no estacionaria.
- Queda por tanto validada la metodología de simulación periódica 2D del flujo oscilatorio, que permite reducir el número de pasos espaciales del dominio computacional de 8 a 1, y el número de ciclos de oscilación de 3 a 2. Estas conclusiones son extensivas, no sólo a la condición de operación 3 evaluada en este capítulo (frecuencia de 2 Hz), sino también a las condiciones de operación 1 y 2 (frecuencias de 0,5 y 1 Hz respectivamente).

3.4. RESOLUCIÓN DEL CAMPO DE VELOCIDADES.

3.4.1. Presentación de resultados.

La solución espacial y temporalmente periódica del campo de velocidades se obtiene en la simulación periódica sobre el dominio computacional 2D de 1 paso, para la condición de operación 3 (frecuencia de 2 Hz). Los resultados presentados en este apartado son los siguientes:

- Perfiles radiales de velocidad axial (véase la *Figura 3.45*):
 - En la sección transversal equidistante entre discos: la componente radial de la velocidad es del orden de 50 veces inferior a la componente axial.
 - En la sección transversal del disco: la componente radial de la velocidad es del orden de 100 veces inferior a la componente axial.
- Contorno de velocidad entre dos discos consecutivos (véase la *Figura 3.46*).

Para presentar los resultados se seleccionan 8 fases como representativas de un ciclo completo de oscilación, formado por un total de 64 fases:

$$t_1/\tau = 0 ; t_2/\tau = 0,125 ; t_3/\tau = 0,25 ; t_4/\tau = 0,375 \\ t_5/\tau = 0,5 ; t_6/\tau = 0,625 ; t_7/\tau = 0,75 ; t_8/\tau = 0,875$$

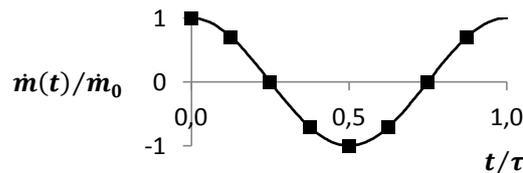


Figura 3.44. Fases de oscilación del campo de velocidades.



Figura 3.45. Obtención de los perfiles radiales de velocidad axial. Sección transversal equidistante entre discos (a) y sección transversal del disco (b).



Figura 3.46. Obtención del contorno de velocidad entre dos discos consecutivos.

3.4.2. Perfiles radiales de velocidad.

Nótese que los perfiles radiales de velocidad axial para el modelo 2D son obtenidos sobre un dominio computacional consistente en la mitad de la sección longitudinal de un paso espacial (véase el *Apartado 2.1.1*). Por lo tanto existe simetría axial en los perfiles, entre $0 < r/R < 1$ y $-1 < r/R < 0$. El análisis que se recoge en los siguientes apartados se centra en el rango $0 < r/R < 1$. Los resultados son adimensionalizados con la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$.

3.4.2.1. Sección transversal equidistante entre discos.

A continuación se presenta el análisis de los perfiles de velocidad axial obtenidos en la sección transversal equidistante entre discos para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$), y que se muestran en la *Figura 3.47*.

Los perfiles de velocidad axial tienen **forma parabólica** acusada en las fases previas y de inversión del gasto másico, es decir, para $t/\tau = [0, 0,125, 0,25]$ durante el semi-ciclo de gasto másico positivo, y para $t/\tau = [0,5, 0,625, 0,75]$ durante el semi-ciclo de gasto másico negativo. En estas fases se detecta la inversión del perfil de velocidad axial en las cercanías del conducto, en regiones que oscilan entre $0,7 < r/R < 1$ y $0,6 < r/R < 1$.

En las fases posteriores a la inversión del gasto másico $t/\tau = [0,375, 0,875]$ la forma parabólica existe pero no es tan acusada, y no aparece inversión del perfil de velocidad axial. A lo largo de todo el ciclo de oscilación se detecta la presencia de una estrecha capa límite en la pared del conducto, confinada aproximadamente en $0,98 < r/R < 1$.

- En la fase $t/\tau = 0$, que corresponde con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, la velocidad axial alcanza el valor de mayor magnitud a lo largo del ciclo de oscilación $v/u_0 = 6,5$ en el eje de simetría. El perfil es positivo en la región central del conducto hasta $r/R < 0,7$ y se produce inversión del perfil en las proximidades de la pared para $0,7 < r/R < 1$, con un mínimo de velocidad de $v/u_0 = -0,75$.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0,71$, el perfil de velocidad axial es positivo en el mismo intervalo que para $t/\tau = 0$, con una reducción del 30 % en el pico de velocidad máxima, que pasa de $v/u_0 = 6,5$ a $v/u_0 = 4,5$. La inversión del perfil se mantiene localizada en el mismo intervalo que en $t/\tau = 0$, siendo el incremento del pico de velocidad mínima igual de acusado, pasando de $v/u_0 = -0,75$ a $v/u_0 = -1$.
- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, el pico de velocidad máxima disminuye un 65 %, hasta $v/u_0 = 1,5$. Al contrario que en la fase anterior, el pico de velocidad negativa se reduce, pasando de valer $v/u_0 = -1$ a valer $v/u_0 = -0,75$. La fuerte inercia del flujo es la responsable de que no haya en esta fase inversión completa del perfil, pese a existir gasto másico nulo, aunque sí se amplía la región de inversión respecto a $t/\tau = 0$ y $t/\tau = 0,125$, de $0,7 < r/R < 1$ a $0,6 < r/R < 1$.

- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -0,71$, se observa ya la inversión completa del perfil a lo largo de todo el conducto y se hace patente la existencia de un retraso, debido a la inercia del flujo, entre la fase de inversión efectiva ($0,25 < t/\tau < 0,375$) y la fase de inversión teórica ($t/\tau = 0,25$). Respecto a la fase anterior, se detecta una cierta simetría en la forma del perfil de velocidad respecto al valor $v/u_0 = 0$ en el entorno de $0 < r/R < 0,7$, con un descenso brusco del 230 % del pico de velocidad, que pasa de $v/u_0 = 1,5$ a $v/u_0 = -2$.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -1$, se aprecia de nuevo un importante incremento en el valor del pico de velocidad respecto a $t/\tau = 0,375$, de $v/u_0 = -2$ a $v/u_0 = -6,5$ (de nuevo en torno al 230 %). Aparecen regiones de recirculación en las proximidades de la pared para $0,7 < r/R < 1$ con un máximo de velocidad de $v/u_0 = 0,75$.
- El análisis en el resto de fases es análogo.

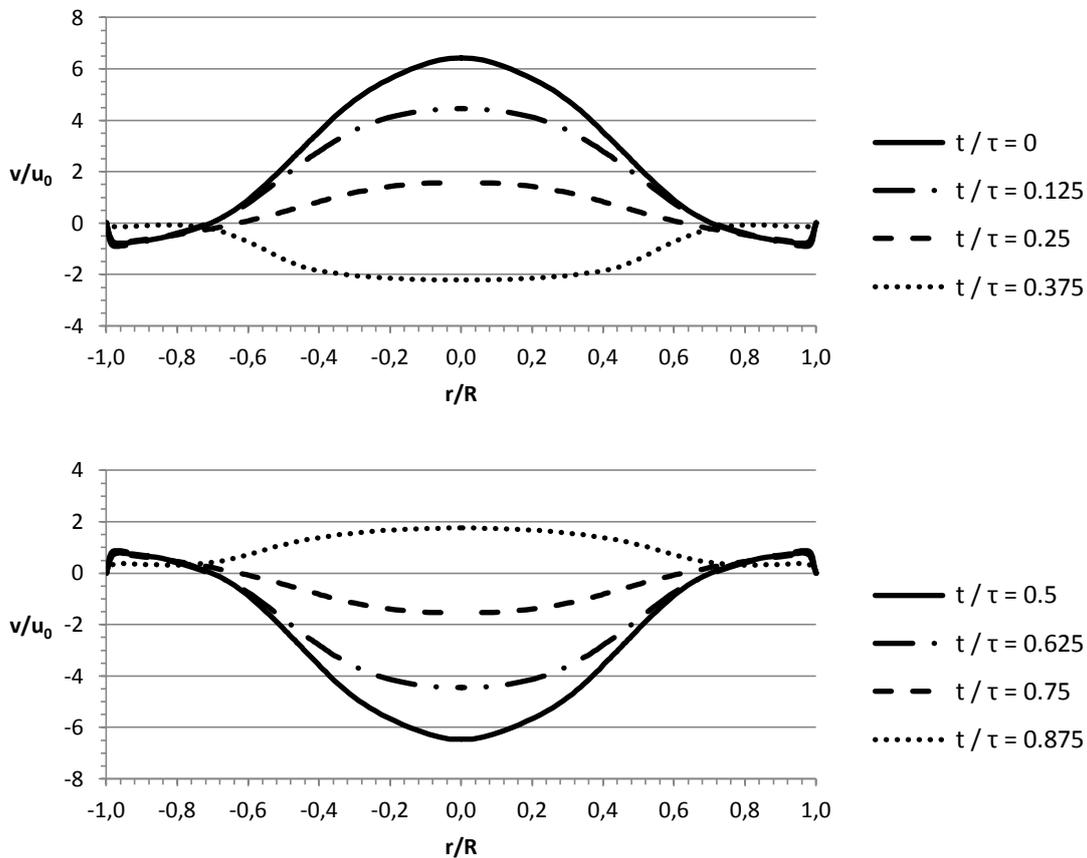


Figura 3.47. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal equidistante entre discos. Condición de operación 3: $f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$.

3.4.2.2. Sección transversal del disco.

A continuación se presenta el análisis de los perfiles de velocidad axial obtenidos en la sección transversal del disco para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$), y que se muestran en la *Figura 3.48*.

A diferencia de lo que ocurre en la sección transversal equidistante entre dos discos consecutivos, los perfiles de velocidad axial en la sección transversal del disco sólo tienen **forma parabólica** en las fases en las que se el gasto másico se hace nulo, es decir, para $t/\tau = [0,25 \ 0,75]$.

En las fases previas a la inversión del gasto, es decir, para $t/\tau = [0 \ 0,125]$ durante el semi-ciclo de gasto másico positivo, y para $t/\tau = [0,5 \ 0,625]$ durante el semi-ciclo de gasto másico negativo, la forma del perfil se caracteriza por un claro **cambio de pendiente** en $r/R_0 = 0,95$, más acentuado en las fases de gasto másico máximo y mínimo, para $t/\tau = [0 \ 0,5]$. En las fases posteriores a la inversión del gasto másico $t/\tau = [0,375 \ 0,875]$ el cambio de pendiente también existe, pero con la particularidad de que el signo de la misma cambia en $r/R_0 = 0,85$.

El hueco del disco por el que el flujo es forzado a pasar es muy estrecho, por lo que la componente axial de la velocidad es predominante, siendo la componente radial del orden de 100 veces menor para las fases de mayor gasto másico $t/\tau = [0 \ 0,5]$. Se trata por tanto de un perfil prácticamente unidimensional, ya que no hay lugar para la existencia de vórtices o recirculaciones.

Se detecta de nuevo la presencia de una estrecha capa límite en la pared del conducto, confinada aproximadamente en $0,95 < r/R_0 < 1$, aunque esta capa no es directamente apreciable en las fases $t/\tau = 0,125$ y $t/\tau = 0,625$ y su espesor es más variable que en la sección transversal equidistante entre discos. Debido también al reducido espesor del disco, la distancia geométrica no es suficiente para que la capa límite se desarrolle (el análisis local de esta capa límite se presenta en el *Apartado 3.4.5*). En consecuencia, el esfuerzo cortante en esta región es muy elevado; esta característica podría desaconsejar el empleo de discos insertados en reactores de flujo oscilatorio con reactivos biológicos, en beneficio de elementos que introducen menor esfuerzo cortante, como por ejemplo muelles helicoidales.

- En la fase $t/\tau = 0$, que corresponde con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, la velocidad axial alcanza el valor de mayor magnitud a lo largo del ciclo de oscilación $v/u_0 = 6,5$ en el eje de simetría (este valor máximo coincide con el detectado en la sección transversal equidistante entre discos). El perfil es positivo prácticamente en toda la región del hueco del disco, produciéndose inversión sólo en las proximidades de la pared para $0,98 < r/R_0 < 1$, con un mínimo de velocidad de $v/u_0 = -1$.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0,71$, el perfil de velocidad axial es positivo en toda su extensión, a diferencia de lo que ocurre en la fase precedente de gasto másico máximo. Se necesita por tanto un período de tiempo $t/\tau < 0,125$ hasta que la inercia del flujo vence la recirculación inducida en el disco. El pico de velocidad máxima experimenta una reducción del 30 % respecto a $t/\tau = 0$, pasando de valer $v/u_0 = 6,5$ a valer $v/u_0 = 4,5$, al igual que en la sección equidistante entre discos.
- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, sí aparece una región de inversión en $0,75 < r/R_0 < 1$, de extensión similar a la que aparece simultáneamente en la sección equidistante entre discos. De nuevo, la fuerte inercia del flujo es la responsable de que no haya inversión completa del perfil, pese a existir gasto másico nulo. El pico de velocidad máxima disminuye un 85 %, hasta $v/u_0 = 0,5$, frente al 65 % que se experimenta en la sección equidistante entre discos. El pico de velocidad negativa que aparece tiene un valor de $v/u_0 = -0,5$.

- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -0,71$, se observa una fuerte inversión del perfil, no completa a lo largo de todo el hueco ya que aparece en $0,95 < r/R_0 < 1$, y se hace patente la existencia de un retraso entre la fase de inversión efectiva ($0,25 < t/\tau < 0,375$) y la fase de inversión teórica ($t/\tau = 0,25$) debido a la inercia del flujo. A diferencia de cualquier otro perfil analizado, en esta fase el pico de velocidad no se alcanza en el eje de simetría, existiendo una aceleración del flujo notable en $r/R_0 = 0,85$ respecto al resto del perfil. Este pico de velocidad varía bruscamente de $v/u_0 = 0,5$ a $v/u_0 = -4,5$, mientras que la recirculación pasa de valer $v/u_0 = -0,5$ a valer $v/u_0 = 0,5$.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -1$, se aprecia un incremento del 45 % en el valor del pico de velocidad mínima respecto a $t/\tau = 0,375$, de $v/u_0 = -4,5$ a $v/u_0 = -6,5$. En las regiones de recirculación próximas al disco, el pico de velocidad pasa de $v/u_0 = 0,5$ a $v/u_0 = 1$.
- El análisis en el resto de fases es análogo.

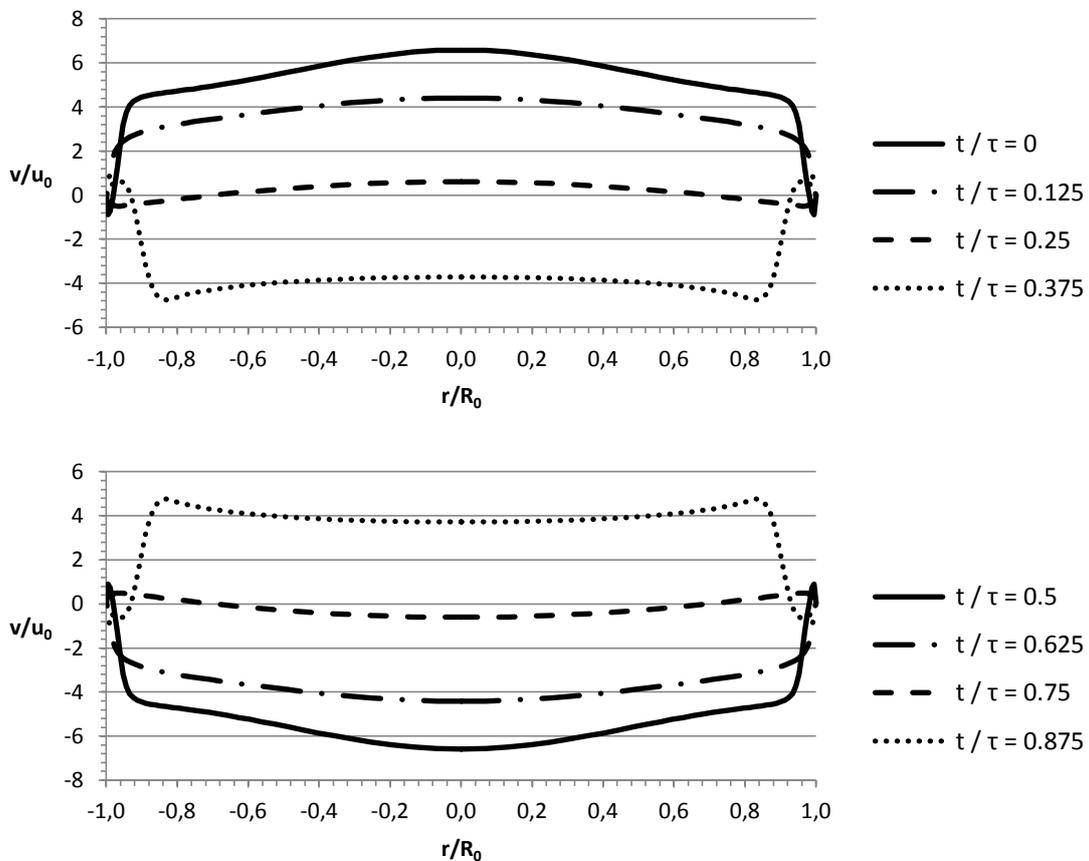


Figura 3.48. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal del disco. Condición de operación 3: $f = 2$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

3.4.3. Contornos de velocidad.

En la *Figura 3.49* se muestra la evolución del contorno de velocidad que se obtiene para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$) en la región del dominio computacional que se extiende entre dos discos consecutivos.

- En la fase $t/\tau = 0$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, se observa la existencia de una región de alta velocidad con componente axial predominante, que se extiende entre dos discos consecutivos, ocupando todo el volumen que correspondería a un cilindro ficticio de radio igual al radio interior del disco. No existe mezclado radial alguno entre esta región central y la región periférica, formada por una gran burbuja de recirculación que cubre todo el volumen libre hasta la pared del conducto. Dentro de esta burbuja aparecen, a su vez, una recirculación importante en la parte central del tanque ($l/L = 0,48$) y otra de menor tamaño aguas abajo de la misma ($l/L = 0,86$). En las proximidades del contacto de los discos con la pared del conducto, aguas abajo y aguas arriba del disco, se detecta la presencia de sendos vórtices residuales que giran en sentido contrario al resto de recirculaciones (el vórtice aguas arriba no es visible en la figura por su pequeño tamaño).
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0,71$, se aprecia que la región central de alta velocidad está más definida que en la fase anterior, es decir, la región de velocidad intermedia que la separa de la burbuja periférica es más estrecha. Se observa que la pequeña inversión de flujo que existe en la pared axial del disco para la fase $t/\tau = 0$ desaparece, lo que corrobora la necesidad de un período de tiempo $t/\tau < 0,125$ hasta que la inercia del flujo vence esta recirculación, hecho reportado ya en el apartado anterior. Las dos recirculaciones internas de la burbuja periférica se acercan entre sí, desplazándose la primera aguas abajo hasta $l/L = 0,56$ y la segunda aguas arriba hasta $l/L = 0,83$.
- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, la burbuja periférica se expande visiblemente y comprime la región central de alta velocidad, sin llegar a promover sin embargo la mezcla radial entre ambas regiones. La primera recirculación aguas abajo se desplaza más claramente hacia la segunda recirculación, uniéndose ambas finalmente en $l/L = 0,79$. Los vórtices residuales se mantienen a lo largo de todo el ciclo de oscilación en las proximidades del contacto de los discos con la pared del conducto, sin interaccionar con el resto del volumen fluido. Pese a tener gasto másico nulo, no se produce aún la inversión debido a la fuerte inercia del flujo.
- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -0,71$, es cuando se evidencia la inversión efectiva del flujo, plasmándose claramente la formación de la región central de alta velocidad. Esta región, en su avance desde un disco hacia el siguiente, desplaza la burbuja periférica que se ve en la fase $t/\tau = 0,25$ en la dirección del flujo hasta frenar la rotación de la burbuja y obligar al volumen encerrado dentro a atravesar el hueco del disco, promoviendo así un fuerte mezclado radial. Simultáneamente a este avance, se crea otra burbuja de recirculación que gira en sentido opuesto.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -1$, esta nueva burbuja crece a la vez que se desarrolla la región de alta velocidad hasta ocupar ambas todo el volumen, al igual que en la fase $t/\tau = 0$. El análisis en el resto de fases es análogo.

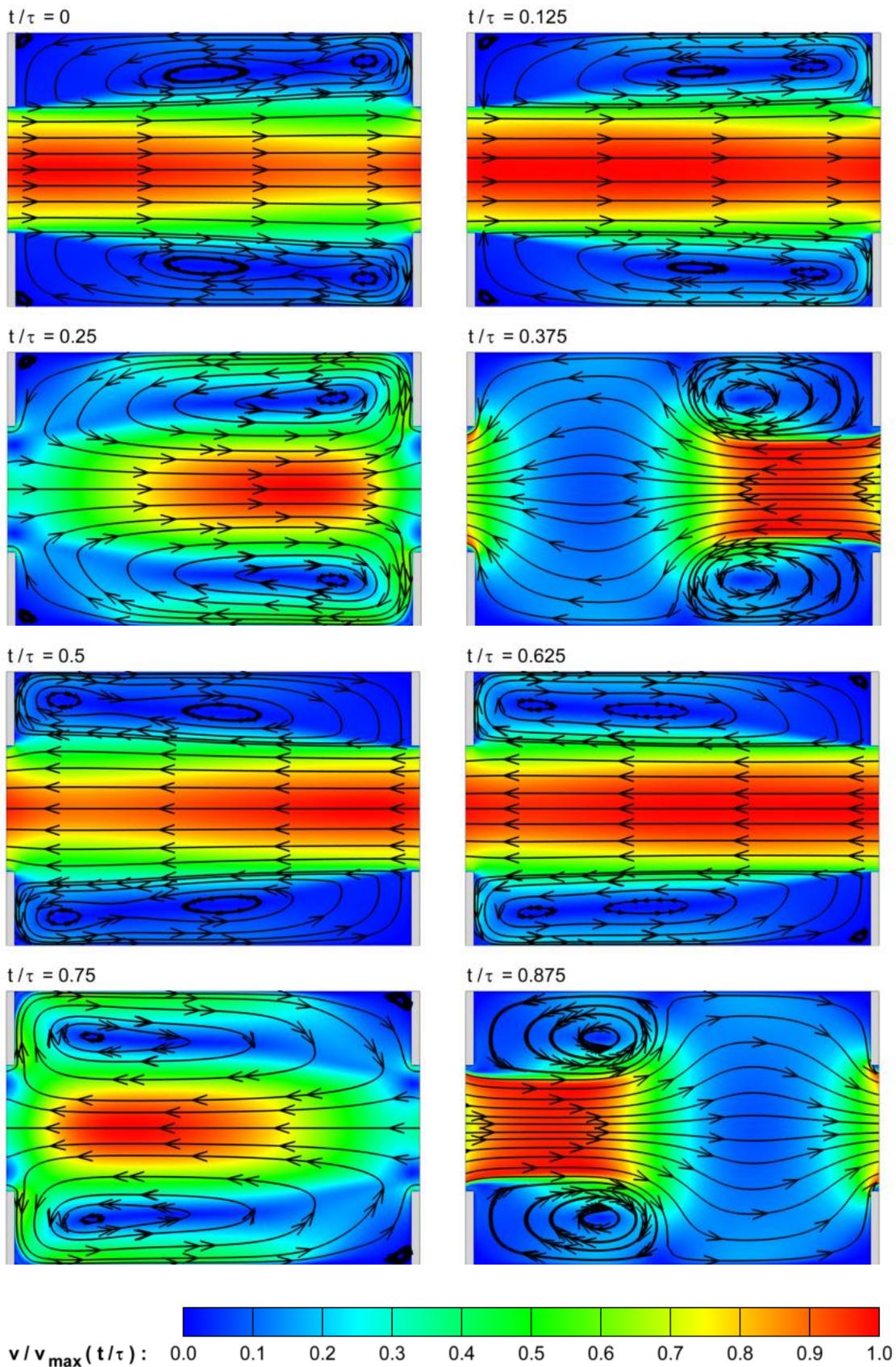


Figura 3.49. Contorno de velocidad. Condición de operación 3: $f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$.

Nótese que el contorno de velocidad de cada fase t/τ ha sido adimensionalizado con la correspondiente velocidad local máxima $v_{max}(t/\tau)$ para identificar fácilmente las regiones de alta y baja velocidad. El análisis del contorno de velocidad recogido se complementa con un **vídeo** en el que se muestra la evolución temporal del contorno de velocidad a lo largo de 6 ciclos de oscilación, para la solución espacial y temporalmente periódica (Vídeo 1. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz).

3.4.4. Influencia del número de Reynolds oscilatorio.

Una vez analizados en profundidad los resultados obtenidos con la condición de operación 3 (véanse los *Apartados 3.4.2 y 3.4.3*), se extiende el análisis al resto de condiciones de operación simuladas. Como se recoge en la *Tabla 3.2*, la amplitud de oscilación x_0 se mantiene constante (en consecuencia el número de Strouhal St es fijo) y se varía la frecuencia de oscilación f , siendo la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$. Se estudia por lo tanto la influencia del número Reynolds oscilatorio Re_0 sobre los perfiles radiales de velocidad axial.

$$Re_0 = \frac{2\pi f x_0 \rho D}{\mu} \quad (\text{ec.3.11})$$

$$St = \frac{D}{4\pi x_0} \quad (\text{ec.3.12})$$

Condición de operación	x_0 (mm)	f (Hz)	u_0 (m/s)	Re_0	St
1	28	0,5	0,088	2.189	0,071
2	28	1	0,176	4.377	0,071
3	28	2	0,352	8.754	0,071

Tabla 3.2. Condiciones de operación del reactor de flujo oscilatorio.

Tanto para la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 3.50*) como para la sección transversal del disco (*Figura 3.51*), la reducción de la frecuencia de oscilación se traduce en una disminución proporcional en la magnitud de la velocidad axial sobre el perfil radial. Al adimensionalizar la velocidad axial con la velocidad de oscilación correspondiente a cada frecuencia, se pone de manifiesto que la forma de los perfiles es perfectamente coincidente en ambas secciones transversales (*Figuras 3.52 y 3.53*) a lo largo de todo el ciclo de oscilación. Un estudio análogo centrado en los contornos de velocidad ofrece el mismo resultado, que se corrobora con la visualización conjunta de los tres **vídeos** en los que se muestra las evoluciones temporales de los contornos de velocidad a lo largo de 6 ciclos de oscilación, para la solución espacial y temporalmente periódica de cada una de las tres condiciones de operación:

- Vídeo 1. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz.
- Vídeo 2. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 1 Hz.
- Vídeo 3. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 0,5 Hz.

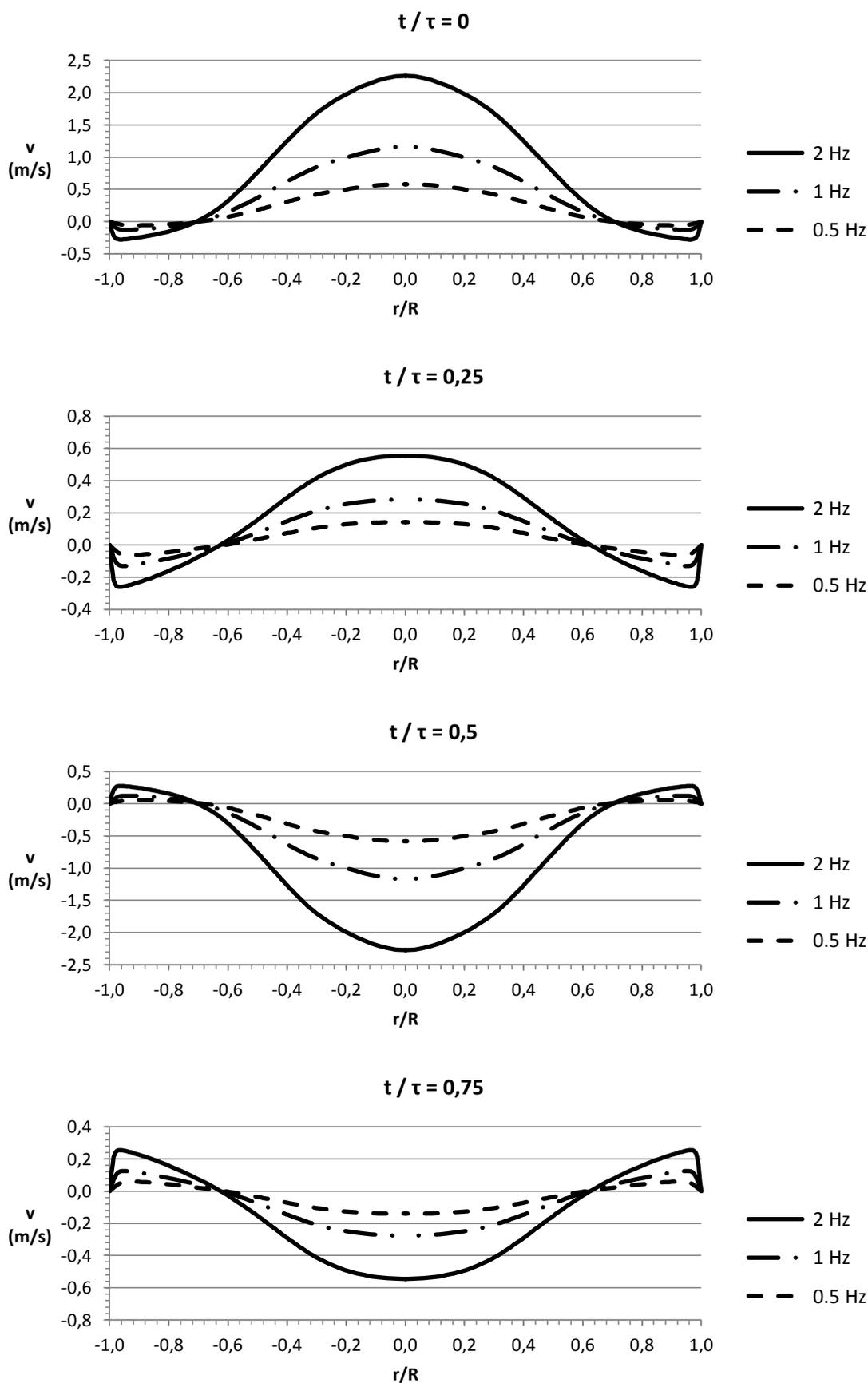


Figura 3.50. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos.
 $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

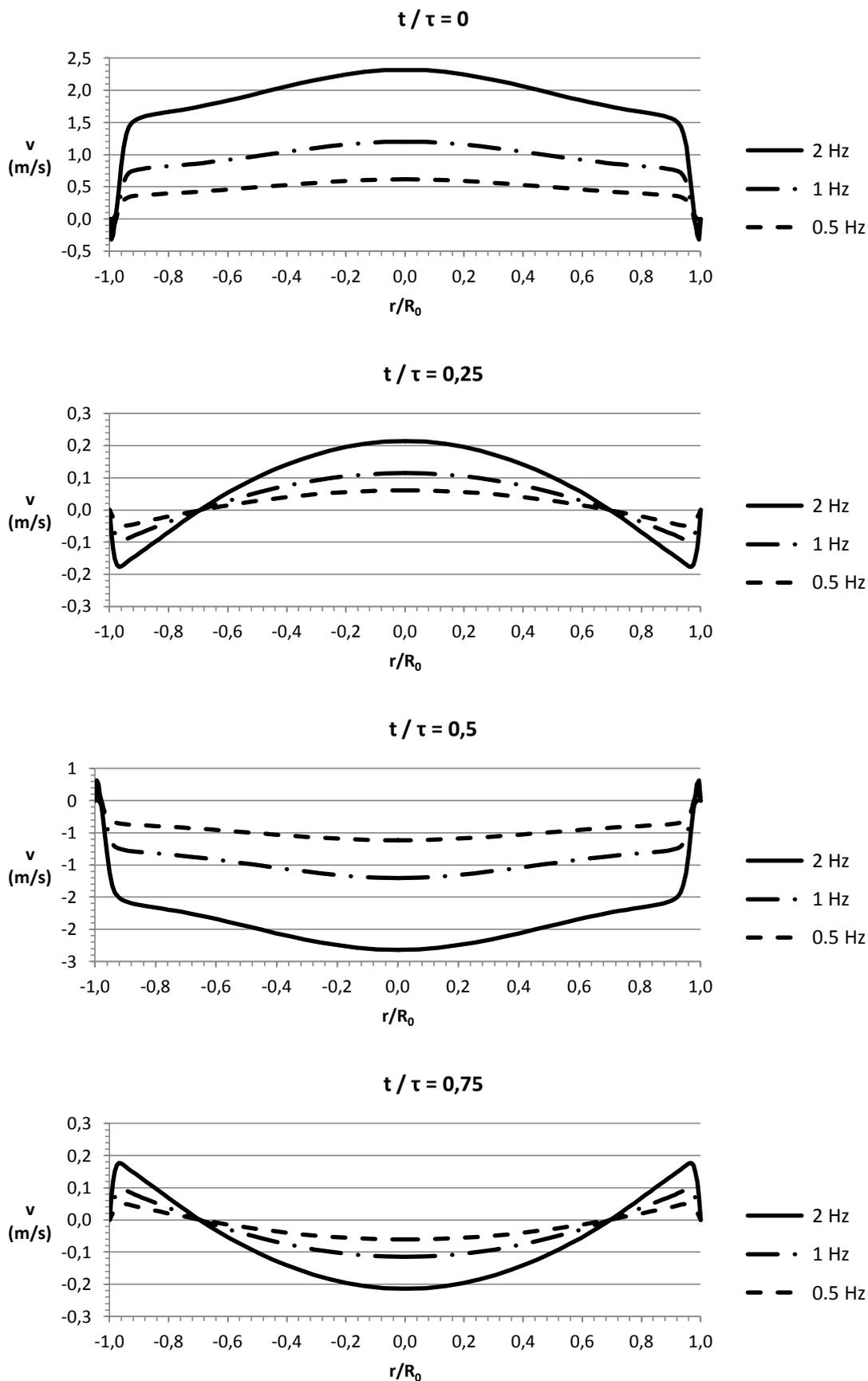


Figura 3.51. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco.
 $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

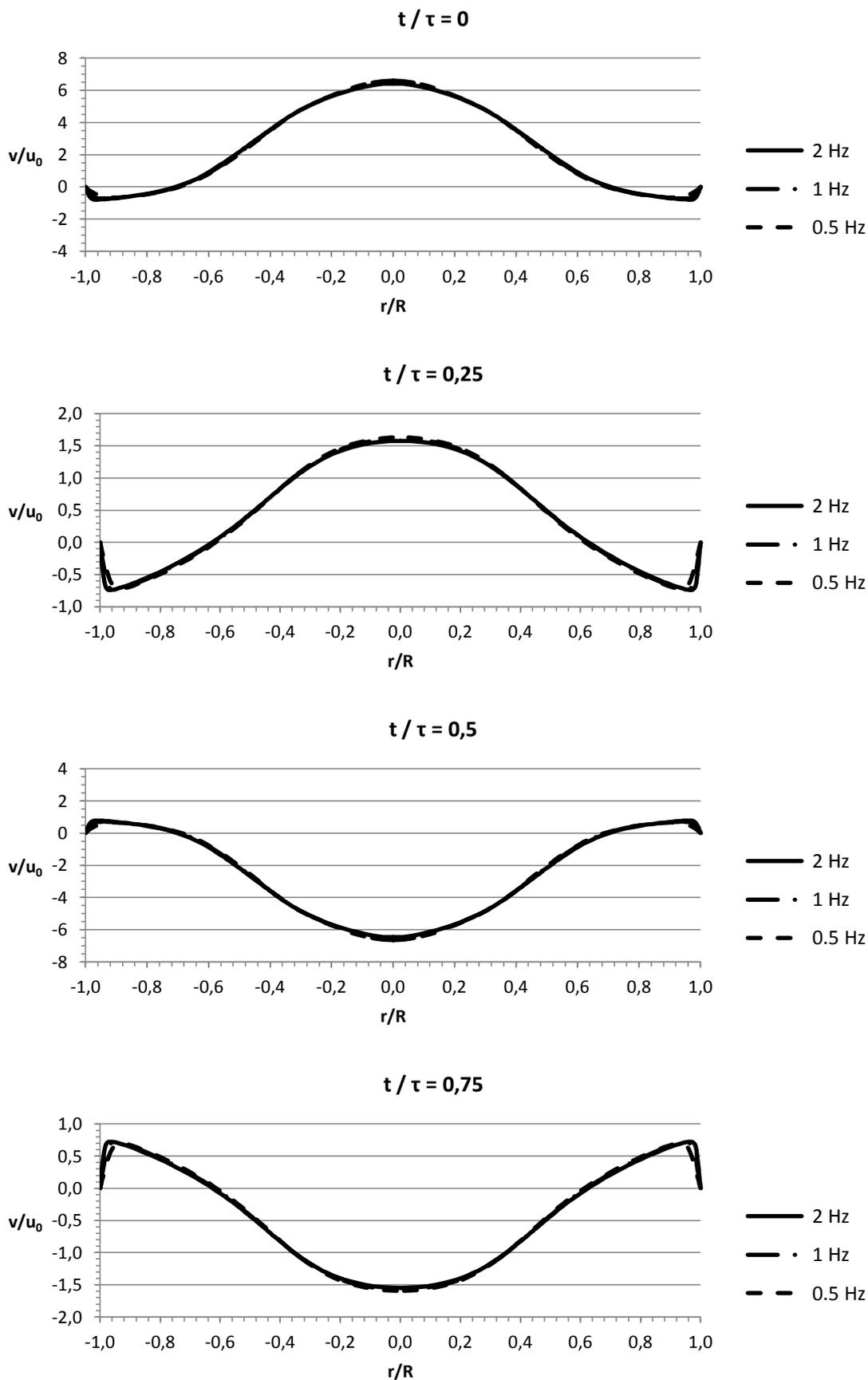


Figura 3.52. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal equidistante entre discos. $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

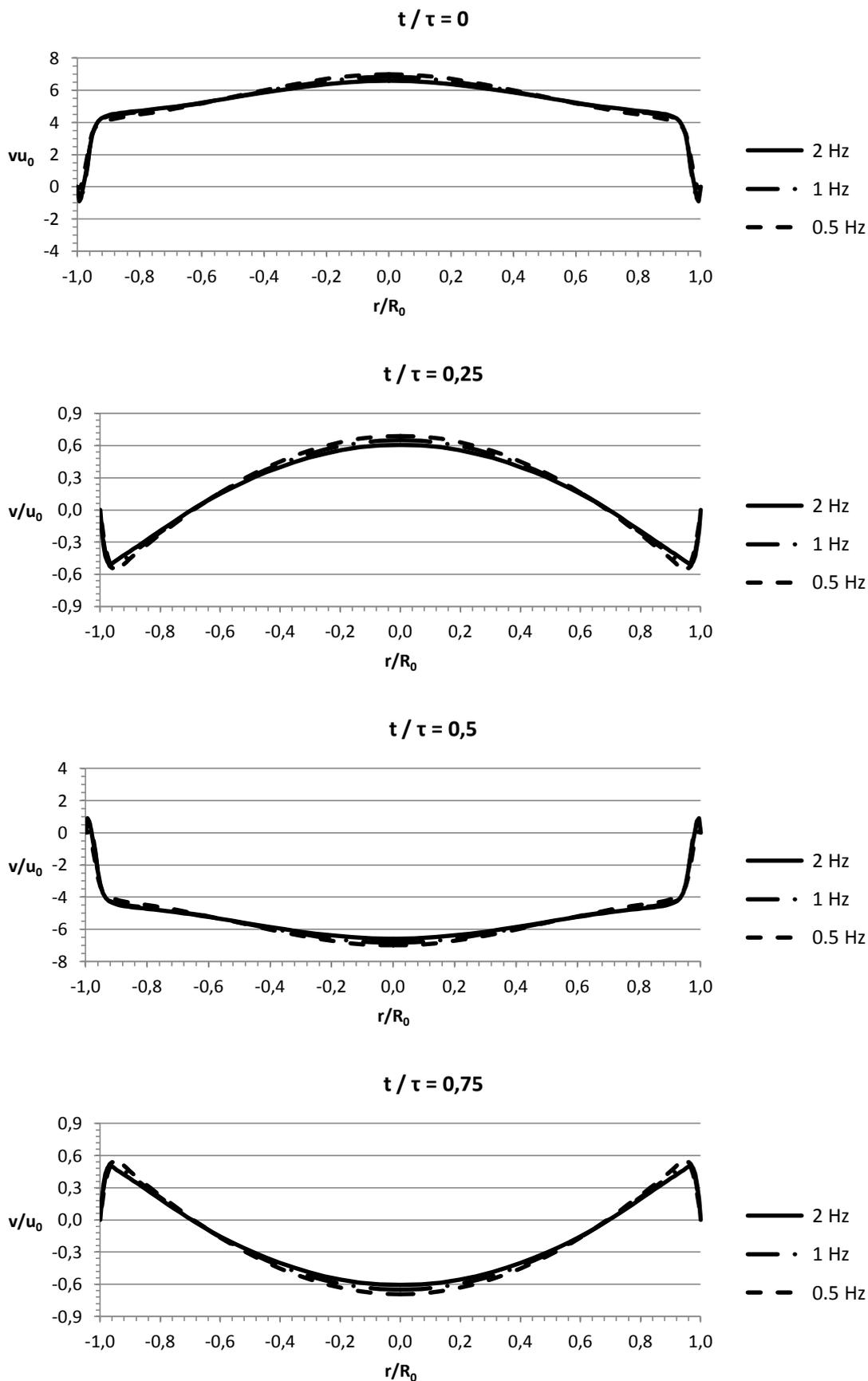


Figura 3.53. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal del disco.
 $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

Se concluye por lo tanto que el parámetro predominante en condiciones de elevado número de Reynolds oscilatorio y reducido número de Strouhal es el Strouhal, siendo inexistente la influencia del Reynolds oscilatorio sobre las estructuras de mezcla que se forman en el interior del reactor de flujo oscilatorio. Nótese que estas condiciones de operación no han sido reproducidas por ningún otro estudio numérico del flujo oscilatorio en *OBR* (véase un resumen de dichos estudios en la *Tabla 1.3* del *Capítulo 1*).

Se observa además que el mecanismo de mezcla descrito en el *Apartado 3.4.3*, válido para las tres condiciones de operación simuladas en el presente proyecto, es muy diferente al reportado por la bibliografía [2, 5, 38, 39, 46, 48] para las condiciones de bajo Reynolds oscilatorio o Strouhal próximo a la unidad. En casos con alto número de Strouhal, las estructuras vorticales que viajan aguas abajo durante un semi-ciclo, impactan con las estructuras vorticales que aparecen en el semi-ciclo siguiente, induciendo fenómenos de mezclado radial muy intensos. Sin embargo, con bajos números de Strouhal, esta interacción desaparece, lo que hace cuestionar la utilidad de este régimen de funcionamiento para propósitos de mezclado.

3.4.5. Análisis local de la capa límite en el hueco del disco.

Se define la **capa límite** como la región fluida en la que el movimiento del fluido es perturbado por la presencia de un sólido con el que está en contacto, pudiendo ser ésta de naturaleza laminar o turbulenta. En el caso de un flujo sobre placa plana, la capa límite se detecta identificando la distancia a la pared δ a partir de la cual la velocidad es mayor que $0,99 \cdot U_{\infty}$, siendo U_{∞} la velocidad del flujo no perturbado (véase la *Figura 3.54*).

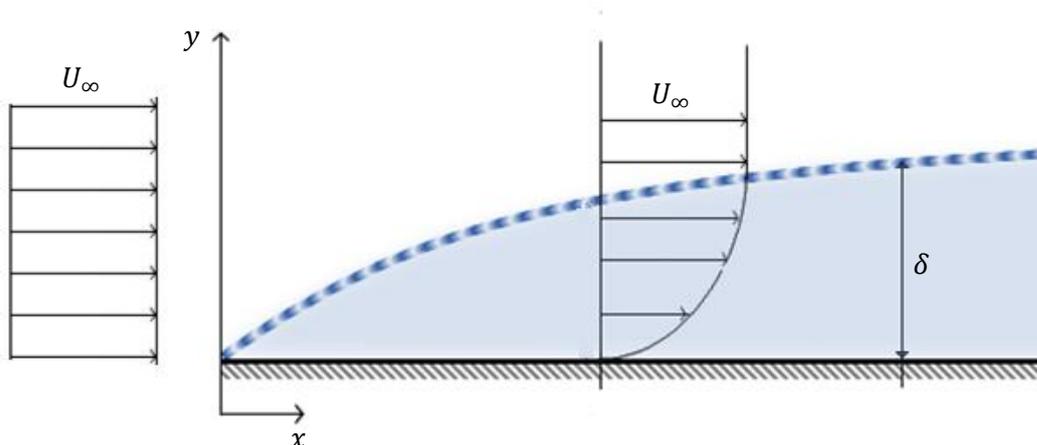


Figura 3.54. Definición de la capa límite en flujo sobre placa plana.

Debido al aspecto cambiante que presenta el perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco a lo largo del ciclo de oscilación, que alterna formas parabólicas y cambios de pendiente, resulta complicado extrapolar la anterior definición de capa límite al flujo oscilatorio en un *OBR*. En este apartado se presenta una introducción al análisis local de la capa límite en el hueco del disco, con el que se pretende dimensionar aproximadamente el espesor de dicha capa a lo largo de un ciclo de oscilación. Para ello se realiza una ampliación de las figuras del *Apartado 3.4.2.2* en el entorno de la pared del disco (véase la *Figura 3.55*), cuyo análisis se presenta a continuación.

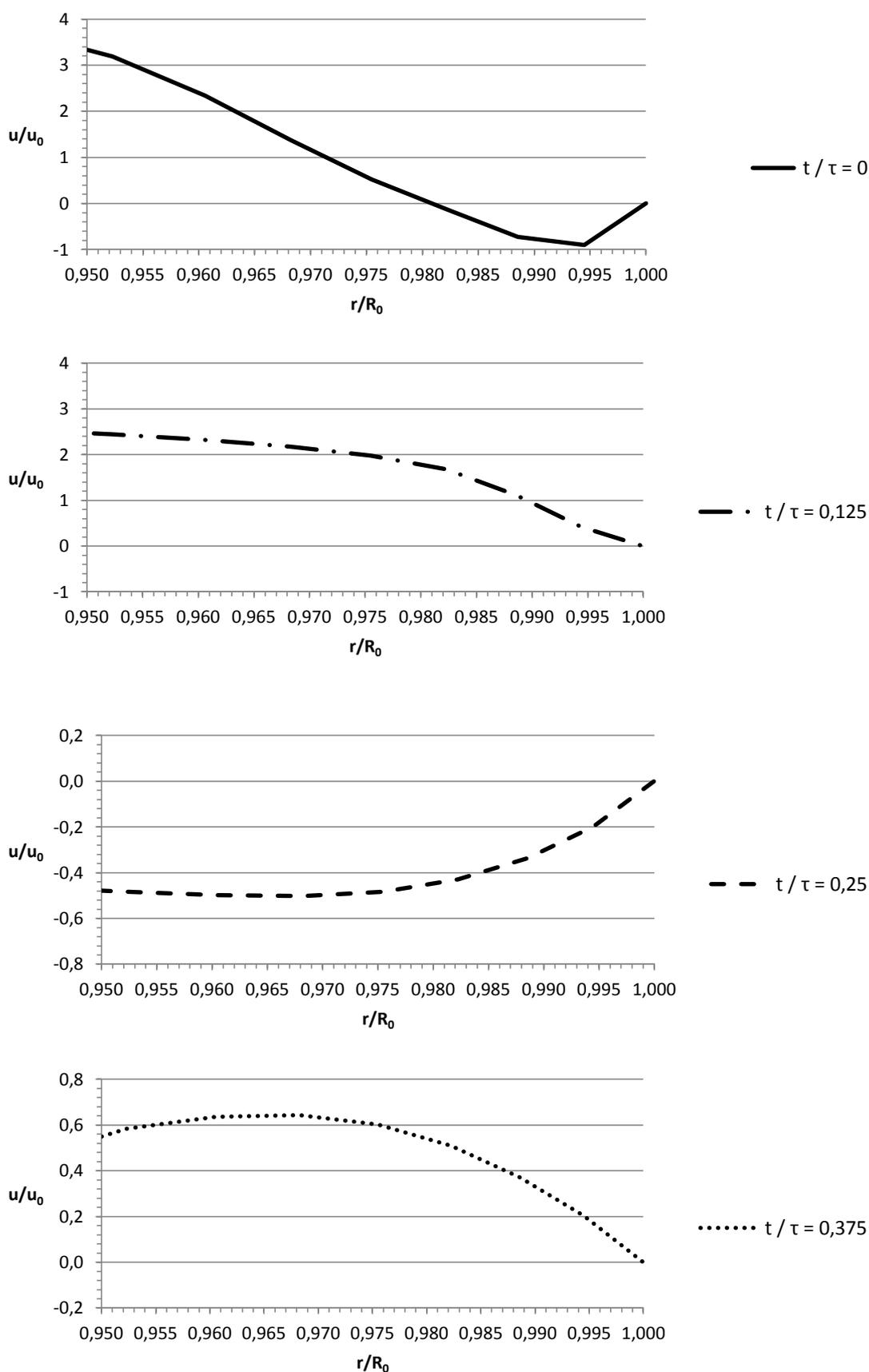
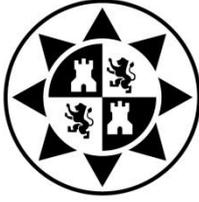


Figura 3.55. Capa límite en la sección transversal del disco. $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

- En la fase $t/\tau = 0$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, la capa límite se presenta en el intervalo $0,988 < r/R_0 < 1$, lo que corresponde con un espesor de 0,069 mm. Esta región queda definida por un total de 2 nodos dentro del mallado del dominio computacional.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0,71$, la capa límite se presenta en el intervalo $0,988 < r/R_0 < 1$, lo que corresponde con un espesor de 0,069 mm. Esta región queda definida por un total de 2 nodos dentro del mallado del dominio computacional.
- En la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, la capa límite se presenta en el intervalo $0,975 < r/R_0 < 1$, lo que corresponde con un espesor de 0,144 mm. Esta región queda definida por un total de 4 nodos dentro del mallado del dominio computacional.
- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -0,71$, la capa límite se presenta en el intervalo $0,968 < r/R_0 < 1$, lo que corresponde con un espesor de 0,184 mm. Esta región queda definida por un total de 5 nodos dentro del mallado del dominio computacional.
- El análisis en el resto de fases es análogo.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

BLOQUE I. OSCILACIÓN DEL FLUIDO.

CAPÍTULO 4. ESTUDIO DE LA MALLA EN EL MODELO 3D.

4.1. DEFINICIÓN DEL DOMINIO COMPUTACIONAL.

4.1.1. Paso espacial.

Como se describe en *Apartado 2.1.1 del Capítulo 2*, la geometría del reactor de flujo oscilatorio del problema a resolver está formada por un conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25 \text{ mm}$, en el que se insertan, equiespaciados una distancia $L = 37,5 \text{ mm}$, una serie de discos con orificio, de diámetro interior $D_0 = 11,5$ y espesor $e = 1,5$. La periodicidad geométrica que existe en dirección longitudinal permite definir un paso espacial como la región de conducto de longitud L centrada en torno a uno de los discos insertados. El criterio de diseño es $L = 1,5D$. De esta manera, el dominio computacional 3D coincide con un paso espacial.

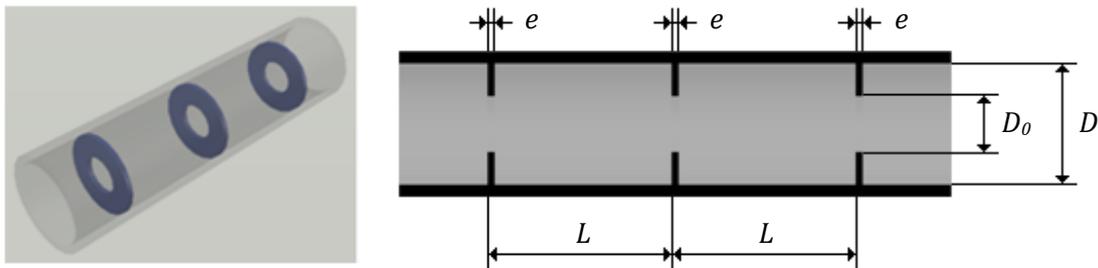


Figura 4.1. Geometría del reactor de flujo oscilatorio.

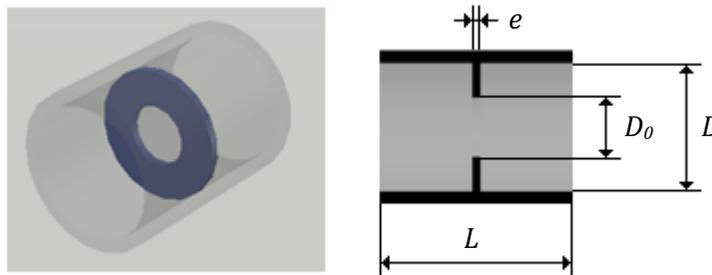


Figura 4.2. Paso espacial en el reactor de flujo oscilatorio.

4.1.2. Construcción del mallado 3D en GAMBIT.

Puesto que el dominio computacional 3D se genera a partir del dominio computacional 2D por revolución alrededor de su eje de simetría, podría considerarse a priori construir el mallado del modelo 3D por **revolución directa** del mallado 2D. Para ello se trasladaría y copiaría angularmente el dominio 2D un número de veces determinado, creando así un volumen.

Supóngase que se desea generar el mallado 3D repitiendo el mallado 2D cada 90° , de manera que el volumen estaría compuesto por un total de 40 planos longitudinales que habría que unir convenientemente para generar un volumen. En un cuarto de volumen se tendrían 11 planos longitudinales, tal y como se muestra en la *Figura 4.3*.

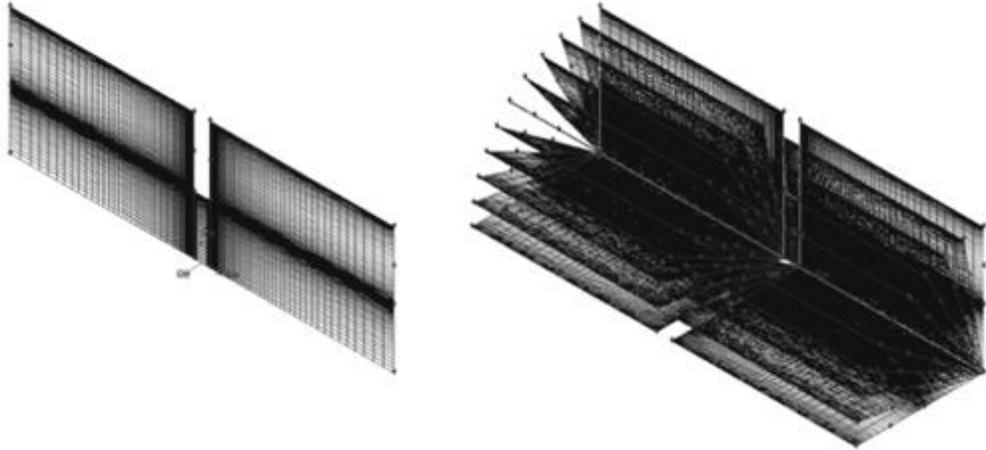


Figura 4.3. Generación del mallado 3D por revolución directa del mallado 2D.

El inconveniente de proceder así es que, a la hora de mallar las caras transversales que se generan, no se puede mantener la distribución de los nodos cerca del eje de simetría: el **tamaño de las celdas** en esa zona es **excesivamente reducido** (véase la *Figura 4.4*), lo que daría problemas de convergencia. Por lo tanto, la obtención del mallado 3D por revolución directa del mallado 2D no es viable.

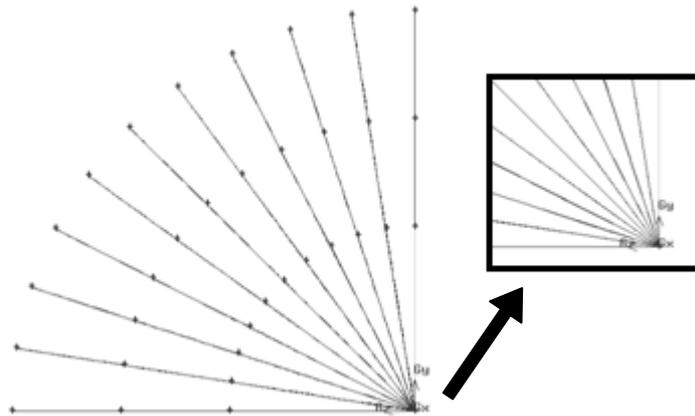


Figura 4.4. Tamaño reducido de las celdas en el entorno del eje de simetría.

Es necesario desarrollar una metodología de construcción de mallado 3D que evite este problema de tamaño reducido de celdas en el eje, y que permita además reproducir la distribución espacial de nodos de la malla estructurada 2D previamente desarrollada, aprovechando así los resultados del estudio de sensibilidad de malla del modelo 2D para simplificar la construcción de la malla del modelo 3D. Las características de esta malla 2D se describen en los *Apartados 2.1.2 y 2.1.3 del Capítulo 2*. Los principales pasos de esta metodología son los siguientes:

1) Se genera la **sección transversal** del dominio computacional 3D formada por la proyección de 4 dominios bidimensionales situados a 90° (*Figura 4.5 y Figura 4.6*).

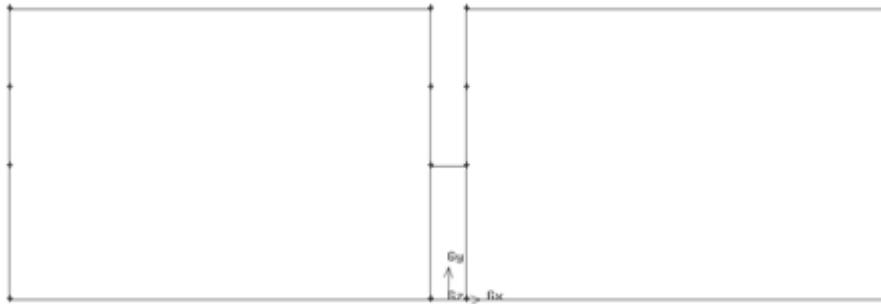


Figura 4.5. Dominio computacional del modelo 2D.

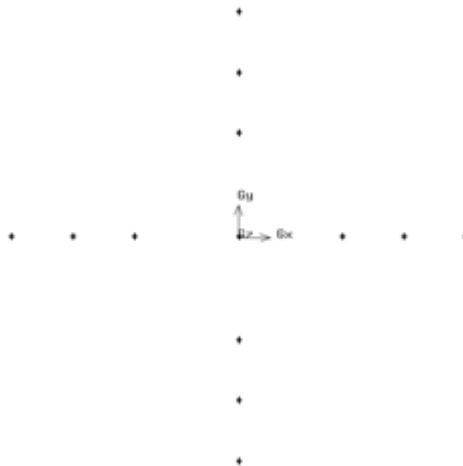


Figura 4.6. Proyección a 90° del dominio computacional del modelo 2D.

2) Se crea en torno al origen de coordenadas un **cuadrado deformado** constituido por 8 puntos: 4 vértices y 4 centros de arco de circunferencia desde los que se unen los vértices (véase a la *Figura 4.7*). La posición exacta de estos puntos ha de establecerse de acuerdo con la distribución de los nodos en la arista proyectada del dominio 2D, para asegurar que el tamaño forma de las celdas en el cuadrado deformado y en las caras contiguas sea similar (véase a la *Figura 4.8*).

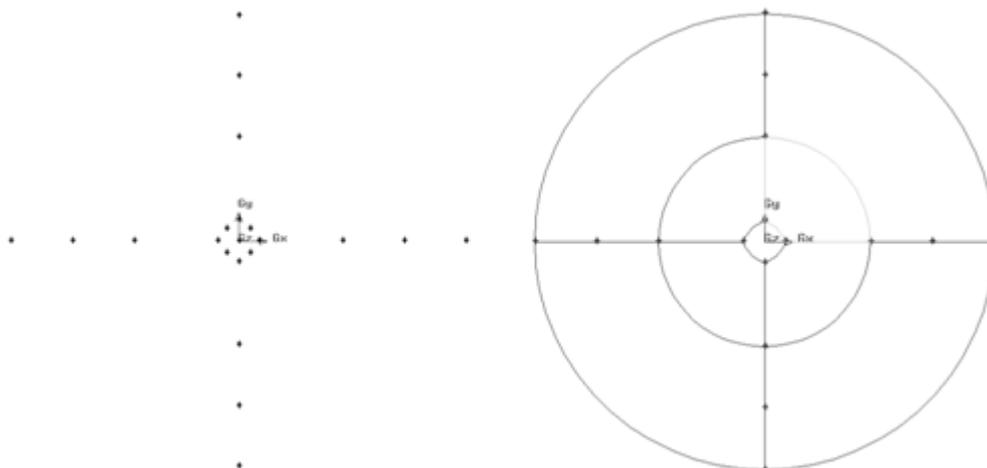


Figura 4.7. Cuadrado deformado. Posición de los puntos.

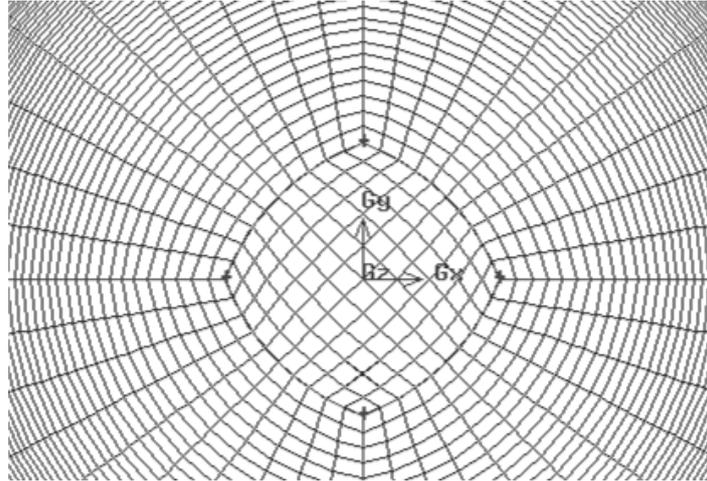


Figura 4.8. Cuadrado deformado. Distribución de los nodos.

3) Una vez creadas las 9 caras que configuran la sección transversal de entrada, se copian desplazadas en la sección de salida, y se crean **volúmenes cilíndricos por extrusión** de dichas caras: la sección transversal de entrada se extruye aguas abajo hasta la pared de entrada del disco, y la sección transversal de salida se extruye aguas arriba hasta la pared de salida del disco. De esta manera se tienen un total de 9 volúmenes en la entrada y 9 volúmenes en la salida, separados por una distancia que coincide con el espesor del disco (véase a la *Figura 4.8*).

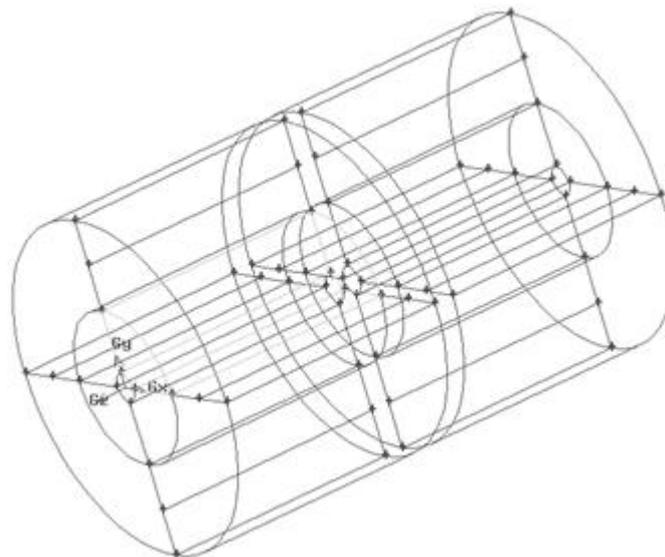


Figura 4.8. Volúmenes de entrada (9) y volúmenes de salida (9).

4) El siguiente paso es crear el **volumen** correspondiente al **orificio del disco** que separa los volúmenes de entrada y de salida. Para ello se crean primero las 8 aristas de conexión entre ambos volúmenes (*Figura 4.9*) y, a partir de éstas, se establecen las 12 caras de conexión (*Figura 4.10*) que, a su vez, dan lugar a los 5 volúmenes de conexión (*Figura 4.11*).

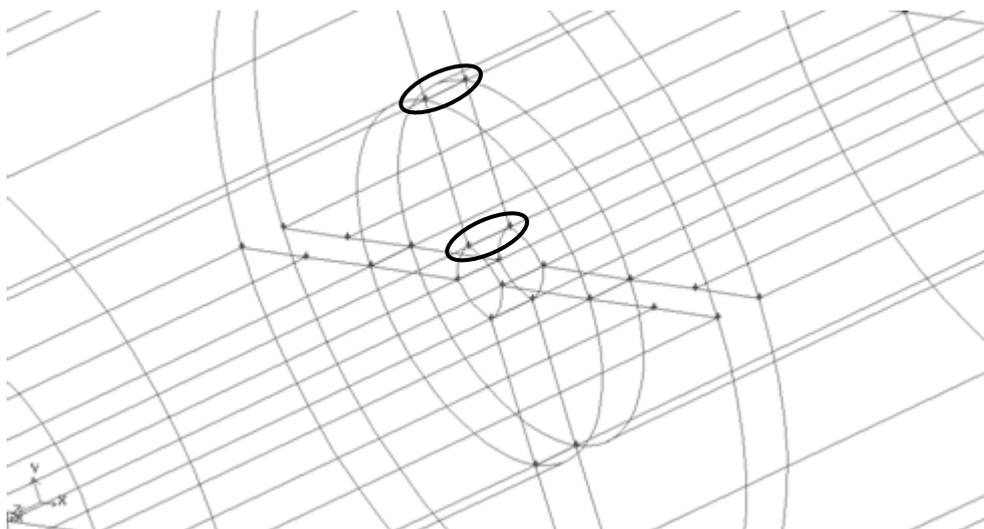


Figura 4.9. Aristas de conexión del orificio del disco (8).

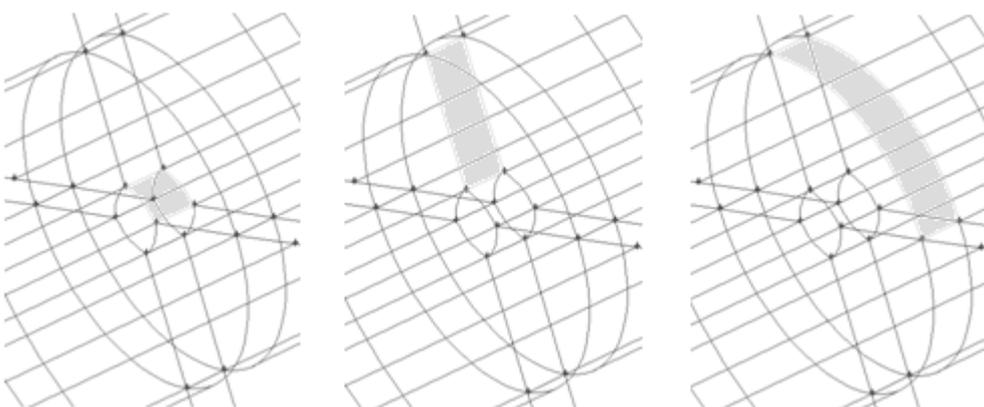


Figura 4.10. Caras de conexión del orificio del disco (12).

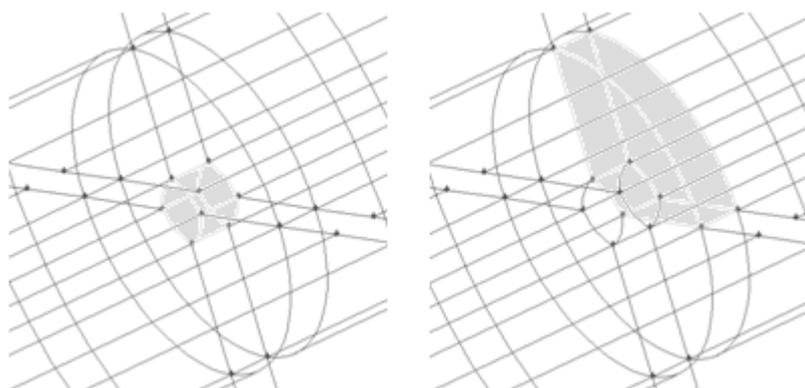


Figura 4.11. Volúmenes de conexión del orificio del disco (5).

5) Seguidamente se distribuye el mismo número de **nodos equiespaciados en los arcos de circunferencia**. Para determinar el número idóneo de nodos se lleva a cabo un estudio de sensibilidad de malla en la sección transversal del dominio computacional (véase el *Apartado 4.2*).

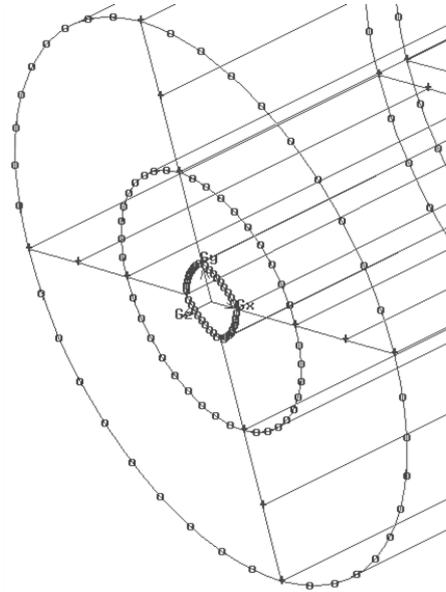


Figura 4.12. Mallado de los volúmenes del dominio computacional.

6) Posteriormente se aplica la **distribución espacial de nodos de la malla óptima para el modelo 2D** sobre cada una de las 4 semi-secciones longitudinales del dominio computacional 3D. De esta manera se extrapola el estudio de sensibilidad de malla del modelo 2D, requiriéndose únicamente determinar en el modelo 3D las divisiones en los arcos de circunferencia con un estudio de sensibilidad más simple.

7) finalmente se mallan cada uno de los **volúmenes** que componen el dominio computacional 3D (véase la *Figura 4.13*).

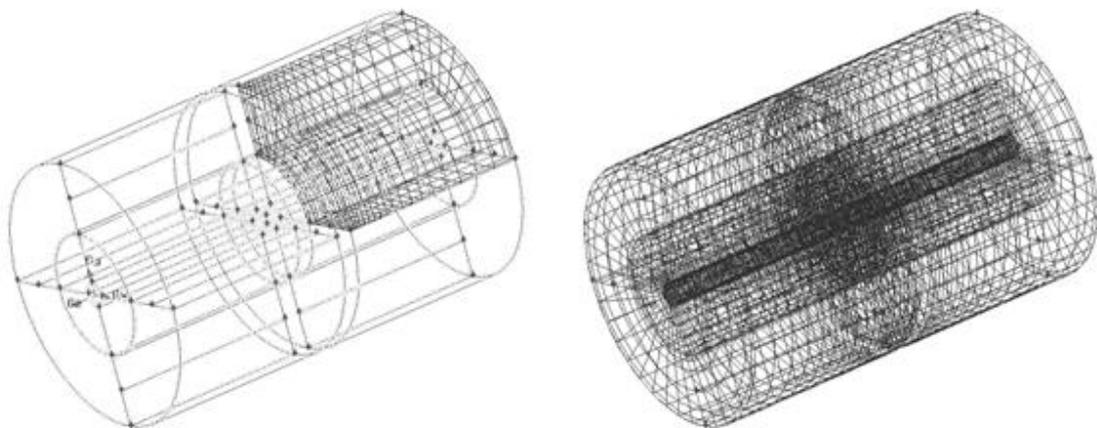


Figura 4.13. Mallado de los volúmenes del dominio computacional.

4.2. ESTUDIO DE SENSIBILIDAD DE MALLA.

4.2.1. Introducción e hipótesis de simulación.

Dada la complejidad del dominio computacional tridimensional que se resuelve numéricamente, no es viable abordar directamente un estudio de sensibilidad de malla en 3D. Por este motivo se realiza previamente el estudio de sensibilidad de malla en 2D recogido en *Apartado 2.2 del Capítulo 2* que, además de permitir generar la malla tridimensional a partir de una malla bidimensional, ofrece información valiosa acerca de las variables testigo y las zonas de evaluación más representativas del problema a resolver.

Así, en este estudio se aborda la sensibilidad del mallado 3D únicamente en la **sección transversal** del dominio computacional, simplificando notablemente el proceso de refinamiento de la malla. Las **hipótesis de simulación** aplicadas en este estudio 3D coinciden con las empleadas en el estudio 2D (véase el *Apartado 2.2.2 del Capítulo 2*), a excepción del número pasos espaciales, que se disminuye para reducir el tiempo de cálculo: 2 pasos en 2D, 1 paso en 3D.

4.2.2. Variables testigo y zonas de evaluación.

Se establecen tres variables testigo como representativas del problema: la velocidad axial evaluada en la sección transversal equidistante entre ejes L1 y en la sección transversal del disco L2 (*Figura 4.14*), y el gradiente de presión por unidad de longitud evaluado entre las secciones de entrada y salida.

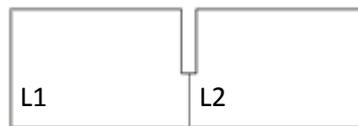


Figura 4.14. Situación de las líneas L1, L2 en el dominio computacional.

Variable testigo	Variable fluida	Zona de evaluación
1	Velocidad axial	L1
2	Velocidad axial	L2
3	Gradiente de presión	entrada, salida

Tabla 4.1. Variables testigo del estudio de sensibilidad de malla.

4.2.3. Construcción de las mallas.

Sobre cada una de las 4 semi-secciones longitudinales que componen el dominio computacional 3D se aplica la distribución espacial de nodos de la malla óptima seleccionada en el estudio de sensibilidad 2D. Fijada dicha distribución, se establece un número de nodos equiespaciados en los arcos de circunferencia que conforman la sección transversal del dominio (véase la *Figura 4.12*).

El número mínimo de divisiones sobre los arcos de circunferencias de la sección transversal se estima en 8 (32 en la circunferencia completa) para mantener la **relación de aspecto** de las celdas (*aspect ratio*) acotada en valores adecuados. Se construyen 4 mallas, de las que la malla 1 es la más gruesa, y la malla 4 es la más fina, siendo el **criterio de selección** para la malla óptima es obtener un error inferior al **1 %** respecto a la malla más fina. El número de divisiones sobre las circunferencias completas y la relación de aspecto máxima para cada una de las mallas se recogen en la *Tabla 4.2*. En la *Figura 4.15* se muestra el proceso de refinamiento llevado a cabo.

Malla	Divisiones	Relación de aspecto máxima
1	32	70
2	36	60
3	40	55
4	44	50

Tabla 4.2. Mallas del estudio de sensibilidad de malla.

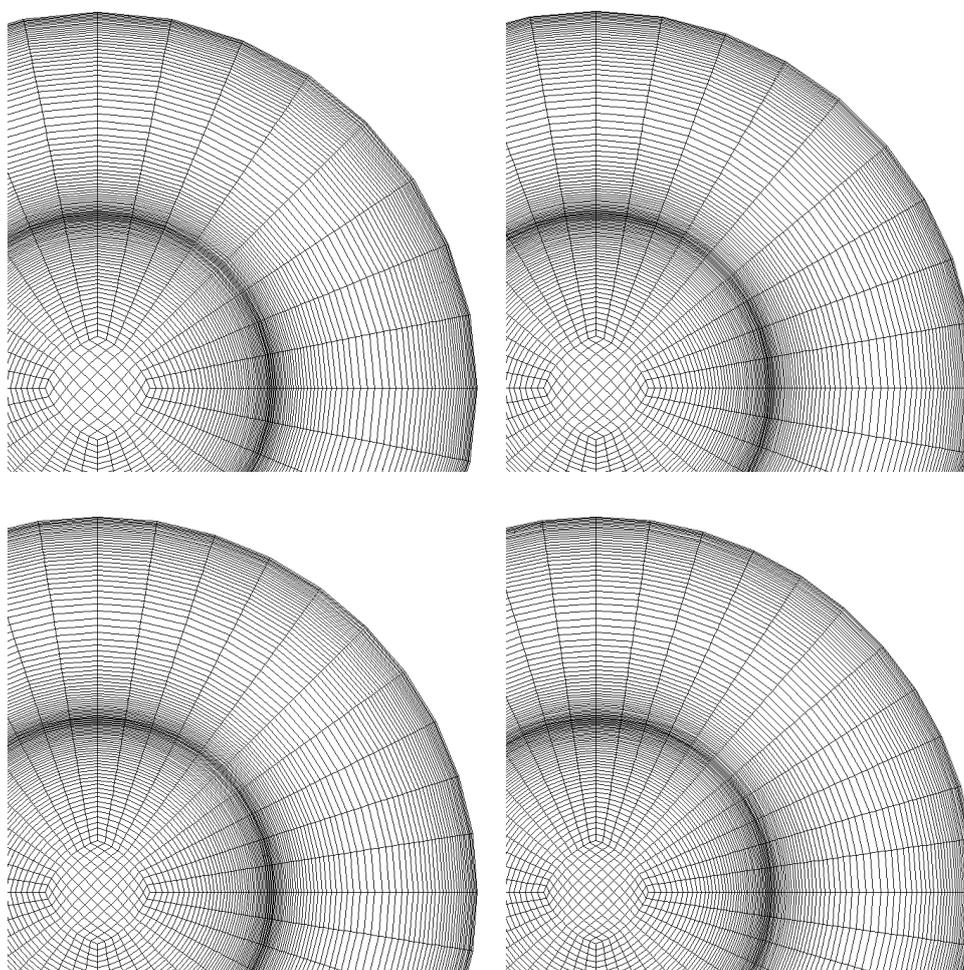


Figura 4.15. Refinamiento del mallado en el estudio de sensibilidad. Izquierda arriba, malla 1. Derecha arriba, malla 2. Izquierda abajo, malla 3. Derecha abajo, malla 4.

4.2.4. Resultados y selección de la malla óptima.

Se observa que en la resolución del **perfil de velocidad axial**, tanto en la línea L1 (Figura 4.16) como la en línea L2 (Figura 4.17), todas las mallas cumplen con el criterio de selección, es decir, el error cometido respecto a la malla más fina es inferior al 1 %. Por su parte, para el **gradiente de presión** por unidad de longitud, el criterio sólo se cumple con la malla 3 (Figura 4.18).

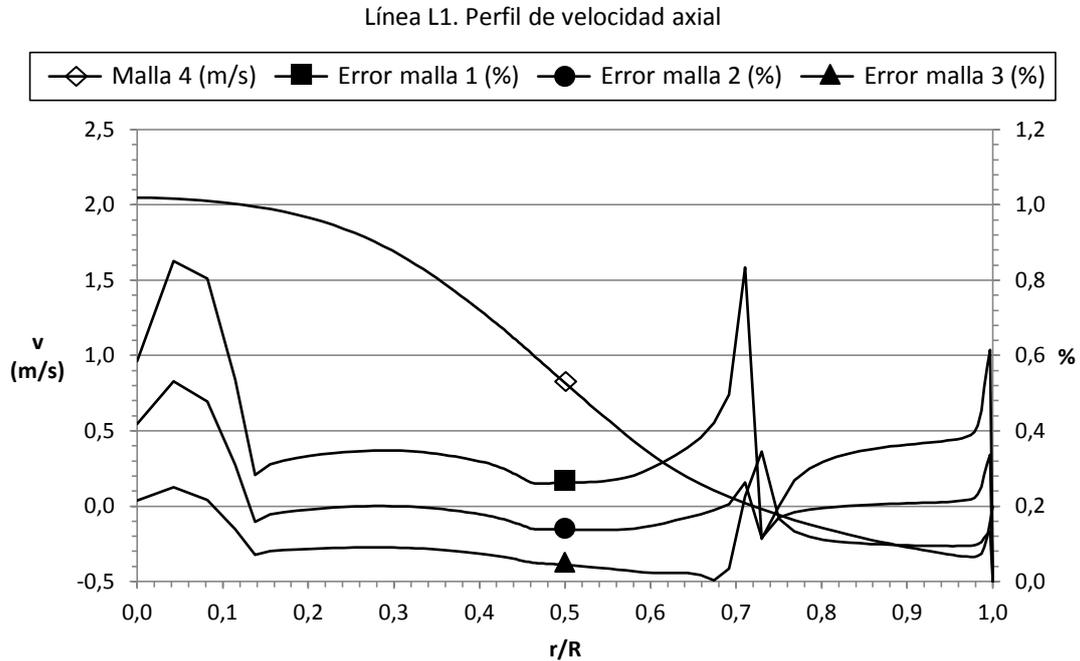


Figura 4.16. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 1.

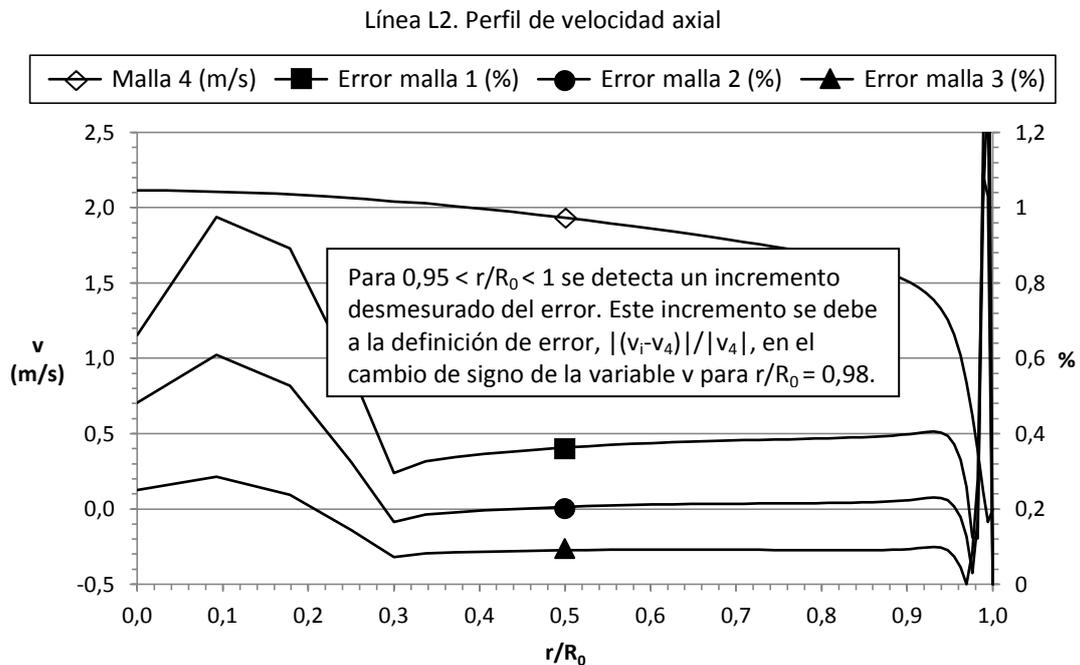


Figura 4.17. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 2.

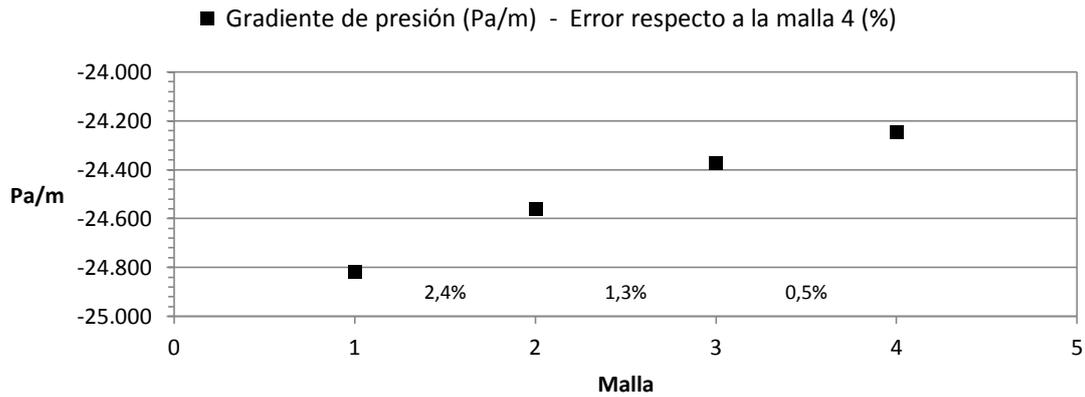


Figura 4.18. Resultados del estudio de sensibilidad. Variable testigo 3.

Por lo tanto, la malla óptima elegida es la **malla 3**, cuyo número de celdas, caras y nodos se recoge en la *Tabla 4.3*. La distribución espacial en detalle de los nodos en la sección longitudinal de la misma se puede observar en el *Apartado 2.2.8* del *Capítulo 2*.

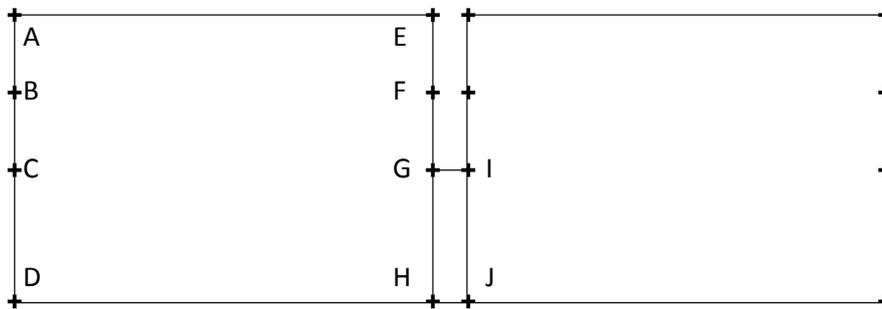


Figura 4.19. Denominación de las aristas en el dominio computacional.

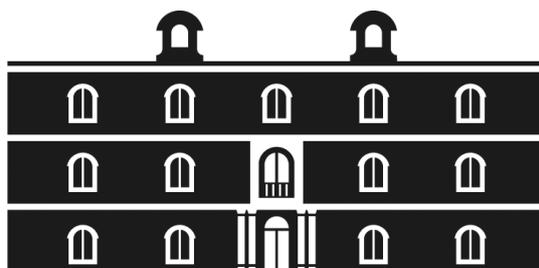
Malla 3	Arista AB	Arista BC	Arista CD	Arista AE	Arista GI	Circunferencia
Divisiones	30	32	48	72	16	40

Nodos	652.041
Celdas	641.920
Caras	1.931.440

Tabla 4.3. Número de nodos, celdas y caras de la malla óptima en 1 paso espacial.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

BLOQUE I. OSCILACIÓN DEL FLUIDO.

CAPÍTULO 5. SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL MODELO 3D.

5.1. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN.

5.1.1. Simulación estacionaria.

En la metodología de simulación que se lleva a cabo para abordar la resolución del campo de velocidades en un OBR es preciso distinguir entre simulación estacionaria y simulación no estacionaria. El problema del flujo oscilatorio es inherentemente no estacionario puesto que las leyes de gobierno del movimiento del fluido son leyes sinusoidales temporales (véase el *Apartado 1.3.3*). En la expresión general ec.5.1 es necesario establecer el **caso de inicio del ciclo** a través de la fase φ , es decir, fijar el gasto másico.

$$\dot{m}(t) = \dot{m}_0 \text{sen}(2\pi ft + \varphi) \quad (\text{ec.5.1})$$

Para la oscilación del fluido, y siguiendo el ejemplo de los autores consultados durante la fase de revisión bibliográfica [2, 5, 38, 39, 46], se inicia el ciclo de oscilación en el punto de **máximo gasto másico**, es decir, para $\varphi = \pi/2$ (la elección de este punto se justifica convenientemente en el *Apartado 5.1.3*). Así, la ley temporal sinusoidal para el gasto másico se expresa como:

$$\dot{m}(t) = \rho \left(\frac{\pi D^2}{4} \right) 2\pi f x_0 \cos(2\pi ft) \quad (\text{ec.5.2})$$

En la *Figura 5.1* se representa la evolución del gasto másico, partiendo del caso estacionario con gasto másico constante:

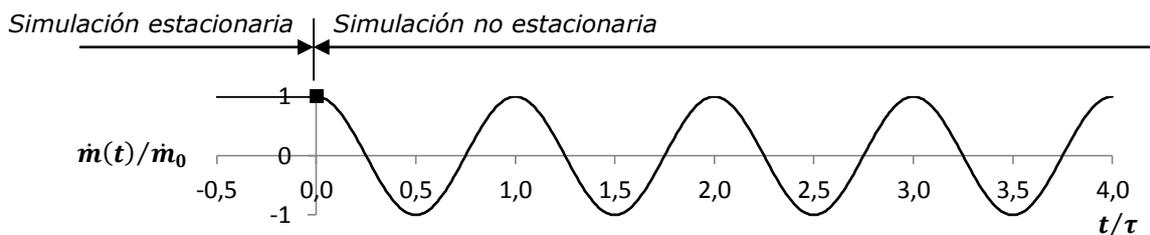


Figura 5.1. Caso de inicio del ciclo en la oscilación del fluido.

Nótese que esta metodología de simulación estacionaria en el modelo 3D coincide exactamente con la metodología aplicada en el modelo 2D (véase el *Apartado 3.1.1* del *Capítulo 3*). Por el contrario, sí existen diferencias entre los modelos 3D y 2D en la metodología de simulación no estacionaria, que se recogen en el siguiente apartado.

5.1.2. Simulación no estacionaria.

A partir del caso de inicio del ciclo comienza la simulación no estacionaria, con gasto másico variable en el tiempo. Para ello es preciso discretizar la ecuación ec.5.2 imponiendo un paso de tiempo en el eje temporal.

Como se describe en el *Apartado 3.1.2 del Capítulo 3*, este paso de tiempo se obtiene mediante la **condición de Courant-Friedrich-Levy** (condición CFL), que para el caso de 3 dimensiones toma la forma:

$$\Delta t \sum_{i=1}^3 \frac{u_{xi}}{\Delta x_i} \leq C \quad (\text{ec.5.3})$$

siendo Δt el paso de tiempo, Δx_i el tamaño de la celda en la dirección i , u_{xi} la velocidad en la celda de tamaño Δx_i y C el número de Courant.

A priori se considera que el paso de tiempo $\Delta t = 0,002604 \text{ s}$ que se ha calculado anteriormente para el modelo 2D (véase el *Apartado 3.1.2 del Capítulo 3*) ha de ser apropiado también para el modelo 3D, lo que supone validar la simplificación unidimensional de la condición CFL, en dirección axial:

$$\Delta t \frac{v}{\Delta x} \leq C \quad (\text{ec.5.4})$$

Sin embargo las simulaciones no estacionarias con este paso de tiempo no han sido satisfactorias, ante la imposibilidad de obtener unos **residuos de convergencia** por debajo de 1×10^{-2} durante la simulación con FLUENT. En consecuencia, no es viable asumir la simplificación unidimensional anterior y es preciso recalcular el paso de tiempo. Ante la dificultad de evaluar con exactitud la ecuación ec.5.3 se recurre a reducir a la mitad el paso de tiempo, obteniéndose $\Delta t = 0,001302 \text{ s}$ con unos residuos de convergencia del orden de 1×10^{-4} . Una vez fijado Δt , el número total de casos n en los que se discretiza un ciclo de la ley sinusoidal depende de la frecuencia de oscilación f , según la ecuación ec.5.5.

$$n = \frac{1}{f\Delta t} \quad (\text{ec.5.5})$$

Dado que el paso de tiempo es bajo, el número de casos n que se requiere resolver por ciclo es muy elevado. Para reducir el volumen de datos generado se opta por guardar en cada ciclo, no el número total de casos resueltos n , sino un número de casos menor $n_0 = 64$ suficientemente representativo. Nótese que el hecho de elegir un paso de tiempo mitad para el modelo 3D obliga a resolver el doble de casos por ciclo respecto al modelo 2D (*Tablas 3.1 y 5.1*).

Condición de operación	f (Hz)	Δt (s)	n	n_0
1	0,5	0,001302	1.536	64
2	1	0,001302	768	64
3	2	0,001302	384	64

Tabla 5.1. Condiciones de operación, paso de tiempo para la discretización y número de casos.

Nótese que a lo largo de todo el ciclo temporal se aplica un **paso de tiempo fijo** $\Delta t = cte$, siendo esta metodología de discretización empleada por la totalidad de los autores consultados [2, 5, 38, 39, 46]. En el *Anexo C* del presente Proyecto se discute la posibilidad de aplicar a la discretización un **paso de tiempo variable** a lo largo del ciclo $\Delta t = \Delta t(t)$.

5.1.3. Periodicidad temporal.

En la simulación no estacionaria, que comienza a partir del caso inicial de la simulación estacionaria, se produce un transitorio que ha de superarse hasta alcanzar una solución periódica en el tiempo. Es decir, existe un número determinado de ciclos temporales al comienzo de la simulación no estacionaria en los que la solución difiere de un ciclo a otro. Este periodo se denomina **simulación transitoria** y su duración está condicionada por la fase del ciclo que se elija para iniciar la ley sinusoidal temporal (véase el *Apartado 5.1.1*). Siguiendo el ejemplo de los autores consultados durante la fase de revisión bibliográfica [2, 5, 38, 39, 46], se inicia el ciclo en el punto de máximo gástrico por considerarse que la mayor inercia del flujo en este punto contribuye a una extinción más rápida del transitorio.

Una vez superado el transitorio se alcanza la periodicidad temporal, comenzando el periodo denominado **simulación periódica temporal**. Para identificar cuántos ciclos tarda en aparecer este periodo se compara la solución en sucesivos ciclos de oscilación hasta encontrar una diferencia despreciable entre un ciclo y el siguiente.

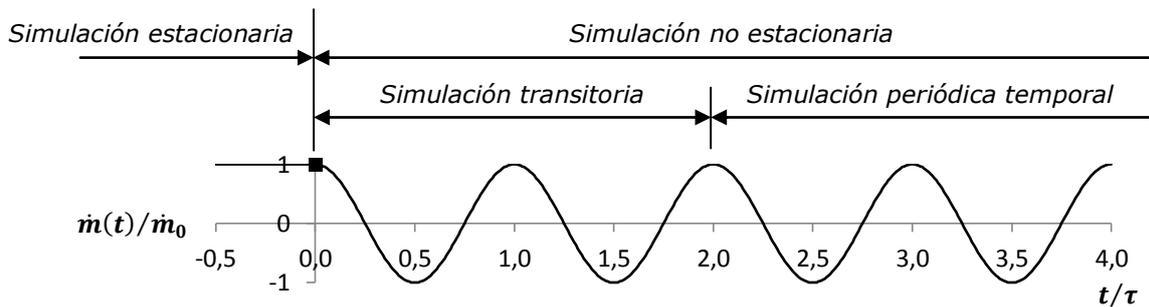


Figura 5.2. Ejemplo de simulación estacionaria, simulación no estacionaria, simulación transitoria y simulación periódica temporal.

En la práctica no es viable comparar la solución entre dos ciclos consecutivos en todos y cada uno de los casos (64 casos guardados de 384 resueltos para la condición de operación 3; véase la *Tabla 5.1*). Se recurre por ello a 4 casos representativos del ciclo, coincidiendo con las **4 fases de oscilación** siguientes, siendo $\theta = 2\pi ft$:

$$\theta_1 = 0 ; \theta_2 = \pi/2 ; \theta_3 = \pi ; \theta_4 = 3\pi/2$$

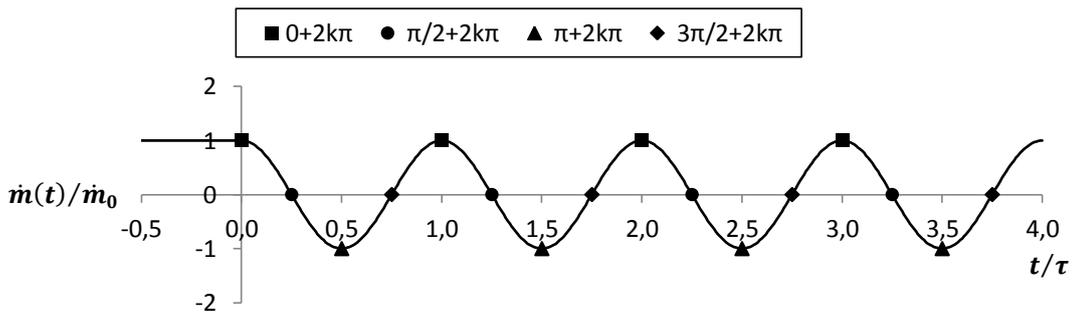


Figura 5.3. Fases de oscilación para la comprobación de la periodicidad temporal.

Para comprobar la periodicidad temporal se estudia el perfil de velocidad axial, para las 4 fases de oscilación anteriores, en tres regiones diferentes del dominio computacional (véanse las Figuras 5.5 y 5.6):

- A lo largo del eje de simetría.
- En la sección transversal equidistante entre dos discos consecutivos, en uno de los pasos centrales del dominio computacional.
- En la sección transversal del orificio del disco, en uno de los pasos centrales del dominio computacional.

Nótese que las tres regiones anteriores pertenecen a una misma sección longitudinal del dominio computacional 3D, dada por $(x, y, z) = (1, 0, 0)$, y definiendo así un plano que se considera representativo de la solución numérica (Figura 5.4). Posteriormente se estudia la existencia o no de simetría angular en el problema 3D, es decir, en diferentes planos longitudinales (véase el Apartado 5.2.7).

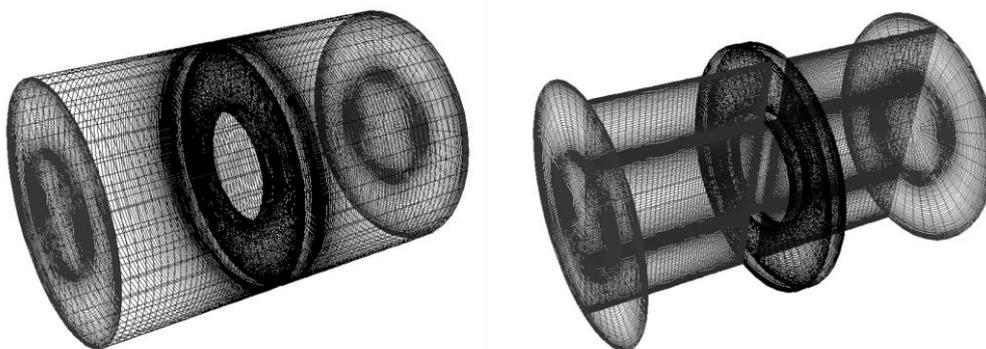


Figura 5.4. Sección longitudinal del dominio computacional 3D.

5.1.4. Periodicidad espacial.

La geometría del reactor de flujo oscilatorio se compone de un determinado número de pasos espaciales consecutivos, centrados en los discos insertados (véase el Apartado 2.1.1). Esta **periodicidad geométrica** se traduce en una periodicidad espacial de la solución numérica dentro del dominio computacional, ya que el patrón de movimiento del flujo ha de ser el mismo en cada uno de los pasos espaciales, salvando las inestabilidades propias de la turbulencia.

El **fenómeno físico** que ocurre en el reactor consiste en una carga de fluido por la sección de entrada y una descarga de fluido por la sección de salida. Este modelo se reproduce mediante una **simulación completa** que reproduce un dominio computacional con un cierto número de pasos espaciales. Puesto que los pasos próximos a la sección de entrada y a la de salida son perturbados por los efectos de entrada y salida del fluido respectivamente, el número de pasos ha de ser suficiente para que se alcance la periodicidad espacial en los pasos centrales. Para estas simulaciones completas se emplea un total de **8 pasos espaciales**.



Figura 5.5. Dominio computacional de 8 pasos espaciales para la simulación completa.

Dada la periodicidad espacial del patrón de movimiento del flujo, existe la posibilidad de reproducir la misma solución obtenida en los pasos espaciales centrales de la simulación completa de 8 pasos con un modelo de un único paso, aplicando condiciones de contorno periódicas. Así, la **simulación periódica** sobre un dominio computacional de **1 paso espacial** permite resolver el mismo problema fluidodinámico con un menor coste computacional. En el *Anexo B* se discuten los aspectos prácticos de las condiciones de contorno de ambas simulaciones.

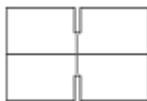


Figura 5.6. Dominio computacional de 1 paso espacial para la simulación periódica.

La distinción entre simulación completa y simulación periódica ya ha sido adelantada en el *Apartado 3.1.4* del *Capítulo 3* para el modelo 2D. Inicialmente se plantea con el modelo 3D la misma línea de trabajo para la validación de las condiciones periódicas seguida con el modelo 2D:

- Comprobar que la simulación completa (con flujo en desarrollo) es temporalmente periódica, determinando a partir de qué ciclo de oscilación se cumple la periodicidad temporal.
- Comprobar que la simulación completa (con flujo en desarrollo) es espacialmente periódica, determinando a partir de qué paso se cumple la periodicidad espacial.
- Comprobar que la simulación periódica, espacialmente periódica por definición, es temporalmente periódica, determinando a partir de qué ciclo de oscilación se cumple la periodicidad temporal.
- Comprobar que la simulación periódica reproduce con exactitud los resultados de la simulación completa.

Sin embargo se opta por realizar en 3D únicamente la simulación periódica de 1 paso espacial, elección apoyada en los siguientes argumentos:

- Se considera que la validación de la metodología de simulación periódica del flujo oscilatorio realizada sobre el modelo 2D (véase el *Apartado 3.3* del *Capítulo 3*) ha sido posible por la propia **definición matemática** de las condiciones periódicas (véase el *Anexo B*), y por tanto es independiente del número de dimensiones del dominio computacional.
- Abordar la simulación completa no estacionaria en 3D sobre un dominio computacional de 8 pasos conlleva un muy **alto coste computacional**, siendo éste un condicionante crítico. Téngase en cuenta que la resolución de un solo ciclo completo de oscilación con condiciones periódicas en 1 paso espacial requiere de más de 20 horas de simulación en el servidor (clúster) del Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos.

En consecuencia las condiciones periódicas se validan también para el modelo 3D, por lo que la comprobación de la periodicidad espacial no procede.

Con el fin de validar la solución numérica, la periodicidad espacial obtenida con la simulación periódica en el modelo 3D se compara con la periodicidad espacial obtenida con la simulación periódica en el modelo 3D. Esta comparación se basa, al igual que para la periodicidad temporal del modelo 3D (*Apartado 5.1.3*), en el estudio del perfil de velocidad axial a lo largo del eje de simetría, en la sección transversal equidistante entre dos discos consecutivos y en la sección transversal del orificio del disco en un plano longitudinal. Se evalúan las mismas 4 fases de oscilación para comparar la periodicidad espacial a lo largo de todo el ciclo de oscilación. Nótese que la periodicidad espacial se da también en los ciclos de simulación transitoria, siendo su estudio irrelevante, ya que la **solución** buscada ha de ser **periódica en el tiempo y en el espacio**. Por ello la periodicidad espacial sólo se estudia en el ciclo que asegura existencia de periodicidad temporal, es decir, una vez superado el transitorio (compárense las *Figuras 5.7* y *5.3*).

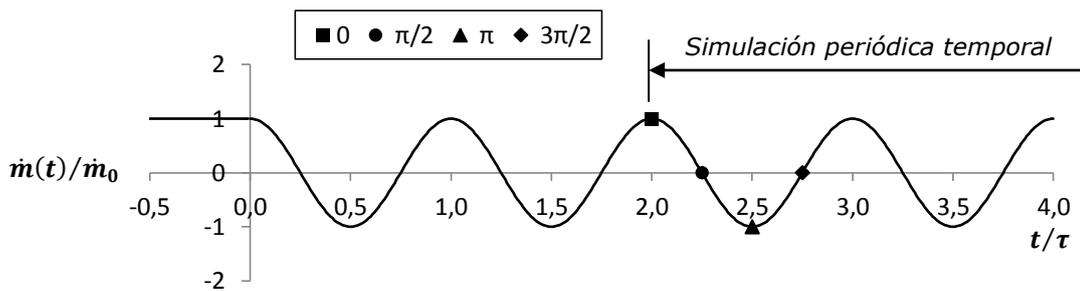


Figura 5.7. Ejemplo de fases de oscilación para la comprobación de la periodicidad espacial.

5.2. SIMULACIÓN PERIÓDICA.

5.2.1. Hipótesis de simulación.

- Simulación: periódica.
Sección de entrada y salida: *Periodic Conditions*.
Type: Specify mass flow.
- *Solver: Pressure Based*.
- *Time:*
Simulación estacionaria: *Steady*.
Simulación no estacionaria: *Unsteady*.
- Modelo de turbulencia:
Simulación estacionaria: k- ω SST, opción *Transitional Flows*.
Simulación no estacionaria: LES, modelo *Smagorinsky-Lilly*.
- Ecuación de la energía: no resuelta.
- Contribución de la gravedad: no considerada.
- Fluido: agua.
- Propiedades del fluido: valores constantes.
Densidad 998,2 kg/m³, viscosidad dinámica 0,001003 kg/m-s.
- Gasto másico: 0,17240718 kg/s.
Condición de operación 3, frecuencia 2 Hz.
- *Pressure-Velocity Coupling: SIMPLE*.
- Discretización: segundo orden
- Números de pasos espaciales = 1.

5.2.2. Simulación de casos sucesivos mediante fichero *Journal*.

La discretización del ciclo temporal implica la resolución numérica de un elevado número de casos (un total de 384 casos para la condición de operación 3; véase la *Tabla 5.1*). A partir de la simulación estacionaria del caso inicial, cada nuevo caso se obtiene **actualizando el gasto másico** y aplicando al caso que le precede un **paso de tiempo** $\Delta t = 0,001302$ s. Las hipótesis de simulación se mantienen, cambiando del modelo estacionario al modelo no estacionario, y del modelo de turbulencia k- ω SST al modelo de turbulencia LES. Para la simulación periódica, a diferencia de para la simulación completa, el software FLUENT no permite utilizar funciones definidas por el usuario (*User-Defined Function, UDF*) para realizar el cambio de gasto másico de un caso al siguiente. Por tanto es necesario programar este cambio de gasto en un **fichero *Journal***, que recoge las líneas de comandos escritas manualmente en la interfaz de usuario.

5.2.3. Periodicidad espacial de la simulación estacionaria.

Comparando los perfiles de velocidad axial obtenidos en la simulación estacionaria periódica sobre el modelo 2D (véase el *Apartado 3.3.3* del *Capítulo 3*) con los obtenidos en la simulación estacionaria periódica sobre el modelo 3D, se concluye que ambas soluciones son coincidentes con un alto grado de exactitud. Nótese que tanto la solución estacionaria 3D como la solución estacionaria 2D se obtienen con el mismo modelo de turbulencia (k- ω SST). El error que se comete es inferior al 2 % en el eje (*Figura 5.8*), inferior al 4 % en la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 5.9*) e inferior al 7 % en la sección transversal del disco (*Figura 5.10*).

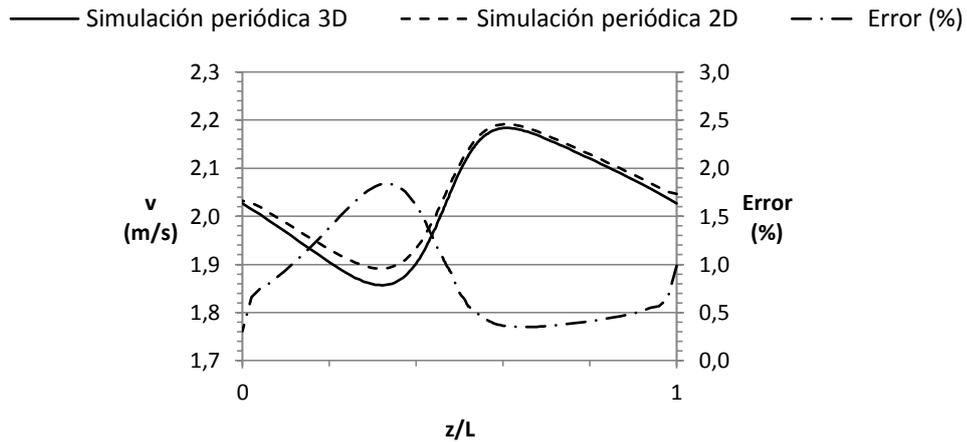


Figura 5.8. Perfil de velocidad axial en el eje. Comparación entre simulación estacionaria periódica 3D y 2D.

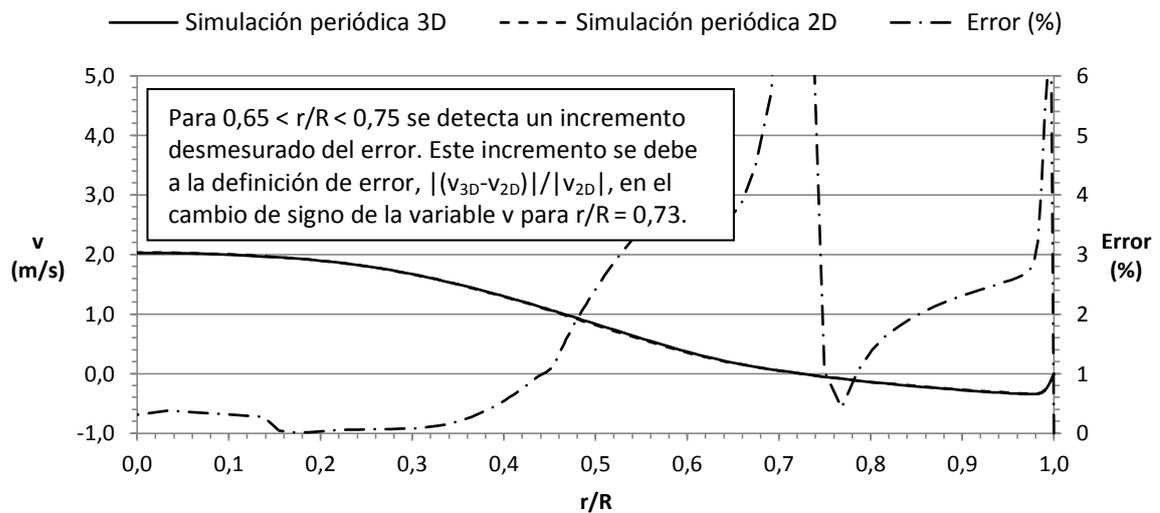


Figura 5.9. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Comparación entre simulación estacionaria periódica 3D y 2D.

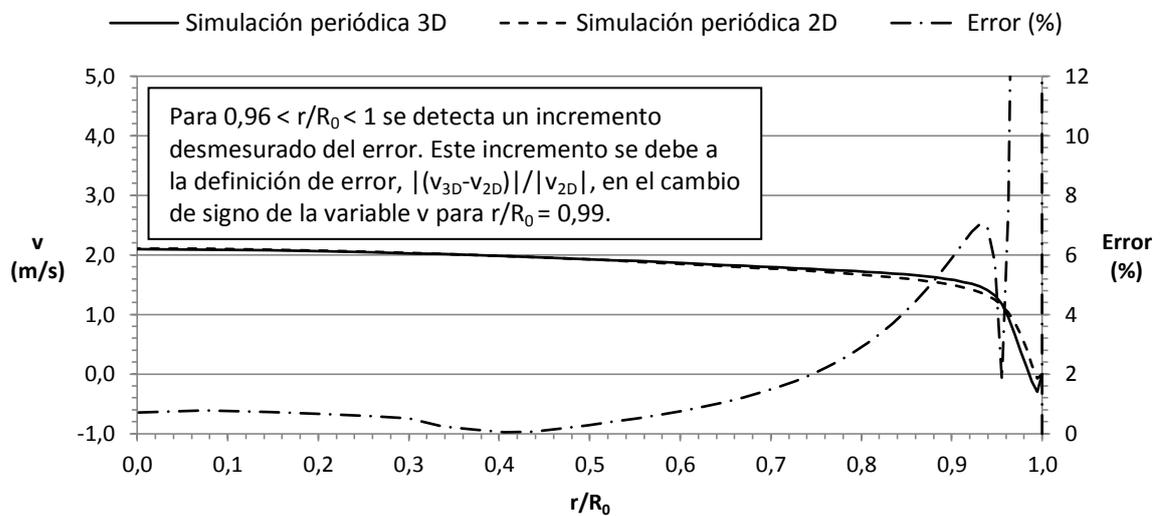


Figura 5.10. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Comparación entre simulación estacionaria periódica 3D y 2D.

5.2.4. Periodicidad temporal de la simulación no estacionaria.

5.2.4.1. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

Al contrario de lo que sucede en la simulación no estacionaria del modelo 2D (véase el *Apartado 3.3.4*), para el modelo 3D no se detecta periodicidad temporal, al menos en los 11 primeros ciclos de oscilación. El perfil de velocidad axial a lo largo del eje fluctúa muy intensamente, sin evidenciar una posible posición de equilibrio en ciclos posteriores (*Figura 5.11*). Por el contrario, en la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 5.12*) y en la sección transversal del disco (*Figura 5.13*), la intensidad de la fluctuación es menor y ésta tiene lugar en torno al perfil del ciclo 1, de manera más evidente en el segundo caso.

Nótese que el perfil de velocidad axial del ciclo 1 corresponde a la solución estacionaria obtenida con el modelo k- ω SST, mientras que los ciclos siguientes corresponden a la solución no estacionaria obtenida con el modelo LES.

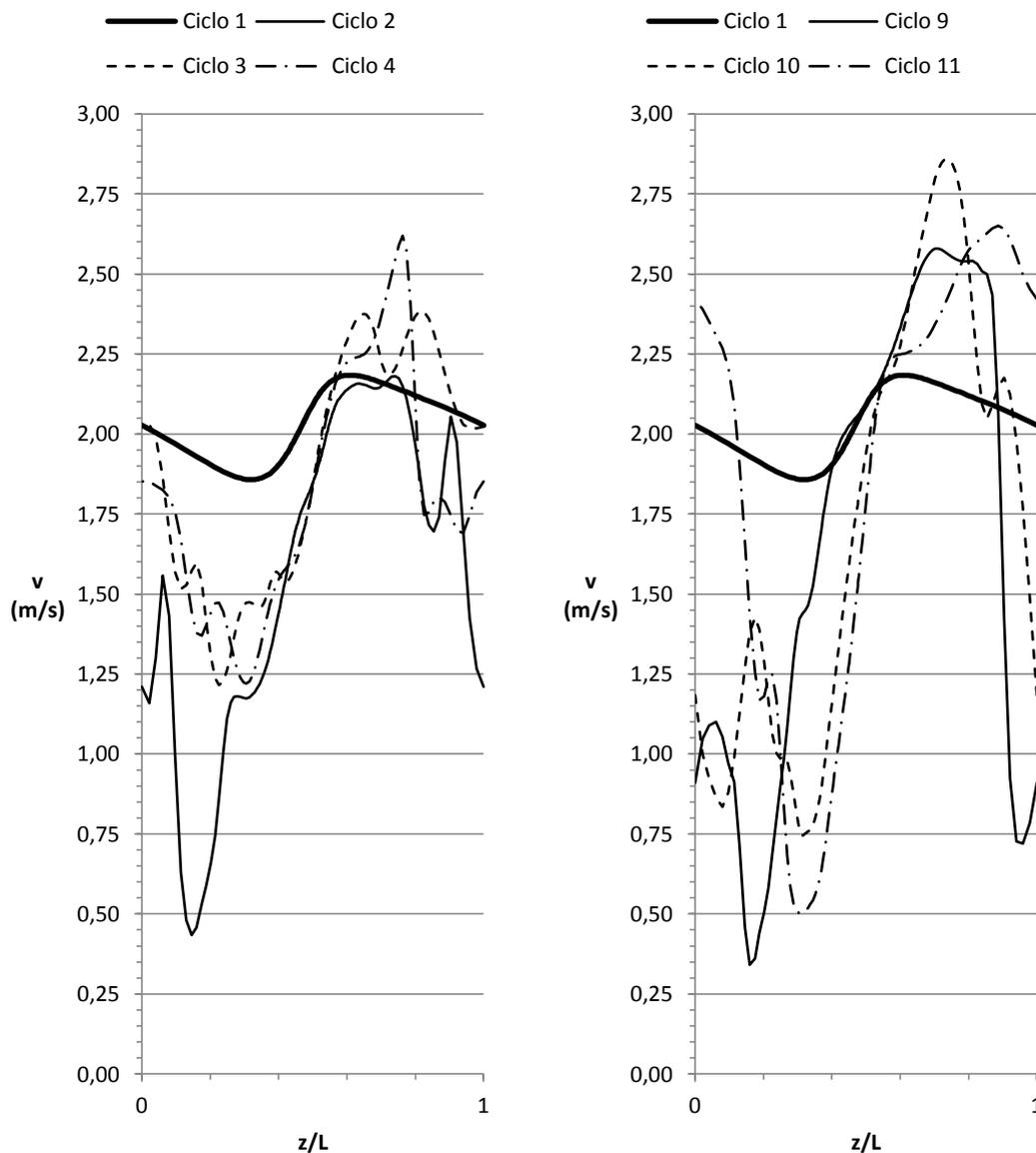


Figura 5.11. Perfil de velocidad axial en el eje. Ciclos 1 a 4 y 9 a 11. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

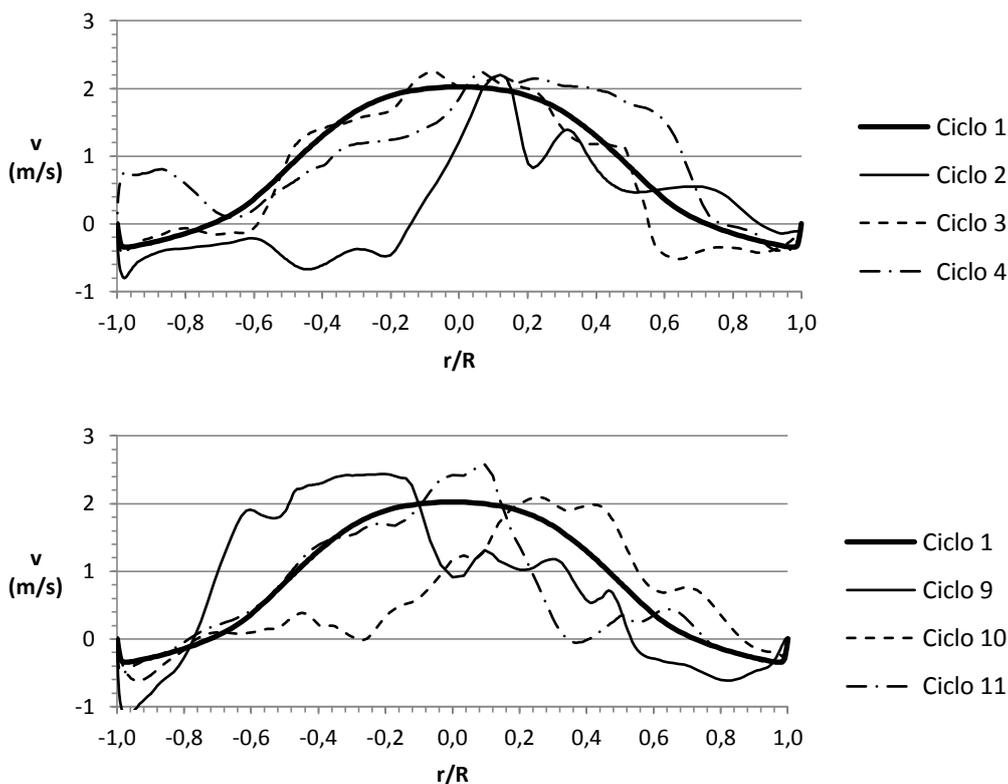


Figura 5.12. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Ciclos 1 a 4 y 9 a 11. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

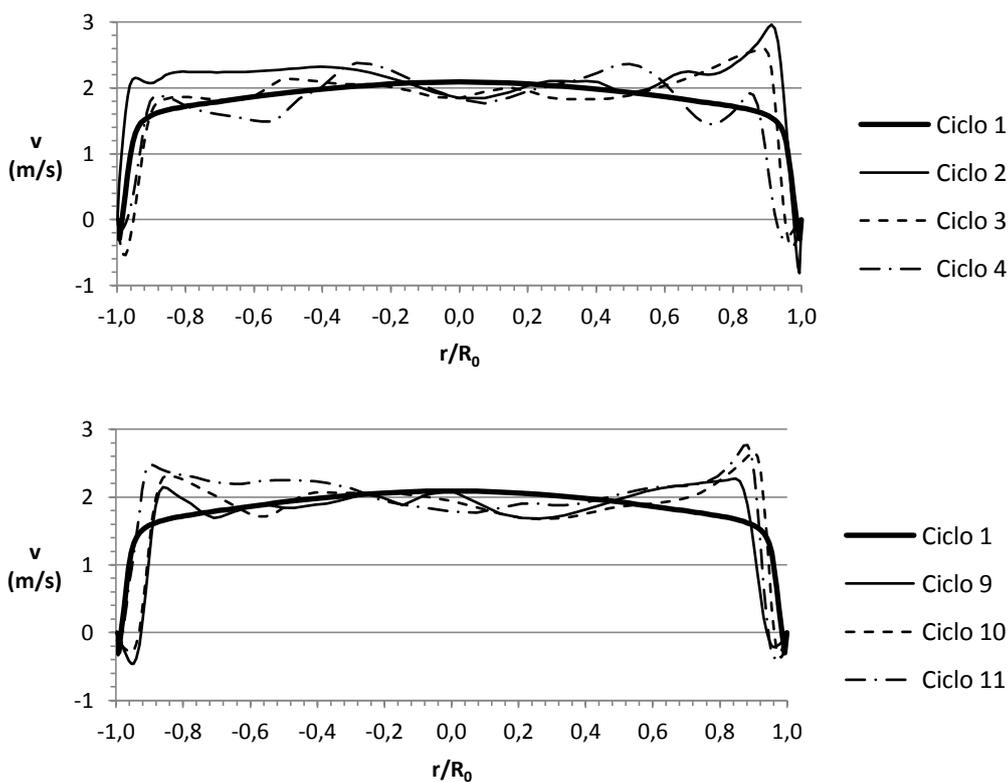


Figura 5.13. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Ciclos 1 a 4 y 9 a 11. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

5.2.4.2. Fases $\theta_2 = \pi/2 + 2k\pi$, $\theta_3 = \pi + 2k\pi$ y $\theta_4 = 3\pi/2 + 2k\pi$.

En el apartado anterior se concluye que, en la fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$, la **periodicidad temporal** no se alcanza al menos en los primeros **11 ciclos de oscilación**. La evolución caótica que muestra el perfil de velocidad axial (principalmente en el eje y en la sección transversal equidistante entre discos) pone de manifiesto que el número de ciclos necesario para alcanzar una posible solución periódica en el tiempo es presumiblemente muy elevado, siempre y cuando dicha solución exista. En el resto de fases, como cabe esperar, el comportamiento caótico evidenciado en la fase θ_1 sigue presente (Figuras 5.14, 5.15 y 5.16).

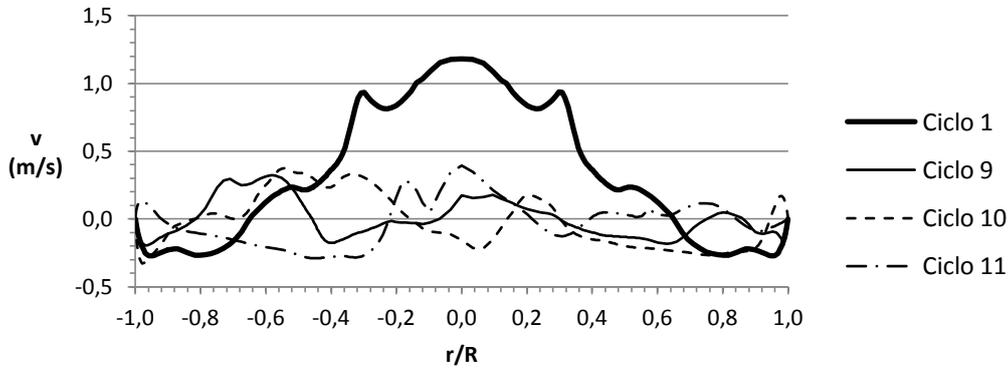


Figura 5.14. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Ciclos 1 y 9 a 11. Fase $\theta_2 = \pi/2 + 2k\pi$.

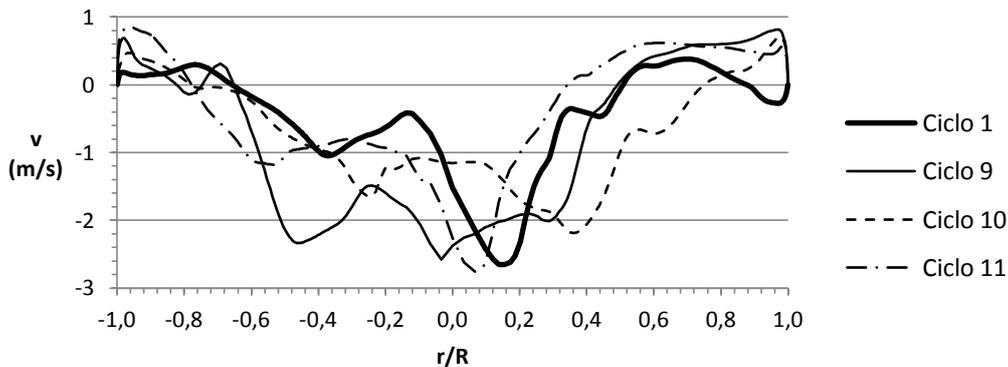


Figura 5.15. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Ciclos 1 y 9 a 11. Fase $\theta_3 = \pi + 2k\pi$.

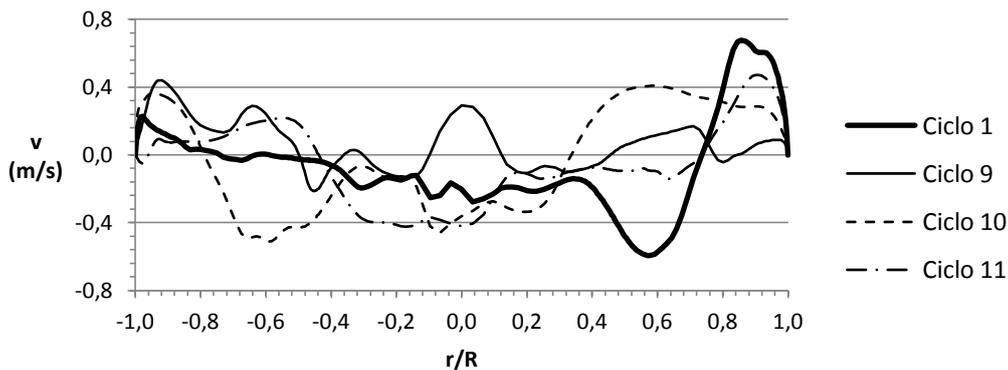


Figura 5.16. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Ciclos 1 y 9 a 11. Fase $\theta_4 = 3\pi/2 + 2k\pi$.

5.2.5. Periodicidad espacial de la simulación no estacionaria.

En el *Apartado 5.2.3* se ha comprobado que las soluciones numéricas obtenidas en la simulación estacionaria periódica 2D y 3D son coincidentes (ambas con el modelo de turbulencia $k-\omega$ SST). Tal y como se muestra en el apartado anterior, para la simulación no estacionaria 3D no se alcanza la periodicidad temporal, al menos en los 11 primeros ciclos de oscilación. Sin embargo ya en el ciclo 11 se consigue, en cualquiera de las fases, una solución que se aproxima cualitativamente a la obtenida con el modelo 2D (*Figuras 5.17, 5.18, 5.19 y 5.20*).

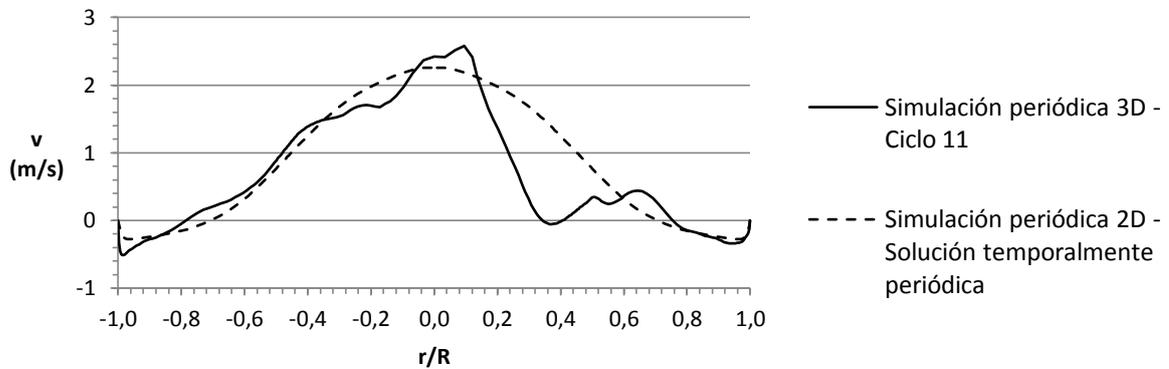


Figura 5.17. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Comparación entre simulación no estacionaria periódica 3D y 2D. Fase $\theta_1 = 0$.

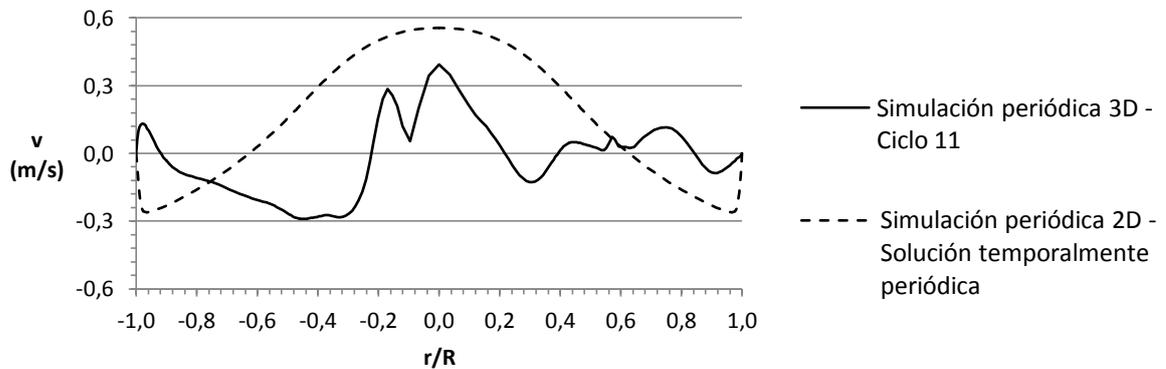


Figura 5.18. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Comparación entre simulación no estacionaria periódica 3D y 2D. Fase $\theta_2 = \pi/2$.

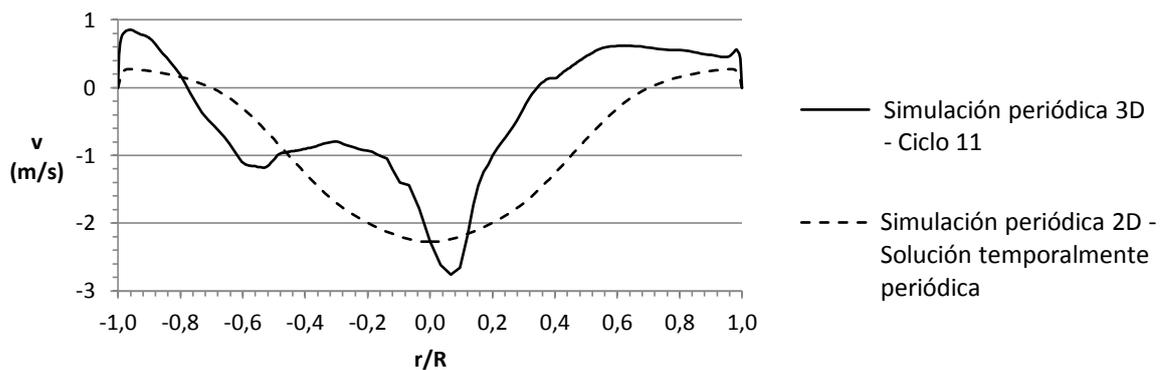


Figura 5.19. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Comparación entre simulación no estacionaria periódica 3D y 2D. Fase $\theta_3 = \pi$.

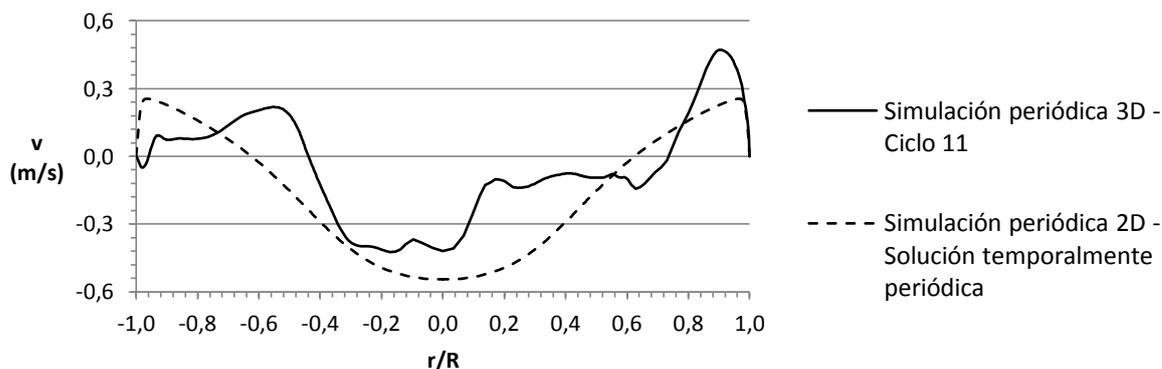


Figura 5.20. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Comparación entre simulación no estacionaria periódica 3D y 2D. Fase $\theta_4 = 3\pi/2$.

5.2.6. Conclusiones del análisis de periodicidad.

Del análisis de periodicidad espacial y temporal realizado para la simulación periódica del flujo oscilatorio en un OBR con el modelo 3D se concluye:

- Los resultados de la simulación periódica estacionaria 3D son coincidentes con un alto grado de exactitud con los resultados de la simulación periódica estacionaria 2D, realizándose ambas simulaciones con el modelo de turbulencia $k-\omega$ SST.
- La simulación periódica no estacionaria 3D, realizada con el modelo LES, no posee periodicidad temporal en los 11 primeros ciclos de oscilación. La intensa fluctuación del campo de velocidades que se registra en estos 11 ciclos pone en duda la posibilidad de hallar una solución temporalmente periódica. En caso de que exista esta solución periódica en el tiempo, el número de ciclos necesario para alcanzarla es presumiblemente muy elevado.
- Los resultados de la simulación periódica no estacionaria 3D para el ciclo de oscilación 11, pese a no alcanzar periodicidad temporal, se aproximan cualitativamente a los resultados de la simulación periódica no estacionaria 2D, que sí es periódica en el tiempo.
- Estas conclusiones son consistentes tanto con los resultados experimentales como con los estudios numéricos referidos en la bibliografía [2, 5, 38, 39, 46]. Queda por tanto validada la metodología de simulación periódica 3D del flujo oscilatorio, que permite reducir el número de pasos espaciales del dominio computacional.

5.2.7. Análisis de la simetría angular.

En el modelo 3D, el caso de inicio del ciclo de oscilación sí posee simetría axial, tal y como muestran los perfiles de velocidad obtenidos en la simulación estacionaria (véase el ciclo 1 en las Figuras 5.11, 5.12 y 5.13). Sin embargo, cuando comienza la simulación no estacionaria, esta simetría axial se rompe rápidamente (véase el ciclo 2 y siguientes en las Figuras 5.11, 5.12 y 5.13).

Es evidente que el campo de velocidad del flujo oscilatorio, además de tener una importante componente fluctuante de naturaleza caótica, no posee **simetría axial** dentro del plano longitudinal $(x, y, z) = (1, 0, 0)$. Un análisis análogo en los diferentes planos longitudinales de la *Figura 5.21* pone de manifiesto que tampoco existe **simetría angular** en el volumen tridimensional, principalmente en las regiones más alejadas del disco (*Figuras 5.22 y 5.23*).

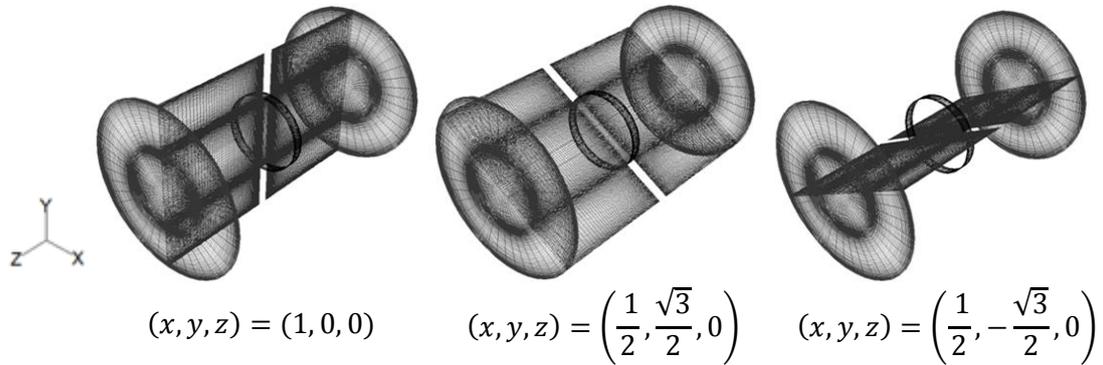


Figura 5.21. Diferentes secciones longitudinales del dominio computacional 3D.

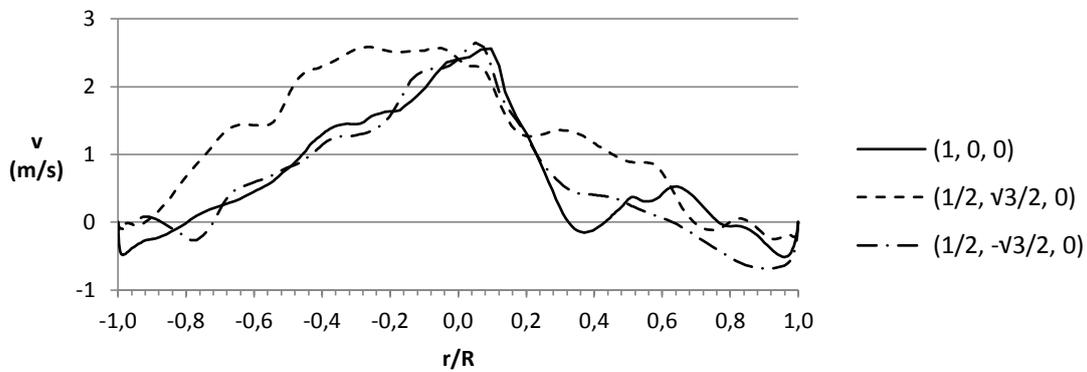


Figura 5.22. Perfil de velocidad axial en diferentes secciones transversales equidistantes entre discos. Ciclo11. Fase $\theta_1 = 0$.

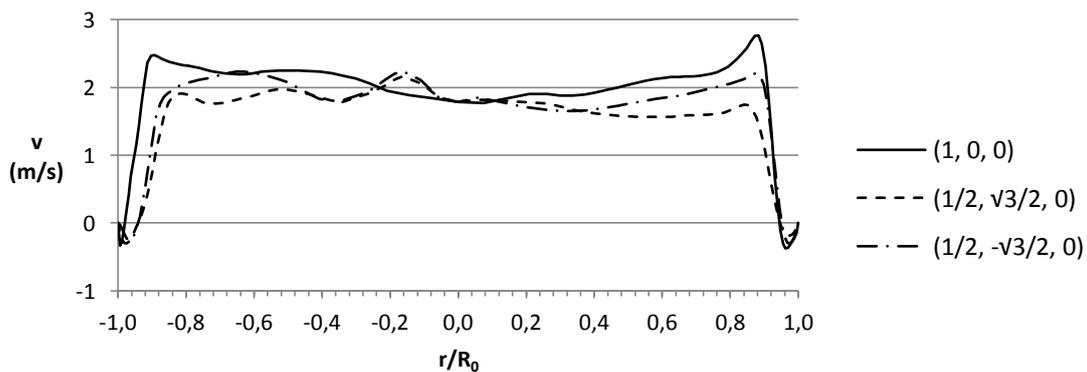


Figura 5.23. Perfil de velocidad axial en diferentes secciones transversales del disco. Ciclo11. Fase $\theta_1 = 0$.

En los contornos de velocidad axial de la *Figura 5.24*, que corresponden a diferentes fases en los planos transversales de la sección equidistante entre discos y del disco, se visualiza claramente la ruptura de simetría en el dominio computacional 3D.

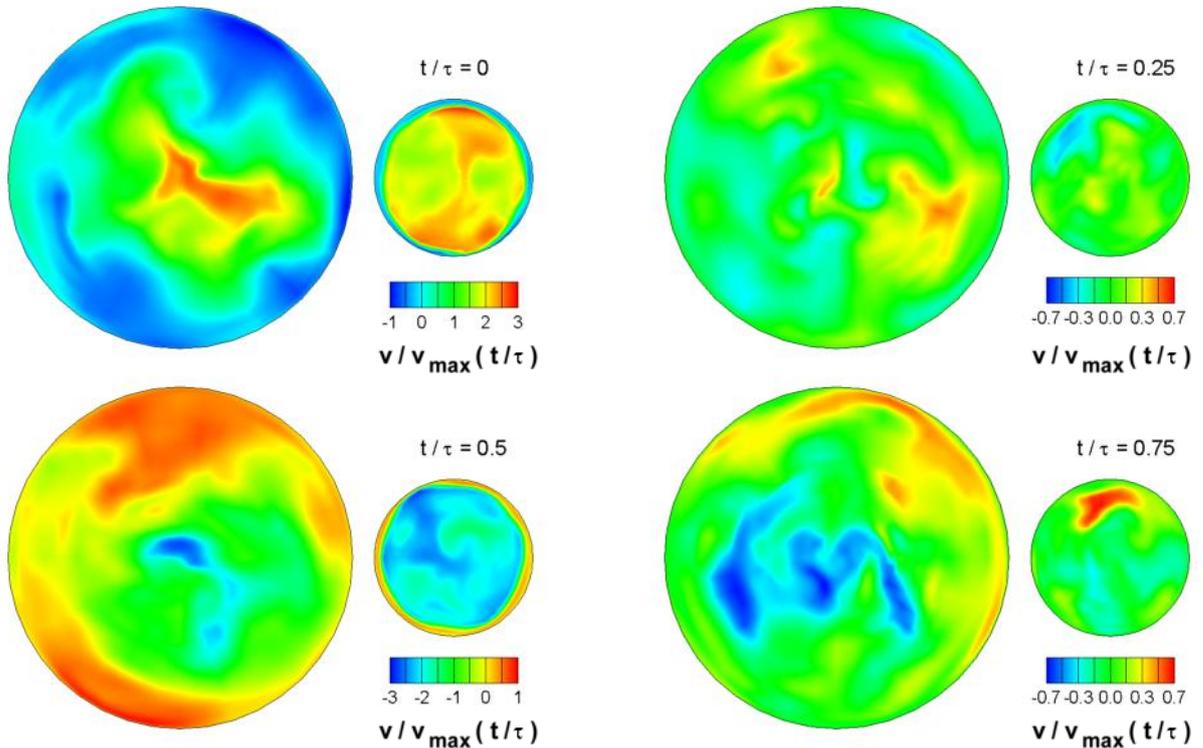


Figura 5.24. Contorno de velocidad axial en el plano transversal. Sección equidistante entre discos y sección del disco. Ciclo de oscilación 11.

5.3. RESOLUCIÓN DEL CAMPO DE VELOCIDADES.

5.3.1. Presentación de resultados.

En la simulación periódica sobre el dominio computacional 3D de 1 paso, para la condición de operación 3 (frecuencia de 2 Hz) se obtiene una solución del campo de velocidades que es periódica espacial pero no periódica temporal, a diferencia de la solución obtenida con el modelo 2D (*Apartado 3.4.1 del Capítulo 3*). Los resultados presentados en este apartado, para el ciclo de oscilación 11 y el plano longitudinal $(x, y, z) = (1, 0, 0)$, son siguientes (véase la *Figura 5.26*):

- Perfiles radiales de velocidad axial:
 - En la sección transversal equidistante entre discos: tanto la componente radial como la componente tangencial son del orden de 10 veces inferiores a la componente axial.
 - En la sección transversal del disco: tanto la componente radial como la componente tangencial son del orden de 10 veces inferiores a la componente axial.
- Contorno de velocidad entre dos discos consecutivos.
- Contorno de velocidad normal al plano (componente x).

Para presentar los resultados se seleccionan 8 fases como representativas de un ciclo completo de oscilación, formado por un total de 64 fases:

$$t_1/\tau = 0 ; t_2/\tau = 0,125 ; t_3/\tau = 0,25 ; t_4/\tau = 0,375$$

$$t_5/\tau = 0,5 ; t_6/\tau = 0,625 ; t_7/\tau = 0,75 ; t_8/\tau = 0,875$$

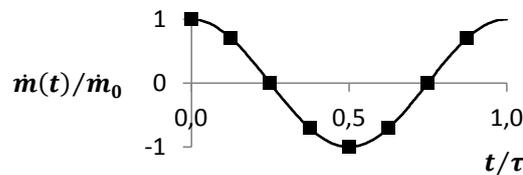


Figura 5.25. Fases de oscilación del campo de velocidades.



Figura 5.26. Izquierda, obtención de los perfiles radiales de velocidad axial; sección transversal equidistante entre discos (a) y sección transversal del disco (b). Derecha, obtención del contorno de velocidad entre dos discos consecutivos

5.3.2. Perfiles radiales de velocidad.

Nótese que los perfiles radiales de velocidad axial son adimensionalizados con la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$.

5.3.2.1. Sección transversal equidistante entre discos.

A continuación se presenta el análisis de los perfiles de velocidad axial obtenidos en la sección transversal equidistante entre discos para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$), y que se muestran en la *Figura 5.27*.

La acusada tridimensionalidad del flujo que genera la ruptura de simetría, unida a la fuerte componente fluctuante del campo de velocidades, da lugar a que la **forma parabólica** que se observa claramente en el modelo 2D (véase el *Apartado 3.4.2.1*) no exista en el caso 3D. Pese a ello, a lo largo de todo el ciclo de oscilación se detecta la presencia de una estrecha capa límite en la pared del conducto, confinada aproximadamente en $0,98 < |r/R| < 1$, que sí coincide con el análisis hecho en el modelo 2D.

Si bien es cierto que a lo largo del ciclo de oscilación se aprecia una cierta correspondencia cualitativa entre los valores de velocidad alcanzados con el modelo 2D y el 3D, en este segundo caso la transición de una fase a la siguiente es muy caótica y desordenada. Las inversiones del perfil, que en el modelo 2D muy están localizadas en las cercanías del conducto, en el modelo 3D aparecen también en regiones interiores de manera aleatoria.

- En la fase $t/\tau = 0$, que corresponde con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, la velocidad axial alcanza el valor de mayor magnitud a lo largo del ciclo de oscilación $v/u_0 = 7$ en el eje de simetría. El perfil es positivo en la mayor parte de la región central del conducto hasta $|r/R| < 0,8$ (sólo negativo localmente en $r/R = 0,4$), y se produce inversión del perfil en las proximidades de la pared para $0,8 < |r/R| < 1$, con un mínimo de velocidad de $v/u_0 = -1,75$.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0,71$, el perfil de velocidad axial es positivo prácticamente en el mismo intervalo que para $t/\tau = 0$, con una reducción del 35 % en el pico de velocidad máxima, que pasa de $v/u_0 = 7$ a $v/u_0 = 4,5$. La inversión del perfil se mantiene localizada casi en el mismo intervalo que en $t/\tau = 0$, sin la inversión local en $r/R = 0,4$, siendo el incremento del pico de velocidad mínima igual de acusado, pasando de $v/u_0 = -1,75$ a $v/u_0 = -2,5$.
- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, el pico de velocidad máxima disminuye un 65 %, hasta $v/u_0 = 1,5$. Al contrario que en la fase anterior, el pico de velocidad negativa se reduce, pasando de $v/u_0 = -2,5$ a $v/u_0 = -1$. La fuerte inercia del flujo es la responsable de que no haya en esta fase inversión completa del perfil, pese a existir gasto másico nulo, aunque sí se amplía la región de inversión respecto a $t/\tau = 0$ y $t/\tau = 0,125$, aunque no simétricamente.

- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -0,71$, se observa ya la inversión casi completa del perfil a lo largo de todo el conducto y se hace patente la existencia de un retraso entre la fase de inversión efectiva ($0,25 < t/\tau < 0,375$) y la fase de inversión teórica ($t/\tau = 0,25$) debido a la inercia del flujo. Respecto a la fase anterior, se detecta un descenso brusco del 400 % del pico de velocidad, que pasa de $v/u_0 = 1,5$ a $v/u_0 = -4,5$.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -1$, se aprecia de nuevo un importante incremento en el valor del pico de velocidad respecto a $t/\tau = 0,375$, de $v/u_0 = -4,5$ a $v/u_0 = -8$ (en torno al 80 %). Aparecen regiones de recirculación en las proximidades de la pared con un máximo de velocidad de $v/u_0 = 2,75$.
- El análisis en el resto de fases es análogo.

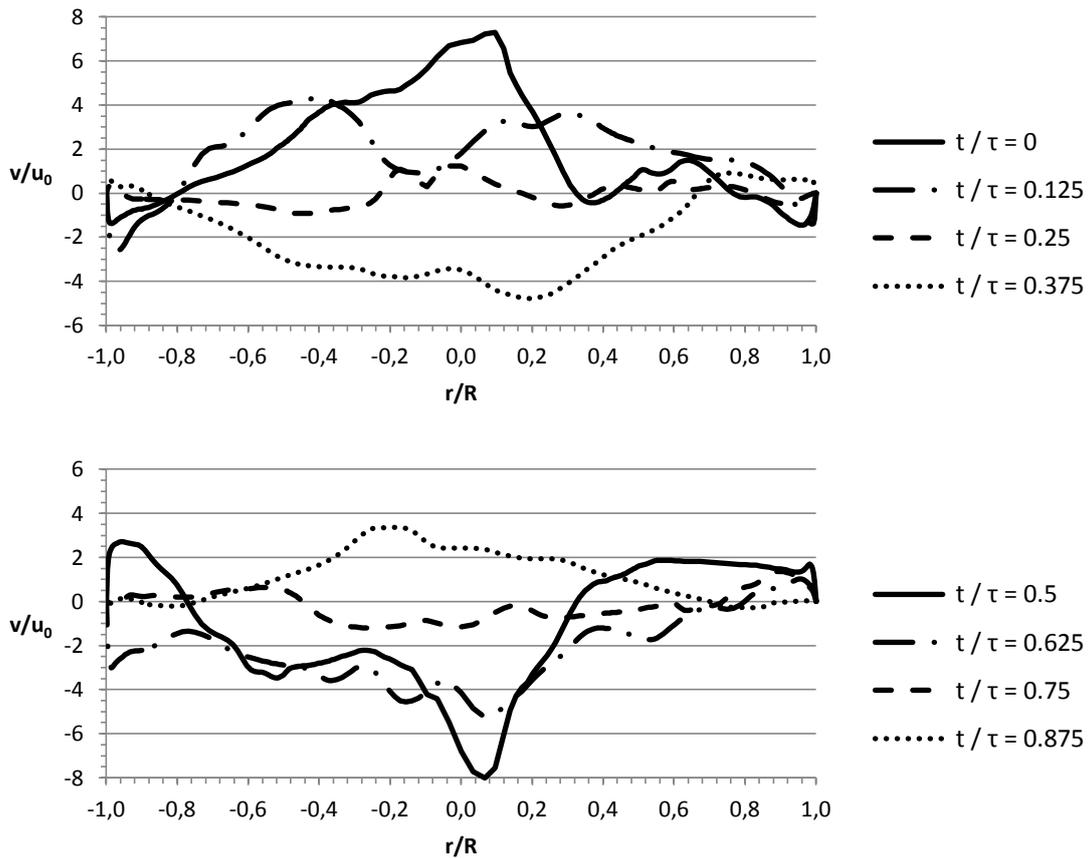


Figura 5.27. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal equidistante entre discos. Condición de operación 3: $f = 2$ Hz, $x_0 = 28$ mm. Ciclo de oscilación 11.

5.3.2.2. Sección transversal del disco.

A continuación se presenta el análisis de los perfiles de velocidad axial obtenidos en la sección transversal del disco para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$), y que se muestran en la *Figura 5.28*.

A diferencia de lo que ocurre en la sección transversal equidistante entre dos discos consecutivos, los perfiles de velocidad axial en la sección transversal del disco que se obtienen con el modelo 3D se corresponden de manera más clara con los obtenidos en el modelo 2D (véase el *Apartado 3.4.2.2*), existiendo un mayor paralelismo en los resultados. El **cambio de pendiente** mostrado en los perfiles 2D se intuye también en 3D, con la particularidad de que en las fases de gasto másico máximo y mínimo, para $t/\tau = [0, 0,5]$, la convexidad del perfil es contraria.

El hueco del disco por el que el flujo es forzado a pasar es muy estrecho, por lo que la componente axial de la velocidad es predominante, siendo la componente radial del orden de 100 veces menor para las fases de mayor gasto másico $t/\tau = [0, 0,5]$. Se trata por tanto de un perfil prácticamente unidimensional, ya que no hay lugar para la existencia de vórtices o recirculaciones.

Se detecta de nuevo la presencia de una estrecha capa límite en la pared del conducto, confinada aproximadamente en $0,95 < |r/R_0| < 1$, que coincide con la reportada en el modelo 2D (más claramente que en la sección transversal equidistante entre discos). Debido también al reducido espesor del disco, la distancia geométrica no es suficiente para que la capa límite se desarrolle. En consecuencia, el esfuerzo cortante en esta región es muy elevado; esta característica podría desaconsejar el empleo de discos insertados en reactores de flujo oscilatorio con reactivos biológicos, en beneficio de elementos que introducen menor esfuerzo cortante, como por ejemplo muelles helicoidales.

- En la fase $t/\tau = 0$, que corresponde con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, la velocidad axial alcanza el valor de mayor magnitud a lo largo del ciclo de oscilación $v/u_0 = 8$, no en el eje de simetría como en 2D, sino en las proximidades del disco $|r/R| = 0,9$ como consecuencia del cambio de convexidad respecto al modelo 2D (este valor máximo está en consonancia con el detectado en la sección transversal equidistante entre discos de $v/u_0 = 7$). El perfil es positivo prácticamente en toda la región del hueco del disco, produciéndose inversión sólo en las proximidades de la pared para $0,98 < |r/R_0| < 1$, con un mínimo de velocidad de $v/u_0 = -1$.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0,71$, el perfil de velocidad axial es positivo en la región $|r/R_0| < 0,9$, al igual que ocurre en la fase precedente de gasto másico máximo. El pico de velocidad máxima experimenta una reducción del 35 % respecto a $t/\tau = 0$, pasando de $v/u_0 = 8$ a $v/u_0 = 5$, con el mismo porcentaje que en la sección equidistante entre discos. El mínimo de velocidad se reduce hasta $v/u_0 = -0,75$.
- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, sí aparece una región de inversión asimétrica en $0,8 < r/R_0 < 1$. De nuevo, la fuerte inercia del flujo es la responsable de que no haya inversión completa del perfil, pese a existir gasto másico nulo. El pico de velocidad máxima disminuye un 85 %, hasta $v/u_0 = 0,75$, frente al 65 % que se experimenta en la sección equidistante entre discos. El pico de velocidad negativa que aparece tiene un valor de $v/u_0 = -1$.

- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -0,71$, se observa una fuerte inversión del perfil, no completa a lo largo de todo el hueco ya que aparece en $0,95 < |r/R_0| < 1$, y se hace patente la existencia de un retraso entre la fase de inversión efectiva ($0,25 < t/\tau < 0,375$) y la fase de inversión teórica ($t/\tau = 0,25$) debido a la inercia del flujo. Al igual que en la fase $t/\tau = 0$, el pico de velocidad no se alcanza en el eje de simetría, existiendo una aceleración del flujo notable en $|r/R_0| = 0,85$ respecto al resto del perfil. Este pico de velocidad varía bruscamente de $v/u_0 = 0,75$ a $v/u_0 = -4,5$, mientras que la recirculación pasa de $v/u_0 = -1$ a $v/u_0 = 0,5$.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -1$, se aprecia un incremento del 45 % en el valor del pico de velocidad mínima respecto a $t/\tau = 0,375$, de $v/u_0 = -4,5$ a $v/u_0 = -6,5$. En las regiones de recirculación próximas al disco, el pico de velocidad pasa de $v/u_0 = 0,5$ a $v/u_0 = 1,5$.
- El análisis en el resto de fases es análogo.

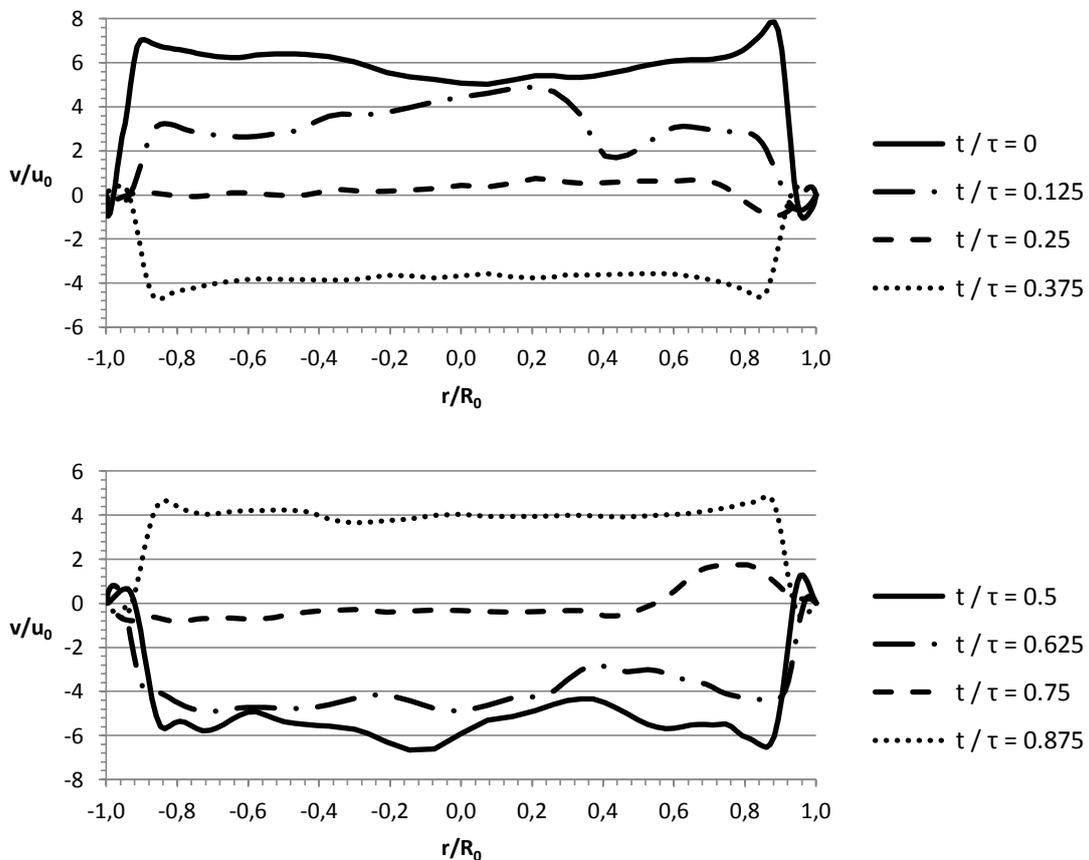


Figura 5.28. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal del disco. Condición de operación 3: $f = 2$ Hz, $x_0 = 28$ mm. Ciclo de oscilación 11.

5.3.3. Contornos de velocidad.

En la *Figura 5.29* se muestra la evolución del contorno de velocidad que se obtiene para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$) en la región del dominio computacional que se extiende entre dos discos consecutivos.

En general, la solución del contorno de velocidad que se obtiene para el modelo 3D tiene una muy estructura parecida a la obtenida para el modelo 2D (véase el *Apartado 3.4.3* del *Capítulo 3*). Ambos mecanismos de mezcla son significativamente similares, con la diferencia del comportamiento altamente fluctuante y caótico del campo de velocidades para el caso 3D ya descrito en los apartados anteriores.

- En la fase $t/\tau = 0$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, se observa la existencia de una región de alta velocidad con componente axial predominante (más evidente en la fase $t/\tau = 0,5$), que se extiende entre dos discos consecutivos, ocupando todo el volumen que correspondería a un cilindro ficticio de radio igual al radio interior del disco. A diferencia del modelo 2D, en el 3D sí existe mezclado radial entre esta región central y la región periférica, formada por una gran burbuja de recirculación que cubre todo el volumen libre hasta la pared del conducto (de nuevo más evidente en la fase $t/\tau = 0,5$). Dentro de esta burbuja aparecen, a su vez, un gran número de recirculaciones que interactúan fuertemente entre sí, en lugar de las dos únicas recirculaciones que se observan en el modelo 2D. En las proximidades del contacto de los discos con la pared del conducto, aguas abajo y aguas arriba del disco, se detecta la presencia de diferentes vórtices residuales que giran en sentido contrario al resto de recirculaciones.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0,71$, la región central de alta velocidad se expande hacia la periferia perdiendo intensidad y deja de ocupar todo el volumen entre dos discos consecutivos. Las recirculaciones internas de la burbuja periférica siguen presentes, ocupando el volumen que deja libre la región central de alta velocidad, e interactuando entre sí
- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, la región central sigue perdiendo intensidad en favor de la burbuja periférica, que se extiende por todo el volumen promoviendo un complejo mezclado radial entre ambas regiones, a diferencia de lo reportado en el modelo 2D. Pese a tener gasto másico nulo, se aprecia la componente axial del movimiento de las fases anteriores, y no se produce aún la inversión debido a la fuerte inercia del flujo.
- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -0,71$, es cuando se evidencia la inversión efectiva del flujo, plasmándose claramente la formación de la región central de alta velocidad. Esta región, en su avance desde un disco hacia el siguiente, desplaza la burbuja periférica que se ve en la fase $t/\tau = 0,25$ en la dirección del flujo hasta frenar la rotación de la burbuja y obligar al volumen encerrado dentro a atravesar el hueco del disco, promoviendo así un fuerte mezclado radial. Simultáneamente a este avance, se crea otra burbuja de recirculación que gira en sentido opuesto. El comportamiento en esta fase coincide exactamente con el modelo 2D.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = -1$, esta nueva burbuja crece a la vez que se desarrolla la región de alta velocidad hasta ocupar ambas todo el volumen, al igual que en la fase $t/\tau = 0$. El análisis en el resto de fases es análogo.

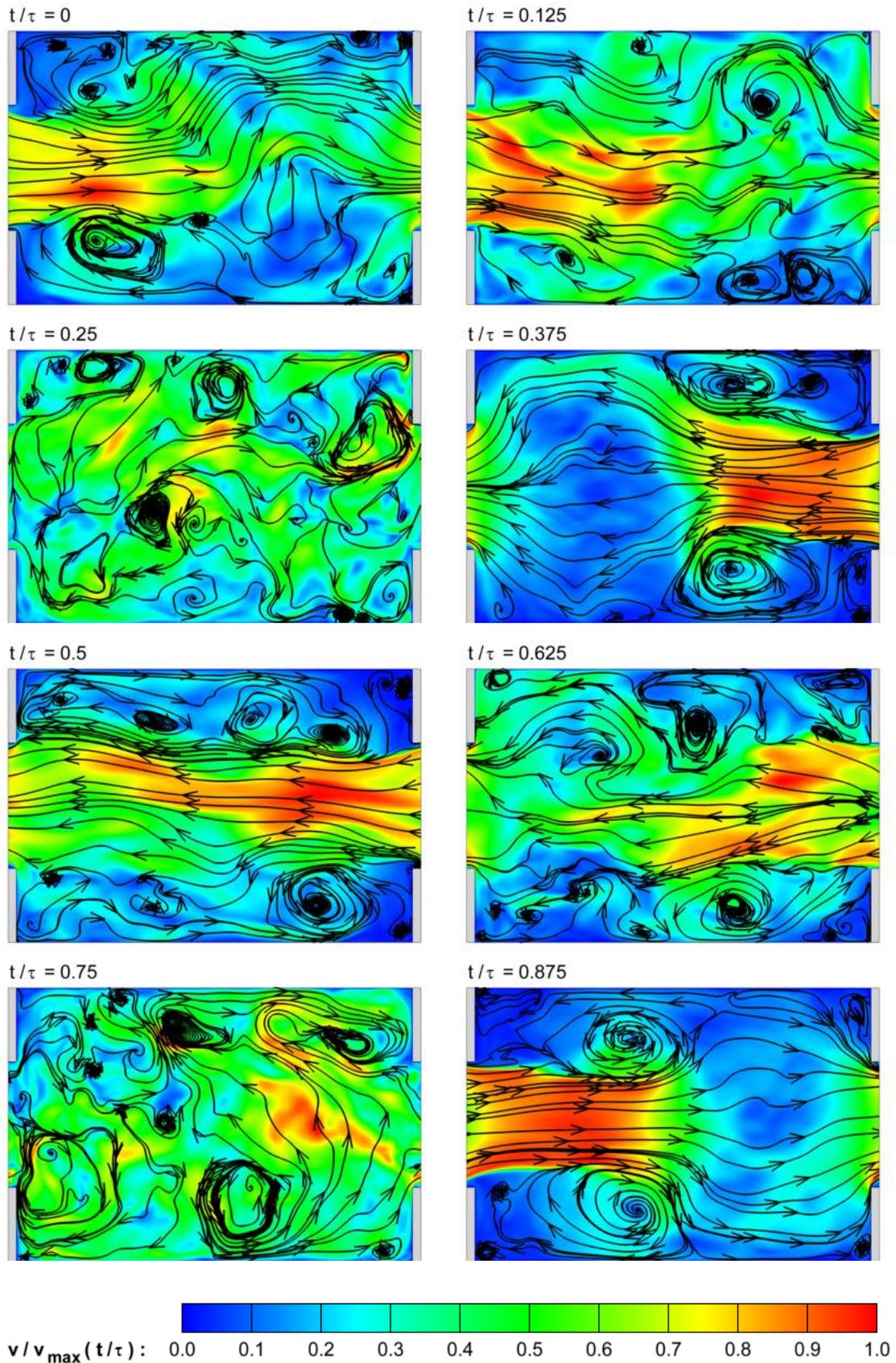


Figura 5.29. Contorno de velocidad. Condición de operación 3: $f = 2$ Hz, $x_0 = 28$ mm. Ciclo de oscilación 11.

Nótese que el contorno de velocidad de cada fase t/τ ha sido adimensionalizado con la correspondiente velocidad local máxima $v_{max}(t/\tau)$ para identificar fácilmente las regiones de alta y baja velocidad. El análisis del contorno de velocidad recogido se complementa con un **vídeo** en el que se muestra la evolución temporal del contorno de velocidad a lo largo de 6 ciclos de oscilación, para una solución espacialmente periódica, pero no periódica en el tiempo (Vídeo 4. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D. Frecuencia 2 Hz).

5.3.4. Contornos de velocidad normal al plano.

Como ya se ha mostrado en el *Apartado 5.2.7*, el campo de velocidad del flujo oscilatorio no posee simetría axial dentro del mismo plano longitudinal, ni simetría angular en diferentes planos longitudinales. En el *Apartado 5.3.3* anterior se observa que, pese a existir un cierto parecido con las estructuras de mezclado obtenidas en 2D, la solución numérica del modelo 3D se aleja del comportamiento axil-simétrico.

Al evaluar la componente x de velocidad, normal al plano longitudinal $(x, y, z) = (1, 0, 0)$, se obtiene un contorno efectivamente **no nulo**, a diferencia del que se tiene por definición con el modelo 2D (*Figura 5.30*).

- En la fase $t/\tau = 0$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, la componente normal de velocidad es localmente del orden de la mitad de la máxima velocidad alcanzada en dicha fase, es decir $v/v_{max}(t/\tau = 0) = 0,5$. El valor alcanzado respecto a la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$ es de $v/u_0 = 4,4$.
- En la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, es $v/v_{max}(t/\tau = 0,25) = 1$ y $v/u_0 = 2,6$.

Se concluye por lo tanto que, la solución espacialmente periódica que se obtiene para el modelo 3D con los 11 primeros ciclos de oscilación no presenta un comportamiento axil-simétrico que permita justificar el análisis numérico del flujo oscilatorio empleando únicamente un modelo 2D.

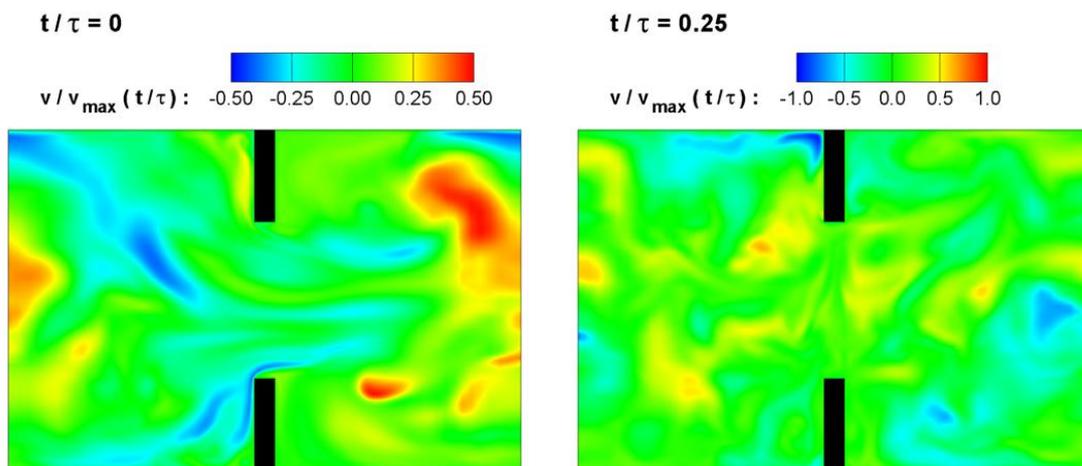


Figura 5.30. Contorno de velocidad normal al plano.
Condición de operación 3: $f = 2$ Hz, $x_0 = 28$ mm. Ciclo de oscilación 11.

5.3.5. Influencia del número de Reynolds oscilatorio.

Una vez analizados en profundidad los resultados obtenidos con la condición de operación 3 (véanse los *Apartados 5.3.2, 5.3.3 y 5.3.4*), se extiende el análisis al resto de condiciones de operación simuladas. Como se recoge en la *Tabla 5.2*, la amplitud de oscilación x_0 se mantiene constante (en consecuencia el número de Strouhal St es fijo) y se varía la frecuencia de oscilación f , siendo la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$. Se estudia por lo tanto la influencia del número Reynolds oscilatorio Re_o sobre los perfiles radiales de velocidad axial, de modo análogo a cómo se hace en el modelo 2D (véase el *Apartado 3.4.4 del Capítulo 3*).

$$Re_o = \frac{2\pi f x_0 \rho D}{\mu} \quad (\text{ec.5.6})$$

$$St = \frac{D}{4\pi x_0} \quad (\text{ec.5.7})$$

Condición de operación	x_0 (mm)	f (Hz)	u_0 (m/s)	Re_o	St
1	28	0,5	0,088	2.189	0,071
2	28	1	0,176	4.377	0,071
3	28	2	0,352	8.754	0,071

Tabla 5.2. Condiciones de operación del reactor de flujo oscilatorio.

La relación de proporcionalidad entre frecuencia de oscilación y velocidad axial que aparece claramente en el modelo 2D a lo largo de todo el ciclo de oscilación, en el modelo 3D no se muestra de forma tan rotunda. Para la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 5.31*), esta proporcionalidad se intuye sólo en la región central del perfil y en el entorno de las fases de mayor gasto másico, $t/\tau = 0$ y $t/\tau = 0,5$. Para la sección transversal del disco (*Figura 5.32*), la relación sí es patente de manera clara en todo el perfil, de nuevo cerca de $t/\tau = 0$ y $t/\tau = 0,5$. En ambas secciones, al acercarse las fases de gasto másico nulo, $t/\tau = 0,25$ y $t/\tau = 0,75$, el comportamiento caótico del flujo se impone diluyendo la correspondencia entre frecuencia de oscilación y velocidad axial.

Al adimensionalizar la velocidad axial con la velocidad de oscilación correspondiente a cada frecuencia, se pone de manifiesto que la forma de los perfiles tiende a ser coincidente en ambas secciones transversales (*Figuras 5.33 y 5.34*) a lo largo de todo el ciclo de oscilación. Un estudio análogo centrado en los contornos de velocidad ofrece el mismo resultado, que se corrobora con la visualización conjunta de los tres **vídeos** en los que se muestra las evoluciones temporales de los contornos de velocidad a lo largo de 6 ciclos de oscilación para la solución espacialmente periódica, pero no periódica en el tiempo, de cada una de las tres condiciones de operación:

- Vídeo 4. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D. Frecuencia 2 Hz.
- Vídeo 5. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D. Frecuencia 1 Hz.
- Vídeo 6. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D. Frecuencia 0,5 Hz.

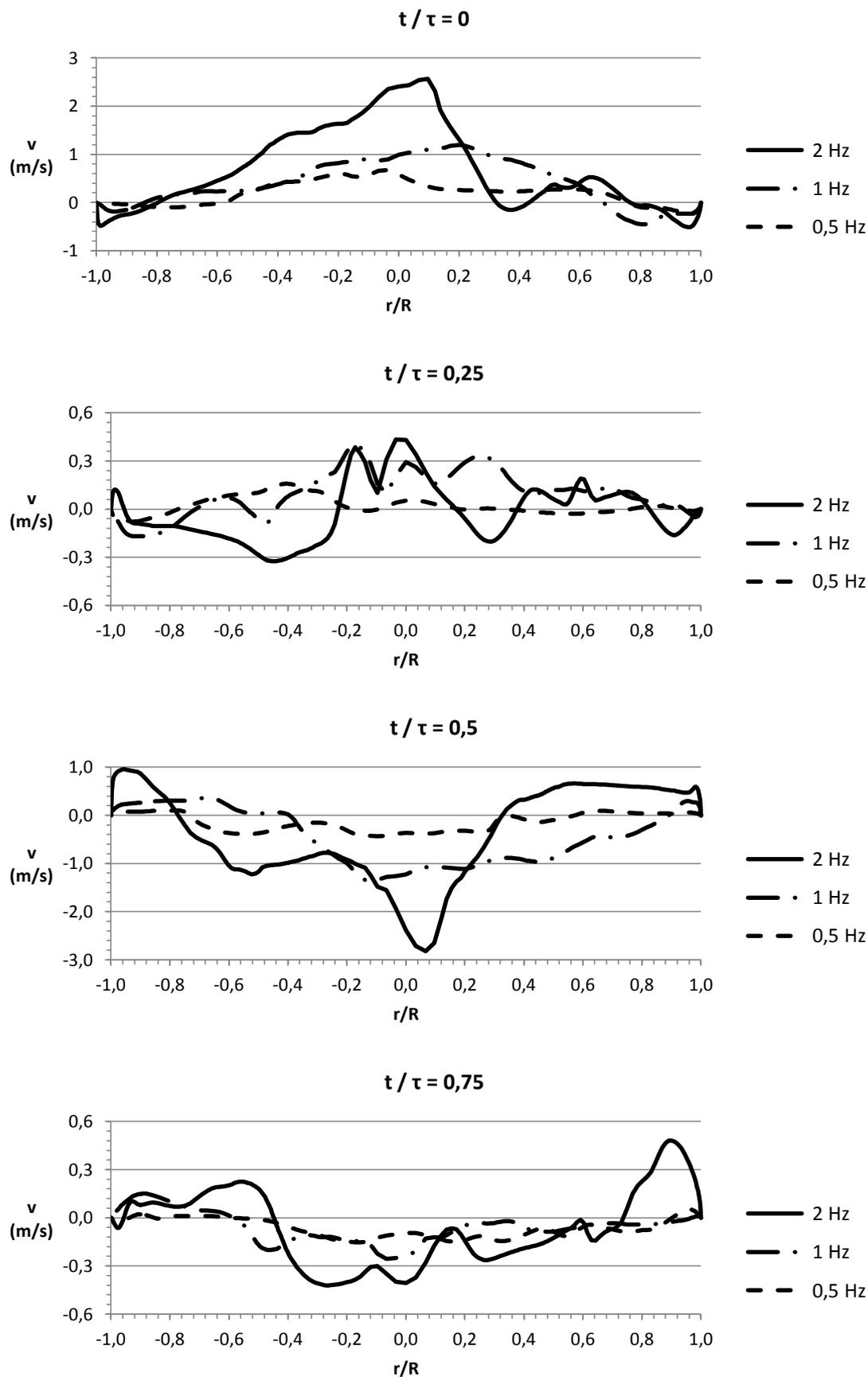


Figura 5.31. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos.
 $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm. Ciclo de oscilación 11.

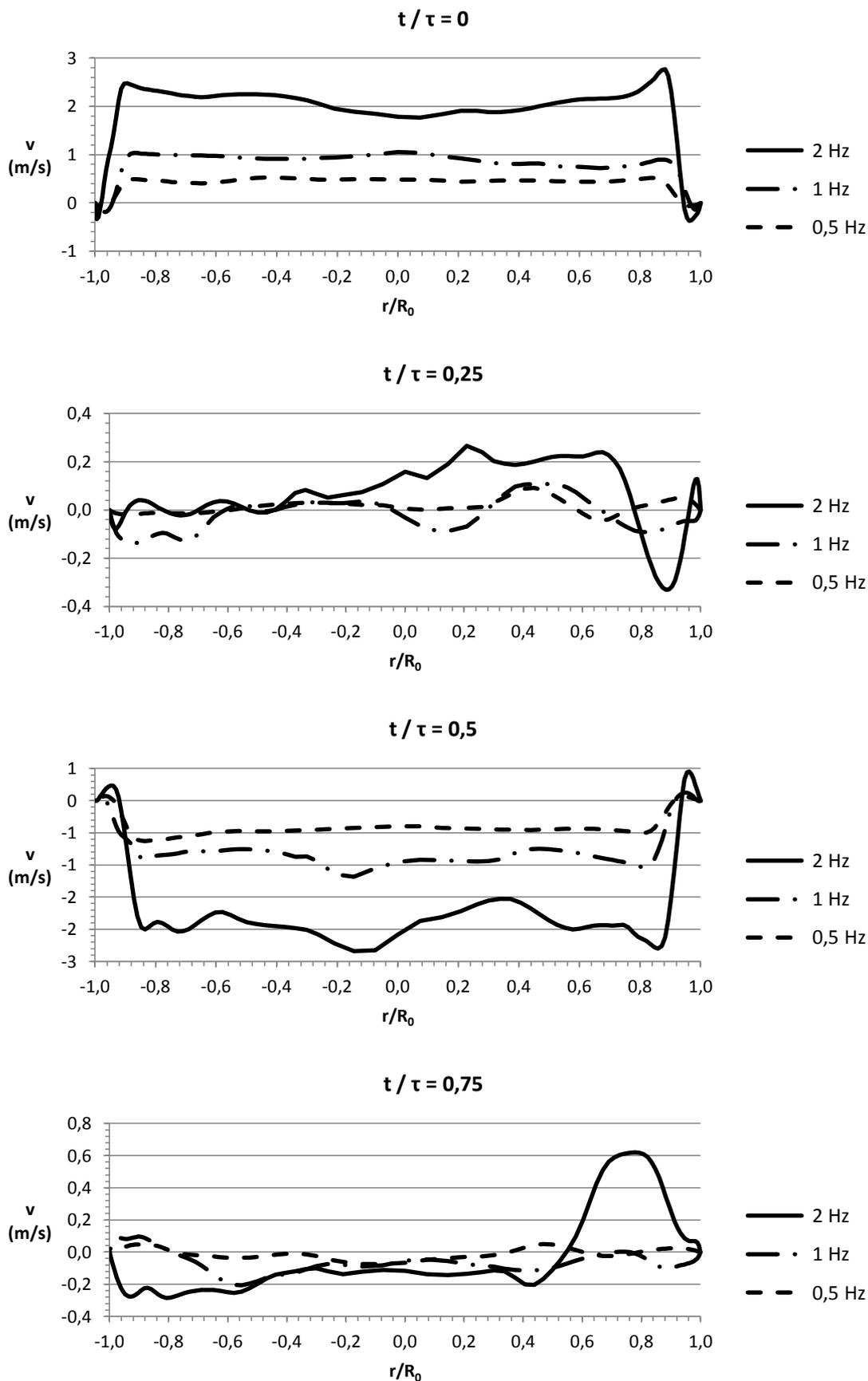


Figura 5.32. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco.
 $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm. Ciclo de oscilación 11.

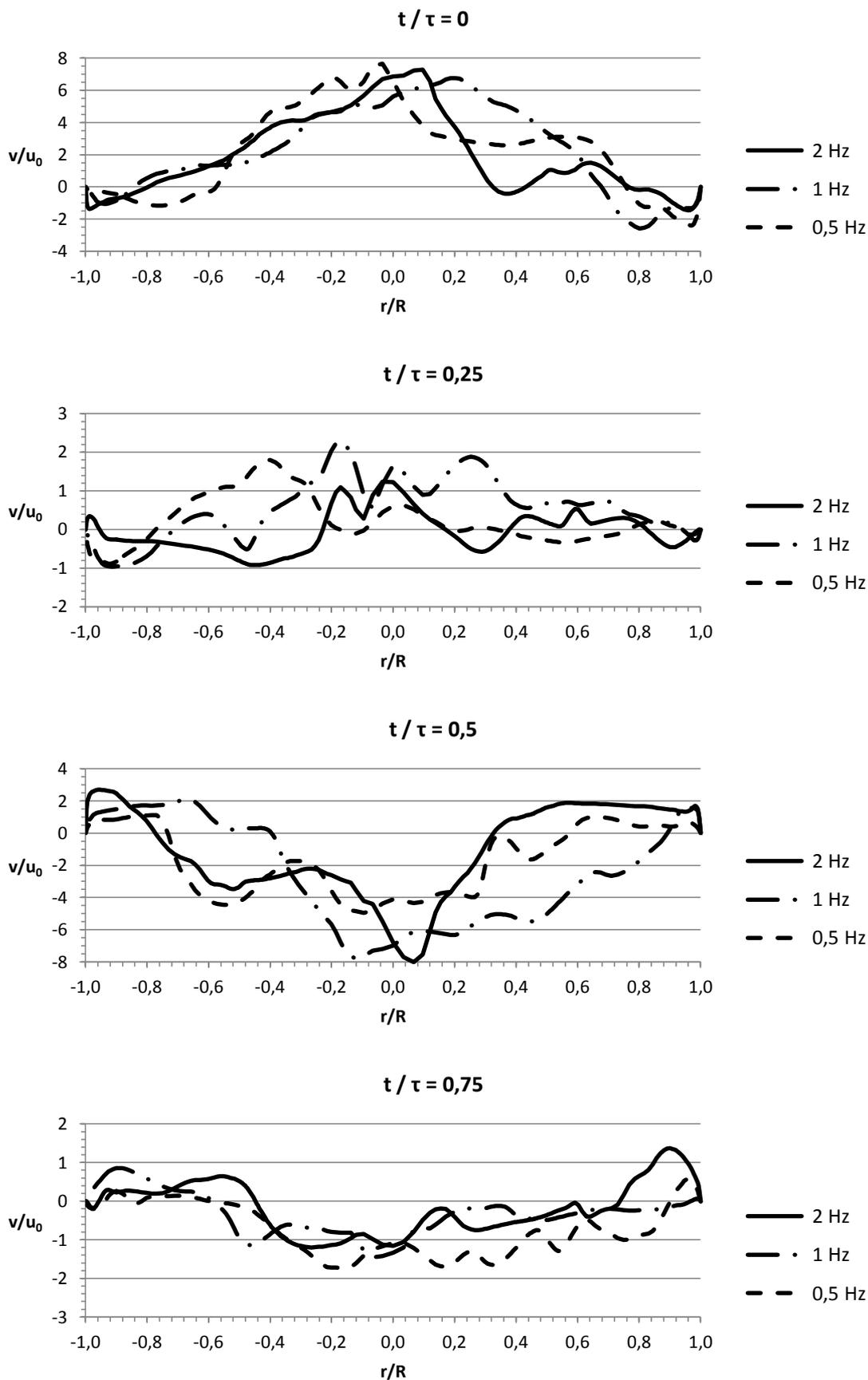


Figura 5.33. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal equidistante entre discos. $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm. Ciclo de oscilación 11.

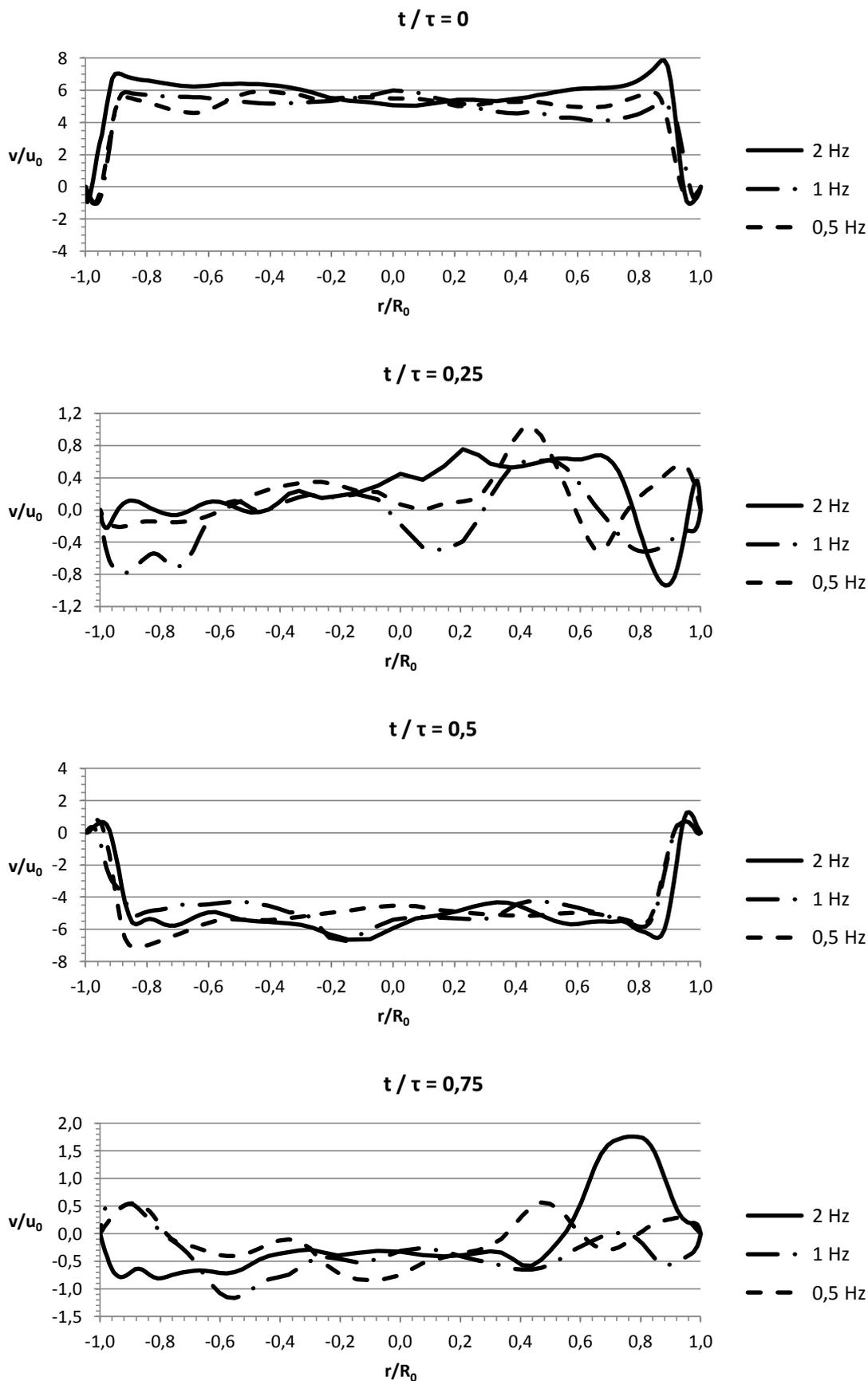


Figura 5.34. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal del disco.
 $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm. Ciclo de oscilación 11.

Se concluye por lo tanto que el parámetro predominante en condiciones de elevado número de Reynolds oscilatorio y reducido número de Strouhal es el Strouhal, siendo poco relevante la influencia del Reynolds oscilatorio sobre las estructuras de mezcla que se forman en el interior del reactor de flujo oscilatorio. Nótese que estas condiciones de operación no han sido reproducidas por ningún otro estudio numérico del flujo oscilatorio en *OBR* (véase un resumen de dichos estudios en la *Tabla 1.3* del *Capítulo 1*).

Se observa además que el mecanismo de mezcla descrito en el *Apartado 5.3.3*, válido para las tres condiciones de operación simuladas en el presente proyecto, es muy diferente al reportado por la bibliografía [2, 5, 38, 39, 46, 48] para las condiciones de bajo Reynolds oscilatorio o Strouhal próximo a la unidad. En casos con alto número de Strouhal, las estructuras vorticales que viajan aguas abajo durante un semi-ciclo, impactan con las estructuras vorticales que aparecen en el semi-ciclo siguiente, induciendo fenómenos de mezclado radial muy intensos. Sin embargo, con bajos números de Strouhal, esta interacción desaparece, y es sustituida por un complejo conjunto de recirculaciones que fluctúan, creándose y destruyéndose de manera caótica, con el avance del ciclo oscilatorio.

5.4. PROMEDIADO EN FASE.

5.4.1. Justificación.

La solución del campo de velocidades para el modelo 2D que se ha obtenido en este estudio numérico es espacial y temporalmente periódica (véase el *Apartado 3.3.6* del *Capítulo 3*). Para el modelo 3D, como se muestra en el *Apartado 5.2.6*, la solución del campo de velocidad es sólo espacialmente periódica, no habiéndose alcanzado periodicidad temporal con los 11 primeros ciclos de oscilación. Pese a esta diferencia, se aprecia correspondencia cualitativa en la forma y en la magnitud de los perfiles radiales de velocidad axial de los modelos 3D y 2D (véase el *Apartado 5.3.2*). De la misma manera, los contornos de velocidad de ambos modelos muestran estructuras y mecanismos de mezcla similares (véase el *Apartado 5.3.3*). Estas similitudes no son suficientes para justificar el análisis numérico del flujo oscilatorio 3D empleando únicamente una aproximación 2D, ya que el contorno de velocidad normal al plano longitudinal de la solución 3D se aleja del comportamiento axial-simétrico (véase el *Apartado 5.3.4*). Nótese que las discrepancias reportadas surgen al comparar la solución del ciclo de oscilación 11 del modelo 3D, no periódica en el tiempo, con la solución del modelo 2D que sí es temporalmente periódica.

Resulta razonable discutir, por lo tanto, la posibilidad de que una solución 3D promediada se aproxime mejor a la solución 2D. Para ello se aplica la técnica del **promediado en fase** (*phase-locked average, PLA*), que consiste en promediar el campo de velocidad que se obtiene para cada uno de los 64 casos (fases) que se guardan del total de casos que componen la discretización del ciclo de oscilación. Sea $\vec{v}_n(\vec{x}, i)$ el campo de velocidades que se obtiene en un punto \vec{x} del dominio computacional Ω para el caso guardado n en el ciclo de oscilación i , sobre un total de n_0 casos y k ciclos resueltos. La solución promediada en fase del campo de velocidades $\vec{V}_n(\vec{x})$ en dicho punto viene dada por:

$$\vec{V}_n(\vec{x}) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \vec{v}_n(\vec{x}, i) \quad ; \quad n = 1, 2, \dots, n_0 \quad ; \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (\text{ec.5.8})$$

Nótese que la solución del primer ciclo de oscilación que se obtiene en el modelo 3D está condicionada por el cambio de modelo de turbulencia, del modelo $k-\omega$ SST con que se realiza la simulación estacionaria al modelo LES con que se realiza la simulación no estacionaria (véase el *Apartado 5.2.1*). A fin de aislar la influencia del modelo de turbulencia aplicado al caso de inicio del ciclo se obvia el ciclo 1 para hacer el promediado en fase del campo de velocidades, siendo:

$$\vec{V}_n(\vec{x}) = \frac{1}{10} \sum_{i=2}^{11} \vec{v}_n(\vec{x}, i) \quad ; \quad n = 1, 2, \dots, 64 \quad ; \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (\text{ec.5.9})$$

5.4.2. Perfiles radiales de velocidad promediados y desviación estándar.

En este apartado se presenta el cálculo de la desviación estándar que corresponde al promediado en fase del campo de velocidad (sin considerar el primer ciclo de oscilación) en la sección transversal equidistante entre discos y en la sección transversal del disco.

El estudio se centra en la componente axial de la velocidad, predominante en el flujo, y en la fase $t/\tau = 0$ que corresponde con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, para obtener un orden de magnitud de la desviación cometida al promediar. Así, la desviación estándar muestral se obtiene como [63]:

$$V = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k v(i) \quad (\text{ec.5.10})$$

$$s = \sqrt{\frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^k [v(i) - V]^2} \quad (\text{ec.5.11})$$

Los resultados obtenidos en ambas secciones transversales, para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$), se presentan a continuación (Figuras 5.35 y 5.36), comparándose los perfiles radiales promediados en 3D con los perfiles radiales obtenidos en el modelo 2D. Se observa una **mejora de la axial-simetría** de la solución promediada en 3D, respecto a la solución del ciclo 11 (véanse las Figuras 5.27 y 5.28), con una menor dispersión en la sección transversal del disco.

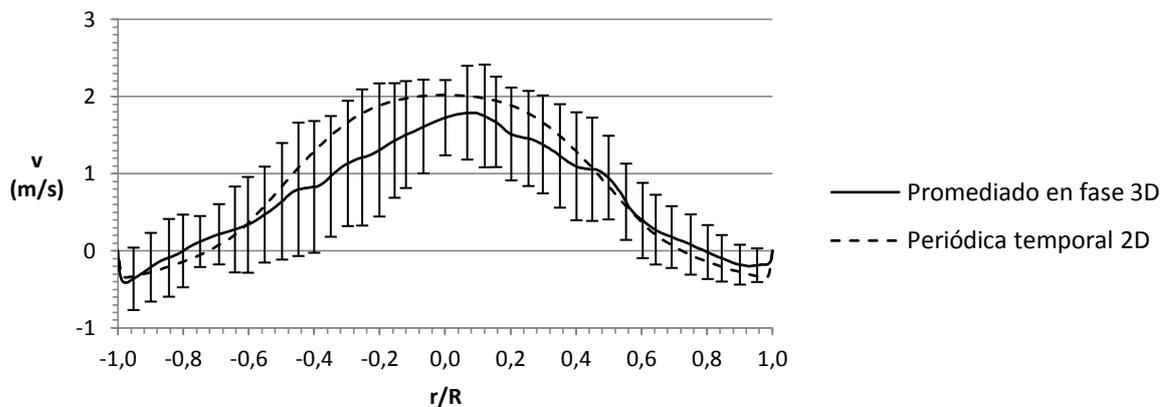


Figura 5.35. Desviación estándar del perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Condición de operación 3: $f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$. Fase $t/\tau = 0$.

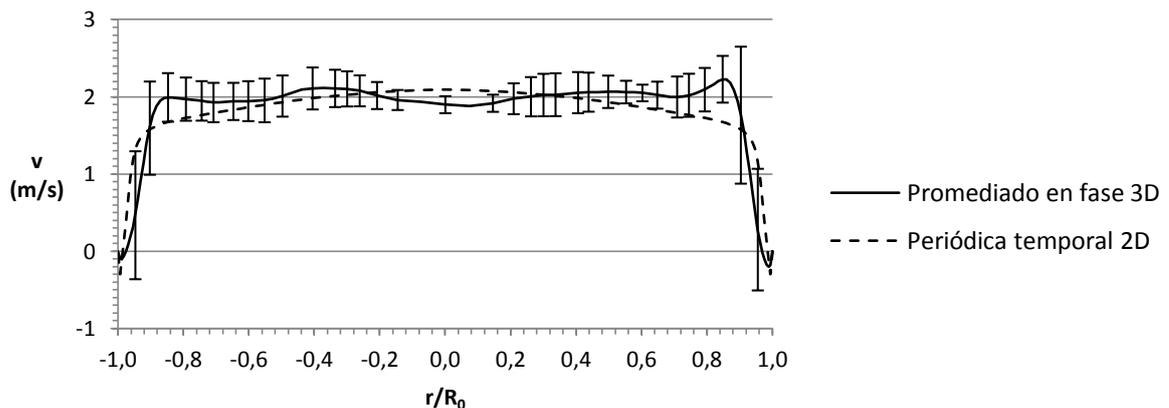


Figura 5.36. Desviación estándar del perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Condición de operación 3: $f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$. Fase $t/\tau = 0$.

5.4.3. Contornos de velocidad promediados.

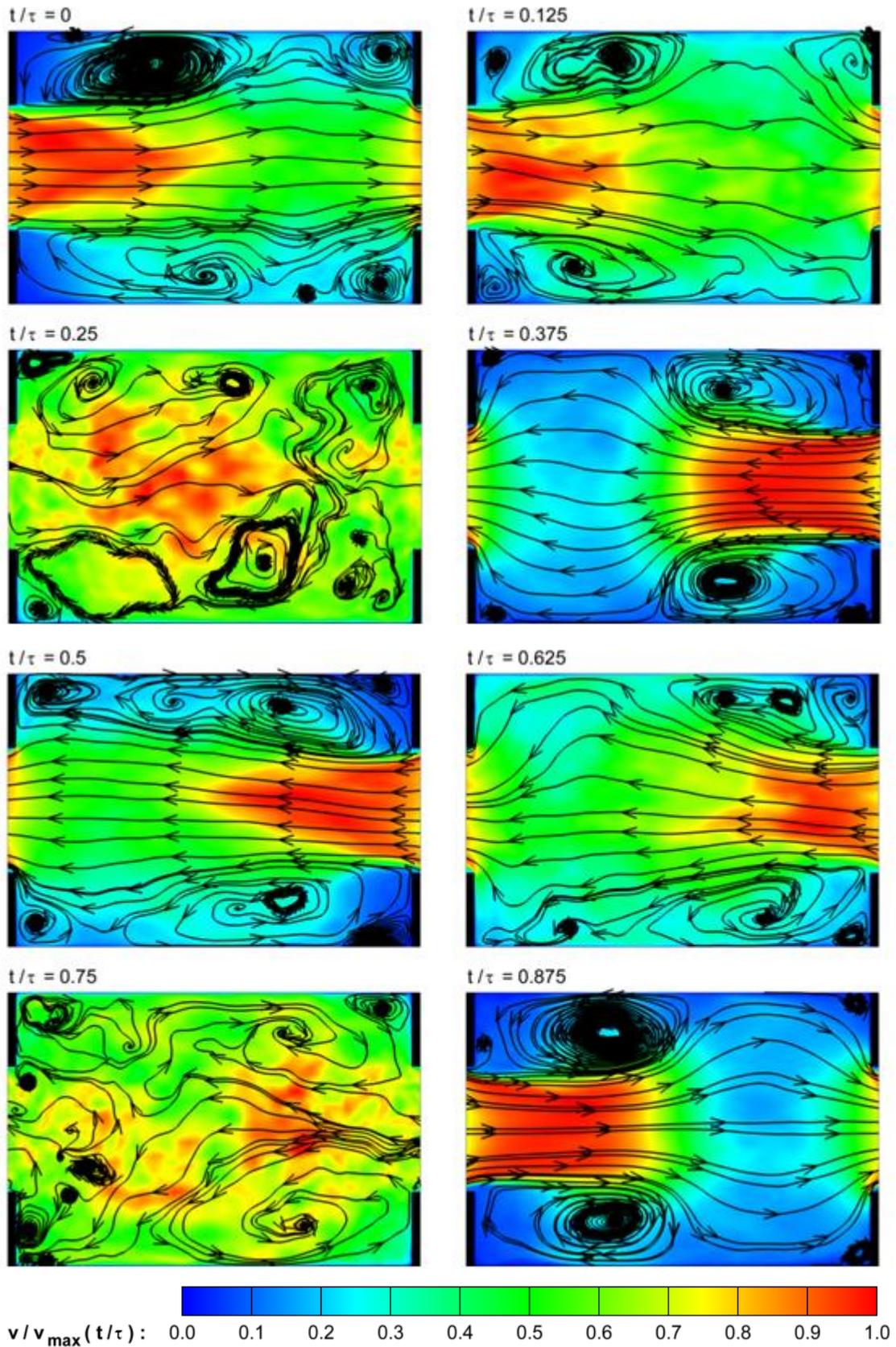


Figura 5.37. Contorno de velocidad promediado en fase.
Condición de operación 3: $f = 2$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

El análisis del campo de velocidades promediado en fase confirma la mejora de axil-simetría que se adelanta en el apartado anterior, de la solución promediada en 3D, respecto a la solución del ciclo 11. Además, al comparar esta solución promediada (Figura 5.37) con las obtenidas en el ciclo de oscilación 11 (Figura 5.29) y en el modelo 2D (Figura 3.49 del Capítulo 3) se observa que:

- En primer lugar, al promediar en fase la solución 3D se reduce notablemente el comportamiento caótico y fluctuante del campo de velocidades, principalmente en las fases $t/\tau = 0$ y $t/\tau = 0,125$.
- En segundo lugar, la solución 3D promediada se aproxima mejor que la solución 3D del ciclo 11 a la solución 2D.

Nótese que el contorno de velocidad de cada fase t/τ ha sido adimensionalizado con la correspondiente velocidad local máxima $v_{max}(t/\tau)$ para identificar fácilmente las regiones de alta y baja velocidad. El análisis del contorno de velocidad recogido se complementa con un **vídeo** en el que se muestra la evolución temporal del contorno de velocidad a lo largo de 6 ciclos de oscilación, para la solución espacialmente periódica promediada en fase a lo largo de 11 ciclos (Vídeo 7. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D PLA. Frecuencia 2 Hz).

5.4.4. Contornos de velocidad normal al plano promediados.

Al aplicar también la técnica de promediado en fase a la componente x de velocidad, normal al plano longitudinal $(x,y,z) = (1,0,0)$, se corrobora la mejora del comportamiento axil-simétrico de la solución 3D, de un modo aún más claro que con el análisis de los perfiles y el contorno de velocidades promediadas de los apartados anteriores.

Al comparar el contorno de velocidad normal que se obtiene para las fases $t/\tau = 0$ y $t/\tau = 0,25$ con el modelo 3D en el ciclo 11 (Figura 5.30) frente al contorno en dichas fases para la solución 3D promediada (Figura 5.38) se observa una tendencia muy evidente hacia un campo de velocidades nulo, tal y como ocurre en el modelo 2D.

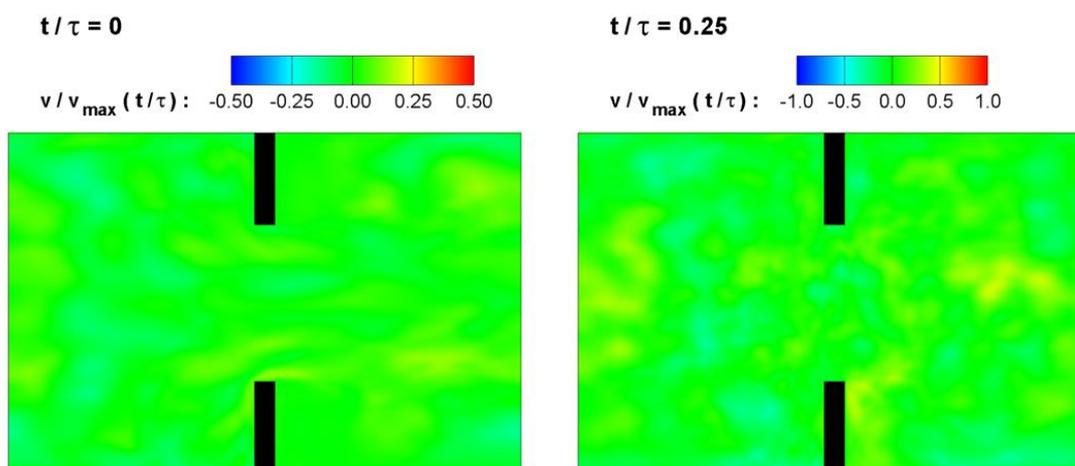


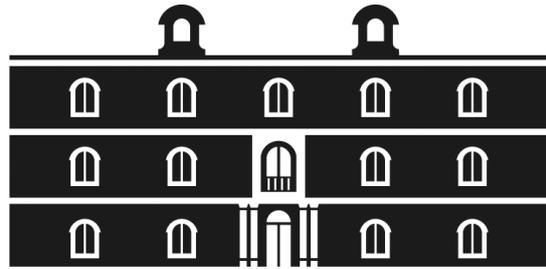
Figura 5.38. Contorno de velocidad normal al plano promediada en fase.
Condición de operación 3: $f = 2$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

- En la fase $t/\tau = 0$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 1$, la componente normal de la velocidad se reduce desde $v/v_{max} = 0,5$ en el ciclo 11, hasta $v/v_{max} = 0,15$ tras promediar en fase. El valor alcanzado respecto a la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$ baja desde $v/u_0 = 4,4$ hasta $v/u_0 = 1$.
- En la fase $t/\tau = 0,25$, con $\dot{m}(t)/\dot{m}_0 = 0$, la componente normal de la velocidad se reduce desde $v/v_{max} = 1$ en el ciclo 11, hasta $v/v_{max} = 0,4$ tras promediar en fase. El valor alcanzado respecto a la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$ baja desde $v/u_0 = 2,6$ hasta $v/u_0 = 0,6$.

Esta importante reducción en la magnitud de la componente normal de la velocidad y la notable mejora de la axil-simetría que se comprueba con el análisis de los perfiles y el contorno de velocidades promediadas, se consigue al promediar en fase tan sólo 10 ciclos de oscilación. Estos resultados permiten establecer la hipótesis de que, con un número suficiente de ciclos de oscilación, la técnica del promediado en fase aplicada sobre el campo de velocidades que se obtiene en la simulación numérica del flujo oscilatorio 3D con el modelo LES dé como solución un campo de velocidades muy próximo al obtenido sobre un dominio computacional 2D con un modelo de turbulencia RANS. Esta puede ser una interesante línea de investigación futura en el campo de los reactores de flujo oscilatorio.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

BLOQUE II. OSCILACIÓN DE LOS DISCOS.

CAPÍTULO 6. MALLADO DINÁMICO.

6.1. ESTUDIO DE LA MALLA EN EL MODELO 2D.

6.1.1. Definición del dominio computacional.

La geometría del problema a resolver está compuesta por un conducto liso de sección transversal circular de diámetro $D = 25\text{ mm}$ en el que se insertan, equiespaciados una distancia $L = 37,5\text{ mm}$, una serie de discos de diámetro exterior $D_1 = 23\text{ mm}$ con orificio interior $D_0 = 11,5\text{ mm}$ y espesor $e = 1,5\text{ mm}$, quedando una distancia $g = 1\text{ mm}$ entre los discos y el conducto.

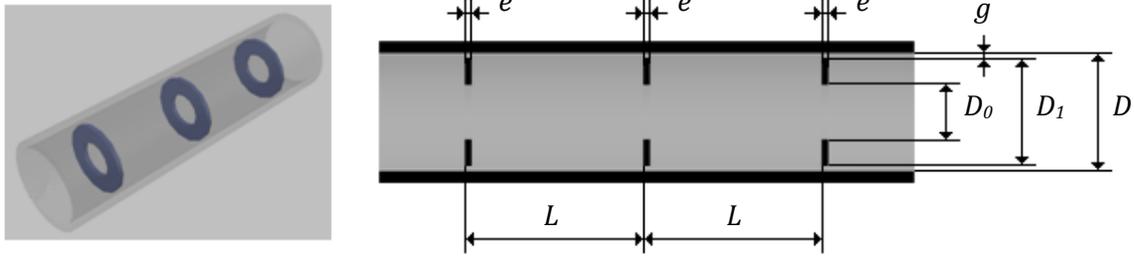


Figura 6.1. Geometría del reactor de flujo oscilatorio.

La periodicidad geométrica que existe en dirección longitudinal permite definir un **paso espacial** como la región de conducto de longitud L centrada en torno a uno de los discos insertados. El criterio de diseño es $L = 1,5D$.

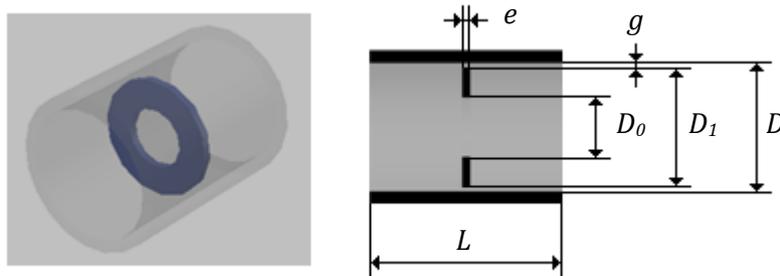


Figura 6.2. Paso espacial en el reactor de flujo oscilatorio.

En el modelo 2D, gracias a la simetría axial de la geometría, el dominio computacional se reduce a la mitad de la sección longitudinal de un paso espacial.

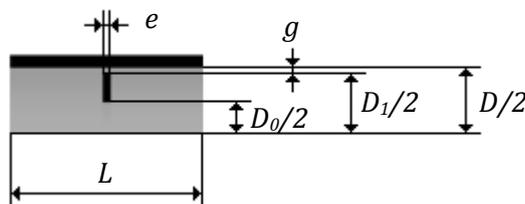


Figura 6.3. Dominio computacional del modelo 2D.

Nótese que la definición del dominio computacional que se hace para este Bloque II es equivalente a la hecha para el Bloque I (véase el *Apartado 2.1.1 del Capítulo 2*), con la única diferencia de la holgura que existe entre el disco y el conducto. Para las simulaciones con oscilación del fluido del Bloque I, el dominio computacional está compuesto por 1 paso espacial en la simulación periódica, y por la unión de 8 pasos espaciales en la simulación completa (véase la *Figura 3.7 del Capítulo 3*). En el caso de las simulaciones con oscilación de los deflectores de este Bloque II es preciso recurrir a un **mallado dinámico** para reproducir el movimiento axial de los deflectores, siendo necesario **adaptar el dominio computacional** convenientemente (*Figura 6.4*). Estas adaptaciones se detallan posteriormente en el *Apartado 6.2.3*.

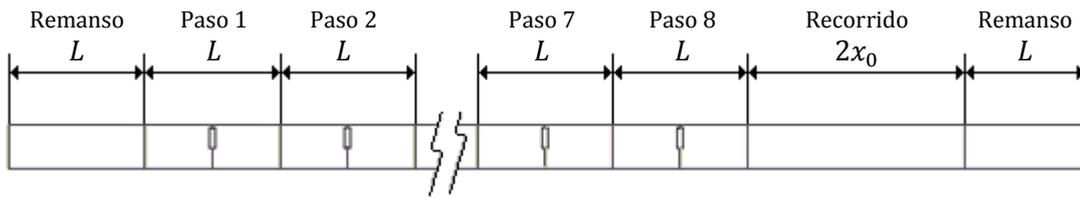


Figura 6.4. Dominio computacional adaptado.

6.1.2. Construcción de la malla.

El paso espacial definido para la oscilación del fluido (*Apartado 2.1.1 del Capítulo 2, Bloque I*) es igual al paso espacial que se define para la oscilación de los discos (*Apartado 6.1.1*), con la salvedad de la **pequeña holgura** existente entre el disco y la pared del tubo en la segunda configuración, y que se introduce para evitar el contacto directo entre ambas superficies durante el desplazamiento de los discos. Por lo tanto es posible aplicar para la oscilación de los discos el mismo mallado que se establece como óptimo en el estudio de sensibilidad de malla del *Capítulo 2* para la oscilación del fluido (véase el *Apartado 2.2.8* de dicho capítulo), modificando adecuadamente la región de la holgura que se extiende entre los vértices X, Y, A, E de la *Figura 6.5*.

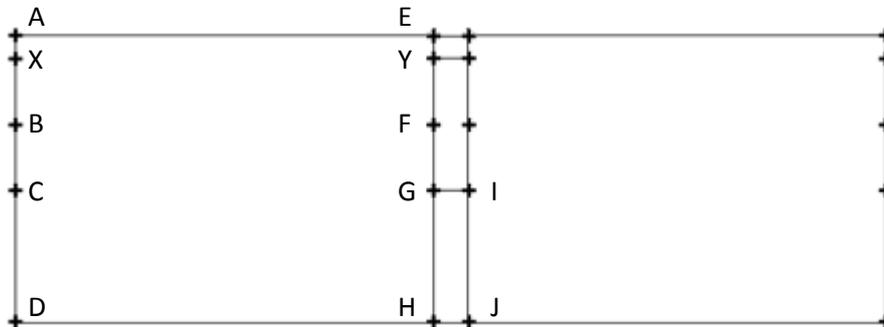


Figura 6.5. Denominación de las aristas en el dominio computacional.

El criterio para construir esta nueva malla a partir de la malla óptima original es de nuevo mantener la restricción de $y^+ \leq 1$ en todas las paredes del dominio (véase el *Anexo A*). Para ello se introduce el vértice X en el dominio y se desplaza el vértice B, de manera que la longitud de las aristas XB y BC coincida.

Se comprueba que con **20 divisiones** en la arista AX se verifica $y^+ = 1$, para la condición de operación 3 (frecuencia de 2 Hz). A continuación se muestra en detalle, en la *Tabla 6.1*, la distribución espacial de los nodos en la nueva malla óptima (véase la *Figura 6.6*), así como los parámetros para su construcción en GAMBIT y el número de nodos, celdas y caras.

Malla 5	Arista AX	Arista XB	Arista BC	Arista CD	Arista AE	Arista GI
Longitud (mm)	1	2,875	2,875	5,75	18	1.5
Divisiones	20	26	28	48	72	16
<i>Interval size</i>	0,05	0,1106	0,1027	0,1198	0,2500	0,0938
<i>Ratio</i>	0,5564	0,6903	0,7085	0,7330	0,8062	0,6751
Restricción	$y^+ = 1$	$y^+ = 1$	Continuidad en el tamaño de las celdas	$y^+ = 1$	$y^+ = 1$	Continuidad en el tamaño de las celdas

Nodos	19.008
Celdas	18.656
Caras	37.664

Tabla 6.1. Parámetros de construcción de la malla óptima en 1 paso espacial.

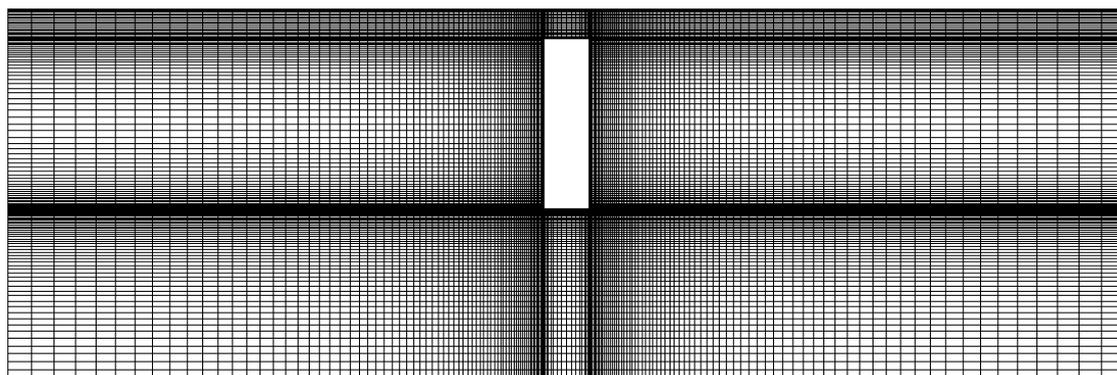


Figura 6.6. Malla óptima. Dominio computacional.

6.2. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN.

6.2.1. Simulación estacionaria y simulación no estacionaria.

La metodología de simulación que se aplica en la resolución del campo de velocidades con la configuración de oscilación de los discos (*Bloque II*) es similar a la aplicada con la configuración de oscilación del fluido (*Bloque I*), que se detalla en el *Apartado 3.1*. A continuación se muestran las diferencias entre ambas metodologías.

Las leyes de gobierno del movimiento de los discos son leyes sinusoidales temporales (véase el *Apartado 1.3.4* del *Capítulo 1*). En la expresión general ec.6.1 es necesario establecer el caso de inicio del ciclo a través de la fase φ , es decir, fijar la velocidad del deflector (*baffle*) para la **simulación estacionaria**.

$$u_b(t) = u_{b0} \text{sen}(2\pi ft + \varphi) \quad (\text{ec.6.1})$$

Al contrario que para la oscilación del fluido (véase el *Apartado 3.1.1*), en este caso se inicia el ciclo de oscilación en condiciones de reposo, para $\varphi = 0$, es decir, con velocidad del disco nula, por considerarse que esta situación reproduce mejor el fenómeno real. Así, la ley temporal sinusoidal para la velocidad del disco se expresa como:

$$u_b(t) = 2\pi f x_0 \text{sen}(2\pi ft) \quad (\text{ec.6.2})$$

En la *Figura 6.7* se representa la evolución de la velocidad del disco, partiendo del caso estacionario con gasto másico constante:

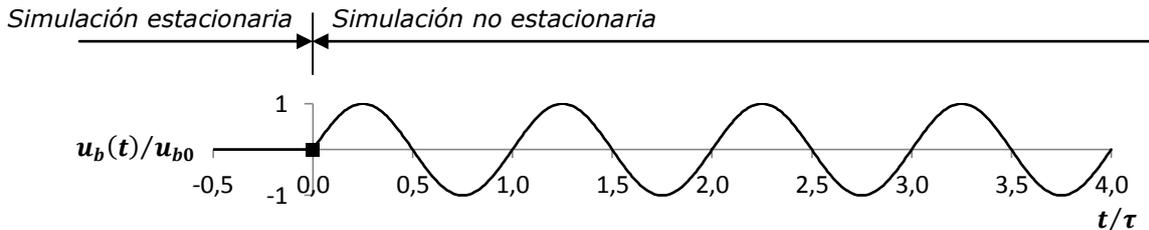


Figura 6.7. Caso de inicio del ciclo en la oscilación de los discos.

A partir del caso de inicio del ciclo comienza la **simulación no estacionaria**, con velocidad del disco variable en el tiempo. Para ello es preciso discretizar la ecuación ec.6.2 imponiendo un paso de tiempo en el eje temporal, que se obtiene mediante la condición de Courant-Friedrich-Levy (condición CFL). Siguiendo el procedimiento detallado en el *Apartado 3.1.2* del *Capítulo 3*, se aplica la simplificación unidimensional de la condición CFL:

$$\Delta t \frac{v}{\Delta x} \leq C \quad (\text{ec.6.3})$$

siendo Δt el paso de tiempo, Δx el tamaño de la celda en dirección axial, v la velocidad en la celda de tamaño Δx y C el número de Courant, cuyo valor se establece en 30 [53].

Puesto que el caso estacionario de inicio del ciclo se establece para condiciones de reposo (campo de velocidades nulo), para evaluar Δt es necesario resolver un nuevo caso estacionario para velocidad del disco máxima ($t/\tau = 0,25$) y condición de operación 3 (frecuencia de 2 Hz). Un análisis cualitativo del contorno de velocidades obtenido permite ubicar la línea L_v donde se encuentra el máximo valor de v (Figura 6.8).

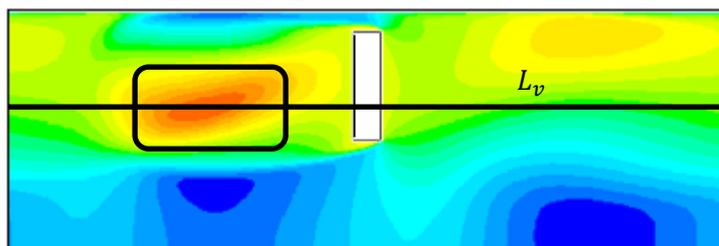


Figura 6.8. Contorno de velocidad axial en el dominio computacional. Análisis cualitativo.

Representando la evolución de la velocidad v y del tamaño de celda Δx a lo largo la línea L_v (Figura 6.9) se obtienen dos puntos críticos: punto (1) de máxima velocidad y punto (2) de mínimo tamaño de celda. Para cada punto, el paso de tiempo obtenido es el siguiente:

$$\Delta t_1 = C \frac{\Delta x_{(1)}}{v_{(1)}} = 30 \times \frac{0,000365 \text{ m}}{0,712468 \text{ m/s}} = 0,015369 \text{ s} \quad (\text{ec.6.4})$$

$$\Delta t_2 = C \frac{\Delta x_{(2)}}{v_{(2)}} = 30 \times \frac{0,000040 \text{ m}}{0,351858 \text{ m/s}} = 0,003411 \text{ s} \quad (\text{ec.6.5})$$

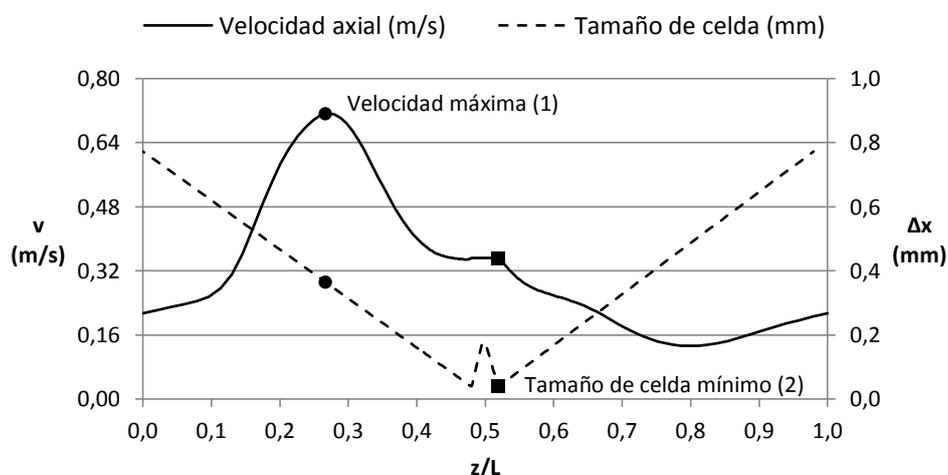


Figura 6.9. Evolución de la velocidad axial y del tamaño de celda axial a lo largo de la línea L_v .

Se selecciona el paso de tiempo 2 y se valida éste, a priori, ya que el orden de magnitud es similar al paso de tiempo $\Delta t = 0,002604 \text{ s}$ que se aplica en el Bloque I para la oscilación del fluido (véase la Tabla 3.1 del Capítulo 3).

Sin embargo, con este paso de tiempo se han encontrado problemas de convergencia durante la simulación asociados al movimiento de la malla dinámica dentro del dominio computacional. Dichos problemas, analizados en el *Apartado 6.3.3.1*, obligan a la determinación de un paso de tiempo válido mediante un proceso de **prueba y error**. La cuestión se resuelve con un paso de tiempo $\Delta t = 0,001302 \text{ s}$, coincidente con el establecido para el modelo 3D en el Bloque I. Una vez fijado Δt , el número total de casos n en los que se discretiza un ciclo de la ley sinusoidal depende de la frecuencia de oscilación f , según la ecuación ec.6.6.

$$n = \frac{1}{f\Delta t} \quad (\text{ec.6.6})$$

Dado que el paso de tiempo es bajo, el número de casos n que se requiere resolver por ciclo es muy elevado. Para reducir el volumen de datos generado se opta por guardar en cada ciclo, no el número total de casos resueltos n , sino un número de casos menor $n_0 = 64$ suficientemente representativo. Nótese que número de casos por ciclo a resolver es el doble respecto al modelo 2D del Bloque I y el mismo que en el modelo 3D (*Tablas 3.1, 5.1 y 6.2*). Con el paso de tiempo $\Delta t = 0,001302 \text{ s}$ aplicado se ha conseguido una simulación no estacionaria satisfactoria con FLUENT, con **residuos de convergencia** inferiores a 1×10^{-4} .

Condición de operación	f (Hz)	Δt (s)	n	n_0
1	0,5	0,001302	1.536	64
2	1	0,001302	768	64
3	2	0,001302	384	64

Tabla 6.2. Condiciones de operación, paso de tiempo para la discretización y número de casos.

6.2.2. Periodicidad temporal.

En la simulación no estacionaria, que comienza a partir del caso inicial de la simulación estacionaria, se produce un transitorio que ha de superarse hasta alcanzar una solución periódica en el tiempo. Es decir, existe un número determinado de ciclos temporales al comienzo de la simulación no estacionaria en los que la solución difiere de un ciclo a otro. Este periodo se denomina **simulación transitoria**. Una vez superado el transitorio se alcanza la periodicidad temporal, comenzando el periodo denominado **simulación periódica temporal**.

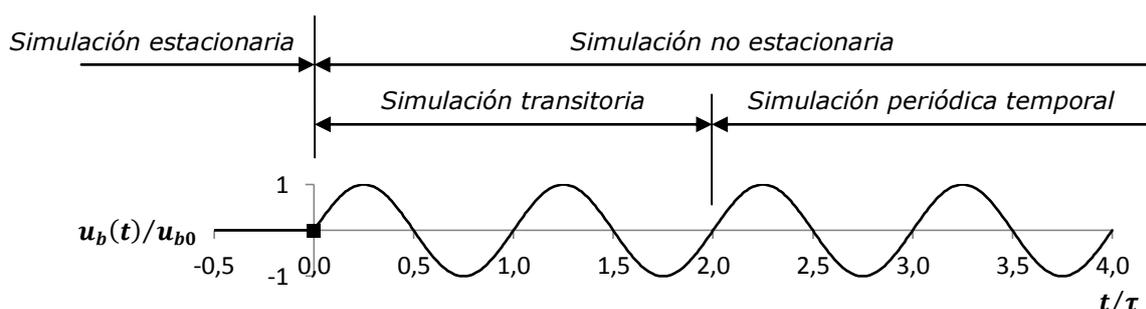


Figura 6.10. Ejemplo de simulación estacionaria, simulación no estacionaria, simulación transitoria y simulación periódica temporal.

Para identificar cuántos ciclos tarda en aparecer este periodo se compara la solución en sucesivos ciclos de oscilación hasta encontrar una diferencia despreciable entre un ciclo y el siguiente. En la práctica no es viable comparar la solución entre dos ciclos consecutivos en todos y cada uno de los casos (64 casos guardados de 384 resueltos para la condición de operación 3; véase la *Tabla 6.2*). Se recurre por ello a 4 casos representativos del ciclo, coincidiendo con las **4 fases de oscilación** siguientes, siendo $\theta = 2\pi ft$:

$$\theta_1 = 0 ; \theta_2 = \pi/2 ; \theta_3 = \pi ; \theta_4 = 3\pi/2$$

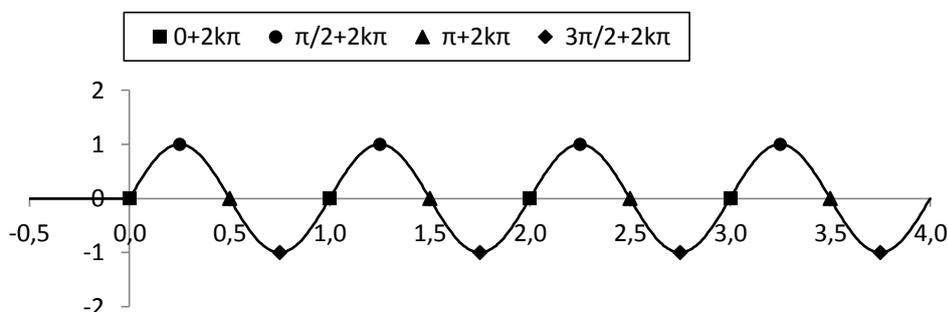


Figura 6.11. Fases de oscilación para la comprobación de la periodicidad temporal.

Para comprobar la periodicidad temporal se estudia el perfil de velocidad axial, para las 4 fases de oscilación anteriores, en tres regiones diferentes del dominio computacional:

- A lo largo del eje de simetría.
- En la sección transversal equidistante entre dos discos consecutivos, en uno de los pasos centrales del dominio computacional.
- En la sección transversal del orificio del disco, en uno de los pasos centrales del dominio computacional.

6.2.3. Periodicidad espacial.

La geometría del reactor de flujo oscilatorio se compone de un determinado número de pasos espaciales consecutivos, centrados en los discos insertados (véase el *Apartado 6.1.1*). Esta **periodicidad geométrica** se traduce en una periodicidad espacial de la solución numérica dentro del dominio computacional, ya que el patrón de movimiento del flujo ha de ser el mismo en cada uno de los pasos espaciales, salvando las inestabilidades propias de la turbulencia.

El **fenómeno físico** consiste, bajo la configuración de oscilación de los deflectores, en el desplazamiento de una serie de discos dentro del volumen de fluido del reactor. La hipótesis aplicada de flujo neto nulo a través del reactor (véase el *Apartado 1.3.4 del Capítulo 1*) se traduce en que este volumen permanece contenido entre la sección de entrada y salida, al no existir diferencia de presiones entre ambas secciones. Este modelo se reproduce mediante una **simulación completa** sobre un dominio computacional con un cierto número de pasos espaciales. Puesto que los pasos próximos a la sección de entrada y a la de salida son perturbados por las condiciones de contorno, el número de pasos ha de ser suficiente para que se alcance la periodicidad espacial en los pasos centrales. Para estas simulaciones completas se emplea un total de **8 pasos espaciales**.

Por lo tanto, el modelo teórico en principio consistiría en un conducto por el que circula un flujo neto u_{net} que se descarga a la atmósfera, con discos insertados que a su vez se desplazan con movimiento oscilatorio. Al aplicar la hipótesis de **flujo neto nulo** (Apartado 1.3.4 del Capítulo 1), el modelo teórico se modifica imponiendo igualdad de presión en la entrada y en la salida (y no velocidad nula a la entrada), para asegurar que todo el volumen de fluido permanece dentro del dominio cuando los discos se desplazan dentro, evitando así que parte del mismo sea expulsado (Figura 6.12). Adviértase que la presión fijada es de 1 bar, elección que se justifica a continuación.

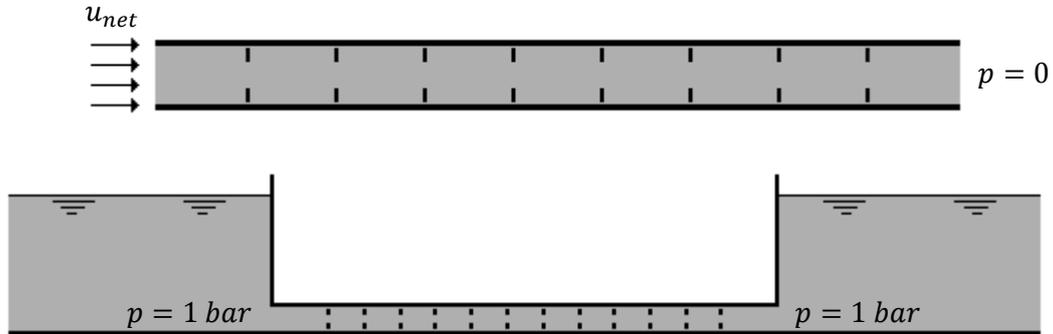


Figura 6.12. Modelo teórico. Arriba, flujo neto no nulo. Abajo, flujo neto nulo.

A diferencia del Bloque I, en el que se impone el gasto másico de entrada, en este Bloque II se fija el valor de las presiones en las secciones de entrada y salida del dominio. Ambos valores son coincidentes puesto que no existe diferencia de presión entre ambas secciones. Nótese que el dato de presión a definir en FLUENT para las condiciones de contorno es diferente [57, 58]:

- Para *Pressure Outlet* (sección de salida), el dato definido es presión estática, *static pressure* p_s .
- Para *Pressure Inlet* (sección de entrada), el dato definido es presión total, *total pressure* p_o .

$$p_o = p_s + p_d \quad (\text{ec.6.7})$$

$$p_d = \frac{1}{2} \rho |\vec{v}|^2 \quad (\text{ec.6.8})$$

La imposición de igualdad de presiones se establece sobre la presión total, cuyo valor p_o se fija para la entrada. Para la salida, y en cada instante de tiempo, sería necesario calcular p_s restando a la presión de entrada p_o el valor de la presión dinámica p_d que va cambiando a lo largo del ciclo de oscilación. Ante la imposibilidad de efectuar este cálculo de manera automática se recurre a imponer una presión estática mucho mayor que la máxima presión dinámica:

$$p_{d \max} = \frac{1}{2} \rho |\vec{v}_{(\theta=\pi/2)}|^2 = \frac{1}{2} \times 998,2 \text{ kg/m}^3 \times (0,712468 \text{ m/s})^2 = 253 \text{ Pa} \quad (\text{ec.6.9})$$

$$p_s = 100.000 \text{ Pa} \gg p_d \quad (\text{ec.6.10})$$

La simulación numérica del modelo se realiza aplicando una **malla dinámica** sobre el dominio computacional descrito, siguiendo la metodología del tutorial de FLUENT sobre mallados dinámicos *Using Dynamic Meshes* [60]. En dicho documento se propone la aplicación del movimiento oscilatorio, no únicamente sobre el disco, sino sobre todo el paso espacial, que incluye el disco y el volumen fluido contenido (en el *Apartado 6.3.3* se explica su aplicación práctica).

Según el tutorial [60], se tienen k pasos de longitud L que se mueven axialmente con amplitud de centro a pico x_0 dentro de un dominio computacional de longitud kL . Es necesario en consecuencia alargar el dominio computacional en la dirección del movimiento una distancia $2x_0$ (igual al **recorrido del pistón**) para que los pasos espaciales estén contenidos en el dominio a lo largo de un ciclo de oscilación. En el esquema de la *Figura 6.13* se plasma más claramente este concepto.

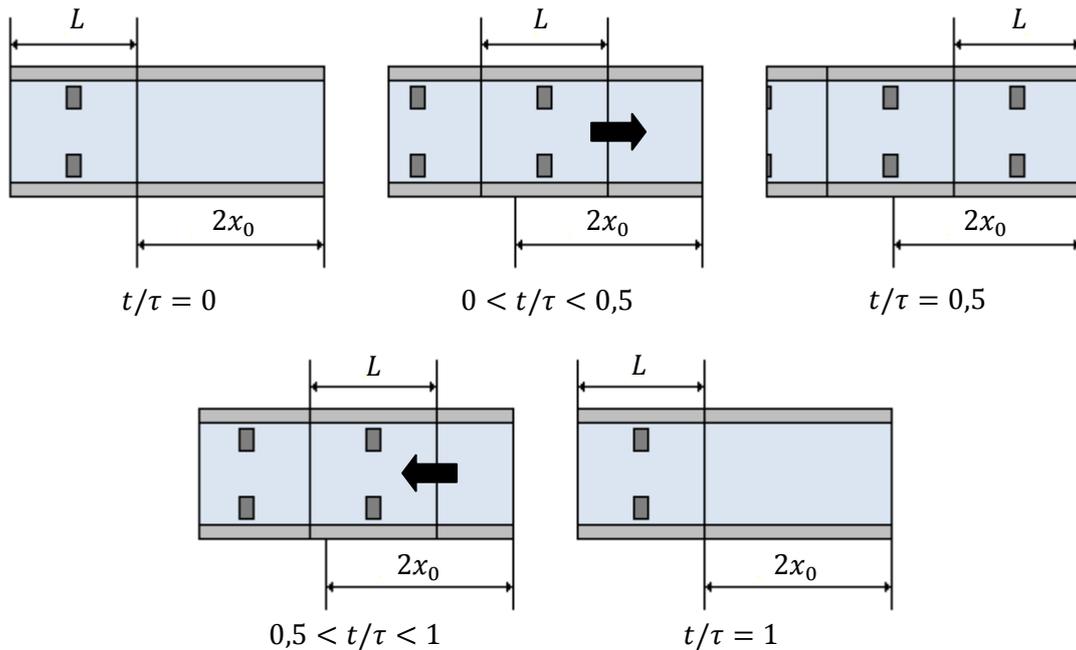


Figura 6.13. Esquema de la modificación del dominio computacional.

Para reducir la influencia de las condiciones de contorno de las secciones de entrada y salida sobre los pasos espaciales cercanos, y con objeto de reducir el número de pasos totales, se añaden además en los extremos del dominio computacional dos **regiones de remanso**. Así la configuración definitiva del dominio se recoge en la *Figura 6.14*:

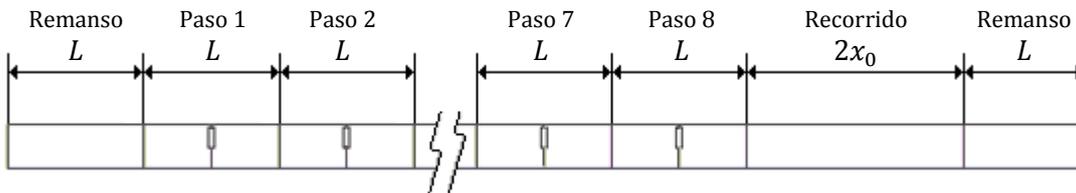


Figura 6.14. Dominio computacional adaptado de 8 pasos espaciales para la simulación completa.

Nótese que en la distribución de nodos en la región de recorrido y en las dos regiones de remanso se respeta la continuidad del mallado con respecto a los pasos espaciales, con el objetivo de no comprometer el desarrollo de la malla estructurada. En dirección radial se emplean las mismas aristas AX, XB, BC, CD con los mismos parámetros de construcción (véase la *Tabla 6.1*), mientras que en dirección axial se aplica una distribución uniforme, con un nodo cada 0.8 mm (véase la *Figura 6.15*).

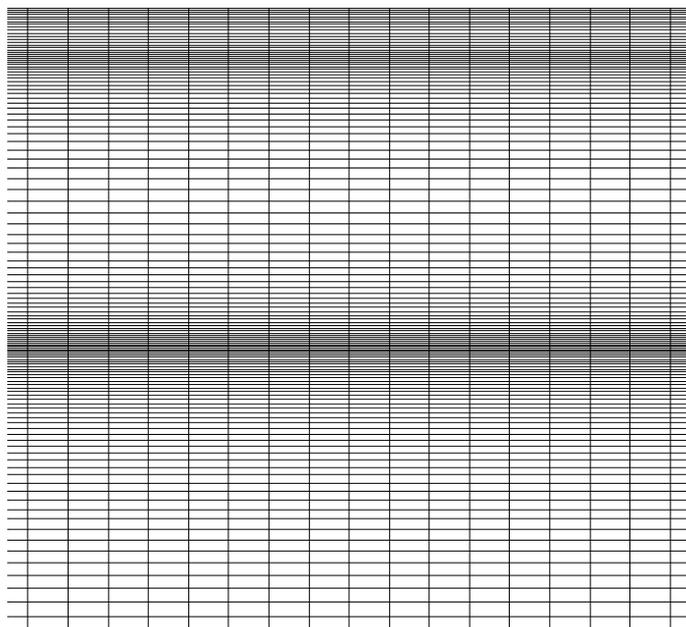


Figura 6.15. Malla óptima. Regiones de remanso y recorrido.

La comprobación de la periodicidad espacial se basa, al igual que para la periodicidad temporal (*Apartado 6.2.2*), en el estudio del perfil de velocidad axial a lo largo del eje de simetría, en la sección transversal equidistante entre dos discos consecutivos y en la sección transversal del orificio del disco. Se evalúan las mismas 4 fases de oscilación para comprobar que la periodicidad espacial se mantiene a lo largo de todo el ciclo de oscilación. Nótese que la periodicidad espacial puede darse también en los ciclos de simulación transitoria, siendo su estudio irrelevante, ya que la **solución** buscada ha de ser **periódica en el tiempo y en el espacio**. Por ello la periodicidad espacial sólo se estudia en el ciclo que asegura existencia de periodicidad temporal, es decir, una vez superado el transitorio (compárense las *Figuras 6.11* y *6.16*).

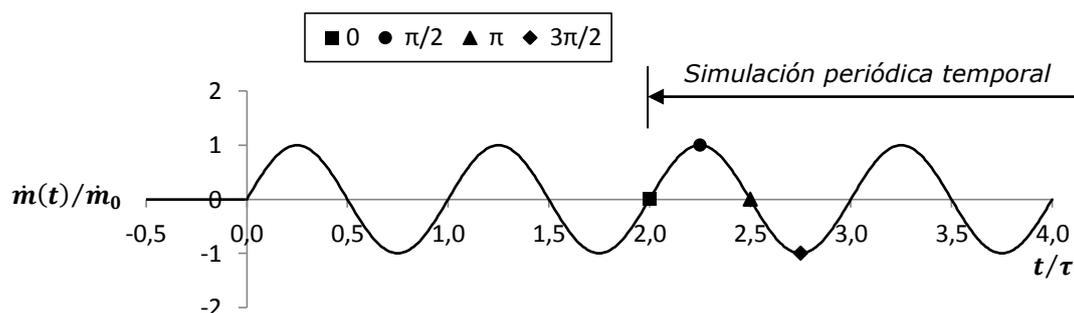


Figura 6.16. Ejemplo de fases de oscilación para la comprobación de la periodicidad espacial.

En el Bloque I, de oscilación del fluido, y dada la periodicidad espacial del patrón de movimiento del flujo, se aborda una **simulación periódica** sobre un dominio computacional de **1 paso espacial** que permite obtener la misma solución numérica que la simulación completa de 8 pasos, con el correspondiente ahorro de coste computacional.

Sin embargo, en este Bloque II, de oscilación de los deflectores, no se ha tenido éxito con la simulación periódica y en estudio se realiza sobre un modelo de flujo en desarrollo. La complejidad del modelo radica en combinar adecuadamente condiciones de contorno periódicas con mallado dinámico, haciendo posible que los discos entren y salgan del dominio computacional de 1 paso. En el esquema de la *Figura 6.17* se plasma más claramente este concepto.

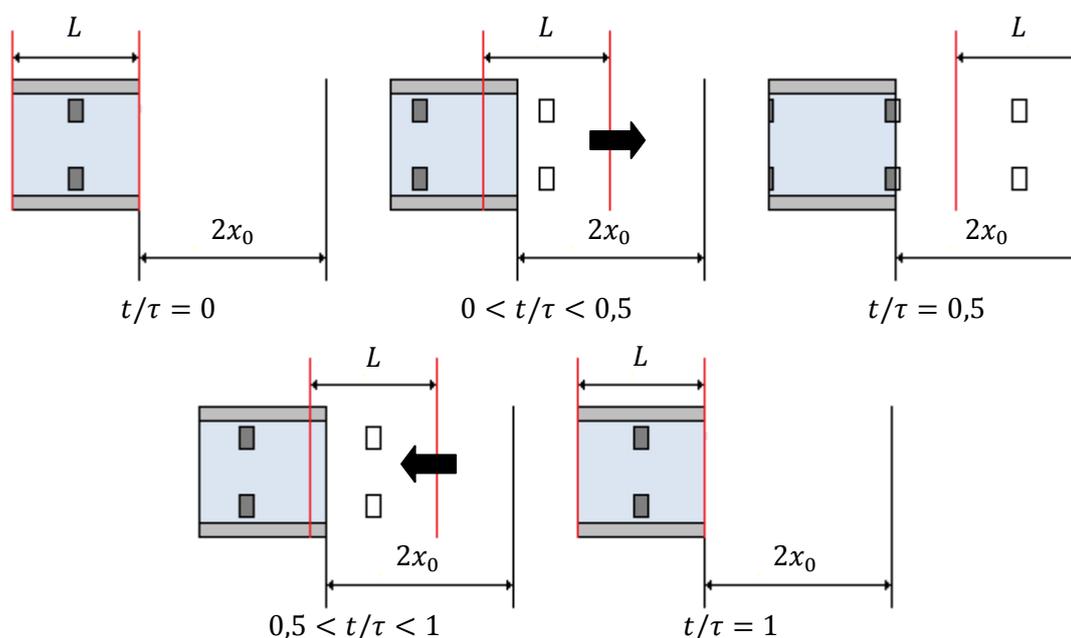


Figura 6.17. Esquema de la simulación periódica con oscilación de los discos.

La aplicación de condiciones de contorno periódicas en un dominio computacional de 1 paso sobre una malla dinámica es una cuestión que ha de abordarse en **futuros trabajos numéricos**, puesto que el incremento en coste computacional de una simulación completa frente a una simulación periódica supone una limitación muy importante a la hora de abordar el problema del flujo oscilatorio con mallado dinámico en un modelo 3D.

6.3. SIMULACIÓN COMPLETA.

6.3.1. Hipótesis de simulación.

- Simulación: completa.
Sección entrada: *Pressure Inlet*. Sección salida: *Pressure Outlet*.
- *Solver*: *Pressure Based*.
- *Time*:
Simulación estacionaria: *Steady*.
Simulación no estacionaria: *Unsteady*.
- Modelo de turbulencia: $k-\omega$ SST, opción *Transitional Flows*.
- Ecuación de la energía: no resuelta.
- Contribución de la gravedad: no considerada.
- Fluido: agua.
- Propiedades del fluido: valores constantes.
Densidad $998,2 \text{ kg/m}^3$, viscosidad dinámica $0,001003 \text{ kg/m-s}$.
- Presiones de entrada y salida: 1 bar.
Condición de operación 3, frecuencia 2 Hz.
- *Pressure-Velocity Coupling*: *SIMPLE*.
- Discretización: segundo orden.
- Números de pasos espaciales = 8.

6.3.2. Simulación de casos sucesivos mediante *UDF*.

La discretización del ciclo temporal implica la resolución numérica de un elevado número de casos (1.536 casos para la condición de operación 1; véase la *Tabla 6.2*). A partir de la simulación estacionaria del caso inicial, cada nuevo caso se obtiene **actualizando la velocidad de los discos** y aplicando al caso que le precede un **paso de tiempo** $\Delta t = 0,001302 \text{ s}$. Las hipótesis de simulación se mantienen, cambiando únicamente del modelo estacionario al modelo no estacionario. El software FLUENT permite realizar el cambio de velocidad de un caso al siguiente de manera cómoda y automática, mediante una función definida por el usuario (*User-Defined Function, UDF*). La programación de una *UDF* en FLUENT se realiza en lenguaje C y permite resolver ciertas operaciones, por ejemplo: inicializar perfiles de velocidad no uniformes, trabajar con condiciones de contorno dependientes del tiempo y/o el espacio, modificar las propiedades de los materiales, etc. FLUENT permite trabajar con dos tipos de *UDFs*:

- Interpretada (*interpreted*): el código se ejecuta línea a línea, no necesita un compilador independiente, utiliza más memoria y tiene limitaciones en cuanto a las tareas que puede resolver.
- Compilada (*compiled*): utiliza una biblioteca, requiere compilador independiente, utiliza menos memoria y no tiene limitación en cuanto a las tareas a resolver.

Para la oscilación del fluido (véase el *Apartado 3.2.2 del Capítulo 3*), la operación que se resuelve, de actualización de gasto másico y paso de tiempo, sí se puede abordar fácilmente con una *interpreted UDF*. Sin embargo, para la oscilación de los discos es necesario recurrir a una *compiled UDF*, puesto que la modificación de la posición de los discos dentro del dominio computacional a lo largo del ciclo de oscilación se realiza mediante la función `DEFINE_CG_MOTION` no permitida en las interpretadas.

La programación de la **UDF compilada** que se aplica, de nombre obr.c se adjunta a continuación en la *Figura 6.18*. En el *Anexo E* se explica la instalación y configuración del compilador, así como los pasos para crear la biblioteca necesaria.

```
# include "udf.h"
# define PI 3.1415926536
# define x0 0.028 /* amplitud de oscilacion, en m */
# define f 2 /* frecuencia de oscilacion, en Hz */

DEFINE_CG_MOTION(obr, dt, vel, omega, time, dtime)
{
  real v;
  real w = 2 * PI * f;
  v = w * x0 * sin(w * time);
  vel[0] = v;
}
```

Figura 6.18. Programación de la UDF compilada (obr.c).

6.3.3. Definición de la malla dinámica en FLUENT.

Para modelar en FLUENT el desplazamiento axial de los discos a lo largo del dominio computacional descrito en la *Figura 6.14* se utiliza una malla dinámica, *dynamic mesh*. Existen tres métodos de mallado dinámico disponibles [59]:

- *Smoothing*: el desplazamiento de una pared móvil comprime o expande las capas uniformemente (*Figura 6.19*).
- *Layering*: el desplazamiento de una pared móvil comprime la capa contigua j hasta alcanzar un tamaño mínimo h_{min} uniendo la capa j con la adyacente i , o expande la capa contigua j hasta alcanzar un tamaño máximo h_{max} dividiendo la capa j en j y k (*Figura 6.20*).
- *Remeshing*: con el desplazamiento de una pared móvil se rehace el mallado localmente (*Figura 6.21*).

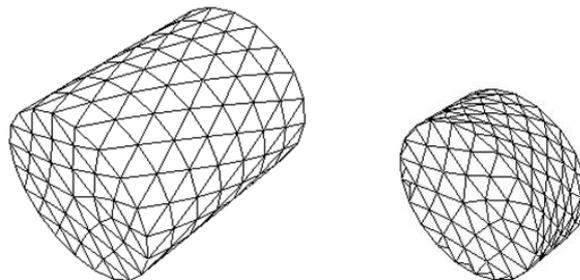


Figura 6.19. Dynamic mesh. Smoothing mesh method.

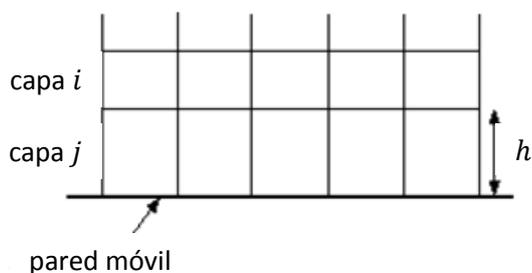


Figura 6.20. *Dynamic mesh. Layering mesh method.*

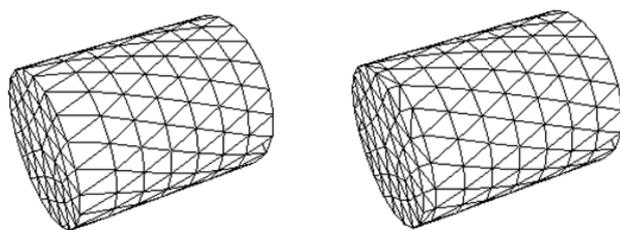


Figura 6.21. *Dynamic mesh. Remeshing mesh method.*

El método seleccionado para modelar el movimiento oscilatorio de los deflectores en el interior del reactor es el de **layering** puesto que sus características se adecúan al mallado estructurado diseñado y la cinemática del modelo. La metodología de simulación que se describe a continuación ha sido adaptada del tutorial de FLUENT *Using Dynamic Meshes* sobre mallados dinámicos [60].

6.3.3.1. Aspectos constructivos del dominio computacional en GAMBIT.

La simulación del dominio computacional, tal y como se ha definido el en el apartado 6.2.3, entra en conflicto con el método de **layering**. Cuando el ciclo de oscilación avanza desde $t/\tau = 0$ hasta $t/\tau < 0,5$, la región de recorrido del pistón (de longitud $2x_0$) se va reduciendo en el sentido del movimiento, de manera que las celdas contiguas a la región de remanso se comprimen hasta unirse con las adyacentes (Figura 6.22). Nótese que en sentido opuesto al movimiento, las celdas se expanden hasta dividirse de manera análoga.

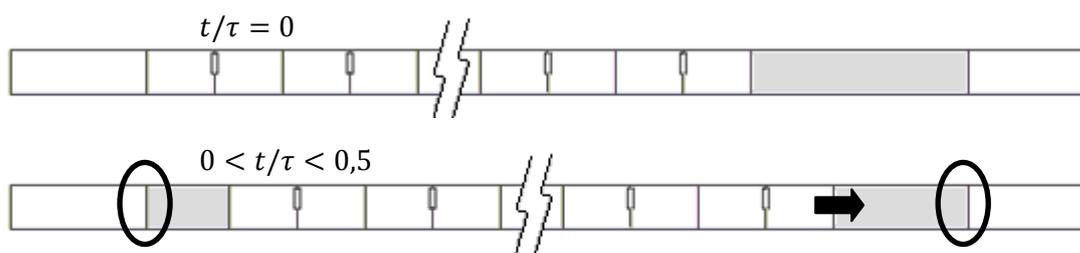


Figura 6.22. *Expansión y compresión de celdas en la región de recorrido.*

Siguiendo este procedimiento, en $t/\tau = 0,5$ la **región de recorrido** tiene **longitud cero** en el sentido del movimiento, no existiendo celdas en dicha parte del dominio, lo cual no es posible desde el punto de vista de la convergencia (este problema se repite a la inversa para $t/\tau = 1$). La solución consiste en prever una **distancia de seguridad** $s = 0,004 \text{ mm}$ dentro de las regiones de remanso para que en ningún caso exista longitud de recorrido nula (*Figura 6.23*).

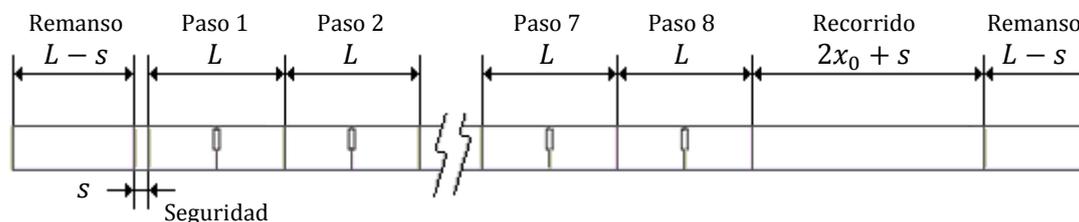


Figura 6.23. Distancia de seguridad dentro de las regiones de remanso.

Pese a la previsión de esta distancia de seguridad se han presentado **problemas de convergencia** para el paso de tiempo $\Delta t = 0,003411 \text{ s}$, que en principio satisface la condición CFL (véase el Apartado 6.2.1). Estos problemas radican en la creación de celdas con área negativa, en instantes aparentemente aleatorios a lo largo del ciclo de oscilación. Se ha comprobado que la reducción del paso de tiempo retrasa la aparición del problema a instantes posteriores en el ciclo, pero no se ha evidenciado el motivo. Con un paso de tiempo $\Delta t = 0,001302 \text{ s}$ sí se consigue evitar la aparición de celdas con área negativa.

6.3.3.2. Denominación de aristas en GAMBIT y regiones fluidas en FLUENT.

A fin de explicar en detalle la metodología de aplicación de malla deformable llevada a cabo en este Bloque II, se presenta la denominación de las aristas en GAMBIT y de las regiones fluidas en FLUENT que componen el dominio computacional completo (*Figura 6.24*). Nótese que la construcción del mismo se realiza en FLUENT mediante la unión (*Grid > Zone > Append Case File / Grid > Fuse*) de cada uno de los sub-dominios creados en GAMBIT, y que se observan en la *Figura 6.14*.

1. entrada	11. eje_extremo_entrada	20. eje_08
2. frontera_entrada	12. eje_recorrido_entrada	21. eje_recorrido_salida
3. ensanche_00	13. eje_01	22. eje_extremo_salida
4. ensanche_01	14. conducto_extremo_entrada	23. conducto_08
5. reduccion_01 (vertical)	15. conducto_recorrido_entrada	24. conducto_recorrido_salida
6. holgura_01 (vertical)	16. conducto_01	25. conducto_extremo_salida
7. disco_entrada_02	17. ensanche_01	a. fluido_recorrido_entrada
8. disco_salida_02	18. frontera_salida	b. fluido_02
9. disco_inferior_02 (horizontal)	19. salida	c. fluido_recorrido_salida
10. disco_superior_02 (horizontal)		

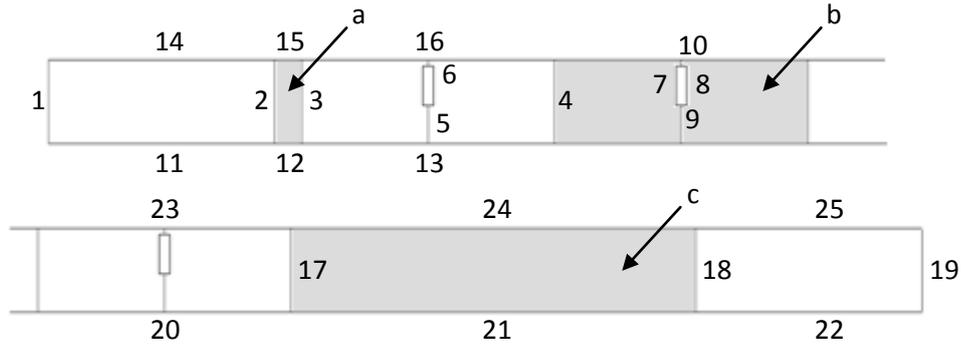


Figura 6.24. Denominación de aristas del dominio computacional en GAMBIT.

6.3.3.3. Definición de parámetros y zonas en la malla dinámica en FLUENT.

Una vez que la *UDF* ha sido compilada correctamente y creada la biblioteca correspondiente (véase el *Anexo E*), se procede a definir los **parámetros** de funcionamiento del mallado dinámico que se configuran como se muestra en la *Figura 6.25*, accediendo a través del desplegable *Define > Dynamic Mesh > Parameters*.

A continuación se establecen las **zonas** de malla dinámica en el desplegable *Define > Dynamic Mesh > Zones*, comprobando previamente que la *UDF* empleada está disponible en la pestaña *Motion Attributes > Motion UDF/Profile* con la extensión `::libudf` (véase la *Figura 6.26*). En la *Tabla 6.3* se recoge la descripción de las zonas necesarias.

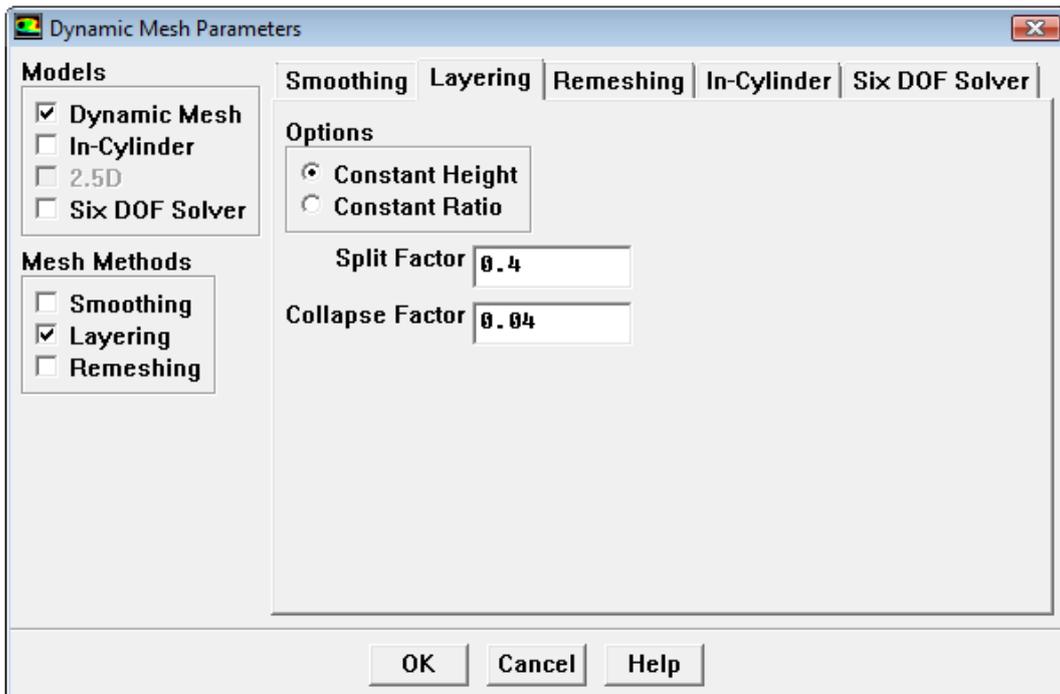


Figura 6.25. Definición de parámetros del mallado dinámico.

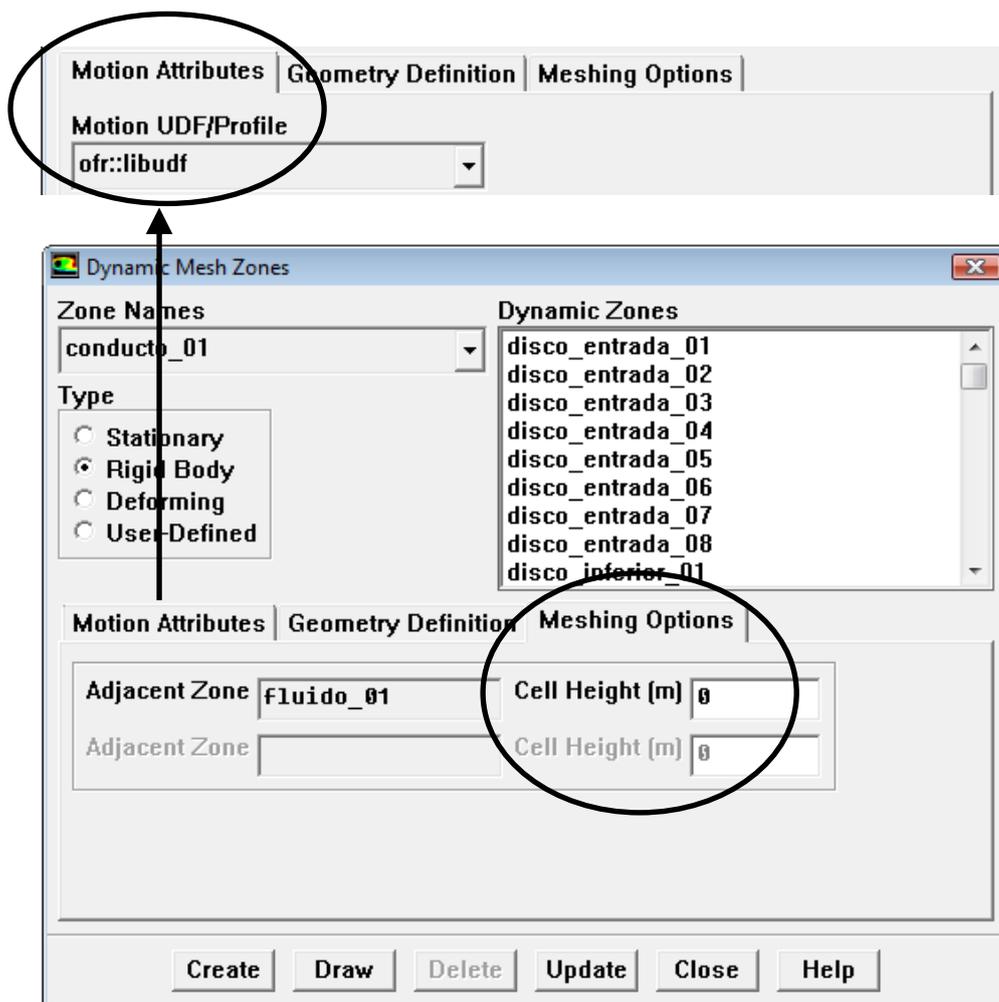


Figura 6.26. Definición de zonas del mallado dinámico.

Malla 5	Type	Cell Height (m)	
disco_entrada_i, i=01:08	Rigid Body	0	-
disco_salida_i, i=01:08	Rigid Body	0	-
disco_inferior_i, i=01:08	Rigid Body	0	-
disco_superior_i, i=01:08	Rigid Body	0	-
ensanche_i, i=01:08	Rigid Body	0	0
reduccion_i, i=01:08	Rigid Body	0	0
holgura_i, i=01:08	Rigid Body	0	0
fluido_i, i=01:08	Rigid Body	-	-
fluido_recorrido_entrada	Rigid Body	-	-
fluido_recorrido_salida	Rigid Body	-	-
frontera_entrada	Stationary	0	0,0008
frontera_salida	Stationary	0,0008	0

Tabla 6.3. Definición de zonas del mallado dinámico.

El valor de la altura *Cell Height* igual a 0,0008 mm para las fronteras de entrada y salida se hace coincidir con la distancia axial uniforme entre nodos que se establece para el mallado de las regiones de recorrido y remanso (*Figura 6.15*).

6.3.4. Periodicidad espacial de la simulación estacionaria.

Siguiendo la metodología de trabajo aplicada en el Bloque I para las simulaciones con fluido oscilante en los modelos 2D y 3D (*Apartados 3.2.3 del Capítulo 3 y 5.2.3 del Capítulo 5*), en primer lugar se determinaría entre qué pasos espaciales, de los 8 de que consta el dominio computacional, existe periodicidad espacial para la simulación estacionaria. En este Bloque II, al contrario que en el Bloque I, el caso de inicio del ciclo se establece para condiciones de reposo, con **campo de velocidades cero** (véase el Apartado 6.2.1). Puesto que todos los perfiles de velocidad axial son nulos, **no procede** en este caso dicho análisis.

6.3.5. Periodicidad temporal de la simulación no estacionaria.

Puesto que el análisis de la periodicidad espacial en la simulación estacionaria no procede, no se dispone de información sobre qué pasos son espacialmente periódicos, para poder particularizar en ellos el estudio de la periodicidad temporal. Así, se estima a priori que la periodicidad espacial, en caso de existir, ha de darse como mínimo en los pasos centrales del dominio. Por lo tanto, el estudio de la periodicidad temporal se particulariza en el paso espacial 4.

6.3.5.1. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

En el perfil de velocidad axial a lo largo del eje, el error del ciclo 6 respecto al ciclo 7 alcanza valores puntuales superiores al 1,7 %. Este error se reduce a menos del 0,5 % si se compara el ciclo 7 con el ciclo 8 (*Figura 6.26*). En el caso de la sección transversal equidistante entre discos, el error del ciclo 6 respecto al ciclo 7 es del 1 % en las proximidades del eje. El error pasa a ser inferior al 0,2 % entre los ciclos 7 y 8 (*Figura 6.27*). En la sección transversal del disco, el error entre el ciclo 6 y el ciclo 7 está ya por debajo del 0,3 % (*Figura 6.28*).

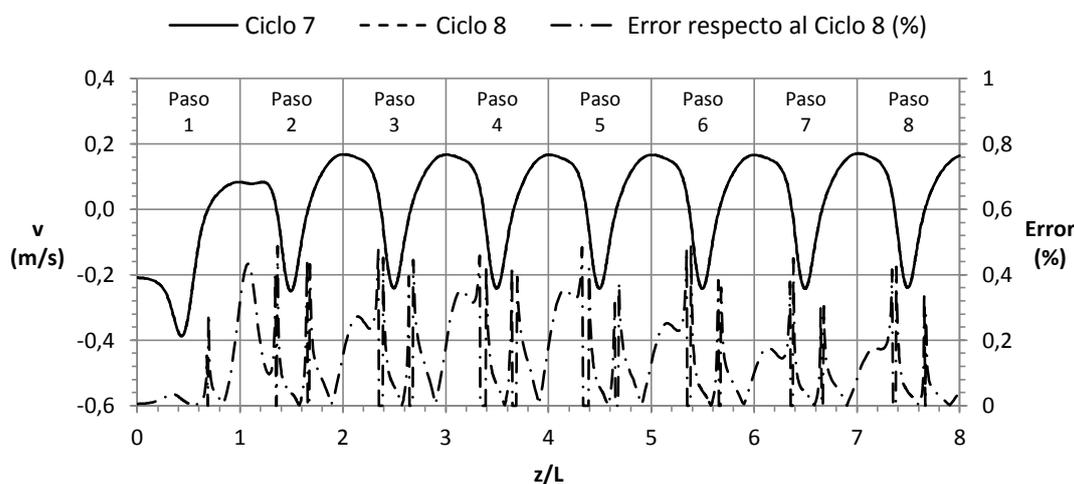


Figura 6.26. Perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 1 a 8. Ciclos 7 y 8. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

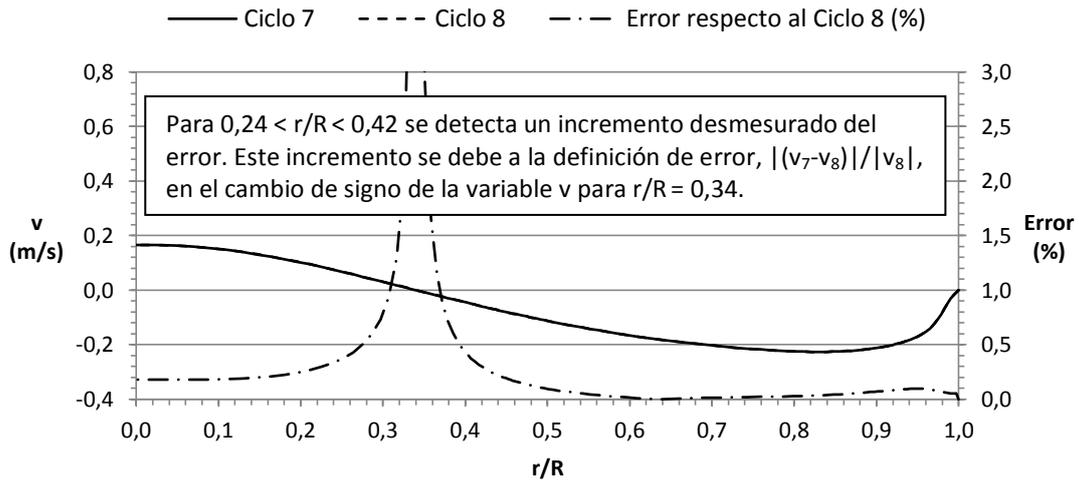


Figura 6.27. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Paso 4. Ciclos 7 y 8. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

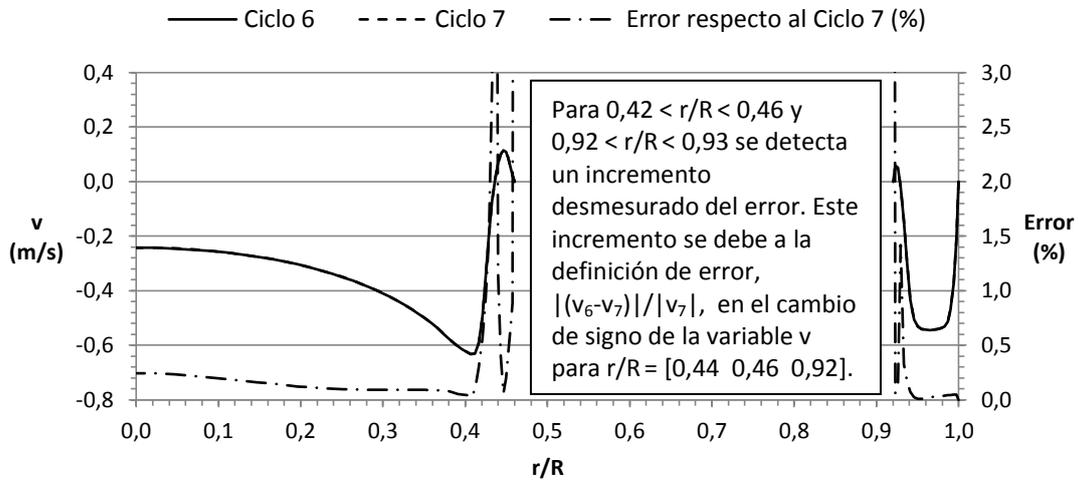


Figura 6.28. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Paso 4. Ciclos 6 y 7. Fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$.

6.3.5.2. Fases $\theta_2 = \pi/2 + 2k\pi$, $\theta_3 = \pi + 2k\pi$ y $\theta_4 = 3\pi/2 + 2k\pi$.

En el apartado anterior se concluye que, en la fase $\theta_1 = 0 + 2k\pi$, la **periodicidad temporal** se alcanza a partir del **ciclo de oscilación 7**, formando parte los ciclos 1 a 6 del periodo transitorio. Al contrario de lo que ocurre en el Bloque I, en este Bloque II son las fases θ_2 y θ_4 las que posee la máxima inercia del flujo en el ciclo (dado que el caso de inicio del ciclo obedece a condiciones de reposo), y por tanto éstas han de ser las fases críticas a la hora de establecer el número de ciclos transitorios. Y tal y como ocurre para la fase θ_1 (Figura 6.26), la región más restrictiva es el eje, también en el resto de fases. Puesto que los resultados son coincidentes con lo reportado en el apartado anterior (Figuras 6.29, 6.30 y 6.31), se concluye que, para la simulación completa, la solución para el ciclo de oscilación 7 es periódica en el tiempo.

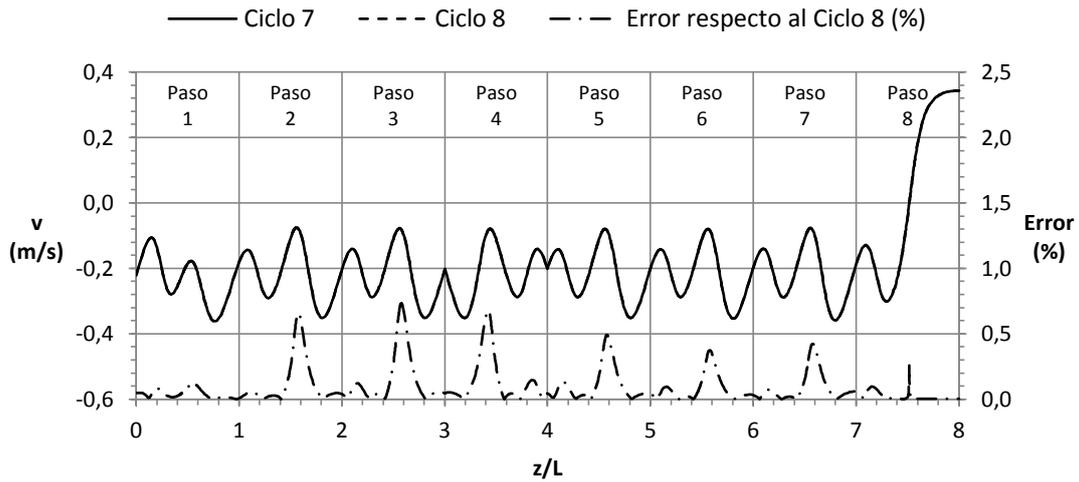


Figura 6.29. Perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 1 a 8. Ciclos 7 y 8. Fase $\theta_2 = \pi/2 + 2k\pi$.

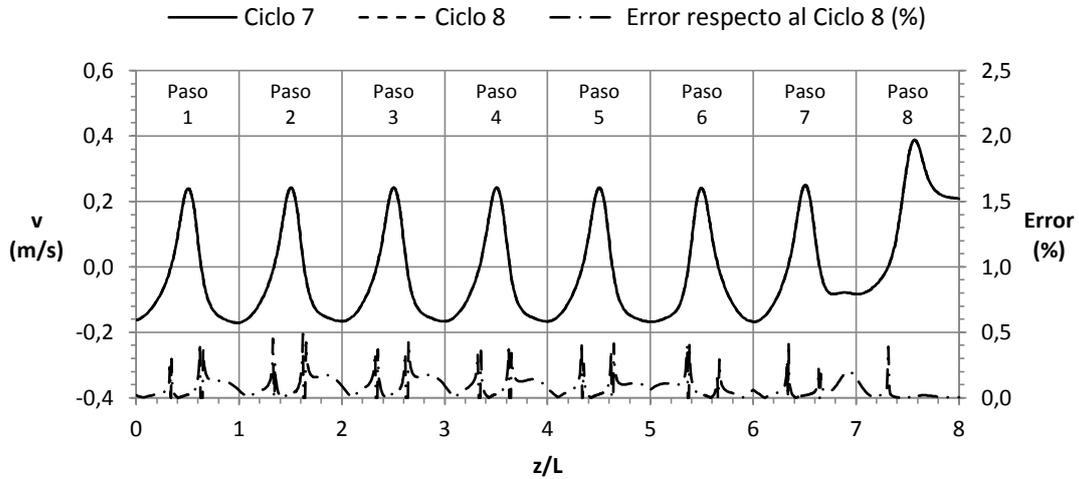


Figura 6.30. Perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 1 a 8. Ciclos 7 y 8. Fase $\theta_3 = \pi + 2k\pi$.

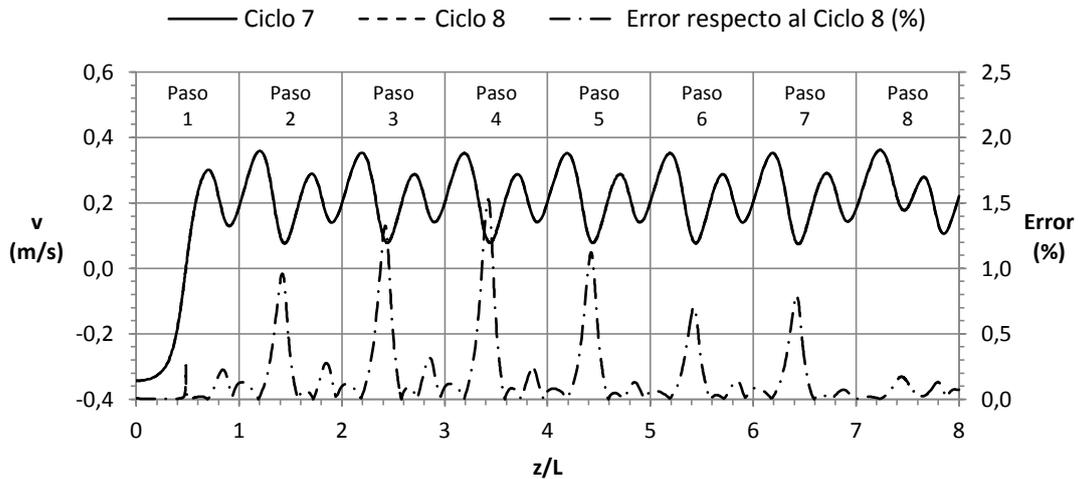


Figura 6.31 Perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 1 a 8. Ciclos 7 y 8. Fase $\theta_4 = 3\pi/2 + 2k\pi$.

6.3.6. Periodicidad espacial de la simulación no estacionaria.

El estudio de la periodicidad espacial se realiza en el ciclo de oscilación 7, a partir del cual se asegura la existencia de periodicidad temporal (*Apartado 6.3.5*).

6.3.6.1. Fase $\theta_1 = 0$.

Directamente se observa que la velocidad axial en el eje está muy condicionada por la presencia de la región de remanso aguas arriba en los pasos espaciales 1 y 2 (*Figura 6.32*). Al superponer los pasos se comprueba que la presencia de las regiones de recorrido y remanso aguas abajo perturban levemente el paso espacial 8 (*Figura 6.33*). Se corrobora la periodicidad espacial en el eje, en los pasos 3, 4, 5, 6 y 7, con un perfil de velocidad axial que se repite en los pasos 4 y 5 con un error inferior al 1 % (*Figura 6.34*). Un análisis análogo en la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 6.35*) y en la sección transversal del disco (*Figura 6.36*) ofrece los mismos resultados, quedando así validada la **periodicidad espacial entre los pasos 4 y 5**.

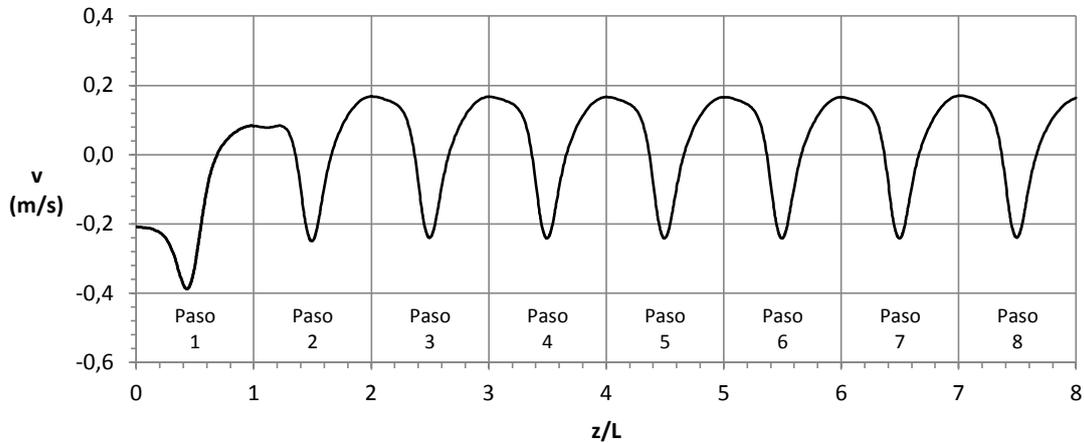


Figura 6.32. Perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 1 a 8. Ciclo 7. Fase $\theta_1 = 0$.

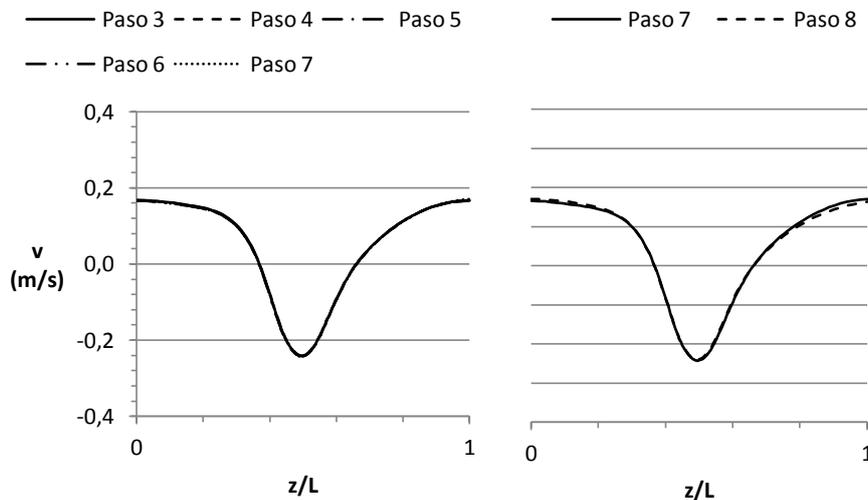


Figura 6.33. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 3, 4, 5, 6 y 7. Pasos 7 y 8. Ciclo 7. Fase $\theta_1 = 0$.

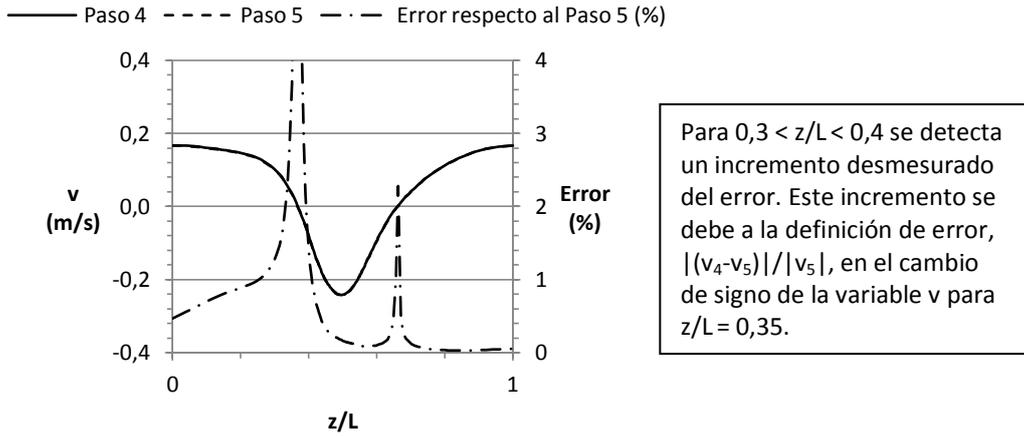


Figura 6.34. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 4 y 5. Ciclo 7. Fase $\theta_1 = 0$.

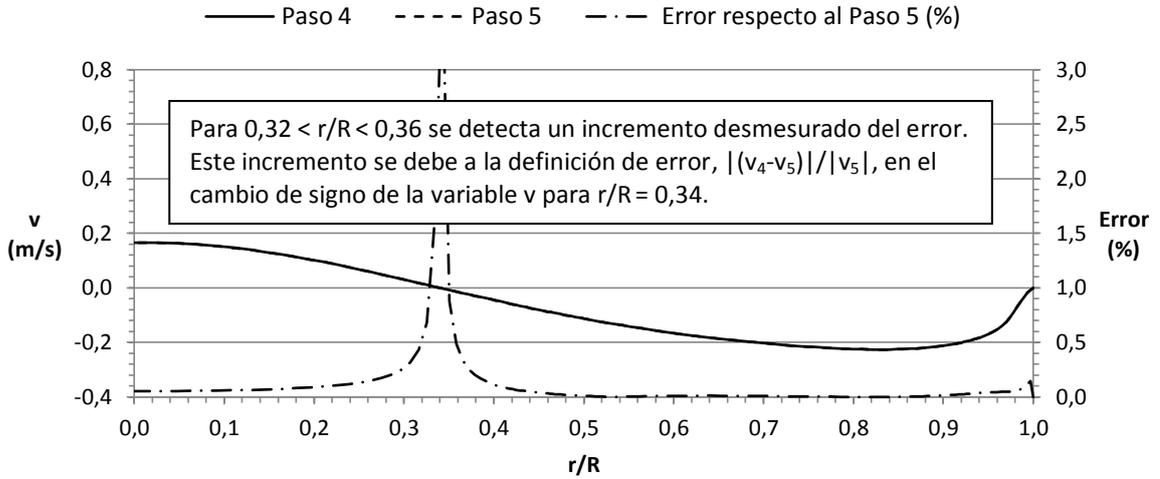


Figura 6.35. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. Pasos 4 y 5. Ciclo 7. Fase $\theta_1 = 0$.

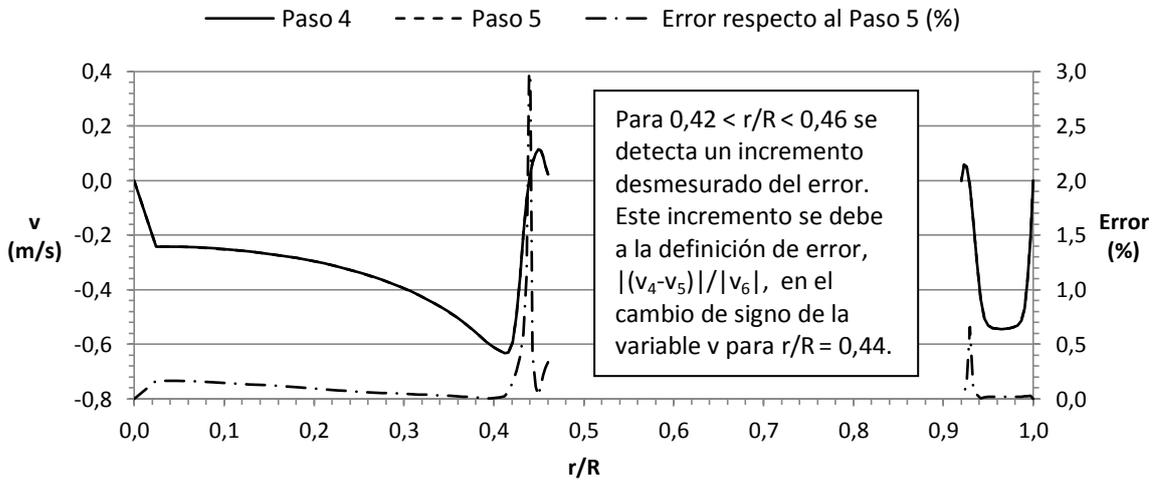


Figura 6.36. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco. Pasos 4 y 5. Ciclo 7. Fase $\theta_1 = 0$.

6.3.6.2. Fases $\theta_2 = \pi/2$, $\theta_3 = \pi$ y $\theta_4 = 3\pi/2$.

Téngase en cuenta que durante el avance del ciclo temporal se produce la **inversión de la velocidad del disco** de manera que los efectos que la presencia de las regiones de remanso y recorrido (véase la Figura 6.14) tienen sobre el flujo afectarán durante cada semi-ciclo a pasos espaciales diferentes. Sin embargo, la existencia de periodicidad espacial entre los pasos 3, 4, 5, 6 y 7 encontrada para la fase $\theta_1 = 0$ permite asegurar que, durante todo el ciclo de oscilación, existe periodicidad al menos en los pasos centrales 4 y 5. Nótese que en la simulación completa del Bloque I, con oscilación del fluido, la periodicidad espacial se detecta en pasos espaciales diferentes, según la fase de oscilación, porque los pasos periódicos son el 2-3 y el 6-7 alternativamente.

Para las fases θ_2 , θ_3 y θ_4 se obtienen las mismas conclusiones que en la fase $\theta_1 = 0$ analizada en el apartado anterior (Figuras 6.37, 6.38 y 6.39), quedando comprobada la **periodicidad espacial entre los pasos 4 y 5** para todo el ciclo de oscilación.

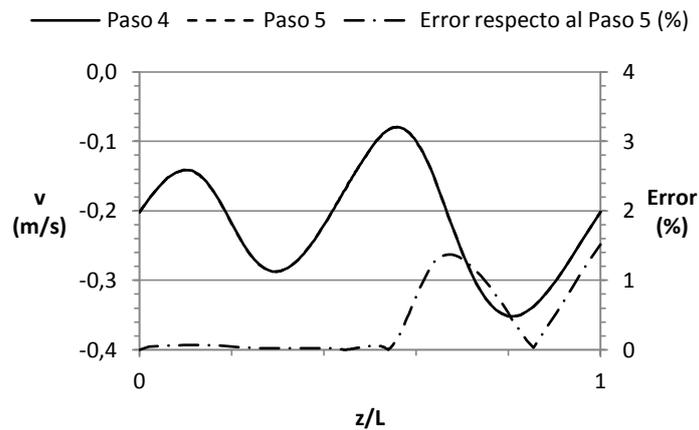


Figura 6.37. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 4 y 5. Ciclo 7. Fase $\theta_2 = \pi/2$.

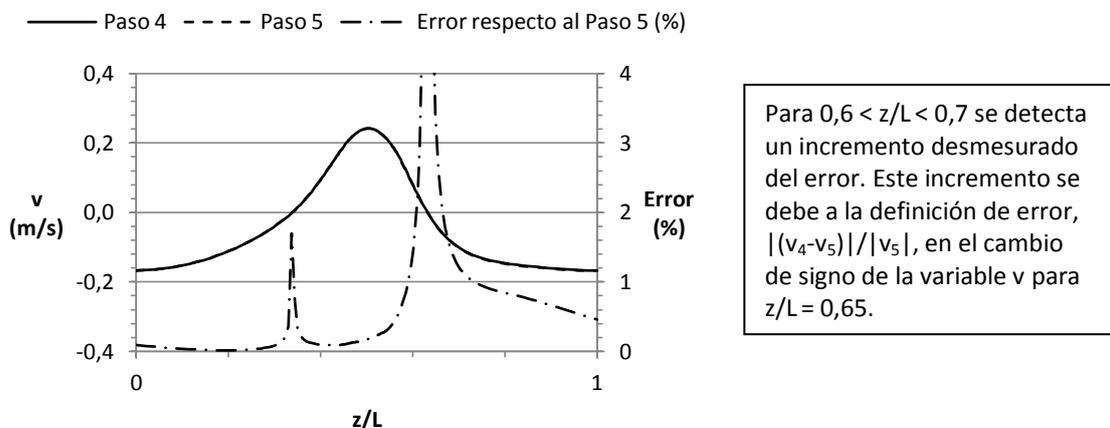


Figura 6.38. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 4 y 5. Ciclo 7. Fase $\theta_3 = \pi$.

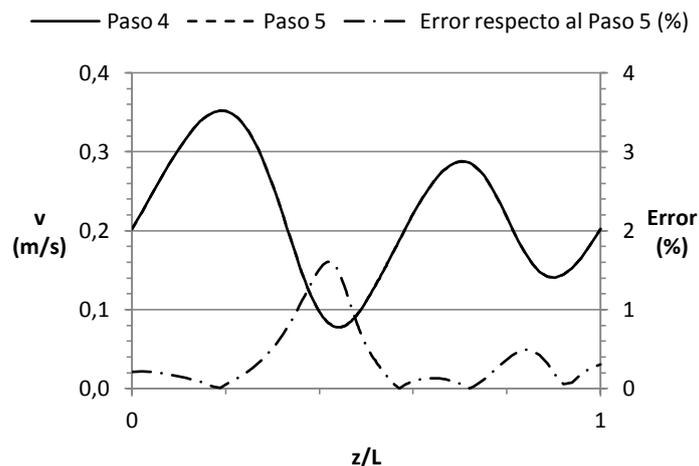


Figura 6.39. Superposición del perfil de velocidad axial en el eje. Pasos 4 y 5. Ciclo 7. Fase $\theta_4 = 3\pi/2$.

6.3.7. Conclusiones del análisis de periodicidad.

Del análisis de periodicidad espacial y temporal realizado para la simulación completa del flujo oscilatorio en un *OBR* con el modelo 2D se concluye:

- La simulación completa no estacionaria (con flujo en desarrollo) es temporalmente periódica desde el séptimo ciclo de oscilación y espacialmente periódica, a partir del paso espacial 4.
- La simulación periódica, espacialmente periódica por definición, no ha sido resuelta con éxito debido a la dificultad de combinar adecuadamente condiciones de contorno periódicas con mallado dinámico.

6.4. RESOLUCIÓN DEL CAMPO DE VELOCIDADES.

6.4.1. Presentación de resultados.

La solución espacial y temporalmente periódica del campo de velocidades se obtiene en la simulación completa sobre el dominio computacional 2D de 8 pasos, en el paso espacial 4, para la condición de operación 3 (frecuencia de 2 Hz). Los resultados presentados en este apartado son los siguientes:

- Perfiles radiales de velocidad axial (véase la *Figura 6.41*):
 - En la sección transversal equidistante entre discos: la componente radial de la velocidad es del orden de 50 veces inferior a la componente axial.
 - En la sección transversal del disco: la componente radial de la velocidad es del orden de 5 veces inferior a la componente axial.
- Contorno de velocidad entre dos discos consecutivos (véase la *Figura 6.42*).

Para presentar los resultados se seleccionan 8 fases como representativas de un ciclo completo de oscilación, formado por un total de 64 fases:

$$t_1/\tau = 0 ; t_2/\tau = 0,125 ; t_3/\tau = 0,25 ; t_4/\tau = 0,375$$

$$t_5/\tau = 0,5 ; t_6/\tau = 0,625 ; t_7/\tau = 0,75 ; t_8/\tau = 0,875$$

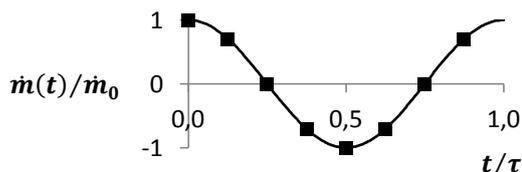


Figura 6.40. Fases de oscilación del campo de velocidades.

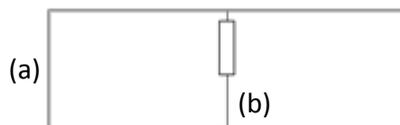


Figura 6.41. Obtención de los perfiles radiales de velocidad axial. Sección transversal equidistante entre discos (a) y sección transversal del disco (b).



Figura 6.42. Obtención del contorno de velocidad entre dos discos consecutivos.

6.4.2. Perfiles radiales de velocidad.

Nótese que los perfiles radiales de velocidad axial para el modelo 2D son obtenidos sobre un dominio computacional consistente en la mitad de la sección longitudinal de un paso espacial (véase el *Apartado 6.1.1*). Por lo tanto existe simetría axial en los perfiles, entre $0 < r/R < 1$ y $-1 < r/R < 0$. El análisis que se recoge en los siguientes apartados se centra en el rango $0 < r/R < 1$. Los resultados son adimensionalizados con la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$.

6.4.2.1. Sección transversal equidistante entre discos.

A continuación se presenta el análisis de los perfiles de velocidad axial obtenidos en la sección transversal equidistante entre discos para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$), y que se muestran en la *Figura 6.43*.

Los perfiles de velocidad axial tienen **forma parabólica** acusada en las fases en las que el disco tiene velocidad nula, es decir, para $t/\tau = 0$ y $t/\tau = 0,5$. En el resto de fases, la forma del perfil se asemeja a una triple parábola que invierte su convexidad alternativamente: dos parábolas simétricas entre sí en los extremos del perfil, para $0,46 < |r/R| < 1$; una parábola inversa respecto a éstas en la parte central, para $0 < |r/R| < 0,46$.

Nótese que la coordenada $r/R = 0,46$, que marca la separación aproximada entre parábolas, corresponde con la relación entre el radio del conducto y el radio del orificio del disco ($R_0/R = 5,75 \text{ mm}/12,5 \text{ mm}$), siendo evidente que el tamaño del orificio condiciona la forma del perfil radial en la sección transversal equidistante entre discos.

Todas las fases presentan una fuerte inversión del perfil de velocidades en la región central, aproximadamente para $r/R < 0,35$, a excepción de las fases $t/\tau = 0,125$ y $t/\tau = 0,625$, previas a alcanzarse la mayor velocidad en el disco para $t/\tau = 0,25$ y $t/\tau = 0,75$ respectivamente. A lo largo de todo el ciclo de oscilación se detecta la presencia de una estrecha capa límite en la pared del conducto, confinada aproximadamente en $0,96 < r/R < 1$.

- En la fase $t/\tau = 0$, que corresponde con $u_b(t)/u_{b0} = 0$, la velocidad en el perfil radial toma valores elevados respecto al resto del ciclo de oscilación, pese a estar el disco en condiciones de reposo. Se alcanza un pico de velocidad axial máxima de $v/u_0 = -0,7$ en $r/R = 0,85$ por efecto del semi-ciclo de velocidad negativa que precede a esta fase, y un mínimo de $v/u_0 = 0,5$ en el eje de simetría que se adelanta al semi-ciclo de velocidad positiva que comienza a partir de la misma.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $u_b(t)/u_{b0} = 0,71$, el perfil es completamente positivo, exceptuando una pequeña inversión en las cercanías de la pared del conducto. El semi-ciclo negativo que condiciona la fase anterior $t/\tau = 0$ deja de tener influencia y el pico de velocidad máxima aumenta un 140 %, pasando de $v/u_0 = -0,7$ a $v/u_0 = 0,3$, y alejándose de la pared hasta $r/R = 0,65$. Por el contrario, la velocidad en el eje se reduce un 70 %, de $v/u_0 = 0,5$ a $v/u_0 = 0,15$.

- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $u_b(t)/u_{b0} = 1$, se alcanza la mayor velocidad máxima en el ciclo, pasando de $v/u_0 = 0,3$ a $v/u_0 = 1,1$ con un incremento del 260 %. Este pico se desplaza ahora hacia la pared del conducto, situándose de nuevo en $r/R = 0,85$. Se produce también una brusca inversión del perfil, desde $v/u_0 = 0,15$ hasta $v/u_0 = -0,6$, con la existencia de un truncamiento evidente de la forma parabólica en la región central.
- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $u_b(t)/u_{b0} = 0,71$, se observa que el perfil de velocidad recupera la forma parabólica en la región central y que los valores máximos y mínimos no sufren variaciones significativas respecto a la fase anterior. El pico de velocidad máxima se reduce un 20 %, desde $v/u_0 = 1,1$ a $v/u_0 = 0,9$, alejándose otra vez de la pared del conducto hasta $r/R = 0,75$. Por su parte, el pico de velocidad mínima en el eje se reduce un 15 %, desde $v/u_0 = -0,6$ a $v/u_0 = -0,5$.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $u_b(t)/u_{b0} = 0$, se mantiene perfectamente la forma del perfil que se apunta en la fase precedente $t/\tau = 0,375$. El pico de velocidad máxima desciende otro 20 %, desde $v/u_0 = 0,9$ a $v/u_0 = 0,7$, acercándose otra vez a la pared del conducto hasta $r/R = 0,85$. Por su parte, el pico de velocidad mínima en el eje se mantiene en $v/u_0 = -0,5$. Se corrobora así la influencia del semi-ciclo que precede a la fase de velocidad nula del disco, tal y como se apunta en la fase $t/\tau = 0$.
- El análisis en el resto de fases es análogo.

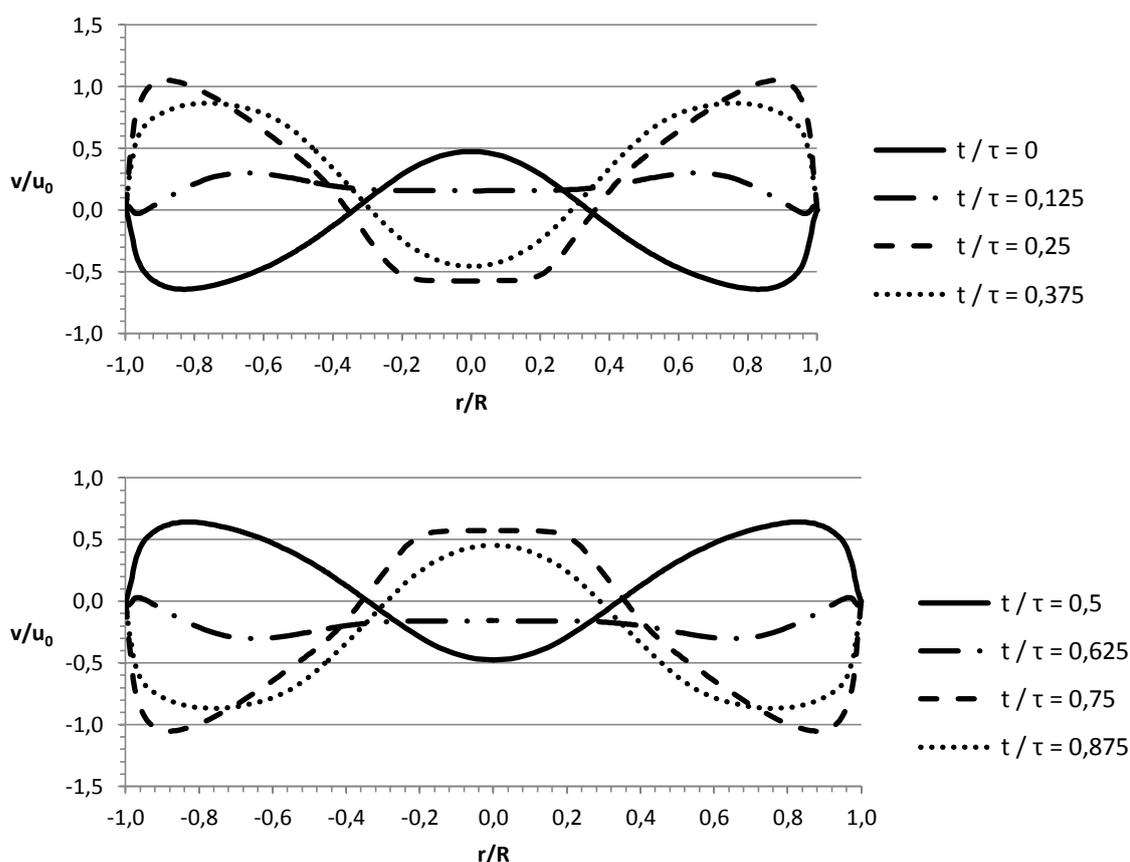


Figura 6.43. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal equidistante entre discos. Condición de operación 3: $f = 2$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

6.4.2.2. Sección transversal del disco, en el orificio.

A continuación se presenta el análisis de los perfiles de velocidad axial obtenidos en la sección transversal del disco, sobre el orificio (en el intervalo $0 < r/R < 0,46$) para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$), y que se muestran en la *Figura 6.44*.

Los perfiles de velocidad axial tienen **forma parabólica** acusada a lo largo de todo el ciclo de oscilación, excepto en las fases $t/\tau = 0,25$ y $t/\tau = 0,75$ de mayor velocidad del disco. En ambas fases se detecta la forma de triple parábola que invierte su convexidad alternativamente, y que aparece también en la sección transversal equidistante entre discos: dos parábolas simétricas entre sí en los extremos del perfil, para $0,1 < |r/R| < 0,4$; una parábola inversa respecto a éstas en la parte central, para $0 < |r/R| < 0,1$. En este caso, la escala no permite observar la triple parábola directamente, siendo necesario hacer una ampliación del perfil para apreciarla convenientemente. Además, en todas las fases, las formas parabólicas vienen acompañadas de una estrecha región lineal en el intervalo $0,40 < r/R < 0,44$, que supone un brusco **cambio en la magnitud de la pendiente y en el signo** de la misma (excepto en las fases $t/\tau = 0,375$ y $t/\tau = 0,875$ en las que el signo se mantiene).

Un aspecto destacable es que, durante el semi-ciclo de velocidad del disco positiva, los perfiles radiales de velocidad en la sección transversal del disco son negativos, y positivos en el semi-ciclo de velocidad negativo. Por tanto, la velocidad del disco y la velocidad axial en esta sección tienen **signo opuesto**. Tomando como referencia la velocidad axial en la pared del disco para $r/R = 0,46$, se observa que ninguna de las fases presenta una importante inversión del perfil de velocidades, al contrario de lo que sucede en la sección transversal equidistante entre discos. Sí existe, sin embargo, una pequeña inversión del perfil de velocidad en el entorno de la capa límite, que se sitúa aproximadamente en $0,44 < r/R < 0,46$ (excepto de nuevo en las fases $t/\tau = 0,375$ y $t/\tau = 0,875$).

- En la fase $t/\tau = 0$, que corresponde con $u_b(t)/u_{b0} = 0$, la velocidad en el perfil toma valores elevados respecto al resto de fases, pese a estar el disco en reposo, al igual que ocurre en la sección transversal equidistante entre discos. Se alcanza un pico de velocidad axial máxima de $v/u_0 = -1,8$ en $r/R = 0,41$ por efecto del semi-ciclo de velocidad negativa precedente, y un mínimo relativo de $v/u_0 = -0,7$ en el eje que presagia el comienzo del semi-ciclo de velocidad positiva a continuación. El mínimo absoluto $v/u_0 = 0,3$ se alcanza en el comienzo de la capa límite, para $r/R = 0,44$.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $u_b(t)/u_{b0} = 0,71$, el pico de velocidad máxima se alcanza en $r/R = 0,4$ con un valor de $v/u_0 = -1,3$, mientras que los picos de velocidad axial mínima, relativa y absoluta, se alcanzan en el eje y en $r/R = 0,44$, con valores de $v/u_0 = -0,8$ y $v/u_0 = 0,9$ respectivamente. Si se refieren las velocidades a $u_b(t)/u_{b0} = 0$, se observa que en esta fase se alcanza la mayor velocidad máxima del ciclo $v/u_0 = -1,3 - 0,7 = -2$. Respecto a la fase $t/\tau = 0$, la forma parabólica del perfil es muy similar, aunque más estrecha debido a la aceleración del movimiento del disco.
- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $u_b(t)/u_{b0} = 1$, el pico de velocidad máxima es $v/u_0 = -0,4$, alcanzado en $r/R = 0,4$, que referido a $u_b(t)/u_{b0} = 0$ supone un valor de $v/u_0 = -0,4 - 1 = -1,4$. Al alcanzarse la máxima velocidad del disco, la forma parabólica se reduce hasta obtenerse un perfil prácticamente plano y se estrecha aún más la diferencia entre velocidad máxima y mínima.

- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $u_b(t)/u_{b0} = 0,71$, la desaceleración del disco en su movimiento de avance cambia la forma del perfil, haciendo desaparecer la región lineal en el intervalo $0,40 < r/R < 0,44$ que acompaña a la parábola en fases anteriores. Además se invierte la convexidad de la parábola y se minimiza la diferencia entre velocidad máxima y mínima en el perfil. El pico de velocidad máxima es $v/u_0 = -0,4$, como en la fase $t/\tau = 0,25$ pero alcanzado esta vez en el eje. Al referirlo a $u_b(t)/u_{b0} = 0$ se obtiene un valor de $v/u_0 = -0,4 - 0,7 = -1,1$.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $u_b(t)/u_{b0} = 0$, se mantiene la magnitud y la forma del perfil parabólico que se apunta en la fase precedente $t/\tau = 0,375$, pero aparece de nuevo la región lineal en el intervalo $0,40 < r/R < 0,44$. Al detenerse el movimiento de avance del disco, al igual que ocurre en la fase $t/\tau = 0$, se alcanza un pico de velocidad axial mínima de $v/u_0 = 1,8$ en $r/R = 0,41$ por efecto del semi-ciclo de velocidad positiva que precede a esta fase, y un máximo relativo de $v/u_0 = 0,7$ en el eje de simetría que presagia el comienzo del semi-ciclo de velocidad negativa a continuación. El mínimo absoluto $v/u_0 = -0,3$ se alcanza en el comienzo de la capa límite, para $r/R = 0,44$.
- El análisis en el resto de fases es análogo.

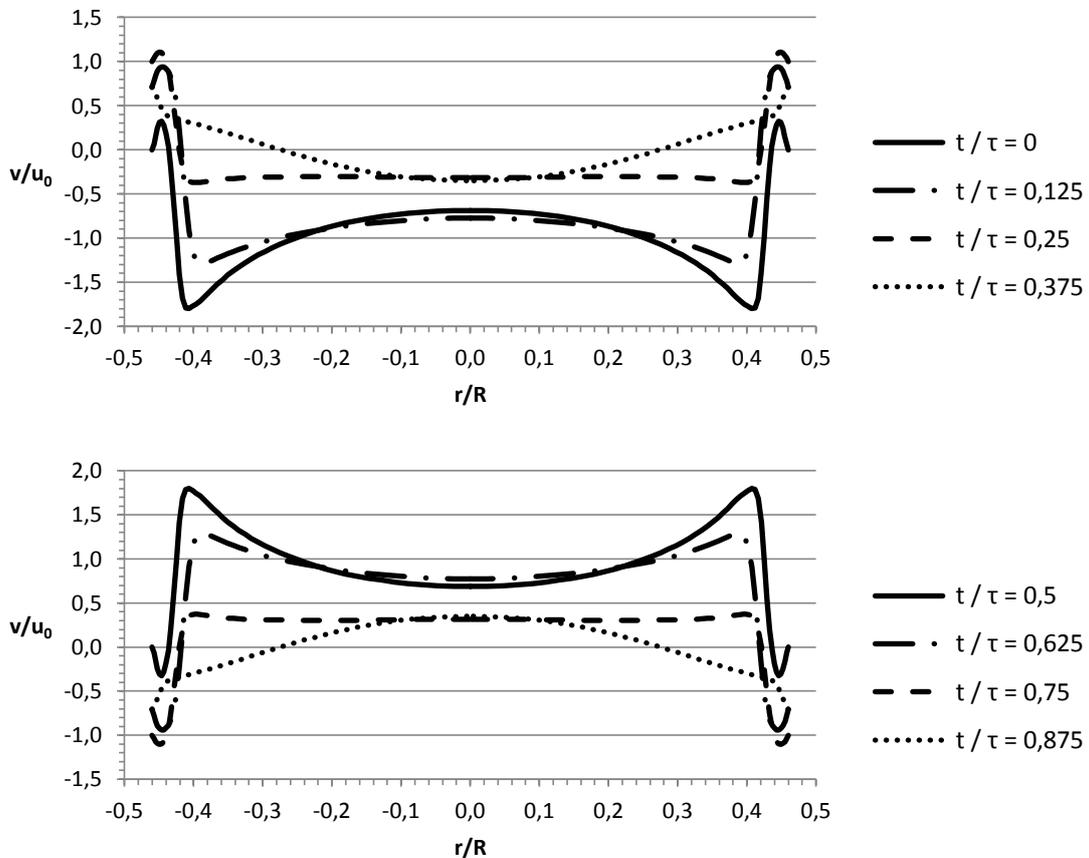


Figura 6.44. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal del disco, en el orificio. Condición de operación 3: $f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$.

6.4.2.3. Sección transversal del disco, en la holgura.

A continuación se presenta el análisis de los perfiles de velocidad axial obtenidos en la sección transversal del disco, sobre la holgura (en el intervalo $0,92 < r/R < 1$) para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$), y que se muestran en la *Figura 6.45*.

Los perfiles de velocidad axial tienen **forma de parábola truncada** a lo largo de todo el ciclo de oscilación, con presencia de dos capas límites visibles en todas las fases, excepto en las fases $t/\tau = [0,375 \text{ } 0,875]$ posteriores a los pasos por velocidad del disco máxima y mínima respectivamente. Existe una primera capa límite muy estrecha sobre la pared del conducto que se extiende a $0,99 < r/R < 1$. Sobre la pared del disco aparece una segunda capa límite que es simétrica a la primera y que, por efecto del desplazamiento del disco, incrementa su espesor hasta aproximadamente $0,92 < r/R < 0,94$.

El hueco del disco por el que el flujo es forzado a pasar es muy estrecho, por lo que la componente axial de la velocidad es predominante, siendo la componente radial del orden de 100 veces menor para las fases de mayor gasto másico $t/\tau = [0,25 \text{ } 0,75]$. Se trata por tanto de un perfil totalmente unidimensional, ya que no hay lugar para la existencia de vórtices o recirculaciones.

De forma parecida a como ocurre en la sección transversal del disco por el orificio, la velocidad del disco y la velocidad axial del perfil tienen **signo opuesto** también en la holgura: durante el semi-ciclo de velocidad del disco positiva, los perfiles radiales de velocidad en la sección transversal del disco son negativos (excepto en la fase $t/\tau = 0,375$, posterior al máximo de velocidad del disco), y positivos en el semi-ciclo de velocidad negativo (excepto en la fase $t/\tau = 0,875$, posterior al mínimo de velocidad del disco). Esto pone manifiesto el diferente comportamiento del perfil en la holgura respecto al perfil en el orificio, ambos situados en la misma sección transversal del disco.

En todas las fases, excepto en $t/\tau = [0,375 \text{ } 0,875]$ para las que no se observa capa límite, existe una inversión del perfil de velocidad en la capa límite situada sobre la pared del disco cuya extensión es variable según el instante de tiempo.

- En la fase $t/\tau = 0$, que corresponde con $u_b(t)/u_{b0} = 0$, la velocidad en el perfil radial toma valores elevados respecto al resto del ciclo de oscilación, pese a estar el disco en condiciones de reposo. Se alcanza un pico de velocidad axial máxima de $v/u_0 = -1,5$ por efecto del semi-ciclo de velocidad negativa que precede a esta fase, y un mínimo de $v/u_0 = 0,2$ que se adelanta al semi-ciclo de velocidad positiva que comienza a partir de la misma. La inversión del perfil se sitúa en $0,93 < r/R < 1$.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $u_b(t)/u_{b0} = 0,71$, el perfil es prácticamente idéntico al de la fase en el intervalo $0,96 < r/R < 1$, alcanzándose el mismo pico de velocidad máxima $v/u_0 = -1,5$. El pico de velocidad mínima aumenta de $v/u_0 = 0,2$ a $v/u_0 = 1$ como consecuencia del desplazamiento positivo del disco y permanece en la misma posición. La inversión del perfil se reduce respecto a la fase anterior hasta $0,94 < r/R < 1$.

- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $u_b(t)/u_{b0} = 1$, y puesto que la velocidad del disco es máxima, se alcanza la mayor velocidad mínima en el ciclo, pasando de $v/u_0 = 1$ a $v/u_0 = 1,2$ con un leve incremento y permaneciendo de nuevo en la misma posición. Asimismo el pico de velocidad máxima baja considerablemente, de $v/u_0 = -1,5$ a $v/u_0 = -0,4$. La inversión del perfil se reduce aún más respecto a las fases anteriores hasta $0,95 < r/R < 1$ aproximadamente.
- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $u_b(t)/u_{b0} = 0,71$, el perfil de velocidad se vuelve positivo en toda su extensión, cambiando la forma que presentan el resto de fases por una parábola perfecta en la que no existe inversión del perfil. El pico de velocidad máxima pasa a ser de $v/u_0 = 1,1$ en $r/R = 0,95$ aproximadamente, agrupando en uno los picos $v/u_0 = 1,2$ y $v/u_0 = -0,4$ de la fase anterior.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $u_b(t)/u_{b0} = 0$, se mantiene la forma del perfil que se apunta en la fase precedente $t/\tau = 0,375$, pero con una mayor magnitud del pico de velocidad máximo y el truncamiento de la parábola en $v/u_0 = 1,5$. Se produce la inversión del perfil en $0,93 < r/R < 1$ con un pico de velocidad mínima de $v/u_0 = -0,2$. Al igual que en la fase $t/\tau = 0$, se aprecia el efecto del semi-ciclo de velocidad positiva precedente, y un adelanto al semi-ciclo de velocidad negativa que comienza.
- El análisis en el resto de fases es análogo.

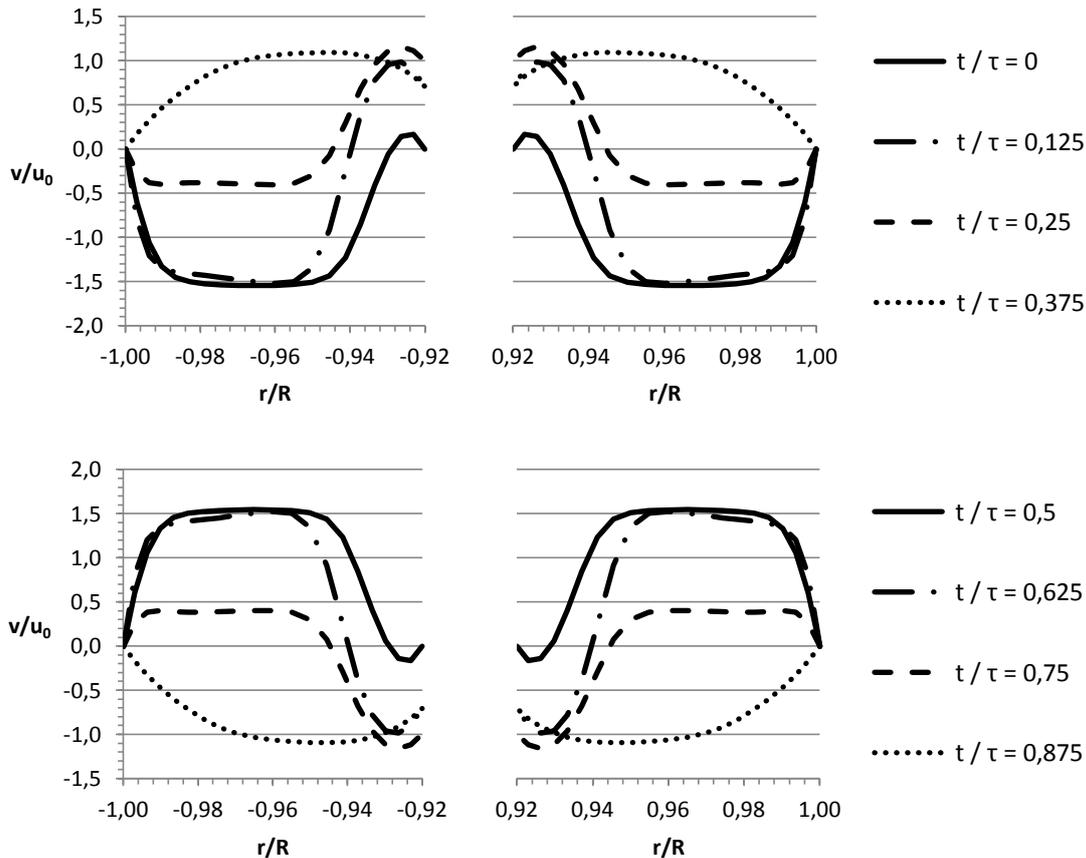


Figura 6.45. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal del disco, en la holgura. Condición de operación 3: $f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$.

6.4.3. Contornos de velocidad.

En la *Figura 6.46* se muestra la evolución del contorno de velocidad que se obtiene para la condición de operación 3 ($f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$) en la región del dominio computacional que se extiende entre dos discos consecutivos.

- En la fase $t/\tau = 0$, que corresponde con $u_b(t)/u_{b0} = 0$, se distinguen sobre el eje de simetría la existencia de dos flujos de sentido opuesto. En la parte central del paso existe un primer flujo, de baja velocidad, que viaja en el mismo sentido en el que el disco va a comenzar a desplazarse, anticipándose al semi-ciclo de velocidad positiva del disco que comienza a partir de $t/\tau = 0$. En las proximidades de los discos aparece un segundo flujo de mayor velocidad que avanza en contra del flujo anterior por la inercia que el paso por el orificio durante el semi-ciclo de velocidad negativa impone al fluido. La separación entre los dos flujos opuestos se presenta en posiciones equidistantes a la sección transversal del eje: en $l/L = 0,13$ y en $l/L = 0,87$. Ambas separaciones actúan, respectivamente, como fuente y sumidero en el eje, y como sumidero y fuente en la dirección perpendicular al eje. Estas líneas de corriente provocan que recircule la región de velocidad prácticamente nula que flanquea al flujo central de baja velocidad, y que se extiende hasta el radio interior del disco. Dentro de esta gran burbuja central aparecen dos recirculaciones internas que giran en el mismo sentido. Así, el flujo opuesto de mayor velocidad rodea a la burbuja central y viaja de un disco a otro sin interactuar con ésta, creando una recirculación residual aguas arriba de los discos. El flujo que atraviesa la holgura del disco se acelera en esta sección y avanza hasta la siguiente holgura sin promover mezclado radial alguno.
- En la fase $t/\tau = 0,125$, para $u_b(t)/u_{b0} = 0,71$, el disco se desplaza en sentido positivo dejando tras de sí una región de alta velocidad aguas abajo que se extiende hasta el radio interior del disco. La recirculación residual que en la fase $t/\tau = 0$ se crea junto al disco crece, posicionándose en $l/L = 0,67$, y aparecen otras dos recirculaciones que la acompañan como consecuencia del avance del disco. Sin embargo, la recirculación de $l/L = 0,67$, que parece haber cambiado su posición respecto a la fase anterior, permanece estacionaria, es decir, en la misma posición con respecto al conducto fijo. Lo mismo sucede con el punto de separación de flujos opuestos que en $t/\tau = 0$ se posiciona en $l/L = 0,87$ y en $t/\tau = 0,125$ se posiciona en $l/L = 0,52$: permanece invariante respecto al conducto. Así, el avance del disco comprime a la anterior región central de baja velocidad contra la nueva región de alta velocidad, haciendo que la burbuja que antes ocupaba gran parte del volumen se reduzca y se desplace hasta $l/L = 0,45$. Aunque existe interacción entre las recirculaciones que aparecen aguas detrás de los discos, sigue sin existir mezclado radial entre la región de alta velocidad que se extiende desde el eje hasta el orificio del disco y las regiones periféricas.
- Para la fase $t/\tau = 0,25$, con $u_b(t)/u_{b0} = 1$, el desplazamiento del disco elimina completamente la región central de baja velocidad que empezaba a ser comprimida en la fase $t/\tau = 0,125$, de manera que en el eje existe un único flujo, a diferencia de lo que sucede en las fases anteriores. También desaparece, por el movimiento del disco, la burbuja que se observa en $l/L = 0,45$ para $t/\tau = 0,125$, quedando únicamente las tres recirculaciones que nacen detrás del disco. La recirculación que ahora ocupa la posición $l/L = 0,28$ (en $l/L = 0,52$ para $t/\tau = 0,125$) deja de ser invariante y se desplaza levemente en el sentido de avance del disco, empujada por el siguiente disco. Las otras dos recirculaciones, situadas en $l/L = 0,78$, son

arrastradas en forma de estela detrás del disco que las ha generado en la fase anterior. Estas tres recirculaciones a su vez son desplazadas, respectivamente, hacia el eje y la pared del conducto conforme el disco avanza, pero sin llegar a promover mezclado radial entre la región central y la periferia.

- En la fase $t/\tau = 0,375$, con $u_b(t)/u_{b0} = 0,71$, la única diferencia notable respecto a la fase anterior es la desaparición de la recirculación próxima a la pared del conducto. El flujo que atraviesa la holgura entre el disco y la pared, pese a no incrementar sensiblemente su velocidad, absorbe esta recirculación, no en la fase de máxima velocidad del disco como cabría esperar, sino posteriormente. Esto pone de manifiesto la alta inercia que el movimiento de los discos introduce en el flujo. La recirculación situada en $l/L = 0,18$ sigue siendo empujada por el disco que la sigue, y la recirculación situada en $l/L = 0,74$ sigue siendo arrastrada en forma de estela por el disco que la sigue, sin promover mezclado radial entre la región central y la periferia.
- En la fase $t/\tau = 0,5$, que corresponde a $u_b(t)/u_{b0} = 0$, se observa la formación, de nuevo en el eje, de dos flujos que avanzan en sentido opuesto como consecuencia de la desaceleración del disco hasta alcanzar condiciones de reposo. Las dos recirculaciones presentes en la fase anterior $t/\tau = 0,375$ pierden velocidad y se acercan entre sí, dando lugar a los dos flujos opuestos que se reportan en la fase $t/\tau = 0$. En la parte central del paso existe un primer flujo, de baja velocidad, que viaja en el mismo sentido en el que el disco va a comenzar a desplazarse, anticipándose al semi-ciclo de velocidad negativa del disco que comienza a partir de $t/\tau = 0,5$. En las proximidades de los discos aparece un segundo flujo de mayor velocidad que avanza en contra del flujo anterior por la inercia que el paso por el orificio durante el semi-ciclo de velocidad positiva impone al fluido. La separación entre los dos flujos opuestos se presenta en posiciones equidistantes a la sección transversal del eje: en $l/L = 0,13$ y en $l/L = 0,87$. Ambas separaciones actúan, respectivamente, como sumidero y fuente en el eje, y como fuente y sumidero en la dirección perpendicular al eje. Estas líneas de corriente provocan que recircule la región de velocidad prácticamente nula que flanquea al flujo central de baja velocidad, y que se extiende hasta el radio interior del disco. Dentro de esta gran burbuja central aparecen dos recirculaciones internas que giran en el mismo sentido. Así, el flujo opuesto de mayor velocidad rodea a la burbuja central y viaja de un disco a otro sin interactuar con ésta, creando una recirculación residual aguas arriba de los discos. El flujo que atraviesa la holgura del disco se acelera en esta sección y avanza hasta la siguiente holgura sin promover mezclado radial alguno.
- El análisis en el resto de fases es análogo.

Nótese que el contorno de velocidad de cada fase t/τ ha sido adimensionalizado con la correspondiente velocidad local máxima $v_{max}(t/\tau)$ para identificar fácilmente las regiones de alta y baja velocidad. El análisis del contorno de velocidad recogido se complementa con un **vídeo** en el que se muestra la evolución temporal del contorno de velocidad a lo largo de 6 ciclos de oscilación, para la solución espacial y temporalmente periódica (Vídeo 8. Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz).

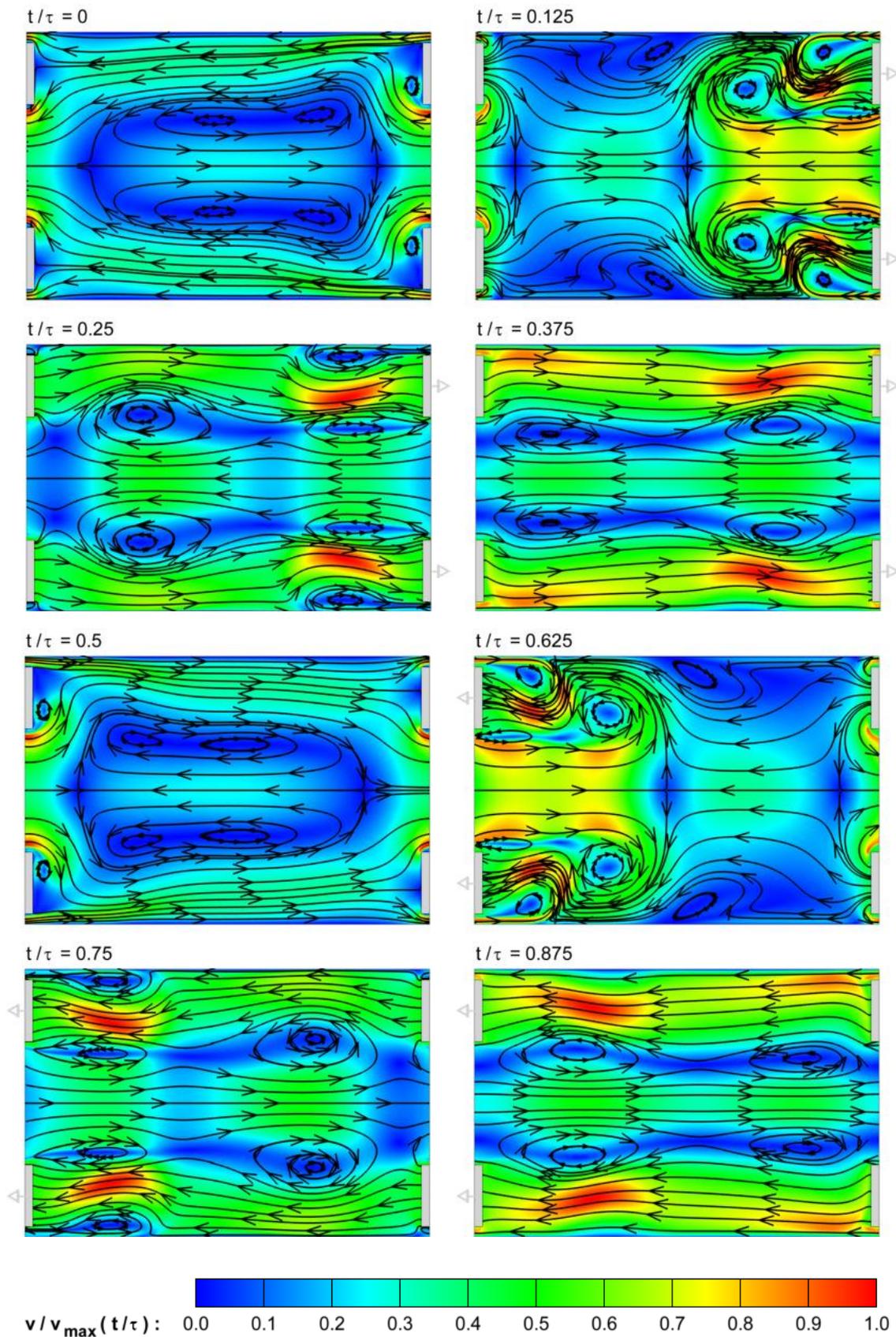


Figura 6.46. Contorno de velocidad. Condición de operación 3: $f = 2 \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$.

6.4.4. Influencia del número de Reynolds oscilatorio.

Una vez analizados en profundidad los resultados obtenidos con la condición de operación 3 (véanse los *Apartados 6.4.2 y 6.4.3*), se extiende el análisis al resto de condiciones de operación simuladas. Como se recoge en la *Tabla 6.4*, la amplitud de oscilación x_0 se mantiene constante (en consecuencia el número de Strouhal St es fijo) y se varía la frecuencia de oscilación f , siendo la velocidad de oscilación $u_0 = 2\pi f x_0$. Se estudia por lo tanto la influencia del número Reynolds oscilatorio Re_o sobre los perfiles radiales de velocidad axial.

$$Re_o = \frac{2\pi f x_0 \rho D}{\mu} \quad (\text{ec.6.11})$$

$$St = \frac{D}{4\pi x_0} \quad (\text{ec.6.12})$$

Condición de operación	x_0 (mm)	f (Hz)	u_0 (m/s)	Re_o	St
1	28	0,5	0,088	2.189	0,071
2	28	1	0,176	4.377	0,071
3	28	2	0,352	8.754	0,071

Tabla 6.4. Condiciones de operación del reactor de flujo oscilatorio.

Tanto para la sección transversal equidistante entre discos (*Figura 6.47*) como para la sección transversal del disco, en el orificio (*Figura 6.48*) y en la holgura (*Figura 6.49*), la reducción de la frecuencia de oscilación se traduce en una disminución, a priori proporcional, en la magnitud de la velocidad axial sobre el perfil radial. Este resultado concuerda con lo observado en el análisis equivalente que se realiza en el Bloque I para la oscilación del fluido con los modelos 2D (*Apartado 3.4.4 del Capítulo 3*) y 3D (*Apartado 5.3.5 del Capítulo 5*).

Al adimensionalizar la velocidad axial con la velocidad de oscilación correspondiente a cada frecuencia, se pone de manifiesto que, al contrario de lo mostrado con la oscilación del fluido, con la oscilación de los deflectores la forma de los perfiles no es perfectamente coincidente (*Figuras 6.50, 6.51 y 6.52*). Sin embargo, las diferencias entre los perfiles que se obtienen en la sección transversal equidistante entre discos y en el orificio del disco, para las diferentes condiciones de operación, no son importantes. En la holgura de la sección transversal del disco, en cambio, estas diferencias son más acusadas, poniendo de manifiesto la relevancia del tamaño de dicha holgura en las estructuras de mezclado que se generan en el interior del reactor de flujo oscilatorio.

Un estudio análogo centrado en los contornos de velocidad ofrece el mismo resultado, que se corrobora con la visualización conjunta de los tres **vídeos** en los que se muestra las evoluciones temporales de los contornos de velocidad a lo largo de 6 ciclos de oscilación, para la solución espacial y temporalmente periódica de cada una de las tres condiciones de operación:

- Vídeo 8. Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz.
- Vídeo 9. Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D. Frecuencia 1 Hz.
- Vídeo 10. Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D. Frecuencia 0,5 Hz.

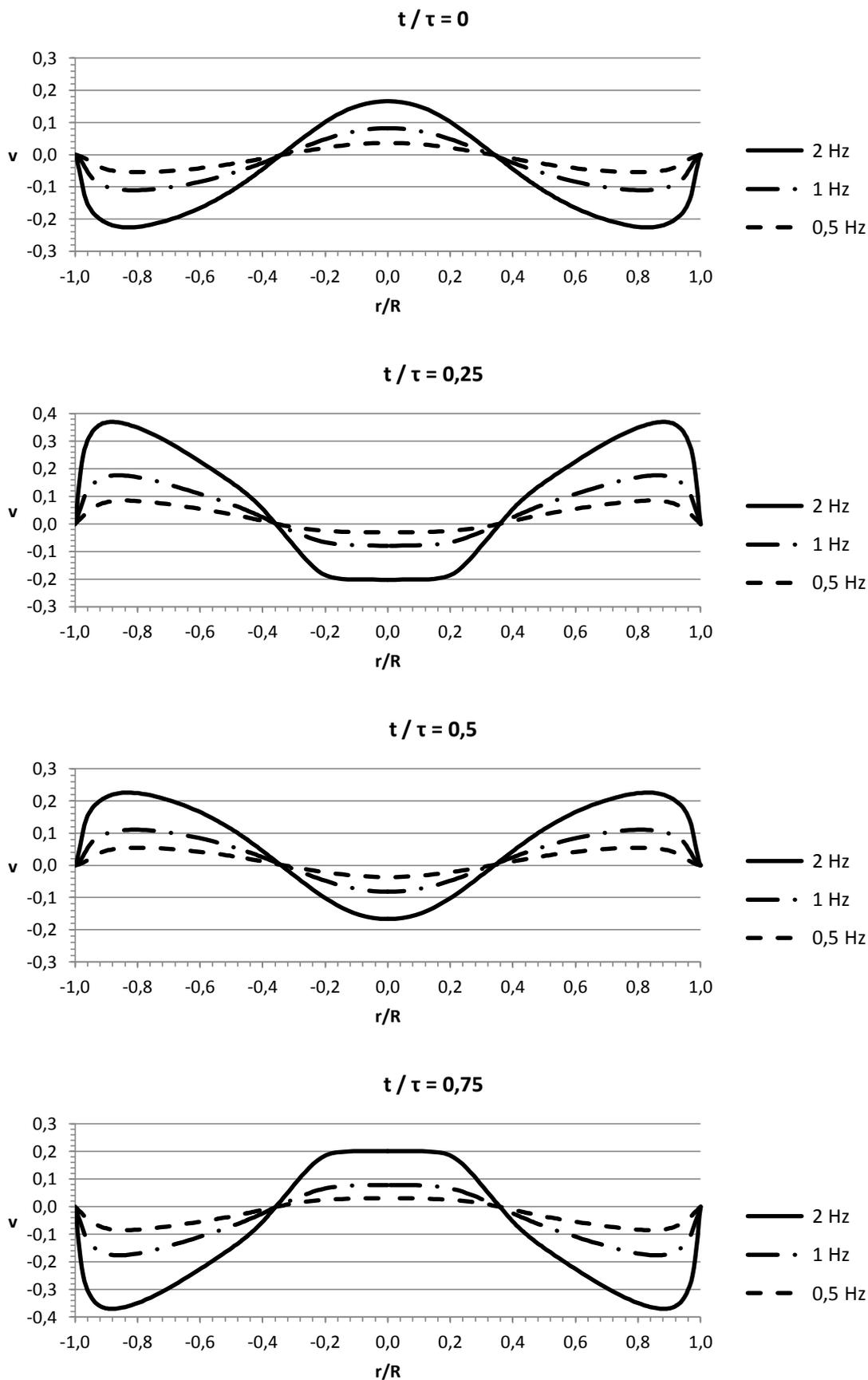


Figura 6.47. Perfil de velocidad axial en la sección transversal equidistante entre discos. $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

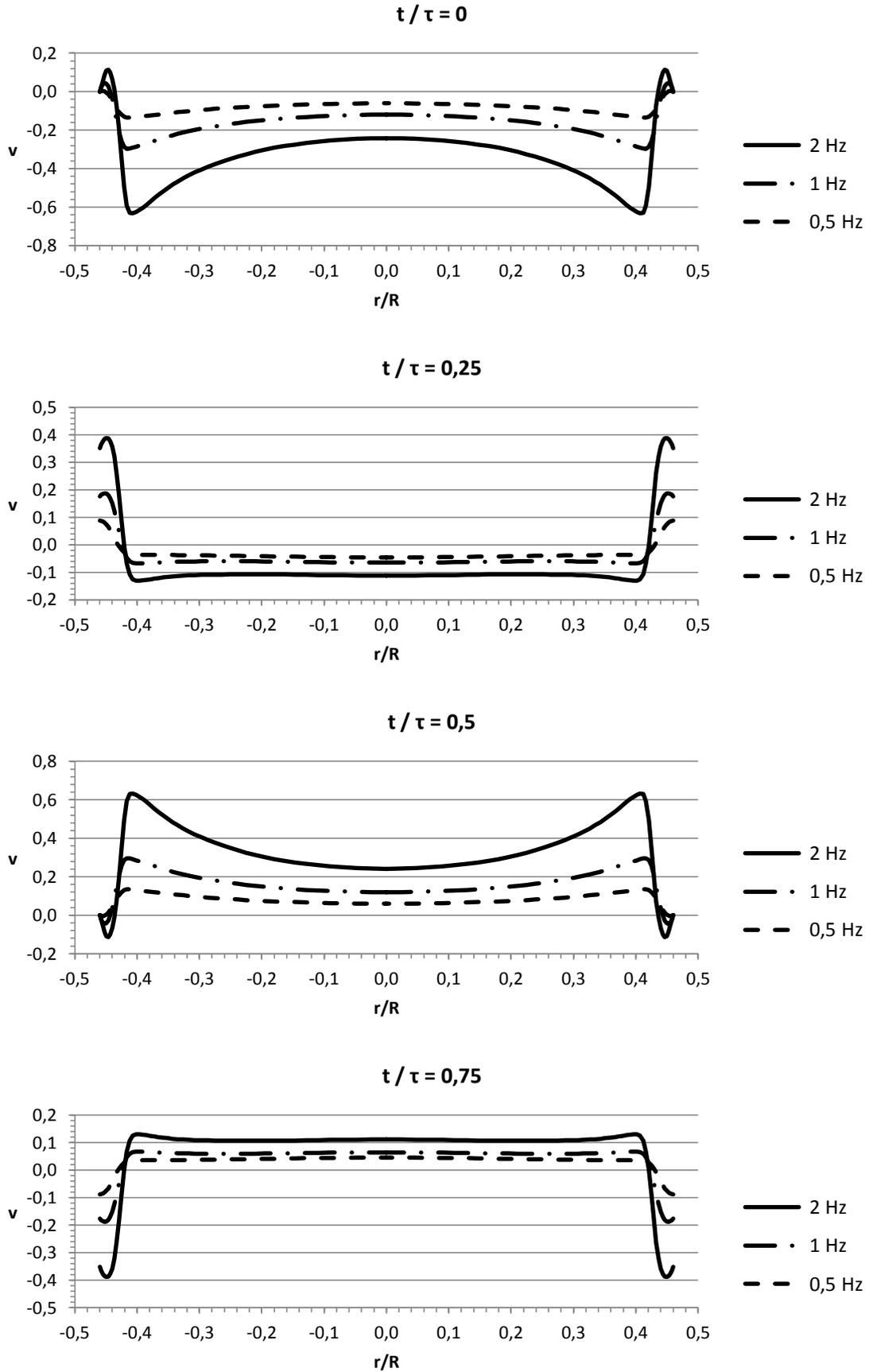


Figura 6.48. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco, en el orificio.
 $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

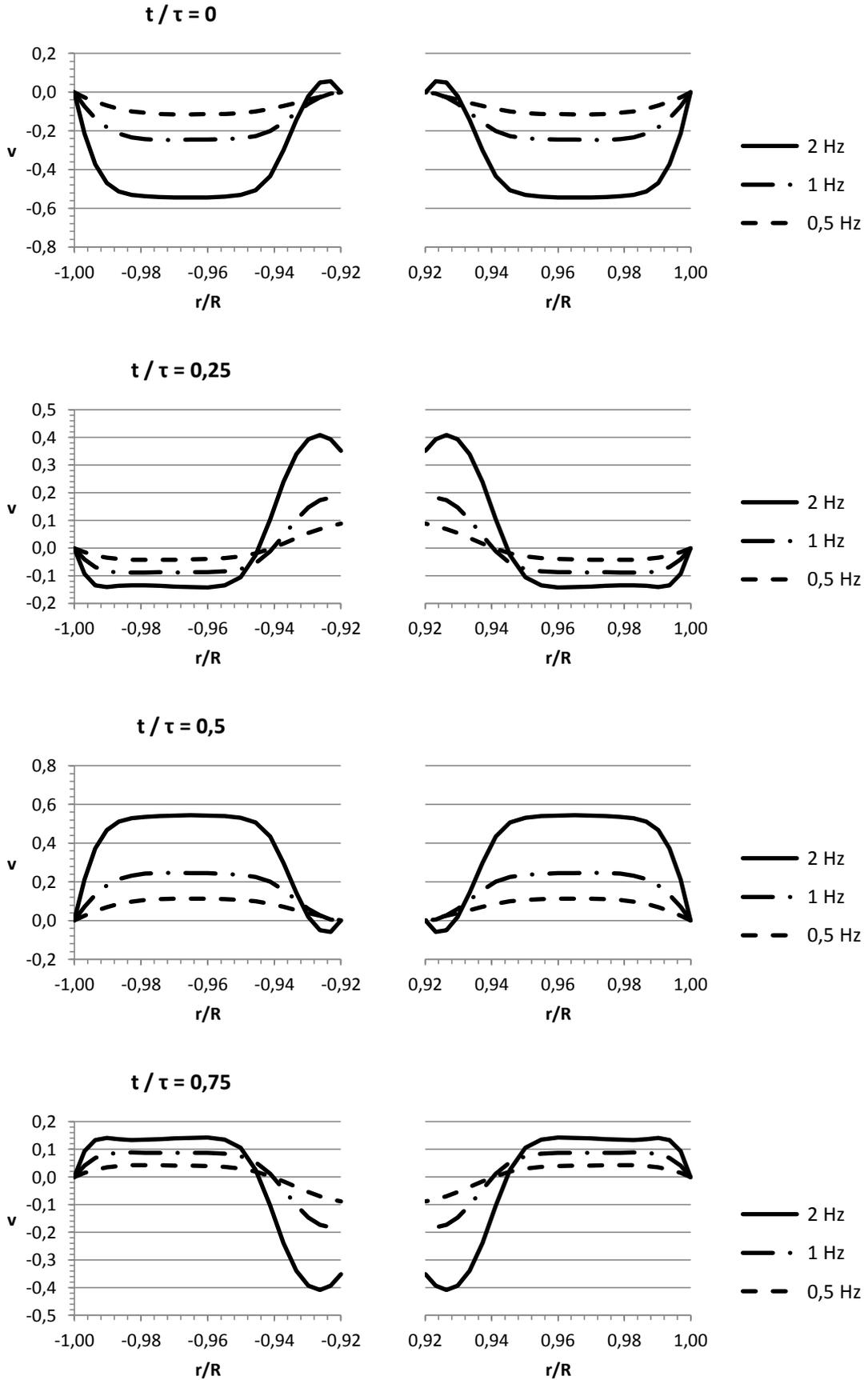


Figura 6.49. Perfil de velocidad axial en la sección transversal del disco, en la holgura.
 $f = [2 \ 1 \ 0,5] \text{ Hz}$, $x_0 = 28 \text{ mm}$.

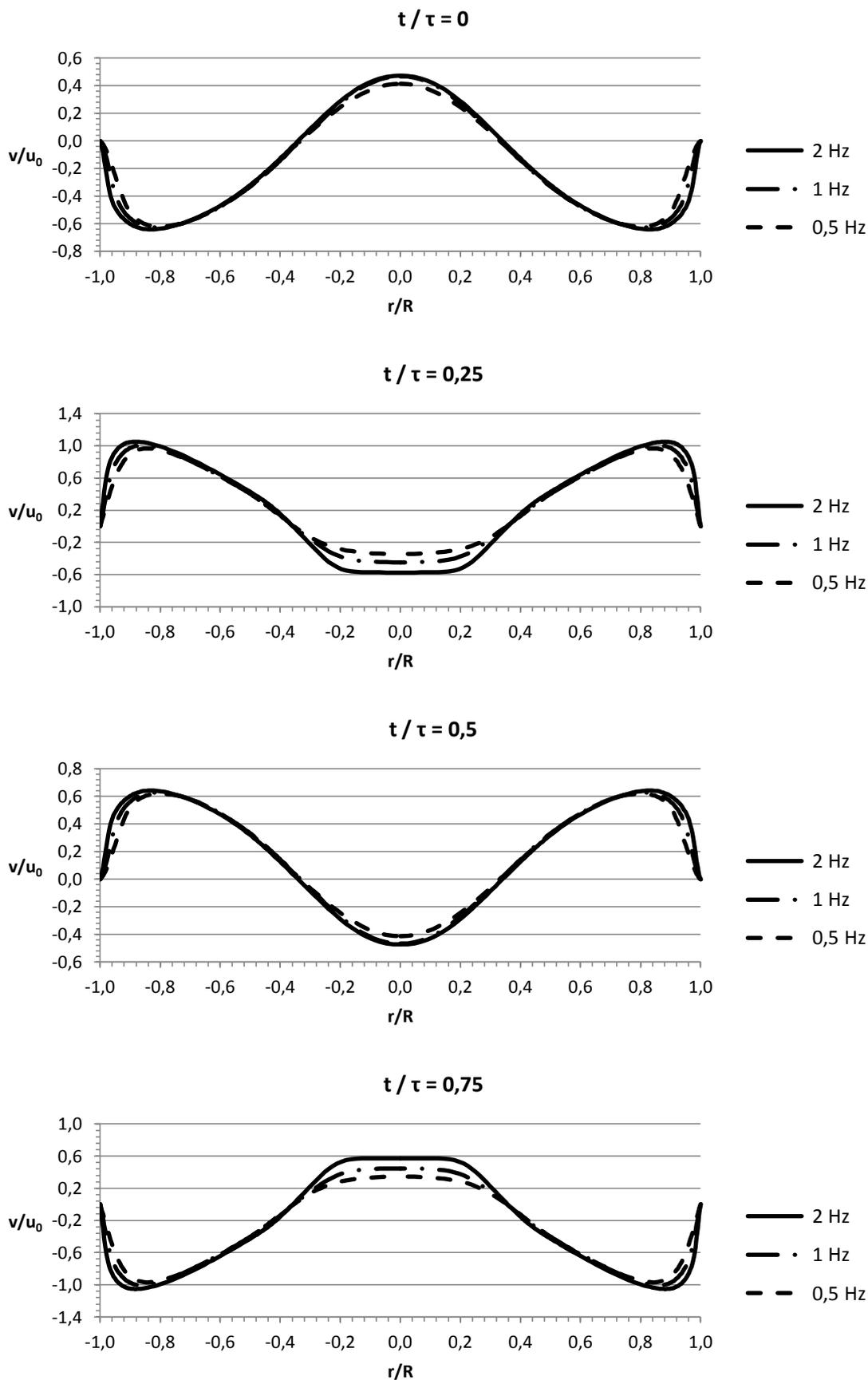


Figura 6.50. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal equidistante entre discos. $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

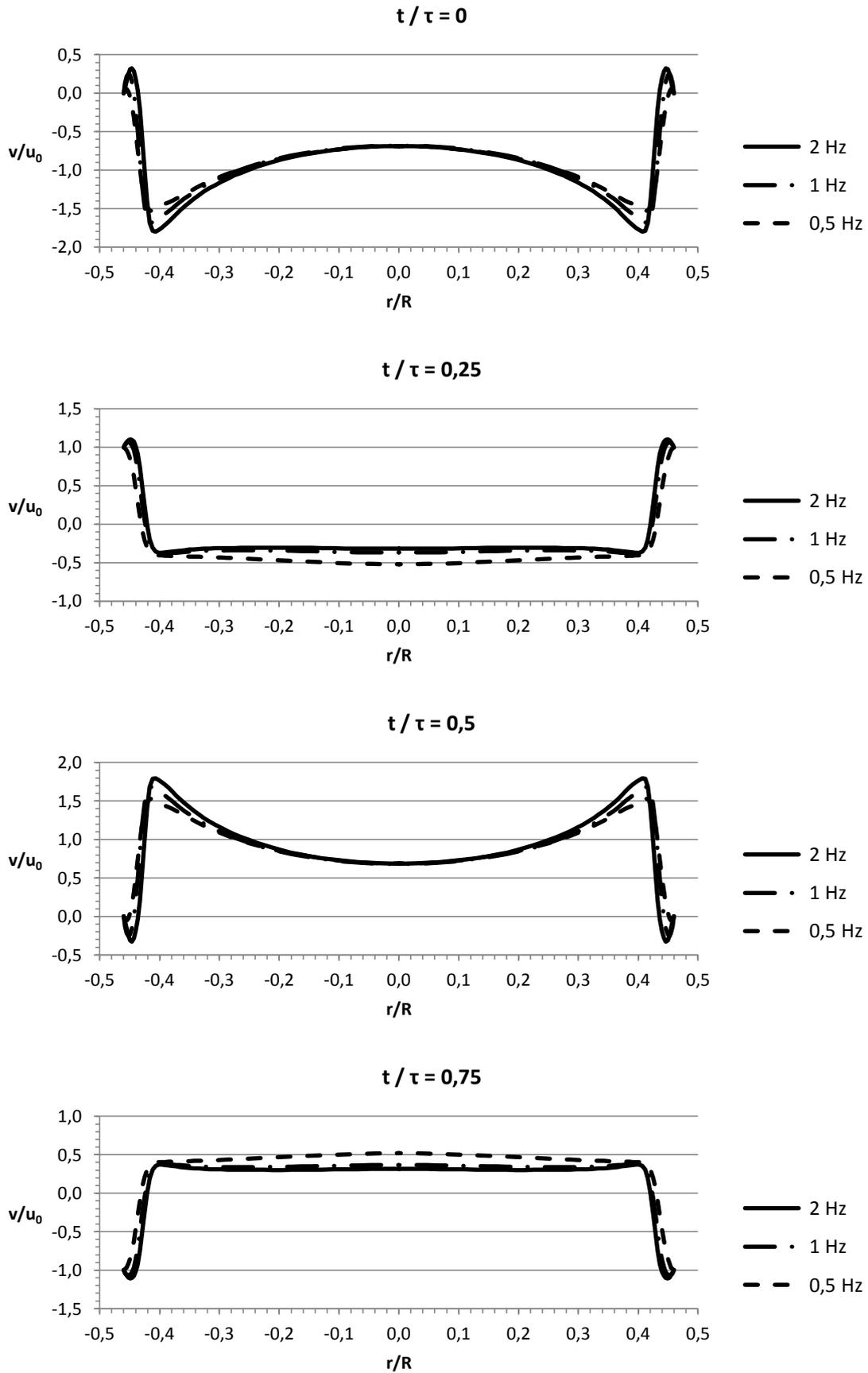


Figura 6.51. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal del disco, en el orificio. $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

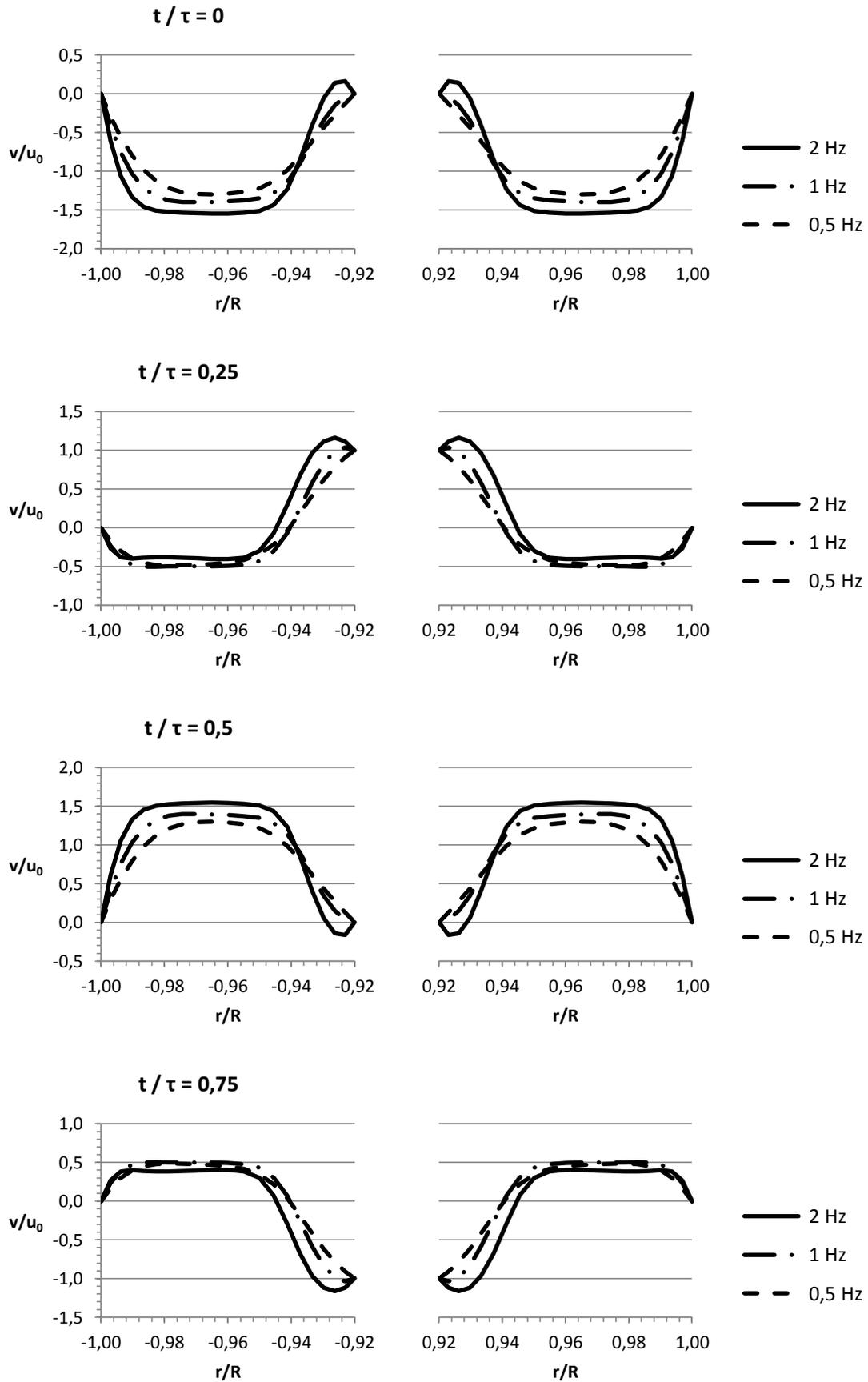


Figura 6.52. Perfil de velocidad axial adimensional en la sección transversal del disco, en la holgura. $f = [2 \ 1 \ 0,5]$ Hz, $x_0 = 28$ mm.

Se concluye por lo tanto que el parámetro predominante en condiciones de elevado número de Reynolds oscilatorio y reducido número de Strouhal es el Strouhal, siendo poco importante la influencia del Reynolds oscilatorio sobre las estructuras de mezcla que se forman en el interior del reactor de flujo oscilatorio, a excepción de las regiones próximas a la holgura. Nótese que estas condiciones de operación no han sido reproducidas por ningún otro estudio numérico del flujo oscilatorio en OBR (véase un resumen de dichos estudios en la *Tabla 1.3* del *Capítulo 1*).

Se observa además que el mecanismo de mezcla descrito en el *Apartado 6.4.3*, válido para las tres condiciones de operación simuladas en el presente proyecto, es muy diferente al observado en el Bloque I. Con la oscilación de los discos, bajo las mismas condiciones de operación que con la oscilación del fluido, se obtienen unas estructuras de mezclado más complejas e intensas. Se pone de manifiesto la mejora que puede suponer este modo de funcionamiento del reactor de flujo oscilatorio de cara a mejorar el mezclado en regímenes de funcionamiento de alto número de Reynolds oscilatorio y bajo número de Strouhal.

CONCLUSIONES DEL ESTUDIO.

Las condiciones de operación simuladas en este estudio numérico, de elevado número de Reynolds oscilatorio y reducido número de Strouhal, dan como resultado un flujo oscilatorio intensamente mezclado y de baja propagación efectiva de vórtices. Esta complejidad del flujo, tanto en la configuración de oscilación del fluido como en la de oscilación de los discos, obliga a un diseño de mallado muy denso que, principalmente en el modelo 3D, ha condicionado la capacidad de cálculo disponible. Se efectúa un estudio de sensibilidad de malla en el que se establecen como variables testigo, el perfil radial de velocidad axial y el gradiente de presión por unidad de longitud. Para la configuración de oscilación del fluido se diseña un mallado estructurado que consta, para cada paso espacial, de 11.240 nodos en el modelo 2D y de 652.041 en el modelo 3D; para la configuración de oscilación de los discos se emplea un mallado estructurado 2D de 19.008 nodos por paso espacial. Las simulaciones 2D son resueltas con el modelo de turbulencia k- ω mientras que en las simulaciones 3D se aplica el modelo LES.

Para la oscilación del fluido con el modelo 2D, la simulación completa con flujo en desarrollo es temporalmente periódica desde el tercer ciclo de oscilación y espacialmente periódica a partir del sexto paso espacial. La simulación periódica, espacialmente periódica por definición, es temporalmente periódica desde el segundo ciclo de oscilación y reproduce con exactitud los resultados de la simulación completa. Para la oscilación del fluido con el modelo 3D se validan las condiciones de contorno periódicas en base a los resultados obtenidos en el modelo 2D, no siendo asumible la simulación completa con flujo en desarrollo por la limitación del alto coste computacional requerido. La simulación periódica, espacialmente periódica por definición, no posee periodicidad temporal en los 11 primeros ciclos de oscilación. El comportamiento altamente fluctuante y caótico de la solución que se registra en estos 11 ciclos pone en duda la posibilidad de hallar una solución temporalmente periódica. La técnica de promediado en fase (*phase-locked average, PLA*) que se aplica a la simulación 3D proporciona unos resultados que superan las expectativas generadas inicialmente, con tan sólo 10 ciclos de oscilación. Se observa una notable reducción del comportamiento fluctuante y caótico del flujo, y una mejora de la axil-simetría respecto a la solución no promediada. Las conclusiones son consistentes tanto con los resultados experimentales como con los estudios numéricos referidos en la bibliografía, quedando por tanto validada la metodología de simulación periódica 3D del flujo oscilatorio que permite trabajar con un dominio computacional de un único paso espacial. Asimismo, los resultados del análisis *PLA* permiten plantear la hipótesis de que, con el promediado de un número suficiente de ciclos de oscilación, la solución 3D del modelo LES se aproxime lo suficiente a la obtenida en 2D con un modelo RANS como para validar el comportamiento axil-simétrico del flujo en un *OBR*.

Para la oscilación de los discos con el modelo 2D, realizada por primera vez aplicando un mallado dinámico con discos móviles, la simulación completa con flujo en desarrollo es temporalmente periódica desde el séptimo ciclo de oscilación y espacialmente periódica a partir del cuarto paso espacial. El mecanismo de mezclado está dominado por el sembrado de vórtices desde la región entre la pared y los discos, los cuáles interactúan con los vórtices que crecen a través de los orificios aguas arriba de los mismos, intensificando el mezclado radial del flujo. La simulación periódica no ha sido resuelta con éxito debido a la dificultad de combinar adecuadamente condiciones de contorno periódicas con mallado dinámico. El mecanismo de mezcla que se desarrolla bajo las condiciones de operación simuladas, con oscilación del fluido y con oscilación de los discos, está dominado por influencia del número de Strouhal, siendo irrelevante la contribución del número de Reynolds oscilatorio.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

ANEXO A. MODELOS DE TURBULENCIA Y RESTRICCIONES SOBRE y^+ .

	Página
A.1. Modelos de turbulencia	173
A.2. Selección del modelo de turbulencia	175
A.3. Cumplimiento de la restricción $y^+ \leq 1$	177

A.1. Modelos de turbulencia.

El sistema de ecuaciones de Navier-Stokes, particularizado bajo las hipótesis de simulación aplicadas en este Proyecto (flujo incompresible, ecuación de la energía no resuelta y contribución de la gravedad no considerada), toma la forma:

$$\text{Continuidad:} \quad \nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{ec.A.1})$$

$$\text{Cantidad de movimiento:} \quad \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho \nabla(\vec{v} \cdot \vec{v}) = -\nabla p + \mu \Delta \vec{v} \quad (\text{ec.A.2})$$

En un flujo turbulento incompresible, para describir el comportamiento de la velocidad \vec{v} , es necesario recurrir a su descomposición en una velocidad media \vec{U} y una velocidad fluctuante \vec{v}' . La introducción de estas dos componentes en las ecuaciones de Navier-Stokes da lugar al sistema de ecuaciones de Reynolds del movimiento promediado (*Reynolds Averaged Navier-Stokes, RANS*):

$$\text{Continuidad:} \quad \nabla \cdot (\vec{U} + \vec{v}') = 0 \quad (\text{ec.A.3})$$

$$\text{Cantidad de movimiento:} \quad \rho \frac{\partial (\vec{U} + \overline{\vec{v}'})}{\partial t} + \rho \nabla(\vec{U} \cdot \vec{U} + \overline{\vec{v}' \cdot \vec{v}'}) = -\nabla \bar{p} + \mu \Delta \vec{U} \quad (\text{ec.A.4})$$

Aplicando las correspondientes propiedades de las componentes media y fluctuante, el sistema RANS anterior se reescribe como:

$$\text{Continuidad:} \quad \nabla \cdot \vec{U} = 0 \quad (\text{ec.A.5})$$

$$\text{Cantidad de movimiento:} \quad \rho \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \rho \nabla(\vec{U} \cdot \vec{U}) = -\nabla \bar{p} + \mu \Delta \vec{U} - \rho \nabla(\overline{\vec{v}' \cdot \vec{v}'}) \quad (\text{ec.A.6})$$

En este sistema de ecuaciones particularizado aparece un nuevo término respecto al sistema de ecuaciones de Navier-Stokes inicial, el tensor de esfuerzos turbulentos de Reynolds $-\rho \nabla(\overline{\vec{v}' \cdot \vec{v}'})$, de manera que el RANS es un sistema abierto, con más incógnitas que ecuaciones: esto se conoce como **problema de cierre de la turbulencia**. Existen diferentes hipótesis para aportar ecuaciones adicionales que completen el sistema, como son el coeficiente de viscosidad turbulenta de Boussinesq, la longitud de mezcla de Prandtl o la condición de semejanza de von Karman.

Estas y otras hipótesis más avanzadas son la base para la formulación de los modelos de turbulencia, que se utilizan para resolver numéricamente el flujo turbulento.

A.1.1. *Reynolds Averaged Navier-Stokes.*

Los **modelos RANS** resuelven el movimiento medio del flujo y emulan la turbulencia, permitiendo alcanzar una solución para las magnitudes fluidas medias con alto grado de precisión y bajo coste computacional. Los más utilizados son:

- *Spalart-Allmaras*: adecuado para mallados gruesos, con geometrías quasi-bidimensionales y flujos poco complejos, con reducido gradiente de presión.
- *k- ϵ Standard*: no recomendable para flujos complejos, con fuertes gradientes de presión, desprendimiento de capa límite o líneas de corriente fuertemente curvadas.
- *k- ϵ RNG*: conveniente para flujos turbulentos complejos, con torbellinos y vórtices de tamaño moderado y flujos localmente transitorios.
- *k- ϵ Realizable*: adecuado para flujos complejos con recirculaciones, rotaciones, desprendimientos y fuertes gradientes de presión.
- *k- ω Standard*: adecuado para flujos con condiciones de contorno complejas, bajo gradientes de presión adversos y desprendimiento de capa límite, y superior a los modelos anteriores con presencia de paredes.
- *k- ω SST*: adecuado en problemas de flujo interno con elevados gradientes de presión y zonas donde se produce recirculación y desprendimiento de la capa límite.
- *Reynolds Stress*: físicamente más real que el resto de modelos, conveniente para flujos tridimensionales complejos.

A.1.2. *Large Eddy Simulation.*

El **modelo LES** permite calcular los torbellinos de la escala macroscópica pero emula los de la escala microscópica. Requiere un mallado mucho más fino que los modelos RANS, debiendo alcanzar para el tamaño de la celda característica un orden de magnitud inferior al de la escala macroscópica de Kolmogorov. El coste computacional es elevado frente a los modelos RANS.

A.1.3. *Detached Eddy Simulation.*

El **modelo DES** es una combinación de los modelos RANS y LES que reúne lo mejor de ambos: trata las regiones próximas a las paredes como el modelo RANS y el resto del flujo como el modelo LES.

A.1.4. *Direct Numerical Simulation.*

El **modelo DNS** realiza la simulación numérica del espectro completo de escalas turbulentas, es decir, simulación numérica directa. Así, estos modelos también calculan los torbellinos de la escala microscópica, requiriéndose un mallado aún más fino que con los modelos LES. El tamaño de la celda característica debe ser un orden de magnitud inferior al de la escala microscópica de Kolmogorov y por ello, el coste computacional es mucho mayor.

A.2. Selección del modelo de turbulencia.

El criterio de selección de un modelo de turbulencia en la simulación del flujo oscilatorio se basa en la necesidad de reproducir las **estructuras turbulentas** que aparecen en el flujo oscilatorio, y cuya contribución al mezclado del flujo es tan importante como los vórtices y recirculaciones inducidos por la propia geometría del reactor. A priori, la utilización de un modelo RANS puede parecer no recomendable ya que, por definición, conlleva un promediado de las fluctuaciones turbulentas. Por otra parte, no se considera la posibilidad de efectuar una simulación DNS por el elevado coste computacional que ello supone, en comparación con el resto de modelos. La elección entre el modelo LES y el modelo DES se decanta por el primero, de acuerdo con la bibliografía consultada [2, 5, 38, 39, 46].

Sin embargo, el modelo LES no está disponible en el software FLUENT para la simulación de un dominio computacional bidimensional (tampoco el DES). Es por ello que para el estudio del mallado en el modelo 2D del *Capítulo 2* es necesario recurrir a un modelo RANS. Puesto que la presencia del disco es determinante en el comportamiento del flujo, el modelo elegido en este caso es el $k-\omega$, ya que se comporta mejor que el resto de modelos en presencia de paredes. Inicialmente se aplica la variante Standard, encontrándose con ésta problemas de convergencia inesperados en algunas de las mallas. Por ello se recurre a la variante *SST*, con la que estos problemas no aparecen. Así, las **simulaciones 2D** se realizan con el modelo de turbulencia **$k-\omega$ SST**, mientras que en las **simulaciones 3D** se aplica el modelo **LES**.

A.2.1 Modelo $k-\omega$ SST.

En la capa límite turbulenta que se desarrolla en todo flujo turbulento en torno a una pared se distingue una región interior en la que los esfuerzos viscosos no son despreciables. A su vez, dentro de esta región interior existe una subcapa en contacto con la superficie, denominada **subcapa viscosa**, donde la viscosidad es dominante. Esta subcapa es en la práctica extremadamente delgada y corresponde a $y^+ < 5$. El modelado de la zona cercana a las paredes que aplica el modelo de turbulencia resulta decisivo a la hora de obtener resultados numéricos satisfactorios. Se presentan dos posibilidades:

- Aplicación de leyes de pared (*Wall Function*): la región interior no es calculada, se emplean fórmulas semiempíricas para resolver el espacio entre la pared y la zona plenamente turbulenta de la capa límite.
- Resolución de la capa límite (*Enhanced Wall Treatment, EWT*): el modelo de turbulencia es modificado para permitir que la capa límite sea resuelta y no emulada.

En el este estudio numérico se opta por la segunda opción, resolver la **capa límite** con el modelo $k-\omega$ SST, lo que implica resolver el flujo dentro de la subcapa viscosa (en FLUENT, con la opción *Transitional Flows* del menú *Viscous Model*). Aunque la resolución de la capa límite se consigue con $y^+ < 5$, se recomienda obtener un valor próximo a la unidad [53]. Por lo tanto se impone la restricción de conseguir $y^+ \leq 1$ en todas las paredes del dominio computacional.

Para completar el cierre de la turbulencia, el modelo $k-\omega$ SST aplica las siguientes ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta k (*turbulent kinetic energy*) y para la disipación específica ω (*specific dissipation*):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \tilde{G}_k - Y_k + S_k \quad (\text{ec.A.7})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + G_\omega - Y_\omega + S_\omega + D_\omega \quad (\text{ec.A.8})$$

siendo μ la viscosidad dinámica, μ_t la viscosidad dinámica turbulenta, σ_k y σ_ω funciones de mezcla, \tilde{G}_k y G_ω la generación de k y ω debida a los gradientes de velocidad media, Y_k e Y_ω la disipación de k y ω debida a la turbulencia, S_k y S_ω términos definidos por el usuario y D_ω la difusión cruzada.

A.2.2. Modelo LES.

El modelo LES realiza un filtrado sobre las ecuaciones de Navier-Stokes, resolviendo directamente sólo los torbellinos macroscópicos (de mayor tamaño que las celdas del mallado) y filtrando los torbellinos microscópicos, responsables de la disipación de energía cinética turbulenta. De esta manera se disminuyen las inexactitudes asociadas a la turbulencia de pequeña escala. El procedimiento se realiza definiendo una variable de filtrado $\bar{\phi}$:

$$\bar{\phi}(x) = \int_D \phi(x') G(x, x') dx' \quad (\text{ec.A.9})$$

$$G(x, x') = \begin{cases} \frac{1}{V} & , x' \in V \\ 0 & , x' \notin V \end{cases} \quad (\text{ec.A.10})$$

siendo D el dominio computacional, G la función de filtrado que determina la escala de los torbellinos resueltos, y V el volumen de la celda.

Con estas expresiones, las ecuaciones de Navier-Stokes (ec.A.1 y ec.A.2) pueden ser expresadas en términos de variables filtradas. Una vez resuelta la escala macroscópica, los torbellinos microscópicos son emulados por separado. Para ello, FLUENT dispone de tres modelos SGS (*sub-grid scales*):

- *Smagorinsky-Lilly model*
- *WALE (wall-adapting local eddy-viscosity) model*
- *Kinetic Energy Transport model*.

De acuerdo con la bibliografía consultada [5], se adopta el modelo *Smagorinsky-Lilly*, que asume que la producción ϵ y la disipación Π de energía en la escala microscópica están en equilibrio [54]:

$$\epsilon = \Pi \quad (\text{ec.A.11})$$

El modelo *Smagorinsky-Lilly* define la viscosidad dinámica turbulenta μ_t a través de la longitud de mezcla para la escala microscópica L_s (*mixing length for subgrid scales*):

$$\mu_t = \rho L_s^2 |\bar{S}| \quad (\text{ec.A.12})$$

$$L_s = \min(\kappa d, C_s V^{1/3}) \quad (\text{ec.A.13})$$

$$|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{ij}\bar{S}_{ij}} \quad (\text{ec.A.14})$$

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{ec.A.15})$$

siendo κ la constante de *von Karman*, d la distancia más próxima a la pared, C_s la constante de *Smagorinsky*.

A diferencia del modelo *k- ω SST*, con el que se resuelve la capa límite, LES implementa las condiciones de contorno usando una **ley de pared** apropiada. Esto significa que a priori no hay restricciones en cuanto a la distancia del primer nodo a la pared del dominio computacional. Sin embargo, para obtener resultados adecuados, sí se recomienda un mallado fino cerca de las paredes. Por lo tanto se impone de nuevo la condición de $y^+ \leq 1$ en todas las paredes del dominio [56].

A.3. Cumplimiento de la restricción $y^+ \leq 1$.

A continuación se comprueba el cumplimiento de la restricción $y^+ \leq 1$ a lo largo de un ciclo de oscilación en todas las simulaciones llevadas a cabo en el presente estudio numérico.

A.3.1. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D.

La comprobación se realiza con la solución temporalmente periódica, obtenida con el modelo *k- ω SST*, sobre las paredes del dominio computacional de un paso periódico, cuya denominación se muestra en la *Figura A.1*.



Figura A.1. Denominación de las paredes en el dominio computacional del Bloque I.

En primer lugar se comprueba, como cabe esperar, que la evolución de y^+ en las aristas simétricas (conducto entrada, conducto salida; disco radial entrada, disco radial salida) es idéntica, estando desfasada $t/\tau = 0,5$ debido a la inversión de gasto másico según la ley de gobierno sinusoidal (véanse las *Figuras A.2* y *A.3*).

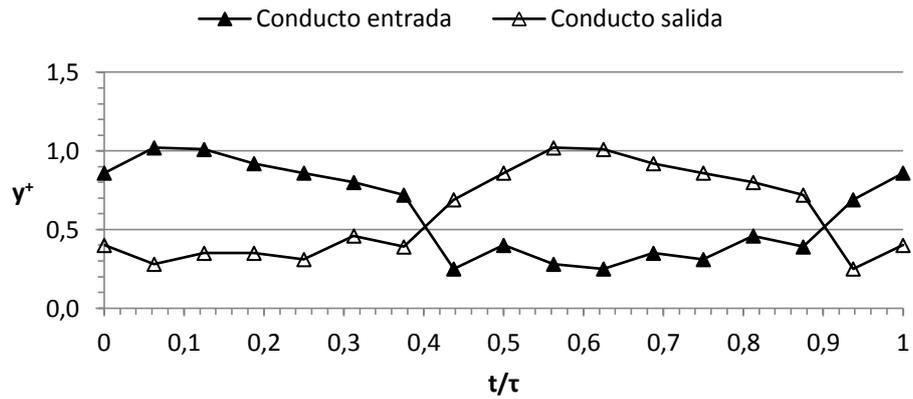


Figura A.2. Evolución de y^+ en las aristas simétricas del conducto.

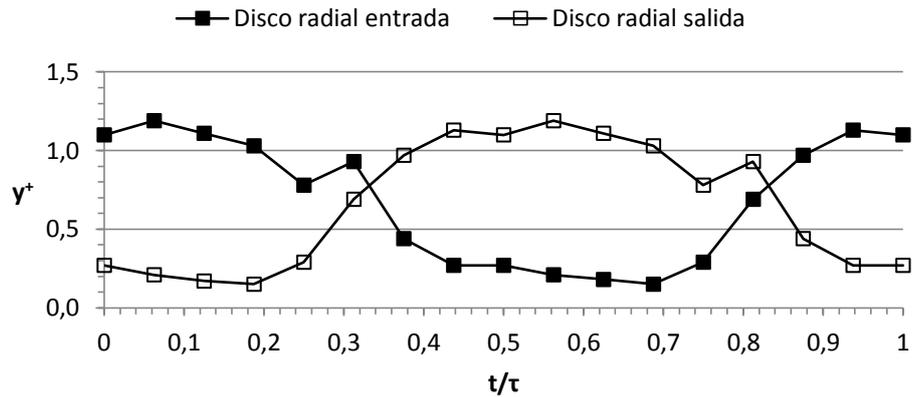


Figura A.3. Evolución de y^+ en las aristas simétricas del disco.

En segundo lugar se establece la influencia de la frecuencia de oscilación f en el comportamiento de y^+ . Un análisis cualitativo de las ecuaciones siguientes permite establecer el siguiente razonamiento:

- La velocidad axial del fluido u aumenta si aumenta la frecuencia de oscilación f (ec.A.16).
- Al mantener la distancia a la pared y constante (puesto que el mallado es el mismo), si aumenta la velocidad axial u el gradiente $\partial u / \partial y$ es mayor, y por tanto también aumenta el esfuerzo cortante en la pared τ_w (ec.A.17).
- Puesto que la distancia a la pared y no cambia, y^+ aumenta cuando crece el esfuerzo cortante τ_w (ec.A.18 y ec.A.19).

$$u_0 = 2\pi f x_0 \quad (\text{ec.A.16})$$

$$\tau_w = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0} \quad (\text{ec.A.17})$$

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (\text{ec.A.18})$$

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu} \quad (\text{ec.A.19})$$

Se comprueba entonces que la condición de operación crítica a la hora de evaluar el comportamiento de y^+ es la de mayor frecuencia de oscilación (véanse las Figuras A.4, A.5 y A.6).

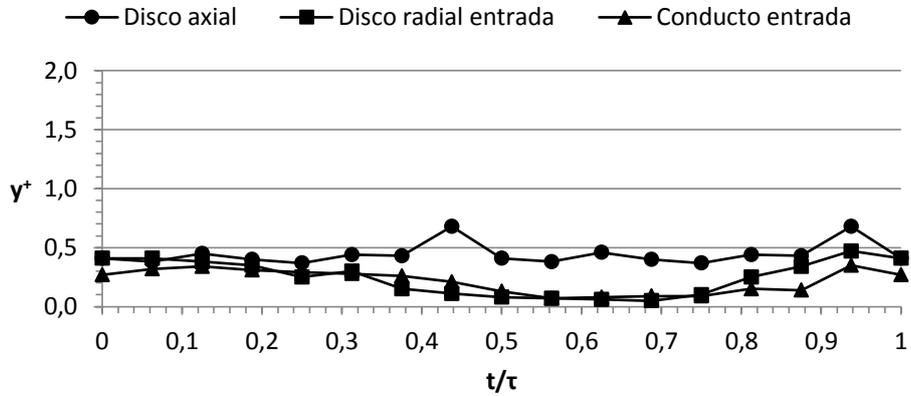


Figura A.4. Evolución de y^+ . Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 0,5 Hz.

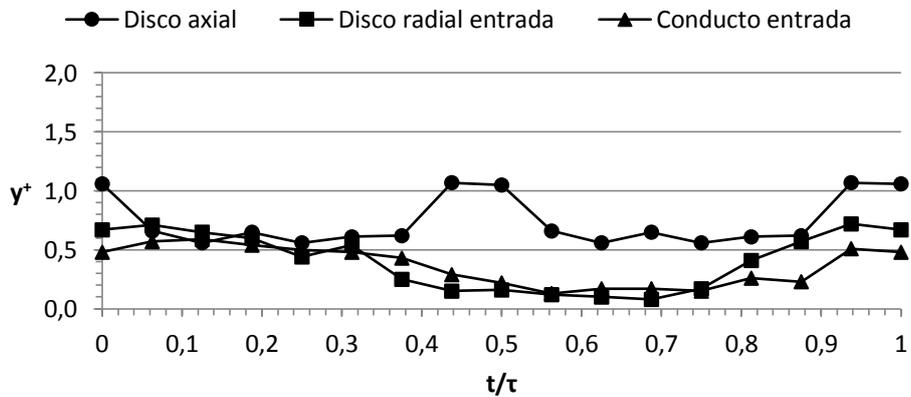


Figura A.5. Evolución de y^+ . Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 1 Hz.

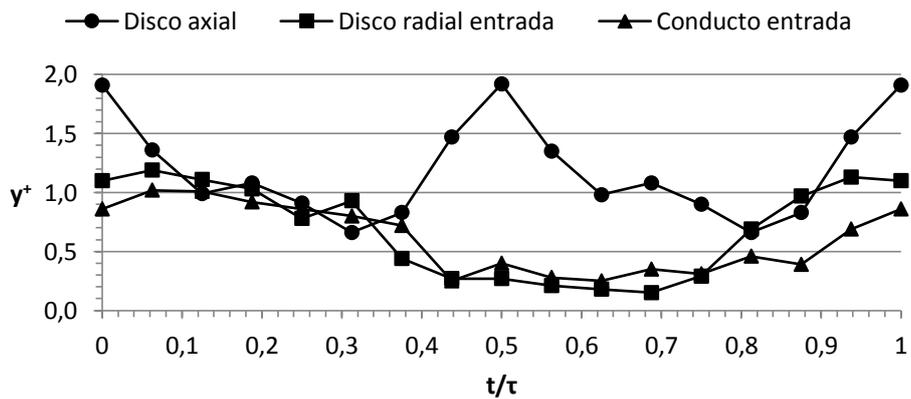


Figura A.6. Evolución de y^+ . Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz.

Por lo tanto la comprobación se puede realizar únicamente para la frecuencia de 2 Hz, dado que esta es la condición más restrictiva. Se observa en la *Figura A.6* que la restricción de $y^+ \leq 1$ se cumple perfectamente a lo largo de todo el ciclo de oscilación tanto para la pared radial del disco como para el conducto. En la pared axial del disco la restricción se incumple sólo en el entorno del gasto másico máximo y mínimo ($t/\tau = [0, 0,5, 1]$), durante un intervalo de tiempo reducido, obteniéndose en cualquier caso valores de y^+ completamente adecuados.

A.3.2. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D.

La comprobación se realiza una solución que no ha alcanzado aún la periodicidad temporal (sexto ciclo de oscilación), obtenida con el modelo LES, sobre las paredes del dominio computacional de un paso periódico, cuya denominación se muestra en la *Figura A.1*. Nótese que en este caso la evaluación de y^+ sobre las paredes se efectúa sobre caras, y no sobre aristas como en el modelo 2D.

Se observa en la *Figura A.7* que la restricción de $y^+ \leq 1$ no se cumple de manera tan estricta como en el modelo 2D (*Figura A.6*) a lo largo de todo el ciclo de oscilación. Las diferencias respecto al 2D se deben a que la determinación de la distribución de los nodos sobre la malla para cumplir $y^+ = 1$ se lleva a cabo con el modelo $k-\omega$ SST y se mantiene para el LES (véase el *Apartado 2.2.9* del *Capítulo 2*). Esta metodología de trabajo es válida puesto que, de nuevo, los valores de y^+ que incumplen la restricción son aceptables.

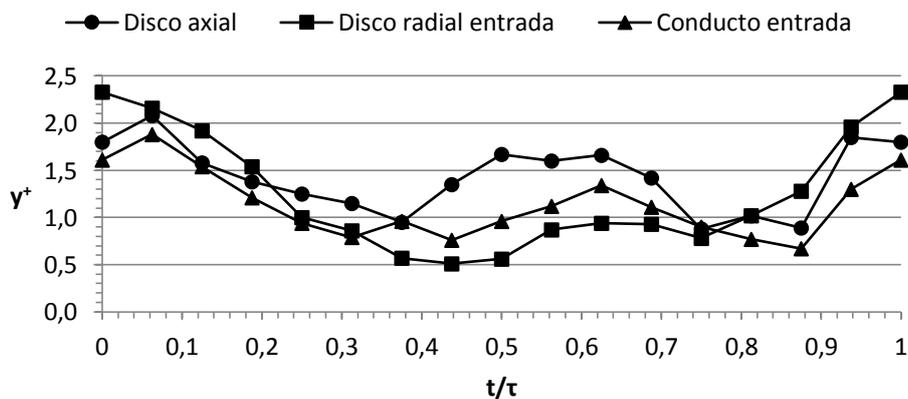


Figura A.7. Evolución de y^+ . Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D. Frecuencia 2 Hz.

A.3.3. Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D.

La comprobación se realiza con la solución temporalmente periódica, obtenida con el modelo $k-\omega$ SST, sobre uno de los pasos espaciales centrales (paso 4) que conforman el dominio computacional de 8 pasos, cuya denominación se muestra en la *Figura A.8*.

Se observa en la *Figura A.9* que la restricción de $y^+ \leq 1$ se cumple estrictamente a lo largo de todo el ciclo de oscilación en todas las paredes. En este caso, a diferencia de la oscilación del fluido en el modelo 2D, no se advierte un comportamiento del y^+ especialmente crítico en instantes de tiempo concretos.

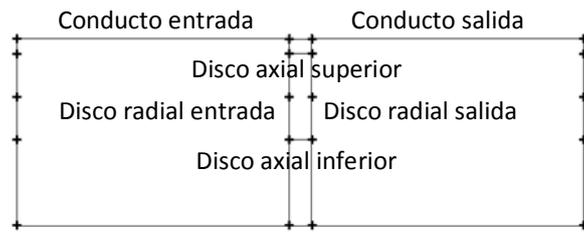


Figura A.8. Denominación de las paredes en el dominio computacional del Bloque II.

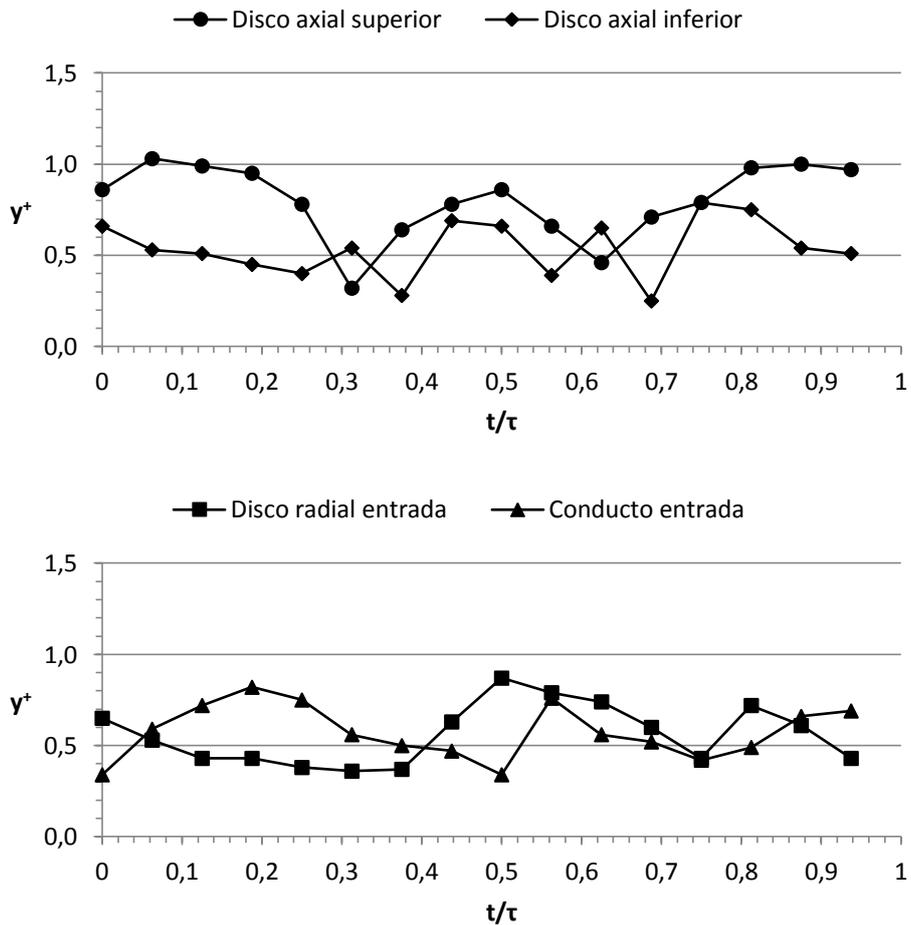
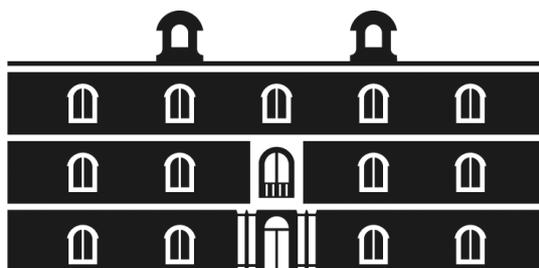


Figura A.9. Evolución de y^+ . Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

ANEXO B. PRESIÓN BAJO CONDICIONES PERIÓDICAS.

	Página
B.1. Campo de velocidades	183
B.2. Campo de presiones	184

El problema fluido que se plantea en este Proyecto Fin de Carrera es la resolución del campo de velocidades en un reactor de flujo oscilatorio. Para ello se aplica a la simulación numérica **condiciones de contorno periódicas** sobre un dominio computacional de un único paso espacial. Este modelo numérico se utiliza previa comprobación de que efectivamente estas condiciones periódicas reproducen el fenómeno de carga y descarga de fluido en un reactor de gran longitud (en el presente estudio se usan 8 pasos espaciales). En el presente anexo se demuestra que la caída de presión por unidad de longitud entre la entrada y la salida del dominio es representativa del fenómeno físico, y no el campo de presiones.

B.1. Campo de velocidades.

En primer lugar se corrobora cualitativamente que el campo de velocidades axiales es espacialmente periódico en el interior del reactor de flujo oscilatorio con una simulación completa, con carga y descarga de fluido (*Figura B.1*). A continuación se valida la simulación periódica comprobando, también cualitativamente, que se reproduce la misma solución que con la simulación completa, lo que supone reducir el dominio computacional de 8 pasos espaciales a 1 paso espacial, y con ello el costo computacional (*Figura B.2*).

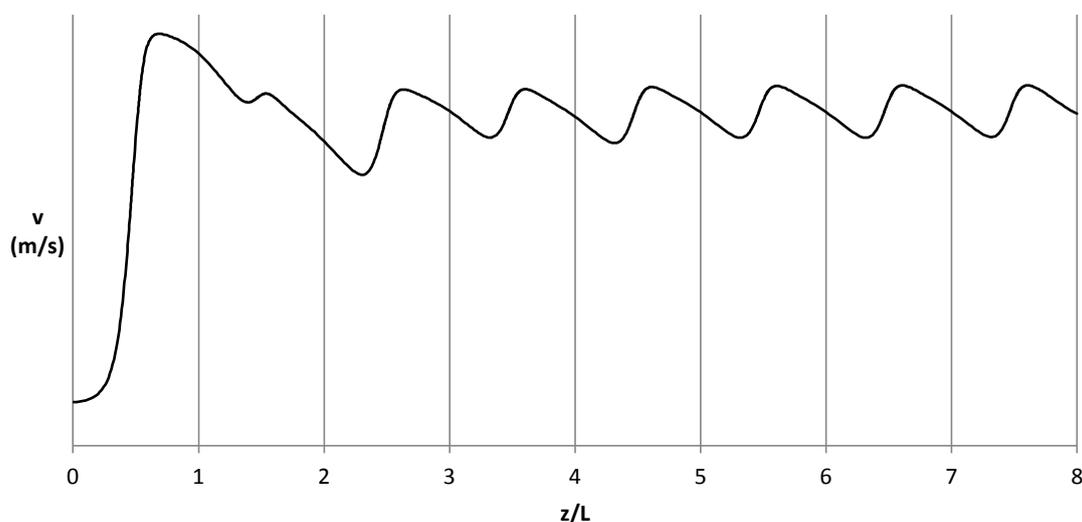


Figura B.1. Periodicidad espacial del campo de velocidades axiales con simulación completa a lo largo del eje de simetría.

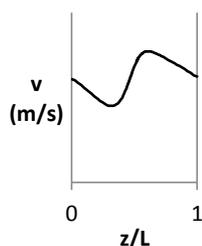


Figura B.2. Periodicidad espacial del campo de velocidades axiales con simulación periódica a lo largo del eje de simetría.

B.2. Campo de presiones.

Se observa cualitativamente en las Figuras B.1 y B.2 que el campo de velocidades axiales de la simulación de 1 paso se corresponde con el campo de velocidades de la simulación de 8 pasos, en los pasos centrales sin influencia de los efectos de entrada y salida. A priori cabría esperar un comportamiento análogo para la presión. Sin embargo, al estudiar la periodicidad espacial del campo de presiones en la simulación completa se observa que dicha periodicidad existe, pero no en términos absolutos como en el caso de la velocidad, sino en términos relativos (Figura B.3). Es decir, la magnitud del campo de velocidad (m/s) se mantiene en cada paso espacial, mientras que la magnitud del campo de presiones (Pa) sufre una **caída de presión** debido a las pérdidas por fricción. Esto se plasma en la simulación periódica con las siguientes ecuaciones para las condiciones de contorno, entre la entrada y la salida de un paso espacial p :

$$v(x) = v(x + p\hat{z}) = v(x + 2p\hat{z}) = \dots \quad (\text{ec.B.1})$$

$$\Delta P = P(x) - P(x + p\hat{z}) = P(x + p\hat{z}) - P(x + 2p\hat{z}) = \dots \quad (\text{ec.B.2})$$

donde v es el campo de velocidades, P es el campo de presiones, ΔP es la caída de presión, x es el vector de posición dentro del dominio computacional y \hat{z} es vector unitario en la dirección axial z .

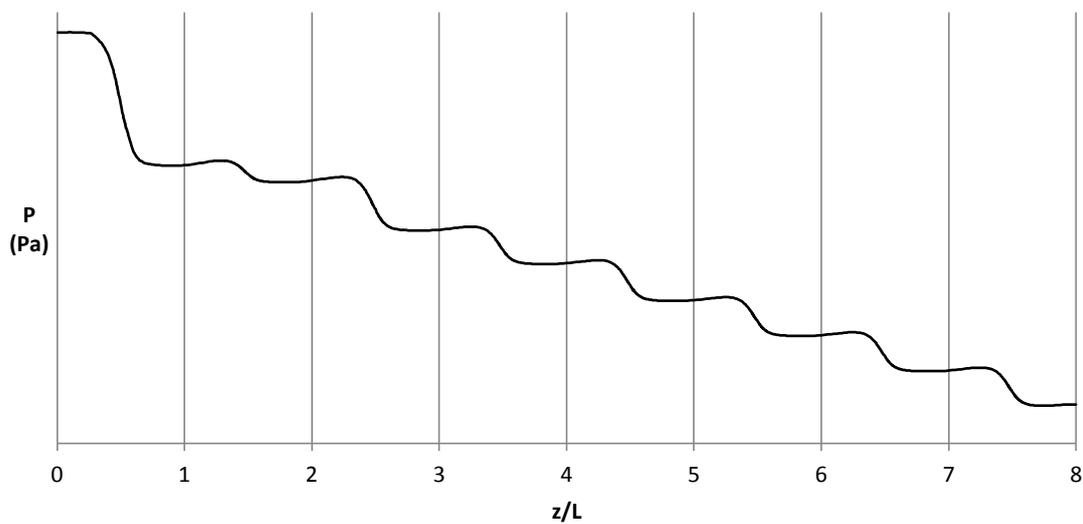


Figura B.3. Periodicidad espacial del campo de presiones con simulación completa a lo largo del eje de simetría.

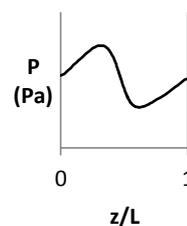


Figura B.4. Periodicidad espacial del campo de presiones con simulación periódica a lo largo del eje de simetría.

Cuando se efectúa la simulación periódica, el resultado encontrado para el campo de presiones en 1 paso no se corresponde con los pasos centrales de la simulación completa de 8 pasos (*Figura B.4*), ya que en la simulación periódica no existe diferencia de presión entre las secciones de entrada y salida del paso espacial. Por lo tanto se concluye que el campo de presiones no es una magnitud fluida que realmente caracterice el problema.

Por el contrario, sí se observa correspondencia de resultados con la simulación completa y la simulación periódica al evaluar la caída de presión por unidad de longitud $\Delta P/L$, entre la presión en la sección de entrada P_e y la presión en la sección de salida P_s de cada paso espacial de longitud L . Los valores para la condición de operación 3 (*Tabla 1.1 del Capítulo 1*) se presentan en la *Figura B.5*.

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{P_e - P_s}{L} \quad (\text{ec.B.3})$$

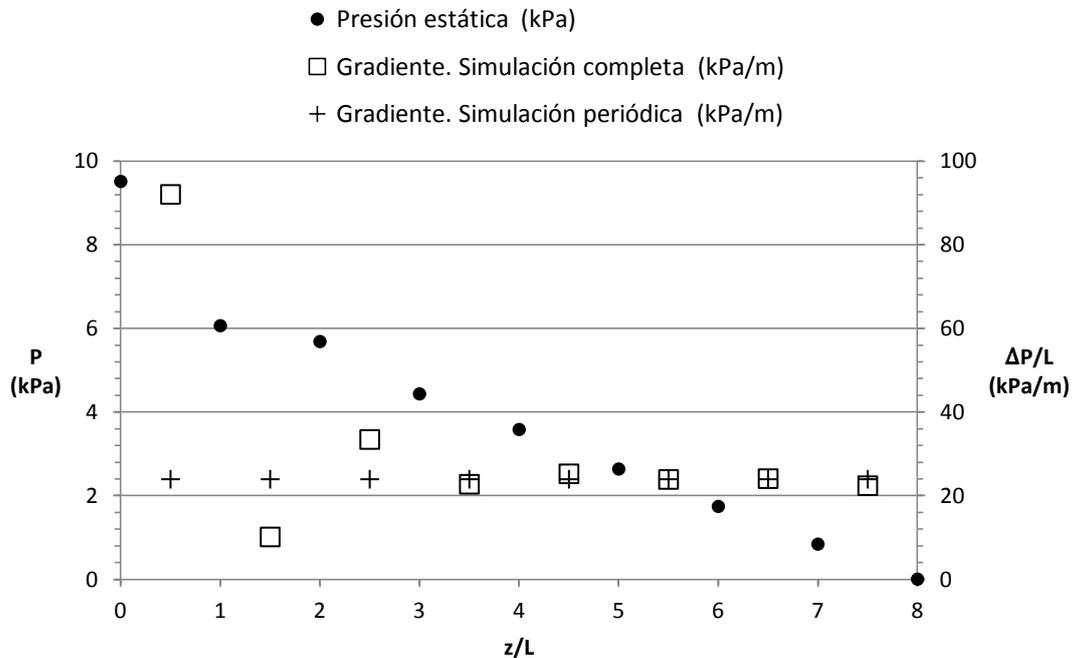
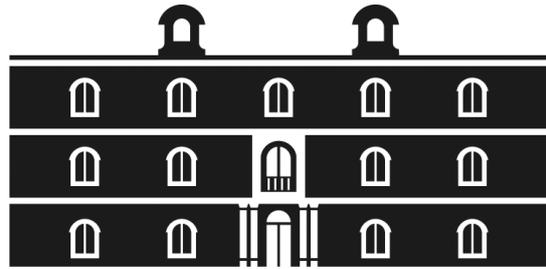


Figura B.5. Presión estática en la sección de entrada y salida. Gradiente de presión por unidad de longitud entre la sección de entrada y salida, con simulación completa y periódica.

En vista de este resultado se concluye que efectivamente es el gradiente de presión por unidad de longitud entre la entrada y la salida del dominio la magnitud fluida de presión que describe el fenómeno periódico, y no el campo de presiones. Esta conclusión se corresponde con la naturaleza incompresible del fluido de trabajo simulado.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

ANEXO C. DISCRETIZACIÓN TEMPORAL CON PASO FIJO Y CON PASO VARIABLE.

	Página
C.1. Discretización con paso de tiempo fijo	187
C.2. Discretización con paso de tiempo variable.....	188
C.3. Discusión	189

La discretización de la ley sinusoidal del gasto másico en función del tiempo se ha realizado aplicando un paso de tiempo fijo. Esta metodología es aplicada por la totalidad de los investigadores cuyos trabajos han sido consultados durante la fase de revisión bibliográfica [2, 5, 38, 39, 46]. Sin embargo, existe la posibilidad de discretizar dicha ley con un paso de tiempo variable, opción que puede ser interesante desde el punto de vista de la convergencia para la simulación numérica del flujo oscilatorio, tal y como se pretende mostrar en este anexo.

C.1. Discretización con paso de tiempo fijo.

Considérese la ley sinusoidal del gasto másico en función del tiempo, que describe el movimiento del fluido dentro del reactor de flujo oscilatorio, y que se presenta en el *Apartado 3.1.1 del Capítulo 3*.

$$\dot{m}(t) = \rho \left(\frac{\pi D^2}{4} \right) 2\pi f x_0 \cos(2\pi f t) \quad (\text{ec.C.1})$$

Sea la condición de operación 3, con $f = 2 \text{ Hz}$, para la que el cumplimiento de la condición CFL requiere la resolución de $n = 192$ casos a lo largo de un ciclo completo, de los cuáles se guardan $n_0 = 64$ (véase la *Tabla 3.1 del Capítulo 3*). La discretización de la ley sinusoidal anterior con paso de tiempo fijo $\Delta t = 0,002604 \text{ s}$ es la siguiente:

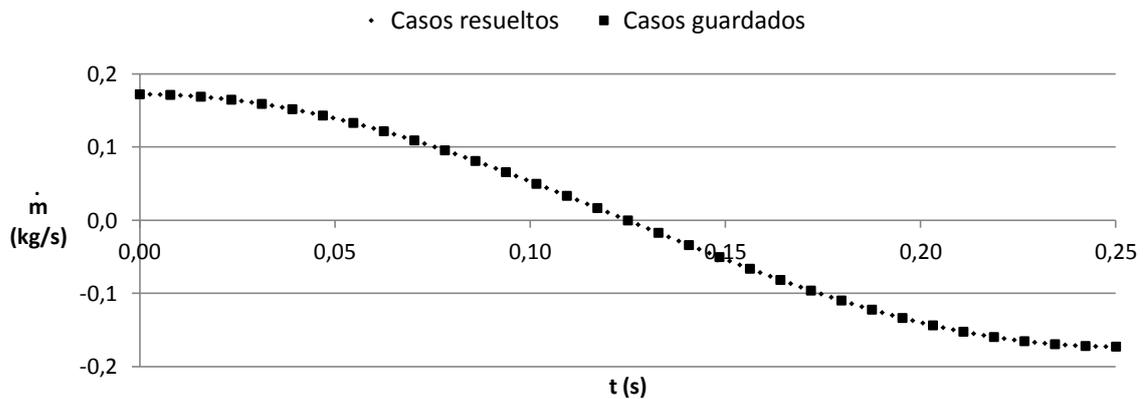


Figura C.1. Discretización de la ley sinusoidal del gasto másico con paso de tiempo fijo.

A la hora de simular numéricamente el ciclo mostrado en la *Figura C.1*, cada caso resuelto se obtiene modificando el gasto másico a partir del caso que le precede, de manera que entre dos casos consecutivos existe una variación de gasto másico $\Delta \dot{m}_i$:

$$\Delta \dot{m}_i = \dot{m}_i - \dot{m}_{i-1} \quad (\text{ec.C.2})$$

Como caso de inicio del ciclo se selecciona el de **gasto másico máximo** por considerarse mayores los efectos inerciales del flujo y por contribuir a una más rápida desaparición del transitorio que existe hasta que se alcanza la periodicidad temporal (véase el *Apartado 3.1.3 del Capítulo 3*).

Puesto que es inviable controlar el proceso de convergencia entre cada caso y el siguiente, este análisis se realiza para el punto partida, y partir de éste se establecen el número de iteraciones y los residuos de convergencia que se aplican a la totalidad de los casos. Esta metodología de trabajo implica asumir la hipótesis de que el **comportamiento de la convergencia** es independiente de la variación de gasto másico entre un caso y el siguiente. Sería necesario realizar un estudio en detalle acerca de esta cuestión para aceptar como válida dicha hipótesis. Con la información de que se dispone, podría validarse la hipótesis de independencia de la convergencia con el gasto másico si, efectivamente, esta variación de gasto se mantuviera acotada en un estrecho margen a lo largo del ciclo. Sin embargo, como se observa en la *Figura C.2*, no ocurre así.

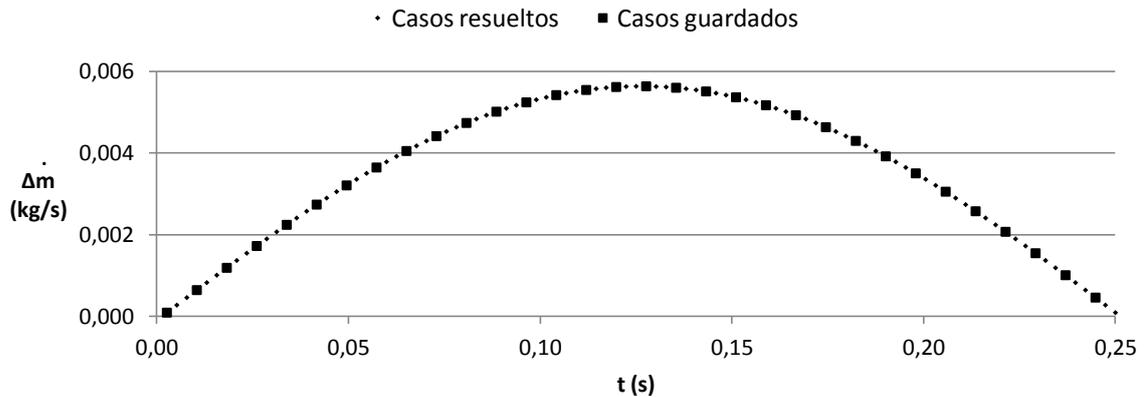


Figura C.2. Variación de gasto másico entre casos consecutivos con paso de tiempo fijo.

Se comprueba, como cabe esperar, que la variación de gasto másico $\Delta\dot{m}_i$ es menor en el entorno de los gastos másicos máximo y mínimo, y mayor en los cambios de signo de la función sinusoidal. Por tanto, el caso inicial de **gasto másico máximo**, con el que se establecen los criterios de convergencia, corresponde a la **variación de gasto mínima**. En vista de este hecho, surge la duda razonable de si las soluciones obtenidas en torno a los cambios de signo del gasto másico son correctas o no.

C.2. Discretización con paso de tiempo variable.

Como solución al interrogante planteado sobre la validez de las soluciones en el entorno de los cambios de signo del gasto másico, se plantea la posibilidad de aplicar un paso de tiempo variable $\Delta t(t)$ para discretizar la ley sinusoidal. Las variantes a la hora de definir $\Delta t(t)$ son infinitas; un ejemplo interesante puede ser el de obtener una **variación fija de gasto másico entre casos consecutivos**, es decir, $\Delta\dot{m} = cte$ (véanse las *Figuras C.3* y *C.4*), cuya definición vendría dada por las siguientes expresiones:

$$\dot{m}_0 = \rho \left(\frac{\pi D^2}{4} \right) \quad (\text{ec.C.3})$$

$$\Delta\dot{m} = \frac{4\dot{m}_0}{n} \quad (\text{ec.C.4})$$

$$\begin{cases} \dot{m}_i = \dot{m}_0 - i \cdot \Delta \dot{m} & \text{si } 1 \leq i < n/2 \\ \dot{m}_i = -\dot{m}_0 + i \cdot \Delta \dot{m} & \text{si } n/2 \leq i < n \end{cases} \quad (\text{ec.C.5})$$

$$t_i = \frac{\arccos(\dot{m}_i/\dot{m}_0)}{2\pi f} \quad (\text{ec.C.6})$$

$$\Delta t_i = t_i - t_{i-1} \quad (\text{ec.C.7})$$

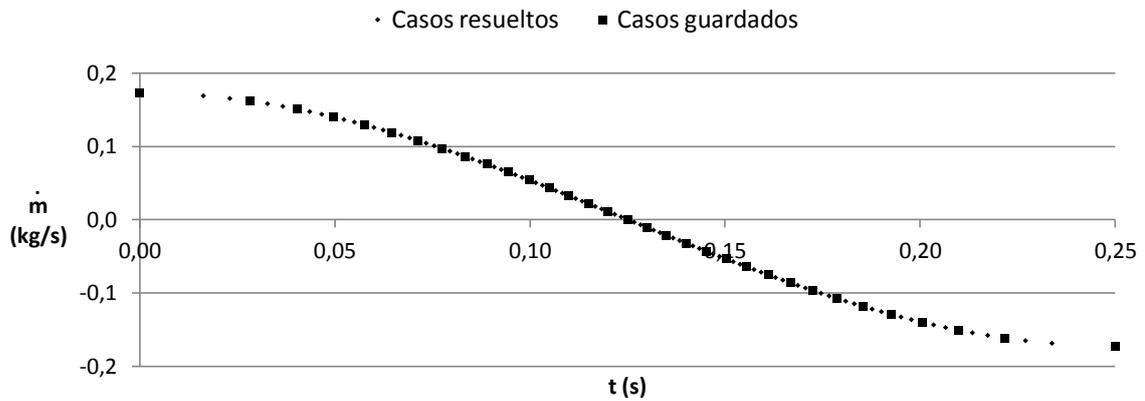


Figura C.3. Discretización de la ley sinusoidal del gasto másico con paso de tiempo variable.

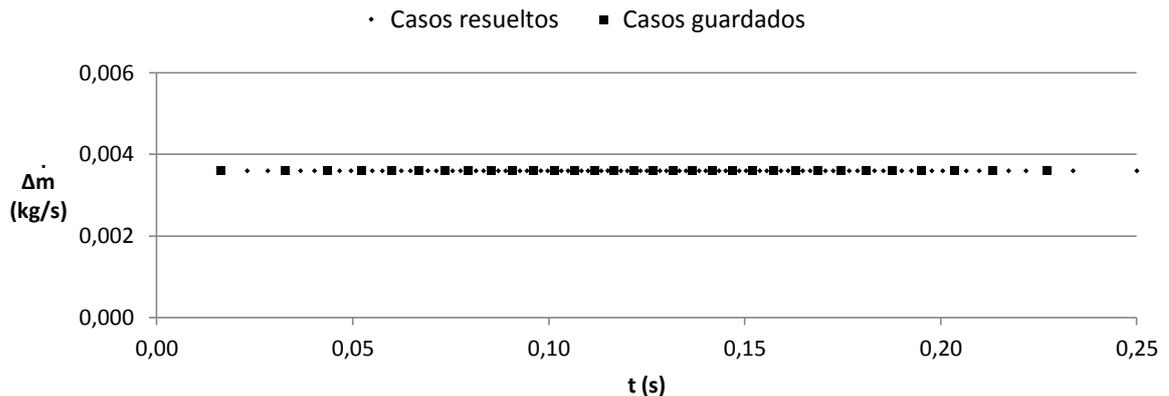


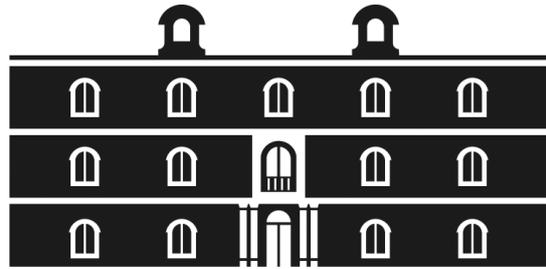
Figura C.4. Variación de gasto másico entre casos consecutivos con paso de tiempo variable.

C.3. Discusión.

A priori, la única y evidente ventaja de aplicar una discretización temporal con paso fijo, frente a paso variable, es la mayor facilidad a la hora de crear un **montaje de vídeo** en el que se muestren, ordenados en el tiempo, los campos de velocidad a lo largo de un ciclo de oscilación. El objetivo de este Anexo no ha sido otro que comparar la discretización temporal del gasto másico con paso fijo y un ejemplo de discretización temporal con paso variable, con el fin de abrir una futura discusión acerca de la obtención del paso de tiempo óptimo desde el punto de vista de la convergencia en la simulación numérica del flujo oscilatorio.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

ANEXO D. GUÍA PRÁCTICA DE MANEJO DE TECPLOT.

	Página
D.1. Creación de vídeos en TECPLOT.....	191
D.2. Contorno de velocidad.....	191
D.3. Vectores de velocidad.....	194
D.4. Desplazamiento de los discos.....	196
D.5. Representación de la ley sinusoidal temporal.....	198
D.6. Animación de los <i>frames</i> mediante <i>macro</i>	200
D.7. Promediado en fase del campo de velocidades.....	202

D.1. Creación de vídeos en TECPLOT.

TECPLOT 360 es un software de visualización que facilita la labor de post-procesado de los datos obtenidos mediante simulación numérica. En el presente trabajo se utiliza la versión 2006 de este programa, con la que se obtienen los contornos de velocidad entre dos discos consecutivos que se muestran para 8 fases de un ciclo de oscilación (véanse los *Apartados 3.4.3, 5.3.3 y 6.4.3*). Sin embargo, la principal utilidad que ofrece TECPLOT es la posibilidad de animar dichos contornos, permitiendo visualizar en un vídeo su evolución temporal a lo largo de un ciclo completo de oscilación. Con la documentación de este Proyecto Fin de Carrera se adjunta un CD con los siguientes vídeos:

- Vídeo 1. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz.
- Vídeo 2. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 1 Hz.
- Vídeo 3. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 0,5 Hz.
- Vídeo 4. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D. Frecuencia 2 Hz.
- Vídeo 5. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D. Frecuencia 1 Hz.
- Vídeo 6. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D. Frecuencia 0,5 Hz.
- Vídeo 7. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 3D PLA. Frecuencia 2 Hz.
- Vídeo 8. Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz.
- Vídeo 9. Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D. Frecuencia 1 Hz.
- Vídeo 10. Bloque II. Oscilación de los discos. Modelo 2D. Frecuencia 0,5 Hz.

En este anexo se detalla, a modo de guía práctica, la creación de vídeos con TECPLOT 360, 2006.

D.2. Contorno de velocidad.

Cada uno de los vídeos es creado a partir de los 64 casos que son guardados en cada ciclo de oscilación del total de casos resueltos. Puesto que cada vídeo muestra 6 ciclos completos, se tiene un total de 384 fotogramas por vídeo. El elevado tamaño de los vídeos (hasta 80 MB para 3D) aconseja crear por separado un vídeo para cada ciclo y unir los 6 vídeos con un programa de edición externo.

Para cada caso se exporta desde FLUENT un fichero de extensión *.plt_tec* con el valor absoluto de la velocidad (*velocity-magnitude*) y sus componentes (en el caso 2D, *axial-velocity* y *radial-velocity*; en el caso 3D, *x-velocity*, *y-velocity* y *z-velocity*). La gran cantidad de datos obliga a realizar el exportado de manera automática mediante un *journal* en FLUENT, y a trabajar con *macros* en TECPLOT para repetir las operaciones que se describen en este anexo.

En primer lugar se dibuja un frame, marcando la opción *snap to paper*, sobre el que se carga el fichero *.plt_tec* que corresponde al primer caso del ciclo. En el modelo 3D, el exportado contiene datos de un único paso espacial. Puesto que se desea mostrar dos pasos espaciales, es preciso **duplicar el paso** (*Data > Create zone > Duplicate*). Al proceder así, los dos pasos creados aparecen superpuestos, siendo necesario **trasladar un paso** en dirección axial (*Data > Alter > Specify equations > {Z}={Z}+0.0375*), como se muestra en la *Figura D.1*. Para el modelo 3D, los contornos son visibles directamente; no ocurre así en el modelo 2D: en 2D se ha de triangular los dos pasos creados para poder visualizar los contornos de velocidad (*Data > Triangulate*). Este procedimiento introduce un grave **fallo de visualización** en las esquinas inferiores del paso, como se observa en la *Figura D.2*.

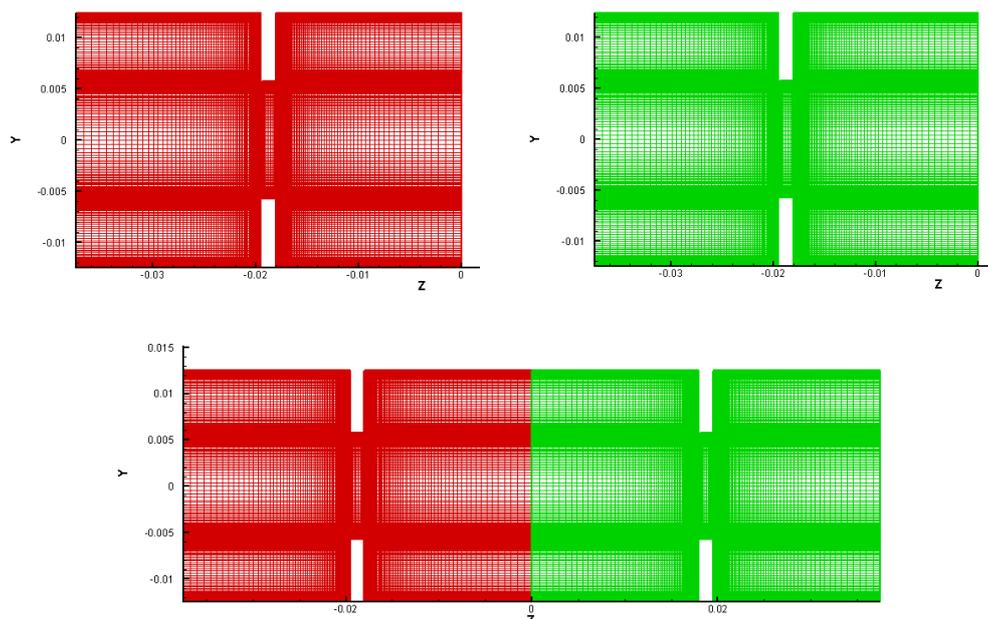


Figura D.1. Duplicación del paso y traslación.

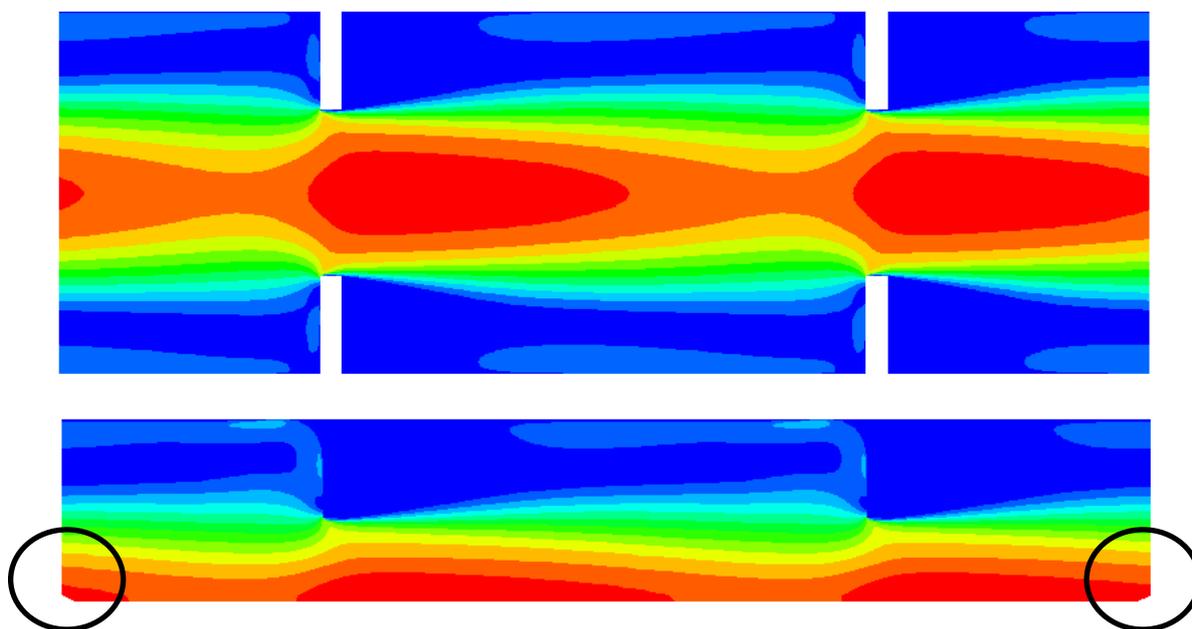


Figura D.2. Contorno de velocidad. Arriba, visualización directa en 3D. Abajo, visualización después de triangular en 2D.

Para subsanar este fallo de visualización se duplica el paso original dos veces, no una, y se trasladan los duplicados a izquierda y a derecha, quedando el paso original en el centro. Se triangulan los tres pasos, y sobre el paso central se crea una zona rectangular (*Data > Create zone > Rectangular*). Al **interpolar linealmente** la zona triangulada sobre el rectángulo central, con un elevado número de divisiones para no perder resolución (*Data > Interpolate linear*), se tiene un paso 2D en el que el contorno de velocidad es ya correctamente visible (*Figura D.3*). La zona triangulada puede ser borrada (*Data > Delete zone*).

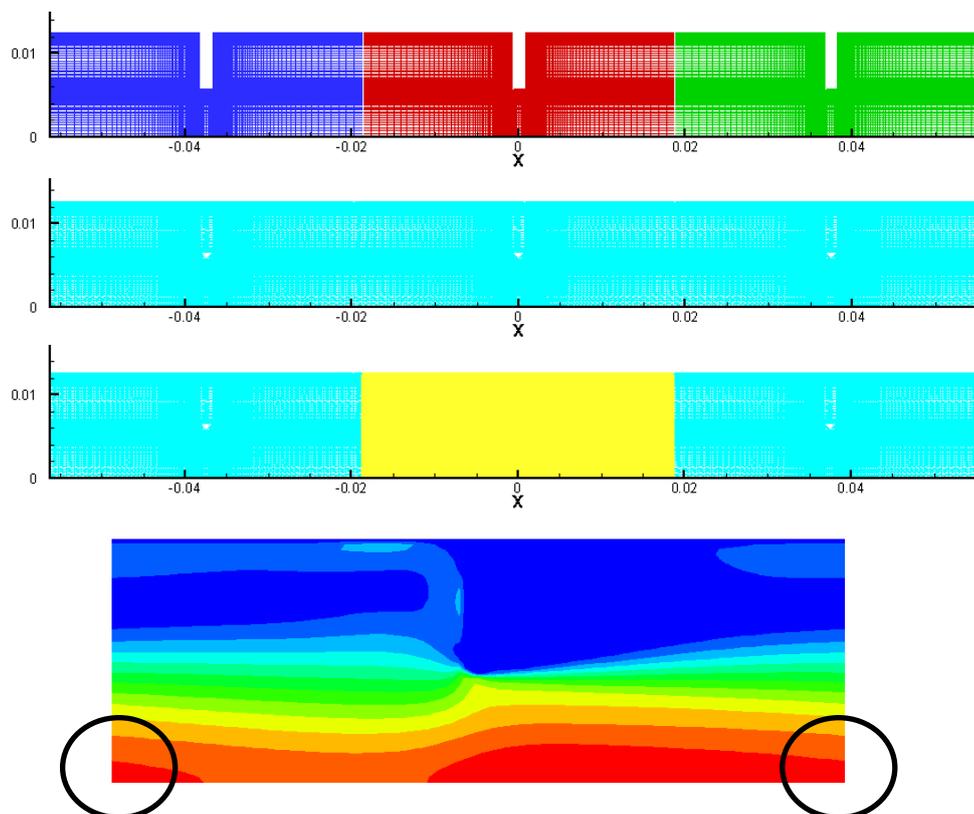


Figura D.3. Interpolación lineal en 2D.

A partir del paso 2D sin fallo de visualización se ejecuta la duplicación y la traslación referidas antes para el modelo 3D. Nótese que en el modelo 2D se trabaja con un semi-paso por a la simetría axial del problema; para completar la geometría existe en TECPLOT la función **espejo** (*Data > Create zone > Mirror*). Aunque parezca por la *Figura D.4* que la axilsimetría se ha completado correctamente, este resultado es engañoso. Al trazar líneas de corriente se observa que el trazo es diferente en las mitades superior e inferior (*Figura D.5*).

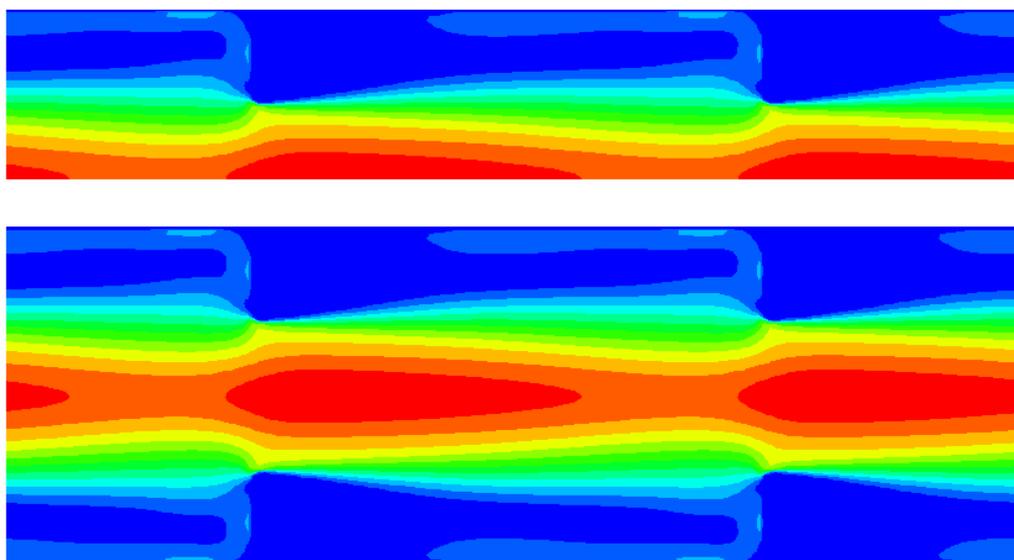


Figura D.4. Función espejo en 2D.

El problema es que la función espejo no cambia el **signo de la componente radial** de la velocidad cuando completa la geometría, por lo que esta modificación ha de imponerse manualmente (*Data > Alter > Specify equations > {radial-velocity}=-{radial-velocity}*).

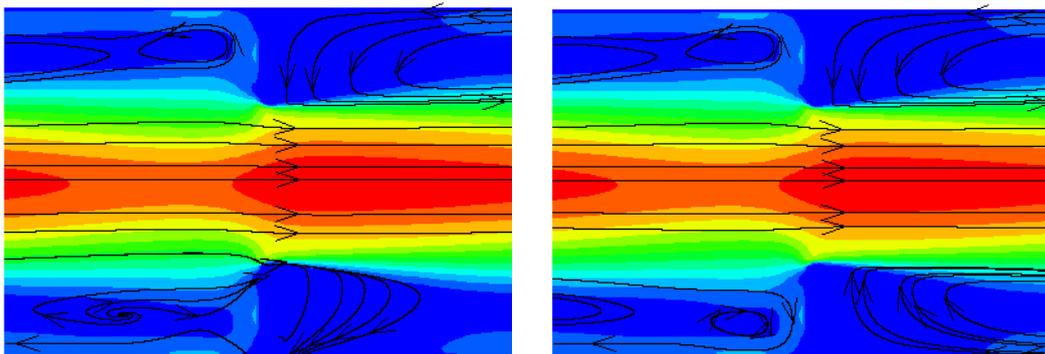


Figura D.5. Función espejo en 2D y cambio de signo de la componente radial. Izquierda, antes del cambio. Derecha, después del cambio.

Tanto para el modelo 2D como para el 3D, con el fin de que la escala de colores del contorno de velocidad se mantenga a lo largo de todo el ciclo de oscilación se crea una **velocidad adimensionalizada** con la máxima velocidad local alcanzada, y cuyo valor se busca en los 64 casos guardados (*Data > Alter > Specify equations > v/v_max}={velocity-magnitude}/valor*). Una vez aplicado el formato, se dibujan manualmente los discos insertados mediante rectángulos (*Figura D.6*)

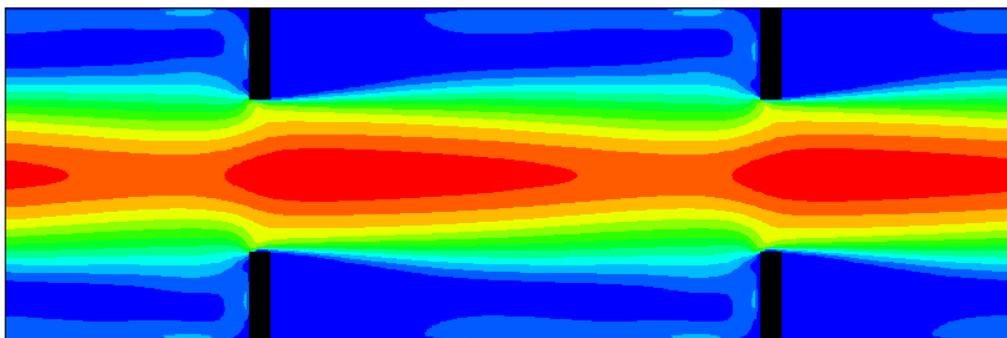


Figura D.6. Contorno de velocidad y discos insertados.

D.3. Vectores de velocidad.

En los vídeos, además de la evolución temporal del contorno de velocidad, se muestra también la evolución de los vectores de velocidad, superpuestos sobre el contorno. Aunque es posible superponerlos sobre el mismo *frame* que se describe en el apartado anterior para el contorno de velocidad, el resultado no es adecuado:

- Modelo 3D: los vectores se crean a partir de la malla usada en FLUENT, cuyo número de nodos es demasiado elevado para este fin (*Figura D.7*).
- Modelo 2D: los vectores se crean a partir del rectángulo interpolado que evita el fallo de visualización del contorno, con elevado número de nodos para no perder resolución (*Figura D.8*).

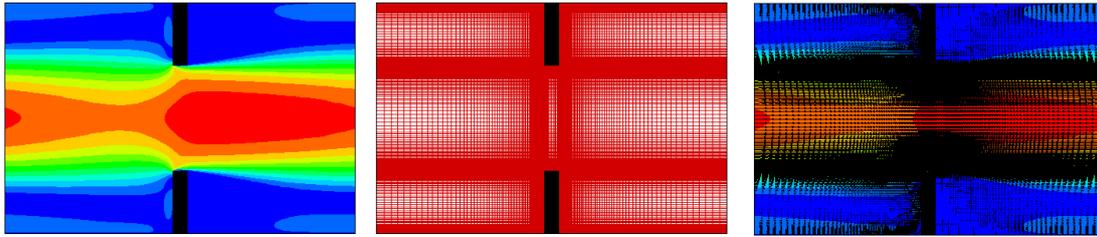


Figura D.7. Contorno de velocidad, malla y vectores superpuestos en el mismo *frame*. Modelo 3D.

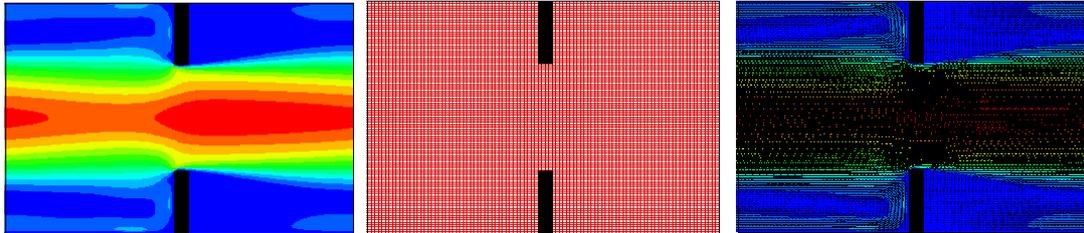


Figura D.8. Contorno de velocidad, rectángulo interpolado y vectores superpuestos en el mismo *frame*. Modelo 2D.

La solución pasa por crear los vectores de velocidad en un **frame superpuesto** al *frame* del contorno de velocidad inicial (con el mismo tamaño, y se ajusta perfectamente gracias a la opción *snap to paper*), en lugar de superponer los vectores en el mismo *frame*. Para hacer efectiva la superposición se hace doble click sobre el segundo *frame* y se desactiva la opción *Show Background* (véase la Figura D.9).

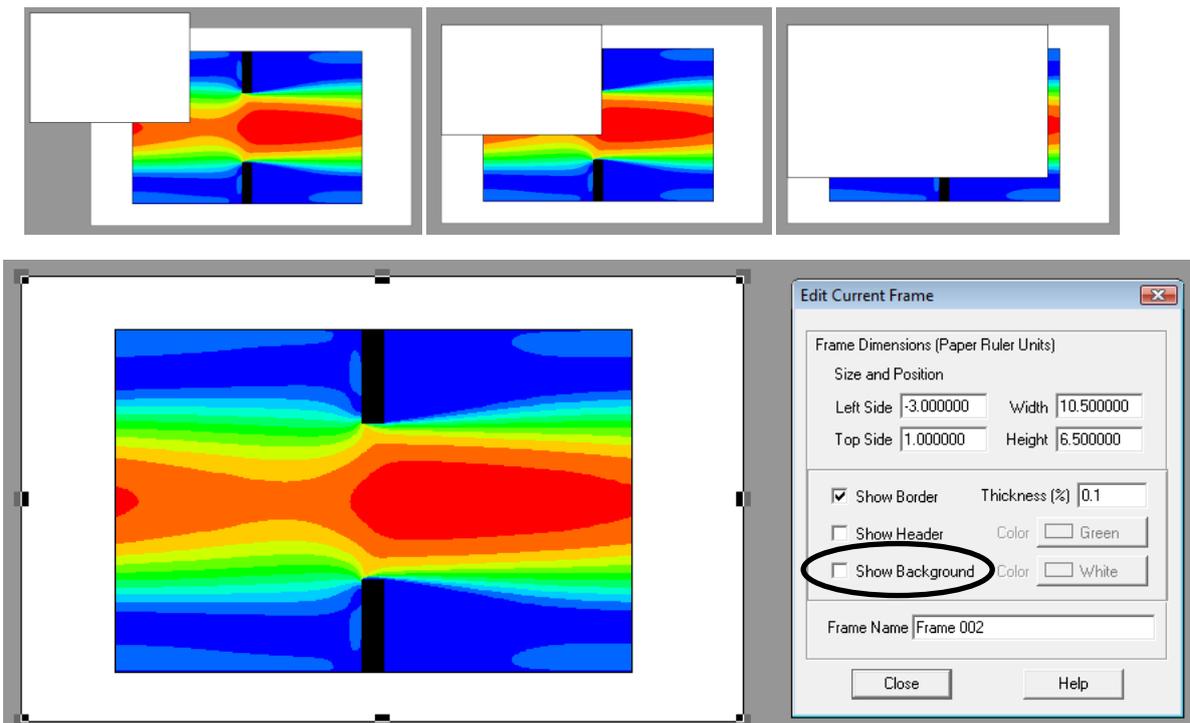


Figura D.9. Superposición de *frames*.

A continuación se repite el proceso de subsanación del fallo de visualización que se ha descrito en el apartado anterior: se duplica el paso dos veces, se trasladan los duplicados, se triangulan los tres pasos, sobre el paso central se crea una zona rectangular y se interpola linealmente. La única diferencia estriba en el **número de divisiones** sobre la **zona rectangular**, teniendo en cuenta que en cada nodo ahora se genera un vector (*Figura D.10*).

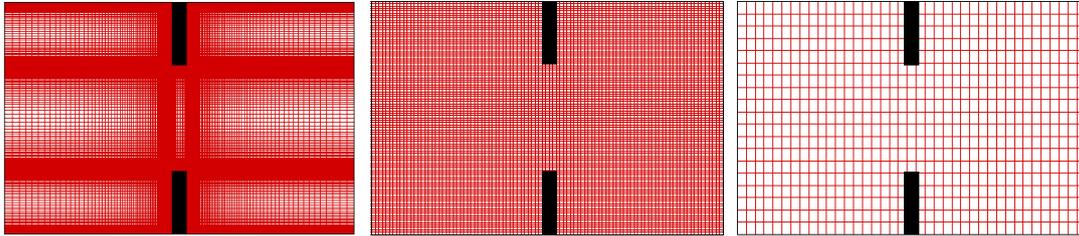


Figura D.10. Izquierda, malla en 3D para el contorno. Centro, zona rectangular en 2D para el contorno. Derecha, zona rectangular en 3D y 2D para los vectores.

Nótese que para que la geometría coincida exactamente, a la hora de dar formato, hay que aplicar los mismos parámetros de encuadre en ambos *frames* (*Plot > Axis > Area > Viewport position*).

D.4. Desplazamiento de los discos.

En los vídeos del Bloque II, en los que los discos se desplazan axialmente, la metodología de creación de los vídeos es diferente a la de los vídeos del Bloque I, en los que los discos permanecen inmóviles.

En primer lugar, para crear el **movimiento** es necesario cargar 4 pasos espaciales, y no 2, para que cuando se desplace el conjunto, la imagen (que sí tiene el tamaño de 2 pasos espaciales) sea completa. Véase la *Figura D.11* para ilustrar el efecto. Se subsana de nuevo el fallo de visualización del modelo 2D: se duplica el paso original cuatro veces, se trasladan los duplicados, se triangulan los cuatro pasos, sobre los dos pasos centrales se crea una zona rectangular y se interpola linealmente. Para completar la geometría se duplica y traslada la zona rectangular, y se aplica la función espejo (véase la *Figura D.12*).

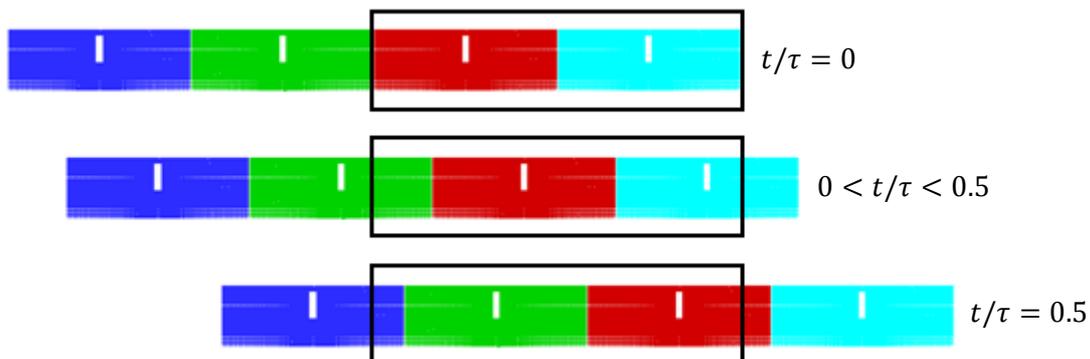


Figura D.11. Creación del movimiento en los vídeos del Bloque II con 4 pasos espaciales.

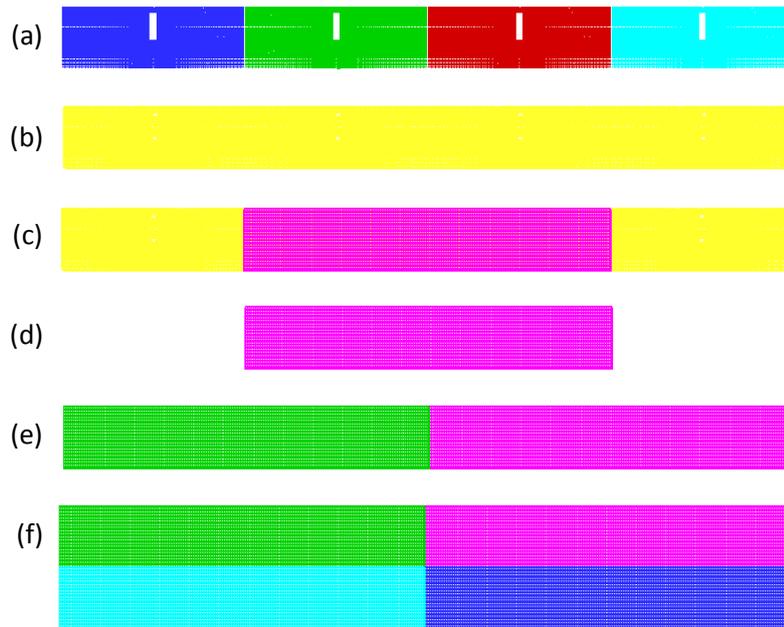


Figura D.12. Duplicación del paso y traslación (a). Triangulación (b). Creación de zona rectangular (c). Interpolación lineal (d). Duplicación y traslación (e). Función espejo (f).

Como se describe en los apartados anteriores, la visualización de los **discos insertados** es posible porque éstos se introducen manualmente mediante rectángulos. Para los vídeos del Bloque II no es asumible introducir así los 8 discos (2 por paso), ya que su posición varía a lo largo del tiempo según la ecuación siguiente:

$$x_b(t) = L_0 - L_0 \cos(2\pi ft) \quad (\text{ec.D.1})$$

La forma de proceder es crear una *macro*, independiente para cada uno de los 8 discos, que dibuje un rectángulo en las coordenadas adecuadas según el fotograma, tal y como se ilustra en la *Figura D.13*. A continuación cada conjunto de 64 fotogramas se carga en un *frame* diferente, superpuesto sobre los dos *frames* anteriores, tal y como se describe para los vectores de velocidad. De manera que se tiene un total de 10 *frames* superpuestos: 1 para el contorno, 1 para los vectores, 8 para los discos.

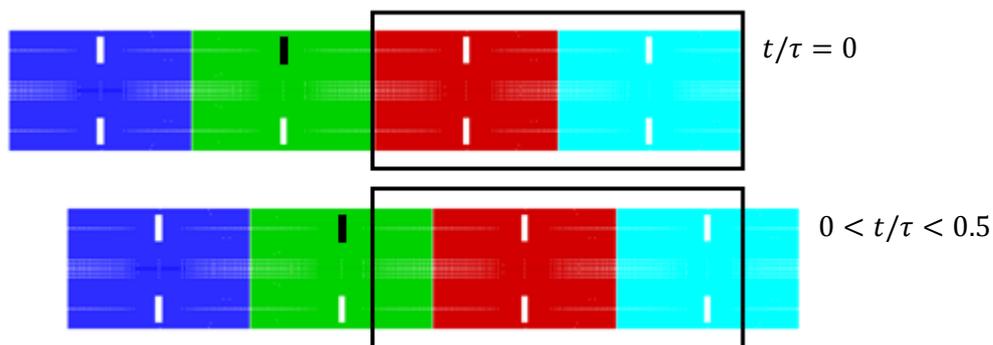


Figura D.13. Creación de uno de los 8 discos en un *frame* propio.

D.5. Representación de la ley sinusoidal temporal.

Además de la visualización de la evolución temporal del contorno y de los vectores de velocidad, los vídeos incluyen una representación de la ley sinusoidal de gobierno para identificar el instante de tiempo a lo largo de los sucesivos ciclos de oscilación. Estas leyes de gobierno son, respectivamente para los Bloques I y II:

$$u(t) = 2\pi f x_0 \cos(2\pi f t) \quad (\text{ec.D.2})$$

$$u_b(t) = 2\pi f L_0 \text{sen}(2\pi f t) \quad (\text{ec.D.3})$$

La representación consiste en un punto móvil que va siguiendo las leyes anteriores a lo largo de 64 fotogramas, al igual que el contorno y los vectores de velocidad. La creación de estos fotogramas se realiza desde MATLAB con el siguiente código:

```
clear all
close all

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% datos geometricos
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

D=0.025; % m
x=28e-3; %m
rho=998.2; % kg/m3
mu=0.001003; % kg/m·s

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% datos de la simulacion
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

f=2; % frecuencia, Hz
cas=64; % numero de frames por ciclo
k=6; % numero de ciclos

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% dimensiones del punto movil en t
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

T_x=22.7; % tamaño del eje x medido sobre la pantalla de Tecplot, mm
T_y=2.8; % tamaño del eje y medido sobre la pantalla de Tecplot, mm
L=0.45; % lado del cuadrado medido sobre la pantalla de Tecplot, mm

tmax_x=3.04; % valor maximo en el eje x, s
tmin_x=-0.04; % valor minimo en el eje x, s (con signo menos)

tmax_y=0.4; % valor maximo en el eje y, kg/s
tmin_y=-0.4; % valor minimo en el eje y, kg/s (con signo menos)
```

Figura D.14. Creación del punto móvil para la ley sinusoidal temporal (1).

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% calculos
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
l_x=L*(tmax_x-tmin_x)/T_x; % lado del cuadrado en el eje x, s
l_y=L*(tmax_y-tmin_y)/T_y; % lado del cuadrado en el eje y, kg/s
t_1=0; % frame inicial, s
dt=1/f/cas; % incremento entre frames, s
t_2=k/f-dt; % frame final, s
t=t_1:dt:t_2; % frames, s
v=2*pi*f*x*sin(2*pi*f*t); % m/s
A=pi*D^2/4; % m2
m=rho*v*A; % kg/s
for i=1:cas*k
    for j=1:cas*k
        nombre=sprintf('frame_coseno_%d.dat',i);
        fid=fopen(nombre,'a');
        fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)]);
        fprintf(fid,'\n');
        if i==j % se dibuja un cuadrado
            % cuadrado inferior izquierdo
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)-l_y/2]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j)-l_x/2 v(j)-l_y/2]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j)-l_x/2 v(j)]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)]);
            fprintf(fid,'\n');
            % cuadrado inferior derecho
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)-l_y/2]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j)+l_x/2 v(j)-l_y/2]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j)+l_x/2 v(j)]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)]);
            fprintf(fid,'\n');
            % cuadrado superior derecho
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)+l_y/2]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j)+l_x/2 v(j)+l_y/2]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j)+l_x/2 v(j)]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)]);
            fprintf(fid,'\n');
            % cuadrado superior izquierdo
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)+l_y/2]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j)-l_x/2 v(j)+l_y/2]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j)-l_x/2 v(j)]);
            fprintf(fid,'\n');
            fprintf(fid,'%1.9f %1.9f',[t(j) v(j)]);
            fprintf(fid,'\n');
        end
    end
end
fclose(fid);
end

```

Figura D.15. Creación del punto móvil para la ley sinusoidal temporal (2).

El resultado de ejecutar el código anterior, cargar los *frames* en TECPLOT, y darles el formato conveniente (en el caso del Vídeo 1. Bloque I. Oscilación del fluido. Modelo 2D. Frecuencia 2 Hz), es el siguiente:

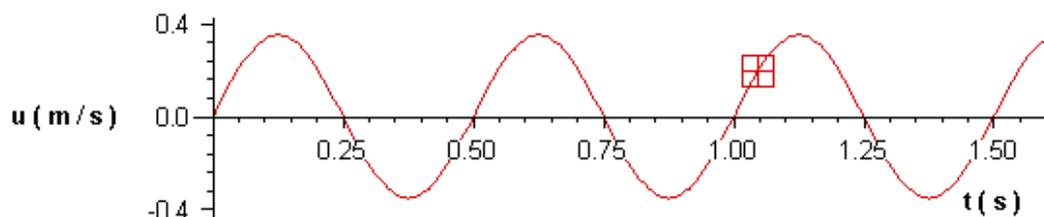


Figura D.16. Ejemplo de creación del punto móvil para la ley sinusoidal temporal.

D.6. Animación de los *frames* mediante *macro*.

La versión 2006 de TECLOT 360 que se ha manejado no tiene disponible opciones de *Time Strands* por lo que la animación simultánea de todos los *frames* creados no se puede efectuar de manera directa. Por ello se ha aplicado una macro específica disponible en la página web oficial del software [61], cuyo código se recoge en la *Figura D.17*. La utilización directa de esta macro no funciona como cabría esperar (debido quizá a la configuración de la versión 2006 de TECPLOT). En cualquier caso se ha desarrollado una metodología de aplicación que sí funciona, aunque pueda parecer confusa, y que se detalla a continuación.

1. Se ordenan los *frames* de manera que la composición sea la deseada (*Frame > Order frames*).
2. Se crea el vídeo del *frame* de la ley sinusoidal temporal (*Animate > Zones > to AVI File*).
3. Se ejecuta la macro que anima todos los *frames* (*File > Macro > Play > anim_n_frames*). Se introduce 1 para crear un video con extensión .avi.
4. Se carga el vídeo creado anteriormente pero se pulsa **Cancelar** en lugar de Abrir. Aparecen una serie de mensajes de error:
 - i. *Invalid file name string argument...* > Aceptar
 - ii. *The file no exists ...* > Aceptar
 - iii. *Macro viewer* > Cerrar
5. Se ejecuta la macro que anima todos los *frames* de nuevo (*File > Macro > Play > animate_n_frames*). Se introduce 1 para crear un video con extensión .avi.
6. Se carga el vídeo creado anteriormente de nuevo, pero pulsando **Abrir** esta vez. Pese a que el programa parece ejecutar la macro, el vídeo cargado no es modificado.
7. Se ejecuta la macro que anima todos los *frames* por tercera vez (*File > Macro > Play > animate_n_frames*). Se introduce 1 para crear un video .avi.
8. Se carga el vídeo creado anteriormente de nuevo, pero pulsando **Cancelar** esta vez. Aparecen los mismos mensajes de error que antes, pero se pregunta al usuario si desea sobrescribir el vídeo:
 - i. *Invalid file name string argument...* > Aceptar
 - ii. *The file no exists ...* > Aceptar
 - iii. *Overwrite ...* > **Aceptar**
 - iv. *Macro viewer* > Close

Como resultado, el video de la ley sinusoidal se completa con la animación del contorno y los vectores de velocidad.

```

$!VarSet |MFBD| = 'C:\Program Files\Tecplot\Tec360\Bin'
$!VarSet |lpa| = 1
$!VarSet |NZm1| = |NUMZONES|
$!VarSet |NZm1| -= 1
$!Varset |MOVIE| = "avi"
$!Varset |ANIMSETUP| = "AVI"
$!PROMPTFORTEXTSTRING |ANIMTYPE|
  INSTRUCTIONS = "Please enter the animation file type: 1 for AVI, 2
for Raster Metafile"
$!IF |ANIMTYPE| == 2
  $!VARSET |MOVIE| = "rm"
  $!VARSET |ANIMSETUP| = "RASTERMETAFILE"
$!ENDIF
#Get the name of the output movie
$!PROMPTFORFILENAME |fname|
  DIALOGTITLE="Specify output movie file."
  DEFAULTFNAME = "*.|MOVIE|"
$!LOOP |NUMFRAMES|
  $!if |framemode| >= 2
    $!ACTIVEFIELDZONES = [ |lpa| ]
  $!Endif
  $!if |framemode| == 1
    $!XYMAP
    ASSIGN { ZONE = |lpa| }
  $!Endif
  $!FRAMECONTROL PUSHTOP
$!ENDLOOP
$!REDRAWALL
$!Delay 1
$!EXPORTSETUP EXPORTFORMAT = |ANIMSETUP|
$!EXPORTSETUP BITDUMPREGION = ALLFRAMES
$!EXPORTSETUP EXPORTFNAME = '|fname|'
$!EXPORT
  APPEND = NO
$!Loop |NZm1|
  $!VARSET |lpa| += 1
  $!LOOP |NUMFRAMES|
    $!if |framemode| >= 2
      $!ACTIVEFIELDZONES = [ |lpa| ]
    $!Endif
    $!if |framemode| == 1
      $!XYMAP
      ASSIGN { ZONE = |lpa| }
    $!Endif
    $!FRAMECONTROL PUSHTOP
  $!ENDLOOP
  $!REDRAWALL
  $!Delay 1
  $!EXPORT
  APPEND = YES
$!ENDLOOP
$!RemoveVar |MFBD|
$!RemoveVar |lpa|
$!RemoveVar |NZm1|
$!RemoveVar |fname|

```

Figura D.17. Macro anim_n_frames.mcr.

D.7. Promediado en fase del campo de velocidades.

En este apartado se describen los pasos a seguir para efectuar en TECPLOT el promediado en fase (*phase-locked average, PLA*), que se realiza para el modelo 3D con oscilación del fluido en el Bloque I, y que se muestra en el *Vídeo 7*.

Sea $\vec{v}_n(\vec{x}, i)$ el campo de velocidades que se obtiene en un punto \vec{x} del dominio computacional Ω para el caso guardado n en el ciclo de oscilación i , sobre un total de n_0 casos y k ciclos resueltos. La solución promediada en fase del campo de velocidades $\vec{V}_n(\vec{x})$ en dicho punto viene dada por:

$$\vec{V}_n(\vec{x}) = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \vec{v}_n(\vec{x}, i) \quad ; \quad n = 1, 2, \dots, n_0 \quad ; \quad \forall \vec{x} \in \Omega \quad (\text{ec.D.4})$$

Para crear el *Vídeo 7* es necesario, antes de aplicar los apartados que se describen en este anexo, generar un nuevo fichero desde TECPLOT, con extensión .plt_tec, que contenga la magnitud y componentes de la velocidad promediadas. Este fichero se crea a partir de los k ficheros .plt_tec que corresponden al caso (fase) n , y que originalmente se exportan desde FLUENT para cada uno de los $n_0 = 64$ casos guardados (fases) por ciclo. Téngase en cuenta que hay que generar un fichero, con valores promediados, para cada una de las $n_0 = 64$ fases, por lo que el procedimiento ha de automatizarse mediante el uso de *macros*.

Supóngase que se tienen cargados en TECPLOT los k ciclos que se desea promediar para la fase n (véase la *Figura D.18* con el ejemplo $k = 3$).

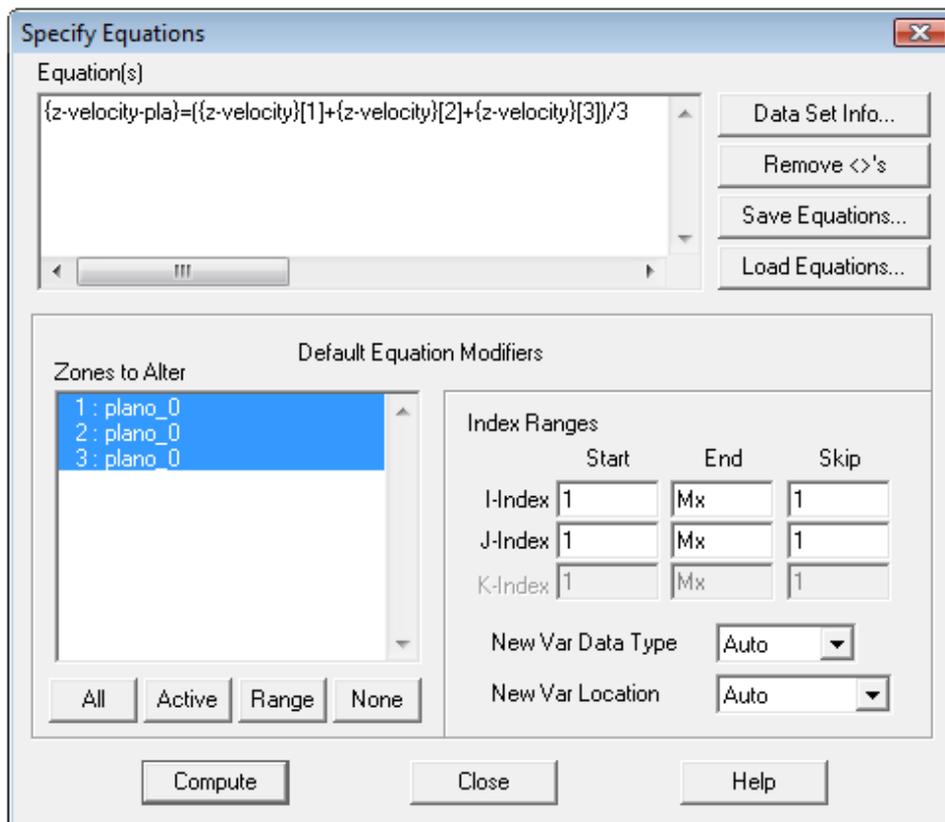


Figura D.18. Introducción de la ecuación de promediado en TECPLOT.

Tal y como se presenta en la figura anterior, para identificar la variable que corresponde a cada uno de los ciclos se emplea la siguiente nomenclatura:

Magnitud de la velocidad en el ciclo 1	{velocity-magnitude}[1]
Componente x de la velocidad en el ciclo 2	{x-velocity}[2]

Tabla D.1. Identificación de variables en TECPLOT.

Simplemente resta introducir la ecuación correspondiente al promediado para las distintas variables (*Data > Alter > Specify equations*), siguiendo el ejemplo de la *Figura D.18*. Nótese que la modificación se ha de realizar en todos los ciclos, es decir, señalando en azul todos los ciclos presentes (*zones to alter*).

Desde el punto de vista de la agilización mediante *macro* del procedimiento de promediado, resulta clave la programación en MATLAB de un código que genere la ecuación del promediado de manera automática. A continuación se recoge la subrutina que realiza esta función, y que forma parte de la *macro* completa que se ejecuta en TECPLOT (*Figura D.19*).

```
% variables a promediar
var={'velocity-magnitude'; 'x-velocity'; 'y-velocity'; 'z-velocity'};
k=10; % numero de ciclos a promediar

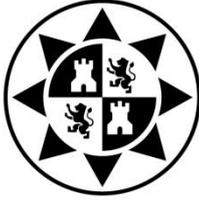
% redaccion del fichero .dat
fichero=sprintf('macro_promediate.dat');
fid = fopen(fichero,'w');
char=1:1:k;
for j=1:length(var)
    v=var(j);
    vmod1=strcat('{',strcat(v,')[1]);
    vmod2=strcat('+',vmod1);
    v1=strcat(strcat(vmod2,num2str(char(2))),']');
    for i=1:k-2
        v1=strcat(v1,strcat(strcat(vmod2,num2str(char(i+2))),']'));
    end
    v0=v{1}; % {1} de cadena de caracteres, con '', a char, sin ''
    v1=strcat(strcat(strcat(vmod1,num2str(char(1))),']'),v1);
    v2=v1{1}; % {1} de cadena de caracteres, con '', a char, sin ''
    file=sprintf('$!ALTERDATA');
    fwrite(fid,file);
    fprintf(fid,'\n');
    file=sprintf(' EQUATION = ^{%s-pla}=(%s)``%d^ ',v0,v2,k);
    fwrite(fid,file);
    fprintf(fid,'\n');
end
fprintf(fid,'\n');
fclose(fid)
```

Figura D.19. Generación de la ecuación de promediado en MATLAB.

Finalmente ténganse en cuenta las siguientes notas, referidas al código de la *Figura D.19*, y que son necesarias para su correcta aplicación en TECPLOT:

```
% NOTA 1: la funcion sprintf no acepta '  
% En su lugar se escribe ^  
% Este cambio se deshace reemplazando ^ por ' en WordPad con ctrl+R  
% NOTA 2: la funcion sprintf no acepta /  
% En su lugar se escribe ``  
% Este cambio se deshace reemplazando `` por / en WordPad con ctrl+R
```

Figura D.20. Notas acerca de la generación de la ecuación de promediado en MATLAB.



Universidad
Politécnica
de Cartagena



industriales
etsii UPCT

ANEXO E. USER-DEFINED FUNCTIONS. CONFIGURACIÓN DEL COMPILADOR.

	Página
E.1. Instalación de un compilador	206
E.2. Variables de entorno	206
E.3. Compilación desde FLUENT.....	208
E.4. Compilación desde el servidor.....	209

E.1. Instalación de un compilador.

El software compilador ha de ser compatible con el sistema operativo con el que se trabaja (el ordenador con el que se realiza el presente Proyecto opera con *Windows Vista™ Home Premium*). De acuerdo con las indicaciones acerca de compatibilidad recopiladas de diferentes webs especializadas en CFD, se instala el software compilador *Microsoft Visual C++ 2008 Express Edition*.

En general, tanto la configuración del compilador como la propia ejecución de FLUENT para la compilación de *UDFs* son metodologías un tanto confusas e imprecisas. El procedimiento que se recoge a continuación funciona correctamente, lo cual no quiere decir que no exista una manera más ortodoxa de proceder: este anexo pretende ser sólo una guía que facilite el uso de *compiled UDFs* en futuros estudios numéricos.

E.2. Variables de entorno.

Una vez instalado el software compilador es preciso definir las variables de entorno del equipo (*Environment Variable Definitions*), a las que se accede con *click* derecho sobre Equipo: Propiedades > Configuración avanzada del sistema > Variables de entorno.

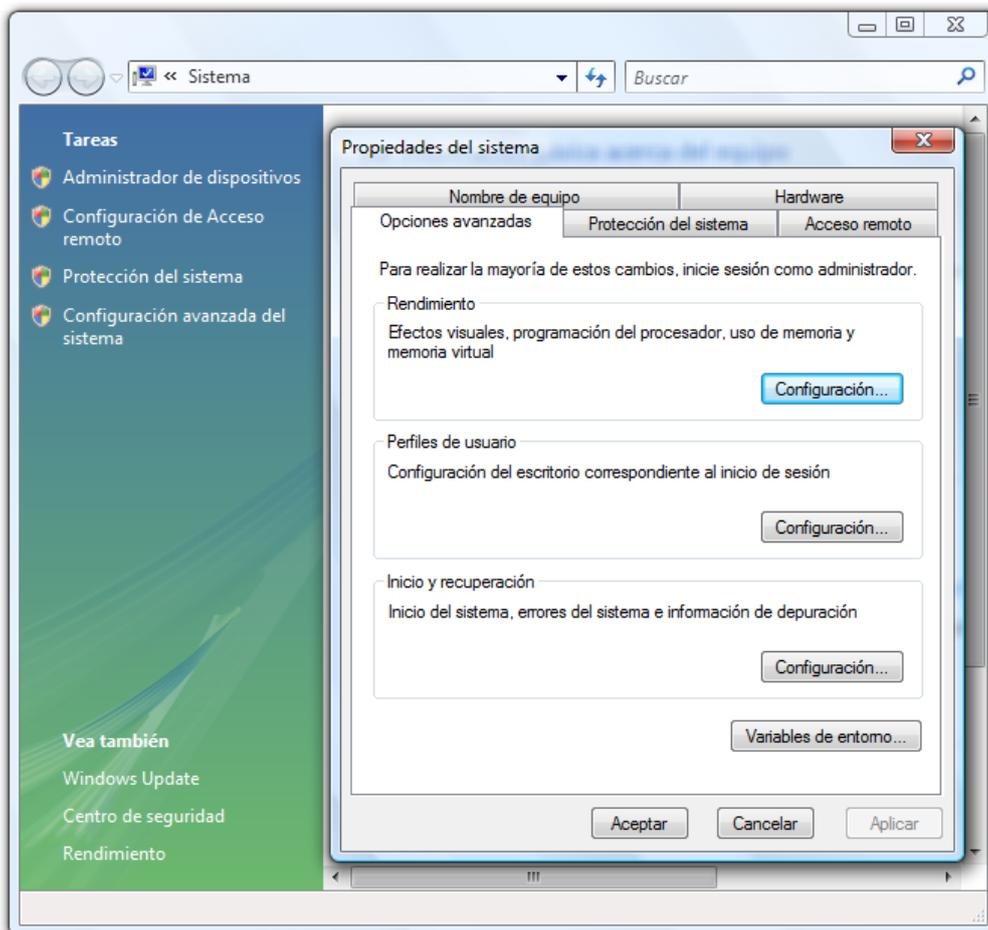


Figura E.1. Definición de las variables de entorno.

Las variables de entorno a definir son include, Lib, MSDevDir y Path (en el equipo utilizado para este Proyecto, las tres primeras variables han de crearse y la cuarta ha de editarse). La definición se realiza con los valores correspondientes al compilador, tanto para las variables de usuario como para las variables del sistema:

- include C:\Program Files\Microsoft Visual Studio 9.0\VC\include
- Lib C:\Program Files\Microsoft Visual Studio 9.0\VC\lib
- MSDevDir C:\Program Files\Microsoft Visual Studio 9.0\Common7\IDE
- Path C:\Program Files\Microsoft Visual Studio 9.0\VC\bin

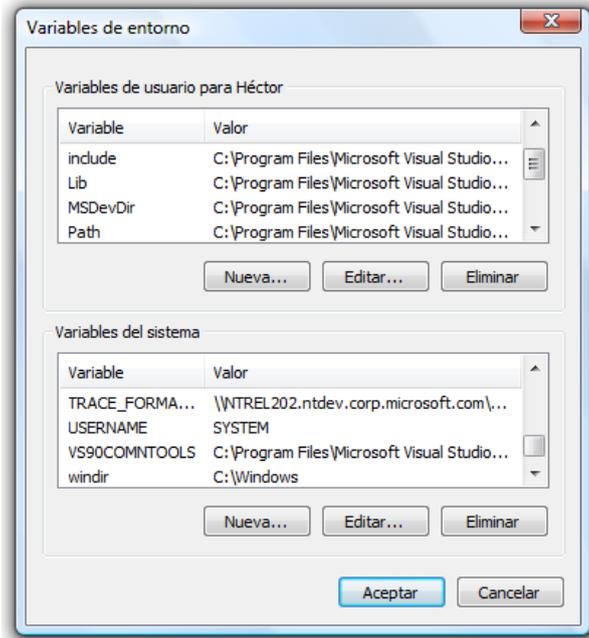


Figura E.2. Valor de las variables de entorno.

A continuación se modifica la variable de entorno Path con el valor correspondiente a FLUENT. Esto se efectúa de manera automática desde la carpeta de ubicación de este programa (C:\ProgramData\Microsoft\Windows\Start Menu\Programs\Fluent Inc Products\Fluent 6.3.26), con el icono *Set Environment*:

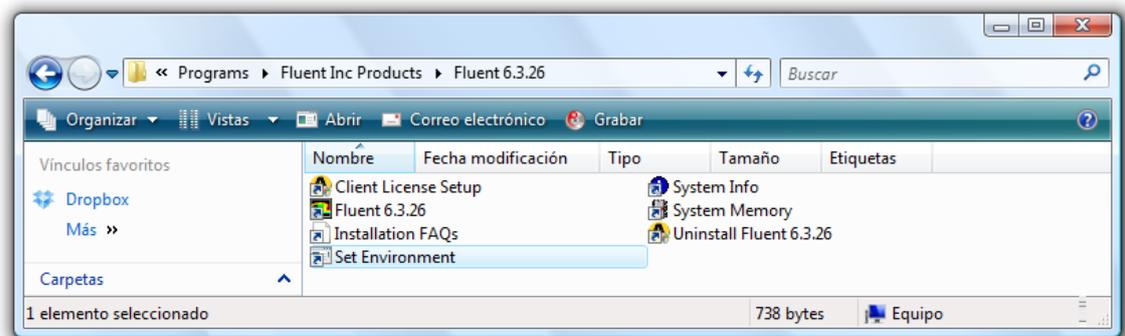


Figura E.3. Modificación de la variable de entorno Path.

El nuevo valor de la variable de entorno Path pasa a ser el siguiente:
C:\Program Files\Microsoft Visual Studio 9.0\VC\bin;C:\fluent.inc\ntbin\ntx86

E.3. Compilación desde FLUENT.

La carpeta donde se guarda el caso ha de contener, además de la UDF, un icono de acceso directo a FLUENT.

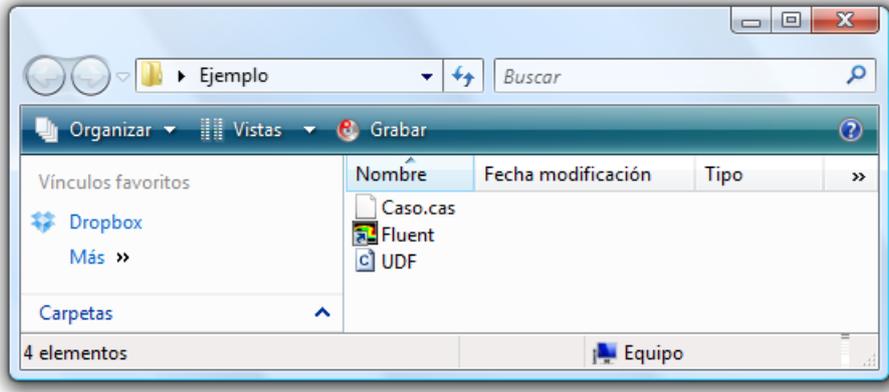


Figura E.4. Contenido de la carpeta del caso.

Este icono de FLUENT ha de abrirse, no con doble *click*, sino desde una ventana de comandos que se encuentra en la carpeta de ubicación del compilador (C:\ProgramData\Microsoft\Windows\Start Menu\Programs\Microsoft Visual C++ 2008 Express Edition\Visual Studio Tools), denominada Símbolo del sistema de Visual Studio 2008. Al abrir esta ventana, aparece por defecto la dirección C:\Program Files\Microsoft Visual Studio 9.0\VC. Para abrir el acceso directo a FLUENT se cambia esta dirección (cd..) por la dirección de la carpeta que contiene el caso. Al teclear el acceso directo, con la extensión .lnk (es importante que el nombre no tenga espacios), arranca FLUENT.

```
ca. Símbolo del sistema de Visual Studio 2008
Setting environment for using Microsoft Visual Studio 2008 x86 tools.
C:\Program Files\Microsoft Visual Studio 9.0\VC>cd..
C:\Program Files\Microsoft Visual Studio 9.0>cd..
C:\Program Files>cd..
C:\>cd users
C:\Users>cd héctor
C:\Users\Héctor>cd desktop
C:\Users\Héctor\Desktop>cd ejemplo
C:\Users\Héctor\Desktop\Ejemplo>dir
El volumen de la unidad C no tiene etiqueta.
El número de serie del volumen es: 1281-378C

Directorio de C:\Users\Héctor\Desktop\Ejemplo
08/03/2012  19:35    <DIR>          .
08/03/2012  19:35    <DIR>          ..
07/03/2012  18:58                357.168 Caso.cas
02/04/2009  17:41                732 Fluent.lnk
08/03/2012  19:35                351 UDF.c
              3 archivos            358.251 bytes
              2 dirs  82.690.064.384 bytes libres

C:\Users\Héctor\Desktop\Ejemplo>fluent.lnk
C:\Users\Héctor\Desktop\Ejemplo>
```

Figura E.5. Ventana de comandos.

Una vez abierto el caso, se accede a la compilación de *UDFs* a través de *Define > User-Defined > Functions > Compiled*. En la sección *Source Files* se añade la *UDF (Add)*, se construye (*Build*) y se carga (*Load*). Si la compilación ha sido correcta, FLUENT crea la biblioteca *libudf* en la misma carpeta y la abre, estando ya disponible la *UDF* para su utilización.

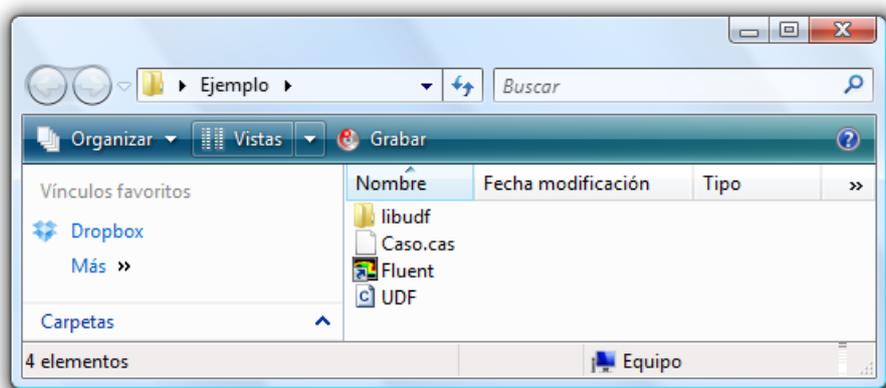


Figura E.6. Creación de la biblioteca libudf.

E.4. Compilación desde el servidor.

En el *Apartado 6.3.3.3 del Capítulo 6* se presentan los parámetros y las zonas que es preciso definir en FLUENT para abordar una simulación con mallado dinámico, una vez que la *UDF* ha sido compilada correctamente y creada la biblioteca correspondiente. En el apartado anterior se describe la compilación y creación de biblioteca para el caso en que la simulación se lleva a cabo desde el propio ordenador del alumno. Para ejecutar la simulación de manera remota, desde el servidor (clúster) de que dispone el Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos de la Universidad Politécnica de Cartagena, se requiere programar en un fichero *Journal* los siguientes pasos:

- Se resuelve el caso estacionario en el servidor de forma habitual.
- Se cambia el *solver* para afrontar la simulación periódica.
- Se activa la malla dinámica y se definen los parámetros.
- Se compila la *UDF* y se crea la biblioteca.
- Se crean las zonas del mallado dinámico.
- Se itera y se guardan los casos de forma habitual.

La principal dificultad radica en escribir adecuadamente los comandos precisos para realizar los pasos anteriores en FLUENT, para su ejecución en el servidor. Se recomienda recurrir al *Text Command List* de FLUENT 6.3 para obtener los comandos ya que algunos de éstos no son evidentes.

A continuación se recoge un recorte del fichero *Journal* que se ha utilizado para la simulación de la malla dinámica.

```
;lee el caso steady
rcd Malla5_2D_8p_steady.cas.gz
;cambia el solver a unsteady
/define/models/unsteady-1st-order
yes
;activa la malla dinámica
/define/models/dynamic-mesh?
yes
no
no
/define/models/dynamic-mesh-controls/layering?
yes
/define/models/dynamic-mesh-controls/smoothing?
no
;compila la udf
/define/user-defined/compiled-functions
compile
libudf
yes
obr.c

;carga la udf
/define/user-defined/compiled-functions
load
libudf
;crea una zona (se generaliza a todas las zonas de manera análoga)
/define/dynamic-zones/create
disco_entrada_01
rigid-body
obr::libudf
0
0
0
fluido_01
0
;itera y guarda
```

Figura E.7. Recorte de fichero *Journal* para simulación de la malla dinámica desde el servidor.

Nota. Téngase la precaución de nombrar el fichero .c en minúsculas porque el servidor no distingue las mayúsculas (obr.c, nunca OFR.c).

Referencias bibliográficas.

- [1] X. Ni, A. Fitch, P. Webster. From maximum to most efficient production using a continuous oscillatory baffled reactor. [Acceso: 16-02-2012]. <http://www.pinetwork.org/pubs/paper/ni-article.pdf>.
- [2] X. Ni, H. Jian, A. Fitch. Computational fluid dynamic modeling of flow patterns in an oscillatory baffled column. *Chemical Engineering Science* 57 (2002) 2849-2862.
- [3] A. Bergles. Techniques to augment the heat transfer. *Handbook of heat transfer applications*. New York: McGraw Hill; 1985.
- [4] R. Webb. Principles of enhanced heat transfer. 2nd ed. New York: Taylor & Francis Group; 2005.
- [5] X. Ni, H. Jian, A. Fitch. Evaluation of turbulent integral length scale in an oscillatory baffled column using large eddy simulation and digital particle image velocimetry. *Institution of chemical engineers. Trans IChemE, Vol 81, Part A, September 2003*. 0263-8762/03/\$23.50+0.00.
- [6] N. E. Pereira, X. Ni. Droplet size distribution in a continuous oscillatory baffled reactor. *Chemical Engineering Science* 56 (2001) 735-739.
- [7] M. R. Mackley, P. Stonestreet. Heat transfer and associated energy dissipation for oscillatory flow in baffled tubes. *Chemical Engineering Science* 50 (1995) 2211-2224.
- [8] X. Ni, J. A. Cosgrove, A. D. Arnott, C. A. Greated, R. H. Cumming. On the measurement of strain rate in an oscillatory baffled column using particle image velocimetry. *Chemical Engineering Science* 55 (2000) 3195-3208.
- [9] C. R. Brunold, J. C. B. Hunns, M. R. Mackley, J. W. Thompson. Experimental observations on flow patterns and energy losses for oscillatory flow in ducts containing sharp edges. *Chemical Engineering Science* 44 (1989) 1227-1244.
- [10] A. W. Dickens, M. R. Mackley, H. R. Williams. Experimental residence time distribution measurements for unsteady-flow in baffled tubes, *Chemical Engineering Science* 44 (1989) 1471-1479.
- [11] T. Howes. On the dispersion of unsteady flow in baffled tubes. PhD thesis, Department of Chemical Engineering. Cambridge University. 1988.
- [12] M. R. Mackley, X. Ni. Mixing and dispersion in a baffled tube for steady laminar and pulsatile flow. *Chemical Engineering Science* 46 (1991) 3139-3151.
- [13] M. R. Mackley, X. Ni. Experimental fluid dispersion measurements in periodic baffled tube arrays. *Chemical Engineering Science* 48 (1993) 3293-3305.
- [14] G. G. Stephens, M. R. Mackley. Heat transfer performance for batch oscillatory flow mixing. *Experimental Thermal and Fluid Science* 25 (2002) 583-594.
- [15] A. P. Harvey, M. R. Mackley, P. Stonestreet. Operation and optimization of an oscillatory flow continuous reactor. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 40 (2001) 5371-5377.
- [16] Z. Qiu, L. Zhao, L. Weatherley. Process intensification technologies in continuous biodiesel production. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, Vol. 49, no. 4, pp. 323-330, Apr. 2010*.
- [17] A. T. Ghazi, M. F. Gunam Resul, R. Yunus, T. C. Shean Yaw. Preliminary design of oscillatory flow biodiesel reactor for continuous biodiesel production from jatropha triglycerides. *Journal of Engineering Science and Technology, Vol. 3, No. 2 (2008)* 138-145.
- [18] A. P. Harvey, M. R. Mackley, T. Seliger. Process intensification of biodiesel production using a continuous oscillatory flow reactor. *Journal of Engineering Science and Technology* 78 (2003) 38-341.
- [19] Resumen del Plan de Energías Renovables 2011-2020. Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía (IDAE). Ministerio de Industria, Turismo y Comercio. Gobierno de España.
- [20] M. F. Hwang, A. Dybbs. Heat transfer in a tube with oscillatory flow. *ASME Paper 83-WA/HT-90 (1983)*.
- [21] I.J. Sobey. The occurrence of separation in oscillatory flow. *Journal of Fluid Mechanics* 151 (1983) 395-426.
- [22] T. Howes, M. R. Mackley. Experimental axial dispersion for oscillatory flow through a baffled tube. *Chemical Engineering Science* 45 (1990) 1349-1358.

- [23] M.R. Mackley, G.M. Tweddle, I.D. Wyatt. Experimental heat transfer measurements for pulsatile flow in baffled tubes. *Chemical Engineering Science* 45 (1990) 1237–1242.
- [24] X. Ni. A study of fluid dispersion in oscillatory flow through a baffled tube. *Journal of Engineering Science and Technology* 65 (1995) 165–174.
- [25] X. Ni. Residence time distribution measurements in a pulsed baffled tube bundle. *Journal of Engineering Science and Technology* 59 (1994) 213–221.
- [26] M. R. Hewgill, M. R. Mackley, A. B. Pandit, S. S. Pannu. Enhancement of gas-liquid mass transfer using oscillatory flow in a baffled tube. *Chemical Engineering Science* 48 (1993) 799–809.
- [27] X. Ni, S. Gao. Scale up correlation for mass transfer coefficients in pulsed baffled reactors. *Chemical Engineering Journal* 63 (1996) 157–166.
- [28] X. Ni, S. Gao. Mass transfer characteristics in a pilot pulsed baffled reactor. *Journal of Engineering Science and Technology* 65 (1996) 65–71.
- [29] M. R. Mackley, K. B. Smith, N. P. Wise. The mixing and separation of particle suspensions using oscillatory flow in baffled tubes. *Transfer Instrn. Chemical Engineering* 71A (1993) 649–656.
- [30] S. Liu, X. Ni, C. A. Greated, P. J. Fryer. Measurements of velocities of single particles for steady and oscillatory flows in plain and baffled tubes. *Transfer Instrn. Chemical Engineering* 73A (1995) 727–732.
- [31] X. Ni, M. R. Mackley. Chemical reaction in batch pulsatile flow and stirred tank reactors. *Engineering Journal* 52 (1993) 107–114.
- [32] M. H. I. Baird, N. V. Rama Rao. Power dissipation and flow patterns in reciprocating baffle-plate columns. *Can. Journal Chemical Engineering* 73 (1995) 417–425.
- [33] P. Stonestreet. Department of Chemical Engineering, University of Cambridge, UK. Personal communication (1995).
- [34] T. Zhao, P. Cheng. A numerical solution for laminar forced convection in a heated pipe subjected to a periodically reversing flow. *International Journal Heat Mass Transfer* 38 (1995), 3011–3022.
- [35] X. Ni, H. Jian, A. W. Fitch. Computational fluid dynamic modeling of flow patterns in an oscillatory baffled column. *Chemical Engineering Science* 57 (2002) 2849–2862.
- [36] X. Ni, M. R. Mackley, A. P. Harvey, P. Stonestreet, M. H. I. Baird, N. V. Rama Rao. Mixing through oscillations and pulsations-guide to achieving process enhancements in the chemical and process industries. *Trans IChemE, Vol* 81, Part A, March 2003. *Chem Eng Res Des*, 81(A3): 373–383.
- [37] P. Bouvier, P. Stouffs, J. P. Bardou. Experimental study of heat transfer in oscillating flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 48 (2005) 2473–2482.
- [38] H. Jian, X. Ni. A numerical study on the scale-up behavior in oscillatory baffled columns. *Trans IChemE, Part A, Chemical Engineering Research and Design*, 83 (2005), 1163–1170.
- [39] N. Reis, A. P. Harvey, M. R. Mackley, A. A. Vicente, J. A. Teixeira. Fluid mechanics and design aspects of a novel oscillatory flow screening mesoreactor. *Trans IChemE, Part A. Chemical Engineering Research and Design* 83 (2005) 1163–1170.
- [40] A. P. Harvey, M. R. Mackley, N. Reis, A. A. Vicente, J. A. Teixeira. The fluid mechanics relating to a novel oscillatory flow micro reactor, in: the 4th European. Congress of Chemical Engineering, Granada, 2003.
- [41] N. Reis, C. N. Goncalves, A. A. Vicente, J. A. Teixeira. Proof-of-concept of a novel micro-bioreactor for fast development of industrial bioprocesses, *Biotechnology and Bioengineering*, 95 (2006).
- [42] A. N. Phan, A. P. Harvey. Development and evaluation of novel designs of continuous mesoscale oscillatory baffled reactors. *Chemical Engineering Journal*, 159 (2010) 212–219.
- [43] A. N. Phan, A. P. Harvey. Effect of geometrical parameters on fluid mixing in novel mesoscale oscillatory helical baffled designs. *Chemical Engineering Journal*, 169 (2011) 339–347.
- [44] A. N. Phan, A. P. Harvey, J. Lavender. Characterization of fluid mixing in novel designs of mesoscale oscillatory baffled reactors operating at low flow rates (0.3–0.6 ml/min). *Chemical Engineering and Processing*, 50(2011) 254–263.
- [45] X. Ni, Y. S. de Gélécourt, J. Neil, T. Howes. On the effect of tracer density on axial dispersion in a batch oscillatory baffled column. *Chemical Engineering Journal* 85 (2002) 17–25.

- [46] A. W. Fitch, H. Jian, X. Ni. An investigation of the effect of viscosity on mixing in an oscillatory baffled column using digital particle image velocimetry and computational fluid dynamics simulation. *Chemical Engineering Journal* 112 (2005) 197–210.
- [47] X. Ni, P. Gough. On the discussion of the dimensionless groups governing oscillatory flow in a baffled tube. *Chemical Engineering Science*, Vol. 52, No. 18, pp. 3209–3212, 1997.
- [48] J.P. Solano, R. Herrero, A. N. Phan, A.P. Harvey. A numerical study of the flow pattern and heat transfer characteristics in oscillatory baffled reactors with helical coil inserts. Elsevier Editorial System for *Chemical Engineering Research and Design*. Manuscript Draft. EPIC 2011 SI.
- [49] R. Herrero, J.P. Solano, A.P. Harvey, A. Phan. Flow field and heat transfer characteristics in oscillatory flow reactors with helical coil inserts. The 3rd European Process Intensification Conference. EPIC 2011.
- [50] D. Muñoz-Esparza, E. Sanmiguel-Rojas. Numerical simulations of the laminar flow in pipes with wire coil inserts. *Computers & Fluids* 44 (2011) 169–177.
- [51] L. Ismail, R. E. Westacott, X. Ni. On the deposition of paraffin wax in a batch oscillatory baffled column. 10th Meeting of Process Intensification Network, June 2004.
- [52] University of Cambridge. Department of Chemical Engineering and Biotechnology. [Acceso: 18-02-2012]. <http://www.ceb.cam.ac.uk/pages/ofm-advantages-enhancement-mass-transfer.html>.
- [53] FLUENT. Chapter 12. Modeling Turbulence wall treatment for k-omega models. 12.11.1. Near-Wall Mesh Guidelines. Enhanced Wall Treatment.
- [54] Large Eddy Simulation. Smagorinsky-Lilly [Acceso: 18-05-2012]. http://en.wikipedia.org/wiki/Large_eddy_simulation.
- [55] GAMBIT Modeling Guide. [Acceso: 22-05-2012]. http://202.118.250.111:8080/FLUENT/Gambit13_help/modeling_guide/mq0302.htm.
- [56] FLUENT. Chapter 12. Modeling Turbulence wall treatment for k-omega models. 12.11.1. Near-Wall Mesh Guidelines. Large Eddy Simulation.
- [57] FLUENT 6.3 User's guide. 7.3.1. Inputs at Pressure Inlet Boundaries. [Acceso: 22-05-2012]. http://hpce.iitm.ac.in/website/Manuals/FLUENT_6.3/FLUENT6.3/help/html/ug/node219.htm.
- [58] FLUENT 6.3 User's guide. 7.8.1. Inputs at Pressure Outlet Boundaries. [Acceso: 22-05-2012]. http://hpce.iitm.ac.in/website/Manuals/FLUENT_6.3/FLUENT6.3/help/html/ug/node235.htm.
- [59] FLUENT 6.3 User's guide. 11.3.2. Dynamic Mesh Update Methods. [Acceso: 23-05-2012]. http://hpce.iitm.ac.in/website/Manuals/Fluent_6.3/fluent6.3/help/html/ug/node444.htm.
- [60] FLUENT. Tutorial 12. Using Dynamic Meshes.
- [61] TECPLOT. Macros. anim_n_frames.mcr. [Acceso: 04-06-2012]. <http://www.tecplot.com/Downloads/Macros.aspx>.
- [62] FLUENT 6.3 User's guide. 30.4 Alphabetical Listing of Field Variables and Their Definitions. [Acceso: 08-06-2012]. http://hpce.iitm.ac.in/website/Manuals/Fluent_6.3/fluent6.3/help/html/ug/node1219.htm.
- [63] Desviación estándar muestral. [Acceso: 27-06-2012]. http://es.wikipedia.org/wiki/Desviaci%C3%B3n_est%C3%A1ndar.

Agradecimientos.

Quisiera agradecer al Ministerio de Educación, Cultura y Deporte la concesión de una **Beca de Colaboración** para iniciación en tareas de investigación durante el curso académico 2011-2012, gracias a la cual he adquirido la formación necesaria para acometer la realización del presente Proyecto Fin de Carrera. Me gustaría dar las gracias asimismo al profesor **José Pérez García**, del Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos de la Universidad Politécnica de Cartagena y vicerrector de Infraestructuras, Equipamiento y Sostenibilidad de dicha universidad, por valorarme como posible candidato para solicitar la beca de colaboración que he disfrutado durante este curso; quisiera agradecerle también su disponibilidad y asesoramiento en cuestiones relacionadas con este y otros proyectos. Por último, quisiera agradecer muy especialmente al profesor **Juan Pedro Solano Fernández**, del Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos de la Universidad Politécnica de Cartagena, su labor como director de este Proyecto Fin de Carrera: por la atención y el seguimiento continuado; por el interés mostrado en aspectos de mi formación no relacionados directamente con el proyecto, como convocatorias de becas o premios, congresos y publicaciones; y muy en especial por su trato personal durante la duración de este trabajo.

Fdo. Héctor Martínez Rodríguez.



Molina de Segura, a 4 de Julio de 2012.

