



**Casa abierta al tiempo**

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**  
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍAS

**CARACTERIZACIÓN DEL TRANSPORTE DE CANTIDAD DE  
MOVIMIENTO Y SU IMPACTO EN EL TRANSPORTE DE CALOR  
AXIAL Y RADIAL EN UN LECHO EMPACADO MEDIANTE CFD**

---

Tesis que presenta

**I.Q. Victoria Tello Hernández**

Para obtener el grado de

Maestra en Ciencias  
(Ingeniería Química)

Asesor:

Dr. Carlos Omar Castillo Araiza

Ciudad de México, Junio 22, 2018



*Para ti...*



# Agradecimientos

*A todas aquellas personas que a pesar de las dificultades estuvieron ahí para apoyarme,  
de corazón, ¡Gracias!*



# Resumen

Los reactores de lecho empacado son los más utilizados en la industria petroquímica. Dentro de nuestro grupo de investigación, se tiene especial interés en reactores de lecho empacado que operan de forma no isotérmica y no adiabática, los cuales se caracterizan por presentar una relación de diámetro de tubo partícula menor a 10 y por contener un catalizador donde la fase activa se encuentra externamente depositada en un soporte no poroso, esto para que se pueda disipar mejor la energía térmica. Por ello es importante describir los mecanismos de transporte de cantidad de movimiento, calor y masa, además de la cinética para llevar a cabo un diseño confiable de esta clase de equipos. Sin embargo, no se tienen una aproximación completa para describir estos sistemas. Esto se debe a dos razones principalmente: la primera se atribuye a la inadecuada descripción de la transferencia de calor en el reactor de lecho empacado; y la segunda a la incertidumbre en la descripción de la cinética de reacción. En esta investigación se tiene interés en el estudio de la transferencia de calor y cantidad de movimiento.

Estudiar la transferencia de calor haciendo uso de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés), ha permitido describir y entender a nivel de escala de poro la interacción de los distintos mecanismos de transporte de cantidad de movimiento y sus interacciones con los mecanismos de transporte de calor en los lechos empacados. No obstante, la definición del sistema geométrico y el tiempo de cómputo han sido los principales retos en el uso de CFD.

En este trabajo se caracteriza mediante de CFD la transferencia de calor en un lecho empacado con una relación de diámetro de tubo partícula ( $dt/dp$ ) igual a 3.175. Primero, se realizó un análisis de los perfiles de velocidad y líneas de corriente, y después se acopló este análisis a la descripción de la transferencia de calor de este lecho empacado cuando es operado de forma adiabática y cuando se opera de forma no isotérmica y no adiabática. Se realizó un análisis de efecto del transporte de cantidad de movimiento en los mecanismos axiales y radiales de transferencia de calor. Los resultados de la transferencia de calor fueron comparados con experimentos del grupo de investigación en trabajos anteriores.

En el análisis que se realizó para el transporte de cantidad de movimiento se encontró que la ecuación de Navier-Stokes permite describir el patrón de flujo en un lecho empacado para valores de números de Reynolds de operación en un rango de 123 a 2090. Así mismo, el análisis del transporte de calor para los casos en los que opera de forma no isotérmica y no adiabática y de forma adiabática, mostró que la dinámica de fluidos influye de manera importante en los mecanismos de transporte de calor, ya que tiene efectos importantes en la dispersión de calor radial en el lecho empacado. De igual manera los resultados revelaron que las consideraciones geométricas en la estructura del empaque tales como el contacto entre partículas, puede afectar significativamente los mecanismos locales de transferencia de calor en el lecho empacado.



# Nomenclatura

## Letras latinas

$C_p$	Calor específico [J/(kg K)]
$C_{p_f}$	Calor específico del aire [J/(kg K)]
$d_t/d_p$	Relación entre diámetro de tubo entre diámetro de partícula
$Fr$	Número de Froude
$\mathbf{g}$	Vector de gravedad [m/s <sup>2</sup> ]
$h_w$	Coefficiente de transferencia de calor en la pared [W/m <sup>2</sup> °C]
$k_{eff}$	Conductividad térmica del material [W/m K]
$k_{effr}$	Conductividad térmica efectiva radial [W/m K]
$k_{effz}$	Conductividad térmica efectiva axial [W/m K]
$k_f$	Conductividad térmica del fluido [W/m K]
$k_s$	Conductividad térmica de la partícula [W/m K]
$l$	Radio del tubo adimensional
$l^*$	Longitud característica de los remolinos en la macroescala
$L$	Altura del lecho empacado adimensional
$\mathbf{n}$	Vector normal en la interfase sólido-fluido
$\nabla$	Operador nabra
$\nabla^*$	Operador nabra adimensional
$P$	Presión de operación [atm]
$P^*$	Presión adimensional
$P_{ref}$	Presión de referencia [atm]
$Pe$	Número de Péclet
$q$	Flux de calor [W/m <sup>2</sup> ]
$r$	Radio del lecho empacado adimensional
$r^*$	Radio del lecho empacado [m]
$R$	Radio de la partícula adimensional
$Re$	Número de Reynolds en función del diámetro del lecho empacado
$Re_p$	Número de Reynolds en función del diámetro de partícula
$t$	Tiempo [s]
$T$	Temperatura [K]
$T_s$	Temperatura de las partículas [K]
$T_f$	Temperatura del fluido [K]
$T_s^*$	Temperatura de las partículas adimensional
$T_f^*$	Temperatura del fluido adimensional
$T_{in}$	Temperatura de entrada [K]

$T_{out}$	Temperatura de salida [K]
$\mathbf{v}$	Vector de velocidad [m/s]
$\mathbf{v}^*$	Vector de velocidad adimensional
$v_{in}$	Velocidad de entrada [m/s]
$v_{ref}$	Velocidad de referencia [m/s]

## Letras griegas

$\alpha$	Difusividad térmica [m <sup>2</sup> /s]
$\gamma$	Variable adimensional
$\epsilon$	Disipación de la energía cinética [m]
$\eta$	Longitud característica de los remolinos en la microescala
$\kappa$	Energía cinética turbulenta
$\kappa^*$	Relación de conductividad térmica sólido-fluido
$\mu$	Viscosidad dinámica [g/m <sup>2</sup> s]
$\mu^{(t)}$	Viscosidad turbulenta [Pa · s]
$\rho$	Densidad del material [kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_f$	Densidad del fluido [kg/m <sup>3</sup> ]
$\tau$	Tiempo adimensional
$\nu$	Viscosidad cinemática [m <sup>2</sup> /s]
$\Phi$	Fuente de generación o consumo de energía térmica
$\omega$	Disipación de la energía cinética específica

# Índice general

Resumen	I
Nomenclatura	III
Índice de figuras	VII
Índice de tablas	XV
Introducción	1
<b>1. Antecedentes</b>	<b>3</b>
1.1. Aproximaciones clásicas . . . . .	3
1.2. Dinámica de fluidos computacional (CFD) . . . . .	5
Objetivos	9
<b>2. Metodología</b>	<b>11</b>
2.1. Sistema experimental a modelar . . . . .	11
2.2. Simulaciones mediante CFD . . . . .	15
2.2.1. Construcción de la geometría del sistema . . . . .	15
2.2.2. Construcción de la malla computacional . . . . .	18
2.3. Modelos de transporte de cantidad de movimiento y de transporte de calor	20
2.4. Comsol Multiphysics y sistema de cómputo . . . . .	25
<b>3. Dinámica de fluidos</b>	<b>27</b>
3.1. Generalidades . . . . .	27
3.1.1. Turbulencia . . . . .	28
3.2. Evaluación de los modelos de turbulencia y Navier-Stokes . . . . .	31
3.3. Campo de velocidad en el lecho empacado . . . . .	34
3.4. Caída de presión . . . . .	50
<b>4. Transporte de calor</b>	<b>53</b>
4.1. Lecho adiabático . . . . .	53
4.1.1. Temperatura axial y radial . . . . .	53
4.1.2. Temperatura promedio axial y radial . . . . .	57
4.1.3. Comparación con las observaciones experimentales . . . . .	59
4.1.4. Efecto de la conductividad térmica . . . . .	65
4.1.5. Análisis en estado no estacionario . . . . .	66

4.2. Lecho no isotérmico y no adiabático . . . . .	67
4.2.1. Temperatura axial y radial . . . . .	67
4.2.2. Temperatura promedio axial y radial . . . . .	70
4.2.3. Comparación con las observaciones experimentales . . . . .	72
<b>Referencias</b>	<b>75</b>
<b>Apéndices</b>	<b>80</b>
<b>A.</b>	<b>81</b>
A.1. Construcción de la geometría sin contacto radial adimensional . . . . .	81
A.2. Construcción de la geometría con contacto radial adimensional . . . . .	82
<b>B.</b>	<b>83</b>
B.1. Pruebas de independencia de malla 1 . . . . .	83
B.2. Pruebas de independencia de malla 2 . . . . .	85
B.3. Pruebas de independencia de malla 3 . . . . .	87
B.4. Pruebas de independencia de malla 4 . . . . .	89
B.5. Pruebas de independencia de malla 5 . . . . .	91
<b>C.</b>	<b>93</b>
C.1. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 264 . . . . .	94
C.2. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 526 . . . . .	97
C.3. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 1054 . . . . .	100
C.4. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 1583 . . . . .	103
C.5. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 2090 . . . . .	106
<b>D.</b>	<b>109</b>
D.1. Dinámica de fluidos lecho no isotérmico y no adiabático Re 123 . . . . .	109
D.2. Dinámica de fluidos lecho no isotérmico y no adiabático Re 246 . . . . .	112
D.3. Dinámica de fluidos lecho no isotérmico y no adiabático Re 492 . . . . .	115
<b>E.</b>	<b>119</b>
E.1. Transporte de calor lecho adiabático Re 264 . . . . .	120
E.2. Transporte de calor lecho adiabático Re 526 . . . . .	121
E.3. Transporte de calor lecho adiabático Re 1054 . . . . .	122
E.4. Transporte de calor lecho adiabático Re 1583 . . . . .	123
E.5. Transporte de calor lecho adiabático Re 2090 . . . . .	124
<b>F.</b>	<b>125</b>
F.1. Transporte de calor lecho no isotérmico y no adiabático Re 123 . . . . .	126
F.2. Transporte de calor lecho no isotérmico y no adiabático Re 246 . . . . .	127
F.3. Transporte de calor lecho no isotérmico y no adiabático Re 492 . . . . .	128
<b>G.</b>	<b>129</b>
G.1. Transporte de calor lecho adiabático Re 264 contacto radial . . . . .	130
G.2. Transporte de calor lecho adiabático Re 2090 contacto radial . . . . .	131

# Índice de figuras

2.1. Esquema y dimensiones del lecho empacado incluyendo los puertos de medición (Castillo-Araiza, 2004) . . . . .	12
2.2. Configuración del lecho empacado que opera de forma adiabática. . . . .	12
2.3. Configuración del lecho empacado que opera de forma no isotérmica y no adiabática. . . . .	13
2.4. Posiciones axiales y radiales de muestreo de temperatura en el lecho empacado del sistema experimental . . . . .	15
2.5. Configuración geométrica del sistema. a) Partícula del lecho. b) Arreglo geométrico para cada cama del empaque. c) Arreglo geométrico a lo largo del lecho. . . . .	16
2.6. Contacto entre partículas tipo brecha (Gap)construido en CFD. . . . .	17
2.7. Contacto entre partículas tipo ensamble (Overlap)construido en CFD. . . . .	17
2.8. Geometría del lecho empacado en CFD sin contacto entre partículas. . . . .	18
2.9. Geometría del lecho empacado en CFD con contacto entre partículas del lecho. . . . .	18
2.10. Estructura de la malla. . . . .	19
2.11. Configuración de la malla utilizada. . . . .	20
3.1. Esquema del desarrollo de los regímenes de flujo . . . . .	27
3.2. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con el modelo $\kappa - \epsilon$ para un $Re_p=761$ a) corte transversal (4 cm) y b) corte frontal ( $r=0$ ). Geometría 8 cm. Malla 1. . . . .	32
3.3. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con el modelo SST para un $Re_p=761$ a) corte transversal (4 cm) y b) corte frontal ( $r=0$ ). Geometría 8 cm. Malla 1. . . . .	33
3.4. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con la ecuación de Navier-Stokes para un $Re_p=761$ a) corte transversal (4 cm) y b) corte frontal ( $r=0$ ). Geometría 8 cm. Malla 1. . . . .	34
3.5. Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=2090$ . $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	35
3.6. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=2090$ . $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	36
3.7. Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=2090$ . $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	36

3.8. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] a) $Re=264$ ; $V_{inRe264}=0.1569$ [m/s] y b) $Re=264$ ; $V_{inRe2090}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	37
3.9. Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] a) $Re=264$ ; $V_{inRe264}=0.1569$ [m/s] y b) $Re=264$ ; $V_{inRe2090}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	37
3.10. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	39
3.11. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista frontal) a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	40
3.12. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista transversal) a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	41
3.13. Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista transversal) a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	42
3.14. Líneas de flecha asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista transversal) a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	43
3.15. Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	44
3.16. Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista transversal) a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	45
3.17. Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista transversal) a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	46
3.18. Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional y líneas de flecha asociadas a la velocidad obtenidas obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista transversal) a un $Re=2090$ ; $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	47
3.19. Perfiles de velocidad promedio adimensional en función del radio del lecho empacado adimensional a diferentes $Re$ de operación obtenidos mediante CFD. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	48

3.20. Comparación perfiles de velocidad radial obtenido con CFD y aproximaciones clásicas a $Re=2090$ y su equivalente experimental de $Re_p=702$ . Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	49
3.21. Perfiles de presión promedio adimensional en función de la longitud del lecho adimensional para un $Re=2090$ . Geometría 41 cm con contacto axial.	50
3.22. Perfiles de presión promedio adimensional en función del radio del lecho adimensional para un $Re=2090$ . Geometría 41 cm con contacto axial. . .	51
3.23. Distribución de la presión adimensional obtenida con las ecuaciones de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=2090$ . $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	52
3.24. Distribución de la presión adimensional asociada a las líneas de corriente de velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=2090$ . $V_{in}=1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	52
4.1. Distribución de la temperatura adimensional a un corte frontal en $\theta=0$ para un $Re=264$ a) Geometría con contacto axial y b) Geometría sin contacto. $T_{in}=293.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. . . . .	54
4.2. Distribución de la temperatura adimensional a un corte transversal en $z=0.22$ [cm] para un $Re=264$ . $T_{in}=293.15$ [K]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	55
4.3. Distribución de la temperatura adimensional y líneas de corriente de velocidad adimensional a un corte transversal en $z=0.22$ [cm] para un $Re=264$ . $T_{in}=293.15$ [K]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	56
4.4. Distribución de la temperatura adimensional y líneas de corriente de vorticidad adimensional a un corte transversal en $z=0.22$ [cm] para un $Re=264$ . $T_{in}=293.15$ [K]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	56
4.5. Perfiles de temperatura promedio adimensional en función de la longitud del lecho adimensional a diferentes $Re$ de operación. $T_{in}=293.15$ [K]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	58
4.6. Perfiles de temperatura promedio adimensional en función del radio del lecho adimensional a diferentes $Re$ de operación. $T_{in}=293.15$ [K]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	59
4.7. Perfiles de temperatura en función de la longitud del lecho experimental (Castillo-Araiza, 2004) . . . . .	60
4.8. Comparación perfil de temperatura obtenido en CFD (geometría con contacto axial) a $Re=264$ y su equivalente experimental a $Re_p=96$ en función de la longitud del lecho. . . . .	61
4.9. Geometría del lecho empacado en CFD con contacto radial y axial entre partículas (vista transversal). . . . .	62
4.10. Geometría del lecho empacado en CFD con contacto radial y axial entre partículas (vista frontal). . . . .	62
4.11. Distribución de la temperatura adimensional a un corte frontal en $r=0$ y a un $Re=264$ , $T_{in}=293.15$ [K]. Geometría 41 cm con contacto axial y radial. Fuente de calentamiento en la parte superior del lecho. . . . .	63

4.12. Distribución de la temperatura adimensional y líneas de corriente vortici- dad adimensional a un corte transversal en $z=0.222$ [cm] y a un $Re=264$ , $T_{in}= 293.15$ [K]. Geometría 41 cm con contacto axial y radial. Geometría 41 cm con contacto axial y radial. . . . .	63
4.13. Distribución de la temperatura adimensional a un corte frontal en $r=0$ para un $Re=264$ a) Geometría con contacto axial y radial, b) Geometría con contacto axial y c) Geometría sin contacto. $T_{in}= 293.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. . . . .	64
4.14. Comparación perfil de temperatura obtenido en CFD para geometrías con contacto axial (negro) y con contacto axial y radial (verde) a $Re=264$ y su equivalente experimental a $Re_p=96$ en función de la longitud del lecho. . .	65
4.15. Temperatura puntual adimensional en función de la longitud del lecho adi- mensional a diferentes conductividades térmicas $Re=264$ ( $r=0$ ). Geometría con contacto axial. . . . .	66
4.16. Temperatura puntual adimensional en función del tiempo adimensional para un $Re=264$ ( $r=0$ ). Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	67
4.17. Distribución de temperatura adimensional a un corte frontal $r=0$ para un $Re=492$ . $T_{in}=352.15$ [k]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	68
4.18. Distribución de temperatura adimensional a un corte transversal $z=0.12$ [cm] para un $Re=492$ . $T_{in}=352.15$ [k]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	68
4.19. Distribución de temperatura adimensional y líneas de corriente velocidad adimensional a un corte transversal en $z=0.12$ [cm] para un $Re=492$ . $T_{in}=$ $352.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	69
4.20. Distribución de temperatura adimensional y líneas de corriente vorticidad adimensional a un corte transversal en $z=0.12$ [cm] para un $Re=492$ . $T_{in}=$ $352.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	70
4.21. Perfiles de temperatura promedio adimensional en función de la longitud del lecho adimensional a diferentes $Re$ de operación. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	71
4.22. Perfiles de temperatura promedio adimensional en función del radio del lecho adimensional a diferentes $Re$ de operación. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	72
4.23. Comparación perfil de temperatura obtenido en CFD (Geometría con con- tacto axial) a $Re=492$ y su equivalente experimental a $Re_p= 101$ en función de la lonfitud del lecho. . . . .	73
B.1. Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=264$ . $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 1 . . . . .	83
B.2. Malla 1 . . . . .	84

B.3.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=264$ . $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 2 . . . . .	85
B.4.	Malla 2 . . . . .	86
B.5.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=264$ . $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 3 . . . . .	87
B.6.	Malla 3 . . . . .	88
B.7.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=264$ . $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 4 . . . . .	89
B.8.	Malla 4 . . . . .	90
B.9.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=264$ . $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 5 . . . . .	91
B.10.	Malla 5 . . . . .	92
C.1.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=264$ . $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	94
C.2.	Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=264$ . $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	95
C.3.	Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=264$ . $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	96
C.4.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=526$ . $V_{in}= 0.3127$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	97
C.5.	Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=526$ . $V_{in}= 0.3127$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	98
C.6.	Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=526$ . $V_{in}= 0.3127$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	99
C.7.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=1054$ . $V_{in}= 0.6272$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	100
C.8.	Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=1054$ . $V_{in}= 0.6272$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	101
C.9.	Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=1054$ . $V_{in}= 0.6272$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	102

C.10.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=1583$ . $V_{in}= 0.9417$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	103
C.11.	Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=1583$ . $V_{in}= 0.9417$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	104
C.12.	Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=1583$ . $V_{in}= 0.9417$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	105
C.13.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=2090$ . $V_{in}= 1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	106
C.14.	Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=2090$ . $V_{in}= 1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	107
C.15.	Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=2090$ . $V_{in}= 1.2431$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	108
D.1.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	109
D.2.	Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	110
D.3.	Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	111
D.4.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	112
D.5.	Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	113
D.6.	Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	114
D.7.	Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	115
D.8.	Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	116
D.9.	Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal $z=0.222$ [cm] para un $Re=123$ . $V_{in}= 0.07321$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	117

E.1.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.33$ [cm]. $T_{in}= 298.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	120
E.2.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.33$ [cm]. $T_{in}= 298.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	121
E.3.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.33$ [cm]. $T_{in}= 298.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	122
E.4.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.33$ [cm]. $T_{in}= 298.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	123
E.5.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.33$ [cm]. $T_{in}= 298.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	124
F.1.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.12$ [cm]. $T_{in}= 433.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	126
F.2.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.12$ [cm]. $T_{in}= 393.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	127

F.3.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.12$ [cm]. $T_{in} = 352.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial. . . . .	128
G.1.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.33$ [cm]. $T_{in} = 298.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial y radial. . . . .	130
G.2.	(a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en $r=0$ [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en $z=0.33$ [cm]. $T_{in} = 298.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial y radial. . . . .	131

# Índice de tablas

2.1. Condiciones de operación experimentales para el caso donde el lecho empacado era operado de forma adiabática. . . . .	13
2.2. Condiciones de operación experimentales para el caso donde el lecho empacado era operado de forma no isotérmica y no adiabática. . . . .	14
2.3. Posiciones axiales de muestreo de temperatura en el lecho empacado del sistema experimental . . . . .	14
2.4. Posiciones radiales de muestreo de temperatura en el lecho empacado del sistema experimental . . . . .	14
2.5. Parámetros de mallado. . . . .	20
2.6. Variables adimensionales. . . . .	22
2.7. Condiciones de operación para simulaciones computacionales del caso adiabático. . . . .	23
2.8. Condiciones de operación para simulaciones computacionales del caso no isotérmico y no adiabático. . . . .	23
2.9. Coeficientes de ajuste de polinomio para el caso no isotérmico y no adiabático. . . . .	23
2.10. Condiciones de frontera en el lecho empacado. . . . .	24
2.11. Condiciones de frontera interfase sólido-fluido. . . . .	24
2.12. Parámetros utilizados en las simulaciones computacionales. . . . .	24
4.1. Relación entre el número de Reynolds y el número de Péclet a las condiciones de estudio. . . . .	54
B.1. Parámetros de malla 1. . . . .	84
B.2. Parámetros de malla 2. . . . .	86
B.3. Parámetros de malla 3. . . . .	88
B.4. Parámetros de malla 4. . . . .	90
B.5. Parámetros de malla 5. . . . .	92



# Introducción

Los lecho empacados tienen diversas aplicaciones en la industria, tales como el secado de diversos materiales, en bio-reactores, así como en la producción de compuestos derivados de reacciones altamente exotérmicas como la producción de anhídrido ftálico, el cual es uno de los productos más utilizados en la la manufactura de pinturas, colorantes, resinas, plastificantes, entre otros productos (Castillo-Araiza *y col.*, 2007; Huerta de la Cruz, 2013; Romero Limones, 2017). Particularmente, este tipo de reactores, se caracterizan por presentar gradientes de temperatura significativos y una alta sensibilidad a cambios en sus condiciones de operación (Castillo-Araiza *y col.*, 2007; Marx, 2012). En la literatura se han modelado los mecanismos de transporte involucrados en su funcionamiento. Sin embargo, a la fecha no se ha logrado describir de forma completa las observaciones en estos sistemas. Esto se ha atribuido a dos aspectos principalmente: no se han logrado capturar el los fenómenos cinéticos en la superficie de catalizador (Anastasov, 2003; Kershenbaum y Lopez-Isunza, 1982; Mongkhonsi y Kershenbaum, 1998; Wainwright y Foster, 1979); y no se ha caracterizado adecuadamente para ciertas aplicaciones el transporte de cantidad de movimiento y su efecto en la transferencia de calor (Castillo-Araiza *y col.*, 2007; Dixon, 1988; Kershenbaum y Lopez-Isunza, 1982).

Dentro de nuestro grupo de investigación se tiene especial interés en los reactores de lecho empacado, en los cuales se llevan a cabo reacciones altamente exotérmicas tales como la oxidación selectiva del o-xileno para producir anhídrido ftálico (Castillo-Araiza, 2008; Marx, 2012; Partopour y Dixon, 2016). El anhídrido ftálico es uno de los productos mas importantes de la síntesis orgánica moderna (Castillo-Araiza *y col.*, 2007; Che Galicia, 2016; Romero Limones, 2017), por lo que proponer un modelo adecuado que considere los fenómenos catalíticos y de transporte involucrados en el funcionamiento de reactores de lecho empacado que procesan este productos es clave para llevar a cabo el diseño eficiente de nuevos equipos y para la optimización de unidades ya existentes.

En el presente proyecto, se caracteriza usando el enfoque de dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) el transporte de cantidad de movimiento y su efecto en la transferencia de calor en un reactor de lecho empacado con una relación de diámetro de tubo a partícula igual a 3.175 en ausencia de reacción. Particularmente, se evalúa la transferencia de calor en el lecho empacado bajo condiciones de operación adiabática y de forma no isotérmica y no adiabática.

El documento esta organizado como sigue: En el capítulo 1, se hace una revisión del estado del arte sobre los estudios de transporte de cantidad de movimiento y transferencia de calor en lechos empacados que se han llevado a cabo mediante el uso de aproximaciones ingenieriles considerando al sistema a nivel local mediante CFD.

En el capítulo 2, se describe el sistema experimental y los distintos tipos de experimentos que se estudiaron mediante CFD, así como las consideraciones geométricas y de

mallado, además del modelo utilizado y las condiciones de operación para la solución de las simulaciones computacionales.

En el capítulo 3, se hace un resumen sobre los conceptos generales de turbulencia y las aproximaciones más utilizadas en su estudio. También, se realizan simulaciones computacionales en donde se comparan algunas de estas aproximaciones en la caracterización de la dinámica de fluidos para el lecho empacado, mostrando un análisis cualitativo de los perfiles de velocidad para un intervalo de números de Reynolds de operación de entre 123 a 2090.

En el capítulo 4, se discuten los resultados de las simulaciones computacionales de transporte de calor en el lecho empacado cuando éste opera de forma adiabática y cuando opera de forma no isotérmica y no adiabática, así como sus interacciones con la dinámica de fluidos.

Por último, se presentan las conclusiones de este trabajo de investigación, junto con las referencias y apéndices correspondientes.

# Capítulo 1

## Antecedentes

### 1.1. Aproximaciones clásicas

La descripción de los perfiles de velocidad en un lecho empacado mediante modelado macroscópico es complicada, debido a la configuración del empaque y las distribuciones de fracción vacía que se tiene (Dixon y van Dongeren, 1998; Guardo *y col.*, 2005; Tobís, 2000). Existen diversas aproximaciones ingenieriles para describir los perfiles de velocidad en este tipo de sistemas; sin embargo, en la mayoría de estas aproximaciones se realizan suposiciones que pueden no ser adecuadas para el diseño de estos equipos a escala industrial. En el estudio de la dinámica de fluidos, estas aproximaciones utilizan modelos pseudo-homogéneos que consideran al sistema como pseudo-continuo y hacen uso de parámetros efectivos, donde el campo de velocidad se describe por las ecuaciones de Navier-Stokes acopladas a la ecuación de Darcy y Forchheimer (Castillo-Araiza, 2004; McGreavy *y col.*, 1986; Papageorgiou y Froment, 1995; Tsotsas y Schlünder, 1990). En las predicciones de estos modelos, la magnitud de velocidad intersticial cerca de del lecho empacado, que presenta una baja relación de diámetro de tubo respecto al diámetro de partícula se sobrestima en comparación con las observaciones experimentales. Para resolver este problema, se ha propuesto adicionar a la ecuación de Navier-Stokes un parámetro denominado viscosidad efectiva así como reestimar los parámetros involucrados en los términos de Darcy y Forchheimer para considerar el efecto de la geometría en la resistencias al transporte de cantidad de movimiento del fluido en las superficies sólidas del lecho empacado (Aparicio-Mauricio *y col.*, 2017).

En los estudios de transporte de calor, los perfiles de temperatura en lechos empacados se han descrito mediante el uso de modelos pseudo-heterogéneos y pseudo-homogéneos que consideran al sistema como pseudo-continuo y hacen uso de parámetros efectivos de transferencia de energía para caracterizar los mecanismos correspondientes (Castillo-Araiza *y col.*, 2007; Dixon, 1997; Dixon y van Dongeren, 1998). Los parámetros que se determinan a partir de estudios de transporte en ausencia de reacción son: la conductividad térmica efectiva radial  $k_{effr}$ , la conductividad térmica efectiva axial  $k_{effz}$  y el coeficiente de transporte de calor en la pared  $h_w$ .

La  $k_{eff}$  engloba los mecanismos de transferencia de calor que dominan del centro hasta la capa límite en las paredes del lecho, sin hacer una distinción entre la fase sólida y la fase fluida; sin embargo, esta conductividad térmica involucra varios mecanismos, los cuales pueden ser independientes y dependientes de la velocidad del fluido. La  $k_{eff}$  considera

la conducción a través del sólido, la conducción a través las interfases sólido-fluido, la transferencia de calor por radiación entre las superficies de la partícula, la conducción dentro del fluido, la convección por el fluido, la transferencia de calor entre el fluido y la conducción del sólido a través de la película del fluido cerca del punto de contacto sólido-sólido (Castillo-Araiza *y col.*, 2007). El coeficiente  $h_w$  considera los mecanismos de transporte de calor por convección y conducción que ocurren en la zona cercana a la pared. Es aquí donde se tiene la mayor resistencia al movimiento del fluido, y por lo tanto se forma una capa límite donde dominan las fuerzas viscosas, y se tiene resistencias a la transferencia de energía. Estas resistencias se cuantifican utilizando un coeficiente de transporte de calor en la pared denominado  $h_w$ . Si este coeficiente es muy pequeño, implica que los mecanismos convectivos dentro de la capa límite son dominantes incrementando las resistencias al transporte de calor, si ese coeficiente tiene un valor grande, significa que los fenómenos inerciales dominan en la capa límite reduciendo las resistencias a la transferencia de energía en esta región.

Para lograr una adecuada predicción de los perfiles de temperatura en los reactores de lecho empacado con enfriamiento en las paredes a escala industrial se requieren determinar adecuadamente los parámetros de transporte de calor mediante experimentos en ausencia de reacción. No obstante, a la fecha no se tiene certidumbre en la determinación de estos parámetros. Diversas correlaciones se han reportado en la literatura para calcular los parámetros de transferencia de calor (Beek, 1962; Bey y Eigenberger, 2001; Calderbank y Moo-Young, 1961; Dixon y Cresswell, 1979; Gorine y Mukhin, 2002; Chi-Hsiung Li y Finlayson, 1976; Smirnov *y col.*, 2003); sin embargo, la mayoría de estas se han obtenido utilizando sistemas que manejan un amplio rango de relaciones de diámetro de tubo respecto al diámetro de partícula. Especialmente a valores de esta relación mayores a 10. En consecuencia, al utilizar estos parámetros se tienen predicciones inadecuadas de los perfiles de temperatura observados. Sin embargo, cuando estos parámetros se estiman a partir de observaciones de transferencia de calor en ausencia de reacción, una de las principales limitaciones en la determinación de  $h_w$  y  $k_{effr}$  es que estos parámetros muestran una correlación estadística cuando son estimados del mismo conjunto de datos experimentales de temperatura. Esta relación estadística se ha relacionado con los gradientes de temperatura en el interior del lecho. Es decir, dependiendo de la zona radial del lecho en donde se tenga un gradiente de temperatura mayor se puede inferir cuál parámetro es estimado con mayor confianza (Cresswell y Dixon, 1982; Lerou y Froment, 1978). Por ejemplo, si el gradiente de temperatura es mayor en la región cercana a la pared del lecho,  $h_w$  se estima con menor incertidumbre que  $k_{effr}$ , mientras que, si éste es mayor en la parte central del lecho,  $k_{effr}$  se estima con una mayor certidumbre que  $h_w$ . Otra limitación que se tiene en la estimación de estos parámetros efectivos se relaciona con las técnicas de medición, las cuales son invasivas en los sistemas experimentales, provocando incertidumbre en los datos experimentales, utilizados para la estimación de estos parámetros (Malang *y col.*, 2015; Nijemeisland y Dixon, 2001; Wehinger, 2016).

Existen pocos estudios (Castillo-Araiza, 2004; Vortmeyer y Adam, 1984; Yagi y Wakao, 1959) que han caracterizado la transferencia de calor axial mediante la estimación de la conductividad térmica efectiva axial  $k_{effz}$ . Uno de ellos es el sistema experimental estudiado por Castillo-Araiza (2004), el cual consistió en un lecho empacado que operaba de forma cuasi-adiabática generando gradientes de temperatura apreciables a lo largo del lecho, donde la dispersión axial de calor era el mecanismo dominante con respecto a la

dispersión radial de calor.

A la fecha, no se tiene clara la importancia del mecanismo conductivo de transporte de calor axial  $k_{effr}$ , ya que una cantidad importante de estudios han despreciado su efecto cuando se determina  $h_w$  y  $k_{effr}$  de experimentos de transferencia de energía en ausencia de reacción en un lecho empacado que opera de forma no isotérmica y no adiabática.

## 1.2. Dinámica de fluidos computacional (CFD)

Otra forma de caracterizar la transferencia de cantidad de movimiento y su interacción con la transferencia de energía térmica en lechos empacados con ausencia de reacción, es CFD. Esta herramienta permite caracterizar la transferencia de cantidad de movimiento y la transferencia de energía, haciendo una distinción entre la fase sólida y la fase fluida del sistema. Con este enfoque se ha obtenido información que permite caracterizar los distintos fenómenos de transporte de cantidad de movimiento y calor sin la necesidad de estimar los parámetros efectivos que se obtienen a partir de experimentos mediante las aproximaciones clásicas (Coussirat *y col.*, 2007; Dixon *y col.*, 2013; Guardo *y col.*, 2005; Nijemeisland y Dixon, 2004; Wehinger, 2016). Si bien los recursos computacionales no son suficientes para describir, diseñar u optimizar mediante CFD reactores de lecho empacado a escala industrial, existen avances importantes en la caracterización de la mecánica de fluidos y el transporte de calor en ausencia de reacción en lechos empacados a escala banco. Lo cual, bajo un cierto tipo de análisis, puede ser esencial en el diseño de esta clase de sistemas bajo condiciones de reacción a nivel industrial.

Uno de los primeros estudios sobre el transporte de calor en lechos empacados y sus interacciones con la mecánica de fluidos usando el enfoque CFD fue realizado por Dixon y van Dongeren (1998), evaluaron la conductividad térmica efectiva radial y el coeficiente de transferencia de calor en la pared para un lecho empacado con ocho esferas. En este estudio se obtuvieron resultados que no se ajustaban a las observaciones que se reportaban mediante el uso de aproximaciones clásicas que determinaban estos parámetros efectivos a partir del ajuste de observaciones experimentales de transferencia de calor en ausencia de reacción. Las diferencias se atribuyeron a que las esferas no se encontraban en contacto y que tampoco había un contacto entre las partículas y la pared del tubo donde estas esferas fueron empacadas. En dicho estudio, también se reportaron simulaciones sobre la presión y se evaluó el efecto de la temperatura de la pared en la determinación de los parámetros efectivos del transporte de calor.

Un año más tarde, Logtenberg *y col.* (1999) describieron los patrones de flujo y temperatura dentro de un lecho empacado con 10 partículas esféricas sin contacto entre ellas, ya que identificaron que éste provocaba problemas de estabilidad numérica en la solución así como en la generación de la malla. Para describir los perfiles de velocidad resolvieron las ecuaciones de Navier-Stokes, y evaluaron el efecto en la transferencia de calor, observando la formación de remolinos en las zonas cercanas a la pared para un intervalo de números de Reynolds entre 182 y 800.

Calis *y col.* (2001) determinaron la caída de presión y los perfiles de velocidad en un lecho empacado con 8-16 partículas sin considerar contacto radial entre ellas, usando un código comercial de CFD (CFX-5.3) y utilizando el modelo de turbulencia  $\kappa - \epsilon$  para un intervalo de números de  $Re_p$  de entre 0.01 y 50000 basados en el diámetro

hidráulico de partícula. Ellos establecieron que el modelo de turbulencia  $\kappa - \epsilon$  presentaba buenos resultados y que podía ser utilizado para describir apropiadamente los perfiles de velocidad en lechos empacados a pesar de la aproximación geométrica que se utilizó para evitar los problemas de convergencia. Las partículas esféricas se dibujaron con una curvatura para que no estuvieran en contacto entre ellas y con la pared del lecho.

Nijemeisland y Dixon (2004) estudiaron la relación que existe entre el flujo local de transferencia de calor en la pared y la velocidad local en un lecho empacado con 72 esferas son contacto entre partículas para un  $Re_p$  de 1000. Utilizando el modelo  $\kappa - \epsilon$ , identificaron los parámetros que afectan el diseño de partículas catalíticas.

Guardo y col. (2005) y Coussirat y col. (2007) realizaron un análisis evaluando varios modelos de turbulencia y sus interacciones con la transferencia de calor en lechos empacados con 44 esferas, considerando contacto entre éstas, y trabajando con números de  $Re_p$  menores a 1000. Estos autores determinaron los parámetros de transferencia de calor y calcularon la caída de presión para reactores de lecho empacado; sin embargo, también estos resultados mostraron que los modelos utilizados no estiman apropiadamente la transición entre regímenes de flujo laminar a turbulento.

Hasta el año 2005, la mayoría de los estudios sobre dinámica de fluidos mediante CFD en lechos empacados solo se había realizado para sistemas empacados con menos de 100 partículas de empaque; varios de estos estudios no consideraron incluso el contacto entre superficies sólidas. En la última década como consecuencia del avance tecnológico se ha logrado modelar mediante CFD lecho tubulares empacados con más de 100 partículas, y manejando  $Re_p$  en el intervalo 0.003-10000. Jafari y col. (2008); Magnico (2009); Reddy y Joshi (2008) describieron los perfiles de velocidad y su comportamiento bajo diferentes distribuciones aleatorias de partículas empacadas en el lecho. En estos estudios los autores validan sus simulaciones describiendo datos de caídas de presión experimentales reportados en la literatura, así mismo concluyeron que es necesario profundizar en los detalles sobre la generación de los mecanismos de turbulencia, así como capturar los efectos de la curvatura de las partículas en la transferencia de cantidad de movimiento y de calor para números de  $Re_p$  altos.

Dixon y col. (2013) llevaron a cabo un análisis del patrón de flujo y su interacción con la transferencia de calor evaluando cuatro aproximaciones para que las partículas empacadas tuvieran contacto entre ellas y con la pared del lecho: brecha (*gaps*), superposición (*overlaps*), puentes (*bridges*) y tapas (*caps*). Ellos establecieron recomendaciones sobre los tipos de contacto más adecuados para estudiar el coeficiente de arrastre, así como los perfiles de transferencia de calor en lechos empacados usando un intervalo de  $Re_p$  entre 50 y 10000. Estas recomendaciones se basan en reducir los efectos de las modificaciones de punto de contacto en la transferencia de calor; sin embargo, no toman en cuenta ninguna consideración de practicidad con respecto a su implementación. Aunque demostraron la importancia de considerar el contacto entre partículas en un lecho empacado, las simulaciones CFD sobre la transferencia de calor de la partícula fueron realizadas con una aproximación ingenieril considerando una fase continua y utilizando un parámetro efectivo,  $h_w$ .

Wehinger (2016) realizó un estudio de CFD modelando un reactor de lecho empacado catalítico a escala banco, en el cual considera la generación aleatoria del empaque del lecho y evalúa distintas estrategias de mallado, realizando simulaciones tridimensionales y bidimensionales para describir los perfiles de velocidad y los perfiles de temperatura

sin reacción para un lecho de 18 mm de ancho y 25 mm de altura cuando era empacado con partículas en contacto esféricas de 1 mm de diámetro, operando a  $Re_p$  entre 35 y 700. Este autor comparó sus resultados con datos experimentales tomados de la literatura para validar su modelo y noto que sus predicciones de CFD difieren de las aproximaciones ingenieriles en aproximadamente 10 %.

Partopour y Dixon (2016) estudiaron mediante CFD el transporte de cantidad de movimiento, calor y masa acoplados a la reacción para un lecho empacado con 120 partículas esféricas bajo condiciones de régimen de flujo laminar ( $Re_p=12$ ). Compararon sus resultados sobre la transferencia de calor con aquellos obtenidos con un modelo simplificado 1D, y encontraron que los gradientes generados en las simulaciones con CFD son totalmente diferentes en comparación con las aproximaciones ingenieriles. Por lo que concluyeron que es necesario obtener información detallada sobre las especies y los perfiles de temperatura en el empaque, así como identificar el régimen de flujo para lograr una mejor comprensión de estos procesos.

En esta revisión de antecedentes muestra que CFD es una herramienta útil para describir y entender el comportamiento del transporte de cantidad de movimiento y su interacción con el transporte de energía en lechos empacados a escala banco que presentan baja relación de  $d_t/d_p$  en un rango de  $Re_p$  entre 12 y 50000, condiciones que son de relevancia para la industria que hace uso de esta clase de sistemas. Sin embargo, todos los estudios reportados en la literatura se basan en casos particulares solo de interés para los autores, y normalmente no se hace una comparación entre las observaciones experimentales y las simulaciones para un mismo caso. Esto hace que la revisión de la literatura de contribuciones utilizando CFD, evidencie limitaciones relacionadas con el contacto entre partículas y su impacto en el modelado de la mecánica de fluidos y el transporte de calor. Aunado al hecho de que cuando se tienen partículas porosas, la transferencia calor en éstas se sigue modelando mediante aproximaciones ingenieriles considerando a la partícula como continua y haciendo uso de parámetros efectivos. Finalmente, hasta donde se tiene conocimiento no se ha estudiado mediante CFD la transferencia de calor axial en esta clase de lecho empacados a escala banco, ya que todos estos estudios se enfocan en estudiar la transferencia de cantidad de movimiento y la transferencia de calor radial.



# Objetivos

## Objetivo general:

Caracterizar mediante CFD la transferencia de cantidad de movimiento y su impacto en el transporte de calor en ausencia de reacción en un lecho empacado con partículas esféricas no porosas con una relación de  $d_t/d_p$  igual a 3.175, para números de Re de 123 y 2090.

## Objetivos particulares:

- ◇ Describir la transferencia de cantidad de movimiento y calor en el lecho empacado en operación adiabática.
- ◇ Describir la transferencia de cantidad de movimiento y calor en el lecho empacado bajo condiciones no isotérmicas y no adiabáticas.



# Capítulo 2

## Metodología

### 2.1. Sistema experimental a modelar

En esta sección se describe el equipo y experimentos de transferencia de calor que se modelaron mediante CFD en esta investigación.

El sistema experimental se construyó dentro de nuestro grupo de investigación (Castillo-Araiza, 2004) para caracterizar los diferentes procesos de transporte de calor axial y radial que tienen lugar en un lecho empacado con un catalizador industrial. La Figura 2.1 muestra el lecho empacado que se utilizó. Este consiste en un tubo de acero inoxidable 316, con un diámetro interior de una pulgada y una longitud de 41 cm, que se encontraba empacado con partículas esféricas de un catalizador comercial no poroso de dióxido de titania ( $\text{TiO}_2$ ) externamente depositado en un soporte de pentóxido de vanadio ( $\text{V}_2\text{O}_5$ ) con un diámetro de partícula de 8.2 mm. Para las mediciones de temperatura se tenían 10 puntos de muestreo no equidistantes y se utilizaron termopares tipo k de 0.5 mm y 0.7 mm de diámetro externo. El tubo se encontraba contenido en un horno calentado por resistencias eléctricas, y aislado con fibra de vidrio.

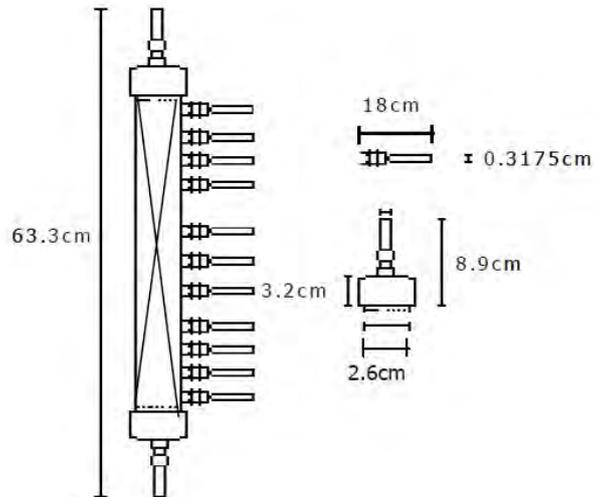


Figura 2.1: Esquema y dimensiones del lecho empacado incluyendo los puertos de medición (Castillo-Araiza, 2004)

En el lecho empacado se llevaron a cabo dos estudios de transferencia de calor. En el primero, que se diseñó para caracterizar la transferencia de calor axial; se hacía pasar una corriente de aire por la parte inferior del lecho a temperatura ambiente mientras que la parte superior del lecho se irradiaba con una lámpara de luz infrarroja de 250 W (Figura 2.2). Debido al aislamiento del lecho con la fibra de vidrio, el sistema se operaba de modo adiabático. En este tipo de experimento se monitoreaba el perfil de temperatura axial en el centro del lecho. En la Tabla 2.1 se presentan las condiciones de operación a las que se llevaron a cabo los experimentos para este caso.

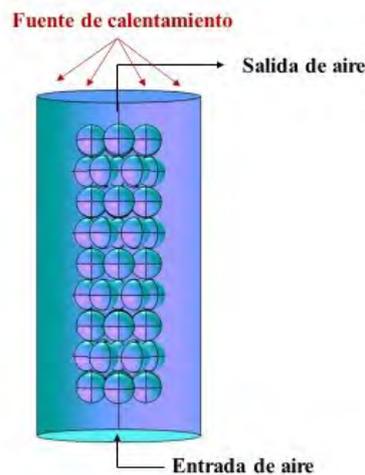


Figura 2.2: Configuración del lecho empacado que opera de forma adiabática.

Tabla 2.1: Condiciones de operación experimentales para el caso donde el lecho empacado era operado de forma adiabática.

$Re_p$	$v_{in}$ [m/s]	$q$ [W/m <sup>2</sup> ]	$T_s$ [°C]
96	0.1569	13876	185
191	0.3127	19357	138
384	0.6272	25664	98
576	0.9417	26758	75
761	1.2431	30826	68

En el segundo tipo de experimentos que se realizaron en el lecho empacado, se caracterizó la transferencia de calor radial (Figura 2.3). En estos experimentos se hacía pasar por la parte superior del lecho una corriente de aire a distintas velocidades superficiales de alimentación, mientras se calentaban las paredes del lecho en forma perpendicular al paso del flujo por medio de una resistencia eléctrica, de tal manera que se tuvieran perfiles de temperatura radial y axial dentro del lecho. En todos los experimentos se controló la temperatura de la pared externa del tubo a la mitad del lecho a una temperatura de 400 °C. Se midieron los perfiles de temperatura a distintas posiciones radiales a lo largo de la longitud axial y radial (Tablas 2.3 y 2.4) del lecho a diferentes flujos de operación (Figura 2.4). En la Tabla 2.2 se presentan las condiciones de operación bajo las cuales operaba este lecho.

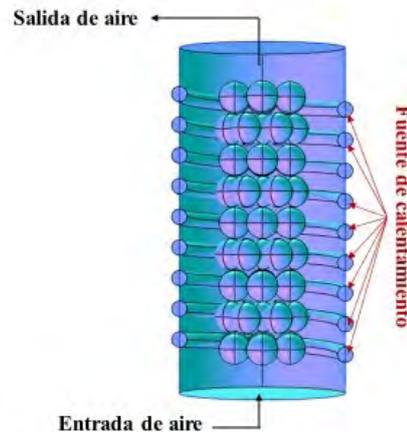


Figura 2.3: Configuración del lecho empacado que opera de forma no isotérmica y no adiabática.

Tabla 2.2: Condiciones de operación experimentales para el caso donde el lecho empacado era operado de forma no isotérmica y no adiabática.

$Re_p$	$v_{in}$ [m/s]	$T_{in}$ [°C]
25	0.07321	160
50	0.1464	120
101	0.2928	79

Tabla 2.3: Posiciones axiales de muestreo de temperatura en el lecho empacado del sistema experimental

Posición axial	Distancia [cm]
$Z_1$	0.0
$Z_2$	5.0
$Z_3$	10.1
$Z_4$	14.7
$Z_5$	20.1
$Z_6$	24.0
$Z_7$	27.32
$Z_8$	32.26
$Z_9$	36.86
$Z_{10}$	41.86

Tabla 2.4: Posiciones radiales de muestreo de temperatura en el lecho empacado del sistema experimental

Posición radial	Distancia [cm]
$R_1$	0.0
$R_2$	0.2
$R_3$	0.5
$R_4$	0.8
$R_5$	1.3

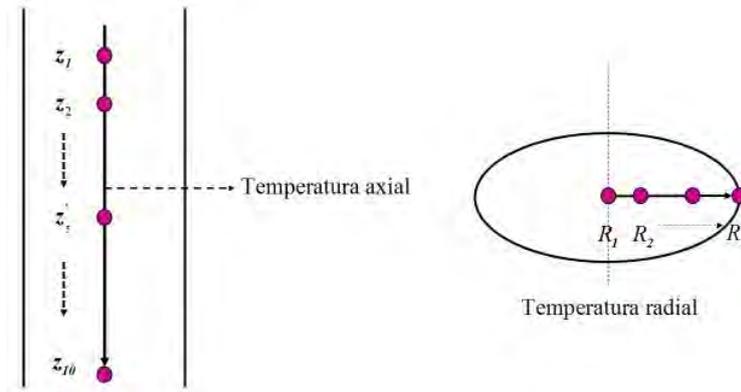


Figura 2.4: Posiciones axiales y radiales de muestreo de temperatura en el lecho empacado del sistema experimental

## 2.2. Simulaciones mediante CFD

### 2.2.1. Construcción de la geometría del sistema

Uno de los principales retos para modelar un determinado sistema mediante CFD es la construcción de la geometría del lecho empacado, esto es esencial para su modelado. Dependiendo del grado de detalle durante la construcción de la geometría, la solución del modelo será más confiable. Sin embargo, la construcción de una geometría como la estudiada aquí, puede afectar la convergencia numérica durante la solución del modelo (Dixon y col., 2011).

Para construir el arreglo geométrico de las partículas de catalizador que se empacan en el lecho presentado en la sección anterior, primero se hizo un bosquejo en papel milimétrico del arreglo geométrico de acuerdo a fotos que se tenían del sistema (Castillo-Araiza, 2004). En el Apéndice A se discute el proceso de construcción de la geometría del lecho empacado.

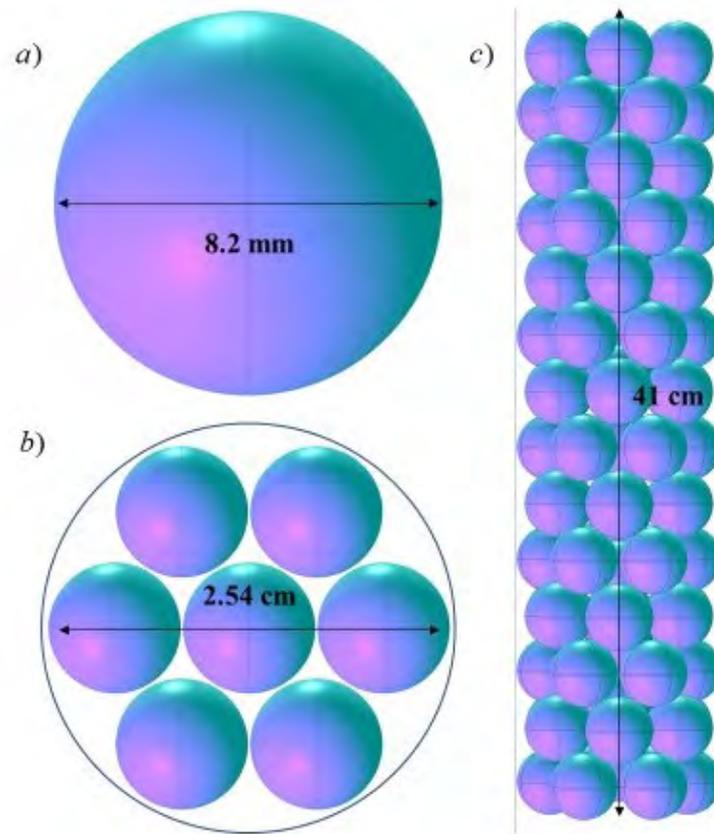


Figura 2.5: Configuración geométrica del sistema. a) Partícula del lecho. b) Arreglo geométrico para cada cama del empaque. c) Arreglo geométrico a lo largo del lecho.

Después se construyó la geometría en forma tridimensional en el software Comsol Multiphysics 5.2 (Figura 2.5). De acuerdo a lo reportado en la literatura (Dixon *y col.*, 2013), con el objetivo de evaluar el efecto del contacto entre partículas en el transporte de cantidad de movimiento y la transferencia de calor, se evaluaron dos tipos de contacto reportados en la literatura, uno donde no se considera contacto entre partículas (Figura 2.6), y otro caso donde se considera un contacto tipo ensamble (Figura 2.7) en el lecho empacado. Los detalles sobre la construcción de la geometría del lecho cuando presenta contacto entre partículas pueden consultarse en el Apéndice A.

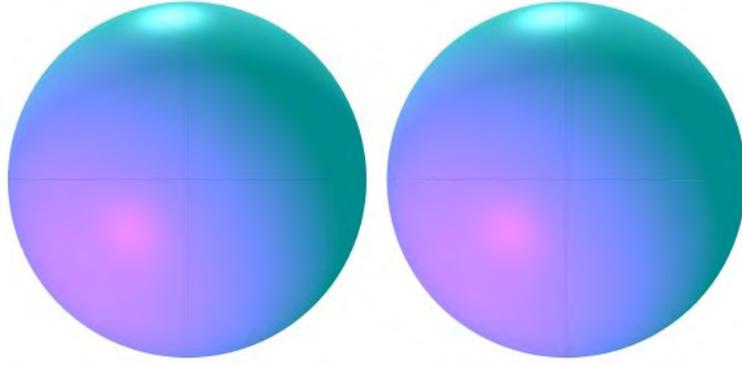


Figura 2.6: Contacto entre partículas tipo brecha (Gap)construido en CFD.

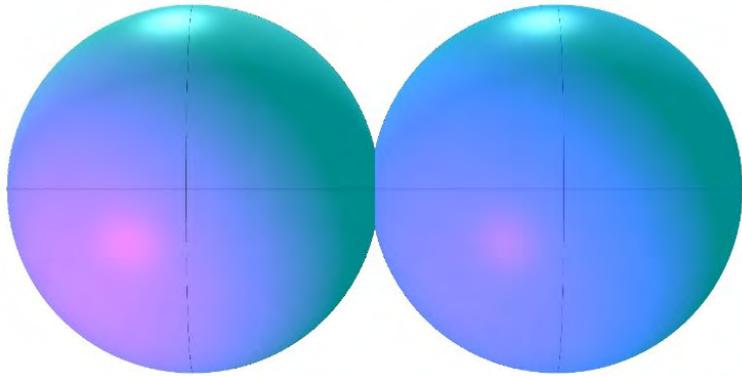


Figura 2.7: Contacto entre partículas tipo ensamble (Overlap)construido en CFD.

Para las simulaciones computacionales que se realizaron en este trabajo de investigación, se construyeron dos geometrías diferentes, la primera en donde se hizo un contacto entre partículas tipo brecha en todas las partículas del lecho y la segunda en donde se hizo un contacto entre partículas tipo ensamble, esto con el fin de evaluar cuáles son los efectos en los resultados que arrojaba CFD (Figuras 2.8 y 2.9).

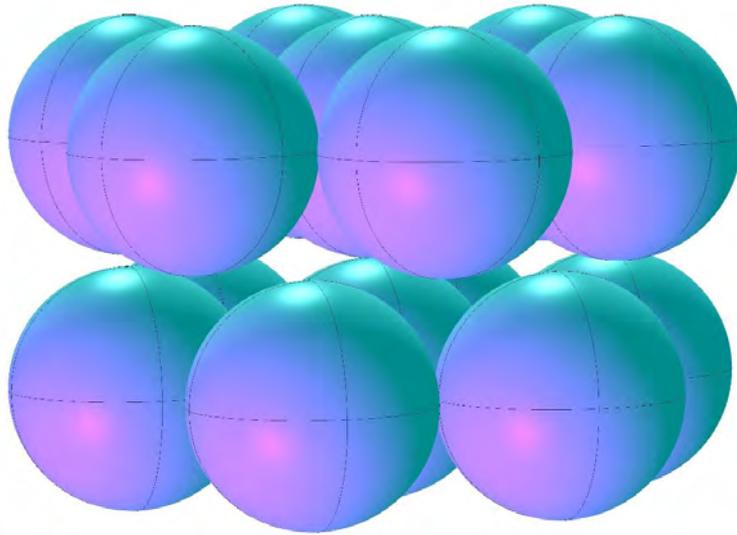


Figura 2.8: Geometría del lecho empacado en CFD sin contacto entre partículas.

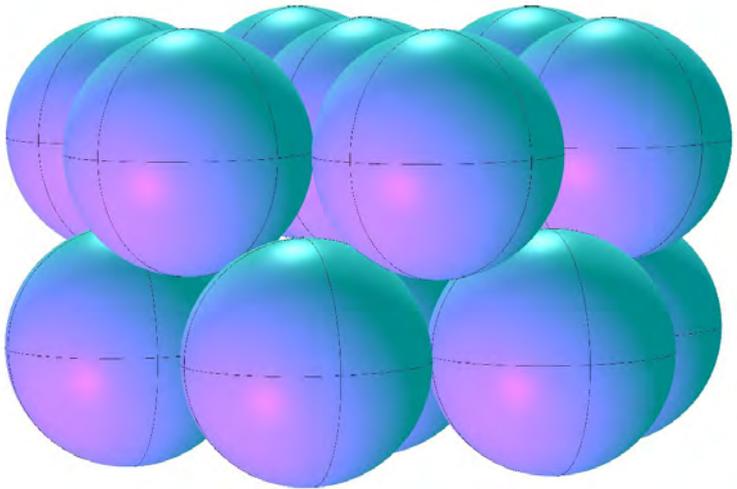


Figura 2.9: Geometría del lecho empacado en CFD con contacto entre partículas del lecho.

### 2.2.2. Construcción de la malla computacional

La construcción de la malla es otro aspecto importante en CFD. La solución de los modelos en Comsol Multiphysics se basa en el método del elemento finito. Este método es una forma de aproximación numérica que permite resolver el modelo (conjunto de ecuaciones diferenciales parciales) que describe al sistema de interés en un medio continuo o dominio. Este método divide el dominio en subdominios conocidos como elementos finitos, a esto se le llama discretización. Cuando dos o más elementos finitos se encuentran en contacto entre sí por medio de puntos de intersección se denominan nodos. A este conjunto de nodos que conforman el dominio se le conoce como malla computacional.

La malla es la forma en la que discretiza el dominio para resolver el modelo en cada uno de los elementos. Como cualquier método numérico basado en una discretización, entre más fina sea la discretización, la aproximación a la solución de las ecuaciones diferenciales capturarán más oscilaciones en sus propiedades del sistema (Figura 2.10), ya que el número de nodos es proporcional al número de ecuaciones diferenciales parciales discretas a resolver. Sin embargo, la construcción de mallas demasiado finas implica un costo computacional elevado, en algunas situaciones un costo computacional no tratable con los recursos computacionales disponibles; así mismo, una malla gruesa tendría una demanda de recursos computacionales menor facilitando la solución del sistema, pero también reduciendo la precisión de la solución.

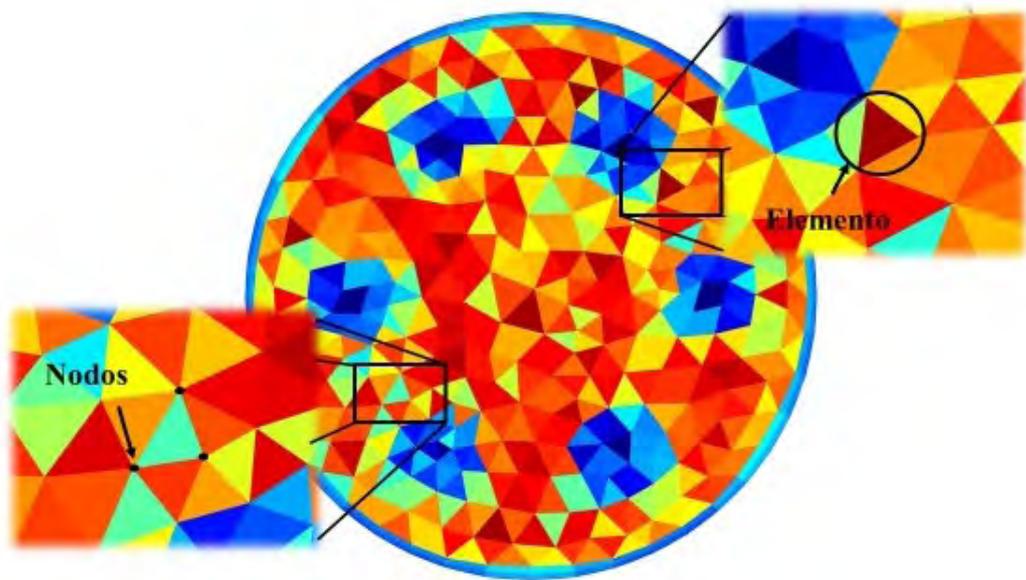


Figura 2.10: Estructura de la malla.

En este trabajo, se llevaron a cabo diversas pruebas de malla para evaluar cuál de éstas permitían obtener una solución aproximada confiable, buscando un equilibrio entre costo computacional y la precisión de la solución. En el Apéndice B se muestran los detalles de las pruebas de independencia de malla.

Comsol Multiphysics cuenta con nueve propuestas de parámetros predefinidos para el mallado; estas propuestas, que normalmente se utilizan para resolver diversas geometrías considerando desde una malla extremadamente fina hasta una malla extremadamente gruesa. Sin embargo, cuando el sistema que se modelará mediante CFD presenta una geometría compleja, es posible modificar algunos parámetros de mallado tales como el tamaño mínimo del elemento, el factor de curvatura, la resolución para regiones estrechas, la tasa máxima de crecimiento del elemento, entre otros parámetros, con el objetivo de obtener resultados precisos en la solución del modelo que describe el sistema de estudio.

El tamaño mínimo del elemento especifica el mínimo permitido en el mallado. Este parámetro se utiliza para prevenir la generación de elementos alrededor de las secciones de la geometría que presentan curvaturas suaves. El factor de curvatura permite aumentar la

resolución en las zonas con curvatura pronunciada. La resolución de las regiones estrechas controla los elementos que se crean en estas regiones de la geometría. La tasa máxima de crecimiento de los elementos reduce el número de elementos de malla especificando la tasa de crecimiento de los elementos pequeños en las superficies hacia los elementos más grandes dentro de la geometría (Figura 2.11). La calidad mínima del elemento o la calidad de malla da una indicación de la relación entre longitud y anchura de sus elementos, para un material homogéneo y una malla regular de calidad cercana a 1 es ideal en su mayoría, pero en elementos finos, la calidad de la malla puede variar muy por debajo de 0.1, lo cual es el caso.

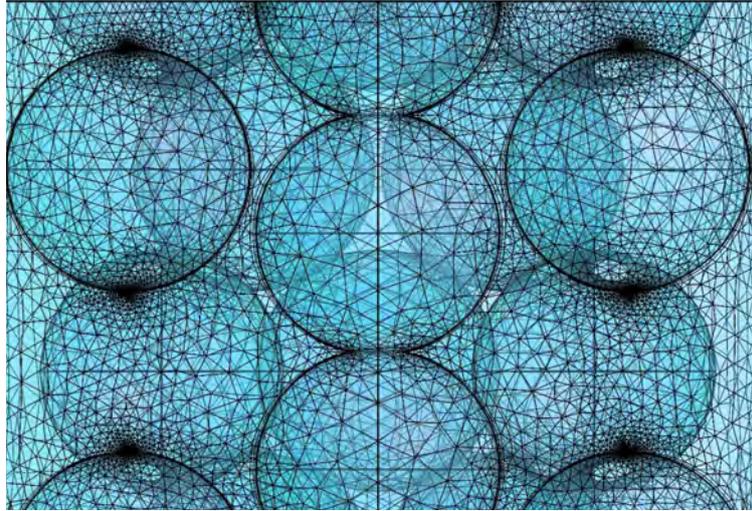


Figura 2.11: Configuración de la malla utilizada.

En este trabajo se seleccionó una malla (malla 5) cuyas características se muestran en la Tabla 2.5. Esta malla fue la utilizada para todas las simulaciones del lecho empacado que se muestran en los Apéndices C-F.

Tabla 2.5: Parámetros de mallado.

Número de elementos totales	11216323
Calidad mínima del elemento	3.64E-4
Volumen de malla [m <sup>2</sup> ]	12.67
Tasa máxima de crecimiento	2.835

### 2.3. Modelos de transporte de cantidad de movimiento y de transporte de calor

Mediante el uso del software Comsol Multiphysics se modela a nivel de CFD la transferencia de cantidad de movimiento y la transferencia de calor en ausencia de reacción

tanto en estado estacionario como en estado transitorio en un lecho empacado que presenta una relación de diámetro de tubo partícula igual a 3.175 que opera de dos formas: (1) adiabática y (2) no isotérmica y no adiabática. El modelado está dado por las ecuaciones de continuidad (2.1), la ecuación de Navier-Stokes (2.2) y la ecuación de transporte de calor (2.3):

$$\underbrace{\nabla \cdot \mathbf{v}}_{\substack{\text{Razón de cambio} \\ \text{en el tiempo de} \\ \text{la masa de un cuerpo}}} = 0 \quad (2.1)$$

$$\underbrace{\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}}_{\substack{\text{Ac. de cant.} \\ \text{de movimiento}}} + \underbrace{\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}}_{\text{Fuerzas inerciales}} = \underbrace{-\nabla P}_{\substack{\text{Fuerzas superficiales} \\ \text{normales}}} + \underbrace{\mu \nabla^2 \mathbf{v}}_{\substack{\text{Fuerzas superficiales} \\ \text{tangenciales}}} + \underbrace{\rho \mathbf{g}}_{\text{Fuerzas volumétricas}} \quad (2.2)$$

$$\underbrace{\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{\substack{\text{Ac. en el tiempo} \\ \text{de energía térmica}}} + \underbrace{\rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T}_{\text{Convección}} = \underbrace{\nabla \cdot (k \nabla^2 T)}_{\text{Conducción}} + \underbrace{\Phi}_{\substack{\text{Generación o consumo} \\ \text{de energía térmica}}} \quad (2.3)$$

En donde se suponen la siguientes simplificaciones que se mencionan a continuación: Transporte de cantidad de movimiento( Ec. 2.1 y 2.2):

- ◇ Fluido newtoniano.
- ◇ Fluido incompresible.
- ◇ Fluido con viscosidad constante.
- ◇ Régimen de flujo en estado estacionario.
- ◇ Movimiento debido a un gradiente de presión.

Transporte de calor en el lecho adiabático:

- ◇ Flujo incompresible.
- ◇ Conductividad térmica y calor específico de la fase sólida y la fase fluida constantes.
- ◇ Régimen de flujo en estado estacionario y no estacionario.
- ◇ Aislamiento térmico en la superficie del lecho empacado.

Transporte de calor en el lecho no isotérmico y no adiabático:

- ◇ Flujo incompresible.
- ◇ Conductividad térmica y calor específico de la fase sólida y la fase fluida constantes.
- ◇ Régimen de flujo en estado estacionario.
- ◇ Fuente de calentamiento en la superficie del lecho empacado.

Este modelo se presenta en forma adimensional, utilizando las siguientes variables y números adimensionales:

Tabla 2.6: Variables adimensionales.

Variable adimensional	Definición
$\nabla^* = l\nabla$	Nabla adimensional
$\mathbf{v}^* = \mathbf{v}/v_{ref}$	Velocidad adimensional
$P_{ref} = \mu v_{ref}/l$	Presión de referencia
$P^* = P/P_{ref}$	Presión adimensional
$Fr = \rho g l^2 / \mu v_{ref}$	Número de Froude
$Re = \rho l v_{ref} / \mu$	Número de Reynolds
$T_f^* = T_f / T_{in}$	Temperatura del fluido adimensional
$T_s^* = T_s / T_{in}$	Temperatura del sólido adimensional
$\alpha = k_f / \rho_f C p_f$	Difusividad térmica del fluido
$\kappa^* = k_s / k_f$	Relación de conductividad térmica sólido/fluido
$\nu = \rho / \mu$	Viscosidad cinemática
$\gamma = \alpha \rho_s C p_s / k_f$	Variable adimensional
$\tau = t \alpha / l^2$	Tiempo adimensional
$Pe = Re \nu / \alpha$	Número de Péclet

Donde  $l$  es la longitud de referencia, que para este sistema se eligió el diámetro de lecho,  $v_{ref}$  es la velocidad de referencia, en este caso la velocidad de entrada,  $P_{ref}$  es la presión de referencia. Al sustituir estas variables y números adimensionales en las ecuaciones 2.1-2.3, se obtienen las siguientes ecuaciones adimensionales:

Para la fase fluida:

$$\nabla^* \cdot \mathbf{v}^* = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}^*}{\partial \tau} + Re \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = -\nabla^* P^* + \nabla^{*2} \mathbf{v}^* - Fr \quad (2.5)$$

$$Pe \frac{\partial T_f^*}{\partial \tau} + \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* T_f^* = \nabla^{*2} T_f^* \quad (2.6)$$

Para la fase sólida:

$$\gamma \frac{\partial T_s^*}{\partial \tau} = \kappa^* \nabla^{*2} T_s^* \quad (2.7)$$

De esta forma, el modelo queda en función del número de Reynolds, por lo que a partir de las condiciones de operación experimentales las condiciones de operación recalculadas en función de este parámetro para ser alimentadas en las simulaciones computacionales se muestran en las Tablas 2.7 y 2.8.

Tabla 2.7: Condiciones de operación para simulaciones computacionales del caso adiabático.

Re	$v_{in}$ [m/s]	$q$ [W/m <sup>2</sup> ]	$T_s$ [°C]
264	0.1569	13876	185
526	0.3127	19357	138
1054	0.6272	26758	98
1583	0.9417	26758	75
2090	1.2431	30826	68

Tabla 2.8: Condiciones de operación para simulaciones computacionales del caso no isotérmico y no adiabático.

Re	$v_{in}$ [m/s]	$T_{in}$ [°C]
123	0.07321	160
246	0.1464	120
492	0.2928	79

En las Tablas 2.10 y 2.11 se presentan las condiciones de frontera para los casos que se estudian en este proyecto de investigación. Las simulaciones computacionales se alimentaron con los datos experimentales reportados por [Castillo-Araiza \(2004\)](#). Para los dos casos de estudio que se modelan en este trabajo, adiabático y no isotérmico y no adiabático, se conoce la velocidad de entrada al lecho, así como la temperatura de entrada y de salida del sistema. Para el caso adiabático, cuando el radio del tubo es igual a R (Tabla 2.10) se considera que hay un aislamiento térmico que permite que el lecho opere de forma adiabática, para el caso no isotérmico y no adiabático, cuando r es igual a R la temperatura es función de la longitud del lecho empacado (Tabla 2.11), la temperatura de la pared del lecho se describe con un polinomio (Ec. 2.8) que ajusta las mediciones experimentales. La Tabla 2.9 presenta los coeficientes del polinomio que se utilizó en las simulaciones para este caso.

$$T^* = a(z)^2 + b(z) + c \quad (2.8)$$

Tabla 2.9: Coeficientes de ajuste de polinomio para el caso no isotérmico y no adiabático.

Re	a	b	c
123	-0.0062	0.1158	1.0545
246	-0.0069	0.1421	0.9653
492	-0.0057	0.1491	0.9563

Tabla 2.10: Condiciones de frontera en el lecho empacado.

Condición de frontera	Mecánica de fluidos	Lecho adiabático	Lecho no isotérmico y no adiabático
$z = 0$	$\mathbf{v}^* = v_{in}$	$T^*$	$T^*$
$z = L/l$	$\mathbf{n} \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = 0$	$T^* = T_{out}$	$T^* = T_{in}$
$r = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla^* T^* = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla^* T^* = 0$
$r = r^*/l$	$\mathbf{v}^* = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla^* T^* = 0$	$T^* = f(z)$
$t = 0$	$\mathbf{v}^* = 0$	$T^* = 1$	$T^* = 1$

Tabla 2.11: Condiciones de frontera interfase sólido-fluido.

Condición de frontera	Mecánica de fluidos	Lecho adiabático	Lecho no isotérmico y no adiabático
$r = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla^* \mathbf{v}^* = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla^* T^* = 0$	$\mathbf{n} \cdot \nabla^* T^* = 0$
$r = R/l$	$\mathbf{v}^* = 0$	$T_s^* = T_f^*$	$T_s^* = T_f^*$
$r = R/l$	$\mathbf{v}^* = 0$	$\mathbf{n}_{sf} \cdot \mathbf{q}_s = \mathbf{n}_{sf} \cdot \mathbf{q}_f$	$\mathbf{n}_{sf} \cdot \mathbf{q}_s = \mathbf{n}_{sf} \cdot \mathbf{q}_f$
$t = 0$	$\mathbf{v}^* = 0$	$T^* = 1$	$T^* = 1$

Así mismo, los parámetros utilizados en las simulaciones computacionales se presentan en la Tabla 2.12.

Tabla 2.12: Parámetros utilizados en las simulaciones computacionales.

$\rho_s$	Densidad del aire[kg/m <sup>3</sup> ]	1.205
$\mathbf{g}$	Constante de gravedad[m/s <sup>2</sup> ]	9.81
$l$	Diámetro del lecho empacado (longitud característica)	0.0254
$L$	Longitud del lecho empacado adimensional	16.142
$R$	Radio de partícula adimensional	0.15748
$r$	Radio del lecho empacado adimensional	0.5
$\nu_f$	Viscosidad cinemática del aire[m <sup>2</sup> /s]	1.511E-5
$k_f$	Conductividad térmica del aire[W/m K]	0.0257
$k_s$	Conductividad térmica de la partícula[W/m K]	3
$Cp_f$	Calor específico del aire[J/kg K]	1005
$\alpha$	Difusividad térmica[m <sup>2</sup> /s]	2.1222E-5
$\kappa$	Relación de conductividad térmica partícula/aire adimensional	194.55

Todas las figuras obtenidas a partir de las simulaciones computacionales realizadas en este trabajo de investigación, la información sobre sus condiciones de operación, así

como características particulares de cada figura se muestran en la sección de Apéndices B-F.

## **2.4. Comsol Multiphysics y sistema de cómputo**

Las simulaciones computacionales se llevaron a cabo en un equipo Dell Workstation PowerEdge T630 con un procesador Intel Xenon CPU E5-2640 v3 2.60 GHz 112 GB de memoria RAM, el software comercial utilizado para la solución del modelo fue Comsol Multiphysics versión 5.2.



# Capítulo 3

## Dinámica de fluidos

### 3.1. Generalidades

Para el lecho empacado que se estudia en este trabajo es importante caracterizar cómo se desarrolla el flujo y cómo es la transición a través de los diferentes regímenes de flujo, desde el laminar al turbulento, así como conocer dónde se llevan a cabo y de qué dependen estos cambios, ya que estos tienen un impacto en los distintos mecanismos de transferencia de calor que tienen lugar en el sistema. En esta caracterización del flujo, un análisis de la magnitud del número de Reynolds, que describe la relación de las fuerzas inerciales sobre las fuerzas superficiales tangenciales y viscosas, permite clasificar macroscópicamente el tipo del flujo (Bird *y col.*, 2001).

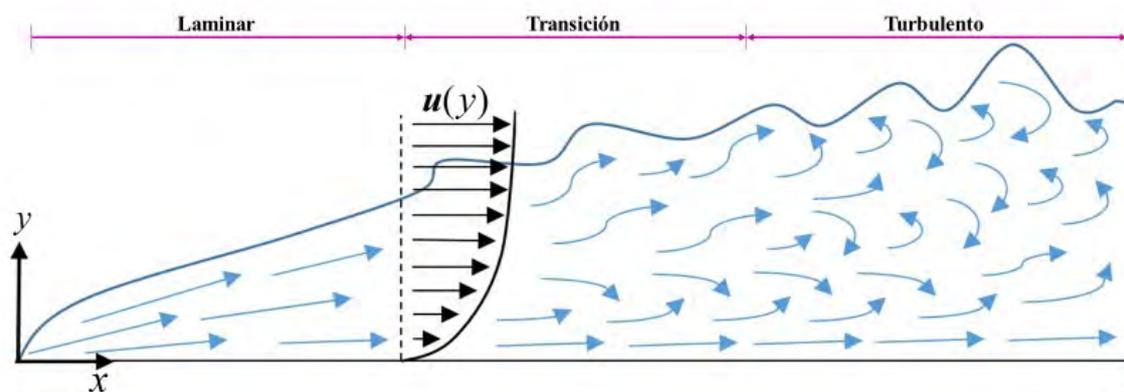


Figura 3.1: Esquema del desarrollo de los regímenes de flujo

Para tuberías en las cuales solo circula flujo libre, la clasificación y caracterización del tipo de flujo se ha llevado a cabo exhaustivamente, pero cuando se trata de lechos

empacados esta clasificación y su caracterización es complicada ya que la transición de un régimen laminar al turbulento ocurre en un amplio intervalo de números de Reynolds (Nijemeisland y Dixon, 2004; Wehinger, 2016), y depende del tamaño de partícula y su estructura geométrica.

### 3.1.1. Turbulencia

En el régimen laminar, el patrón del flujo se puede predecir con la ecuación de Navier-Stokes, sin embargo, conforme aumenta el número de Reynolds el régimen de flujo cambia de laminar a turbulento, donde para predecir el patrón de flujo se requiere de otro tipo de aproximaciones (Bird y col., 2001; Slattey, 1999). En esta sección se describen conceptos sobre la turbulencia y las aproximaciones que se han utilizado en la literatura para su descripción.

La turbulencia se relaciona con el movimiento caótico de un fluido, el cual presenta trayectorias sinuosas e irregulares formando remolinos (Davidson, 2004; Pope, 2012; Wilcox, 1993). Este tipo de flujo se presenta cuando las fuerzas inerciales son dominantes sobre las fuerzas viscosas. En el régimen de flujo turbulento, la velocidad puntual difiere con la velocidad promedio en cuanto a magnitud y dirección en función del tiempo (Davidson, 2004), no obstante, los perfiles de velocidad en régimen turbulento normalmente se representan en su forma promedio, ya que para aplicaciones ingenieriles estos valores contienen la información que se necesita de manera inmediata para describir el perfil de velocidad y su impacto en los distintos fenómenos de transporte de calor y masa tanto en operaciones unitarias como en reactores.

#### 3.1.1.1. Ecuaciones de Reynolds Navier-Stokes promediadas(RANS)

En el régimen laminar las suposiciones de que algunas propiedades del flujo son constantes pueden ser válidas, pero una vez que el flujo se convierte en turbulento todas las cantidades fluctúan en tiempo y espacio. Actualmente se tienen limitaciones computacionales para obtener información detallada de estas fluctuaciones. Una representación promedio suele proveer suficiente información acerca del flujo dividiéndolo en valores promediados y en sus fluctuaciones para cualquier cantidad escalar, la cual muestra su variación en espacio-tiempo.

La descomposición de la velocidad en sus componentes promedio y desviaciones en el tiempo y su implementación en la ecuación de Navier-Stokes promediada (Ec. 3.1) da origen a las ecuaciones RANS, por sus siglas en inglés (*Reynolds Average Navier-Stokes Equations*), donde lo único diferente con respecto a la ecuación de Navier-Stokes sin promediar en el tiempo es la aparición del último término en el lado derecho de esta ecuación. Este término se le conoce como tensor de esfuerzos de Reynolds, y considera la interacción entre las fluctuaciones del campo de velocidad. Por lo que para determinar las fluctuaciones es necesario determinar el campo de velocidad y el tensor de esfuerzos de Reynolds, siendo éste un problema de cerradura. Boussinesq en 1877, propuso una analogía a la ley de Newton de la viscosidad para resolver este problema de cerradura. Prandtl en 1925, propuso una teoría para resolver la ecuación de Navier-Stokes promediada sin tener que lidiar con la complejidad del problema de cerradura proponiendo el concepto de la capa límite y una longitud del mezclado.

$$\rho \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\bar{\mathbf{v}} \bar{\mathbf{v}}) = -\nabla \bar{P} + \rho \mathbf{g} + \mu \nabla^2 \bar{\mathbf{v}} - \rho \nabla \cdot \overline{\mathbf{v}' \mathbf{v}'^T} \quad (3.1)$$

Esto significa que para obtener las características principales del flujo se requiere información de la micro escala del flujo, por esta razón se debe seleccionar cuidadosamente el enfoque del modelo con el que se pretende estudiar la mecánica de fluidos dentro del sistema.

Existen diversas aproximaciones para estudiar la turbulencia, todas ellas parten de las ecuaciones de Navier-Stokes (Bird *y col.*, 2001; Davidson, 2004; Pope, 2012; Slattery, 1999; Wilcox, 1993). Estas aproximaciones utilizan términos adicionales para describir el comportamiento de la viscosidad turbulenta como función de la generación de energía y su disipación. Cuando estas ecuaciones se expresan como una ecuación algebraica se les conoce como modelos de cero ecuaciones (*zero-equation models*), cuando se expresan como ecuaciones diferenciales parciales se les refiere como modelos de una ecuación o modelo de dos ecuaciones (*one-equation models o two equation models*), dependiendo del número de ecuaciones diferenciales parciales que componen el modelo. Dentro de las aproximaciones de turbulencia utilizando las ecuaciones RANS se tienen varios modelos, los cuales se describen a continuación.

### 3.1.1.2. Modelo Spalart-Allmaras

El modelo Spalart-Allmaras resuelve el campo de velocidad en función de la viscosidad turbulenta sin hacer uso de funciones de pared. El modelo dado por la Ec. 3.2, fue originalmente desarrollado para aplicación en aerodinámica (Pope, 2012).

$$\frac{\bar{D}v^{(t)}}{Dt} = \nabla \cdot \left( \frac{v^{(t)}}{\sigma_v} \nabla v^{(t)} \right) + S_v \quad (3.2)$$

Donde  $\sigma_v = 2/3$  y el término fuente  $S_v$  es una función de la viscosidad laminar y la viscosidad turbulenta, de la vorticidad y de la distancia a la pared más cercana. Diversos estudios reportados en la literatura muestran que este modelo tiene problemas de precisión al momento de calcular el campo de velocidad para flujos por arrastre. Una de sus ventajas es que presenta estabilidad numérica.

### 3.1.1.3. Modelo $\kappa-\epsilon$

El modelo  $\kappa - \epsilon$  es el más utilizado en CFD para simular las características principales del flujo turbulento. Este modelo, dado por las Ec. 3.3 y 3.4, está conformado por dos ecuaciones que describen la energía cinética turbulenta y la disipación de la energía.

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla \kappa = \nabla \cdot (v^{(t)} \nabla \kappa) + G - \epsilon \quad (3.3)$$

$$\frac{\bar{D}\epsilon}{Dt} = \nabla \cdot \left( \frac{v^{(t)}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon \right) + C_{\epsilon 1} \frac{G_\epsilon}{\kappa} - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{\kappa} \quad (3.4)$$

cuyas constantes están definidas como:

$$C_{\epsilon 1} = 1.44, ; C_{\epsilon 2} = 1.92; \sigma_\epsilon = 1.3 \quad (3.5)$$

las cuales fueron obtenidas experimentalmente bajo condiciones específicas de fluido y el tipo de flujo.

Este modelo fue diseñado principalmente para el estudio de flujos con caídas de presión relativamente pequeñas y flujos con recirculación; sin embargo, al usarlo en el estudio de sistemas que operan con caídas de presión apreciables o geometrías confinadas, suele tener problemas de precisión en las zonas cercanas a la pared ya que una de las suposiciones más importantes que se asume en este modelo es que la viscosidad turbulenta es isotrópa, esto quiere decir que la relación entre el esfuerzo de Reynolds y la tasa de deformación es la misma en todas las direcciones (Pope, 2012).

#### 3.1.1.4. Modelo $\kappa - \omega$

Así como el modelo  $\kappa - \epsilon$ , el modelo  $\kappa - \omega$  también está constituido por dos ecuaciones, una que describe la energía cinética turbulenta  $\kappa$ , la cual está dada por la Ec. 3.3, y la segunda ecuación que describe la tasa de disipación de energía cinética específica o frecuencia de turbulencia  $\omega$  ( $\omega = \epsilon/\kappa$ ) dada por la Ec. 3.6, la cual tiene lugar a nivel de la micro escala mientras que la tasa de disipación es la tasa de transferencia de energía turbulenta que se transfiere a la micro escala.

$$\frac{\bar{D}\omega}{Dt} = \nabla \cdot \left( \frac{v^{(t)}}{\sigma_\omega} \nabla \omega \right) + C_{w1} \frac{G\omega}{\kappa} - C_{w2}\omega^2 \quad (3.6)$$

A diferencia del modelo  $\kappa - \epsilon$ , el modelo  $\kappa - \omega$  presenta una mayor precisión en la estimación del campo de velocidad en las regiones cercanas a la pared, así también este modelo se utiliza de manera confiable en sistemas que operan bajo gradientes de presión apreciables, sin embargo, a un costo computacional mayor (Pope, 2012).

#### 3.1.1.5. Modelo SST

El modelo de turbulencia  $\kappa - \omega$  presenta buenos resultados, incluso mejor que el modelo  $\kappa - \epsilon$  en las zonas cercanas a la pared. Sin embargo,  $\kappa - \omega$  ha mostrado que el calor de  $\omega$  lejos de las regiones cercanas a la pared se ve fuertemente influenciado por la corriente libre del sistema. Por otro lado, el modelo  $\kappa - \epsilon$  tiene un comportamiento superior a  $\kappa - \omega$  en las regiones alejadas de las capas de flujo cercanas a las fronteras, pero inferior en las zonas cercanas a las frontera. Para incluir las mejores características de cada modelo se propuso combinar diferentes elementos de ambos modelos para formar un nuevo modelo de turbulencia de dos ecuaciones conocido como SST (Shear-Stress Transport, por sus siglas en inglés)(Ec. 3.7 y 3.8).

$$\rho (v \cdot \nabla) \kappa = \nabla \cdot [(\mu + \mu^{(t)}\sigma_\kappa) \nabla \kappa] + P - \beta_0^* \rho \omega \kappa \quad (3.7)$$

$$\rho (v \cdot \nabla) \omega = \nabla \cdot [(\mu + \mu^{(t)}\sigma_\omega) \nabla \omega] + \frac{\gamma}{\mu^{(t)}} \rho P - \rho \beta_0^* \omega^2 + 2(1 - f_{v1}) \frac{\sigma_\omega 2\rho}{\omega} \quad (3.8)$$

Este modelo permite obtener resultados computacionales más precisos que  $\kappa - \epsilon$  y  $\kappa - \omega$ , y puede utilizarse en el estudio de sistemas que presentan geometrías intrincadas y que operan bajo gradientes de presión apreciables, pero a un costo computacional mucho más elevado (Pope, 2012). Este modelo calcula la viscosidad turbulenta basado únicamente en la velocidad local del fluido y la distancia a la pared más próxima.

### 3.1.1.6. Direct Numerical Simulation (DNS)

Las ecuaciones de observación en su forma diferencial referidas a la ecuación de Navier-Stokes pueden ser resueltas numéricamente para predecir la transición, así como la evolución de la turbulencia, de hecho, la ecuación de Navier-Stokes puede utilizarse para predecir el campo de velocidad para cualquier escala de la turbulencia, a esta aproximación se le conoce como simulaciones numéricas directas o DNS por sus siglas en inglés. Su objetivo es resolver la ecuación de Navier-Stokes para todas las escalas de turbulencia en un intervalo de tiempo en el que la propiedades del fluido alcancen un equilibrio estadístico. La longitud características de los remolinos más pequeños,  $\eta$ , se estima de la siguiente forma:

$$\eta = \mathcal{O}(Re^{-3/4}l^*) \quad (3.9)$$

Donde  $l^*$  es el tamaño de los remolinos más grandes. Conforme el número de Reynolds incrementa, el tamaño  $\eta$  se vuelve cada vez más pequeño, por lo que la malla debe refinarse de tal manera que el tamaño mínimo del elemento sea del orden de magnitud de  $\eta$ . Sin embargo, a la fecha no existe la tecnología computacional que permita resolver DNS para todas las escalas de la turbulencia para cualquier sistema (Davidson, 2004; Pope, 2012; Wilcox, 1993).

### 3.1.1.7. Large Eddy Simulation (LES)

LES es una aproximación que se encuentra entre la aproximación de DNS, donde todas las escalas de la turbulencia pueden ser computadas de manera directa a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes y la aproximación de las RANS. En la aproximación de LES los fenómenos en la micro escala se filtran a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes, donde solo se resuelven para los movimientos de la macro escala de la turbulencia los cuales en su mayoría son responsables del transporte de cantidad de movimiento y energía y que son altamente dependientes de las condiciones de flujo y de la geometría considerada (Davidson, 2004; Pope, 2012; Wilcox, 1993).

## 3.2. Evaluación de los modelos de turbulencia y Navier-Stokes

En este trabajo se evaluaron distintos modelos para describir el campo de velocidad en el lecho empacado descrito en el capítulo 2.

Primero, se realizaron simulaciones de prueba en un lecho empacado de 8 cm de altura utilizando las condiciones de operación reportadas en la Tabla 2.7 para todos los casos y donde cuya geometría no presentaba contacto de partículas axial (Apéndice A). El primer modelo de turbulencia que se utilizó es el modelo de turbulencia  $\kappa - \epsilon$ , ya que en la literatura (Dixon y col., 2013; Guardo y col., 2005; Malang y col., 2015; Nijemeisland y Dixon, 2004) es el modelo más utilizado y aparentemente el que mejores proporciona resultados cuando describen los perfiles de velocidad en un lecho empacado. En la Figura 3.2 se presentan las líneas de corriente asociadas a la velocidad obtenidas con el modelo  $\kappa - \epsilon$  a un  $Re_p$  de 761.

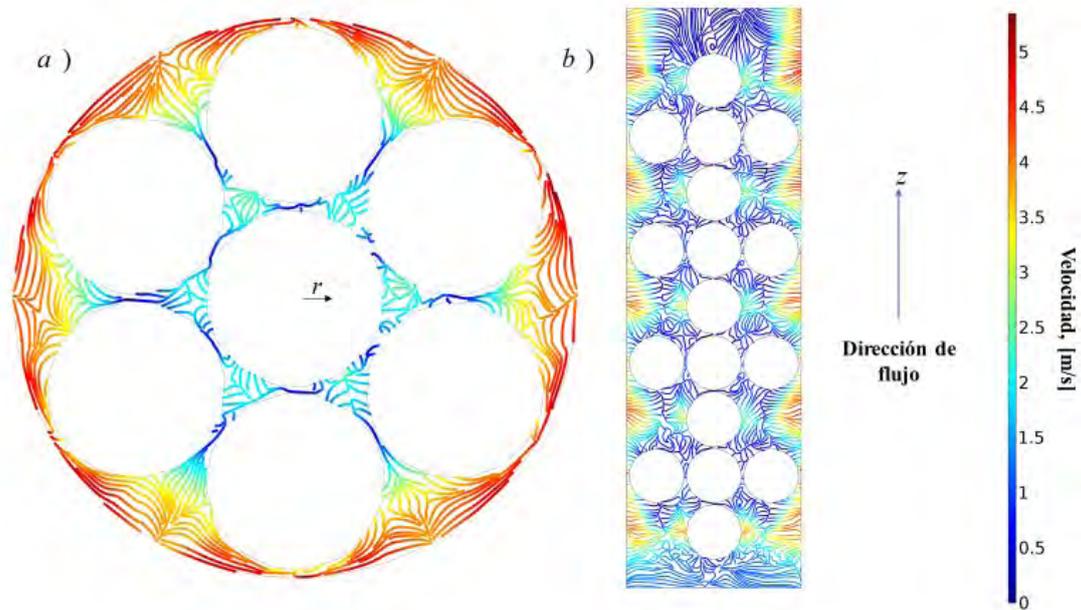


Figura 3.2: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con el modelo  $\kappa - \epsilon$  para un  $Re_p=761$  a) corte transversal (4 cm) y b) corte frontal ( $r=0$ ). Geometría 8 cm. Malla 1.

Estas simulaciones son cuestionables ya que la velocidad máxima del sistema se encontraban en la superficie del tubo, donde la velocidad debía ser cero. Este resultado llevó a evaluar otros modelos de turbulencia para describir el campo de velocidad, donde se buscaba tener un modelo de turbulencia que permitiera mejorar el tiempo de computo y que además predijera resultados confiables.

En ese sentido, se evaluó el modelo de turbulencia SST que fue utilizado por [Dixon y col. \(2011\)](#) en su estudio para describir el flujo alrededor de una esfera. En las Figuras 3.3 se muestran las líneas de corriente asociadas al campo de velocidad obtenidas con el modelo de turbulencia SST, donde se observa que en comparación con los resultados obtenidos con el modelo  $\kappa - \epsilon$ , se obtienen perfiles de velocidad similares a aquellos que se han observado experimentalmente para esta clase de sistemas ([Dixon y col., 2013](#); [Wehinger, 2016](#)); es decir, la velocidad máxima del sistema se encuentra en las zonas intersticiales, donde los esfuerzos de corte son mínimos. En la pared, la velocidad tiende a cero, ya que es en donde los esfuerzos cortantes tienden a ser máximos.

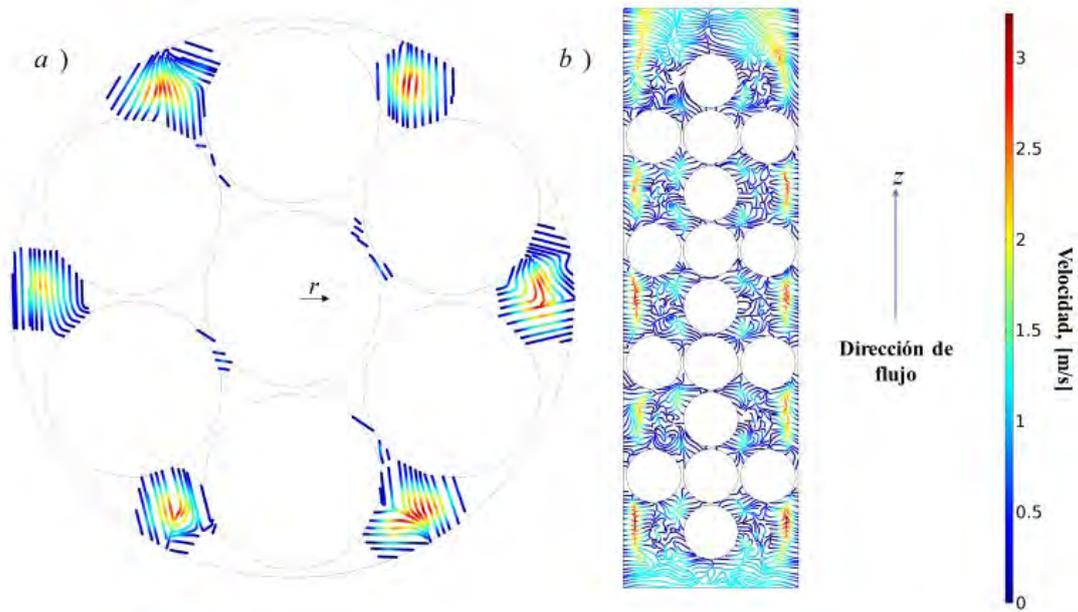


Figura 3.3: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con el modelo SST para un  $Re_p=761$  a) corte transversal (4 cm) y b) corte frontal ( $r=0$ ). Geometría 8 cm. Malla 1.

Las diferencias que se muestran en las Figuras 3.2 y 3.3 entre el modelo  $\kappa - \epsilon$  y el modelo SST, se atribuye principalmente a que en Comsol Multiphysics 5.2 el modelo  $\kappa - \epsilon$  requiere funciones de pared que generen menos incertidumbre (Nijemeisland y Dixon, 2001). Estudios han reportado que el modelo  $\kappa - \epsilon$  no muestra buenos resultados cuando se tienen geometrías con superficies curvas, como la de éste estudio (Malang y col., 2015). Por otra parte, el modelo SST requiere de un costo computacional intratable en nuestro grupo de investigación para resolver todas las escalas de la turbulencia. A las condiciones que se realizaron las simulaciones, esencialmente de mallado, el modelo SST no predice de manera precisa el campo de velocidad en las zonas intersticiales del empaque.

Otro ejercicio que se hizo fue evaluar la ecuación de Navier-Stokes y comparar los resultados con los predichos con el modelo SST (Figura 3.4). Al comparar las simulaciones computacionales, la solución del modelo SST predice perfiles de velocidad idénticos a los predichos con la ecuación de Navier-Stokes (Figuras 3.3 y 3.4) a distintos  $Re_p$  (96-761).

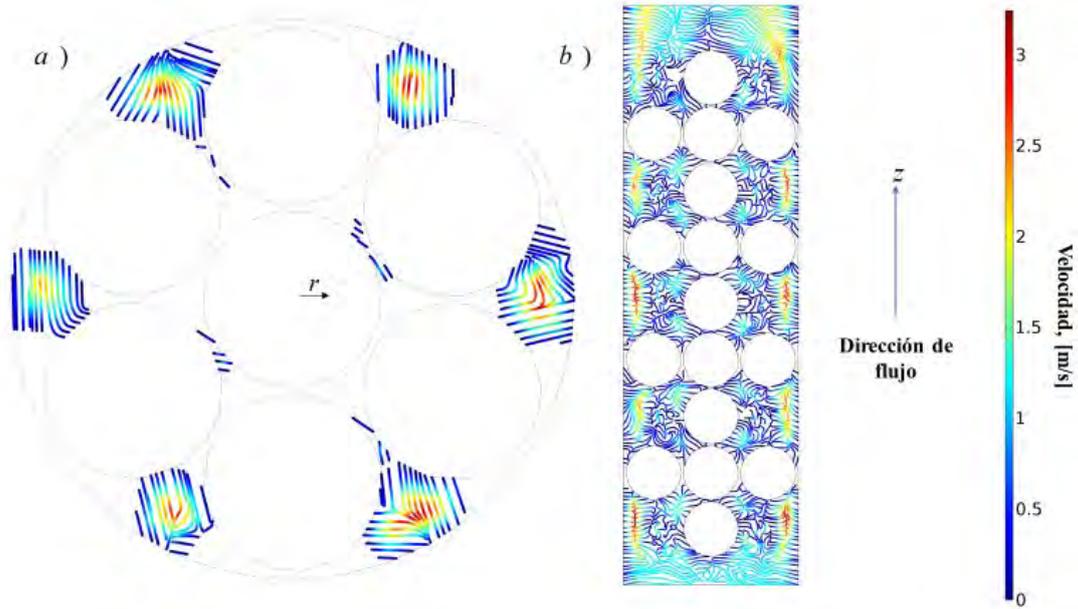


Figura 3.4: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con la ecuación de Navier-Stokes para un  $Re_p=761$  a) corte transversal (4 cm) y b) corte frontal ( $r=0$ ). Geometría 8 cm. Malla 1.

Esto, al no estar en escalas de turbulencia, pareciese cuestionable, ya que el rango de  $Re$  que se estudia aquí (Castillo-Araiza *et al.*, 2007; Nijemeisland y Dixon, 2004), se ha reportado como régimen de flujo turbulento para lechos empacados con estas características, no obstante, todas las aproximaciones de los modelos de turbulencia parten de la ecuación de Navier-Stokes; es por eso que los estos resultados son válidos (Davidson, 2004; Pope, 2012; Wilcox, 1993), aunque esto se requiere revisar en estudios a futuro. Por ahora, es importante comentar que el modelo de turbulencia SST y la ecuación de Navier-Stokes describieron cualitativamente y cuantitativamente el campo de velocidad; sin embargo, el tiempo de cómputo para resolver el sistema con la ecuación de Navier-Stokes era una tercera parte del tiempo de computo que se requería para resolver el sistema con el modelo SST. Por estas razones, para realizar el estudio de la dinámica del fluido en el lecho empacado y para estudiar su impacto en la transferencia de calor se utilizó la ecuación de Navier-Stokes.

### 3.3. Campo de velocidad en el lecho empacado

En la Figura 3.5 se muestra un corte del lecho empacado a una longitud de 0.222 cm para un RE de 2090: en este corte se presenta el campo de velocidad utilizando una malla con las características descritas en el capítulo 2. En esta figura se observa que la velocidad cerca de las superficies sólidas, empaque y pared del lecho, tienden a cero debido a los efectos de no deslizamiento. No obstante, también se observa la presencia de zonas de alta velocidad, cerca de la pared del tubo y a un diámetro de partícula de la pared, en magnitudes similares a las que se han observado experimentalmente (Castillo-Araiza,

2004). La mayor velocidad es alrededor de 5 veces la velocidad superficial de la entrada del lecho.

En la Figura 3.6 se muestran las líneas de corriente asociadas al campo de velocidad a un corte a una longitud de 0.222 cm para un Re de 2090. Las líneas de corriente muestran el patrón de flujo en el lecho empacado. Éstas, a pesar de que tienen un patrón ordenado, presentan ligeras deformaciones debido a los cambios en la contracción y expansión de intersticios dentro de la geometría del empaque. Incluso se observan zonas donde se forman remolinos, dando como resultado una disminución de la magnitud de la velocidad en estas regiones.

En la Figura 3.7 se muestran las líneas de corriente asociadas al campo de vorticidad para un Re de 2090. Aquí se observa que los vórtices se establecen esencialmente en las zonas intersticiales; sin embargo, al observar las zonas cercanas a las superficies de las partículas y de la pared del tubo, se tienen los valores máximos de la vorticidad, ya que en estas superficies es donde se origina la vorticidad para después dispersarse a las zonas intersticiales.

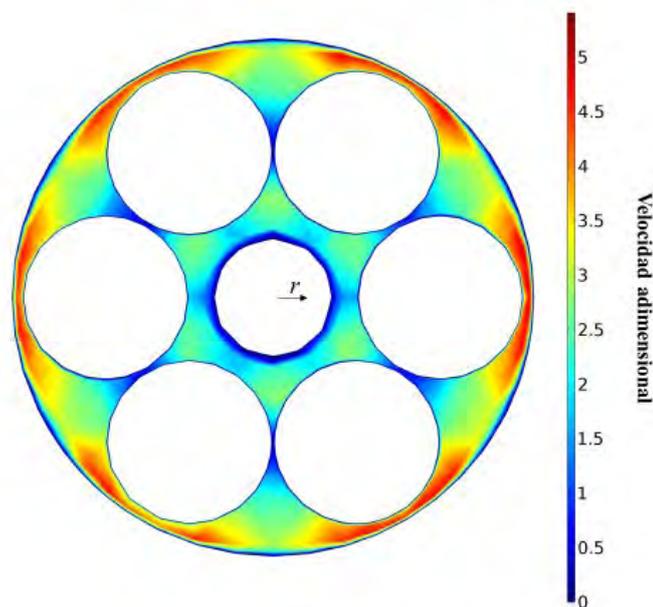


Figura 3.5: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=2090$ .  $V_{in}=1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

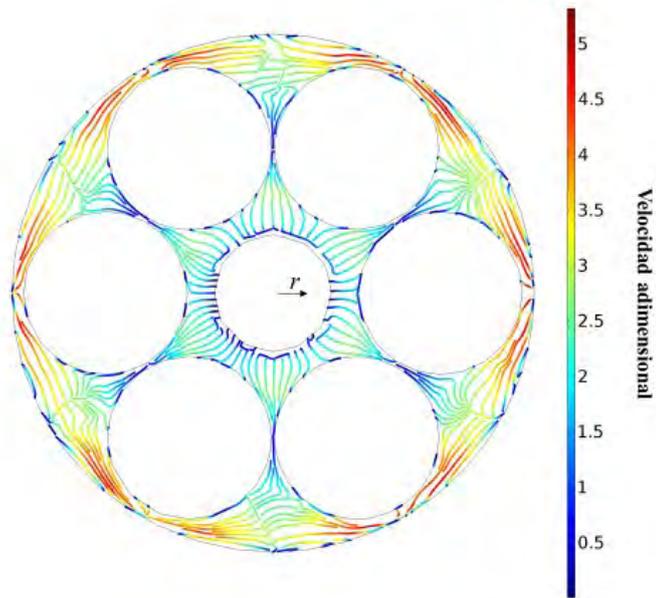


Figura 3.6: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=2090$ .  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

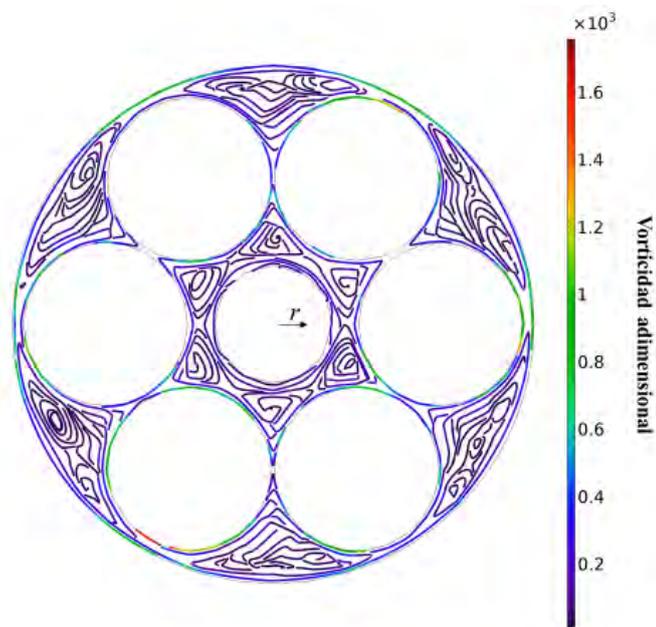


Figura 3.7: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=2090$ .  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

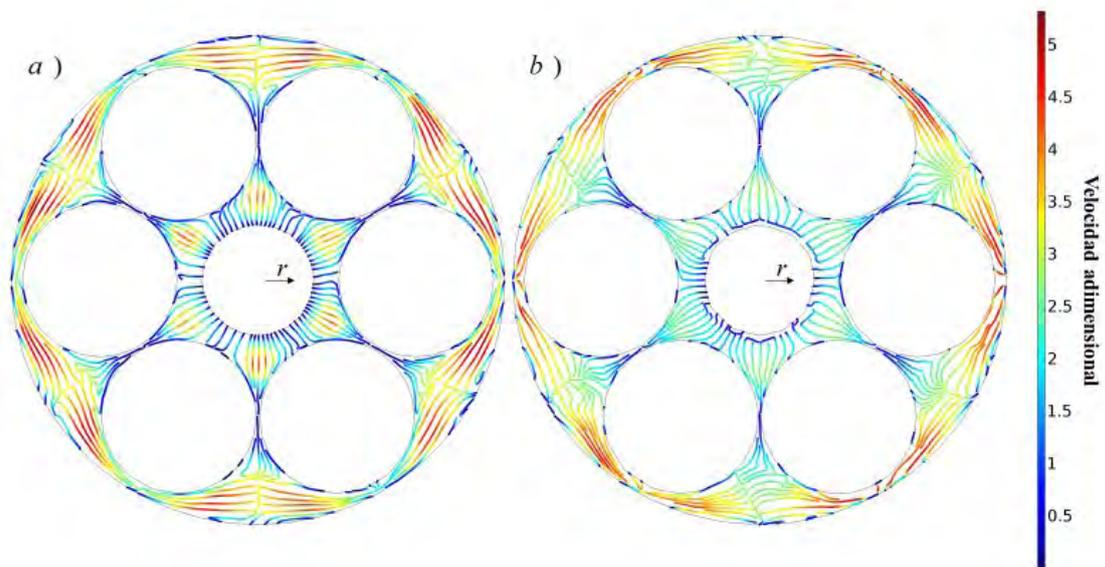


Figura 3.8: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] a)  $Re=264$ ;  $V_{inRe264}=0.1569$  [m/s] y b)  $Re=264$ ;  $V_{inRe2090}=1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

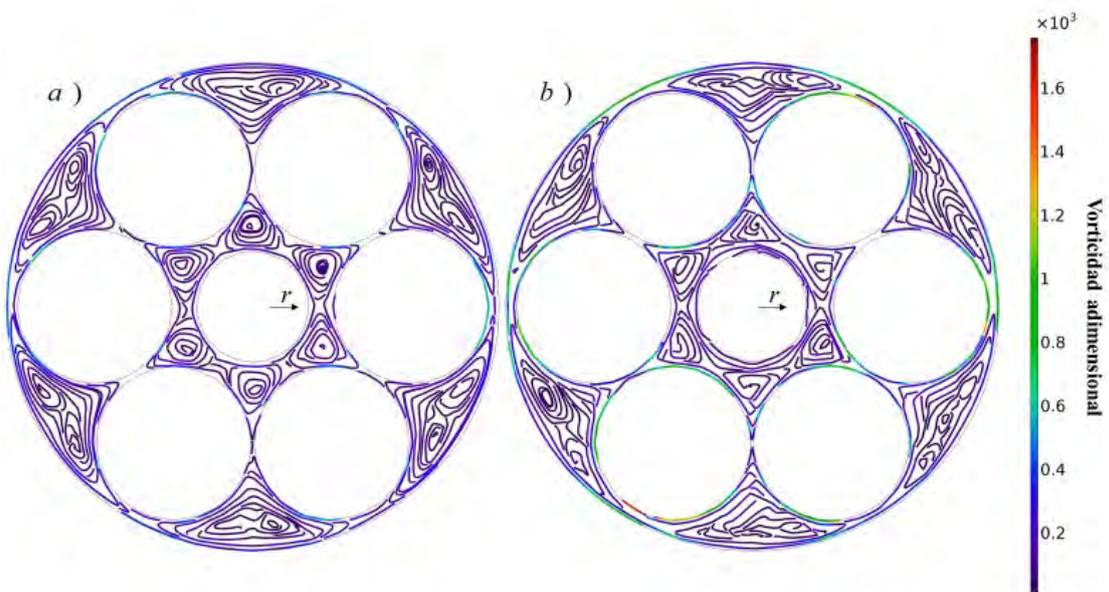


Figura 3.9: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] a)  $Re=264$ ;  $V_{inRe264}=0.1569$  [m/s] y b)  $Re=264$ ;  $V_{inRe2090}=1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

En las Figuras 3.8 y 3.9 se muestran las líneas de corriente asociadas al campo de

velocidad y las líneas de corriente asociadas al campo de vorticidad para el Re 264 y el Re de 2090, ambas figuras muestran resultados similares a distintos Re. Es importante observar que para el Re más pequeño con el que se trabajó la velocidad máxima se localiza en las zonas intersticiales cercanas a la pared, mientras que conforme va aumentando el número de Reynolds la velocidad máxima se desplaza a aquellas zonas donde se reduce el área de flujo cercana a la pared. En estas figuras también se observa cómo la velocidad disminuye a un diámetro de partícula de la pared como consecuencia de la vorticidad que se genera en esta zona.

Debido a la naturaleza del campo de velocidad en el lecho empacado, una vista tridimensional de una porción del lecho empacado permite hacer un análisis de la interacción de las tres componentes del campo de velocidad dentro del sistema y tener más claridad sobre el patrón de flujo. En las Figuras 3.10, 3.11 y 3.13 se observan las líneas de corriente asociadas a la velocidad para un corte tridimensional de una sección del lecho empacado desde diferentes perspectivas para un Reynolds de 2090; en este corte se observa que las líneas de corriente que están asociadas con la velocidad adimensional en el lecho tienen un patrón en el cual no presentan deformaciones considerables, y esencialmente su forma se debe a la estructura del empaque. En esta figura también se observa el comportamiento de las líneas de corriente en las zonas donde se tiene una mayor magnitud de la velocidad adimensional, que es hasta 5 veces la velocidad superficial a la entrada del lecho.

En la Figura 3.14, se muestran las líneas tipo flecha asociadas al campo de velocidad en el lecho empacado para un Re de 2090, las cuales corroboran lo mencionado anteriormente, que el campo de velocidad no presenta deformaciones apreciables en el patrón de flujo, de tal forma que el fluido se mueve de manera ordenada a través del lecho empacado.

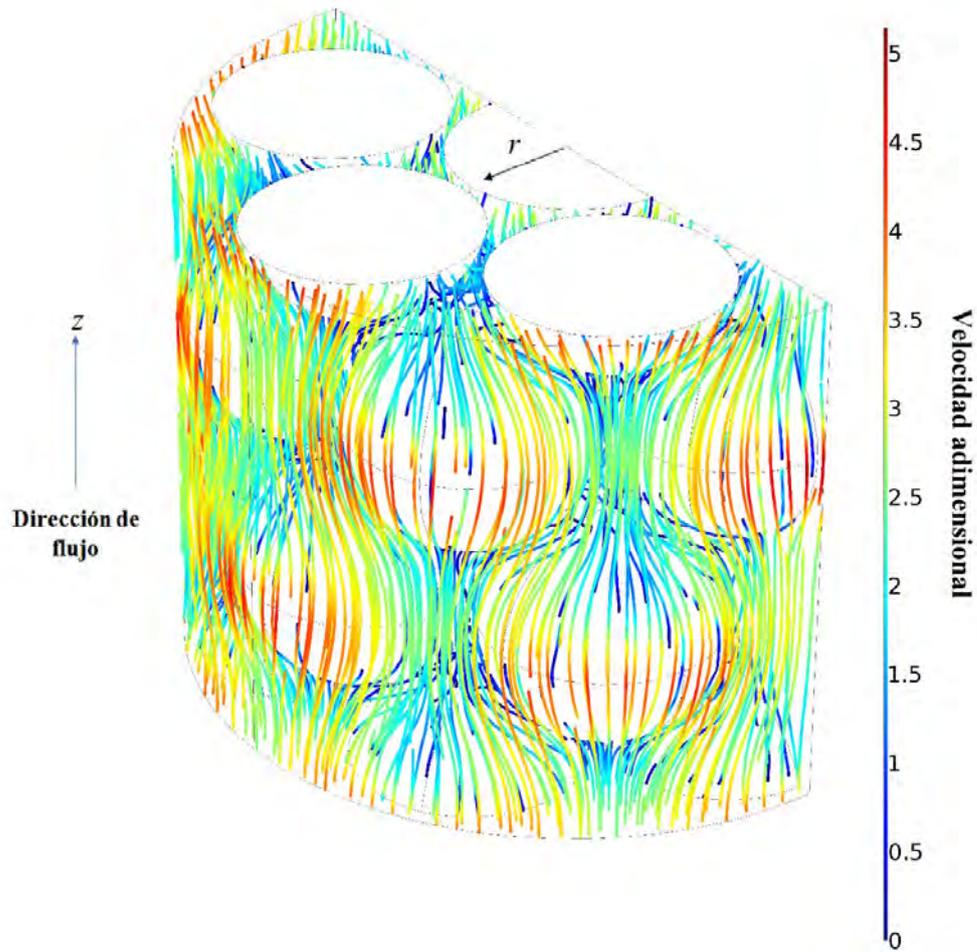


Figura 3.10: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}=1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

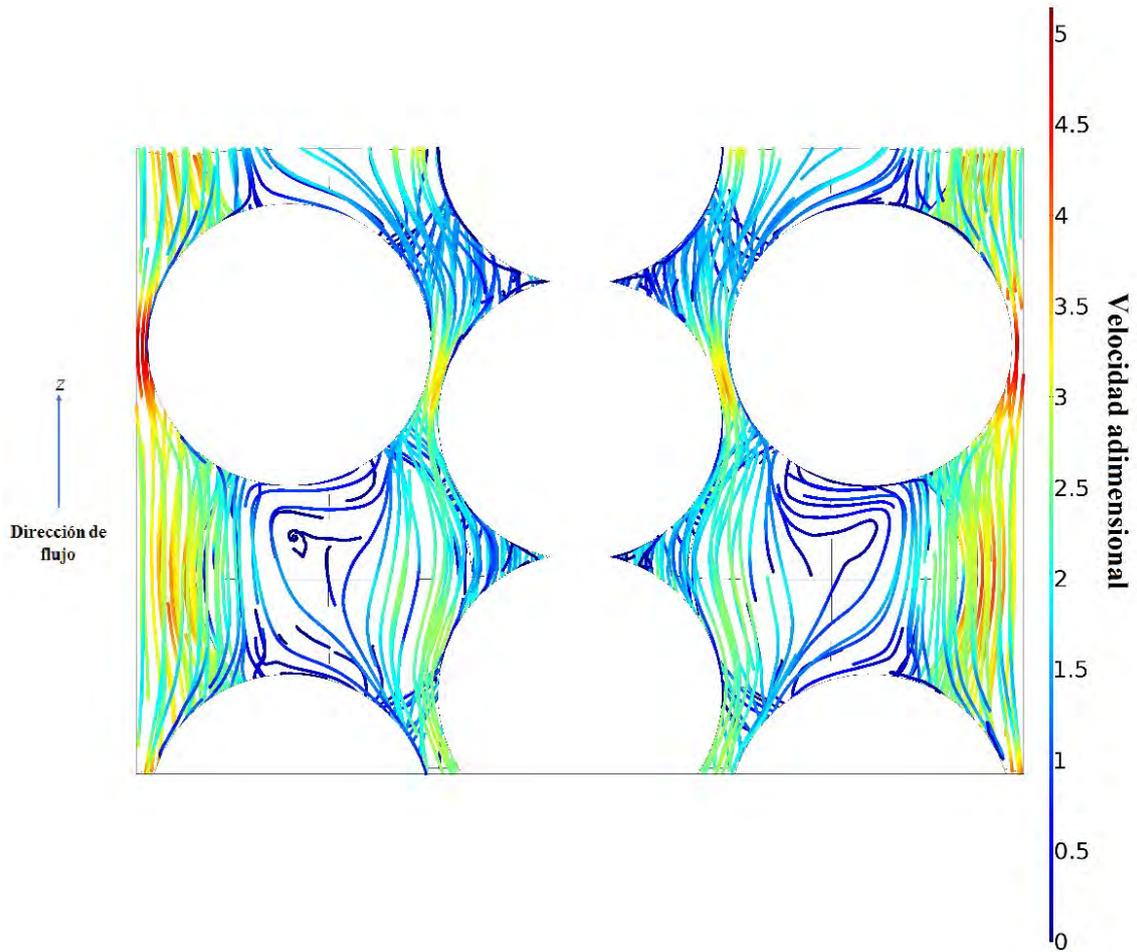


Figura 3.11: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado (vista frontal) a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

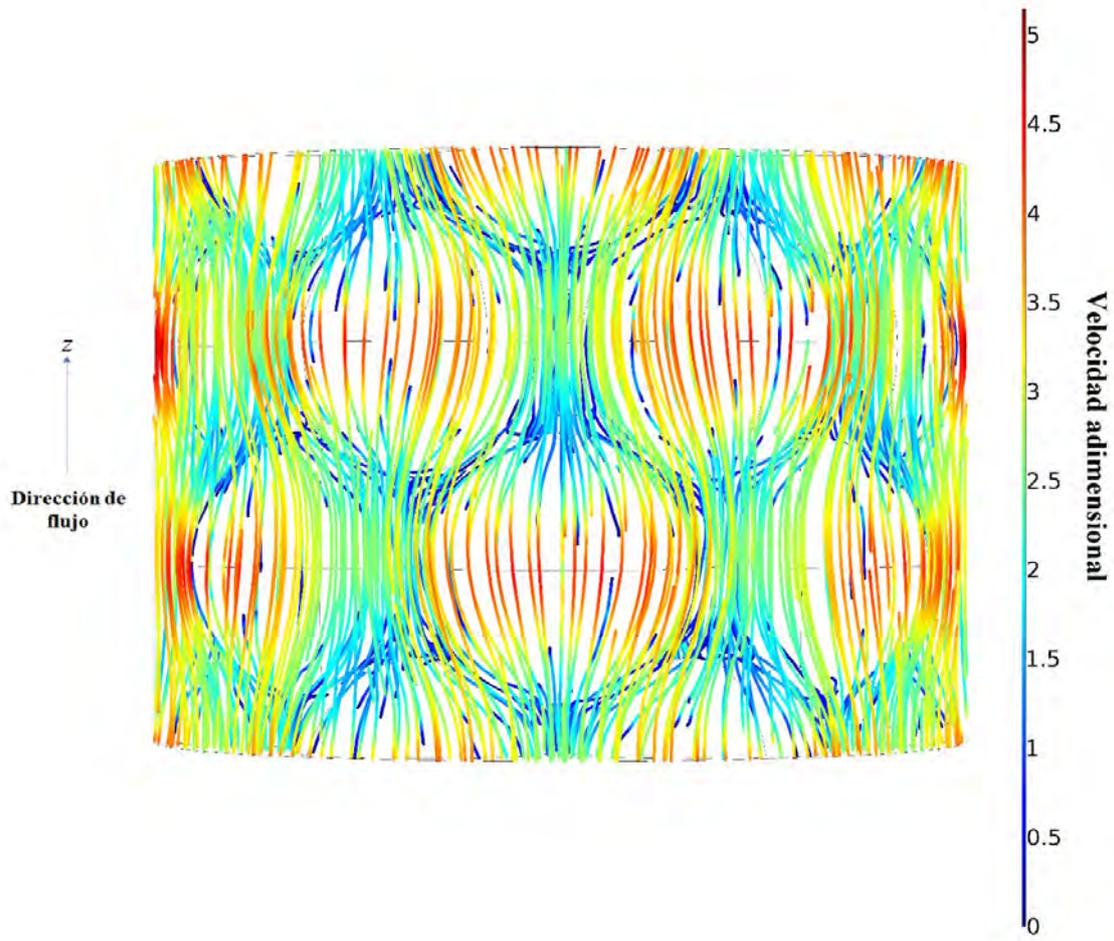


Figura 3.12: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado (vista transversal) a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

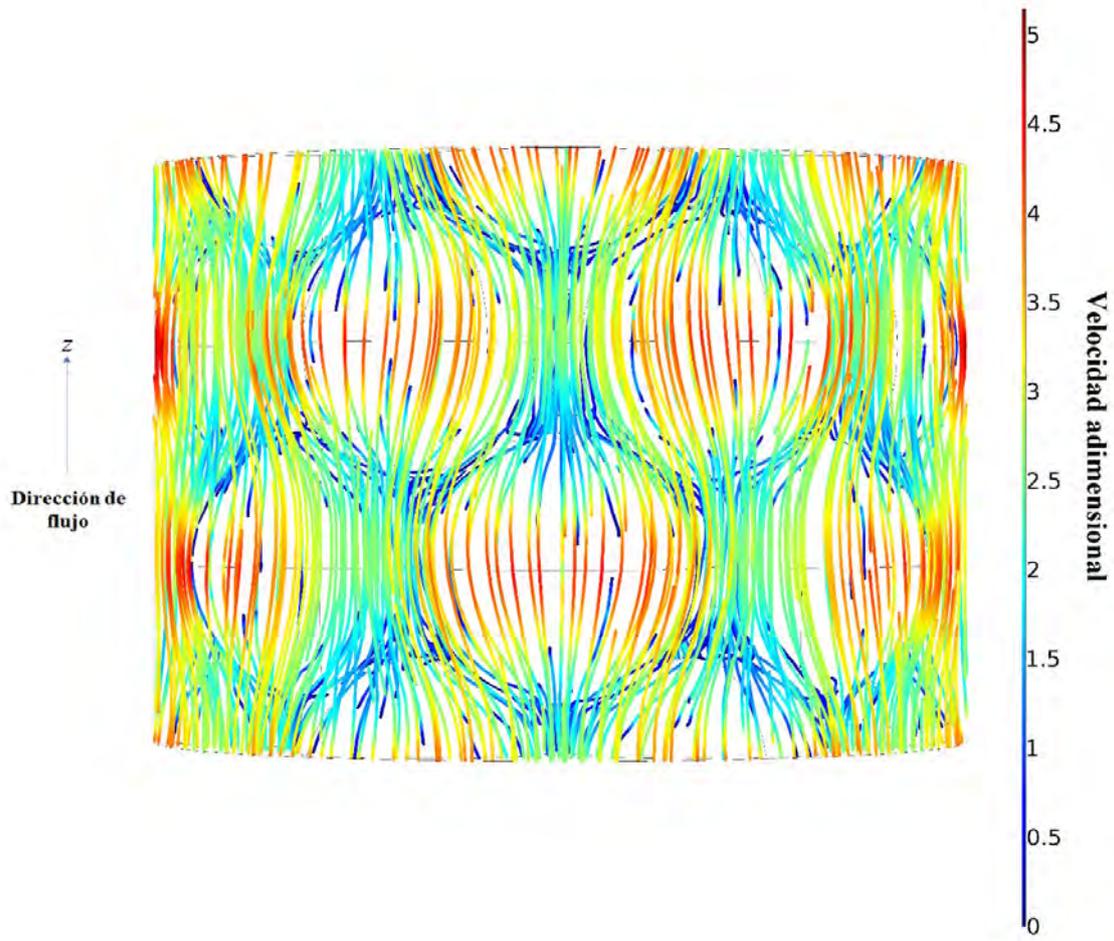


Figura 3.13: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado (vista transversal) a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

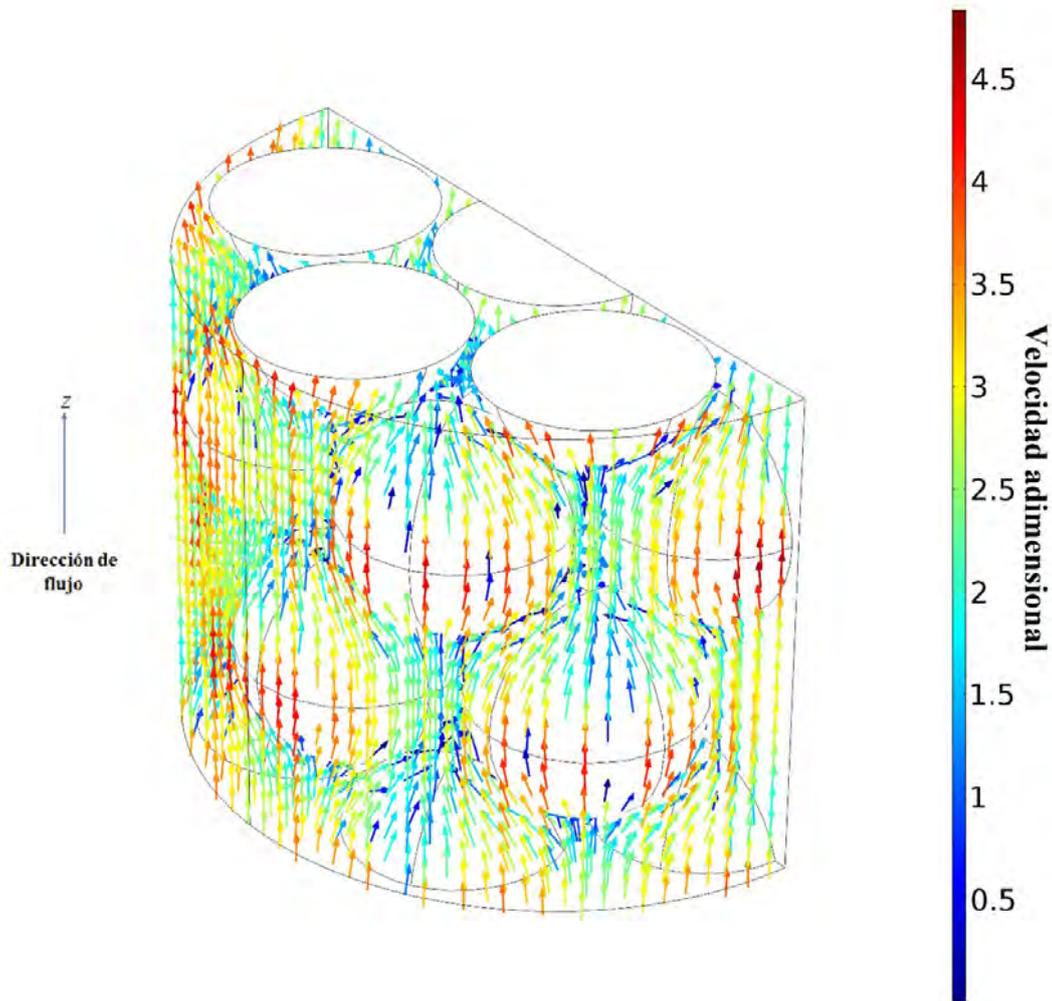


Figura 3.14: Líneas de flecha asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista transversal) a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

En las Figuras 3.15, 3.16 y 3.17 se muestran las líneas de corriente asociadas a la vorticidad para un corte tridimensional de una sección del lecho empacado desde diferentes perspectivas para un Reynolds de 2090. Al hacer un análisis de las líneas de corriente asociadas al campo de vorticidad, la cual representa el producto cruz del campo de velocidad, prueban que no hay deformaciones apreciables en el campo de velocidad ni formación de remolinos fractales en su patrón de flujo los cuales caracterizan al régimen turbulento.

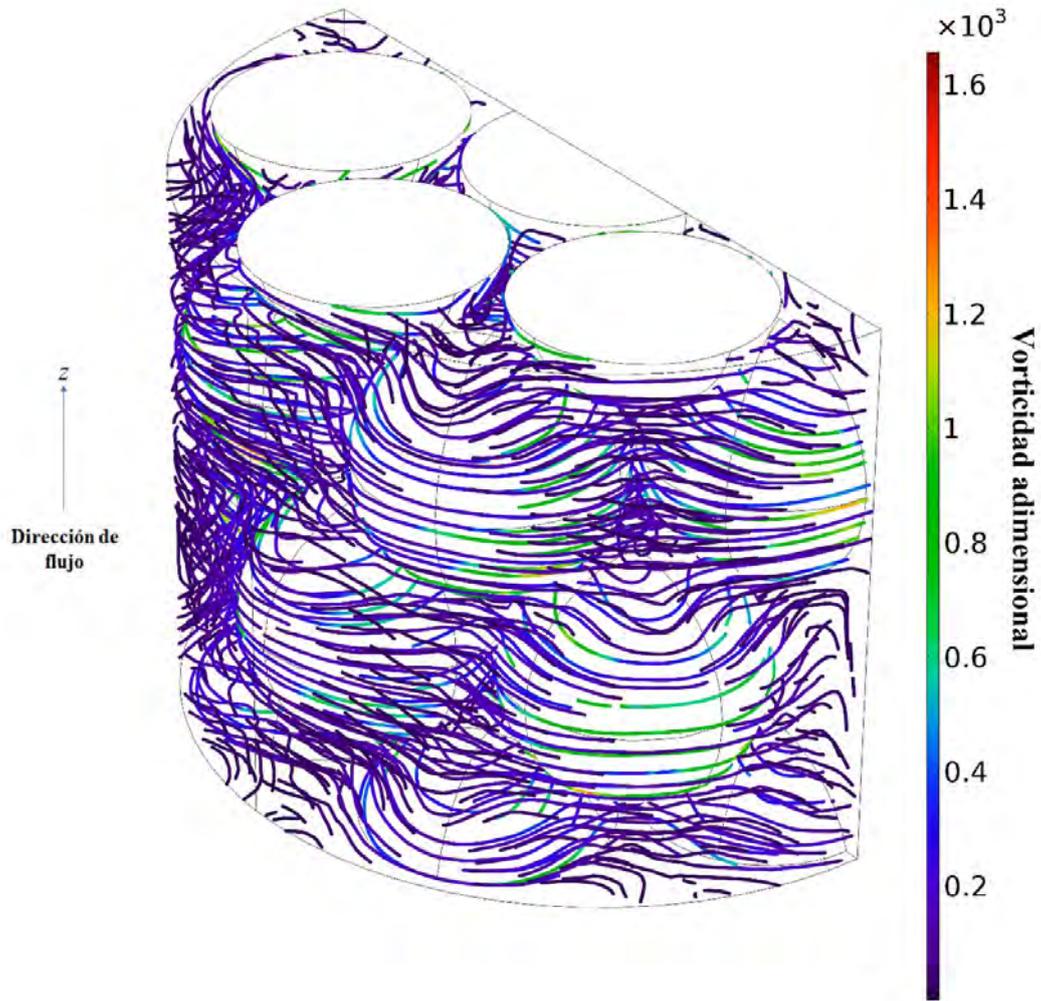


Figura 3.15: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}=1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

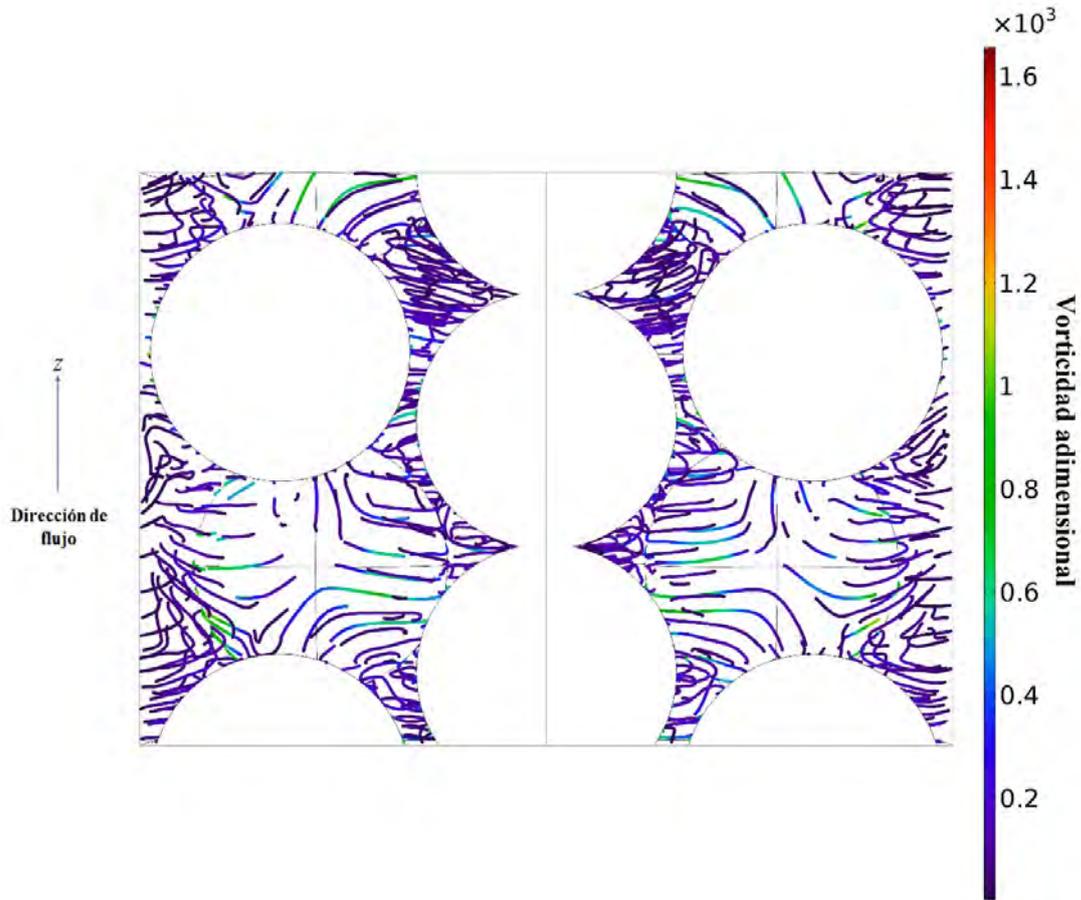


Figura 3.16: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado(vista transversal) a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

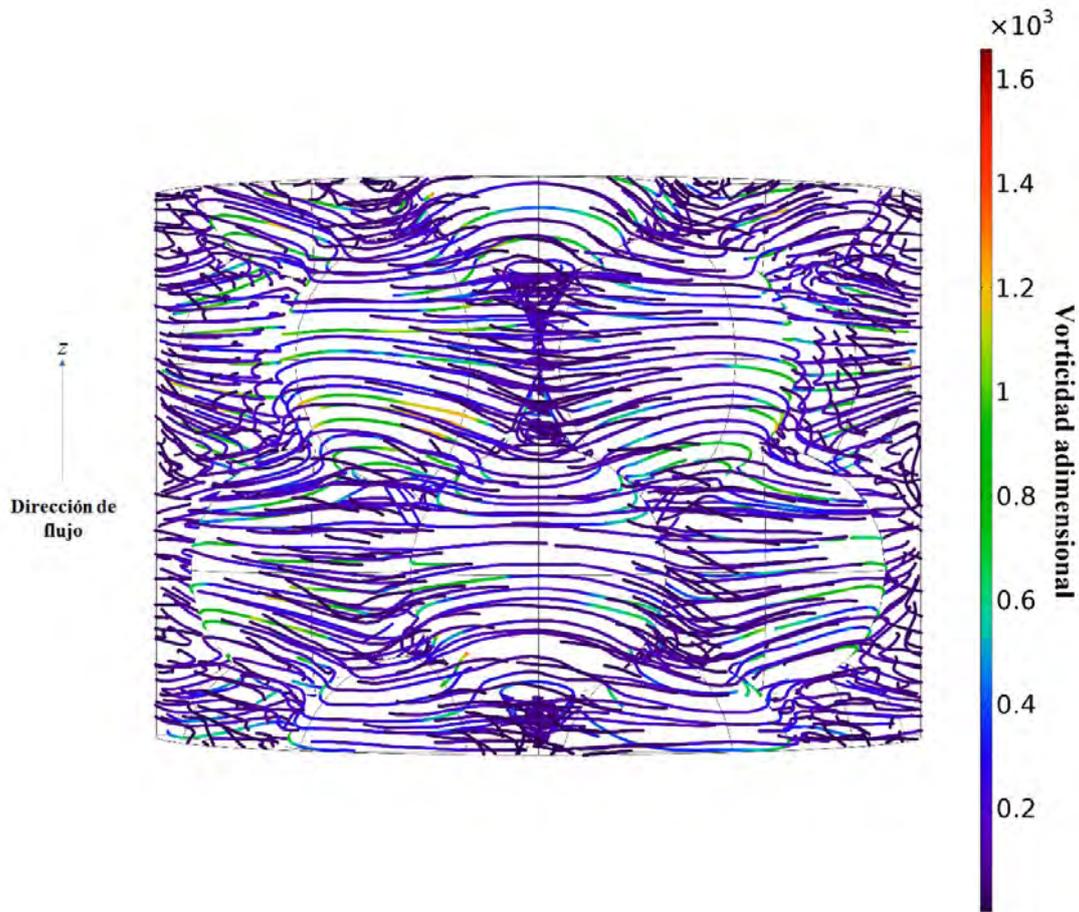


Figura 3.17: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado (vista transversal) a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

En la Figura 3.18 se muestra un corte tridimensional de las líneas de corriente de vorticidad y las líneas de flecha asociadas al campo de velocidad para un  $Re$  de 2090. Al relacionar las líneas de corriente del campo de vorticidad y las líneas de flecha del campo de velocidad adimensional se puede observar la interacción del campo de velocidad y el campo de vorticidad, las líneas de flecha del campo de velocidad avanzan ordenadamente en la misma dirección del flujo, por lo que para las condiciones de operación y las características del lecho estudiado en los experimentos de [Castillo-Araiza \(2004\)](#), en los cuales están basadas las simulaciones computacionales realizadas en este proyecto de investigación. Los resultados muestran que el régimen de flujo no es turbulento como se suponía en estudios reportados en la literatura ([Aparicio-Mauricio y col., 2017](#); [Castillo-Araiza y col., 2007](#)), a pesar de la estructura geométrica del empaque y de los números de Reynolds de operación experimentales.

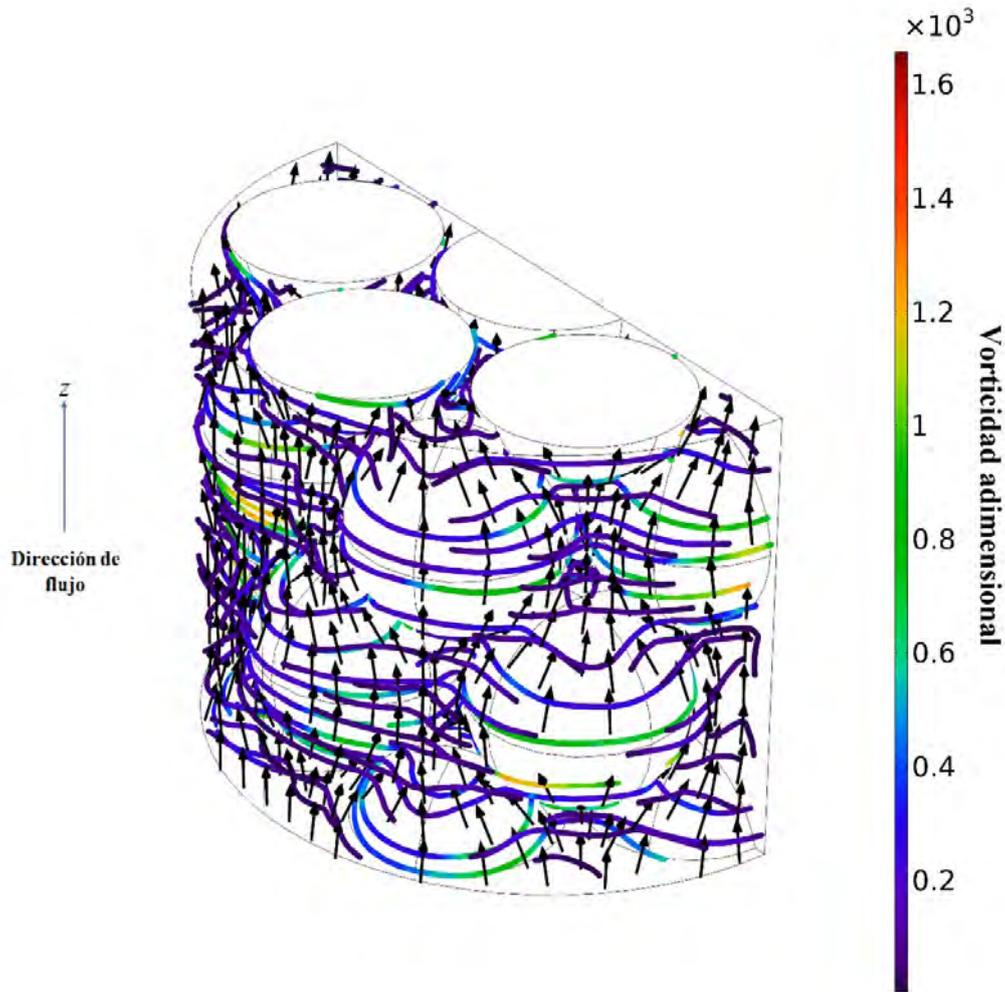


Figura 3.18: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional y líneas de flecha asociadas a la velocidad obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes en una sección del lecho empacado (vista transversal) a un  $Re=2090$ ;  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

En la Figura 3.19 se presentan los perfiles de velocidad promedio adimensional para todos los  $Re$  de operación del lecho empacado. Al evaluar la velocidad promedio adimensional a diferentes valores de  $Re$  se puede observar que la velocidad máxima se encuentra en los intersticios del empaque, y que conforme aumenta el número de  $Re$  esta velocidad máxima aumenta.

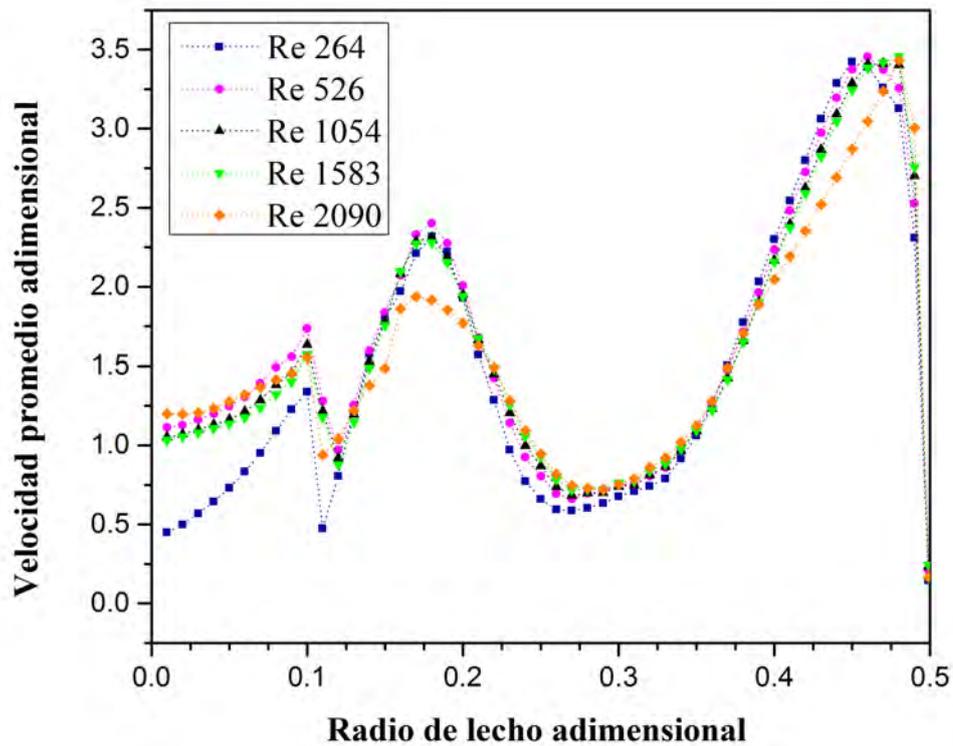


Figura 3.19: Perfiles de velocidad promedio adimensional en función del radio del lecho empacado adimensional a diferentes  $Re$  de operación obtenidos mediante CFD. Geometría 41 cm con contacto axial.

Sin embargo, en la Figura 3.20, al comparar los resultados a nivel de CFD con las predicciones de los modelos de las aproximaciones clásicas para un lecho empacado con la misma relación de diámetro de tubo partícula a un  $Re_p$  de 702, el cual es equivalente al  $Re$  de 2090 utilizando en las simulaciones computacionales de este trabajo al hacer una corrección de escala asociada al diámetro de lecho empacado, los perfiles de velocidad obtenidos con CFD no se ajustan a los reportados en la literatura. Lo cual se puede deber a que las aproximaciones ingenieriles, sobre predicen la velocidad cerca de la pared (Aparicio-Mauricio *y col.*, 2017). Otras razones podrían estar relacionadas con la fracción vacía, que en los modelos aproximados se considera como una función del radio siendo efectiva en la coordenada tangencial y axial. Por otro lado, en las simulaciones a nivel de CFD, la geometría se construyó sin la presencia de irregularidades simétricas; sin embargo, en la realidad, la disposición espacial de las partículas va cambiando a lo largo del lecho, aunque el empaque presenta un arreglo geométrico contante. Es por eso que, en los estudios desarrollados en CFD es necesario construir la geometría del sistema a estudiar con la mayor precisión posible, lo cual no se ha resuelto para lechos empacados en la literatura (Dixon, 2017; Partopour y Dixon, 2016; Wehinger, 2016).

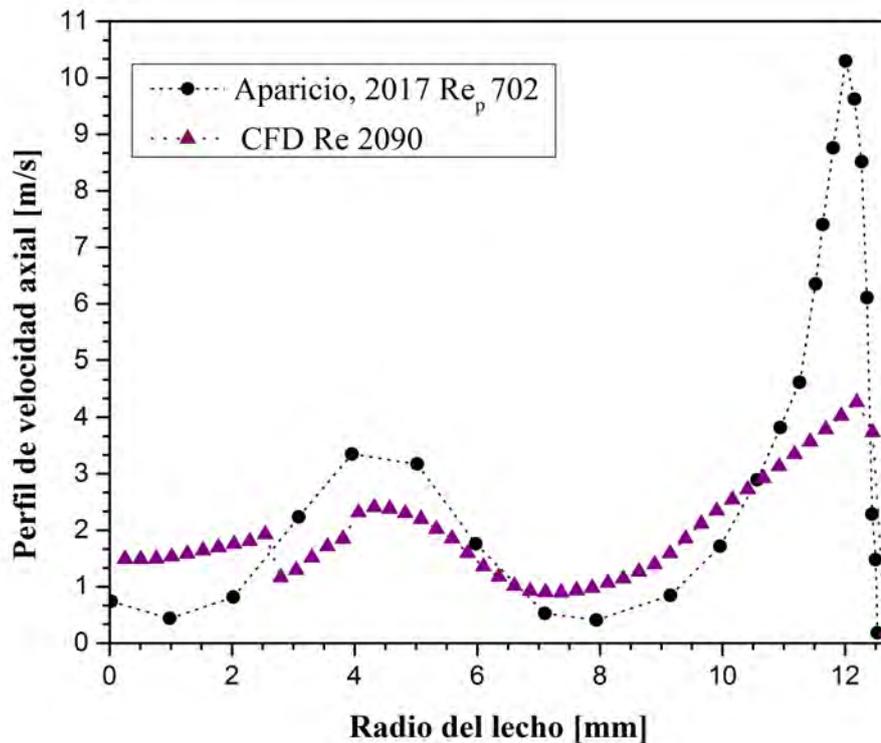


Figura 3.20: Comparación perfiles de velocidad radial obtenido con CFD y aproximaciones clásicas a  $Re=2090$  y su equivalente experimental de  $Re_p=702$ . Geometría 41 cm con contacto axial.

También es posible que estas diferencias se deban a la malla construida en las simulaciones computacionales, ya que entre más fina sea la malla, la solución será más precisa, capturando mayor información de lo que está ocurriendo en la micro escala; sin embargo, debido a las limitaciones computacionales que se tienen en nuestro grupo de investigación, no fue posible construir una mejor malla. Por lo que es recomendable para trabajos futuros reformular y refinar la malla conforme se aumente el número de  $Re$  de operación en el lecho.

Otras de las razones por las cuales los perfiles de velocidad obtenidos en CFD son distintos a los predichos por los modelos aproximados se debe a las suposiciones consideradas en las aproximaciones ingenieriles, ya que en la mayoría de los casos se desprecia la componente axial y angular de la velocidad. CFD considera las tres componentes del campo de velocidad en el flujo a lo largo del sistema. Esto permite estudiar cómo son los cambios en el campo de velocidad a lo largo del lecho empacado sin la necesidad de recurrir a los métodos invasivos de medición de estas propiedades experimentales así como calcular la permeabilidad del lecho.

### 3.4. Caída de presión

La caída de presión en el lecho está relacionada con la velocidad intersticial, de aquí la necesidad de estudiarla a lo largo del lecho.

En la Figura 3.21, se muestra el perfil de presión axial para un  $Re$  de 2090, donde se puede observar que la relación entre la altura del lecho empacado y el gradiente de presión tienen una relación lineal, como se ha observado experimentalmente (Castillo-Araiza, 2008) y con modelos pseudo-empíricos (Aparicio-Mauricio *y col.*, 2017). En la Figura 3.22, se muestra el perfil de presión como una función del radio adimensional del lecho para el mismo  $Re$  de 2090 donde se muestra como la presión varía a lo largo de la coordenada radial como consecuencia de la presencia del empaque y los mecanismos de fricción en la superficie de éste.

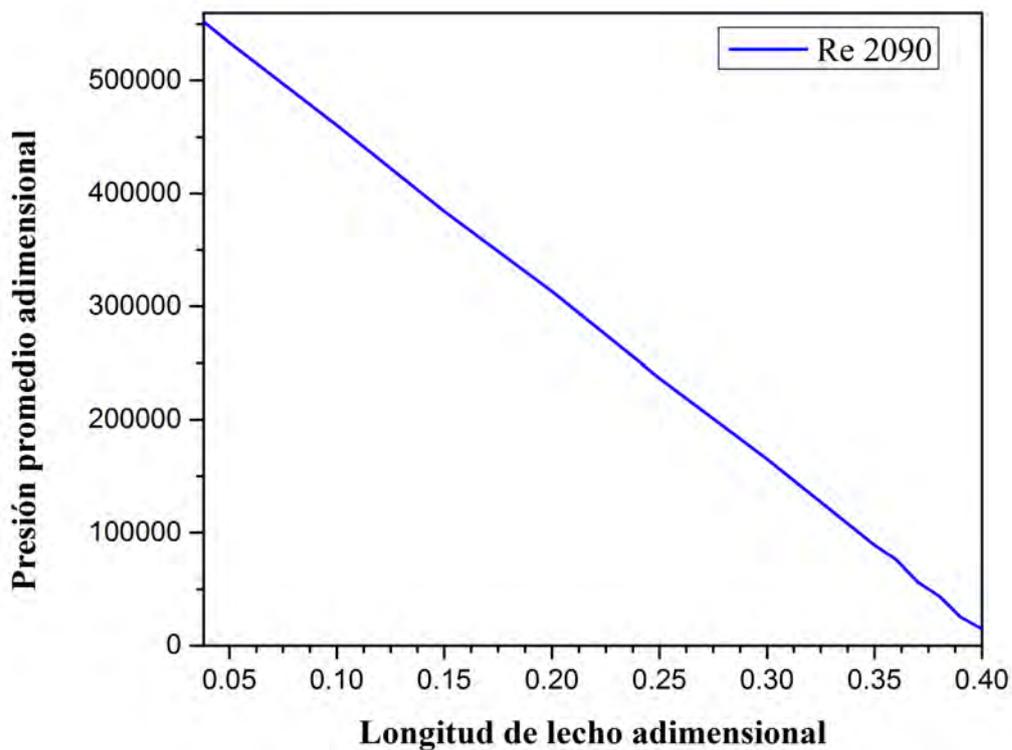


Figura 3.21: Perfiles de presión promedio adimensional en función de la longitud del lecho adimensional para un  $Re=2090$ . Geometría 41 cm con contacto axial.

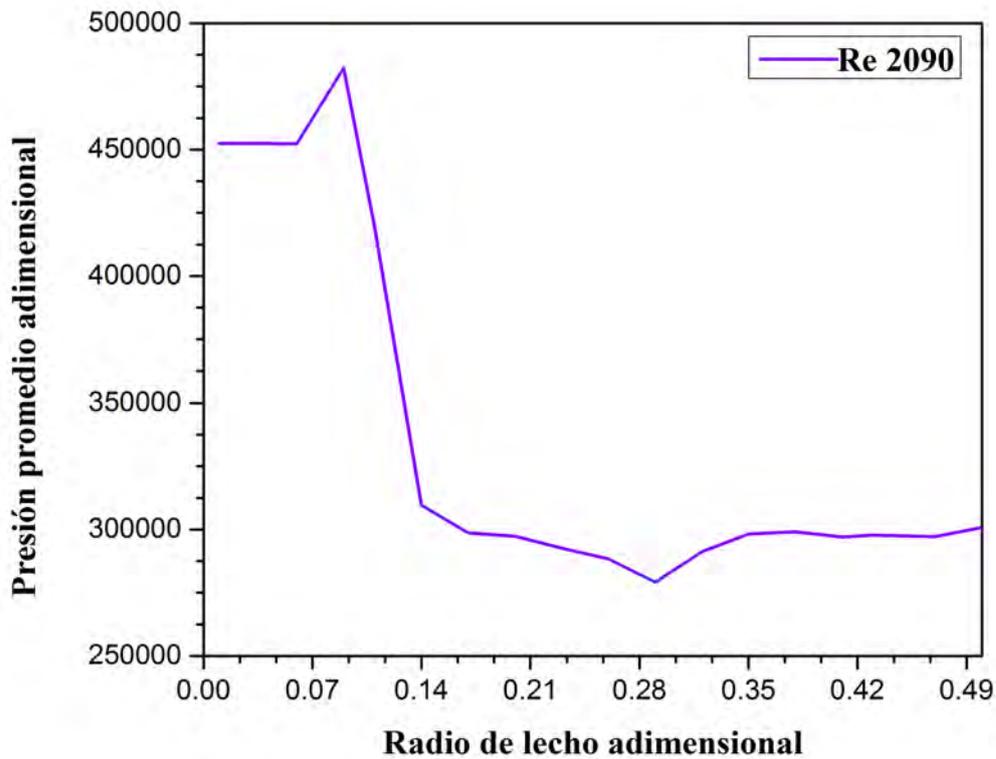


Figura 3.22: Perfiles de presión promedio adimensional en función del radio del lecho adimensional para un  $Re=2090$ . Geometría 41 cm con contacto axial.

En las Figuras 3.23 y 3.24, se muestra un corte del perfil de presión asociado a las líneas de corriente para un  $Re$  de 2090, donde se observa cómo en las zonas en las que la presión es menor, la velocidad del flujo aumenta considerablemente, de igual forma en las zonas en las que la presión es mayor, la velocidad es menor que en las zonas de mayor presión del fluido.

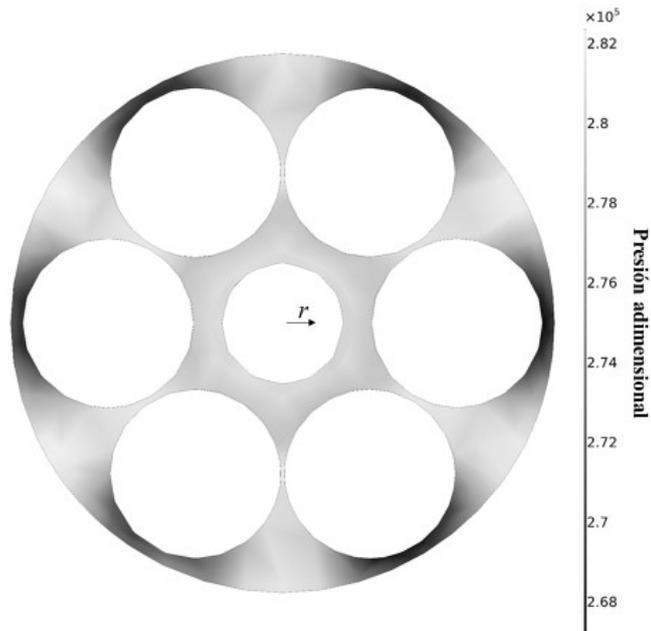


Figura 3.23: Distribución de la presión adimensional obtenida con las ecuaciones de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=2090$ .  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

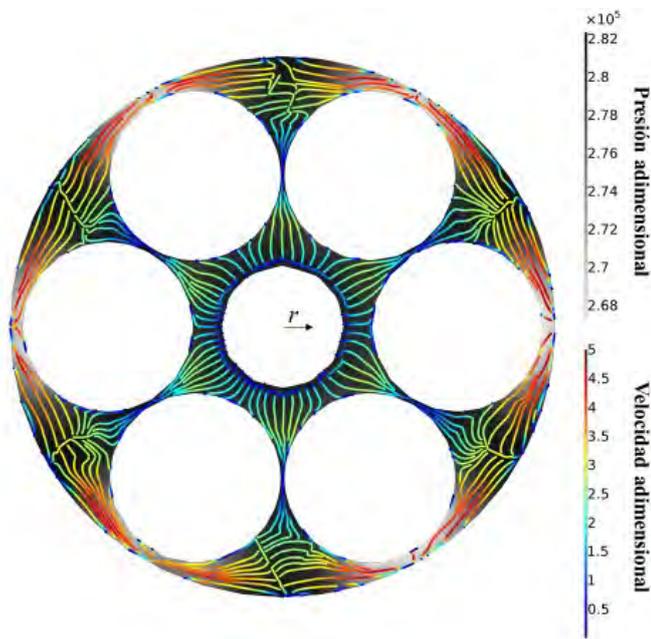


Figura 3.24: Distribución de la presión adimensional asociada a las líneas de corriente de velocidad adimensional obtenidas con las ecuaciones de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=2090$ .  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

# Capítulo 4

## Transporte de calor

### 4.1. Lecho adiabático

#### 4.1.1. Temperatura axial y radial

Dentro del lecho empacado existen diversos mecanismos de transporte de calor que intervienen en cómo se disipa la energía térmica en el sistema. La dinámica de fluidos afecta estos mecanismos de transporte. En esta sección se presentan los resultados de las simulaciones computacionales en donde se acopla el transporte de cantidad de movimiento con el transporte de calor en un lecho empacado bajo las condiciones de operación presentadas en el capítulo 2.

En la Figura 4.1 se muestra una vista frontal de la distribución de temperatura adimensional en el lecho empacado, que opera de forma adiabática a un  $Re$  de 264. Se presentan dos casos: uno donde se considera contacto axial entre partículas (Figura 4.1-a); y otro donde no se considera contacto axial entre éstas (Figura 4.1-b). Se puede observar que en la zona cercana a la fuente de calor (parte superior del lecho) es donde se tienen el mayor gradiente de temperatura, lo cual es de esperarse, ya que el lecho se alimenta con un flujo de aire a temperatura ambiente por la parte inferior del lecho. Este gradiente de temperatura en el lecho es consecuencia de que el mecanismo de transferencia de calor convectivo domina con respecto al mecanismo conductivo. La Figura 4.1 muestra la necesidad de considerar el contacto entre partículas a nivel de CFD (Dixon y col., 2013; Wehinger, 2016).

El número de Péclet ( $Pe$ ) permite identificar la contribución de los mecanismos convectivos con respecto de los conductivos. Para este caso de estudio, a todos los  $Re$  de operación (264-2090) se obtuvieron valores de  $Pe \gg 1$  (188-1488), indicando que la transferencia de calor por convección domina sobre la transferencia de calor por conducción. Sin embargo, es importante resaltar que la transferencia de calor por conducción es la principal forma de disipación de energía de la fuente de calentamiento a lo largo del lecho, por esta razón los gradientes de temperatura se aprecian solo en los primeros centímetros cerca de la lámpara. Al hacer un análisis para distintos números de  $Re$  con relación al número de  $Pe$  (Tabla 4.1), el número de Péclet aumenta conforme el  $Re$  crece, por lo que es evidente que la convección gobierna el sistema.

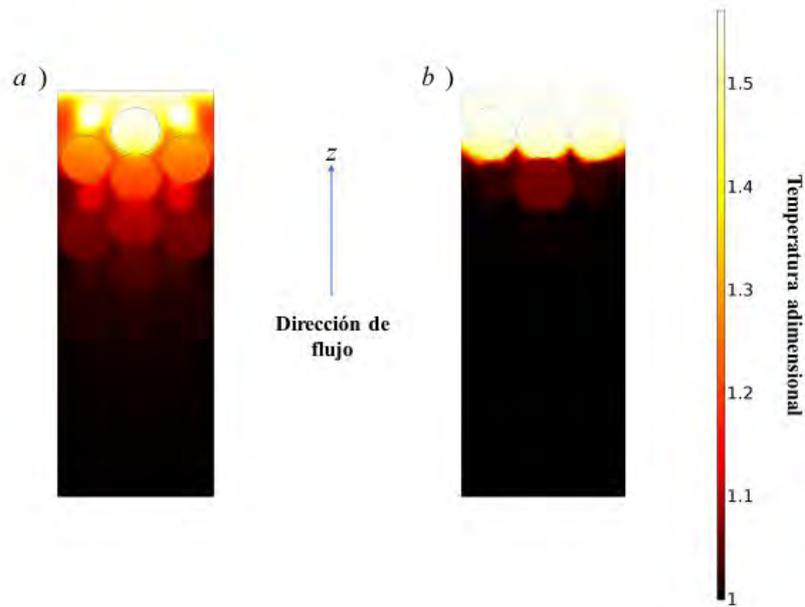


Figura 4.1: Distribución de la temperatura adimensional a un corte frontal en  $\theta=0$  para un  $Re=264$  a) Geometría con contacto axial y b) Geometría sin contacto.  $T_{in}= 293.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior.

Tabla 4.1: Relación entre el número de Reynolds y el número de Péclet a las condiciones de estudio.

Re	Pe
264	188
526	374
1054	751
1583	1127
2090	1488

En el caso de la transferencia de calor radial, en la Figura 4.2 se muestra la distribución de temperatura adimensional a un corte transversal al paso del flujo a una longitud de 39 cm del lecho empacado cuya geometría presenta únicamente contacto axial entre partículas. La distribución de temperatura mostrada es la que se obtiene a un  $Re=264$  cuando el fluido se alimenta a una temperatura de 293.15 K. Si bien el lecho es adiabático, se identificó una diferencia de temperatura radial de  $23^{\circ}C$  entre el centro y la pared del lecho empacado. Como se observa, las partículas son las que presentan las temperaturas mayores, mientras que las zonas donde el aire fluye tienden a presentar los valores de temperatura menores. La diferencia de temperaturas se debe a la forma en la que se consideró el contacto entre partículas y el contacto entre la pared del tubo y las partículas. En estas simulaciones se resalta la importancia de considerar el contacto entre superficies sólidas en simulaciones a nivel de CFD, que en varios estudios se ha despreciado

(Dixon *y col.*, 2005; Guardo *y col.*, 2005; Nijemeisland y Dixon, 2004), y en otros se han propuesto aproximaciones que manejan parámetros geométricos de ajuste para describir observaciones, lo que está en contradicción con el enfoque de CFD (Dixon *y col.*, 2013; Wehinger, 2016).

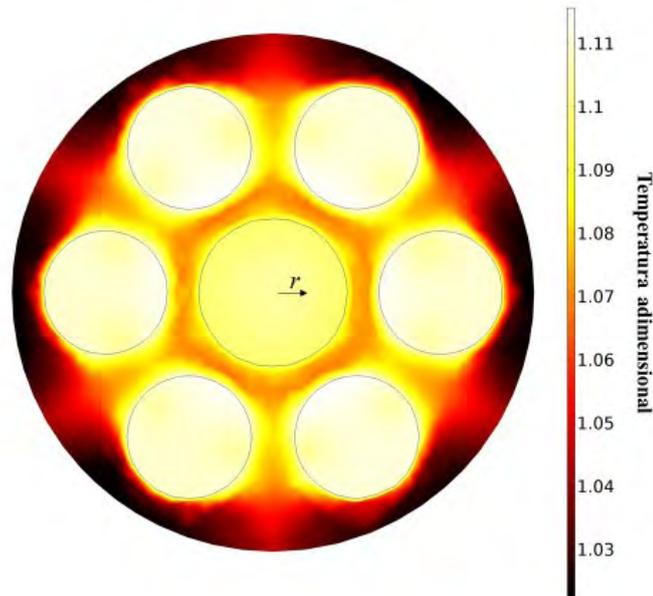


Figura 4.2: Distribución de la temperatura adimensional a un corte transversal en  $z=0.22$  [cm] para un  $Re=264$ .  $T_{in}= 293.15$  [K]. Geometría 41 cm con contacto axial.

En la Figura 4.3, se superponen las líneas de corriente asociadas a la velocidad a la distribución de temperatura adimensional cuando el  $Re=264$  a una altura de 39 cm y cuando la temperatura de entrada es igual a 293.15 K y cuya geometría presenta únicamente contacto axial entre partículas. Se observa que en zonas donde la velocidad es mayor se relaciona con zonas donde la temperatura es menor y viceversa. Específicamente, donde dominan los esfuerzos de corte viscoso, los fenómenos conductivos dominan sobre los convectivos, y viceversa, explicando el campo de temperatura adimensional que se observa en el lecho que opera de manera adiabática (Figura 4.2).

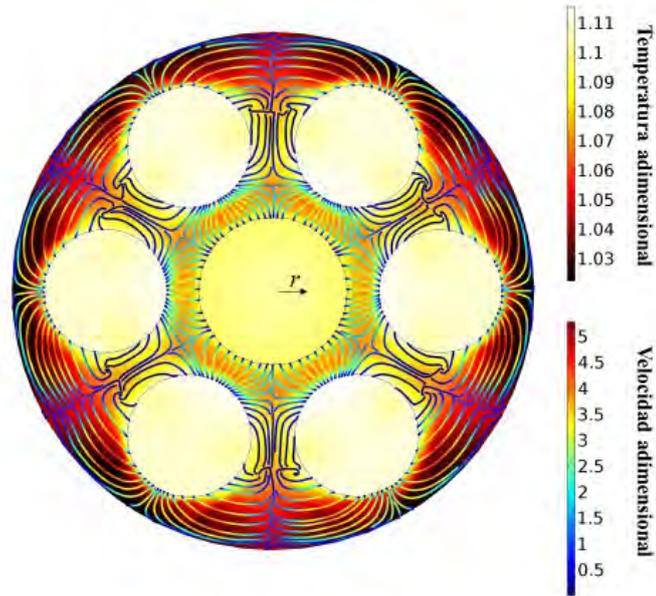


Figura 4.3: Distribución de la temperatura adimensional y líneas de corriente de velocidad adimensional a un corte transversal en  $z=0.22$  [cm] para un  $Re=264$ .  $T_{in}= 293.15$  [K]. Geometría 41 cm con contacto axial.

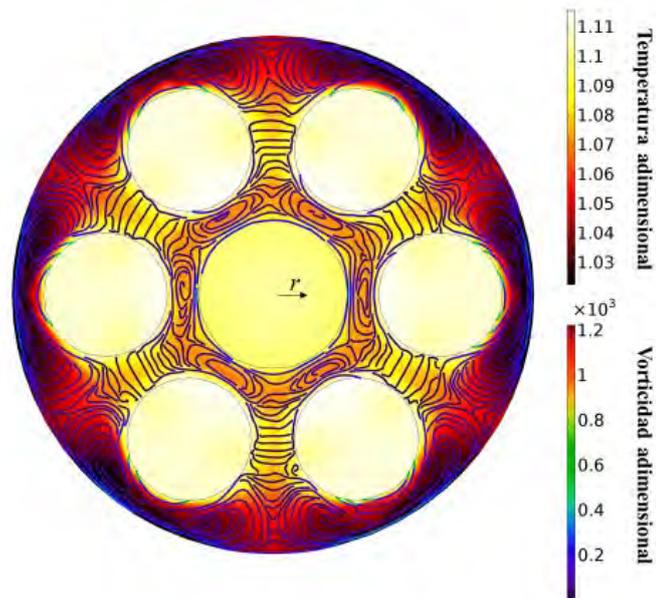


Figura 4.4: Distribución de la temperatura adimensional y líneas de corriente de vorticidad adimensional a un corte transversal en  $z=0.22$  [cm] para un  $Re=264$ .  $T_{in}= 293.15$  [K]. Geometría 41 cm con contacto axial.

Otra forma de entender la distribución de temperatura adimensional que se muestra

en la Figura 4.2 es mediante el campo de vorticidad que se presenta en la Figura 4.4, en la cual se muestra el campo de vorticidad del lecho empacado cuando el  $Re=264$  a una altura de 39 cm y cuando la temperatura de entrada es igual a 293.15 K y cuya geometría presenta únicamente contacto axial entre partículas. En esta figura, se sobrepone el campo de vorticidad con el campo de temperatura adimensional. Las zonas en las que se forman los vórtices, las cuales corresponden a aquellas zonas intersticiales, es donde se forman los vórtices más pequeños, y coincide con la zona en la que se disipa mejor la energía térmica.

#### 4.1.2. Temperatura promedio axial y radial

Al realizar un análisis de la magnitud de la temperatura adimensional promedio a lo largo del lecho para todos los  $Re$  (264-2090) (Figura 4.5) se observa que se tienen gradientes de temperatura en los primeros centímetros del lecho cuando la temperatura de entrada es igual a 293.15 K y cuya geometría presenta únicamente contacto axial entre partículas. La temperatura máxima se tiene en la parte superior del lecho, mientras que en la parte inferior donde se alimenta el flujo de aire se tiene la temperatura mínima. Al comparar los perfiles de temperatura a diferentes  $Re$  de operación, es evidente que mientras se aumenta el  $Re$ , el gradiente de temperatura dentro del sistema disminuye. Al aumentar la velocidad de alimentación, el transporte de cantidad de movimiento convectivo se favorece teniendo una mejor disipación de energía en el sistema.

En la Figura 4.6, se presenta la variación en el radio de los perfiles de temperatura adimensional, promediados axialmente y angularmente, a diferentes  $Re$ . Se observan gradientes de temperatura adimensional radiales a todos los  $Re$ , donde, al incrementar el número de  $Re$ , el gradiente radial de la temperatura adimensional disminuye como una consecuencia de la disipación del calor en el lecho empacado por un mecanismo de transferencia de calor convectivo.

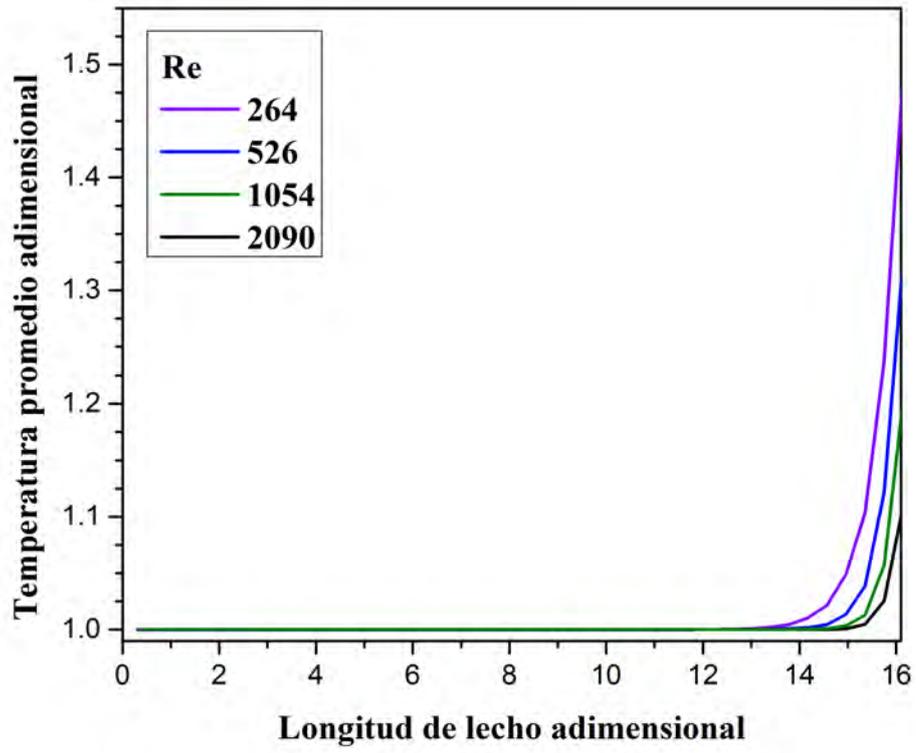


Figura 4.5: Perfiles de temperatura promedio adimensional en función de la longitud del lecho adimensional a diferentes  $Re$  de operación.  $T_{in} = 293.15$  [K]. Geometría 41 cm con contacto axial.

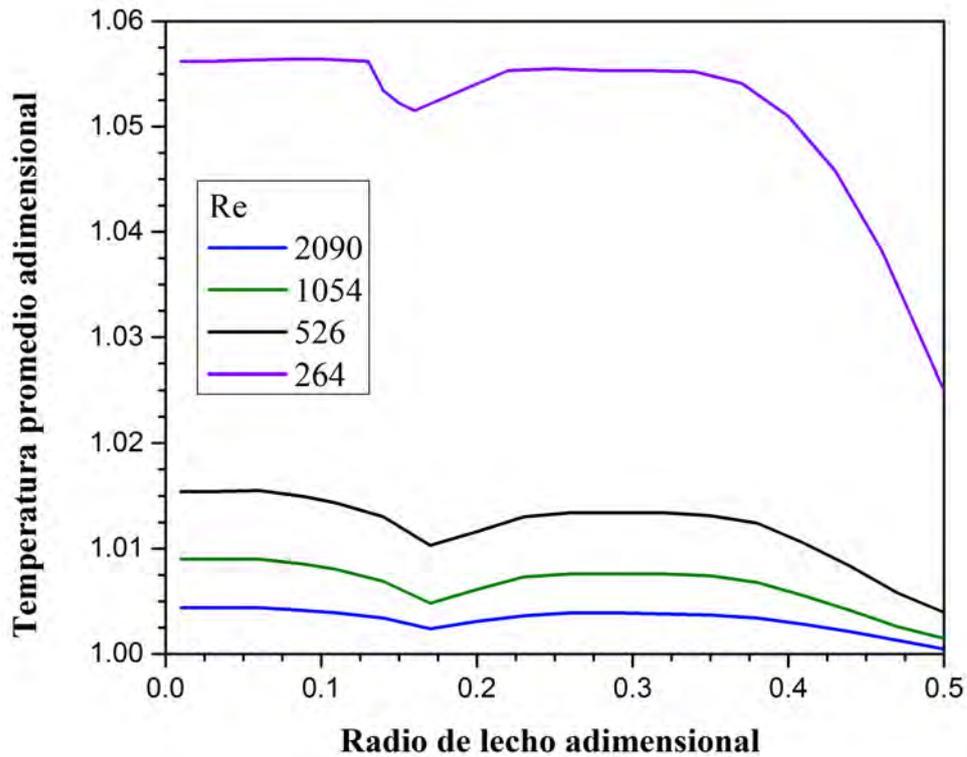


Figura 4.6: Perfiles de temperatura promedio adimensional en función del radio del lecho adimensional a diferentes  $Re$  de operación.  $T_{in} = 293.15$  [K]. Geometría 41 cm con contacto axial.

#### 4.1.3. Comparación con las observaciones experimentales

Al hacer una comparación cualitativa entre los perfiles de temperatura axial obtenidos con las simulaciones computacionales y los datos observados por [Castillo-Araiza \(2004\)](#) (Figura 4.7), se observa una tendencia similar en los perfiles de temperatura para  $Re_p$  equivalentes a los  $Re$  utilizados en las simulaciones desarrolladas en este trabajo.

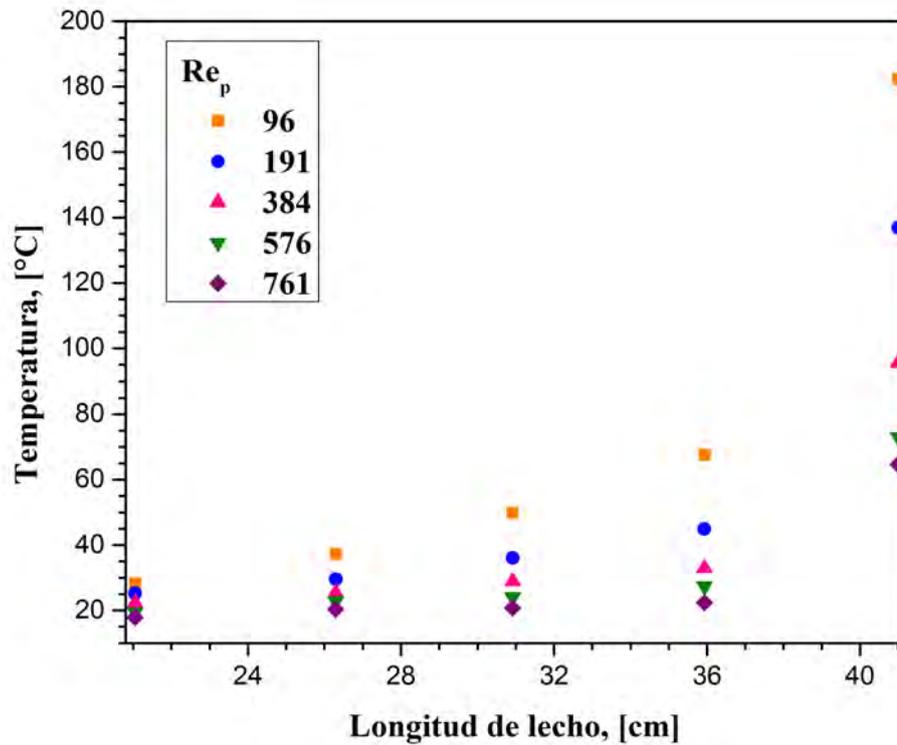


Figura 4.7: Perfiles de temperatura en función de la longitud del lecho experimental (Castillo-Araiza, 2004)

Sin embargo, al comparar cuantitativamente los resultados de CFD con los obtenidos experimentalmente para  $Re$  equivalentes (Figura 4.8), es clara la discrepancia en los perfiles de temperatura axial. Existen diversas razones por las cuales se observan diferencias significativas entre los resultados obtenidos mediante CFD y las observaciones experimentales. Una de ellas, se debe a que no se consideró el contacto radial entre partículas del empaque en las éstas simulaciones a nivel de CFD.

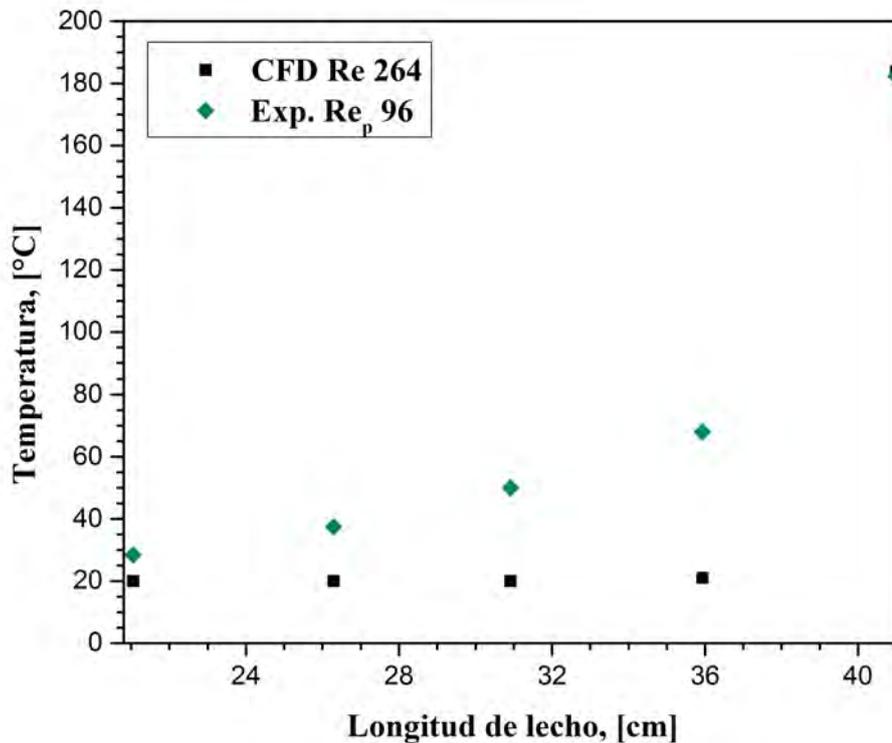


Figura 4.8: Comparación perfil de temperatura obtenido en CFD (geometría con contacto axial) a  $Re=264$  y su equivalente experimental a  $Re_p=96$  en función de la longitud del lecho.

Debido a lo anterior, se realizaron simulaciones computacionales donde se construyó una geometría en la que las partículas presentaban un contacto axial y radial tipo ensamble para Reynolds de 264 y 2090 con el fin de observar si esto tenía un efecto significativo en la transferencia de calor en el sistema 4.9 y 4.10. En las Figuras 4.11 y 4.12 se muestran los resultados de estas simulaciones para un  $Re$  de 264, donde se observa cómo el contacto radial entre partículas tiene un efecto significativo en los perfiles de temperatura axial y radial. En términos del gradiente de temperatura axial, este se tuvo en 20 cm del lecho, a diferencia de los resultados despreciando el contacto radial entre partículas, donde el gradiente de temperatura axial (Figura 4.11) era apreciable únicamente en 10 cm del lecho empacado, teniendo en ambos casos la máxima temperatura donde se ubicaba la fuente de calentamiento, y la mínima temperatura donde entraba el flujo de aire.

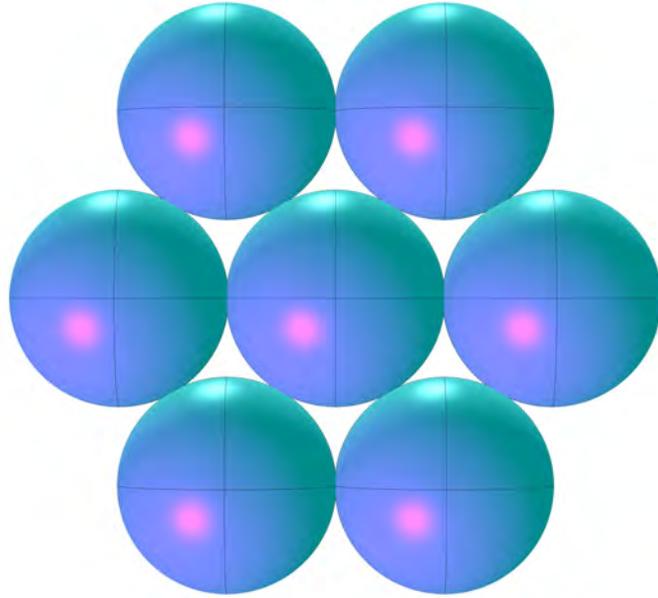


Figura 4.9: Geometría del lecho empacado en CFD con contacto radial y axial entre partículas (vista transversal).

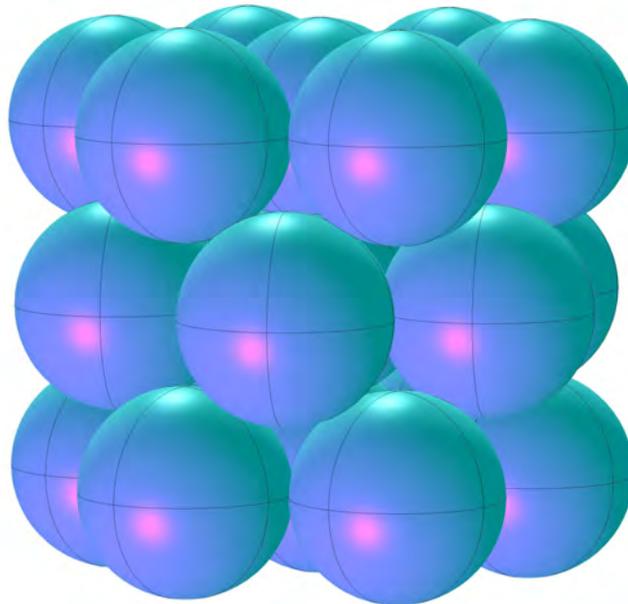


Figura 4.10: Geometría del lecho empacado en CFD con contacto radial y axial entre partículas (vista frontal).

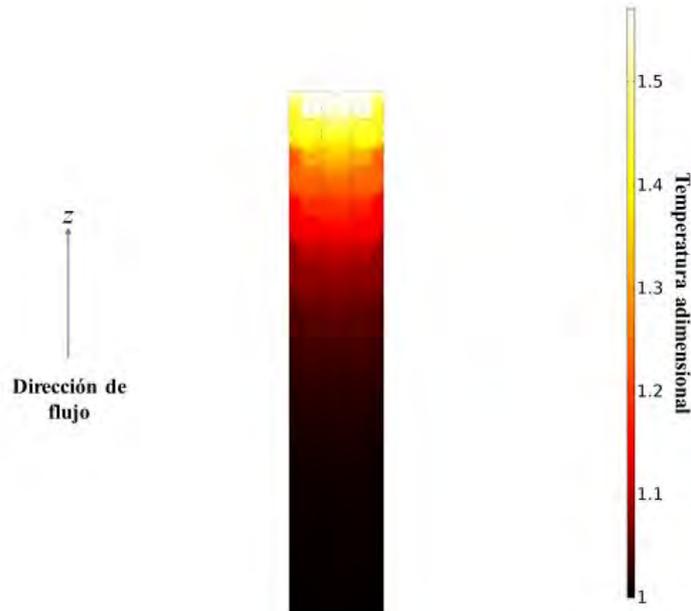


Figura 4.11: Distribución de la temperatura adimensional a un corte frontal en  $r=0$  y a un  $Re=264$ ,  $T_{in}= 293.15$  [K]. Geometría 41 cm con contacto axial y radial. Fuente de calentamiento en la parte superior del lecho.

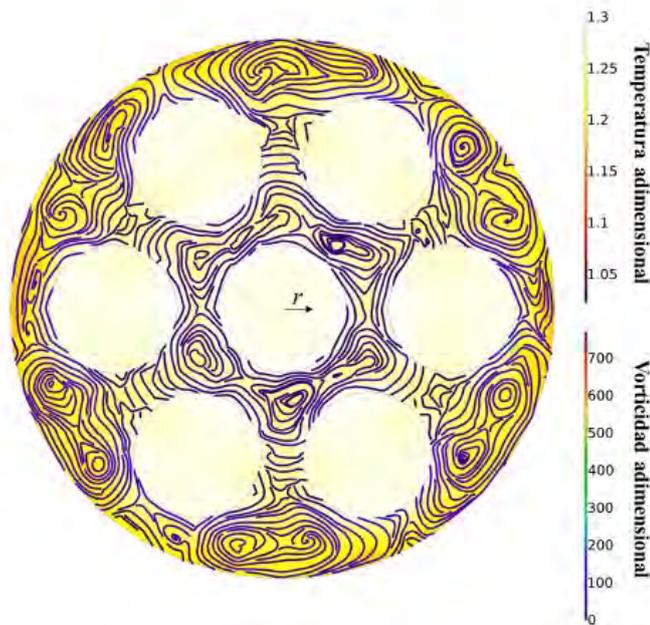


Figura 4.12: Distribución de la temperatura adimensional y líneas de corriente vorticidad adimensional a un corte transversal en  $z=0.222$  [cm] y a un  $Re=264$ ,  $T_{in}= 293.15$  [K]. Geometría 41 cm con contacto axial y radial.

En la Figura 4.13, se muestra una comparación de los perfiles de temperatura axiales para un  $Re$  de 264 cuando la geometría del sistema presenta un contacto axial y radial, así como cuando la geometría sólo presenta contacto axial, y cuando la geometría no presenta contacto entre partículas. Es evidente que los perfiles de temperatura con contacto de partículas difieren considerablemente con los obtenidos en las simulaciones cuando no se considera contacto entre las partículas. El mayor gradiente de temperatura se presenta al considerar un contacto axial y radial entre partículas, indicando que a nivel de CFD el mecanismo de transporte de calor por conducción se favorece.

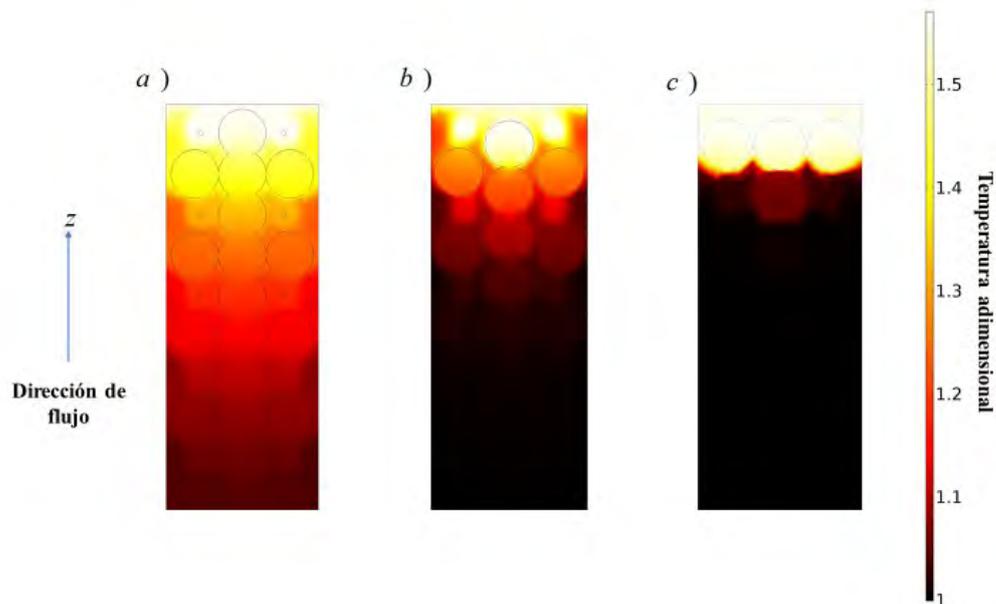


Figura 4.13: Distribución de la temperatura adimensional a un corte frontal en  $r=0$  para un  $Re=264$  a) Geometría con contacto axial y radial, b) Geometría con contacto axial y c) Geometría sin contacto.  $T_{in}= 293.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior.

Al comparar las observaciones experimentales con los resultados de CFD, se observa en la Figura 4.14 que al incrementar los puntos de contacto entre partículas se favorece la transferencia de calor por conducción entre partículas, teniendo una tendencia similar a las observaciones experimentales de temperatura. Esto indica que la descripción de las observaciones depende fuertemente de los puntos de contacto entre partículas, siendo la principal limitación cuando se evalúa un lecho empacado a nivel de CFD.

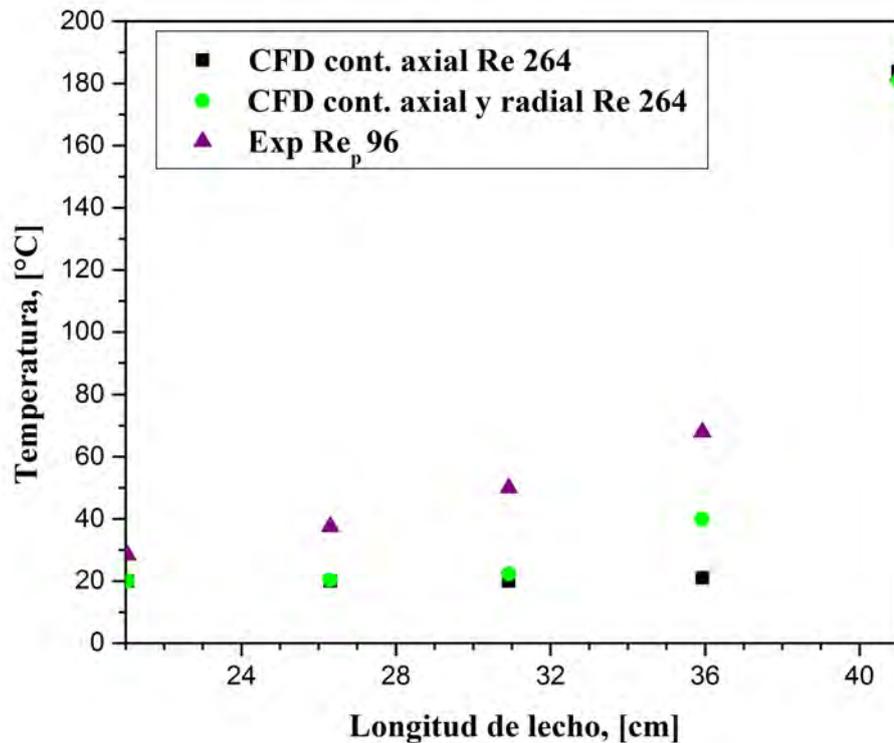


Figura 4.14: Comparación perfil de temperatura obtenido en CFD para geometrías con contacto axial (negro) y con contacto axial y radial (verde) a  $Re=264$  y su equivalente experimental a  $Re_p=96$  en función de la longitud del lecho.

#### 4.1.4. Efecto de la conductividad térmica

Debido a la incertidumbre sobre la configuración geométrica del lecho empacado también se realizó un análisis sobre el comportamiento de los perfiles de temperatura en el lecho empacado al variar la conductividad térmica del material, con el fin de estudiar cómo se comporta el sistema bajo estas condiciones, y evaluar si posible aplicación para describir las observaciones de temperatura experimentales. Como se esperaba, al aumentar este parámetro, se favorece el transporte de calor por conducción, por lo que la región donde se tiene el gradiente de temperatura también incrementa, lo cual se asimila más a las observaciones experimentales (Figura 4.15).

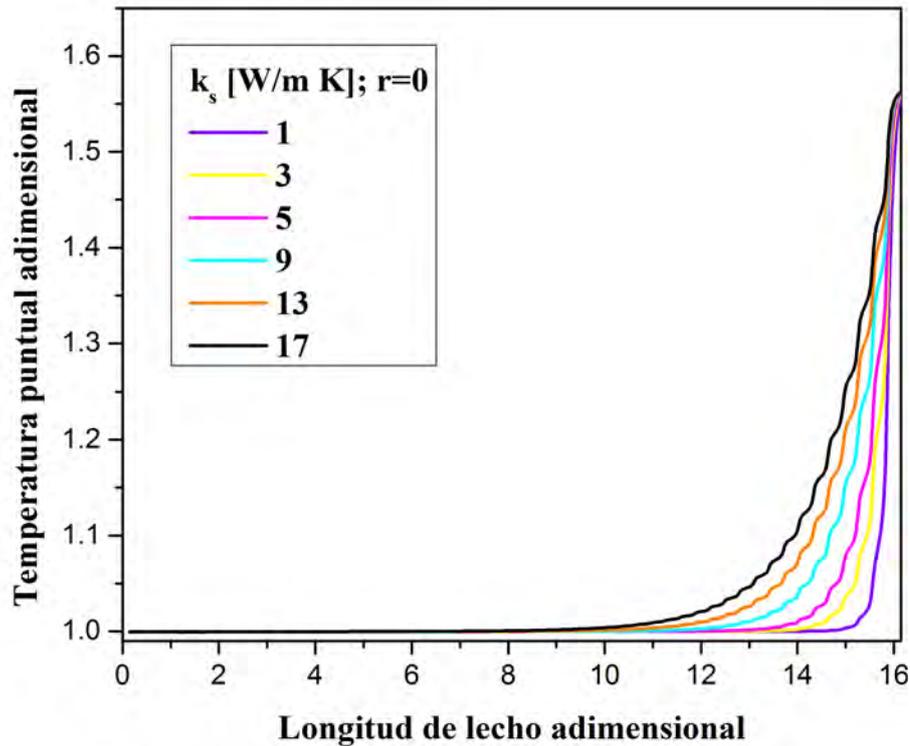


Figura 4.15: Temperatura puntual adimensional en función de la longitud del lecho adimensional a diferentes conductividades térmicas  $Re=264$  ( $r=0$ ). Geometría con contacto axial.

#### 4.1.5. Análisis en estado no estacionario

Finalmente, se llevaron a cabo simulaciones en estado transitorio. En la Figura 4.16, se presenta la transición de un perfil de temperatura axial para el  $Re=264$  y cuando la temperatura de entrada es igual a 293.15 K y cuya geometría presenta únicamente contacto axial entre partículas. En el estudio de [Castillo-Araiza \(2004\)](#) también se estudió la dinámica del sistema experimental, en el que para el caso adiabático el estado estacionario se alcanza en un tiempo aproximado de una hora. En las simulaciones realizadas en CFD no se logró alcanzar el estado estacionario ya que las capacidades computacionales con las que nuestro grupo de investigación cuenta no fueron suficientes para satisfacer las exigencias numéricas en la solución del sistema con las características de malla y geométricas de nuestro lecho. Sin embargo, se logró describir hasta los 45 segundos adimensionales, que en tiempo dimensional equivale a 22.8 min.

Como se puede observar este perfil no presenta la tendencia que mostraban los perfiles de temperatura en estado estacionario para este  $Re$  de operación por falta de tiempo de computo.

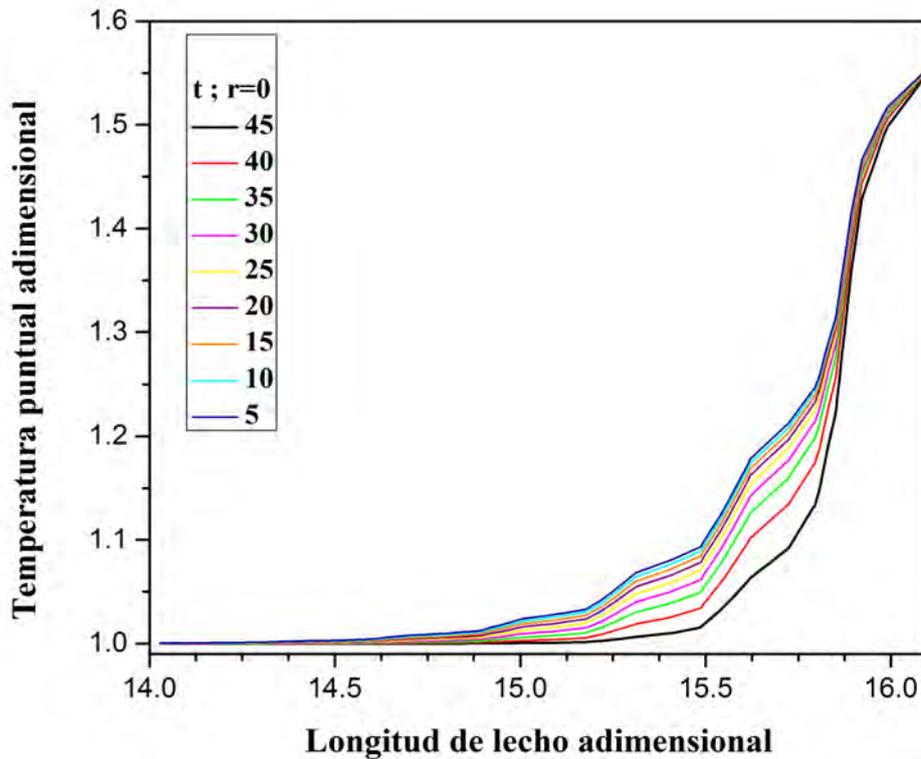


Figura 4.16: Temperatura puntual adimensional en función del tiempo adimensional para un  $Re=264$  ( $r=0$ ). Geometría 41 cm con contacto axial.

## 4.2. Lecho no isotérmico y no adiabático

### 4.2.1. Temperatura axial y radial

En las Figuras 4.17 y 4.18 se muestran los perfiles de temperatura, axial y radial respectivamente para un  $Re$  de 492 bajo condiciones de operación no isotérmicas y no adiabáticas. en estas simulaciones la fuente de calentamiento se encuentra en las paredes del tubo, de tal forma que la función que describe cómo cambia la temperatura a lo largo de la pared del lecho corresponde a un polinomio de segundo orden (Castillo-Araiza, 2004), como el que se presenta en la Ec. 2.8. En este experimento se alimenta un flujo de aire por la parte superior del lecho por lo que las menores temperaturas se encuentran en esta región del sistema.

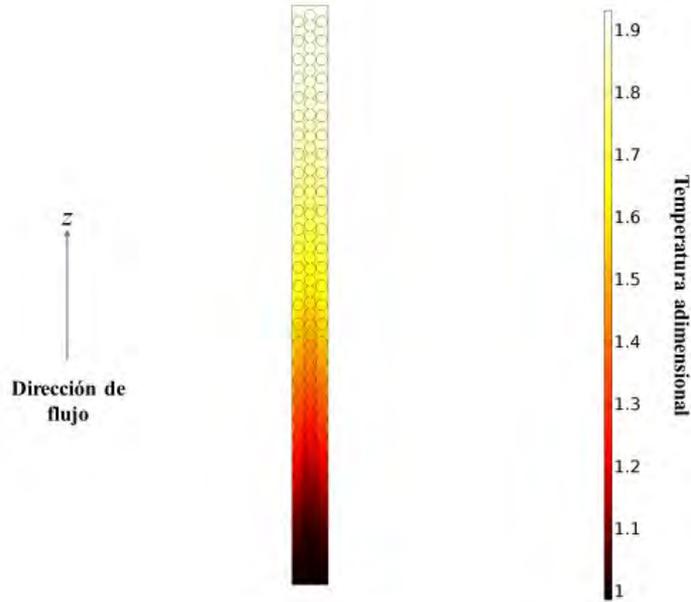


Figura 4.17: Distribución de temperatura adimensional a un corte frontal  $r=0$  para un  $Re=492$ .  $T_{in}=352.15$  [k]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial.

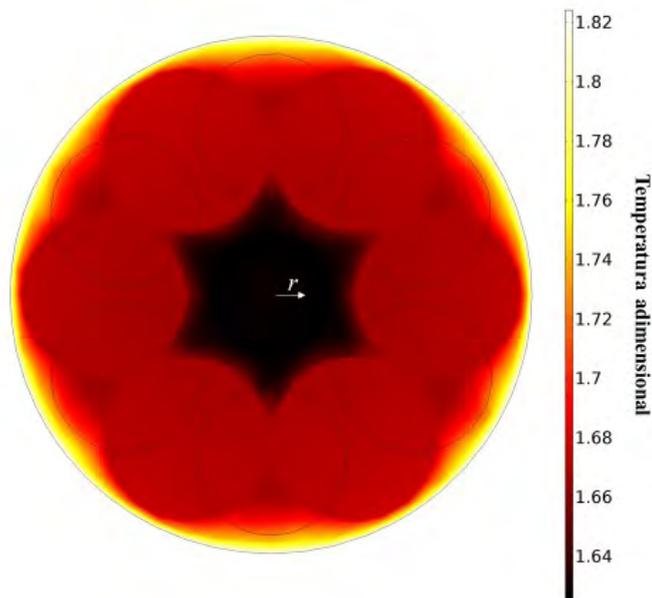


Figura 4.18: Distribución de temperatura adimensional a un corte transversal  $z=0.12$  [cm] para un  $Re=492$ .  $T_{in}=352.15$  [k]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial.

En la Figura 4.19 se muestra la distribución de la temperatura asociada a las líneas

de corriente de velocidad en función del radio del lecho a un  $Re=492$  cuando la geometría presenta contacto axial. Al sobreponer las líneas de corriente indicando la magnitud de la velocidad local, se observa que la transferencia de calor se favorece en las zonas donde la velocidad local es mayor, a un diámetro de partícula y cerca de la pared. En términos de vorticidad y el campo de temperatura adimensional (Figura 4.20) en las zonas intersticiales donde se genera vorticidad se tiene una disipación de energía mayor que en zonas donde no hay generación de vórtices.

En la zona centro del lecho la vorticidad es menor y las resistencias a la transferencia de calor aumentan, ya que los mecanismos de condición son dominantes, de tal forma que del centro del lecho a la región cercana a la pared provoca la generación de gradientes de temperatura de hasta  $63.38\text{ }^\circ\text{C}$  a la posición axial que se presenta en la Figura 4.20.

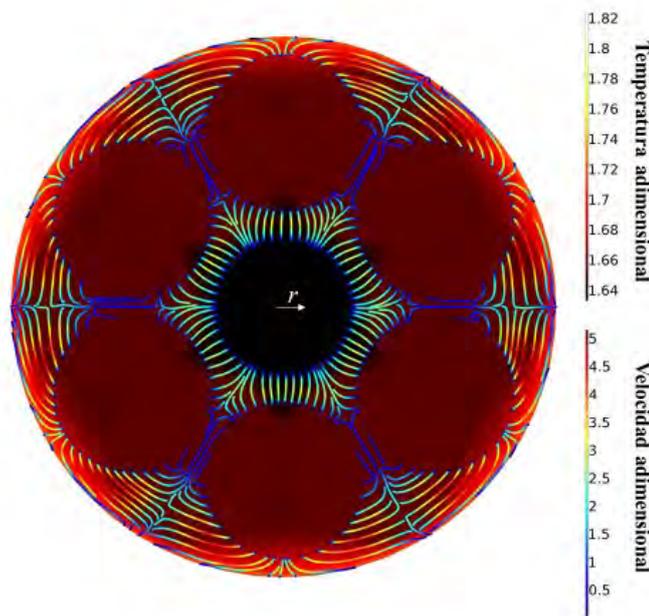


Figura 4.19: Distribución de temperatura adimensional y líneas de corriente velocidad adimensional a un corte transversal en  $z=0.12$  [cm] para un  $Re=492$ .  $T_{in}= 352.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial.

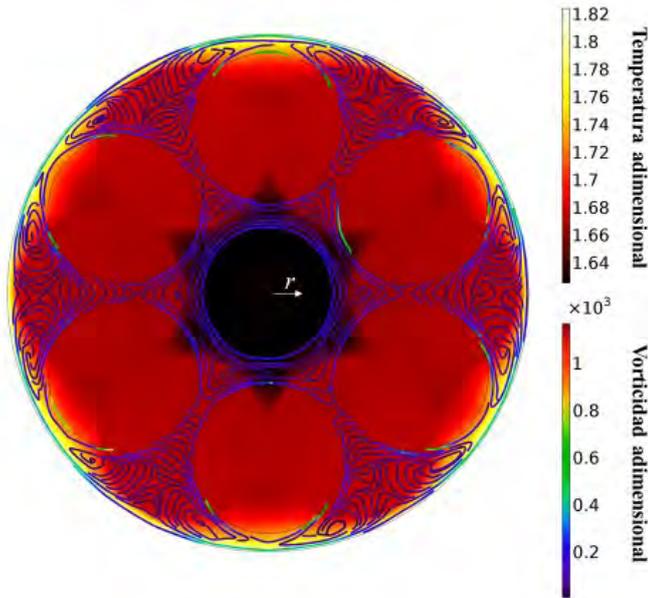


Figura 4.20: Distribución de temperatura adimensional y líneas de corriente vorticidad adimensional a un corte transversal en  $z=0.12$  [cm] para un  $Re=492$ .  $T_{in}= 352.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial.

#### 4.2.2. Temperatura promedio axial y radial

Los gradientes de temperatura se tienen en ambas direcciones, axial y radial, el mayor gradiente en la dirección axial. En la Figura 4.21 se presentan los perfiles de temperatura promedio obtenidos con CFD para diferentes  $Re$  de operación en la geometría con contacto axial. Con respecto a los perfiles axiales de temperatura, se observa que, al aumentar el flujo de entrada del aire, se favorecen los mecanismos de transporte de calor convectivos. Debido a que el punto de control de temperatura se tenía en la posición 20.5 cm, en este punto se tiene la máxima temperatura.

En la Figura 4.22 se presentan los perfiles de temperatura promedio adimensional obtenidos mediante CFD para diferentes  $Re$  de operación en función del radio del lecho en la geometría con contacto axial.

Se observa que la diferencia de temperatura en la dirección radial aumenta conforme aumenta el número de  $Re$  esto es debido a que los mecanismos convectivos se favorecen al aumentar la velocidad, por lo tanto, aumenta la temperatura en las regiones cercanas a la pared rápidamente e impidiendo transferir la energía que proviene de la fuente de calentamiento en la pared del lecho hasta el centro del lecho empacado.

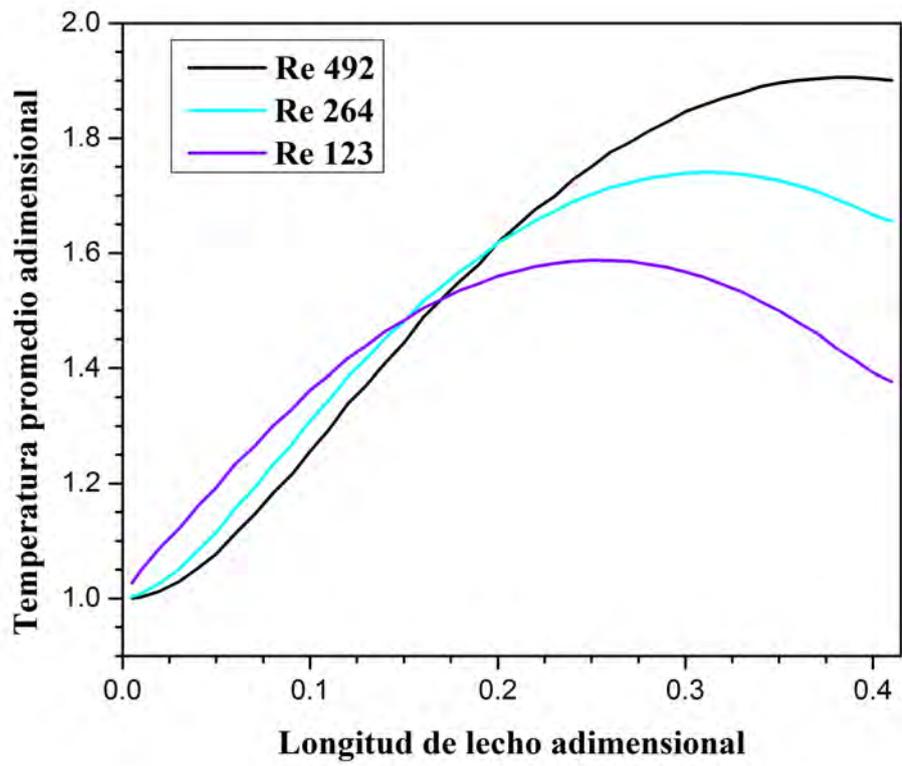


Figura 4.21: Perfiles de temperatura promedio adimensional en función de la longitud del lecho adimensional a diferentes Re de operación. Geometría 41 cm con contacto axial.

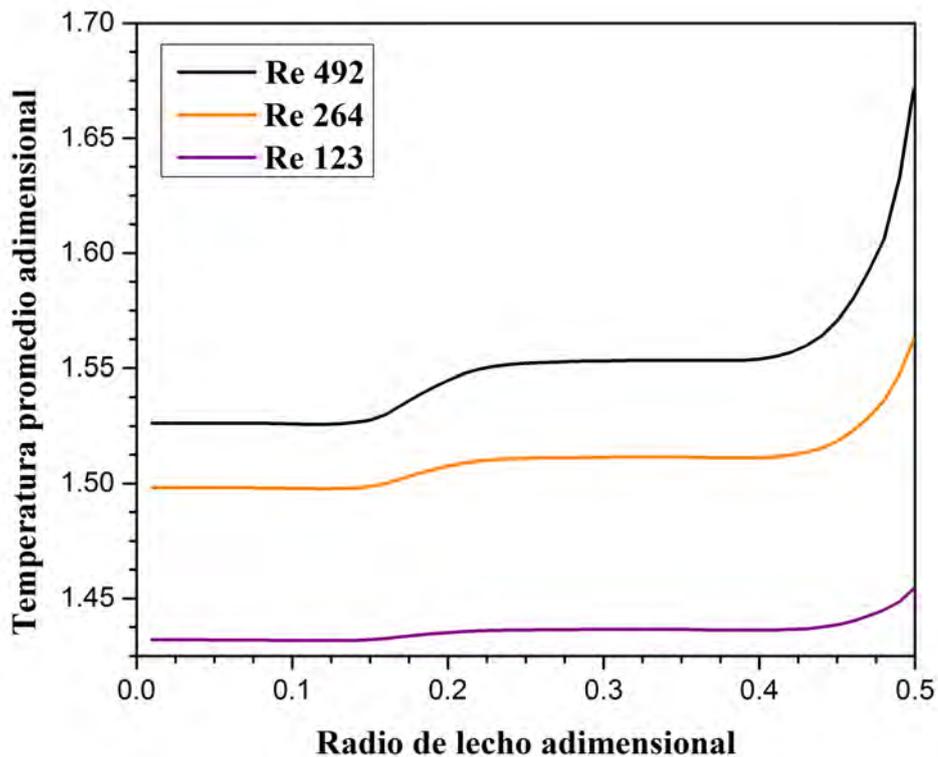


Figura 4.22: Perfiles de temperatura promedio adimensional en función del radio del lecho adimensional a diferentes Re de operación. Geometría 41 cm con contacto axial.

### 4.2.3. Comparación con las observaciones experimentales

En la Figura 4.23, se muestra una comparación del perfil de temperatura obtenido mediante CFD para un Re de 492 con el perfil de temperatura experimental para un  $Re_p$  equivalente de 101 (Castillo-Araiza, 2004). Así en el caso de estudio de transporte de calor adiabático, los resultados obtenidos mediante CFD no describen las observaciones experimentales, esto se atribuye, al igual que en caso anterior, a diversas razones, siendo la principal debido a las consideraciones geométricas en las simulaciones de CFD. Es por eso recomendable realizar estudios detallados sobre las implicaciones en la constricción de la geometría para sistemas complejos y sus estudio mediante CFD.

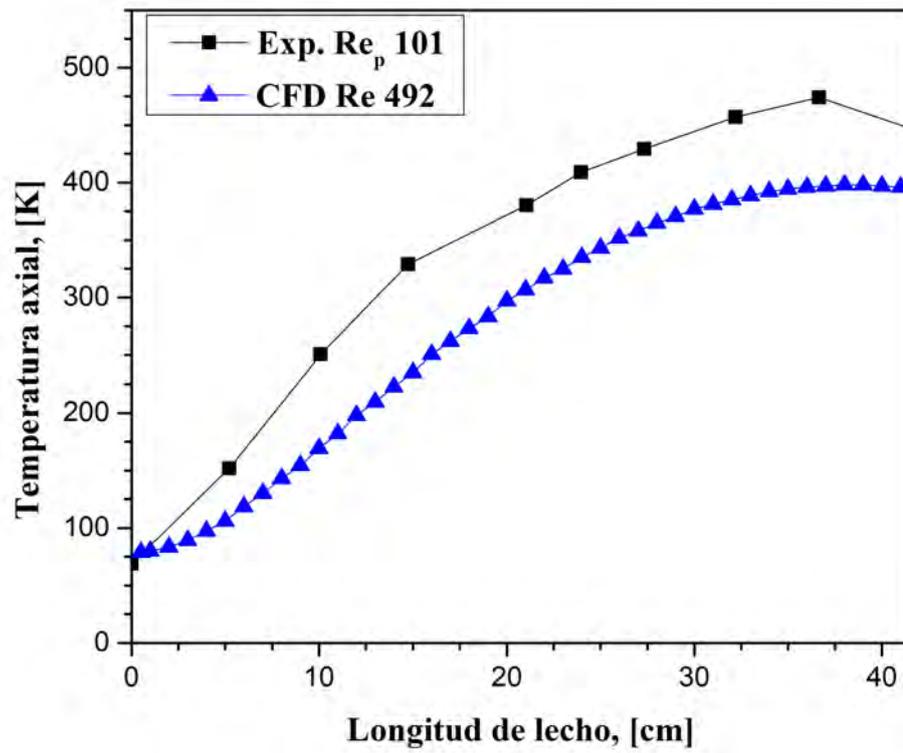


Figura 4.23: Comparación perfil de temperatura obtenido en CFD (Geometría con contacto axial) a  $Re=492$  y su equivalente experimental a  $Re_p= 101$  en función de la longitud del lecho.



# Conclusiones

A continuación, se discuten de manera breve las conclusiones del presente proyecto de investigación, así como algunas recomendaciones para trabajos futuros.

Las líneas de corriente asociadas a la velocidad y asociadas a la vorticidad muestran que el régimen de flujo en el lecho empacado no es turbulento. Sin embargo, es importante resaltar que se requieren nuevos estudios para caracterizar como es el régimen de flujo de operación dentro de estos sistemas, así como su transición en el rango de operación típica de estos equipos y estudiar cuáles son sus efectos en la transferencia de calor.

Existen diferencias entre las aproximaciones clásicas y CFD en el campo de velocidad, esto se atribuye a dos motivos principalmente el primero es debido a las consideraciones de la estructura geométrica del empaque en la solución de los modelos en CFD y las aproximaciones clásicas. Y el segundo, a la configuración de la malla para la solución del sistema en CFD. Por lo que se sugiere realizar estudios sobre cómo considerar la geometría del sistema en CFD y en las aproximaciones clásicas mediante técnicas de escaneo de la estructura del empaque (Fredrich, 1999; Manz y col., 1999). Así mismo, se sugiere realizar estudios con respecto a cuál es el tipo de malla adecuada para la solución del sistema mediante CFD implementando las técnicas de imagen antes mencionadas.

El contacto entre partículas afecta drásticamente los resultados obtenidos para los perfiles de temperatura del lecho empacado. Un estudio sobre cómo afectan el contacto global entre las partículas y las paredes del sistema permitiría estudiar de forma precisa como son los mecanismos de transferencia de calor en el lecho empacado considerando las técnicas de imagen para la construcción de la geometría antes mencionadas.

Los perfiles de temperatura obtenidos mediante CFD no describen cuantitativamente las observaciones experimentales. Es necesario un nuevo diseño de experimentos implementando técnicas no invasivas de medición (Boyer y col., 2002) para el lecho empacado estudiado en este trabajo de investigación, ya que, hasta donde se sabe, muchos estudios de las aproximaciones ingenieriles y las aproximaciones que se han realizado mediante CFD parten de las observaciones experimentales.

La diferencia de temperatura radial observada en los resultados obtenidos mediante CFD disminuye conforme el  $Re$  aumenta en el caso adiabático, mientras que para el caso no isotérmico y no adiabático aumenta conforme el  $Re$  aumenta. Estos resultados podrían estar relacionados con las consideraciones en la geometría para la solución de CFD. Es necesario realizar estudios que consideren los puntos mencionados en las conclusiones anteriores para precisar los resultados obtenidos sobre el contacto radial en el lecho empacado estudiado en este trabajo.

De forma general, los resultados obtenidos en el presente trabajo de investigación aportan información valiosa para trabajos futuros relacionados con el funcionamiento de los lechos empacados a escala industrial.



# Referencias

- Anastasov, A.I. (2003). An investigation of the kinetic parameters of the o-xylene oxidation process carried out in a packed bed of high-productive vanadia-titania catalyst vanadia-titania catalyst. Chemical Engineering Science.
- Aparicio-Mauricio, G., Ruiz, R.S., López-Isunza, F., Castillo-Araiza, C.O. (2017). A simple approach to describe hydrodynamics and its effect on heat and mass transport in an industrial wall-cooled fixed bed catalytic reactor: Odh of ethane on a MoVNbTeO formulation. Chemical Engineering Journal **321**, 584–599.
- Beek, J. (1962). Design of packed catalytic reactors, en: *Advances in Chemical Engineering Volume 3*. Elsevier, pp. 203–271.
- Bey, O., Eigenberger, G. (2001). Gas flow and heat transfer through catalyst filled tubes. International Journal of Thermal Sciences **40**, 152–164.
- Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N. (2001). Transport Phenomena. Wiley. 2nd edition edición.
- Boyer, C., Duquenne, A.M., Wild, G. (2002). Measuring techniques in gas-liquid and gas-liquid-solid reactors. Chemical Engineering Science **57**, 3185–3215.
- Calderbank, P., Moo-Young, M. (1961). The continuous phase heat and mass-transfer properties of dispersions. Chemical Engineering Science **16**, 39–54.
- Calis, H., Nijenhuis, J., Paikert, B., Dautzenberg, F., van den Bleek, C. (2001). CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing. Chemical Engineering Science **56**, 1713–1720.
- Castillo-Araiza, C.O. (2004). Estudio de los Procesos de Transferencia de Calor en un Lecho Empacado. Tesis de maestría. Universidad Autónoma Metropolitana.
- Castillo-Araiza, C.O. (2008). Estudio del comportamiento del reactor de oxidación parcial de o-xileno a anhídrido ftálico. Tesis de doctorado. Universidad Autónoma Metropolitana.
- Castillo-Araiza, C.O., Jiménez-Islas, H., López-Isunza, F. (2007). Heat-transfer studies in packed-bed catalytic reactors of low tube/particle diameter ratio. Industrial & Engineering Chemistry Research **46**, 7426–7435.

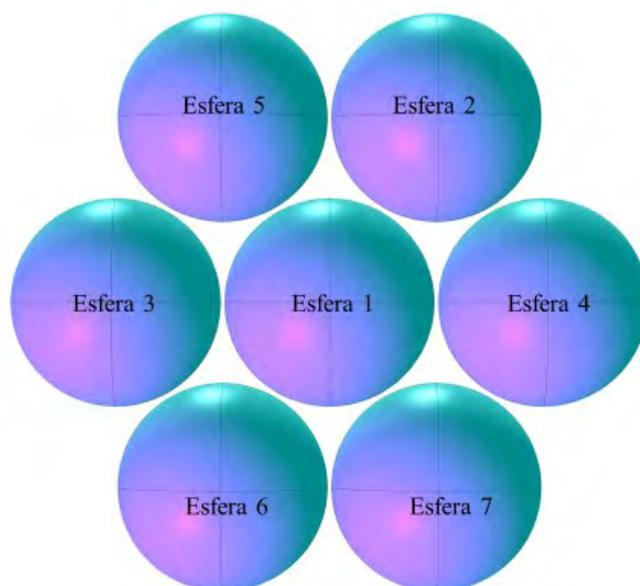
- Che Galicia, G. (2016). Comportamiento de un óxido mixto multimetálico (MoVTenbO) como catalizador para la deshidrogenación oxidativa de etano en un reactor de lecho empacado. Tesis de doctorado. Universidad Autónoma Metropolitana.
- Coussirat, M., Guardo, A., Mateos, B., Egusquiza, E. (2007). Performance of stress-transport models in the prediction of particle-to-fluid heat transfer in packed beds. Chemical Engineering Science **62**, 6897–6907.
- Cresswell, D.L., Dixon, A.G. (1982). Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds. AIChE Journal **28**, 511–513.
- Huerta de la Cruz, Z. (2013). Simulación de un reactor de lecho empacado para producción de anhídrido ftálico y caracterización del catalizador empleando. Tesis de maestría. Instituto Tecnológico de Celaya.
- Davidson, P.A. (2004). Turbulence: An Introduction for Scientists and Engineers. Oxford University Press.
- Dixon, A.G. (1988). Correlations for wall and particle shape effects on fixed bed bulk voidage. The Canadian Journal of Chemical Engineering **66**, 705–708.
- Dixon, A.G. (1997). Heat transfer in fixed beds at very low  $d_t$  tube-to-particle diameter ratio. Industrial & Engineering Chemistry Research **36**, 3053–3064.
- Dixon, A.G. (2017). Local transport and reaction rates in a fixed bed reactor tube: Endothermic steam methane reforming. Chemical Engineering Science **168**, 156–177.
- Dixon, A.G., Cresswell, D.L. (1979). Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds. AIChE Journal **25**, 663–676.
- Dixon, A.G., van Dongeren, J.H. (1998). The influence of the tube and particle diameters at constant ratio on heat transfer in packed beds. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification **37**, 23–32.
- Dixon, A.G., Nijemeisland, M., Stitt, E.H. (2005). CFD study of heat transfer near and at the wall of a fixed bed reactor tube: Effect of wall conduction. Industrial & Engineering Chemistry Research **44**, 6342–6353.
- Dixon, A.G., Nijemeisland, M., Stitt, E.H. (2013). Systematic mesh development for 3d cfd simulation of fixed beds: Contact points study. Computers and Chemical Engineering **48**, 135–153.
- Dixon, A.G., Taskin, M.E., Nijemeisland, M., Stitt, E.H. (2011). Systematic mesh development for 3d cfd simulation of fixed beds: Single sphere study. Computers & Chemical Engineering **35**, 1171–1185.
- Fredrich, J. (1999). 3d imaging of porous media using laser scanning confocal microscopy with application to microscale transport processes. Physics and Chemistry of the Earth, Part A: Solid Earth and Geodesy **24**, 551–561.

- Dekhtyar, R.A., Gorine, A.V., Mukhin, V.A. (2002). Heat transfer in a packed bed at moderate values of the Reynolds number. High Temperature .
- Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M., Recasens, F., Egusquiza, E. (2005). Influence of the turbulence model in CFD modeling of wall-to-fluid heat transfer in packed beds. Chemical Engineering Science **60**, 1733–1742.
- Jafari, A., Zamankhan, P., Mousavi, S., Pietarinen, K. (2008). Modeling and CFD simulation of flow behavior and dispersivity through randomly packed bed reactors. Chemical Engineering Journal **144**, 476–482.
- Kershenbaum, L.S., Lopez-Isunza, F. (1982). Dynamic behavior of an industrial scale fixed-bed catalytic reactor, en: *ACS Symposium Series*. AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, pp. 109–120.
- Lerou, J.J., Froment, G.F. (1978). Estimation of heat transfer parameters in packed beds from radial temperature profiles. The Chemical Engineering Journal **15**, 233–237.
- Chi-Hsiung Li, L.C., Finlayson, B. (1976). Heat transfer in packed beds: A reevaluation. Chemical Engineering and Science .
- Logtenberg, S., Nijemeisland, M., Dixon, A. (1999). Computational fluid dynamics simulations of fluid flow and heat transfer at the wall-particle contact points in a fixed-bed reactor. Chemical Engineering Science **54**, 2433–2439.
- Magnico, P. (2009). Pore-scale simulations of unsteady flow and heat transfer in tubular fixed beds. AIChE Journal **55**, 849–867.
- Malang, J., Kumar, P., Saptoru, A. (2015). Computational fluid dynamics-based hydrodynamics studies in packed bed columns: Current status and future directions. International Journal of Chemical Reactor Engineering **13**.
- Manz, B., Alexander, P., Gladden, L.F. (1999). Correlations between dispersion and structure in porous media probed by nuclear magnetic resonance. Physics of Fluids **11**, 259–267.
- Marx, R. (2012). Kinetics of the Selective Oxidation of o-Xylene to Phthalic Anhydride. Tesis de doctorado. Clausthal University of Technology.
- McGreavy, C., Foumeny, E., Javed, K. (1986). Characterization of transport properties for fixed bed in terms of local bed structure and flow distribution. Chemical Engineering Science **41**, 787–797.
- Mongkhonsi, T., Kershenbaum, L. (1998). The effect of deactivation of a V<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/TiO<sub>2</sub> (anatase) industrial catalyst on reactor behaviour during the partial oxidation of o-xylene to phthalic anhydride. Applied Catalysis A: General **170**, 33–48.
- Nijemeisland, M., Dixon, A.G. (2001). Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed. Chemical Engineering Journal **82**, 231–246.

- Nijemeisland, M., Dixon, A.G. (2004). CFD study of fluid flow and wall heat transfer in a fixed bed of spheres. AICHE Journal **50**, 906–921.
- Papageorgiou, J., Froment, G. (1995). Simulation models accounting for radial voidage profiles in fixed-bed reactors. Chemical Engineering Science **50**, 3043–3056.
- Partopour, B., Dixon, A.G. (2016). Resolved-particle fixed bed CFD with microkinetics for ethylene oxidation. AICHE Journal **63**, 87–94.
- Pope, S.B. (2012). Turbulent Flows. Cambridge University Press.
- Reddy, R.K., Joshi, J.B. (2008). CFD modeling of pressure drop and drag coefficient in fixed and expanded beds. Chemical Engineering Research and Design **86**, 444–453.
- Romero Limones, A. (2017). Evaluación de la transferencia de calor en estado estacionario y dinámico de un lecho quisi-adiabático y con calentamiento en la pared con una baja relación dt/dp. Tesis de maestría. Universidad Autónoma Metropolitana.
- Slattery, J.C. (1999). Advanced Transport Phenomena. Cambridge University Press.
- Smirnov, E., Muzykantov, A., Kuzmin, V., Kronberg, A., Zolotarskii, I. (2003). Radial heat transfer in packed beds of spheres, cylinders and rashig rings. Chemical Engineering Journal **91**, 243–248.
- Tobís, J. (2000). Influence of bed geometry on its frictional resistance under turbulent flow conditions. Chemical Engineering Science **55**, 5359–5366.
- Tsotsas, E., Schlünder, E.U. (1990). Heat transfer in packed beds with fluid flow: remarks on the meaning and the calculation of a heat transfer coefficient at the wall. Chemical Engineering Science **45**, 819–837.
- Vortmeyer, D., Adam, W. (1984). Steady-state measurements and analytical correlations of axial effective thermal conductivities in packed beds at low gas flow rates. International Journal of Heat and Mass Transfer **27**, 1465–1472.
- Wainwright, M.S., Foster, N.R. (1979). Catalysts, kinetics and reactor design in phthalic anhydride synthesis. Catalysis Reviews **19**, 211–292.
- Wehinger, G.D. (2016). Particle-resolved CFD simulations of catalytic flow reactors. Tesis de doctorado. Technischen Universität Berlin.
- Wilcox, D.C. (1993). Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries.
- Yagi, S., Wakao, N. (1959). Heat and mass transfer from wall to fluid in packed beds. AICHE Journal **5**, 79–85.

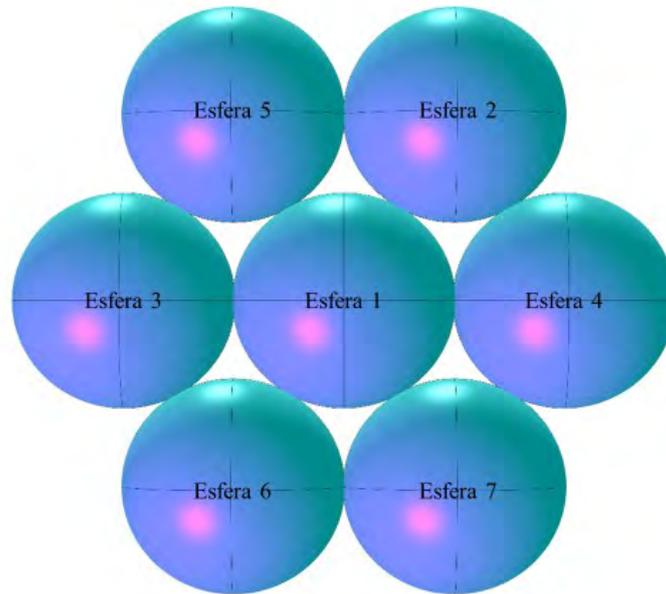
# Apéndice A

## A.1. Construcción de la geometría sin contacto radial adimensional



Elemento geométrico	Radio	Longitud	$x$	$y$	$z$
Tubo	0.5	$L$	0	0	$0.0038/l$
Esfera 1	$0.0040/l$	-	0	0	$0.008/l$
Esfera 2	$0.0040/l$	-	$0.004075/l$	$0.0071/l$	$0.008/l$
Esfera 3	$0.0040/l$	-	$-0.00815/l$	0	$0.008/l$
Esfera 4	$0.0040/l$	-	$0.00815/l$	0	$0.008/l$
Esfera 5	$0.0040/l$	-	$-0.00815/l$	$0.0071/l$	$0.008/l$
Esfera 6	$0.0040/l$	-	$-0.004075/l$	$-0.0071/l$	$0.008/l$
Esfera 7	$0.0040/l$	-	$0.004075/l$	$-0.0071/l$	$0.008/l$

## A.2. Construcción de la geometría con contacto radial adimensional



Elemento geométrico	Radio	Longitud	$x$	$y$	$z$
Tubo	0.5	$L$	0	0	$0.0038/l$
Esfera 1	$0.0040/l$	-	0	0	$0.008/l$
Esfera 2	$0.0040/l$	-	$0.00397/l$	$0.0069/l$	$0.008/l$
Esfera 3	$0.0040/l$	-	$-0.0079/l$	0	$0.008/l$
Esfera 4	$0.0040/l$	-	$0.0079/l$	0	$0.008/l$
Esfera 5	$0.0040/l$	-	$-0.00397/l$	$0.0069/l$	$0.008/l$
Esfera 6	$0.0040/l$	-	$-0.00397/l$	$-0.0069/l$	$0.008/l$
Esfera 7	$0.0040/l$	-	$0.00397/l$	$-0.0069/l$	$0.008/l$

# Apéndice B

## B.1. Pruebas de independencia de malla 1

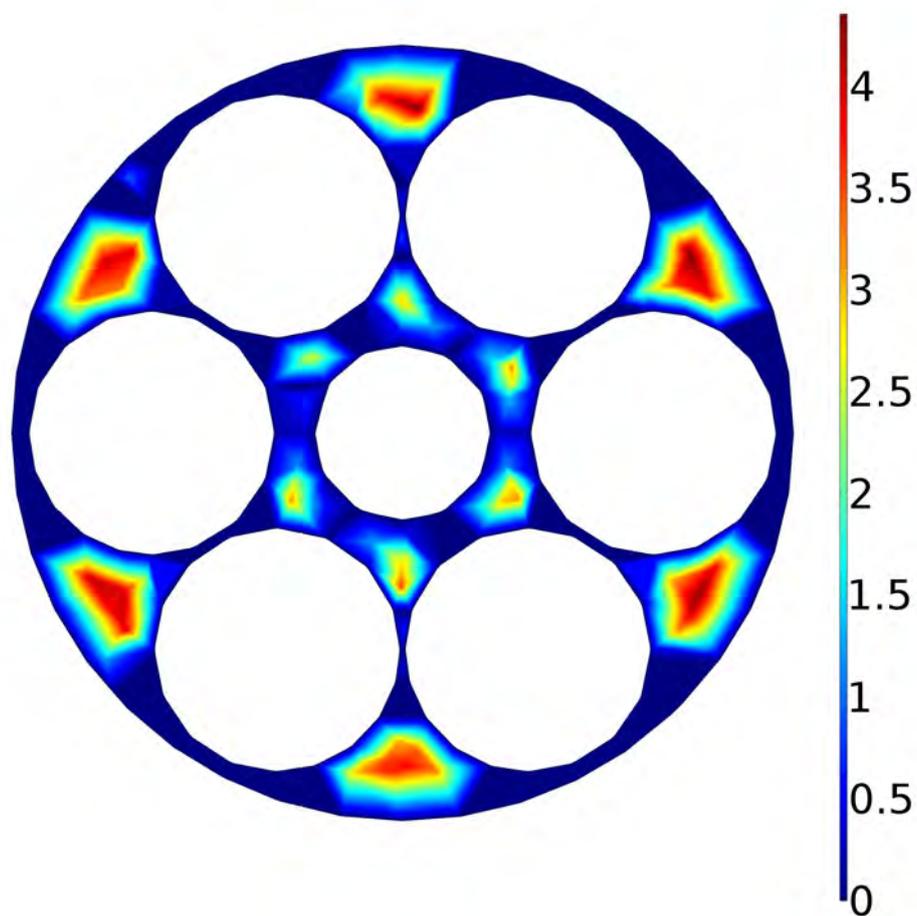


Figura B.1: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=264$ .  $V_{in}=0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 1

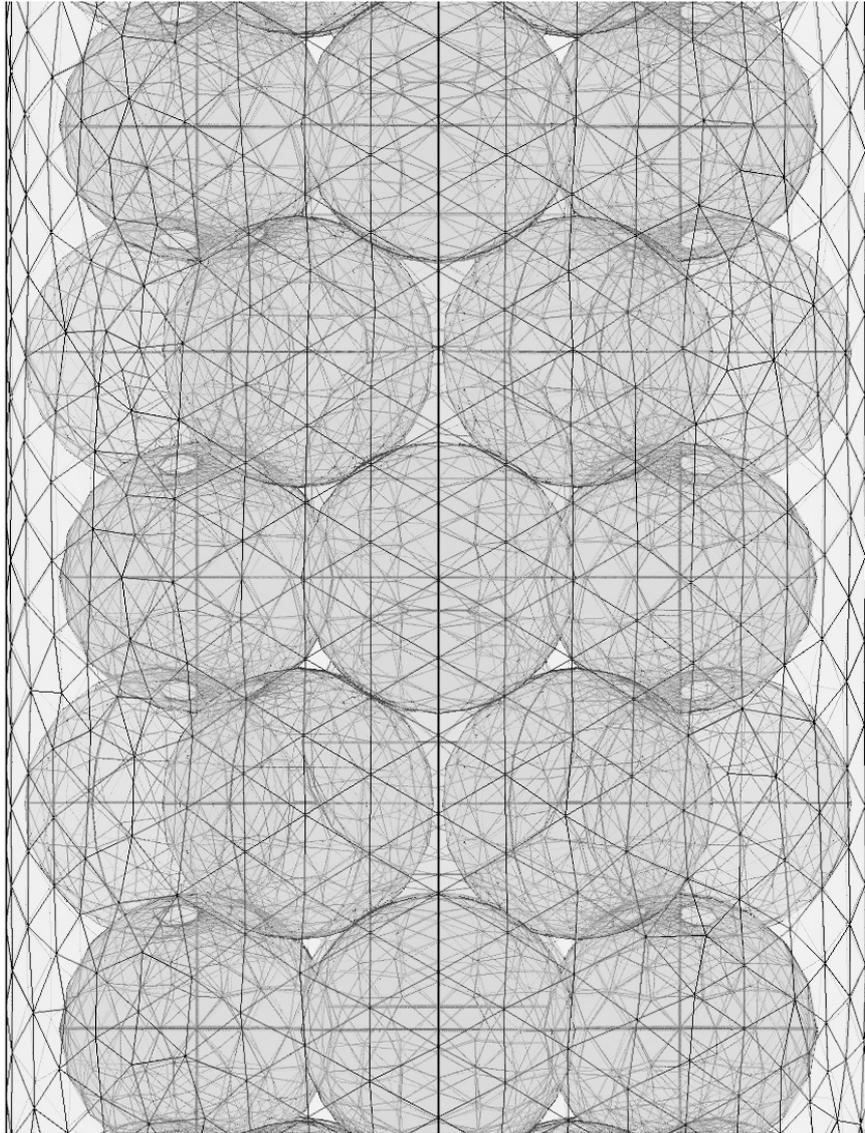


Figura B.2: Malla 1

Tabla B.1: Parámetros de malla 1.

Número de elementos totales	1896282
Calidad mínima del elemento	0.005316
Volumen de malla [m <sup>2</sup> ]	12.63
Tasa máxima de crecimiento	6.674

## B.2. Pruebas de independencia de malla 2

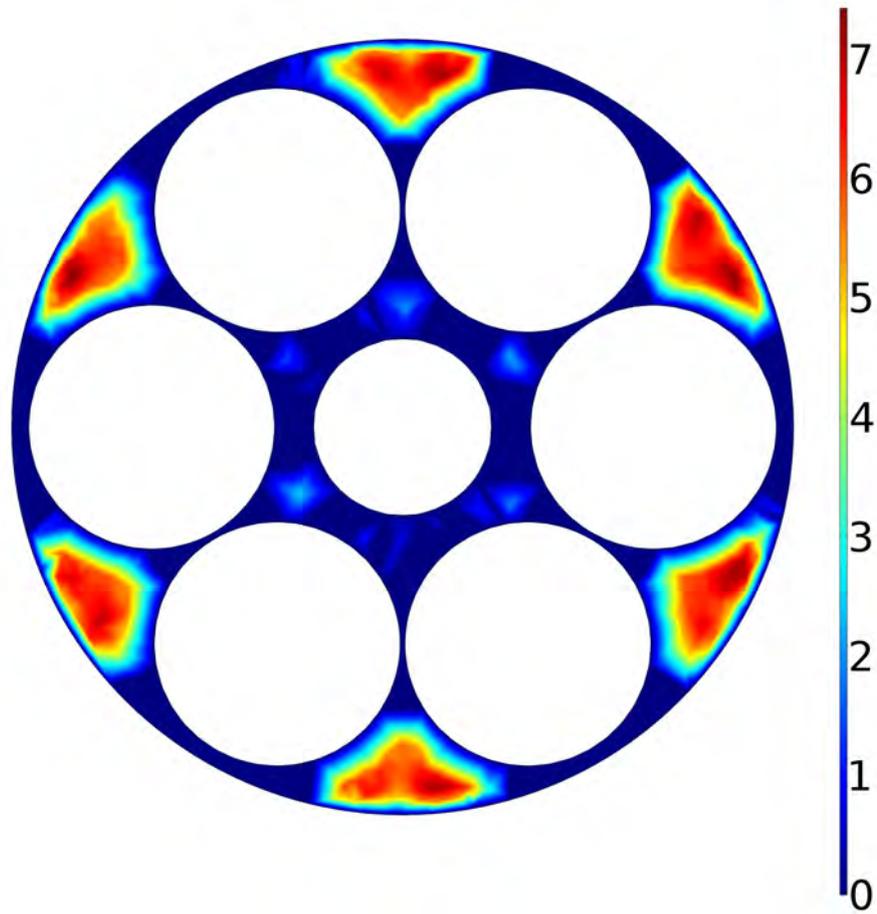


Figura B.3: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=264$ .  $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 2

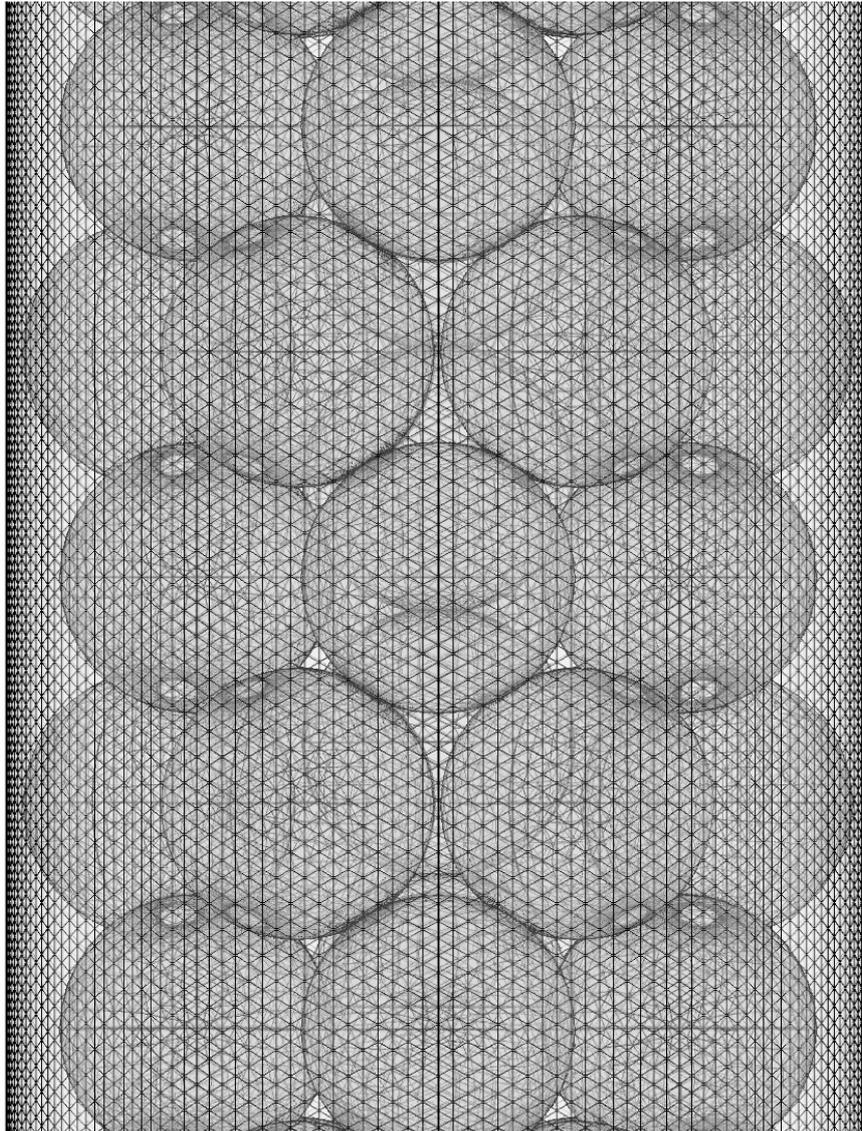


Figura B.4: Malla 2

Tabla B.2: Parámetros de malla 2.

Número de elementos totales	4093653
Calidad mínima del elemento	0.003257
Volumen de malla [m <sup>2</sup> ]	12.66
Tasa máxima de crecimiento	7.45

### B.3. Pruebas de independencia de malla 3

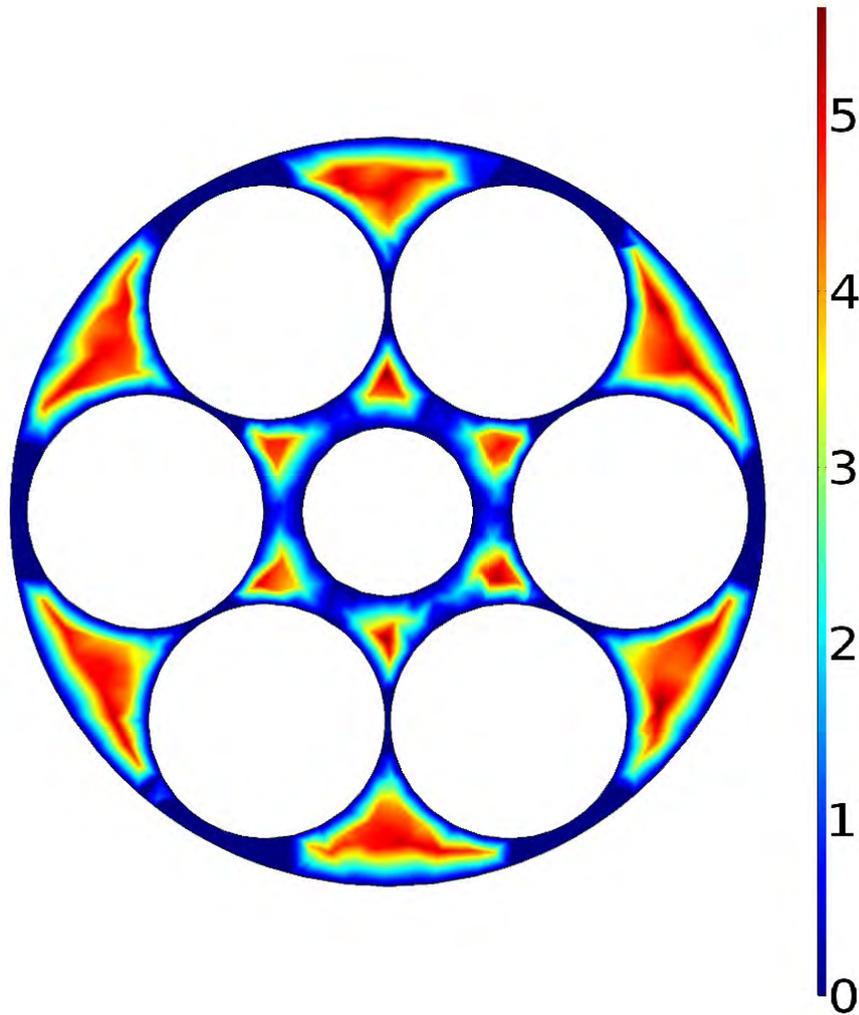


Figura B.5: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=264$ .  $V_{in}=0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 3

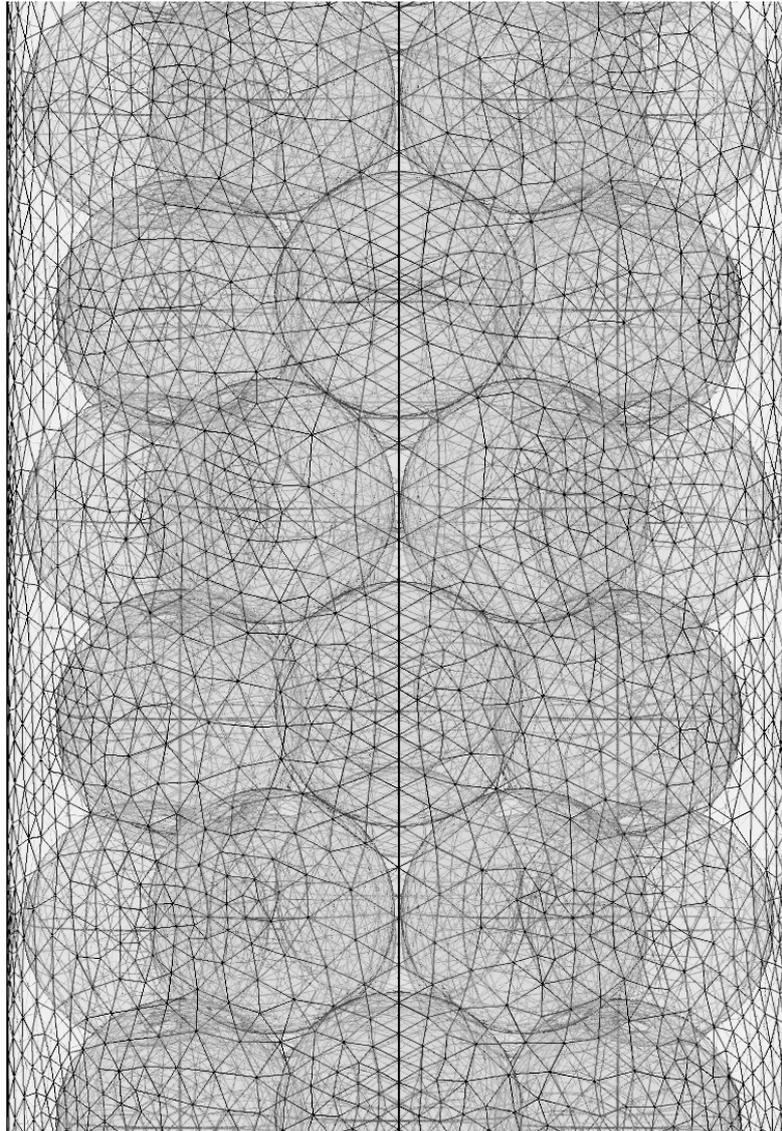


Figura B.6: Malla 3

Tabla B.3: Parámetros de malla 3.

Número de elementos totales	9497431
Calidad mínima del elemento	2.565E-12
Volumen de malla [m <sup>2</sup> ]	12.68
Tasa máxima de crecimiento	135.9

#### B.4. Pruebas de independencia de malla 4

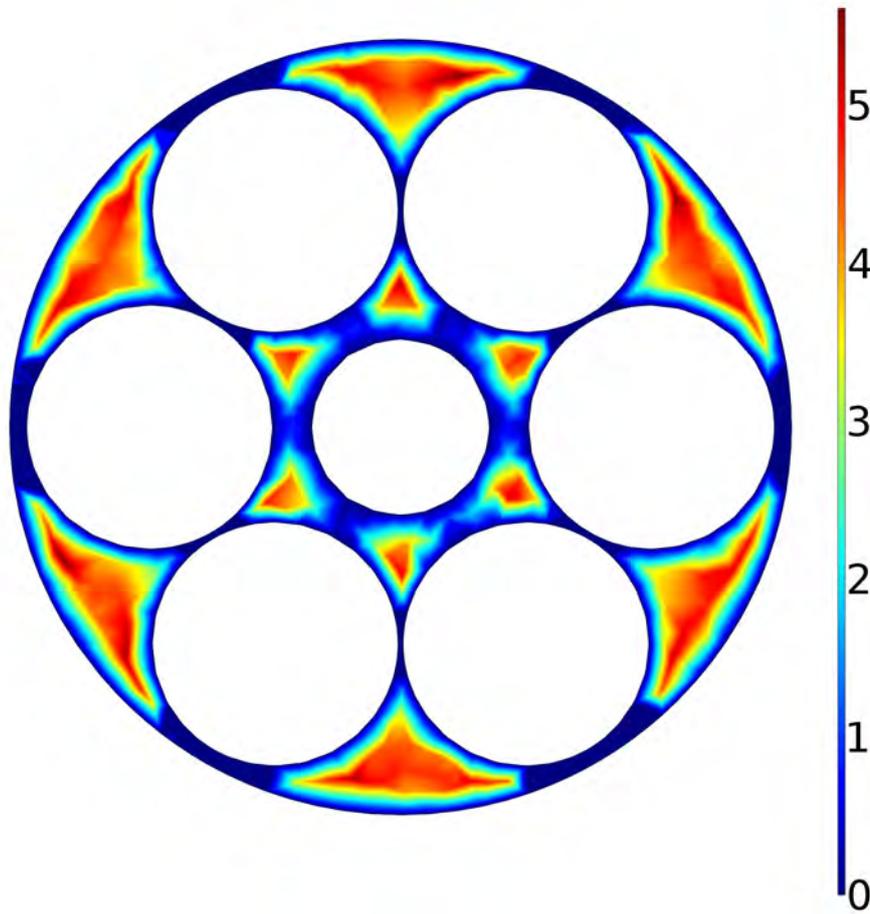


Figura B.7: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=264$ .  $V_{in}= 0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 4

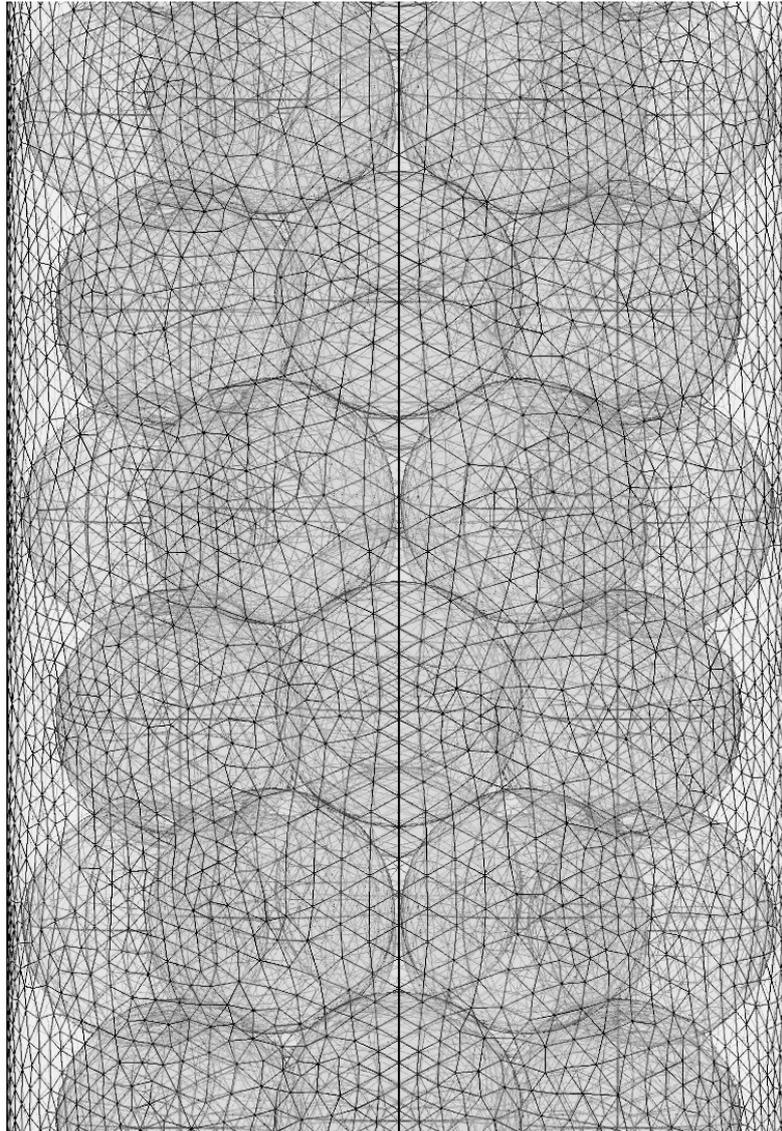


Figura B.8: Malla 4

Tabla B.4: Parámetros de malla 4.

Número de elementos totales	6735329
Calidad mínima del elemento	3.905E-4
Volumen de malla [m <sup>2</sup> ]	12.66
Tasa máxima de crecimiento	48.5

## B.5. Pruebas de independencia de malla 5

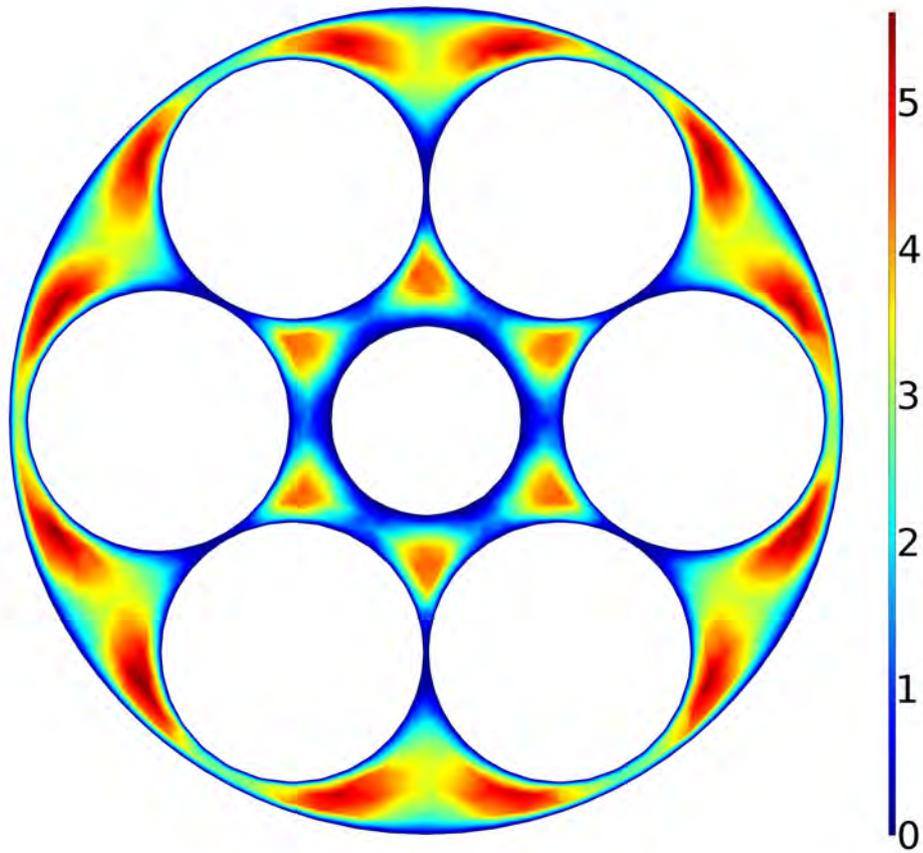


Figura B.9: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=264$ .  $V_{in}=0.1569$ [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial. Malla 5

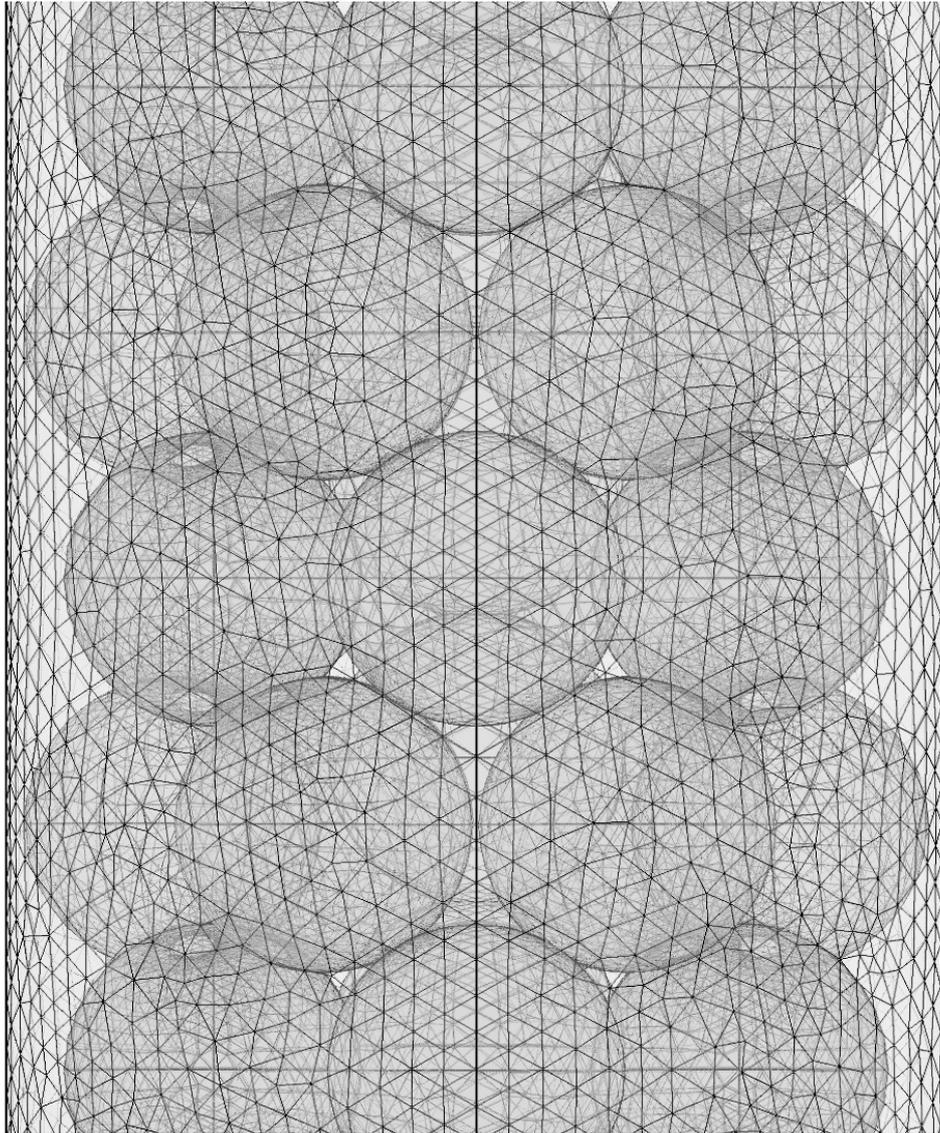


Figura B.10: Malla 5

Tabla B.5: Parámetros de malla 5.

Número de elementos totales	11216323
Calidad mínima del elemento	3.645E-4
Volumen de malla [m <sup>2</sup> ]	12.67
Tasa máxima de crecimiento	2.835



# Apéndice C

## C.1. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 264

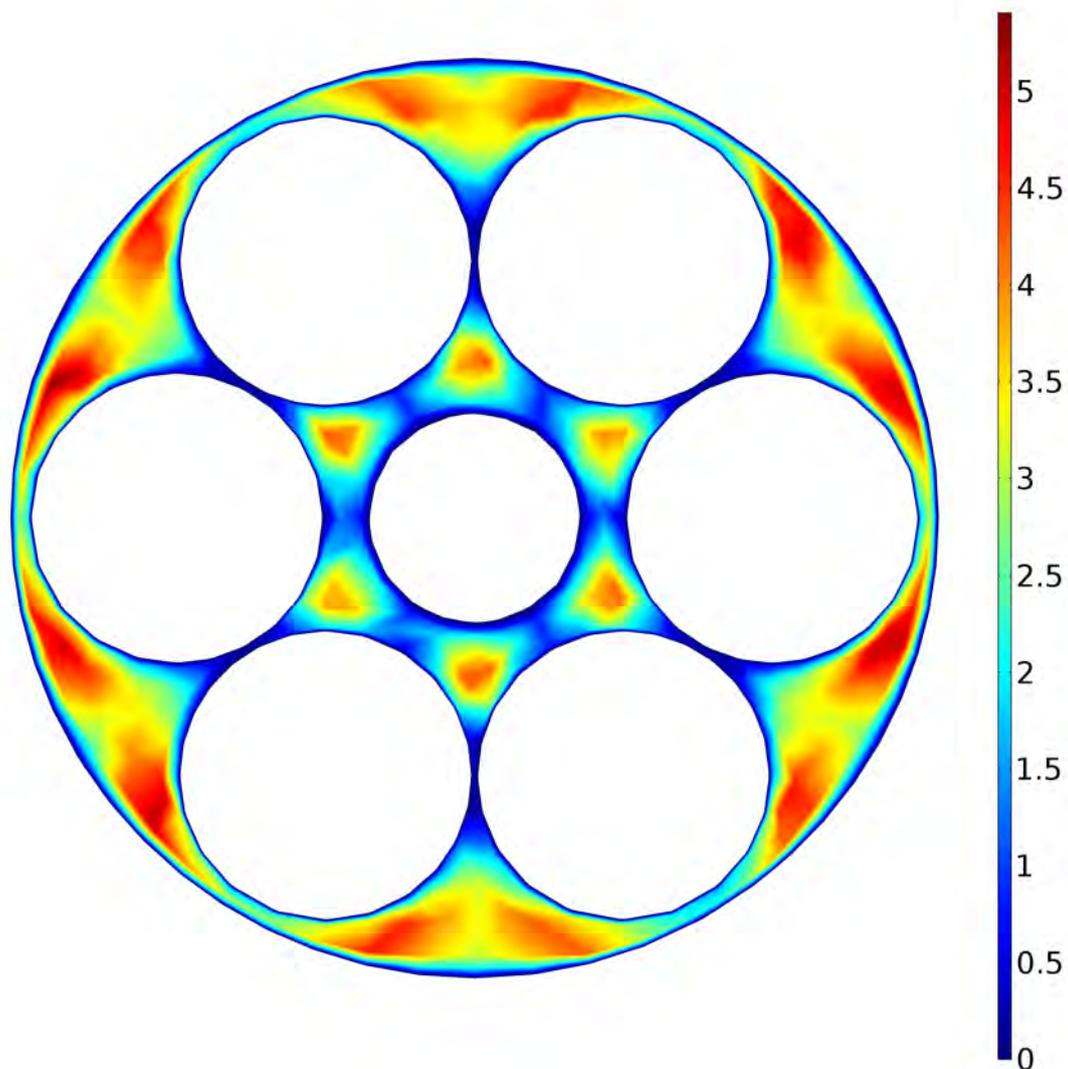


Figura C.1: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=264$ .  $V_{in}=0.1569$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

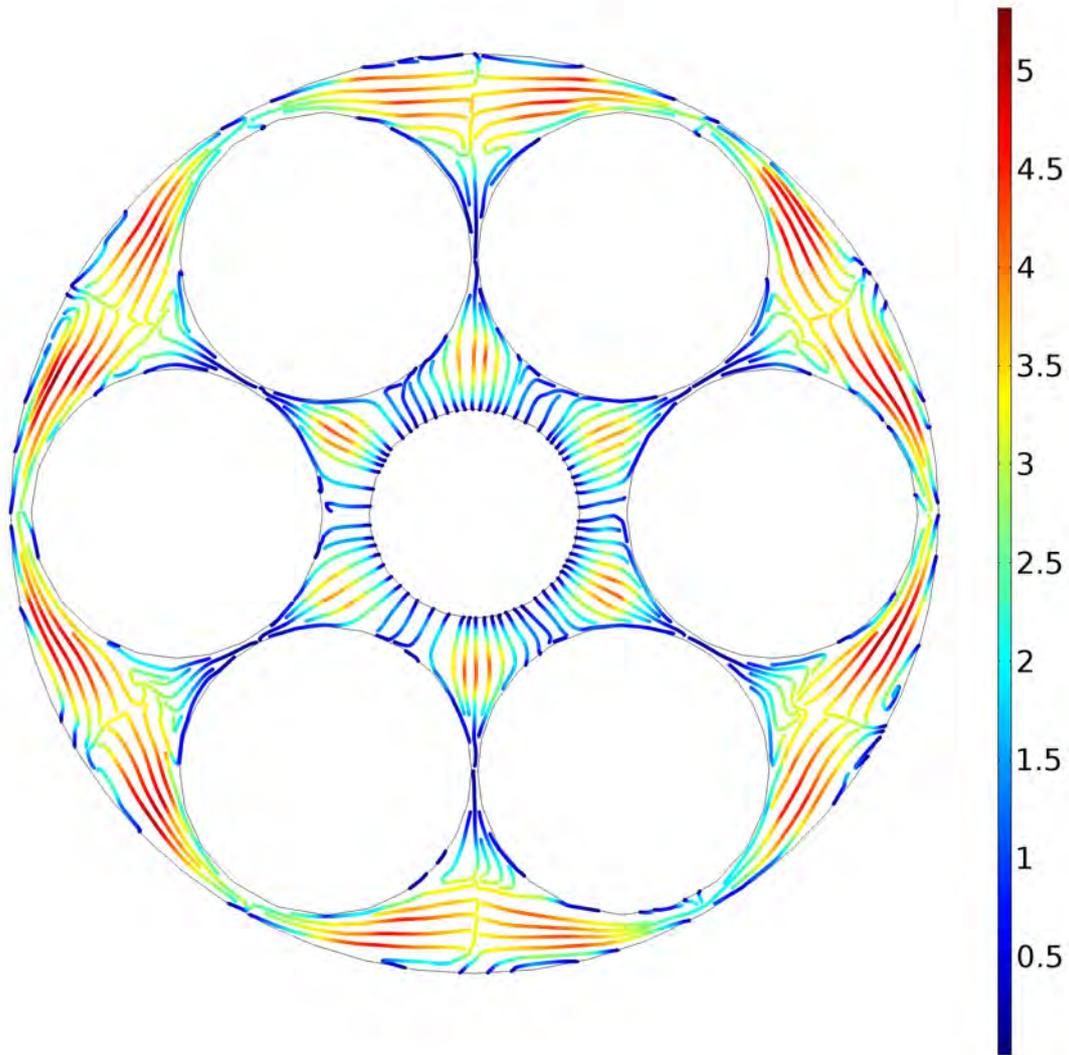


Figura C.2: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=264$ .  $V_{in}= 0.1569$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

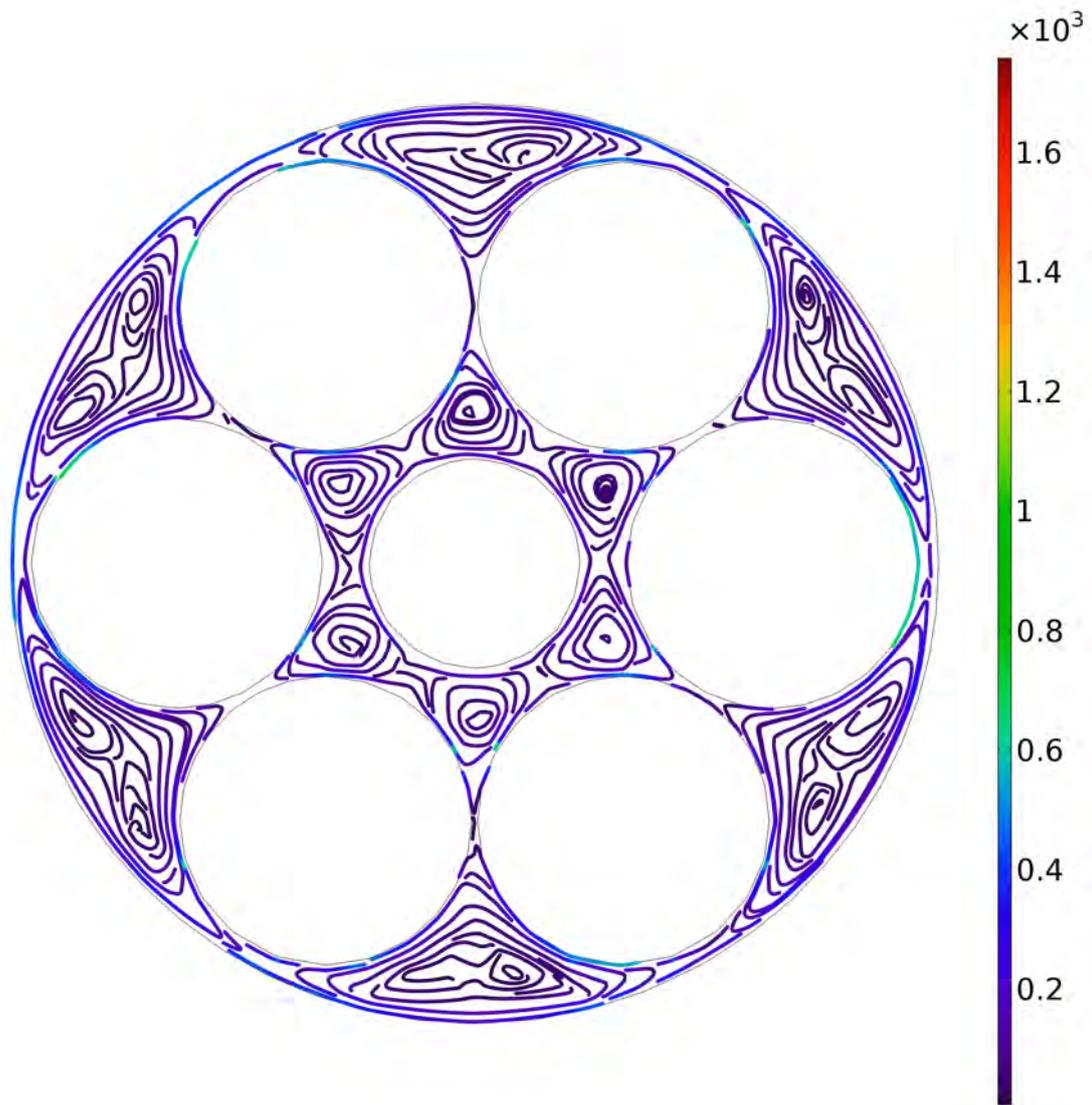


Figura C.3: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=264$ .  $V_{in}= 0.1569$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

## C.2. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 526

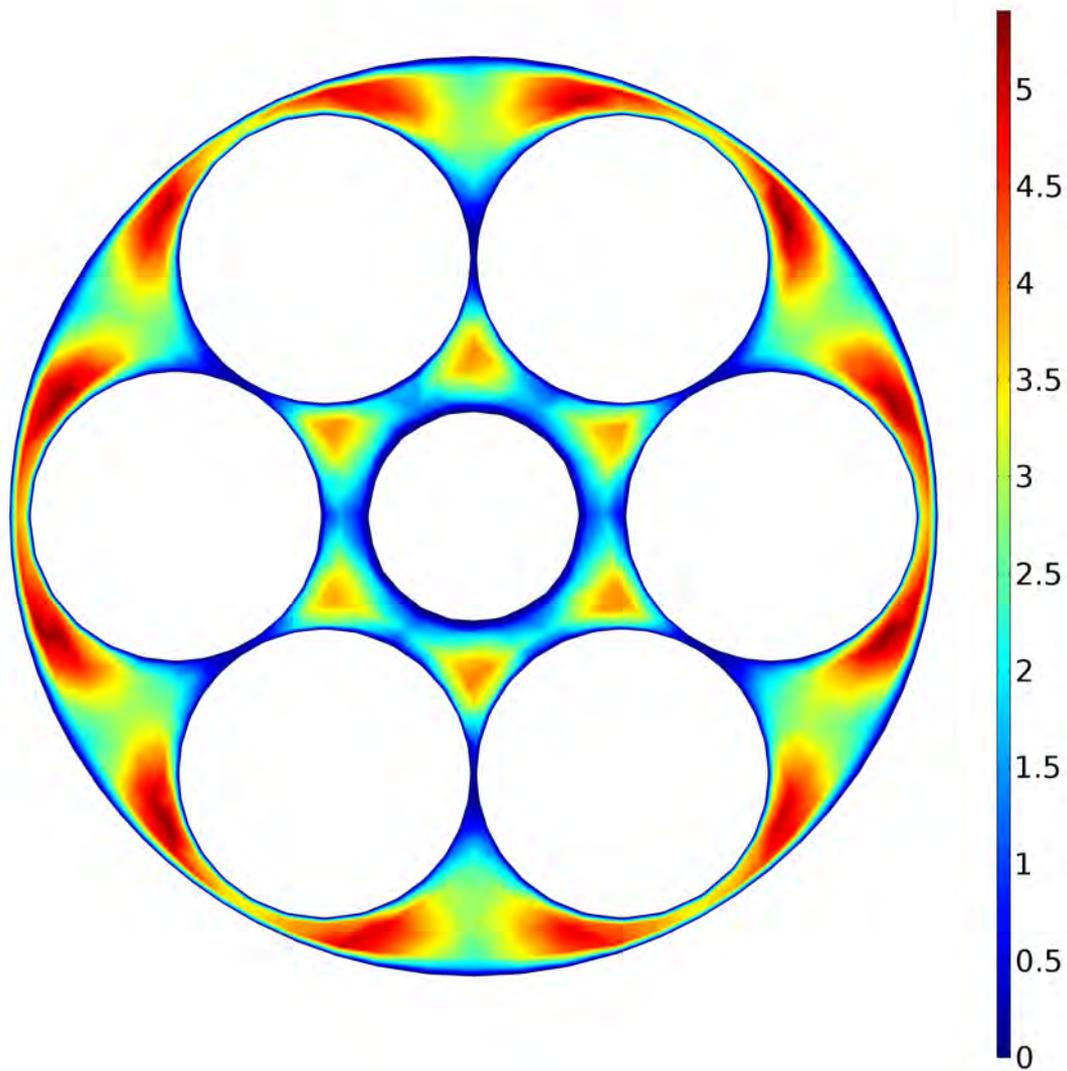


Figura C.4: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=526$ .  $V_{in} = 0.3127$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

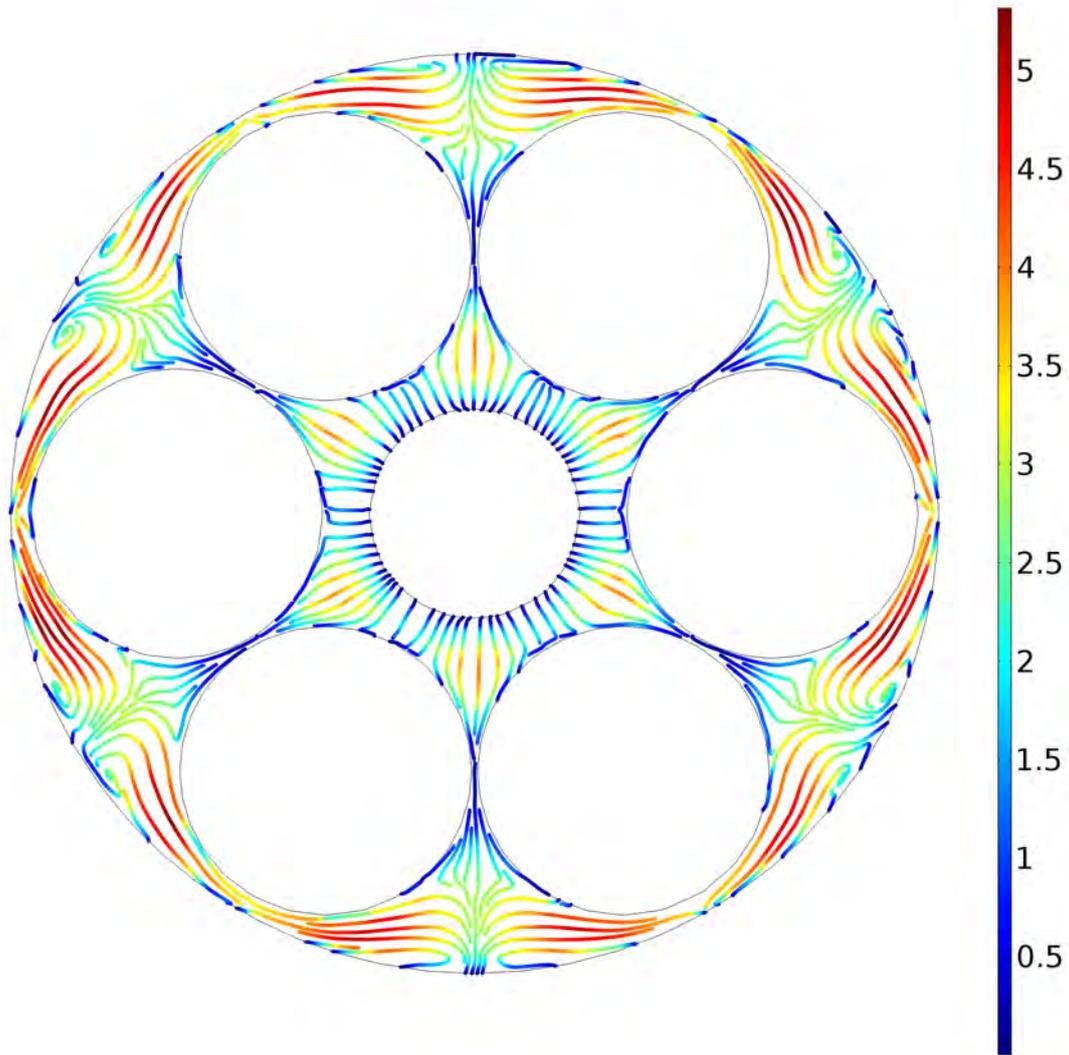


Figura C.5: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=526$ .  $V_{in}= 0.3127$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

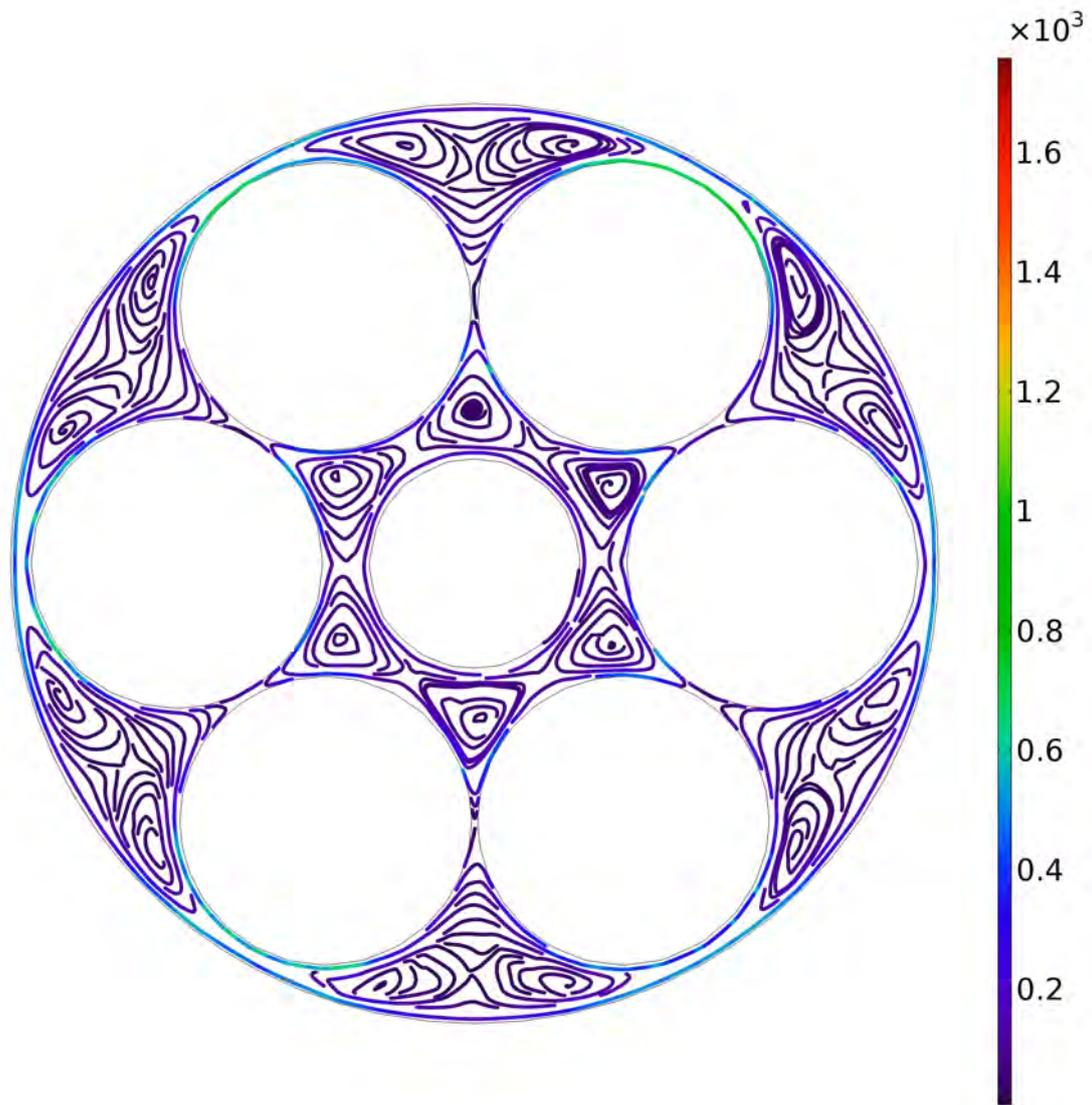


Figura C.6: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=526$ .  $V_{in}= 0.3127$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

### C.3. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 1054

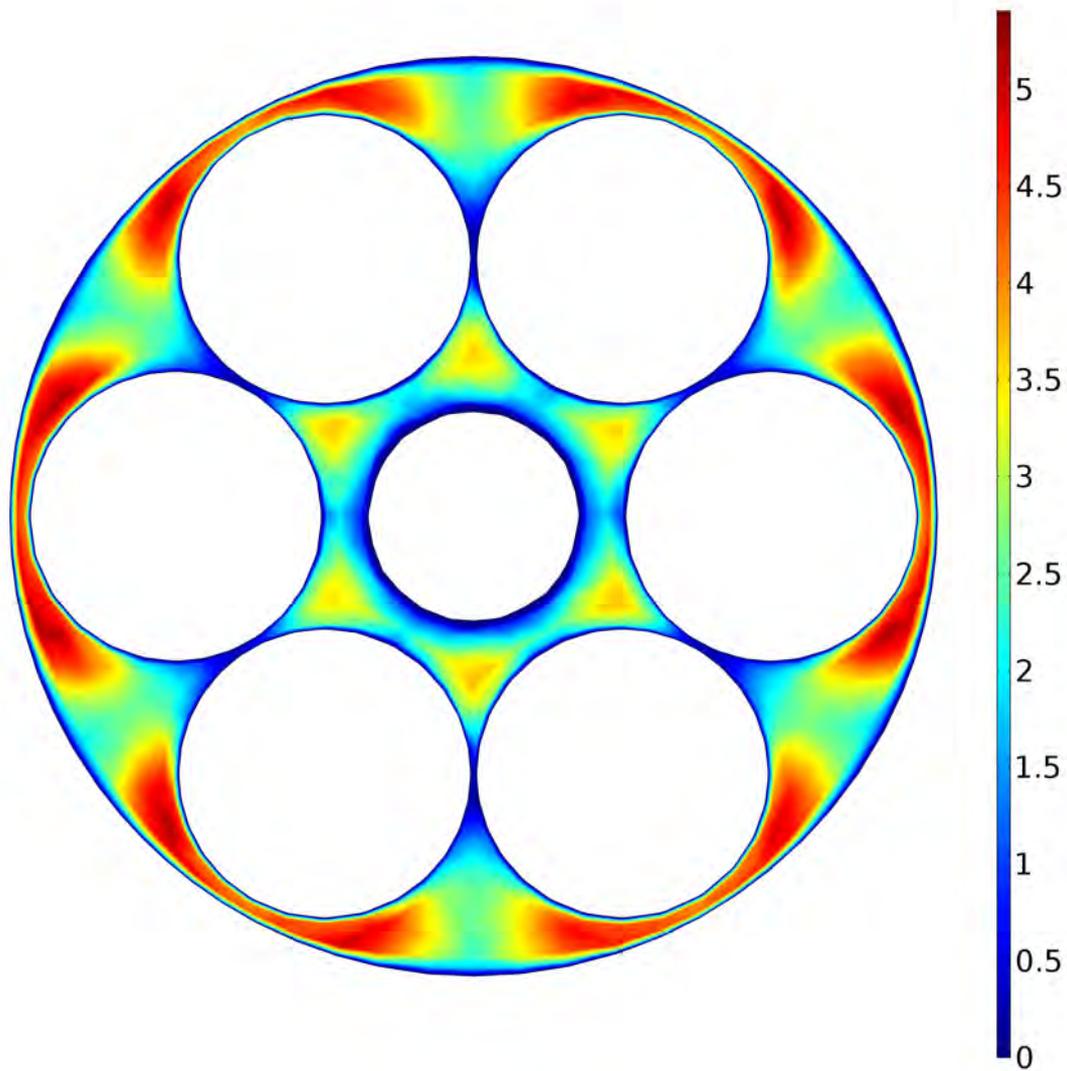


Figura C.7: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=1054$ .  $V_{in}= 0.6272$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

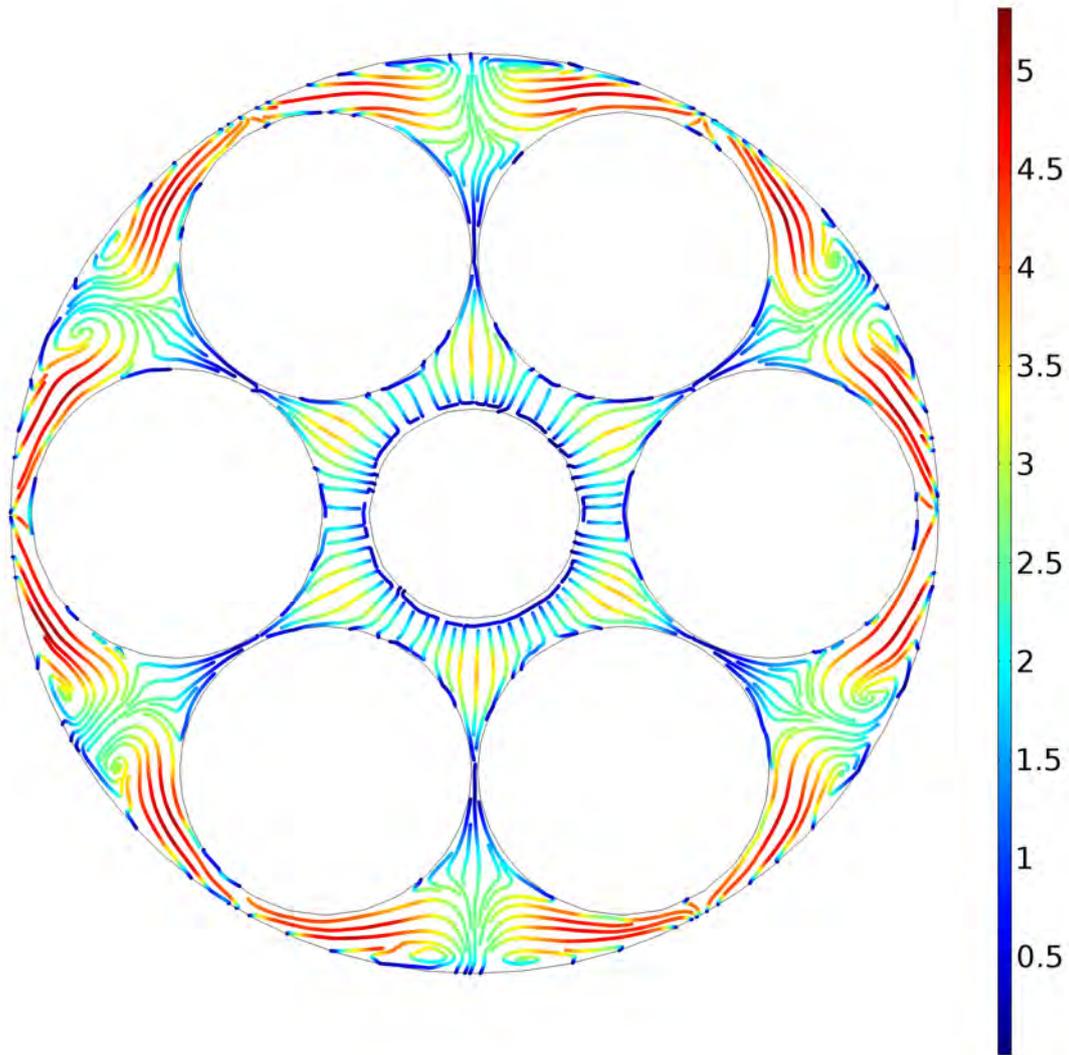


Figura C.8: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=1054$ .  $V_{in}= 0.6272$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

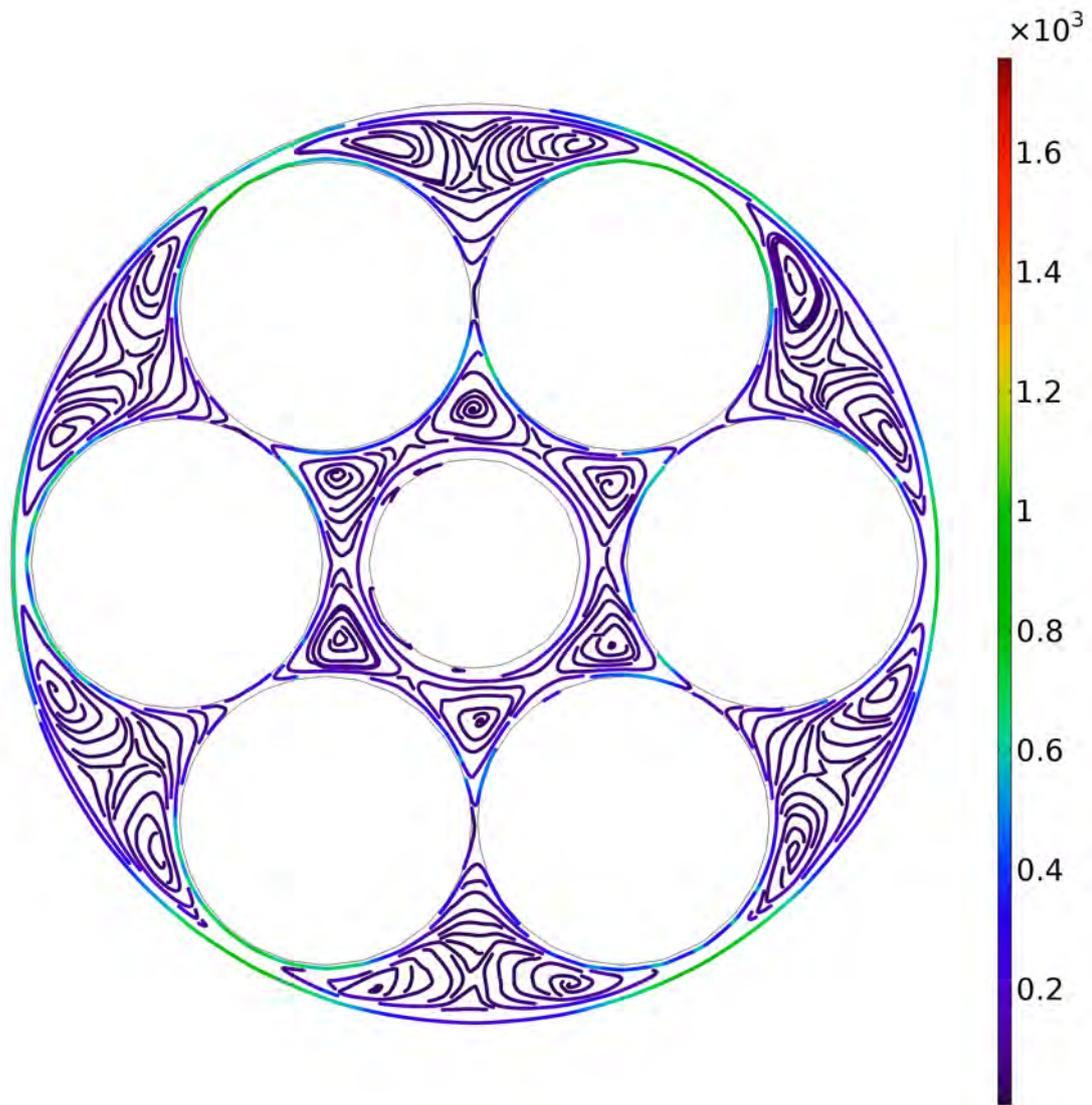


Figura C.9: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=1054$ .  $V_{in}= 0.6272$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

#### C.4. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 1583

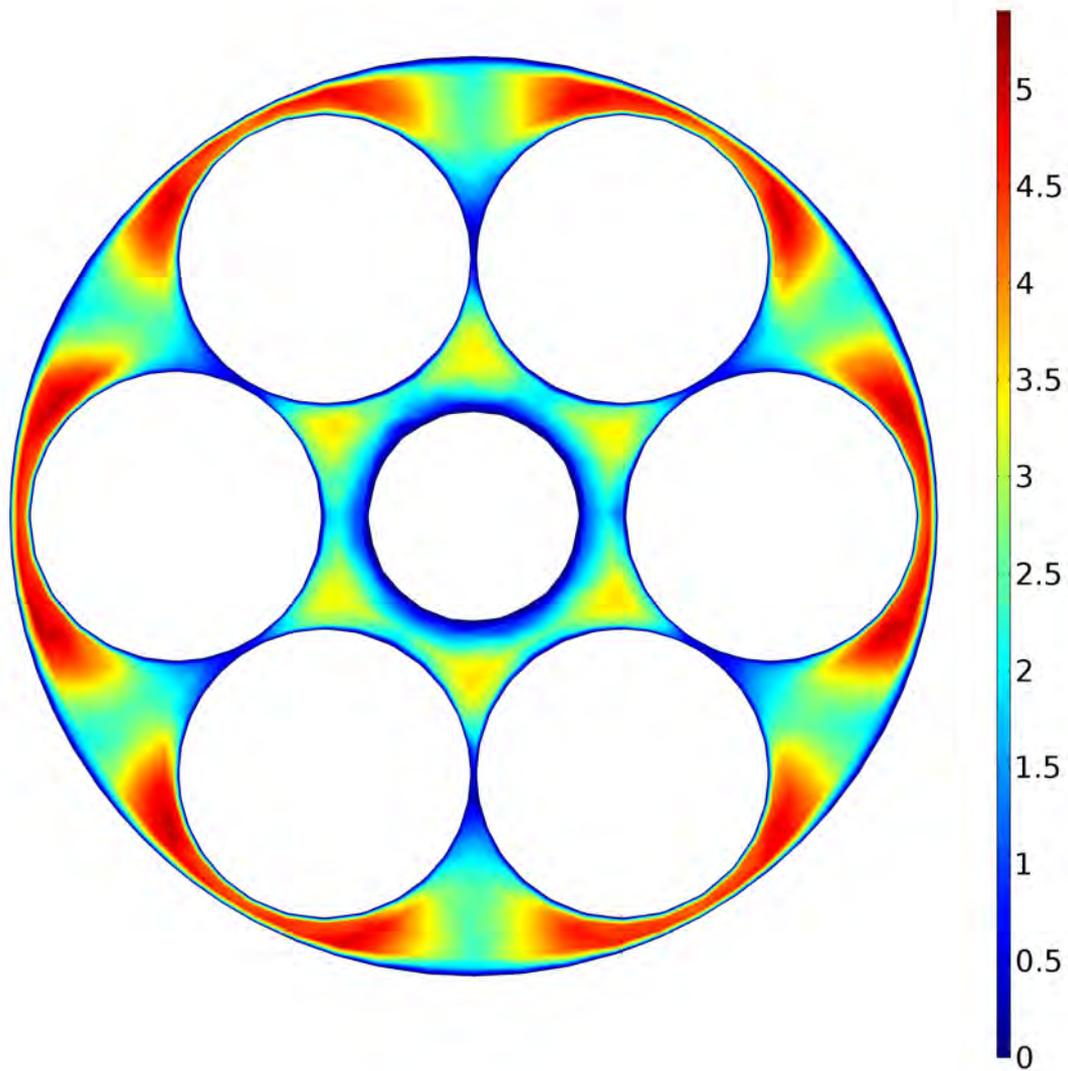


Figura C.10: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=1583$ .  $V_{in}= 0.9417$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

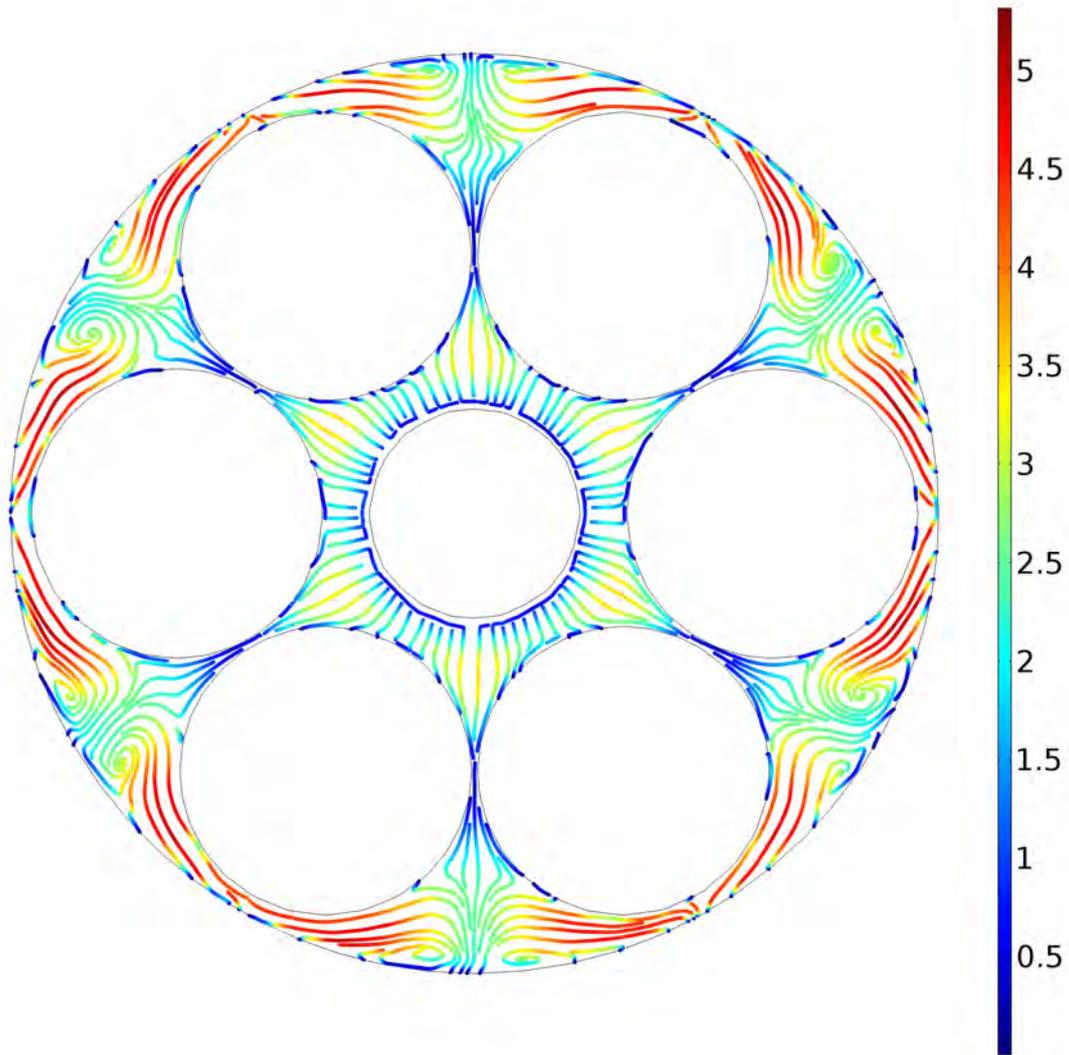


Figura C.11: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=1583$ .  $V_{in}= 0.9417$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

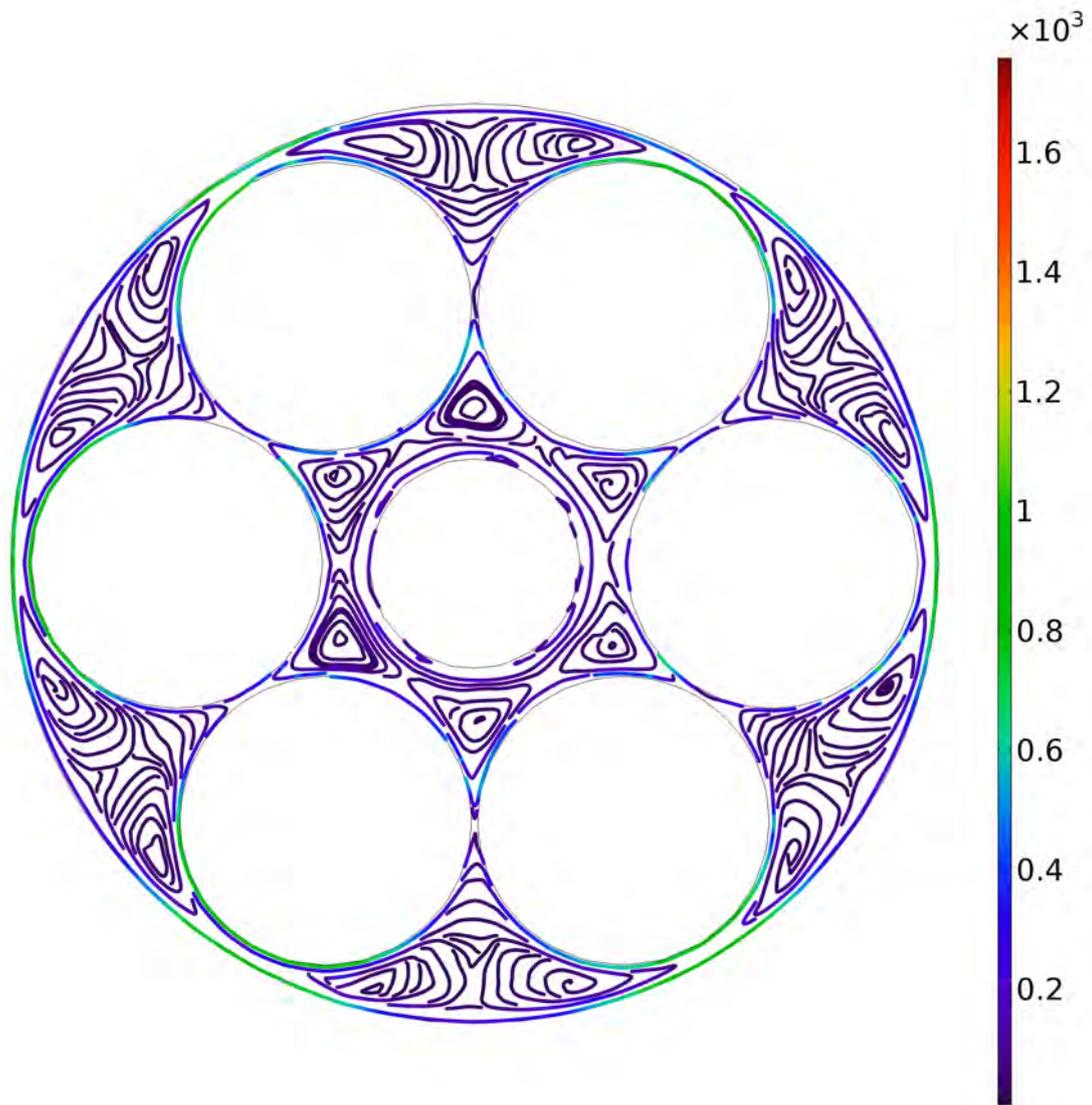


Figura C.12: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=1583$ .  $V_{in}= 0.9417$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

## C.5. Dinámica de fluidos lecho adiabático Re 2090

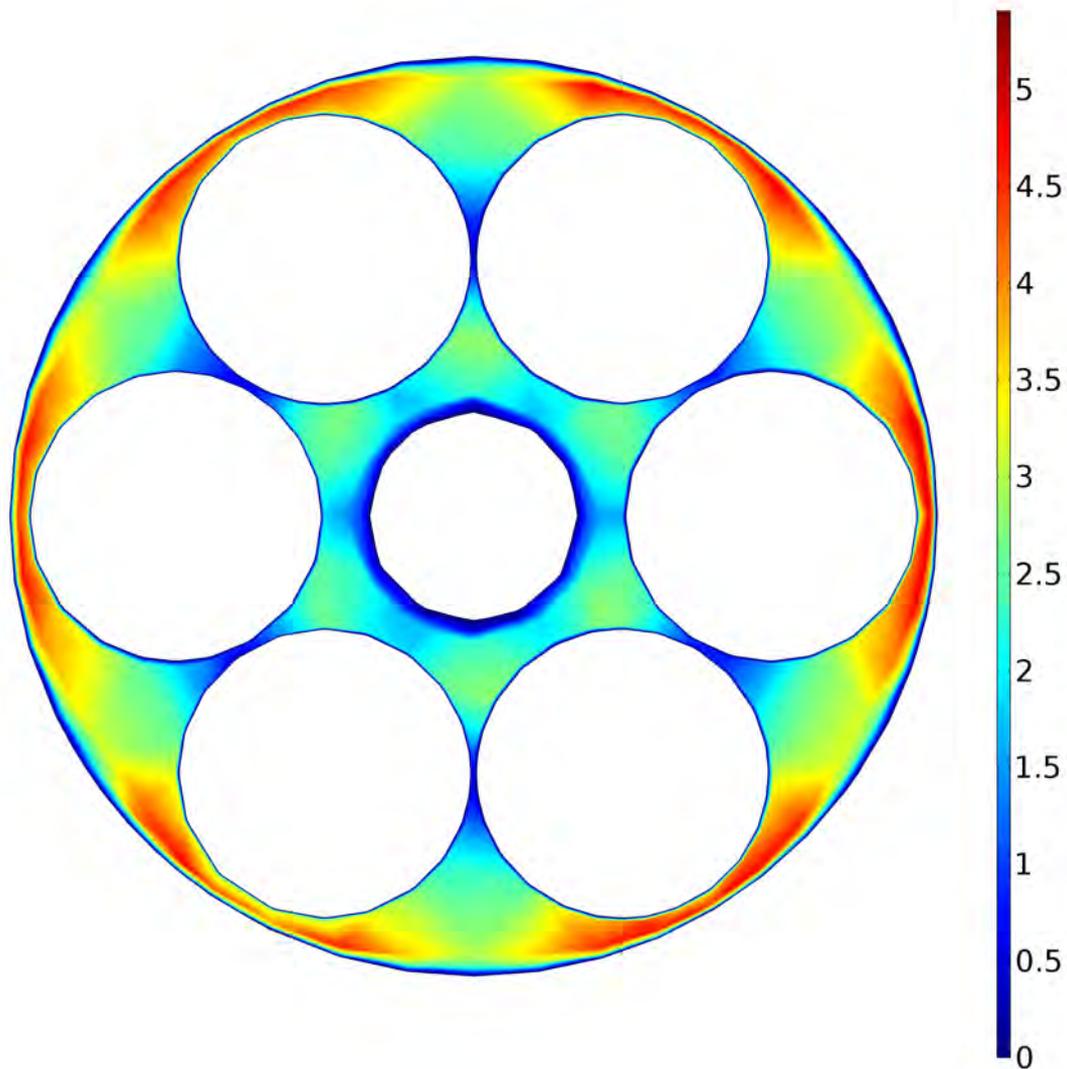


Figura C.13: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=2090$ .  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

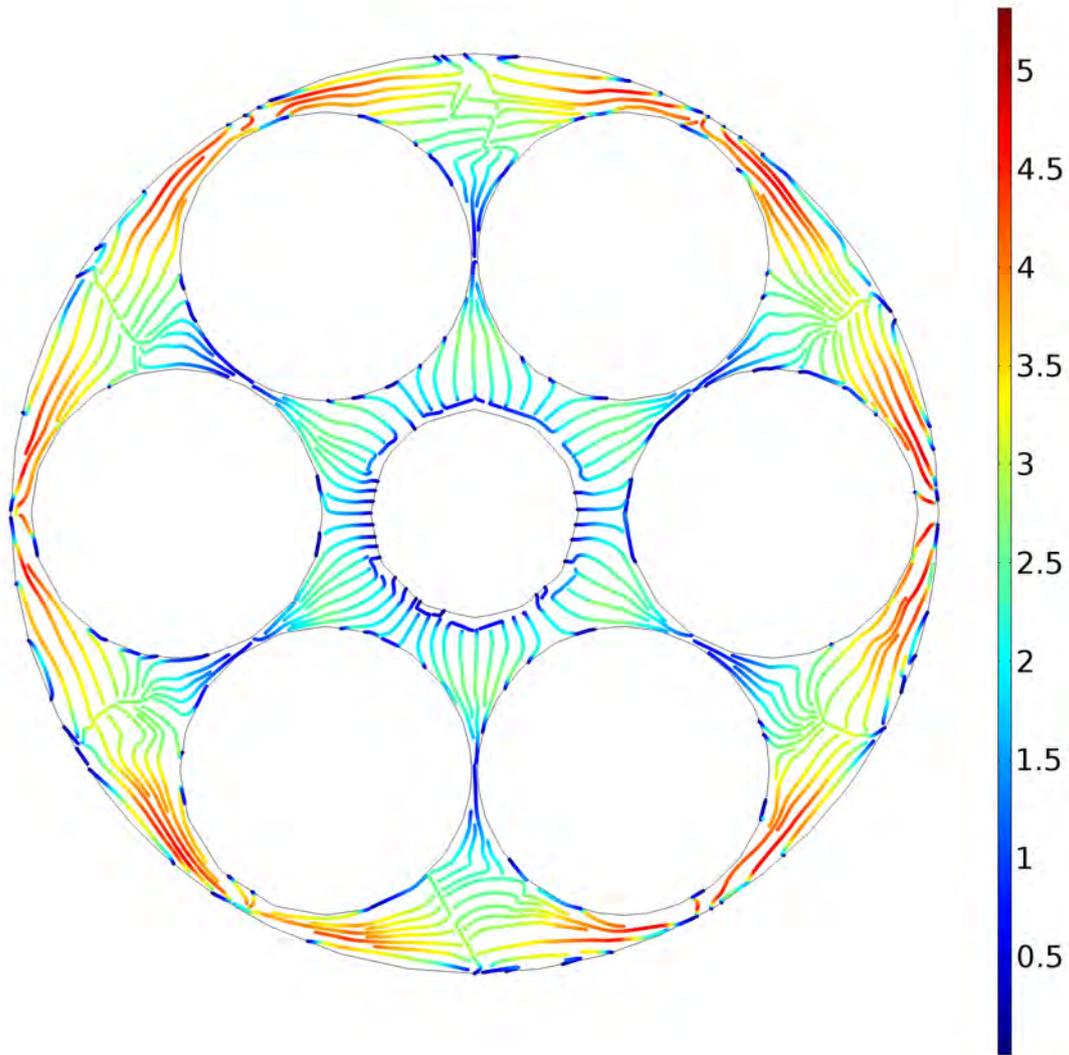


Figura C.14: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=2090$   $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

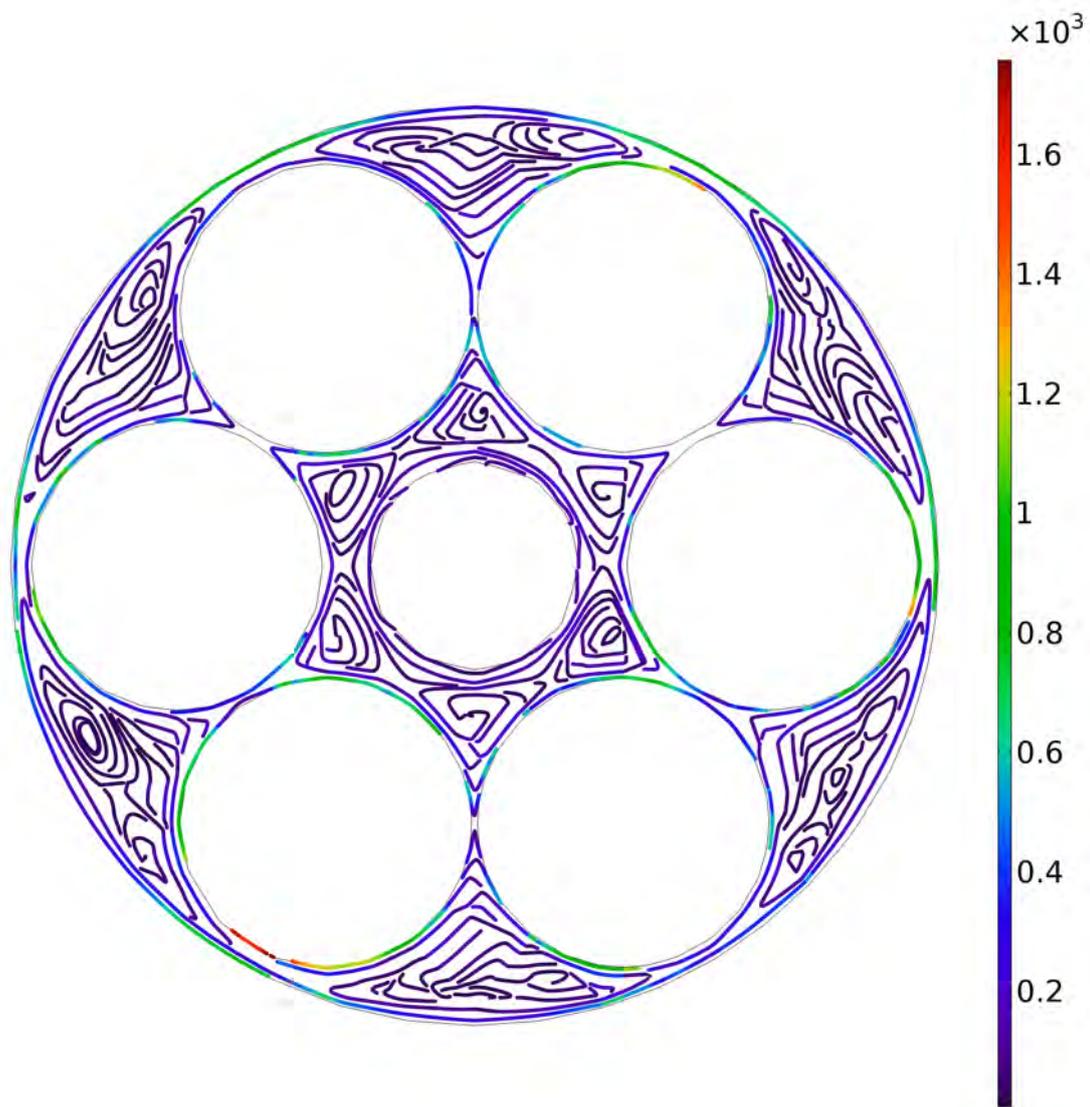


Figura C.15: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=2090$ .  $V_{in}= 1.2431$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

# Apéndice D

## D.1. Dinámica de fluidos lecho no isotérmico y no adiabático $Re$ 123

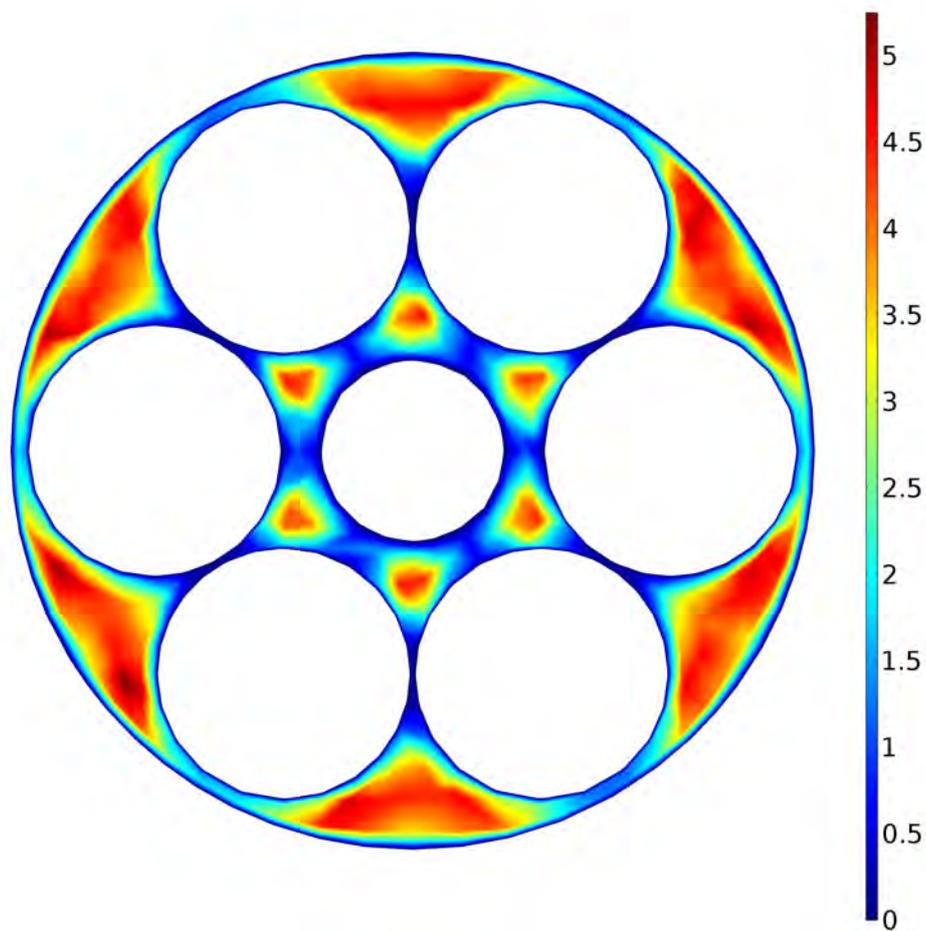


Figura D.1: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}= 0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

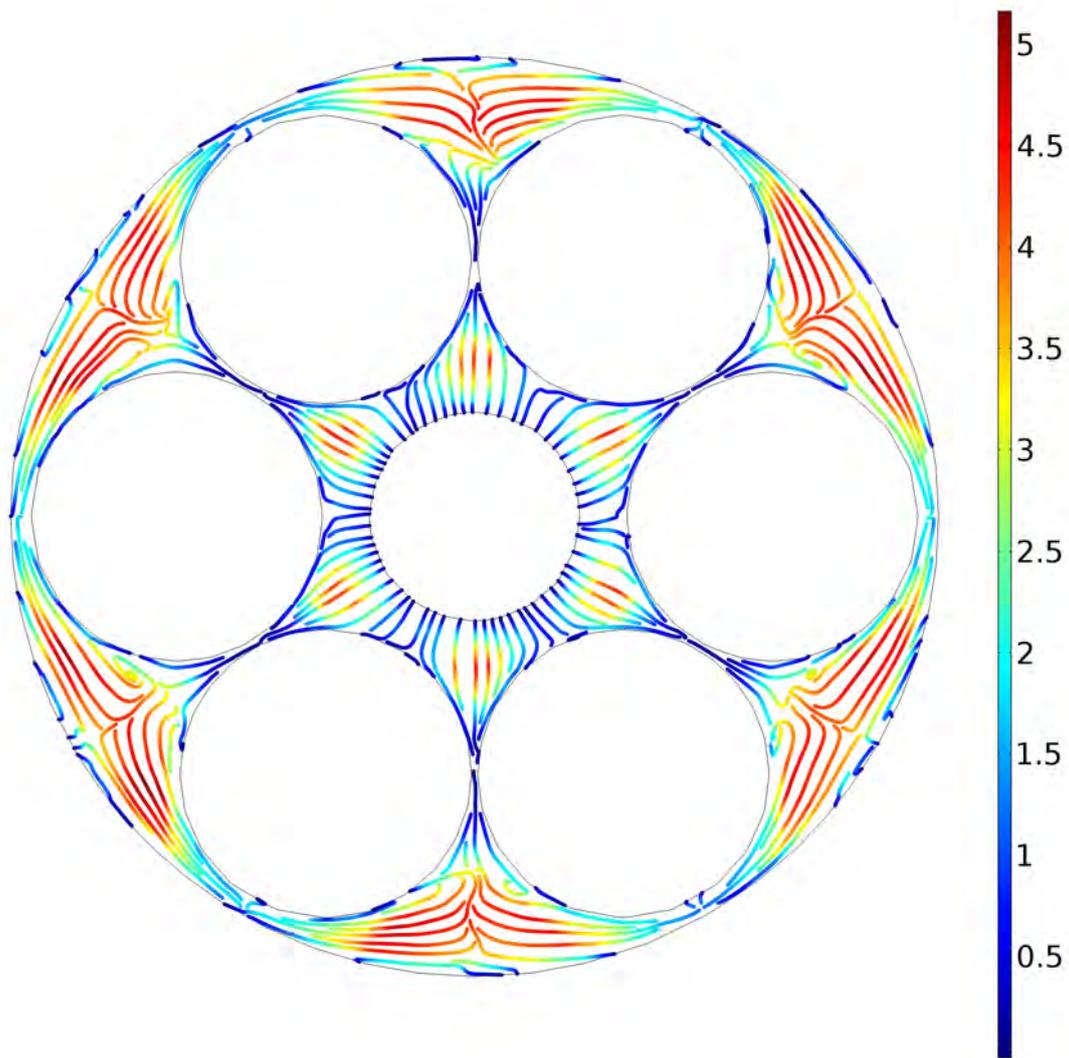


Figura D.2: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}=0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

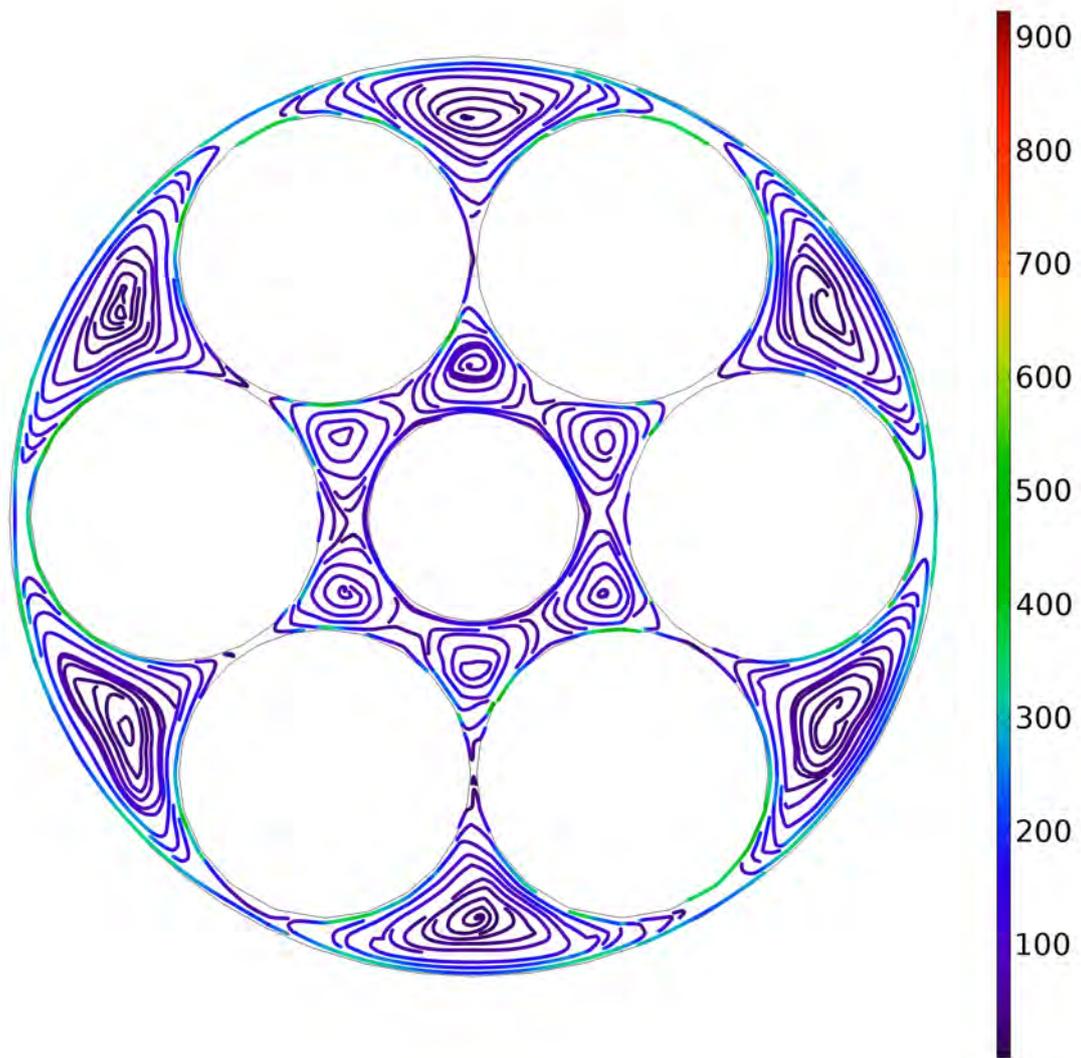


Figura D.3: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}= 0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

## D.2. Dinámica de fluidos lecho no isotérmico y no adiabático $Re$ 246

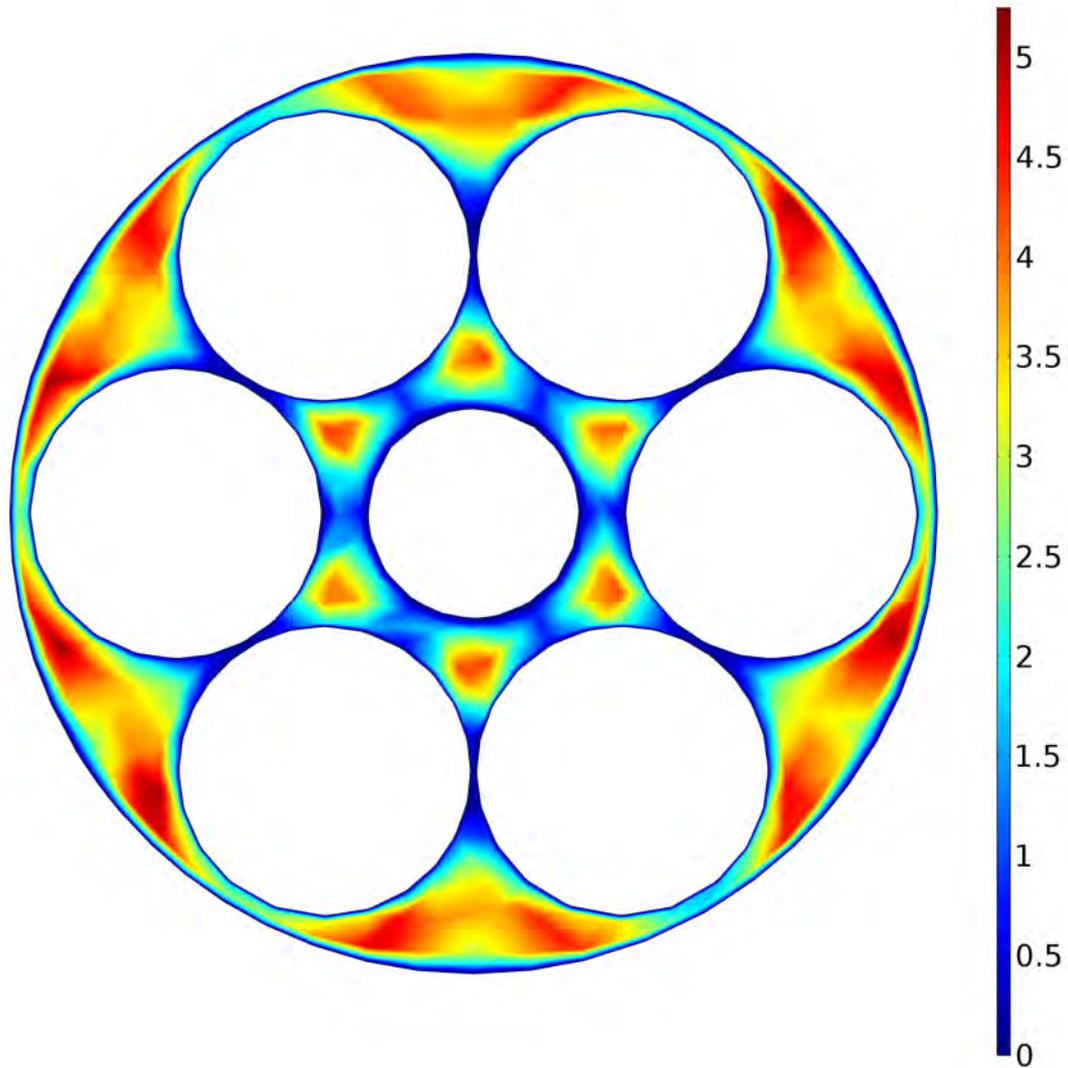


Figura D.4: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}=0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

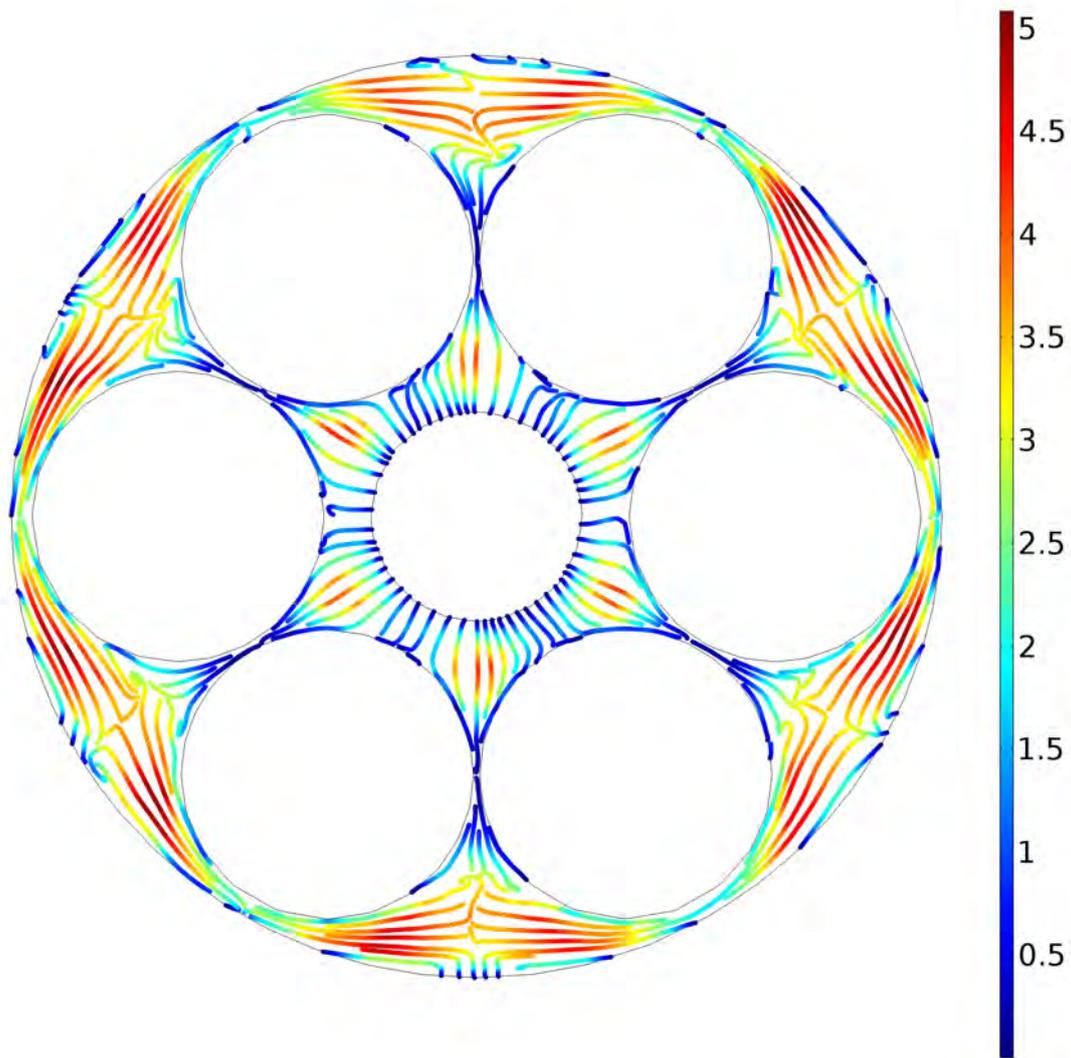


Figura D.5: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}=0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

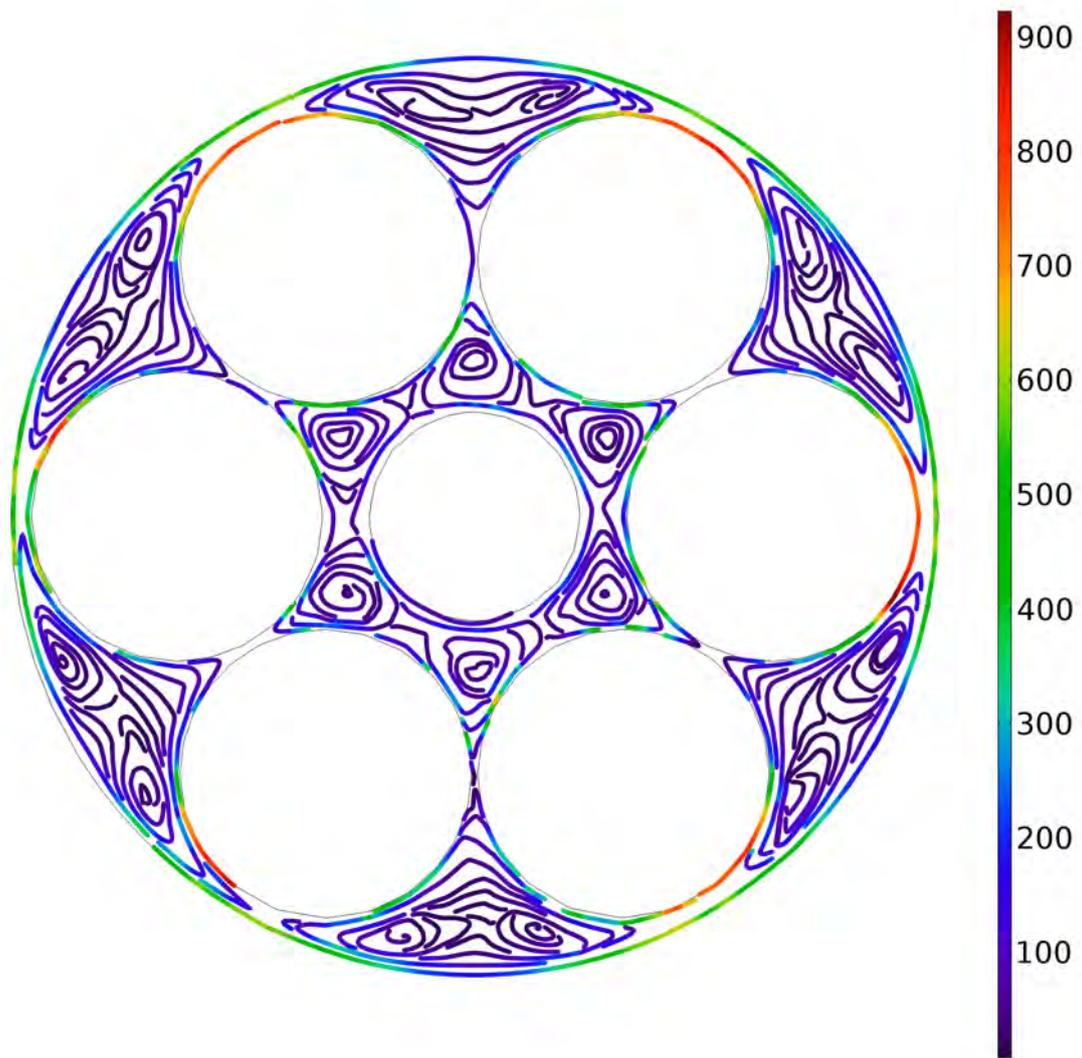


Figura D.6: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}=0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

### D.3. Dinámica de fluidos lecho no isotérmico y no adiabático Re 492

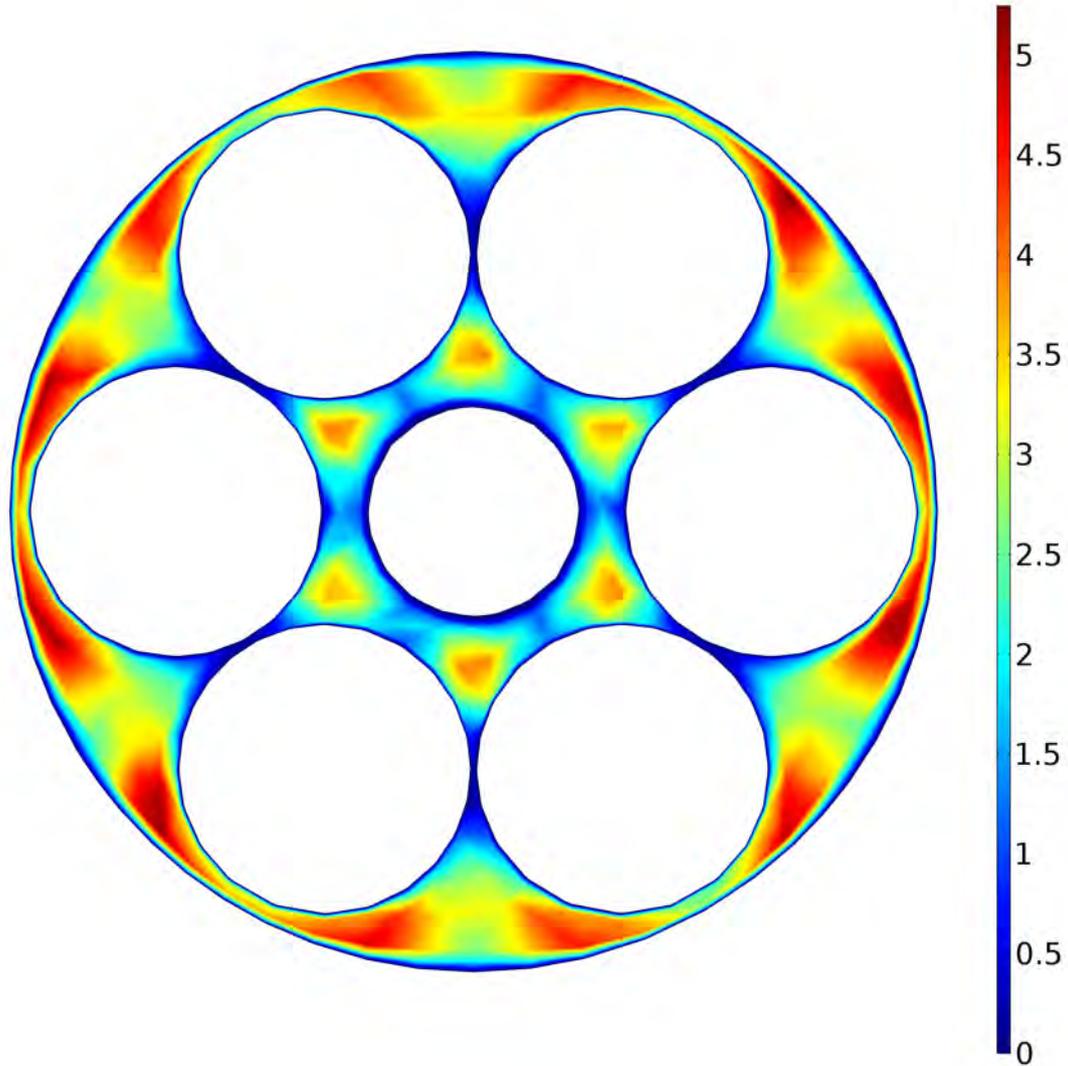


Figura D.7: Distribución del campo de velocidad adimensional obtenido con la ecuación de Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}= 0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

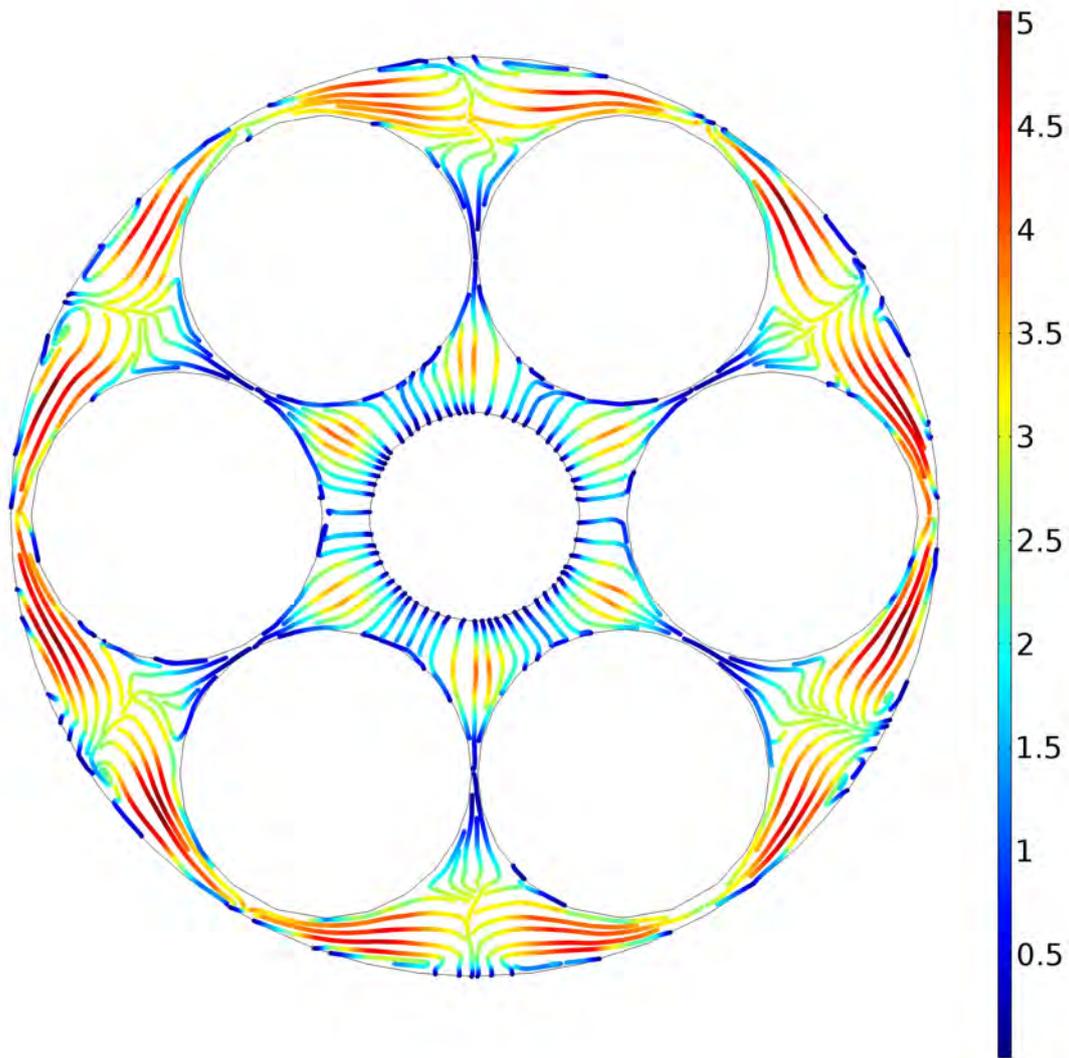


Figura D.8: Líneas de corriente asociadas a la velocidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}=0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.

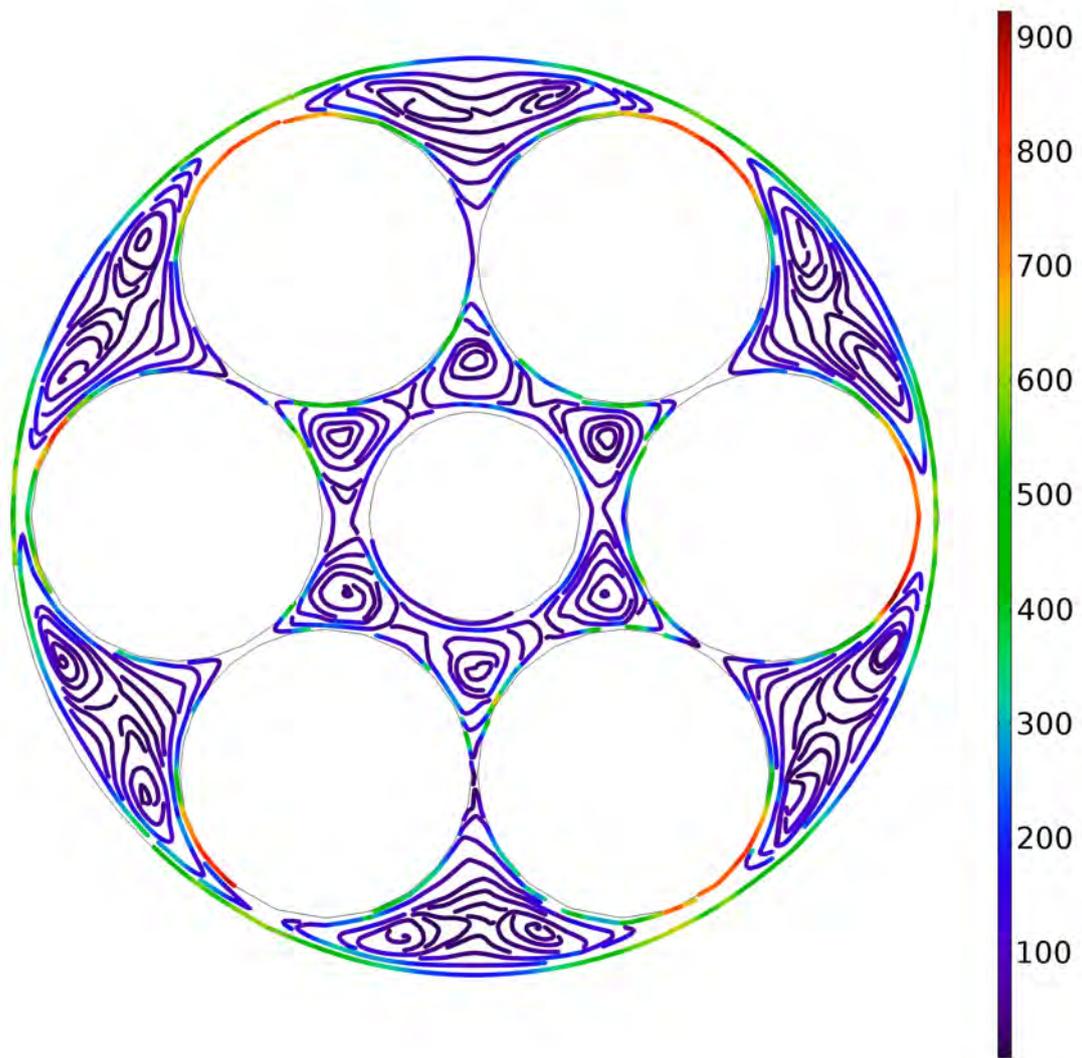


Figura D.9: Líneas de corriente asociadas a la vorticidad adimensional obtenidas con Navier-Stokes a un corte transversal  $z=0.222$  [cm] para un  $Re=123$ .  $V_{in}=0.07321$  [m/s]. Geometría 41 cm con contacto axial.





# Apéndice E

## E.1. Transporte de calor lecho adiabático Re 264

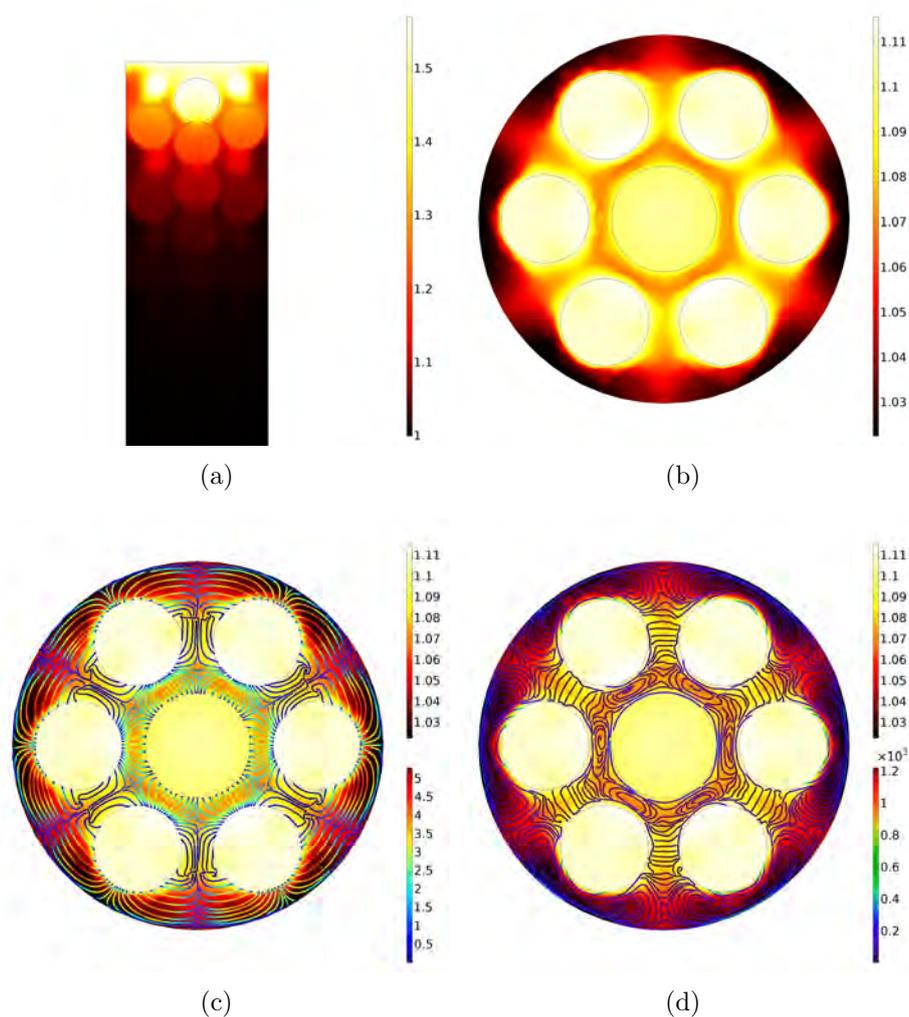


Figura E.1: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.33$  [cm].  $T_{in}= 298.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial.

## E.2. Transporte de calor lecho adiabático Re 526

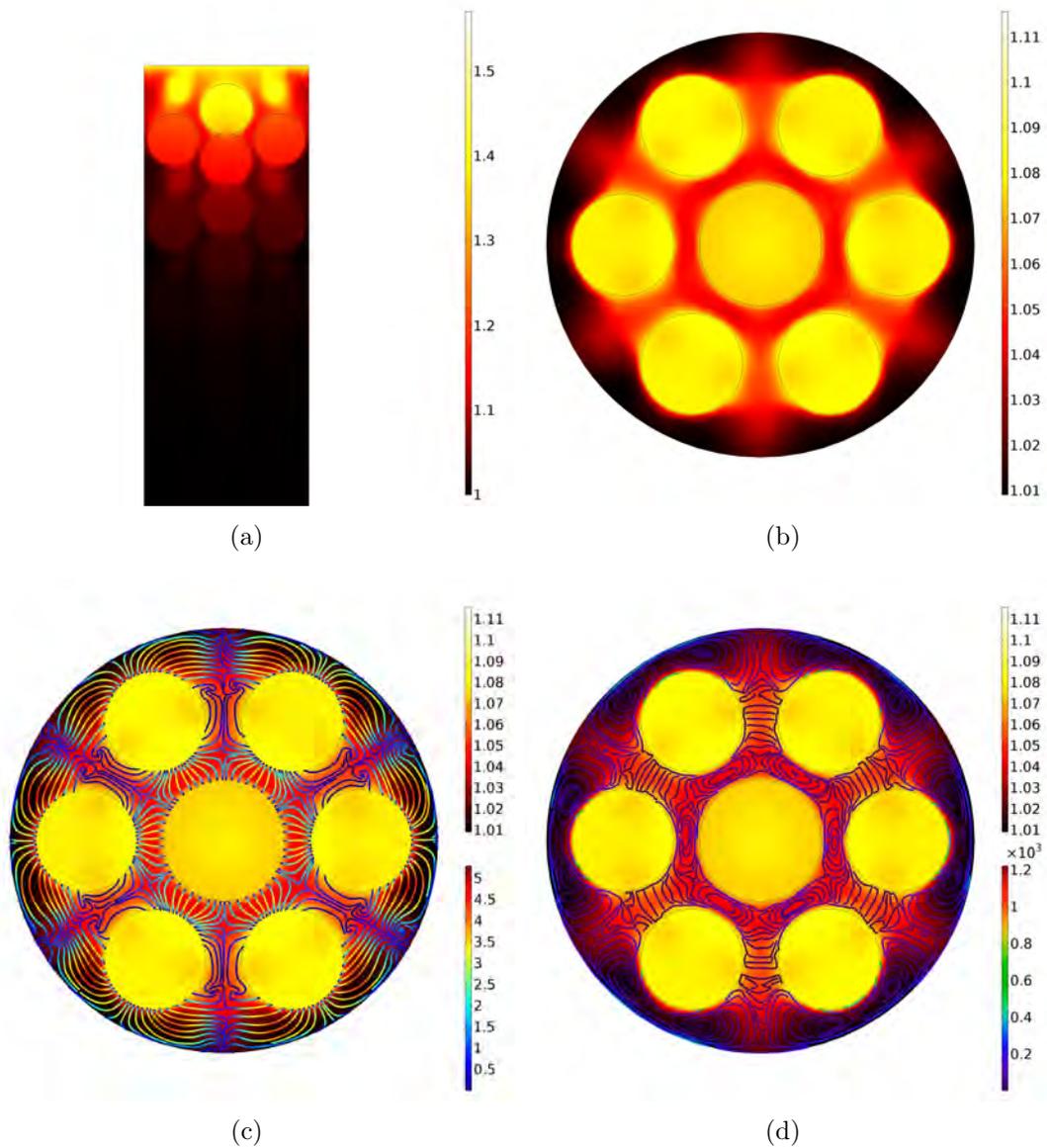


Figura E.2: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.33$  [cm].  $T_{in} = 298.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial.

### E.3. Transporte de calor lecho adiabático Re 1054

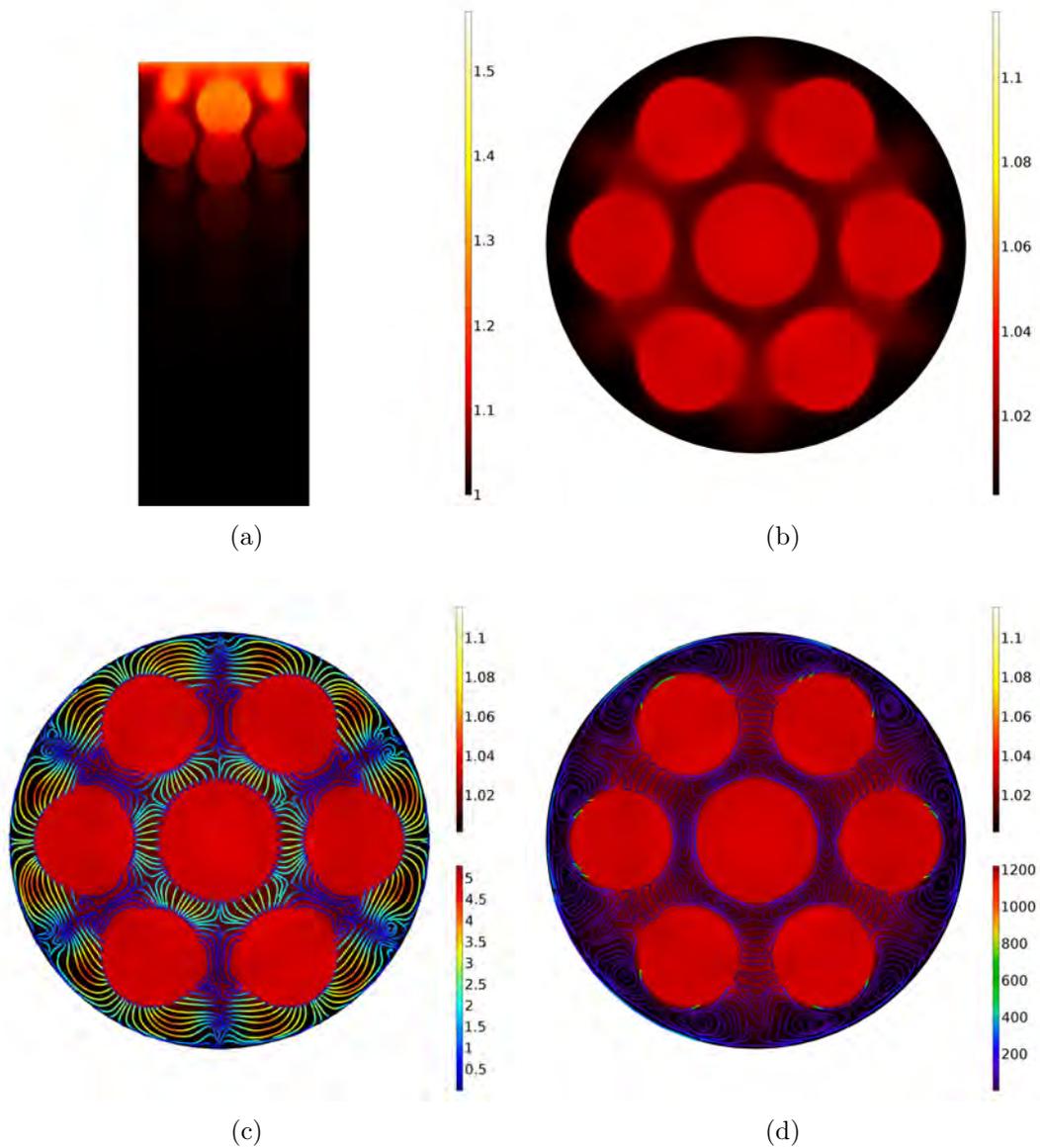


Figura E.3: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.33$  [cm].  $T_{in} = 298.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial.

## E.4. Transporte de calor lecho adiabático Re 1583

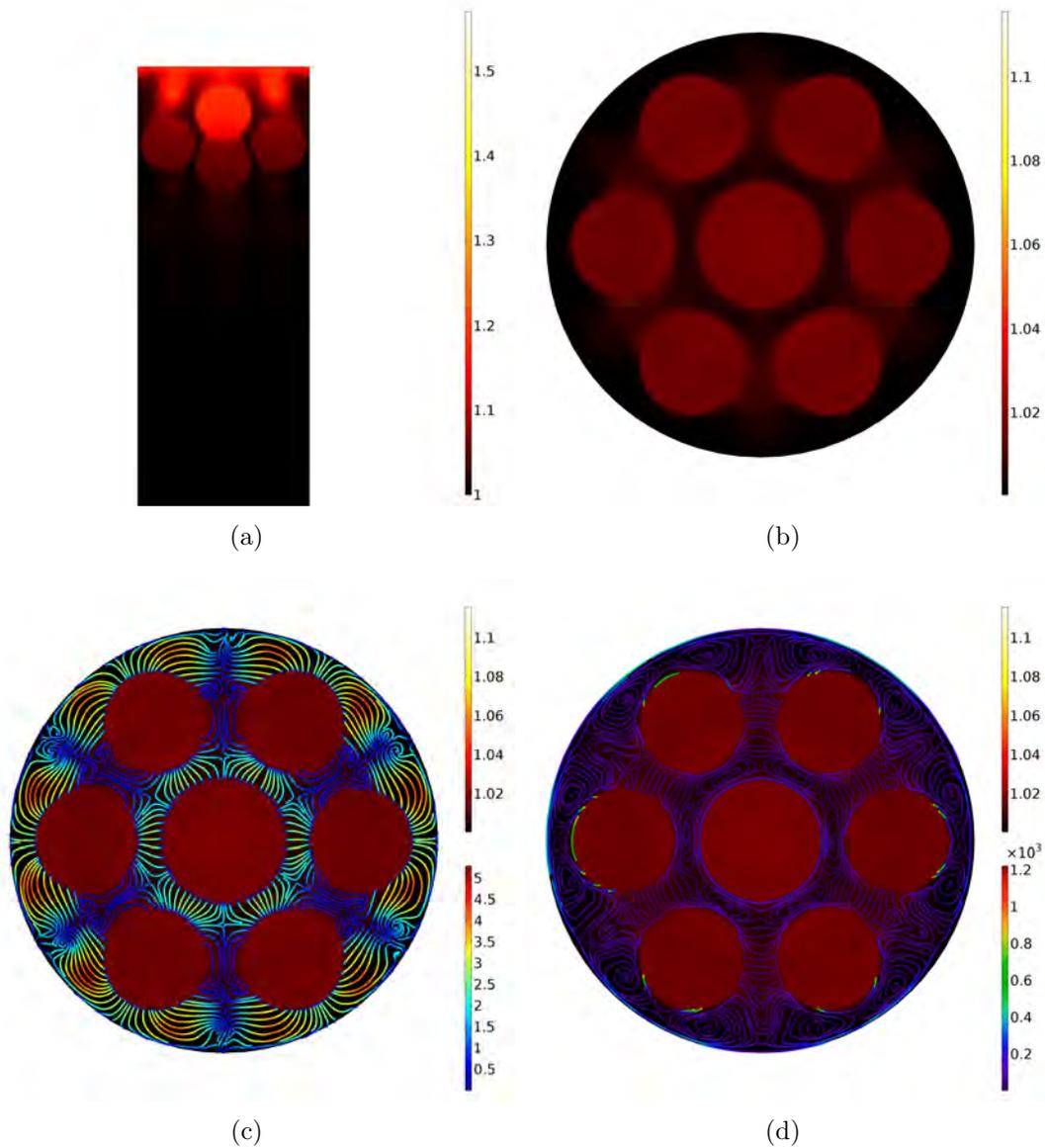


Figura E.4: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.33$  [cm].  $T_{in} = 298.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial.

## E.5. Transporte de calor lecho adiabático Re 2090

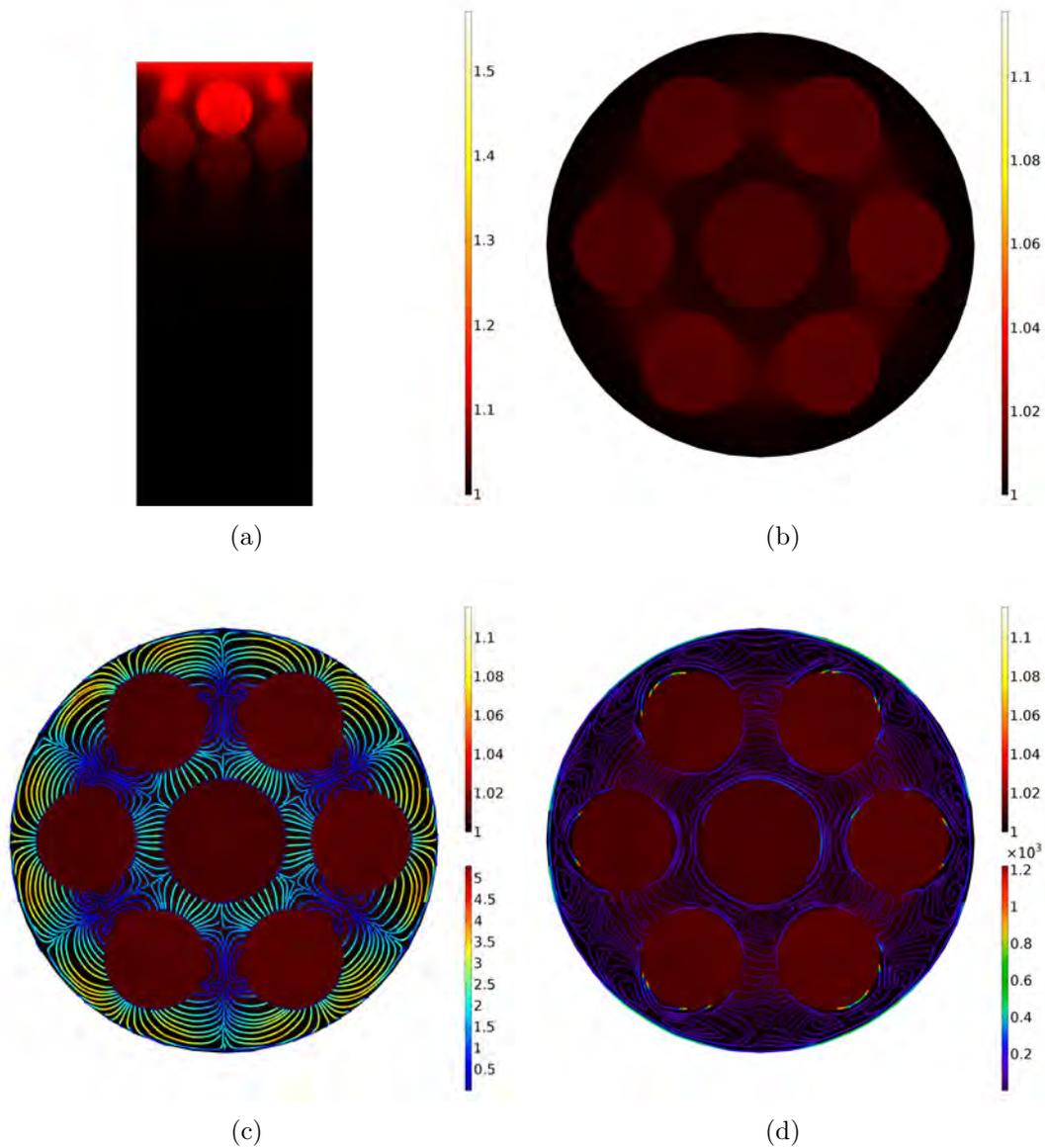


Figura E.5: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.33$  [cm].  $T_{in} = 298.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial.



# Apéndice F

## F.1. Transporte de calor lecho no isotérmico y no adiabático Re 123

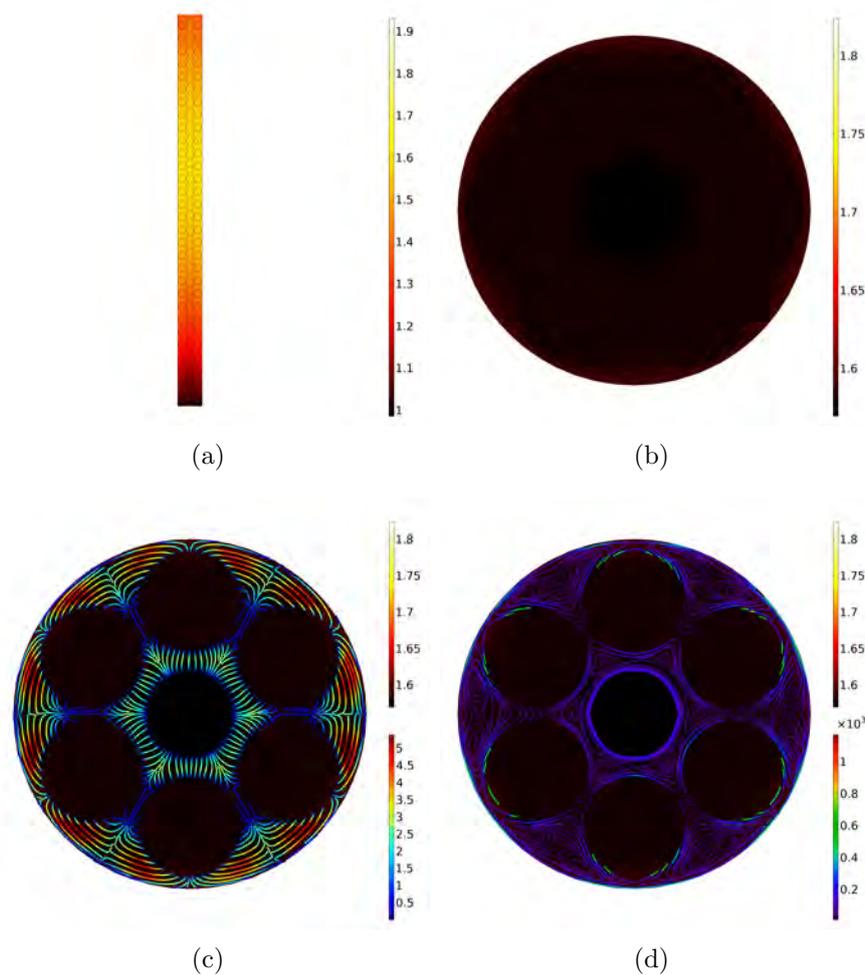


Figura F.1: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.12$  [cm].  $T_{in} = 433.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial.

## F.2. Transporte de calor lecho no isotérmico y no adiabático Re 246

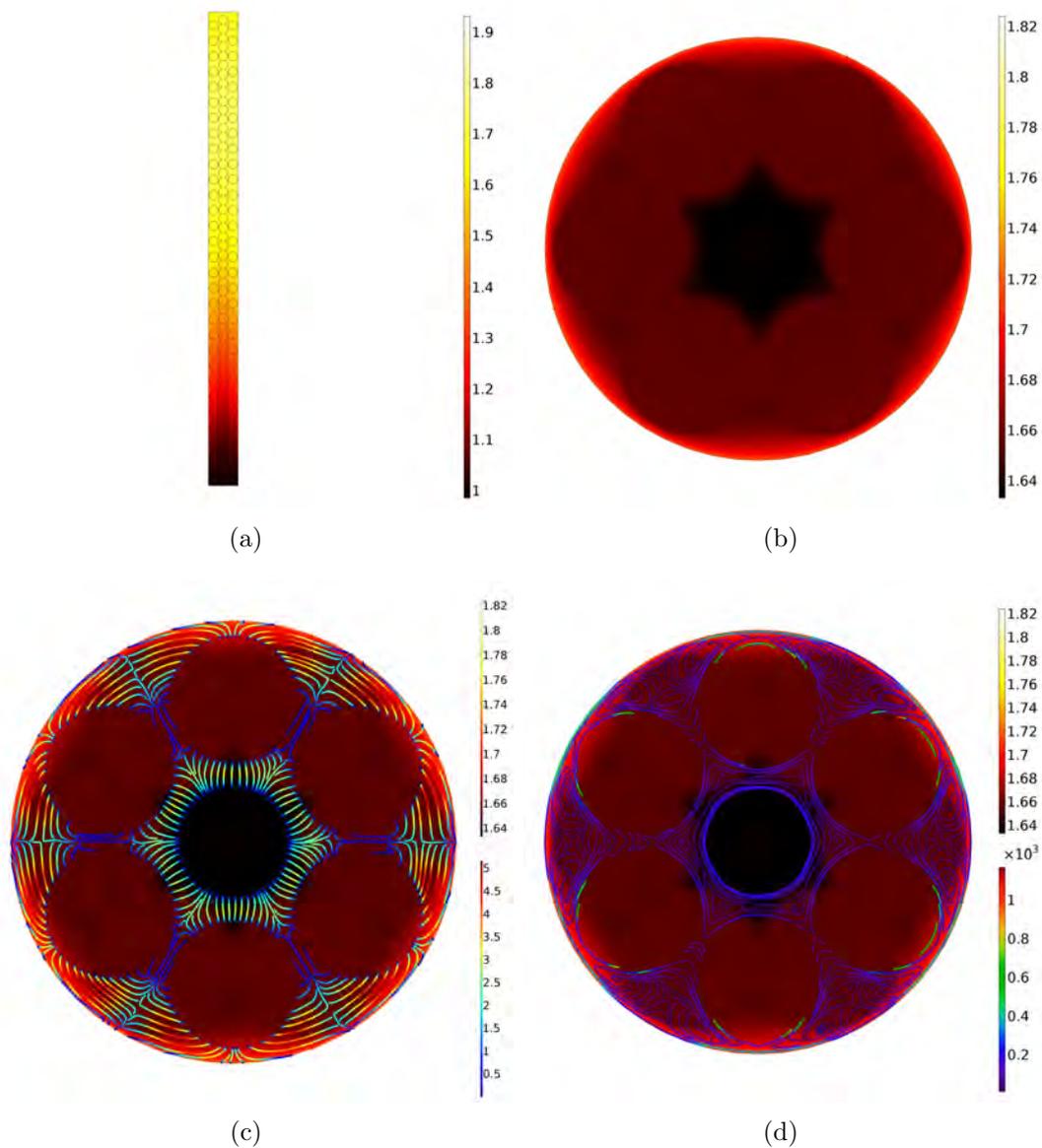


Figura F.2: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.12$  [cm].  $T_{in}= 393.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial.

### F.3. Transporte de calor lecho no isotérmico y no adiabático Re 492

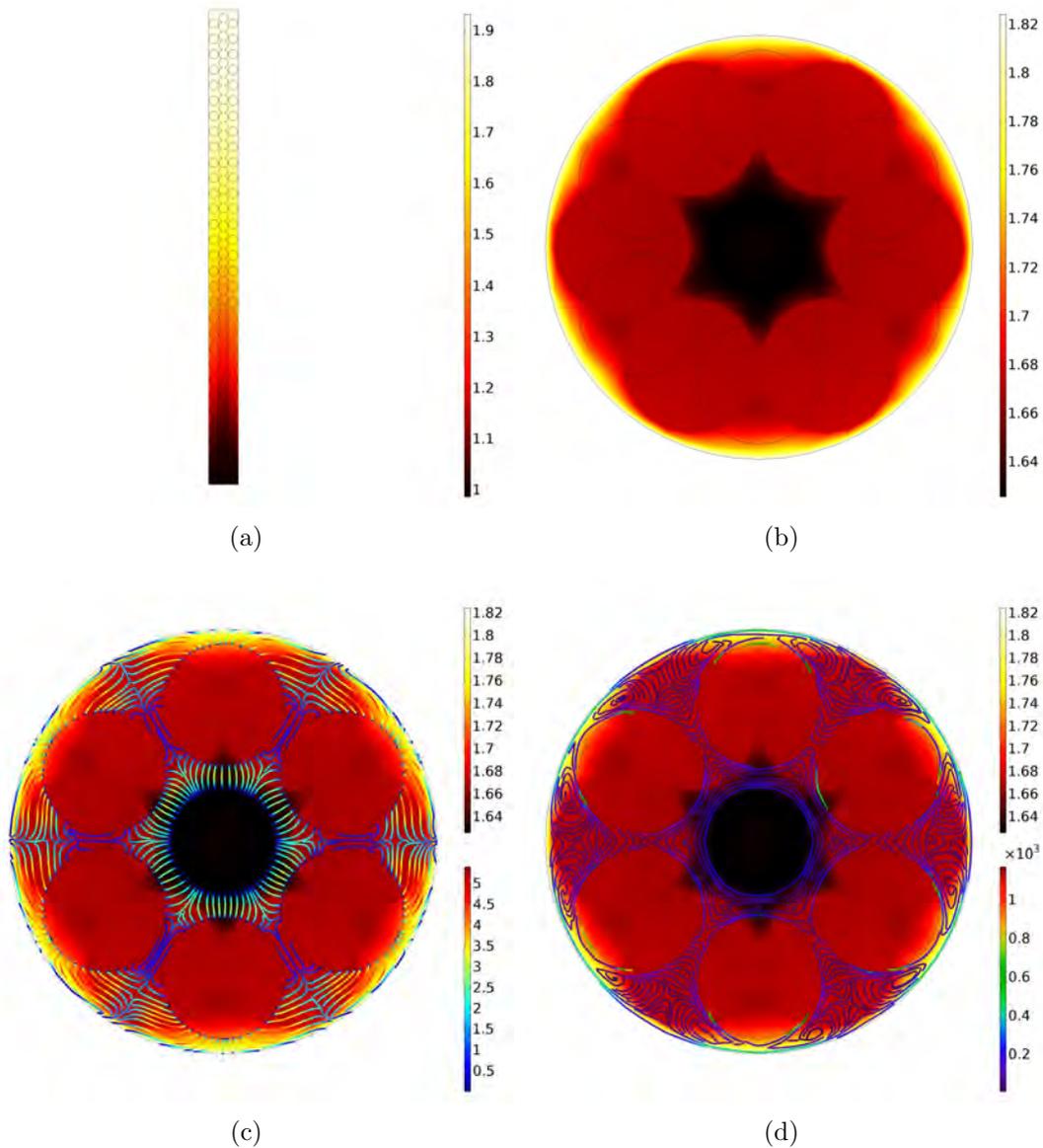


Figura F.3: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.12$  [cm].  $T_{in} = 352.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la pared del lecho. Geometría 41 cm con contacto axial.



# Apéndice G

## G.1. Transporte de calor lecho adiabático Re 264 contacto radial

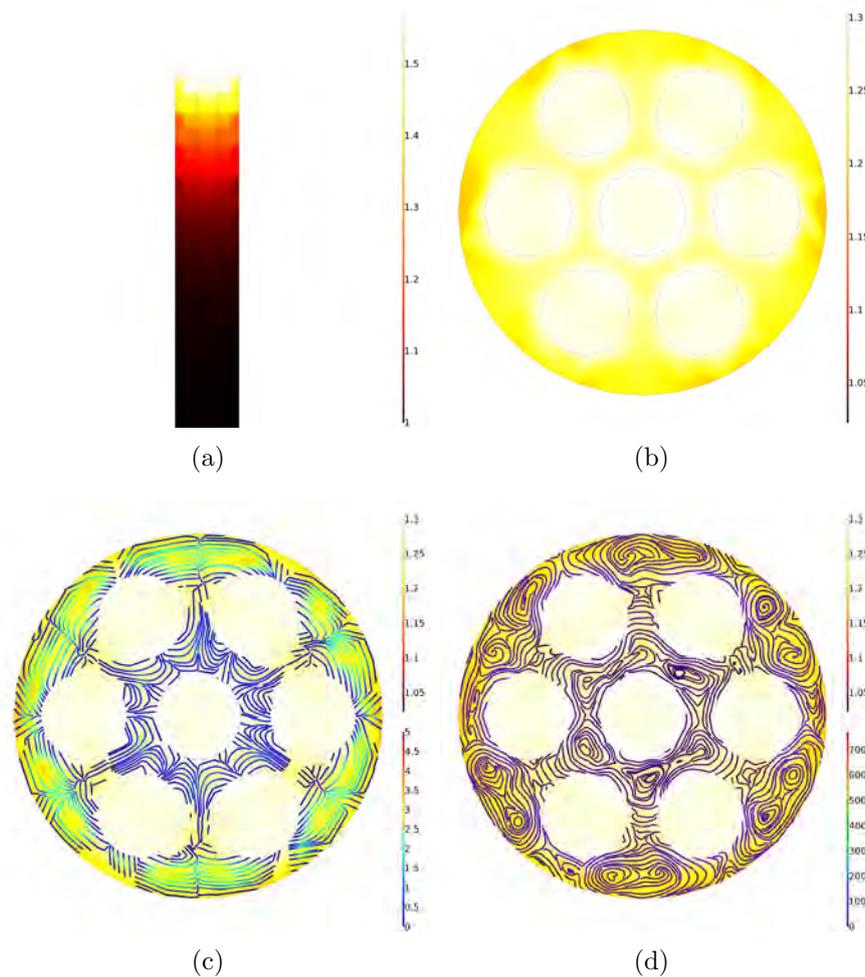


Figura G.1: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.33$  [cm].  $T_{in} = 298.15$ [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial y radial.

## G.2. Transporte de calor lecho adiabático Re 2090 contacto radial

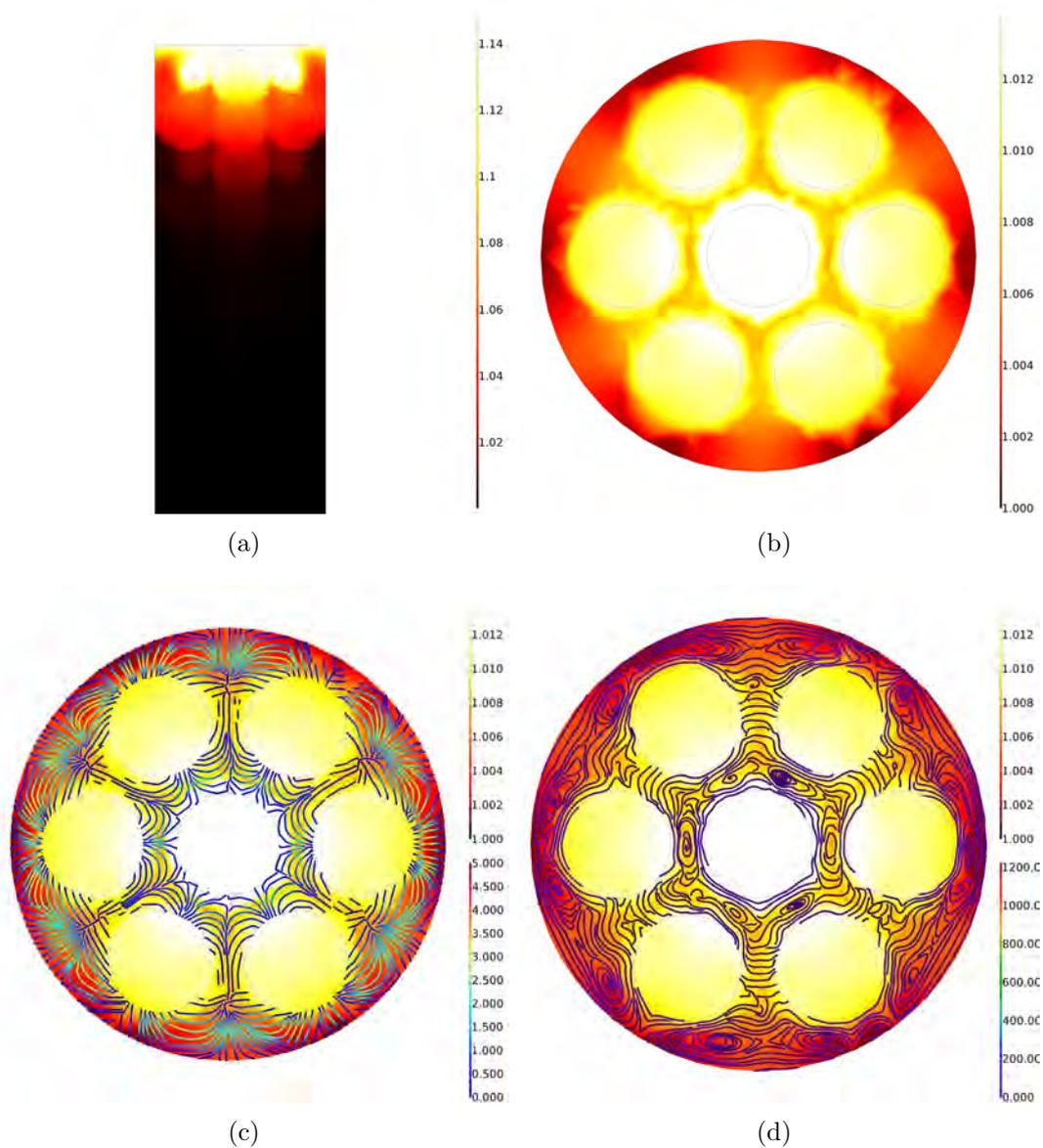


Figura G.2: (a) Distribución de temperatura axial adimensional a un corte longitudinal en  $r=0$  [cm], (b) Distribución de temperatura radial adimensional, (c) Distribución de temperatura asociada a líneas de corriente velocidad y (d) Distribución de temperatura asociada a líneas de vorticidad a un corte transversal en  $z=0.33$  [cm].  $T_{in} = 298.15$  [K]. Fuente de calentamiento en la parte superior. Geometría 41 cm con contacto axial y radial.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 0027  
Módulo 213804781

CARACTERIZACIÓN DEL TRANSPORTE DE CANTIDAD DE MOVIMIENTO Y SU IMPACTO EN EL TRANSPORTE DE CALOR AXIAL Y RADIAL EN UN LECHE EMPACADO MEDIANTE CFD

En la Ciudad de México, se presentaron a las 16:00 horas del día 27 del mes de junio del año 2018 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

DR. PATRICIO JAVIER VALADES PELAYO  
DR. EDISON EMILIO HERRERA VALENCIA  
DR. FRANCISCO JOSE VALDES PARADA



VICTORIA TELLO HERNANDEZ  
ALUMNA

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece en el margen, para la obtención del grado de:

MAESTRA EN CIENCIAS (INGENIERIA QUIMICA)

DE: VICTORIA TELLO HERNANDEZ

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

Aprobar

REVISÓ  
  
LIC. JULIO CÉSAR DE LARA (ASSI)  
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso sprobatorio, le fue tomada la protesta.

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI  
  
DR. JESÚS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE  
  
DR. PATRICIO JAVIER VALADES PELAYO

VOCAL  
  
DR. EDISON EMILIO HERRERA VALENCIA

SECRETARIO  
  
DR. FRANCISCO JOSE VALDES PARADA