

EFECTO DE LA TURBULENCIA EN LA TRANSFERENCIA DE MOMENTUM Y CALOR EN LECHOS EMPACADOS CON BAJA RELACIÓN DE DIÁMETROS DE TUBO A PARTÍCULA

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTA M.C. Fernando Iván Molina Herrera

ASESOR

Dr. Héctor Felipe Lopez Isunza

SINODALES

Dr. Gamaliel Che Galicia

Dr. Miguel Ángel Morales Cabrera

- Dr. Jorge Ramírez Muñoz
- Dr. Carlos Omar Castillo Araiza
- Dr. Richard Steve Ruiz Martinez

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA UNIDAD IZTAPALAPA DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Felipe Lopez Isunza, por ser el asesor de este trabajo de tesis por el tiempo y dedicación incondicional para mi formación personal y profesional y el desarrollo de este trabajo, por lo cual le manifiesto mi más sincero agradecimiento.

Quiero expresar también mi más sincero agradecimiento al Dr. Hugo Jiménez Islas por su importante aporte y participación activa en el desarrollo de esta tesis. Debo destacar, por encima de todo, su disponibilidad y paciencia que hizo que nuestras discusiones redundaran benéficamente tanto a nivel científico como personal. No Cabe duda que su participación ha enriquecido el trabajo realizado y, además, ha significado el surgimiento de una amistad y confianza.

Al Doctor Omar Castillo Araiza por su valiosa colaboración en la realización de este trabajo doctoral.

Al cuerpo de sinodales, integrado por los Doctores: Gamaliel Che Galicia, Miguel Ángel Morales Cabrera, Jorge Ramírez Muñoz, Carlos Omar Castillo Araiza y Richard Steve Ruiz Martínez.

Al consejo Nacional de Ciencia y Tecnologia por el apoyo económico brindado con la beca de estudios.

A la Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa por las facilidades brindadas para este trabajo doctoral.

A la Universidad de Guanajuato por impulsar decididamente el programa de formación de recursos humanos.

Y, por supuesto, el agradecimiento más profundo y sentido va para mi familia. Sin su apoyo, colaboración e inspiración habría sido imposible llevar a cabo esta dura empresa.

ÍNDICE DE CONTENIDO

NOMENCLATURA	iii
ÍNDICE DE FIGURAS	v
ÍNDICE DE TABLAS	vi
RESUMEN	1
INTRODUCCIÓN	2
CAPÍTULO 1: HIPÓTESIS Y OBJETIVOS	6
1.1. Hipótesis	6
1.2. Objetivo general	6
1.2. Objetivos particulares	6
CAPÍTULO 2: ANTECEDENTES	7
CAPÍTULO 3: HIDRODINÁMICA EN UN LECHO EMPACADO	14
3.1 Ecuación de Darcy	14
3.2. Ecuación de Brinkman	14
3.3 Ecuación de Forchheimer	15
3.4 Caída de presión en el lecho empacado	16
3.5 Modelo de la hidrodinámica de un lecho empacado	16
3.5.1 Interacciones entre el sólido y el fluido	16
3.5.2 Perfiles de fracción vacía	17
3.5.3 Permeabilidad en el lecho empacado	20
3.7. Teoría de la turbulencia	21
3.7.1. Escalas de turbulencia	22
3.7.1. La ecuación de Reynolds	22
CAPÍTULO 4: SISTEMA EXPERIMENTAL Y MODELOS MATEMÁTICOS DESARROLLADOS	
4.2. Modelo del lecho empacado	
4.3 Ecuaciones de transporte	
4.4. Ecuaciones adimensionales	

CAPÍTULO 5: RESULTADOS Y DISCUSIÓN)
5.1 Solución numérica40)
5.1 Hidrodinámica en el lecho empacado41	1
5.1.1 Régimen de flujo laminar42	2
5.1.2 Régimen de flujo turbulento	1
5.1.3 Transporte de calor en el lecho empacado	7
CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS	2
REFERENCIAS	3
APENDICE A: DEDUCCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO DE MOMENTUM Y CALOR EN RÉGIMEN LAMINAR PARA EL LECHO EMPACADO64	1
APENDICE B: DEDUCCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO DE MOMENTUM Y CALOR EN RÉGIMEN TURBULENTO PARA EL LECHO EMPACADO)

NOMENCLATURA

- A Razón geométrica, L/R
- *B* Razón geométrica, d_p/L
- Bi_w Número de Biot de pared, $h_w R/k_{eff}$
- *c_p* Calor especifico del fluido, kJ /kg K
- *Da* Número de Darcy, $L \alpha (1-\phi)^2 / \phi^3 d_p$
- d_t Diámetro de tubo, m
- d_p Diámetro partícula, m
- G Flujo másico promedio, kg/m² s
- g Vector gravedad, m/s²
- g_z Componente axial de la gravedad, m/s²
- h_w Coeficiente de transferencia de calor en la pared, kJ /m s K
- K Tensor de permeabilidad. m²
- *k_{eff}* Conductividad térmica efectiva, kJ /m s K
- *k*_t Conductividad térmica turbulenta, kJ /m s K
- \tilde{k}_t Conductividad térmica turbulenta promedio, W/m K
- K_a Permeabilidad del lecho, m²
- *K_b* Parámetro de la ecuación de Ergun, m
- L Longitud del lecho, m
- p Presión, Pa
- p' Fluctuación de la presión, Pa
- \overline{p} Valor medio de la presión, Pa
- *Pe* Numeró de Peclet, $Pe=Gc_pR/k_{eff}$
- $Pr^{(t)}$ Número de Prandtl, $Pr^{(t)} = \rho c_p \mu_t / k_t$
- *R* Radio total del tubo, m
- R_p Radio total de la partícula, m
- r Posición radial, m
- Rep Número de Reynolds de partícula, $d_p \rho u_0/\mu$
- t Tiempo, s
- T Temperatura del fluido, °C
- T_0 Temperatura del aire de entrada
- *T_b* Temperatura del Baño
- T' Fluctuación de la temperatura, °C
- \overline{T} Valor medio de la temperatura, °C
- T_w Temperatura del baño de sal, °C

- U_r Velocidad radial, u_r / u_o
- U_z Velocidad axial, u_z/u_o
- u_r Componentes del vector velocidad en la coordenada radial, m/s
- u_z Componentes del vector velocidad en la coordenada axial, m/s
- *u*_o Velocidad promedio del flujo, m/s
- \bar{u}_r Valor medio de la componente velocidad radial, adimensional, m/s
- \bar{u}_z Valor medio de la componente de velocidad axial, adimensional, m/s
- z Posición axial, m

Símbolos griegos

- α Factor geométrico que afecta las resistencias viscosas en el lecho empacado en la ecuación de Ergun
- β Factor geométrico que afecta las resistencias inerciales en el lecho empacado en la ecuación de Ergun
- ε Disipación de energía cinética turbulenta, m²/s³
- $\overline{\varepsilon}$ Disipación de energía cinética turbulenta, $R\varepsilon/u_0^2$
- κ Energía cinética turbulenta, m²/s²
- $\overline{\kappa}$ Energía cinética turbulenta, κ/u_0^2
- ρ Densidad, kg/m³
- μ Viscosidad dinámica, Pa-s
- μ_t Viscosidad turbulenta, Pa-s
- v Viscosidad cinemática,m²/s
- ζ Coordenada axial adimensional, z/L
- θ Temperatura adimensional, \overline{T}/T_0
- ξ Coordenada radial adimensional, r/R
- ϕ Fracción vacía en el medio poroso, adimensional
- ϕ_{∞} Fracción vacía promedio del lecho empacado, adimensional

Subíndices

- eff Propiedad de medio efectivo
- 0 Estado de referencia o propiedad evaluada al tiempo cero
- *w* Pared del lecho empacado

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 3.1	Fotografías que muestran las vistas superiores y laterales de un tubo de acrílico empacado con un catalizador industrial esférico de las mismas dimensiones que el 12			
	sistema experimental utilizado en los experimentos de transferencia de calor			
Figura 3.2	Predicción de los perfiles de fracción vacía usando diferentes correlaciones reportadas	10		
	en la literatura	19		
Figura 3.2	Variación de la fracción vacía y del número de Darcy a lo largo del radio del tubo 2			
Figura 4.1	.1 Fotografías que muestran las vistas superiores y laterales de un tubo de acrílico empacado con un catalizador industrial esférico de las mismas dimensiones que el			
	sistema experimental utilizado en los experimentos de transferencia de calor			
Figura 4.2	Sistema geométrico analizado en este trabajo			
Figura 4.3	Comparación entre los datos de caída de presión experimentales y la predicha con diferentes correlaciones propuestas en la literatura (López -Isunza, 1983)			
Figura 5.1	Efecto de los puntos de colocación sobre la predicción de los perfiles de temperatura	4.1		
	para un Re _p =630	41		
Figura 5.2	Perfiles axiales de velocidad calculados para diferentes Rep, utilizando la	10		
	aproximación de flujo laminar	43		
Figura 5.3	Perfiles axiales de velocidad calculados para diferentes Rep, utilizando la	4.4		
	aproximación de flujo turbulento	44		
Figura 5.4	Perfiles axiales de velocidades calculadas para diferentes Rep, utilizando la	15		
	aproximación de flujo laminar	45		
Figura 5.5	Perfiles axiales de velocidades calculadas para diferentes Rep, utilizando la aproximación de flujo turbulento	46		
Figura 5.6	Comparación de los perfiles experimentales de temperatura con los predichos utilizando la aproximación de lujo laminar y turbulento (a) perfiles radiales, (b) perfiles axiales, para las condiciones de operación: Rep=630; To=192°C; Tb=394°C	49		
Figura 5.7	Comparación de los perfiles experimentales de temperatura con los predichos			
0	utilizando la aproximación de lujo laminar y turbulento para diferentes profundidades	50		
	del lecho empacado			
Figura 5.8	Comparación de los perfiles radiales de temperature con los predichos utilizando			
2	diferentes valores de conductividad térmica, utilizando la aproximación de flujo	52		
	turbulento, para las siguientes condiciones de operación: To=192°C; Tb=394°			

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1.	Clasificación de los modelos de reactores heterogéneos	7		
Tabla 3.1.	1. Modelos de turbulencia reportados en la literatura			
Tabla 4.1.	Características físicas del lecho empacado	31		
Tabla 4.2.	Condiciones de operacion del lecho empacado	32		
Tabla 5.1.	Valores adimensionales usados en las simulaciones numéricas	40		
Tabla 5.2.	Flujo masico experimental <i>vs</i> los calculados con las aproximaciones de flujo laminar y turbulento a la entrada del tubo	46		
Tabla 5.3.	Valores calculados de las conductividades térmicas efectiva y turbulenta	51		

RESUMEN

En este trabajo se analizó el efecto de incluir la turbulencia en la transferencia de momentum y calor en un lecho empacado a baja relación de diámetros de tubo a partícula $(d_t/d_p \approx 3)$. Para describir la hidrodinámica se emplearon las ecuaciones de Navier-Stokes-Darcy-Forchheimer temporalmente promediadas, junto con un modelo de turbulencia de dos ecuaciones (modelo de turbulencia κ - ϵ), para describir la producción y la disipación de energía cinética del flujo considerando un medio pseudo-homogéneo. Los resultados obtenidos con este modelo fueron comparados con un modelo hidrodinámico de flujo laminar, que no considera la producción y disipación de la energía cinética del flujo. En el modelo de flujo laminar se utilizaron parámetros efectivos para describir la transferencia de calor: coeficiente de transferencia de calor en la pared (h_w) y conductividad térmica efectiva (k_{eff}), mientras que el modelo de flujo turbulento además de utilizar estos parámetros también se incluyó la conductividad térmica turbulenta (k_t) , como función de la viscosidad turbulenta (μ_{eff}). Los perfiles de temperatura radial y axial obtenidos con ambos modelos se compararon con datos experimentales de un lecho empacado a escala industrial. Se encontró que las predicciones de los perfiles de temperatura radial y axial con ambos modelos presentaron pequeñas diferencias, mientras que en sus respectivos perfiles radiales calculados para la componente de velocidad axial hay diferencias significativas. También se encontró que el modelo que incluye la turbulencia coincide mejor con las mediciones experimentales del flujo masico experimental, con un error calculado de 0.77%, en el balance de flujo masico para un numero de Reynolds promedio de partícula de 630. Por lo anterior se concluyó que el enfoque de flujo turbulento puede ser utilizado eficientemente para la caracterización de la hidrodinámica y el diseño y ampliación de lechos empacados con baja relación de diámetros de tubo a partícula en varias aplicaciones industriales.

INTRODUCCIÓN

El transporte de calor en lechos empacados se ha estudiado desde finales de los años 40's (Brunnell et al., 1949; Morales et al., 1951; Coberly y Marshall 1951; Chu y Storrow, 1952; Yagi y Kunii, 1960; Smith, 1973; De Wasch y Froment, 1972; Gunn y Khalid, 1975; Lerou y Froment, 1977; Dixon et al., 1979; Schlunder, 1978; Dixon y Cresswell, 1979; Kulkarni y Doraiswamy, 1980; Li y Finlayson 1997), y a partir de estos trabajos se han derivado varios modelos matemáticos, para describir el transporte de calor en medios pseudo-homogéneos, los cuales se han utilizado para describir el comportamiento de reacciones altamente exotérmicas como la oxidación parcial de O-xileno en reactores catalíticos de lecho empacado con baja relación de diámetros ($d_t/d_p = 3$).

En las últimas tres décadas ha habido un interés especial en acoplar la hidrodinámica al transporte de calor en los modelos de lecho empacado, esto con el objetivo de predecir las observaciones de los perfiles de temperatura en ausencia de reacciones químicas. Se ha señalado que un modelo adecuado de un reactor debería considerar la descripción de los campos de velocidad, ya que estos influyen en la transferencia de calor en el lecho empacado Delmas y Froment, 1988; Kufner y Hofmann, 1990; Tsotsas y Schlunder, 1990; Daszkowski y Eigenberger, 1992; Foumeny y Ma, 1994; Papageorgiou y Froment, 1995). La descripción de la hidrodinámica en el lecho empacado basada en las ecuaciones de Navier-Stokes, junto con los términos de Darcy y Forchheimer, ha sido utilizada para describir los perfiles de velocidad en los lechos empacados (Bey y Eigenberger, 1997; Giese y et al., 1998; Magnico, 2003; Castillo-Araiza et al., 2007; Castillo-Araiza y López-Isunza, 2008; Aparicio-Mauricio et al., 2017).

Sin embargo, en la actualidad aún existe una gran incertidumbre en la predicción de los perfiles de velocidad debido a la alta variación de la fracción vacía en lechos empacados a baja relación de diámetro de tubo a partícula $(d_t / d_p \le 5)$. En este tipo de lechos empacados se ha reportado la existencia de dos regiones de fracción vacía bien definida. Estas son el núcleo central y la región próxima a la pared. Para resolver este problema, este problema, se ha introducido un parámetro denominado viscosidad efectiva turbulenta (μ_{eff}), que toma en cuenta los efectos de disipación viscosa así como los efectos de turbulencia en las zonas

cercanas a la pared (Bey y Eigenberger, 1997; Giese et al., 1998; Winterberg y Tsotsas, 2000). Este parámetro ha sido estimado para diferentes tipos de lechos empacados, como una función de la relación de diámetro de tubo a partícula (d_t/d_p) y del número de Reynolds de partícula (Rep).

Los perfiles de velocidad en lechos empacados con baja relación de diámetro de tubo a partícula son de suma importancia en la determinación de la transferencia de calor y masa que ocurren de forma acoplada en reacciones altamente exotérmicas, como la oxidación parcial de hidrocarburos, donde se requiere extraer una gran cantidad de calor para evitar la presencia de gradientes significativos de temperatura los cuales tienen un efecto importante en la disminución de la selectividad y en la desactivación del catalizador.

Por otro lado, para describir los perfiles de temperatura experimentales en ausencia de reacciones químicas se han empleado modelos pseudo-homogéneos en dos dimensiones (Eigenberger, 1972; Tsotsas y Schlunder, 1990; Kufner y Hofmann, 1990; Papageorgiou y Froment, 1995; Giese et al., 1998; Catillo Araiza, 2007). Con estos modelos el transporte de calor se describe usando dos enfoques: En el primero el lecho empacado utiliza coeficientes efectivos para describir la transferencia de calor, i.e.: coeficiente de transferencia de calor de la pared (h_w) y conductividad térmica efectiva (k_{eff}) (Coberly y Marshall, 1951). En el segundo se añadió la hidrodinámica al modelo del lecho empacado para tomar en cuenta el efecto de los perfiles de velocidad, utilizando expresiones empíricas para describir la variación de la fracción vacía en la dirección radial en función de la relación (d_t/d_p) , utilizando los mismos coeficientes para describir la transferencia de calor. En estos dos enfoques todavía existe el problema de estimar estos dos parámetros que están altamente correlacionados a partir de las mediciones experimentales de temperatura en el lecho empacado en ausencia de reacciones químicas (Lerou y Froment, 1978; Michelsen, 1979). A pesar que en la bibliografía existen varias correlaciones para estimar h_w y k_{eff} , éstas están en función de las diferentes propiedades del lecho empacado: propiedades del fluido, partícula, número de Reynolds, relación de diámetro de tubo a partícula, así como de las condiciones de operación.

El uso de estos modelos no ha sido exitoso debido a la gran complejidad que representa describir los transportes de momentum y calor en esta clase de reactores catalíticos de lecho empacado. Esto se debe a dos problemas fundamentalmente, el primero está relacionado con la descripción inadecuada de los transportes de momentum y calor en el lecho empacado, y el segundo se debe a la alta correlación que exhiben los parámetros de transporte de calor (k_{eff} y h_w).

En las últimas décadas, algunos de estos modelos que incorporan la hidrodinámica y el transporte de calor en diferentes niveles de sofisticación se han resuelto mediante la dinámica computacional de fluidos (CFD), y se han reportado los perfiles de velocidad y de temperatura locales dentro del lecho empacado con baja relación (d_t / d_p) . Sin embargo, la solución numérica de las ecuaciones resultantes requiere grandes tiempos de cálculo. Por lo tanto, la dinámica computacional de fluidos (CFD) sólo se aplica a lechos empacados ya sea de pequeñas longitudes o con grandes fracciones vacías (Logtenberg et al., 1998; Baoyu et al., 2003; Nijemeisland y Dixon, 2001a, 2004b; Dixon, 2012).

Con base en lo anteriormente discutido, esta investigación se dirige analizar dando un particular punto de vista de cómo se deben abordar este tipo de problemas. Para ello se desarrolla un estudio sobre la contribución de incluir los efectos de la turbulencia en el transporte de momentum y calor en un lecho empacado en el que $d_t/d_p \approx 3.05$, que se utiliza en los reactores catalíticos para reacciones altamente exotérmicas como la oxidación parcial de O-xileno para producir anhídrido ftálico (Lopez-Isunza, 1983) y comparar el uso de la conductividad térmica turbulenta (k_t), para mostrar la diferencia de la inclusión de este parámetro con los resultados que emplean dos parámetros efectivos para describir la transferencia de calor: coeficiente de transferencia de calor de la pared (h_w) y conductividad térmica efectiva (k_{eff}). Los perfiles de velocidad y temperatura calculados con este modelo se comparan con el modelo que utiliza las ecuaciones de Navier-Stokes para flujo laminar, incluyendo también los términos de Darcy y Forchheimer, en un modelo de lecho empacado pseudo-homogéneo en dos dimensiones. Además se incluyen comparaciones adicionales de los perfiles de velocidad calculados para diferentes números de Reynolds de partícula (25 <Rep≤160).

El contenido de la tesis se organiza de la siguiente forma. En el **capítulo 1**, se reporta una revisión bibliográfica de los trabajos que se encuentran directamente relacionados con los temas a desarrollar. En el **capítulo 1** se presenta la hipótesis y los objetivos de este trabajo. En el **capítulo 2** se presentan los antecedentes relacionados con el presente trabajo. Mientras que en el **capítulo 3**, se presenta el desarrollo teórico. En el **capítulo 4** se describe lo relacionado con el sistema experimental y se plantean las ecuaciones gobernantes. La solución del modelo así como la discusión de las simulaciones numéricas se presentan en el **capítulo 5**.

CAPÍTULO 1: HIPÓTESIS Y OBJETIVOS

1.1. Hipótesis

El modelo de turbulencia κ - ε , aplicado para estudiar la transferencia de momentum y calor en lechos empacados a baja relación de diámetros de tubo a partícula, permitirá calcular con menor incertidumbre los perfiles de velocidad y predecir los perfiles de temperatura en lechos empacados sin reacción química.

1.2. Objetivo general

Analizar el efecto de la turbulencia en los transportes de momentum y calor en un lecho en lechos empacados con una relación de diámetro de tubo a partícula igual a 3.048, utilizando las ecuaciones de Navier-Stokes-Darcy-Forchheimer para flujo turbulento y el modelo de turbulencia κ - ϵ , para un medio pseudo-homogéneo en 2D.

1.2. Objetivos particulares

- Simular numéricamente y analizar la transferencia de momentum y calor en un lecho empacado en 2D, para régimen de flujo turbulento para números de Reynolds de partícula en el intervalo de 600 a 1000.
- II. Comparar los resultados obtenidos cuando se incluye el efecto de la turbulencia en la transferencia de momentum y calor, con las observaciones experimentales.
- III. Comparar los perfiles de velocidad y temperatura obtenidos con un modelo hidrodinámico para flujo laminar con los obtenidos en el punto I.

CAPÍTULO 2: ANTECEDENTES

El modelado de un reactor de lecho empacado para reacciones altamente exotérmicas requiere de una descripción adecuada tanto de la cinética de reacción como de los procesos de transferencia de calor. En este tipo de sistemas resulta de especial importancia el transporte de calor en la dirección radial, debido a que en esta dirección ocurre el calentamiento o enfriamiento del reactor. La medición y la predicción de los perfiles radiales de temperatura ha sido un tema ampliamente estudiado en los últimos 60 años, sobre todo para lechos empacados con bajas relaciones de diámetro de tubo a partícula (Beek, 1962; Froment, 1962; Hlavacek, 1970; Smith, 1973; Li and Finlayson, 1997; Balakrishnan y Pei, 1979; Kulkarni y Doraiswamy, 1980; Paterson y Carberry, 1983; López Isunza, 1983; Cresswell, 1986; Daszkowski y Eigenberger, 1992; Cybulski et al., 1997).

La transferencia de calor en un lecho empacado ocurre a través de los mecanismos de conducción y convección de calor en el fluido que fluye a través del lecho, conducción a través de los puntos de contacto entre las partículas y la pared, conducción a través de los puntos de contacto entre las partículas y la transferencia de calor de la pared al fluido (Argo y Smith, 1963). Diferentes mecanismos de transporte dominarán en función de las tasas de flujo, niveles de temperatura y de otros factores del proceso. De acuerdo a la clasificación dada por Froment y Bishoff (1990), los modelos de transporte de calor pueden ser divididos en modelos heterogéneos y pseudo-homogéneos, una clasificación esquemática se muestra en la **Tabla (1.1)**.

Tabla 1.1. Clasificación de los modelos de transporte de calor en reactores heterogéneos.				
	Heterogéneos	Pseudo-homogéneos		
	$T_f eq T_s$	$T_f = T_s$		
Una dimensión	Gradiente extra-partícula	Flujo Pistón		
	Gradiente inter-partícula	Dispersión Axial		
Dos dimensiones	Dispersión radial	Dispersión Radial		

La mayoría de los experimentos para medir la transferencia de calor en lechos empacados se llevan a cabo en ausencia de reacción, de esta forma hay muy poca diferencia entre las temperaturas del fluido y las partículas, y es por ello que se pueden emplear modelos pseudo-homogéneos para predecir los perfiles de temperatura (Calderbank et al., 1977; Lerou y Froment, 1977; Kershenbaum y López-Isunza, 1982; Castillo-Araiza y López-Isunza, 2010).Sin embargo, el uso de modelos heterogéneos para la simulación de reactores es necesario cuando ocurren reacciones químicas (Eigenberger, 1972; Kulkarni y Doraiswany, 1980; Tsotsas y Schlunder, 1990; Kufner y Hofmann, 1990; Papageorgiou y Froment, 1995; Giese et al., 1998; Lopez-Isunza, 1983).

Las siguientes ecuaciones representan el modelo pseudo-homogéneo de transporte de calor en dos dimensiones, considerando flujo pistón.

$$\rho c_p u_z \frac{\partial T}{\partial z} = k_{eff} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$
(1.1)

C.F.1
$$r = 0$$
 $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$ (1.2)

C.F.2
$$r = R - k_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} = h_w (T - T_w)$$
 (1.3)

C.F.3
$$z = 0$$
 $T = T_0$ (1.4)

C.F.2
$$z=L$$
 $\frac{\partial T}{\partial z} = 0$ (1.5)

En este modelo, los mecanismos que contribuyen a la transferencia de calor dentro del lecho empacado se agrupan en una constante denominada conductividad térmica efectiva (k_{eff}) . Para modelar los mecanismos de transporte de calor cerca de la pared se emplea el coeficiente de transferencia de calor en la pared (h_w) como condición de frontera asociada a la ecuación (1.1). Los primeros trabajos reportados sobre la estimación de k_{eff} y h_w consideraron la velocidad axial u_z como constante y estiman estos parámetros usando métodos analíticos y computacionales a partir de mediciones experimentales de temperatura Crider y Foss, 1965; López- Isunza, 1983; Pereira Duarte et al., 1985; Froment y Bischoff, 1990; Mascazzini y Barreto, 1989; Koning et al., 2006).

Diversas correlaciones se han reportado en la literatura para estimar k_{eff} y h_w . Sin embargo, la mayoría de estas se han obtenido utilizando sistemas que tienen un amplio rango de relaciones d_t/d_p , dominando aquellas que trabajan con valores de $d_t/d_p > 10$ (Colburn, 1931; Hlavacek, 1970; Kunii, 1961; Smith, 1973; Tsang et al., 1976; Li y Finlayson, 1977; Schlunder, 1978; Dixon et al., 1979; Dixon y Cresswell, 1979). Esto ocasiona que con el uso de estas correlaciones se obtengan valores alejados de los que se esperarían en sistemas con $d_t/d_p < 10$ y por consecuencia se producen predicciones inadecuadas de los perfiles experimentales de temperatura observados en esta clase de lechos empacados (Tsang et al., 1976; Michelsen 1979; Froment y Bischoff, 1990; López Isunza, 1983; Wen y Ding, 2006; Castillo Araiza et al., 2007). En algunos estudios se ha considerado la distribución del empaque y la hidrodinámica para estimar los parámetros asociados con el transporte de calor. Esto es esencial cuando se tiene un lecho empacado con una relación de d_t/d_p menor a 10 (López Isunza, 1983; Castillo Araiza et al., 2007; Colburn, 1931; Hlavacek, 1970; Kunii, 1961; Smith, 1973; Tsang et al., 1976; Li y Finlayson, 1977; Schlunder, 1978; Dixon et al., 1978; Dixon y Cresswell, 1979; Tsotsas y Schlunder, 1990).

En principio, tanto los perfiles de velocidad como de temperatura pueden ser descritos para cualquier geometría empleando Dinámica Computacional de Fluidos. Sin embargo, la solución numérica de las ecuaciones para un lecho empacado mediante CFD requiere de tiempos de cálculo considerables, por lo que actualmente CFD ha sido aplicada solo a lechos empacados con una longitud pequeña y grandes fracciones vacías (Logtenberg et al., 1999; Nijemeisland y Dixon, 2001, 2004b; Baoyu et al., 2003; Dixon et al., 2006; Nijemeisland y Stitt, 2008).

Esto ha conducido a varios grupos de investigadores a desarrollar modelos hidrodinámicos para predecir el comportamiento de lechos empacados (Lerou y Froment, 1997; Paterson y Carberry, 1983; Tsotsas y Schlunder, 1990; Kufner y Hofman, 1990; Papageorgiou y Froment, 1995; Castillo Araiza et al., 2008). En general estos grupos describen los campos de velocidad por medio de las ecuaciones modificadas de Navier-Stokes. Normalmente se utilizan expresiones empíricas para describir los perfiles de fracción vacía. Mientras que las interacciones sólido-fluido se consideran con términos adicionales en base a mediciones experimentales de caída de presión utilizando normalmente la ecuación de Ergun.

Sin embargo la velocidad en zonas de alta fracción vacía cerca de la pared normalmente se sobrestima, por lo que se ha hecho uso de un parámetro emperico conocido como viscosidad efectiva (μ_{eff}), que algunos autores emplean como parámetro de ajuste para calcular los perfiles de velocidad (Bey y Eigenberger, 1997; Giese et al., 1998; Winterberg y Tsotsas, 2000; Eisfeld y Schnitzlein, 2001). Este parámetro genera gran incertidumbre, ya que se supone que es una función de la fracción vacía y del número de Reynolds (Castillo Araiza y López Isunza, 2008).

El siguiente conjunto de ecuaciones representan el modelo hidrodinámico pseudohomogéneo en dos dimensiones con la aproximación clásica de flujo laminar. Para el transporte de calor en el lecho empacado se considera un modelo psudo-homogéneo en dos dimensiones (Lerou y Froment, 1997; Paterson y Carberry, 1983; Tsotsas y Schlunder, 1990; Kufner y Hofman, 1990; Papageorgiou y Froment, 1995; Castillo Araiza et al., 2007):

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \tag{1.6}$$

Ecuaciones de momentum:

Coordenada radial:

$$\rho\phi\left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r\frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}\right) = -\phi\frac{\partial p}{\partial r} + \phi\mu\left[\frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}\right] - \phi\frac{\mu}{K}u_r - \frac{1}{r^2}\frac{\rho}{K_z}u_r^2$$

$$(1.7)$$

Coordenada axial:

$$\rho\phi\left(\frac{\partial u_{z}}{\partial t}+u_{r}\frac{\partial u_{z}}{\partial r}+u_{z}\frac{\partial u_{z}}{\partial z}\right)=-\phi\frac{\partial p}{\partial z}+\phi\mu\left[\frac{\partial^{2} u_{z}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial u_{z}}{\partial r}+\frac{\partial^{2} u_{z}}{\partial z^{2}}\right]-\phi\frac{\mu}{K}u_{z}$$

$$-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}u_{z}^{2}+\phi\rho g_{z}$$
(1.8)

Ecuación de Energía:

$$\rho c_{p} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_{r} \frac{\partial T}{\partial r} + u_{z} \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k_{eff} \left(\frac{\partial^{2} T}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^{2} T}{\partial z^{2}} \right)$$
(1.9)

Las condiciones de frontera correspondientes para el sistema de ecuaciones descrito anteriormente son:

C.F.1
$$r = 0$$
 $\frac{\partial u_z}{\partial r} = \frac{\partial u_r}{\partial r} = 0$ $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$ (1.10)

C.F.2
$$r = R$$
 $u_z = u_r = 0$ $-k_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} = h_w (T - T_w)$ (1.11)

C.F.3
$$z = 0$$
 $\frac{\partial u_z}{\partial z} = \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0$ $-k_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} = \rho c_p u_0 (T_0 - T)$ (1.12)

C.F.4
$$z=L$$
 $\frac{\partial u_z}{\partial z} = \frac{\partial u_r}{\partial z} = 0$ $\frac{\partial T}{\partial z} = 0$ (1.13)

Para poder describir los perfiles de velocidad y temperatura con este modelo es necesario estimar los parámetros de transporte μ_{eff} , k_{eff} y h_w a partir de mediciones experimentales, los cuales se consideran constantes. Sin embargo, se ha observado que cerca de la pared del lecho empacado hay un aumento de la resistencia a la transferencia de calor, la cual es causada por un aumento en la fracción vacía, lo que genera una disminución en la conductividad térmica efectiva (k_{eff}) y un aumento en el coeficiente de transferencia calor (h_w). Se ha reportado que este comportamiento no puede ser descrito si se consideran estos parámetros como constantes (Yagi y Kunii, 1961; Tobis y Ziolkowski, 1998).

Diversos estudios reportados en la literatura muestran que con una descripción de los perfiles de velocidad lo suficientemente preciso y con el uso de una conductividad térmica

en función de las variaciones de la fracción vacía es posible predecir los perfiles de temperatura con una buena aproximación (Logtenberg et al., 1998; Baoyu et al., 2003; Nijemeisland y Dixon, 2004a, 2004b; Dixon, 2012).

Esto ha motivado el uso de modelos de turbulencia para describir los perfiles de velocidad y temperatura en lechos empacados con bajas relaciones de diámetro de tubo a partícula. En particular, se ha utilizado el modelo estándar de turbulencia κ - ϵ , con el cual se han obtenido resultados satisfactorios en la predicción del flujo y del transporte de calor al aplicarse en la solución de este tipo de problemas (Rodi, 1980; Wilcox, 2006). Con los avances logrados en los modelos de turbulencia, se han derivado modificaciones a partir del modelo κ - ϵ estándar, extendiendo su aplicación a distintos problemas que existen en ingeniería de reacciones químicas, como el de lechos empacados (Logtenberg et al., 1998; Baoyu et al., 2003; Nijemeisland y Dixon, 2004a, 2004b).

Las siguientes ecuaciones representan el modelo de turbulencia estándar en dos dimensiones, que se ha aplicado en la dinámica computacional de fluidos para describir los perfiles de velocidad y temperatura en lechos empacados (Launder y Spalding, 1972; Hoffman, 1975; Hinze, 1987; Wilcox, 1993; Hoffman, 1996; Pope 2000).

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \overline{u}_r}{\partial r} + \frac{\overline{u}_r}{r} + \frac{\partial \overline{u}_z}{\partial z} = 0$$
(1.14)

Coordenada radial:

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial t}+u_{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\overline{u}_{z}\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r}\right)=-\phi\frac{\partial p}{\partial z}+\phi\left(\mu+\mu_{t}\right)\left[\frac{\partial^{2}\overline{u}_{r}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial z}-\frac{1}{r^{2}}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\frac{\partial^{2}\overline{u}_{z}}{\partial z^{2}}\right] \quad (1.15)$$

Coordenada axial:

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial t}+\overline{u}_{r}\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r}+\overline{u}_{z}\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r}\right)=-\phi\frac{\partial p}{\partial r}+\phi(\mu+\mu_{t})\left[\frac{\partial^{2}\overline{u}_{z}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r}+\frac{\partial^{2}\overline{u}_{z}}{\partial z^{2}}\right]$$
(1.16)

Ecuación de energía cinética turbulenta (κ):

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\kappa}{\partial t} + \bar{u}_{r}\frac{\partial\kappa}{\partial r} + \bar{u}_{z}\frac{\partial\kappa}{\partial z}\right) = \phi\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\kappa}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\kappa}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial\kappa}{\partial r} + \frac{\partial^{2}\kappa}{\partial z^{2}}\right) + \phi(\mu + \mu_{t})$$

$$\left(2\left(\frac{\partial\bar{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2} + 2\left(\frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial r}\right)^{2}\right) - \phi\rho\varepsilon$$
(1.17)

Ecuación de energía disipativa turbulenta (ε):

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \bar{u}_{r}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + \bar{u}_{z}\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\right) = \phi\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\kappa}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\varepsilon}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + \frac{\partial^{2}\varepsilon}{\partial z^{2}}\right) + c_{1}\phi(\mu + \mu_{t})$$

$$\left(2\left(\frac{\partial\bar{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2} + 2\left(\frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\bar{u}_{r}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial r}\right)^{2}\right)\frac{\varepsilon}{\kappa} - \phi\rho c_{2}\frac{\varepsilon^{2}}{\kappa}$$
(1.18)

Ecuación de energía:

$$\rho c_{p} \left(\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \overline{u}_{r} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} + \overline{u}_{z} \frac{\partial \overline{T}}{\partial z} \right) = \left(k_{eff} + k_{t} \right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} + \frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial z^{2}} \right)$$
(1.19)

Las condiciones de frontera correspondientes para el sistema de ecuaciones descrito anteriormente son:

C.F.1
$$r = 0$$
 $\frac{\partial \overline{u}_z}{\partial r} = \frac{\partial \overline{u}_r}{\partial r} = 0$ $\frac{\partial \kappa}{\partial r} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = 0$ $\frac{\partial \overline{T}}{\partial r} = 0$ (1.20)

C.F.2
$$r = R$$
 $\overline{u}_z = \overline{u}_r = 0$ $\kappa = u_0^2 / \sqrt{c_\mu}$ $\overline{T} = T_w$ (1.21)
 $\varepsilon = u_0^4 / 0.04 \mu y^+$

C.F.3 z = 0 $\overline{u}_z = \overline{u}_0; \ \overline{u}_r = 0$ $\kappa = \varepsilon = 0$ $\overline{T} = T_0$ (1.22)

C.F.2
$$z = L$$
 $\frac{\partial \overline{u}_z}{\partial z} = \frac{\partial \overline{u}_r}{\partial z} = 0$ $\frac{\partial \kappa}{\partial z} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$ $\frac{\partial T}{\partial z} = 0$ (1.23)

Con las siguientes condiciones iniciales:

$$t=0 \quad \overline{u}_r = 0 \quad \overline{u}_z = 0 \qquad \varepsilon = 0 \qquad \kappa = 0 \qquad \overline{T} = T_0 \tag{10}$$

CAPÍTULO 3: HIDRODINÁMICA EN UN LECHO EMPACADO

3.1 Ecuación de Darcy

El primer estudió sobre el transporte de un fluido a través de un medio poroso fue realizado por el físico francés Henri Darcy, quien en 1856 publicó una expresión obtenida a partir de una serie de experimentos, donde establece que la caída de presión para un fluido incompresible, en régimen laminar, a través de un medio poroso puede describirse por la siguiente ecuación:

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \cdot \left[\nabla p - \rho \mathbf{g}\right] \tag{3.1}$$

Donde K es la permeabilidad, y es la propiedad global del fluido que controla el flujo. Como toda propiedad de transporte depende fundamentalmente de propiedades geométricas y topológicas de los medios tales como la conectividad del espacio conducto, la geometría, la disposición espacial de las partes que lo conforman y la proporción de volumen que ocupan estas partes (Bird et al., 1960; Greenkorn, 1983; Jiménez-Islas, 1999).

En la postulación de la ley de Darcy se incluyen varias consideraciones: se ignoran los efectos inerciales y las pérdidas por fricción, la cuales se han balanceado solamente con la caída de presión y las fuerzas volumétricas. Por lo tanto, esta ley es solo válida para pequeñas velocidades de flujo. Una desventaja original de la ley de Darcy, es que no requiere de la condición de velocidad en las fronteras del medio poroso, lo cual hace que dicha ley sea únicamente valida lejos de las fronteras. Con base en lo anterior se han publicado diversas modificaciones a la ley de Darcy (Greenkorn, 1983; Gebhart et al., 1988; Jiménez Islas, 1999).

3.2. Ecuación de Brinkman

Brinkman (1947a, b) consideró que la ecuación de Darcy está limitada al no incluir los esfuerzos cortantes de tipo viscoso causados por el contacto del fluido con una superficie en la frontera del sistema. Brinkman realizó la distinción del diferente origen físico de los términos viscosos al realizar una analogía entre la ecuación de Stokes y la ecuación de

Darcy diferenciando entre el esfuerzo viscoso cortante y el arrastre viscoso de los sólidos. También observo que el efecto del esfuerzo cortante viscoso del fluido llega a ser despreciable si se compara con el arrastre viscoso cuando la permeabilidad es pequeña, por lo que el modelo de Brinkman no es del todo correcto cuando se tienen medios porosos poco permeables. La expresión de la ecuación de momentum con la adecuación de Brinkman es (Beavers y Joseph, 1967; Neale y Nader 1974; Eisfeld y Schnitzlein, 2005; Jiménez Islas, 1999):

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \cdot \left[\nabla p - \rho \mathbf{g}\right] + \mu_{eff} \nabla^2 \mathbf{u}$$
(3.2)

3.3 Ecuación de Forchheimer

La ecuación de Darcy es válida solo en los casos cuando la velocidad toma valores lo suficientemente pequeños. Es decir, cuando el Reynolds tiene un valor característico del orden de la unidad. Sin embargo, existe un efecto de la morfología del solido sobre el flujo generándose resistencias debido a la fricción superficial entre el fluido y la matriz solida cuando se aumenta la velocidad. El efecto que produce esta fricción es el denominado arrastre de forma. Para tomar en consideración estos efectos denominados inerciales debido al incremento de la velocidad del flujo, Forchheimer establece una modificación a la ecuación de Darcy, resultando la ecuación de Darcy-Brinkman con la corrección de Forchheimer (Forchheimer, 1935; Nield y Bejan, 1992; Jiménez Islas, 1999):

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \cdot \left[\nabla p - \rho \mathbf{g}\right] + \mu_{eff} \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{F}{\mathbf{K}_z} \cdot \mathbf{u}^2$$
(3.3)

Donde F es el factor de corrección de Forchheimer, y es una función lineal de la velocidad. Con la ecuación de Forchheimer se distinguen los dos regímenes de flujo en el medio poroso, el régimen de Darcy y el régimen de Forchheimer. Al diferenciar los dos regímenes de flujo se puede determinar para qué valores de números de Reynolds el arrastre de forma tiene mayor importancia con respecto al arrastre viscoso.

3.4 Caída de presión en el lecho empacado

Una importante pieza en el estudio de la hidrodinámica del lecho empacado es la caída de presión a lo largo de este. Por lo tanto la caída de presión a través del lecho empacado puede ser aproximada mediante la ecuación de Ergun (Ergun, 1952; Bird et al., 1960; Lopez-Isunsa, 1983: Castillo Araiza y Lopez –Isunza, 2007):

$$\frac{\Delta p}{L} = \alpha \mu \frac{(1-\phi)^2}{d_p^2 \phi^3} u_0 + \beta \rho \frac{(1-\phi)}{d_p \phi^3} u_0^2$$
(3.4)

3.5 Modelo de la hidrodinámica de un lecho empacado

A partir de los trabajos anteriores se han tratado de obtener relaciones que describan mejor el flujo en un medio poroso. De manera general la ecuación para un fluido a través de un medio poroso isotrópico, rígido y homogéneo se escribe como:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \mu_{eff} \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{\mu}{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{u} - \frac{F}{\mathbf{K}_z} \cdot \mathbf{u}^2 + \rho \mathbf{g}$$
(3.5)

La ecuación anterior representa el modelo hidrodinámico que han empleado varios grupos de trabajo (Foumeny y Ma, 1994; Bey y Eigenberger, 1997; Giese et al., 1998; Eisfeld y Schnitzlein, 2001; Castillo Araiza et al., 2007; Castillo Araiza y López Isunza 2008), para calcular los perfiles de velocidad en los lechos empacados con baja relación de diámetros.

3.5.1 Interacciones entre el sólido y el fluido

Las interacciones ente el sólido y el fluido, dependen de la magnitud del número de Reynolds de partícula y de la superficie sólida en el lecho empacado. El termino R^{gs} considera dos contribuciones: i) los esfuerzos de corte viscosos Rep < 10 y ii) los esfuerzos inerciales Rep > 10. Así, las fuerzas debidas a la presencia del solido se expresan como la suma:

$$R^{g-s} = R' + R'' \tag{3.5}$$

Normalmente la contribución a los esfuerzos de corte viscosos ha sido expresada por el término de Darcy de la siguiente manera:

$$R' = \frac{\mu}{k_a(\phi)d_p^2}\phi \mathbf{u}$$
(3.6)

Por otro lado, para el caso de flujos altos de alimentación (Rep > 10), los efectos inerciales debidos a la presencia del solido son más importantes, por lo que se requiere una expresión que describe este comportamiento.

$$R'' = \frac{\rho}{k_b(\phi)d_p}\phi^2 \mathbf{u}^2$$
(3.7)

Este término tiene la forma del segundo término de la expresión propuesta por Forchheimer (1935). Estas expresiones tienen una relación directa con las ecuaciones usadas para calcular la caída de presión en lechos empacados y que normalmente han sido utilizadas en sistemas con bajas relaciones de $d_t/d_p < 10$. Las siguientes ecuaciones muestran la funcionalidad de k_a (ϕ) y k_b (ϕ) con la fracción vacía desarrollada por Ergun (Ergun, 1952).

$$k_{a}(\phi) = -\frac{1}{150\left(\frac{(1-\phi)^{2}}{\phi^{3}}\right)}; \quad para \text{ Rep} < 10$$
(3.8)

$$k_{b}(\phi) = -\frac{1}{1.75\left(\frac{1-\phi}{\phi^{3}}\right)}; \quad para \text{ Rep} > 10$$
(3.9)

3.5.2 Perfiles de fracción vacía

Los perfiles de fracción vacía en lechos empacados han sido estudiados ampliamente, debido a su influencia en la caída de presión, en la permeabilidad y en los perfiles de velocidad. Diversos estudios teóricos y experimentales han mostrado que la fracción vacía varia ampliamente a través del radio del tubo, siendo esta máxima en la zona cercana a la pared, y decrece en dirección al centro del tubo, en alrededor de 1-2 diámetros de partícula (Benenati y Brosilow, 1962; Lerou y Froment, 1977; Govindrao y Froment, 1986; Mueller, 1991; Govindrao y Ramrao, 1992).

Con base en esto se han desarrollado expresiones empiricas para describir la variación de la fracción vacía a lo largo del radio del tubo donde esta variación ha sido normalmente descrita por términos exponenciales (Vortmeyer y Schuster, 1983; Foumeny y Ma 1994; Giese et al., 1998; Mueller 1992).

Otros modelos se basan en combinar más de una expresión y usualmente consiste de una función parabólica para la región de la pared y una función coseno amortiguada para la región central; entre estos modelos podemos mencionar los de Vortmeyer y Schuster (1983) y De Klerk (2003).

En la **Figura 3.1**es claro notar que la fracción vacía no solamente varia radialmente si no también tiene una variación periódica a lo largo de la coordenada axial. A este respecto, en este trabajo no se considera dicha variación axial de la fracción vacía, la mayor variación es de tipo radial.

Mientras que en la **Figura 3.2** se muestra la variación radial de la fracción vacía calculada empleando los diferentes modelos reportados en la literatura donde se observa que el modelo desarrollado por De Klerk (2003) representa mejor el comportamiento radial de la fracción vacía en lechos empacados con baja relación de diámetros ($d_t/d_p \sim 3$).





Figura 3.1. Fotografías que muestran las vistas superiores y laterales de un tubo de acrílico empacado con un catalizador industrial esférico de las mismas dimensiones que el sistema experimental utilizado en los experimentos de transferencia de calor.



Figura 3.2. Predicción de los perfiles de fracción vacía usando diferentes correlaciones reportadas en la literatura.

En este trabajo, el perfil de la fracción vacía radial en el lecho empacado se describe mediante la expresión empírica desarrollada por De Klerk (2003), la cual considera dos regiones a lo largo del radio del tubo. Una cerca de la pared y otra en el centro del lecho, las cuales se describen mediante el siguiente par de ecuaciones:

Para:
$$\left(\frac{R-r}{d_p}\right) < 0.637$$

 $\phi = 2.14 \left(\frac{R-r}{d_p}\right)^2 - 2.53 \left(\frac{R-r}{d_p}\right) + 1$
(3.10)

Para:
$$\left(\frac{R-r}{d_p}\right) \ge 0.637$$

 $\phi = \phi_{\infty} + 0.29 \exp\left(-0.6\frac{R-r}{d_p}\right) \left[\cos\left(2.3\pi\left(\frac{R-r}{d_p} - 0.16\right)\right)\right] + 0.15 \exp\left(-0.9\frac{R-r}{d_p}\right)$ (3.11)

3.5.3 Permeabilidad en el lecho empacado

Se sabe que la magnitud del número Darcy (*Da*) da una buena indicación de los términos viscosos e inerciales que las ecuaciones de momento deben incluir para modelar el flujo en un medio poroso (Jiménez-Islas, 1999). Para $Da < 10^{-8}$ la ecuación de Darcy es suficiente para describir la hidrodinámica; para $10^{-8} < Da < 10^{-4}$ el término viscoso tiene que ser incluido; para $Da > 10^{-4}$ los términos inerciales tienen que ser incluidos. Existe cierto acuerdo en que estos criterios podrían extenderse a lechos empacados con baja relación de $d_{/d_p}$, donde la permeabilidad del lecho varía ampliamente a través de la radio del tubo (Castillo-Araiza, et al., 2007) A este respecto, la **Figura 3.3** muestra el comportamiento no Darciano para el lecho empacado, lo que sugiere la necesidad de incluir términos tanto viscosos como inerciales de la ecuación de Ergun en las ecuaciones de momentum (Castillo-Araiza y Lopez-Isunza, 2008).



Figura 3.3. Variación de la fracción vacía y del número de Darcy a lo largo del radio del tubo.

3.7. Teoría de la turbulencia

Taylor y Von Karman (1956) definieron la turbulencia como un movimiento irregular que aparece en los fluidos, cuando éstos encuentran superficies solidas o inclusive cuando corrientes del mismo fluido se reencuentran (Pope, 2000). Hinze en 1975 definió la turbulencia como una condición de irregularidad del flujo, en el cual varias cantidades (velocidad, presión, temperatura, concentración) muestran una variación aleatoria con respecto a las coordenadas espaciales y temporales, así que distintos valores promedios pueden ser apreciados. Ante la dificultad de una definición precisa de la turbulencia se opta por la enumeración de las propiedades más destacables de los movimientos turbulentos. Se debe tener en cuenta que la turbulencia no es una propiedad del fluido, si no del flujo (Bird, 1960; Hinze, 1975; Wilcox 1993).

Las manifestaciones típicas de la turbulencia se pueden resumir en tres efectos principales:

- Irregularidad. Es la característica más fácilmente apreciable para cualquier observador. La irregularidad se manifiesta en la aparición de fluctuaciones de las variables de flujo (velocidad, presión, temperatura, concentración) con tamaños y tiempos muy dispares (diferentes escalas). Se producen fluctuaciones no estacionarias en flujos inicialmente estacionarios. A pesar de ser un fenómeno determinista, los flujos turbulentos parecen caóticos e impredecibles, lo que justifica el uso de métodos estadístico para su estudio.
- Tridimensionalidad. Pueden existir flujo turbulentos que al ser promediados en el tiempo, resulten ser bidimensionales. Incluso pueden existir movimientos turbulentos en los que las escalas más grades de la turbulencia sean fundamentalmente bidimensionales. Sin embargo, a medida que se desciende en el tamaño de las escalas dentro del amplio espectro que caracteriza a la turbulencia se encuentra que el movimiento asociado a estas escalas pequeñas es siempre tridimensional.
- Disipación. Los flujos turbulentos son siempre disipativos, es decir una vez que se ha desarrollado el flujo turbulento, la turbulencia tiende a mantenerse, aunque para

ello necesite de un aporte continuo de energía. Esta energía proviene del flujo principal y se invierte en aumentar la energía interna mediante procesos de deformación a los que se ven sometidos los paquetes de fluido. La turbulencia necesita de una transferencia continua de energía para reponer esas pérdidas viscosas.

 Difusividad. Los fenómenos de transporte de masa, momentum y energía se ven notablemente amplificados por efecto de la turbulencia y esto se debe a las fluctuaciones del movimiento turbulento. Si bien estas fluctuaciones tienen lugar a escalas mucho mayores que la escala molecular, producen efectos difusivos semejantes a los de carácter molecular (al menos cualitativamente).

La turbulencia se origina principalmente por inestabilidades en el flujo, comúnmente asociadas a altos números de Reynolds. La turbulencia generalmente es no- isotrópica, es decir que varía de intensidad y dirección, pero algunos flujos tienen un limitado intervalo de escalas de remolino que se pueden idealizar como isotrópicos (Prandtl, 1945; Hinze, 1975; Abbot, 1992; Wilcox, 1993).

3.7.1. Escalas de turbulencia

Como se mencionó en el párrafo anterior, existe un amplio rango de escalas en un flujo turbulento. Las más grandes son del orden de la geometría del flujo, por ejemplo el espesor de la capa limite (Prandtl, 1945). Estas escalas extraen energía cinética del flujo medio, estas escalas pierden gradualmente su energía cinética al interactuar con las escalas más pequeñas a través del proceso de energía en cascada, de esta manera, la energía cinética es transferida a las pequeñas escalas. En las escalas más pequeñas de la turbulencia las fuerzas de fricción (esfuerzos viscosos) llegan a ser demasiados grandes y la energía cinética es disipada en energía calorífica, provocando un aumento en la temperatura. (Taylor, 1915; Prandtl, 1945; Launder y Sharma, 1974; Wilcox, 1993).

3.7.1. La ecuación de Reynolds

El estudio de los flujos en régimen turbulento es importante dentro de la mecánica de fluidos y la transferencia de calor. Basta recordar que la mayor parte de los flujos que se presentan en la naturaleza y en las aplicaciones de la ingeniería generalmente se encuentran

en régimen de flujo turbulento. La turbulencia modifica significativamente parámetros tales como la resistencia a la fricción y el coeficiente de transferencia de calor.

Como ejemplos en los cuales se presentan flujos turbulentos se pueden mencionar los siguientes: flujos atmosféricos, flujos en ríos, flujos en conductos, flujo en lechos empacados, tanques de agitación, enfriamiento de dispositivos electrónicos, entre otros.

No existe una teoría general para representar el fenómeno de la turbulencia. Durante la segunda mitad del siglo xx se inició la determinación del movimiento turbulento mediante el uso de diversos métodos: visualización de flujos, desarrollo de instrumentación adecuada y soluciones numéricas de las ecuaciones de conservación.

El origen de la aproximación del modelo RANS, es el resultado de las investigaciones de Reynolds (1895) en el campo de la turbulencia. Reynolds propone que en el flujo turbulento cada variable (velocidad, temperatura, presión, concentración), se puede escribir como la suma de un valor promedio más la fluctuación de la misma (Bird et al., 1960).

$$\Omega(x_i,t) = \bar{\Omega}(x_i,t) + \Omega'(x_i,t)$$
(3.12)

Esta aproximación se sustituye en las ecuaciones de continuidad, momentum y energía, para flujos en régimen laminar dando como resultado términos adicionales conocidos como los esfuerzos de Reynolds (Bird, 1960). Partiendo de la ecuación de continuidad y de momentum para un fluido incompresible en régimen de flujo laminar, utilizando coordenadas cilíndricas en dos dimensiones (r, z).

$$\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$
(3.13)

$$\rho\left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r\frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}\right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu\nabla^2 u_r + \rho g_r$$
(3.14)

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \nabla^2 u_z + \rho g_z$$
(3.15)

Ahora empleando la descomposición de Reynolds (ecuación 3.12) las variables del transporte de momentum se escriben como:

$$u_r = \overline{u}_r + u_r' \tag{3.16}$$

$$\boldsymbol{u}_z = \boldsymbol{\overline{u}}_z + \boldsymbol{u}_z' \tag{3.17}$$

$$p = \overline{p} + p' \tag{3.18}$$

Al escribir las ecuaciones de continuidad y movimiento con u_i sustituida por su equivalente $u_i = \overline{u}_i + u'_i$ y p por su equivalente $p = \overline{p} + p'$.

$$\frac{\partial}{\partial r}(\bar{u}_r + u_r') + \frac{1}{r}(\bar{u}_r + u_r') + \frac{\partial}{\partial z}(\bar{u}_z + u_z') = 0$$
(3.19)

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} (\bar{u}_r + u_r') = -\frac{\partial}{\partial r} (\bar{p} + p') - \rho \left(\frac{\partial}{\partial r} (\bar{u}_r + u_r') (\bar{u}_r + u_r') + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{u}_z + u_z') (\bar{u}_r + u_r') \right)$$
(3.20)

Teniendo en cuenta las siguientes igualdades, las cuáles son útiles para la manipulación algebraica, de las ecuaciones anteriores (Bird et al., 1960).

$$\overline{u}_{r}' = 0, \quad \overline{\overline{u}_{r}} = \overline{u}_{r}, \quad \overline{\overline{u}_{r}} u_{r}' = 0, \quad \overline{\frac{\partial}{\partial r}} \overline{u}_{r} = \frac{\partial}{\partial r} \overline{u}_{r}, \quad \overline{\frac{\partial}{\partial t}} \overline{u}_{r} = \frac{\partial}{\partial t} \overline{u}_{r}$$

$$\overline{u}_{z}' = 0, \quad \overline{\overline{u}_{z}} = \overline{u}_{z}, \quad \overline{\overline{u}_{z}} u_{z}' = 0, \quad \overline{\frac{\partial}{\partial z}} \overline{u}_{z} = \frac{\partial}{\partial z} \overline{u}_{z}, \quad \overline{\frac{\partial}{\partial t}} \overline{u}_{z} = \frac{\partial}{\partial t} \overline{u}_{z}$$

$$(3.22)$$

A continuación se muestran las ecuaciones promediadas en el tiempo que resultan de sustituir el valor de las variables instantáneas por su valor medio y fluctuante, asi como también aplicando las igualdades anteriores:

$$\frac{\partial \overline{u}_r}{\partial r} + \frac{\overline{u}_r}{r} + \frac{\partial \overline{u}_z}{\partial z} = 0$$
(3.23)

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \bar{u}_{r} = -\frac{\partial p}{\partial r} - \rho \left(\frac{\partial}{\partial r} \bar{u}_{r} \bar{u}_{r} + \frac{\partial}{\partial z} \bar{u}_{r} \bar{u}_{z} \right) - \rho \left(\frac{\partial}{\partial r} \overline{u_{r}' u_{r}'} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{u_{r}' u_{z}'} \right) + u \nabla^{2} \bar{u}_{r} + \rho q$$
(3.24)

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \overline{u}_{z} = -\frac{\partial p}{\partial z} - \rho \left(\frac{\partial}{\partial r} \overline{u}_{z} \overline{u}_{z} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{u}_{r} \overline{u}_{z} \right) - \rho \left(\frac{\partial}{\partial r} \overline{u'_{z} u'_{z}} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{u'_{r} u'_{z}} \right) + \mu \nabla^{2} \overline{u}_{z} + \rho g_{z}$$

$$(3.25)$$

Así, éstas son las ecuaciones de continuidad y movimiento con ajuste en el tiempo para un fluido con densidad y viscosidad constante. Al compararlas con las ecuaciones correspondientes en las ecuaciones (3.13)-(3.15), se observa que;

- I. La ecuación de continuidad es la misma que ya se tenía, excepto que ahora u_r y u_z ha sido remplazado por \bar{u}_r , y \bar{u}_z , lo cual implica que ahora las variables principales son las componentes medias.
- II. Ahora la ecuación de movimiento tiene \bar{u}_r , \bar{u}_z y \bar{p} donde previamente se tenían u_r , u_z y p. Además, aparecen los términos subrayados con línea continua en las ecuaciones (3.24) y (3.25), que describen el transporte de cantidad de movimiento asociada con las fluctuaciones turbulentas.

Es posible volver a escribir las ecuaciones introduciendo el tensor de densidad de flujo de cantidad de movimiento turbulento y el tensor para la densidad de cantidad de movimiento viscoso con ajuste en el tiempo $(\bar{\tau}^{(v)} + \bar{\tau}^{(t)})$. Esto permite entonces escribir las ecuaciones de variación en forma vector tensor como (Bird, 1960);

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \tag{3.26}$$

$$\rho \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\mathbf{u}} \right) = -\nabla \bar{p} + \left[\nabla \cdot \left(\bar{\boldsymbol{\tau}}^{(\nu)} + \bar{\boldsymbol{\tau}}^{(t)} \right) \right] + \rho \mathbf{g}$$
(3.27)

Donde los componentes del tensor en coordenadas cilíndricas (r, z) son los siguientes. Estas cantidades son denominadas como los esfuerzos de Reynolds (Bird, 1960).

$$\tau_{rr} = -\left(\mu + \mu_t\right) \left[2\frac{\partial \overline{\mu}_r}{\partial r}\right]; \tau_{zz} = -\left(\mu + \mu_t\right) \left[2\frac{\partial \overline{\mu}_z}{\partial z}\right]; \tau_{zr} = \tau_{rz} = -\left(\mu + \mu_t\right) \left[\frac{\partial \overline{\mu}_r}{\partial z} + \frac{\partial \overline{\mu}_z}{\partial r}\right] \quad (3.28)$$

La ecuación para una cantidad escalar, como lo es la temperatura, también se puede escribir utilizando la descomposición de Reynolds para un fluido Newtoniano.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho c_p \left(\frac{\partial}{\partial r} u_r T + \frac{\partial}{\partial z} u_z T \right) + k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$
(3.29)

En la ecuación anterior sustituimos T por $\overline{T} + T'$ y u_i por $\overline{u}_i + \overline{u}'_i$.

$$\rho c_{p} \frac{\partial \overline{T}}{\partial t} = -\rho c_{p} \left(\frac{\partial}{\partial r} (\overline{u}_{r} + u_{r}') (\overline{T} + T') + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{u}_{z} + u_{z}') (\overline{T} + T') \right) + k \left(\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} (\overline{T} + T') + \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} (\overline{T} + T') \right)$$

$$(3.30)$$

Resulta evidente T' que promedia a cero, de modo que T'=0, pero cantidades como $\overline{u'_rT'}, \overline{u'_zT'}$ no son cero debido a la "correlación" entre las fluctuaciones de velocidad y temperatura en cualquier punto. Entonces la ecuación ajustada respecto al tiempo se escribe de la siguiente forma (Bird, 1960);

$$\rho c_{p} \frac{\partial \overline{T}}{\partial t} = -\rho c_{p} \left(\frac{\partial}{\partial r} \overline{u}_{r} \overline{T} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{u}_{z} \overline{T} \right) - \rho c_{p} \left(\frac{\partial}{\partial r} \overline{u'_{r} T'} + \frac{\partial}{\partial z} \overline{u'_{z} T'} \right) + k \left(\frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial r^{2}} + \frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial z^{2}} \right)$$

$$(3.31)$$

Al comparar esta ecuación con la ecuación (3.29), se observa que la ecuación con ajuste de tiempo tiene la misma forma que la ecuación original, excepto por la aparición de los términos indicados con una línea, que están relacionados con las fluctuaciones turbulentas denominados como flux de calor turbulento $\overline{q}^{(t)}$ con componentes:

$$\overline{q}_{r}^{(t)} = k_{t}\rho c_{p}\overline{u_{r}^{\prime}T^{\prime}}, \quad \overline{q}_{z}^{(t)} = k_{t}\rho c_{p}\overline{u_{z}^{\prime}T^{\prime}}$$
(3.32)

Es posible volver a escribir la ecuación (3.31) introduciendo la densidad de flujo de calor turbulento $\overline{q}^{(t)} = -k\nabla \overline{T}$ y la densidad de flujo de calor como función de la disipación viscosa $\overline{q}^{(v)}$ con componentes $\overline{q}^{(v)} = -k\nabla \overline{T}$ (Bird et al., 1960).

$$\rho c_{p} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{T} \right) = - \left[\nabla \cdot \left(\bar{\mathbf{q}}^{(\nu)} + \bar{\mathbf{q}}^{(t)} \right) \right]$$
(3.32)

Sin embargo, estas ecuaciones contienen diez incógnitas, la presión, los tres componentes de la velocidad promedio y los seis componentes del tensor de esfuerzos de Reynolds. Esta disparidad entre ecuaciones e incógnitas es lo que da origen a la búsqueda de nuevas ecuaciones que relacionan principalmente las variables promedio con la de esfuerzos de Reynolds, dando origen a lo que se conoce como problema de cerradura para la turbulencia (Jones y Launder, 1972). Para el caso en dos dimensiones se generan tres ecuaciones y seis incógnitas.

Debido a lo anterior es inevitable el uso de relaciones empíricas para el cierre de las ecuaciones que surgen al aplicar el promedio de Reynolds a las ecuaciones de Navier-Stokes. Existen diferentes metodologías para cerrar el problema de la turbulencia reportadas ampliamente en la literatura, resulta importante mencionar que el objetivo de las diferentes metodologías es satisfacer los esfuerzos de Reynolds que resultan al promediar las ecuaciones de Navier-Stokes. Con base en esto se han desarrollado modelos de turbulencia los cuales permiten calcular los esfuerzos de Reynolds que aparecen en las ecuaciones en las ecuaciones de momentum y temperatura. En la **Tabla 3.1** se presentan los modelos más ampliamente utilizado por diferentes autores. Para un mayor detalle de estos modelos, consultar el libro de Wilcox, (1993).
Tabla 3.1. Modelos de turbulencia reportados en la literatura.			
Nombre del modelo	Descripción	Autores	
Modelo de esfuerzos de Reynolds	Este modelo es el más complejo de los modelos, se caracteriza por cerrar el sistema de ecuaciones a partir de la simulación directa de cada una de las incógnitas del tensor de esfuerzos de Reynolds.	Van Drisest, 1956; Wilcox y Rubesin, 1980; Versteeg y Malalasekera, (1995); Wilcox 1993; Ferziger, 1997.	
Modelos de esfuerzos algebraicos	Este modelo propone la idea de que los esfuerzos de Reynolds pueden ser reducidos a un grupo de ecuaciones algebraicas. Para posteriormente satisfacer los términos convectivos y difusivos de las ecuaciones de Navier-Stokes en su versión promediada.	Taylor, 1915; Prandtl, 1945; Rodi 1985; Gatski y Speziale, 1993; Ghia et al., 1682; Wilcox 1993.	
Modelo de dos ecuaciones	Estos modelos consisten en la modelación de los esfuerzos de Reynolds considerando una relación de estos con los esfuerzos viscosos en los flujos laminar. En estos modelos destacan el modelo κ - ϵ y κ - ω .	Launder y Spalding, 1972; Hoffman, 1975; Hinze, 1975; Wilcox, 1993; Hoffman, 1996 Pope 2002.	

Unas de la aproximaciones con mayor aplicación para obtener las ecuaciones de cerradura es el denominado modelo de longitud de mezclado de Prandtl, (1942) y que sea a utilizado para desarrollar el modelo de turbulencia κ - ϵ , este modelo de turbulencia es el más comúnmente usado, el cual se emplea el presente trabajo.

El modelo de turbulencia κ - ϵ es el modelo más popular de dos ecuaciones que utiliza en aplicaciones de modelado de problemas de ingeniería. Los primeros autores en desarrollar este modelo fueron Chou (1945), Davidov (1961) y Harlow y Nakayama (1968). Sin embargo, el trabajo de Jones y Launder (1972) es el más referenciado entre la comunidad de modelado de turbulencia por medio del modelo κ - ϵ (Wilcox, 1993).

Jones y Launder (1972) presentaron un modelo de turbulencia en el cuál los valores locales de la viscosidad turbulenta (μ_t) son determinados de la solución de las ecuaciones de transporte, para la energía cinética turbulenta κ y la disipación de la misma ε . Esta contribución proporciona una forma adecuada para las ecuaciones en la región cerca de la pared donde la viscosidad ejerce una influencia directa sobre la estructura de la turbulencia. Launder y Spalding (1974) presentaron la solución numérica del flujo turbulento para diferentes problemas: flujo en una tubería, flujo en una cavidad rectangular con entrada y salida de flujo en un conducto de sección cuadrada. Para modelar el flujo turbulento los autores emplean las ecuaciones de transporte de energía cinética turbulenta y la disipación de la misma, modelo κ - ϵ , estas ecuaciones fueron resueltas simultáneamente con las ecuaciones de continuidad y momentum. El objetivo del estudio fue encontrar en el modelo de turbulencia la economía computacional, el rango de aplicabilidad y el realismo físico.

De esta manera, las ecuaciones para el transporte de la energía cinética turbulenta y la disipación de la misma se definen respectivamente de acuerdo con Wilcox (1993).

Ecuación de energía cinética turbulenta κ:

$$\rho\left(\frac{\partial\kappa}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla\kappa\right) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa}\right)\nabla\kappa\right] + (\mu + \mu_t)\nabla\bar{\mathbf{u}} \cdot \left(\nabla\bar{\mathbf{u}} + \nabla\bar{\mathbf{u}}^T\right) - \rho\varepsilon$$
(3.47)

Ecuación de energía disipativa turbulenta ɛ:

$$\rho\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \overline{\mathbf{u}} \cdot \nabla\varepsilon\right) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\varepsilon}}\right) \nabla\varepsilon\right] + c_{1}\left(\mu + \mu_{t}\right) \nabla\overline{\mathbf{u}} \cdot \left(\nabla\overline{\mathbf{u}} + \nabla\overline{\mathbf{u}}^{T}\right) \frac{\varepsilon}{\kappa} -c_{2}\rho \frac{\varepsilon^{2}}{\kappa}$$

$$(3.48)$$

Donde la viscosidad turbulenta se expresa en términos de κ y ϵ de la siguiente forma:

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \tag{3.49}$$

CAPÍTULO 4: SISTEMA EXPERIMENTAL Y MODELOS MATEMÁTICOS DESARROLLADOS

En este capítulo se, describe el problema a resolver. Se consideran las ecuaciones para flujo en régimen turbulento, y las ecuaciones de transporte de momentum y calor se resuelven conjuntamente con las ecuaciones provenientes del modelo de turbulencia κ - ϵ .

4.1. Sistema experimental

Los datos experimentales utilizados en este estudio provienen de un tubo de acero inoxidable con un diámetro interno de 2.50 cm y 3.35 m de longitud, empacado con 2.60 m de, empacado con esferas de 8.2 mm de diámetro de un catalizador industrial no poroso (V_2O_5/TiO_2) , produciendo una relación de d_t/d_p =3.048. La fracción vacía media del lecho es 0.48, y el lecho empacado opera con números de Reynolds de partícula dentro del régimen turbulento (Rep>600) (López Isunza, 1983).

En la **Figura 4.1** se muestra una vista superior y lateral de un tubo de acrílico del mismo radio que el tubo de acero inoxidable, empacado con el mismo catalizador, donde se puede observar que en la zona que se extiende desde la pared del tubo hasta la distancia de aproximadamente un radio de partícula una mayor fracción vacía que el resto del lecho, produciéndose, en consecuencia, una mayor permeabilidad del fluido que puede producir cambios importantes en tanto las componentes de velocidad como en el transporte de calor en la dirección radial (Dixon, 2012; Thiagalingam y Sagaut, 2016).





Figura 4.1. Fotografías que muestran las vistas superiores y laterales de un tubo de acrílico empacado con un catalizador industrial esférico de las mismas dimensiones que el sistema experimental utilizado en los experimentos de transferencia de calor.

Las mediciones experimentales de temperatura en el lecho empacado a escala industrial fueron obtenidas por López Isunza, (1983), mediante una serie de experimentos en un lecho empacado sumergido en un baño agitado de sal fundida (T_b), que actuó como medio de calentamiento a una temperatura de 394 ± 4 °C, con un flujo de aire de 4 Nm³ /h. La **Figura 4.3** muestra los datos experimentales de caída de presión para diferentes flujos de aire en el rango de 1 a 5 Nm³/ h (López-Isunza, 1983). Todos los experimentos se realizaron utilizando aire que fluye desde la parte superior del lecho empacado. Las mediciones experimentales de temperatura fueron tomadas con termopares situados en diferentes posiciones axiales, y en algunas de estas posiciones axiales también se tomaron mediciones radiales de temperatura, donde los termopares se mueven radialmente a lo largo de los termopozos soldados a la pared del tubo, que a su vez producen una distorsión en las mediciones de radiales de temperatura debido a las pérdidas de calor hacia los alrededores (López Isunza, 1983; Castillo Araiza et al., 2008; Mongkhonsi et al., 1992). Las características físicas y las condiciones de operación del lecho empacado usadas en este estudio se muestran en las tablas 4.1 y 4.2, respectivamente.

Tabla 4.1. Características físicas del lecho empacado.		
	Valor	Unidades
Diámetro del tubo	0.025	m
Diámetro de partícula	0.0082	m
Longitud del lecho empacado	2.600	m
Densidad de las esferas	2608	kg/m ³
Relación de diámetros, d_t/d_p	3.048	
Número de Darcy, K/R^2	10-3	
Números de Reynolds de partícula, Rep	630 [#] , 767 [#] , 1000 [#]	
	25*, 60*, 160*	
Temperatura del aire de entrada, T_0	192	°C
Temperatura del baño de sal	390 ± 4	°C
Flujo del aire	4	m³/h

[#]López-Isunza, (1983); *Castillo-Araiza et al. (2007).

Tabla 4.2. Condiciones de operacion del lecho empacado		
	Valor	Unidades
Densidad del fluido del aire , ρ	0.7788	kg/m ³
Capacidad calorífica del aire, C_p	1019	J/kg·K
Viscosidad dinámica, μ	2.504x10 ⁻⁵	Pa·s
Conductividad térmica del aire, k _{fluid}	0.03646	W/m·K
Conductividad térmica del aire	2.63#, 2.47*	W/m·K
Coeficiente de trasferencia de calor, h_w	284.04*	$W/m^2 \cdot K$
Número de Peclet, Pe	17.82#, 14.15*,	
Número de Biot, Bi_w	1.35*, 0.86•	
Parámetros de la ecuación de Ergun, α , β	1028*, 1.15*	

[#]López-Isunza, (1983); *Castillo-Araiza et al. (2007).

4.2. Modelo del lecho empacado

El sistema físico analizado en este trabajo es un tubo de acero de longitud L, con un diámetro interno d_t , empacado con esferas de diámetro d_p , produciendo una relación de $d_t/d_p=3.048$ y una porosidad promedio de 0.48 (Ver Figura 4.2). A través del lecho empacado el aire fluye a una temperatura T_0 , el tubo se calienta mediante un baño de sal fundida a una temperatura prácticamente constante T_b . El enfoque hidrodinámico considera que el fluido es newtoniano e incompresible, donde la viscosidad y la densidad son constantes. El régimen del fluido es turbulento debido a los valores de Rep utilizados en la experimentación. Debido a que L>>> d_t , la caída de presión en la dirección radial puede despreciarse, mientras que para describir la caída de presión en la dirección axial se emplea la ecuación de Ergun (ver Figura 4.3). Para describir los perfiles de velocidad, se emplean las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas para flujo turbulento junto con el modelo de turbulencia κ - ϵ . Además, para describir los perfiles de temperatura se emplea un modelo psudo-homogéneo 2D que considera la producción y disipación de la energía cinética turbulenta k_t , considerando las propiedades efectivas de la fase fluida y la fase sólida. Con base en estas consideraciones, las ecuaciones que rigen se describen en los siguientes apartados.



Figura 4.2. Sistema geométrico analizado en este trabajo.



Figura 4.3. Comparación entre los datos de caída de presión experimentales y la predicha con diferentes correlaciones propuestas en la literatura (López Isunza, 1983).

4.3 Ecuaciones de transporte

Ecuaciones de momentum

Las ecuaciones de momentum para las componentes de la velocidad radial y axial se describen por medio de las ecuaciones de Navier Stokes temporalmente promediadas (modelo RANS) (Bird et al., 1960; Nielsen, 1974), incluyendo los términos de Darcy y Forchheimer para tomar en cuenta los efectos viscosos e inerciales debido a las interacciones entre el sólido y el fluido (Hsu y Cheng, 1990; Foumeny y Ma, 1994; Castillo-Araiza et al., 2008).

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \overline{u}_r}{\partial r} + \frac{\overline{u}_r}{r} + \frac{\partial \overline{u}_z}{\partial z} = 0$$
(4.1)

Coordenada radial:

$$\rho\left(\frac{\partial \bar{u}_{r}}{\partial t} + \bar{u}_{r}\frac{\partial \bar{u}_{r}}{\partial r} + \bar{u}_{z}\frac{\partial \bar{u}_{r}}{\partial z}\right) = (\mu + \mu_{r})\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\bar{u}_{r})\right) + \frac{\partial^{2}\bar{u}_{r}}{\partial z^{2}}\right] - \frac{\mu}{K_{a}}\bar{u}_{r} - \frac{\rho}{K_{b}}\bar{u}_{r}^{2}$$
(4.2)

Coordenada axial:

$$\rho \left(\frac{\partial \overline{u}_{z}}{\partial t} + u_{r} \frac{\partial \overline{u}_{z}}{\partial r} + \overline{u}_{z} \frac{\partial \overline{u}_{z}}{\partial z}\right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + (\mu + \mu_{r}) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \overline{u}_{z}}{\partial r}\right) + \frac{\partial^{2} \overline{u}_{z}}{\partial z^{2}}\right] - \frac{\mu}{K_{a}} u_{z} - \frac{\rho}{K_{b}} u_{z}^{2} + \rho g_{z}$$
(4.3)

Donde los parámetros de permeabilidad del lecho empacado se representan en términos de la ecuación de Ergun (1952).

$$K_a = \frac{\phi^3 d_p^2}{\alpha \left(1 - \phi\right)^2} \tag{4.4}$$

$$K_{b} = \frac{\phi^{3} d_{p}}{\beta (1 - \phi)} \tag{4.5}$$

Modelo de turbulencia

Para tener en cuenta el efecto de la turbulencia del fluido y calcular la viscosidad turbulenta en este estudio se emplea el modelo de turbulencia de dos ecuaciones κ - ε , el cual plantea un balance para el transporte de la energía cinética turbulenta y de la disipación de la misma, y de acuerdo con (Jones y Launder, 1972; Nijemeisland y Dixon, 2001; Baoyu et al., 2003) estas ecuaciones son:

Ecuación de energía cinética turbulenta κ:

$$\rho\left(\frac{\partial\kappa}{\partial t} + \bar{u}_{r}\frac{\partial\kappa}{\partial r} + \bar{u}_{z}\frac{\partial\kappa}{\partial z}\right) = \left(\mu + \frac{\mu_{r}}{\sigma_{\kappa}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\kappa}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial\kappa}{\partial r} + \frac{\partial^{2}\kappa}{\partial z^{2}}\right) + \left(\mu + \mu_{r}\right)\left(2\left(\frac{\partial\bar{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2} + 2\left(\frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial r}\right)^{2}\right) + \phi S_{\kappa} - \rho\varepsilon$$

$$(4.6)$$

Ecuación de energía disipativa turbulenta ε:

$$\rho \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{u}_{r} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} + \bar{u}_{z} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z}\right) = \left(\mu + \frac{\mu_{r}}{\sigma_{\kappa}}\right) \left(\frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} + \frac{\partial^{2} \varepsilon}{\partial z^{2}}\right) + c_{1} \left(\mu + \mu_{r}\right) \left(\left(2\frac{\partial \bar{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2} + \left(2\frac{\partial \bar{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial \bar{u}_{z}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}_{z}}{\partial r}\right)^{2}\right) \frac{\varepsilon}{\kappa} + c_{2} \phi \left[S_{\varepsilon} - \rho \frac{\varepsilon^{2}}{\kappa}\right]^{(4.7)}$$

Estas ecuaciones anteriores en contraste con las ecuaciones del modelo κ - ϵ estándar (ecuaciones 1.17 y 1.18), contienen dos términos adicionales, es decir, S_{κ} y S_{ϵ} que toman en cuenta la relación entre la producción de energía cinética y su disipación debido a la presencia del medio sólido, y se expresan mediante la ecuación de Ergun (Takeda, 1994; Baoyu, 2003).

$$S_{\kappa} = c_{\kappa} \left(\alpha \mu \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3 d_p^2} + \beta \rho \frac{1-\phi}{\phi^3 d_p} u_0 \right) u_0^2$$
(4.8)

$$S_{\kappa} = c_{\kappa} \left(\alpha \mu \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3 d_p^2} + \beta \rho \frac{1-\phi}{\phi^3 d_p} u_0 \right) \frac{\varepsilon}{\kappa} u_0^2$$
(4.9)

Los valores usuales para las constantes del modelo κ - ε son: $c_{\mu}=0.09$, $c_1=1.44$, $c_2=1.92$, $\sigma_{\kappa}=1.00$ y $\sigma_{\varepsilon}=1.30$ (Jones y Launder, 1972; Nijemeisland y Dixon, 2001; Baoyu et al., 2003; Wilcox 1993; Wilcox 2006). Los valores de las constantes α y β en las ecuaciones (4.4) y (4.5), son 1028 y 1.15 respectivamente los cuales se determinaron ajustando los datos experimentales de caída de presión a diferentes flujos de alimentación (López Isunza, 1983; Castillo Araiza y López Isunza, 2007) (**ver Figura 4.3**).

Condiciones iniciales y de frontera

Las condiciones iniciales y de frontera correspondientes para el sistema de ecuaciones descrito anteriormente son:

B.C.1
$$r = 0$$
 $\frac{\partial \overline{u}_z}{\partial r} = \frac{\partial \overline{u}_r}{\partial r} = 0$ $\frac{\partial \kappa}{\partial r} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = 0$ (4.10)
B.C.2 $r = R$ $\overline{u}_z = \overline{u}_r = 0$ $\kappa = \langle \overline{u}_z(r) \rangle^2 / \sqrt{c_\mu}$ $\varepsilon = \langle \overline{u}_z(r) \rangle^4 / 0.04 \mu y^+$ (4.11)

B.C.3
$$z = 0$$
 $\overline{u}_z = \langle \overline{u}_z(r) \rangle; \ \overline{u}_r = 0$ $\kappa = \varepsilon = 0$ (4.12)

B.C.4
$$z = L$$
 $\frac{\partial \overline{u}_z}{\partial z} = \frac{\partial \overline{u}_r}{\partial z} = 0$ $\frac{\partial \kappa}{\partial z} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$ (4.13)

$$t=0 \quad \theta=1 \qquad \overline{u}_z=0 \qquad \varepsilon=0 \qquad \kappa=0 \tag{4.14}$$

Transporte de calor en el lecho empacado

El modelo pseudo-homogéneo que describe la transferencia de calor en ausencia de reacciones químicas en el interior del lecho empacado, que considera el transporte convectivo así como la dispersión radial y axial de calor es:

$$\rho c_{p} \left(\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \overline{u}_{r} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} + \overline{u}_{z} \frac{\partial \overline{T}}{\partial z} \right) = \left(k_{eff} + k_{r} \right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} + \frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial z^{2}} \right)$$
(4.15)

En la ecuación anterior \overline{T} , se encuentra temporalmente promediada y la conductividad térmica turbulenta k_t se expresa en términos de la viscosidad turbulenta (Bird el at., 1960; Jones y Launder, 1972; Wilcox, 2006), y se incluye la k_{eff} para evaluar k_t .

$$k_t = c_p \frac{\mu_t}{\mathbf{Pr}^t} \tag{4.16}$$

Donde Pr^t es el número de Prandtl turbulento, que tiene un valor típico de 0.85 (Jones y Launder, 1972).

La ecuación (4.15), tiene asociada las siguientes condiciones iniciales y de frontera:

$$t = 0 \qquad \overline{T} = T_0 \tag{4.17}$$

C.F.1
$$r = 0$$
 $\frac{\partial \overline{T}}{\partial r} = 0$ (4.18)

C.F.1
$$r = R$$
 $-k_{eff} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} = h_w \left(\overline{T} - T_w\right)$ (4.19)

C.F.1
$$z = 0$$
 $\overline{T} = T_0$ (4.20)

C.F.1
$$z=L$$
 $\frac{\partial T}{\partial z}=0$ (4.21)

4.4. Ecuaciones adimensionales

Al llevar acabo el procedimiento de adimensionalización de las ecuaciones de transporte se reduce el número de parámetros requeridos para la solución de las ecuaciones. En el Apéndice B se encuentra en detalle la obtención de las ecuaciones adimensionales.

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \xi} + \frac{\overline{U}_r}{\xi} + \frac{1}{A} \frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \zeta} = 0$$
(4.22)

Ecuaciones de momentum:

Coordenada radial:

$$\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} = A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu} \frac{\tilde{\kappa}^{2}}{\tilde{\varepsilon}}\right) \left[\frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} - \frac{\overline{U}_{r}}{\xi^{2}} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \zeta^{2}}\right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}} \overline{U}_{r} - \phi F \overline{U}_{r}^{2}$$

$$(4.23)$$

Coordenada axial:

$$\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial \zeta} + A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu} \frac{\tilde{\kappa}^{2}}{\tilde{\varepsilon}}\right) \left[\frac{\partial^{2} \overline{U}_{z}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta^{2}}\right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}} \overline{U}_{z} - F\overline{U}_{z}^{2} + \operatorname{Gn}$$

$$(4.24)$$

Modelo de turbulencia κ-ε:

Ecuación de energía cinética turbulenta κ:

$$\frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \zeta} = A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{c_{\mu}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{\kappa}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \frac{R^{2}}{L^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{\kappa}}{\partial \zeta^{2}}\right) + A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi}\right)^{2} + \left(\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi}\right)^{2}\right) + c_{\kappa}B\left(\frac{\alpha}{\operatorname{Rep}} \frac{(1-\phi)^{2}}{\phi^{3}} + \beta \frac{(1-\phi)}{\phi^{3}}\right) - a\overline{\varepsilon}$$

$$(4.25)$$

Ecuación de energía disipativa turbulenta ε:

$$\frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta} = A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{c_{\mu}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{\varepsilon}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta^{2}}\right) + Ac_{1}\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(2\left(\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi}\right)^{2} + \frac{2}{A^{2}}\left(\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta}\right)^{2} + \left(\frac{1}{A} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi}\right)^{2}\right) \frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{\kappa}} \quad (4.26)$$

$$+ c_{2}\left[Bc_{\kappa}\left(\frac{\alpha}{\operatorname{Rep}} \frac{(1-\phi)^{2}}{\phi^{3}} + \beta \frac{(1-\phi)}{\phi^{3}}\right) \frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{\kappa}} - A \frac{\overline{\varepsilon}^{2}}{\overline{\kappa}}\right]$$

Ecuación de energía

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau} + A\bar{U}_{r}\frac{\partial\theta}{\partial\xi} + \bar{U}_{z}\frac{\partial\theta}{\partial\zeta} = A\left(\frac{1}{Pe} + \frac{c_{\mu}}{Pr^{(t)}}\frac{\bar{\kappa}^{2}}{\bar{\varepsilon}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\theta}{\partial\xi^{2}} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\theta}{\partial\xi} + \frac{1}{A^{2}}\frac{\partial^{2}\theta}{\partial\zeta^{2}}\right)$$
(4.27)

Condiciones iniciales y de frontera

Las condiciones iniciales y de frontera correspondientes para el sistema de ecuaciones descrito anteriormente son:

B.C.1
$$\xi = 0$$
 $\frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \xi} = \frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \xi} = 0$ $\frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} = \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} = 0$ $\frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0$ (4.28)

B.C.2
$$\xi = 1$$
 $\overline{U}_z = \overline{U}_r = 0$ $\overline{\kappa} = 1/\sqrt{c_\mu}$ $\frac{\partial \theta}{\partial \xi} = -Bi_w (\theta - \theta_w)$ (4.29)
 $\overline{\varepsilon} = 1/0.04 \operatorname{Rep} \zeta^+$

B.C.3
$$\zeta = 0$$
 $\overline{U}_z = \langle \overline{U}_z(r) \rangle; \ \overline{U}_r = 0$ $\overline{\kappa} = \overline{\varepsilon} = 0$ $\theta = 1$ (4.30)

B.C.4
$$\zeta = 1$$
 $\frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \zeta} = \frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \zeta} = 0$ $\frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \zeta} = \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta} = 0$ $\frac{\partial \theta}{\partial \zeta} = 0$ (4.31)

$$\tau = 0$$
 $\overline{U}_r = 0$ $\overline{U}_z = 0$ $\overline{\varepsilon} = 0$ $\overline{\kappa} = 0$ $\theta = 1$ (4.32)

CAPÍTULO 5: RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presenta la solución numérica del modelo que se presenta en el capítulo anterior (ver ecuaciones 4.22-4.32). Se optó por emplear el método de colocación ortogonal como la alternativa más factible debido a su alta precisión (Jiménez Islas, 1999), esto se pudo comprobar al validar el modelo presentado por Castillo Araiza et al., 2007 (ver apéndice A).

5.1 Solución numérica

Las ecuaciones gobernantes adimensionales (véanse los detalles en el apéndice A y B) para ambos modelos se resolvieron mediante discretización espacial empleando colocación ortogonal con polinomios de Legendre (Villadsen and Michelsen, 1978). A partir de un análisis de independencia de malla (**ver Figura 5.1**), se decidió utilizar una malla uniforme de 31 x 31 puntos internos. Mientras que la discretización del tiempo se hizo con diferencias finitas para formar un esquema de Euler implícito de integración hacia adelante. El sistema de ecuaciones algebraicas no lineales obtenido en cada etapa de integración, se resolvió usando el método de Newton-Raphson con factorización LU (Jiménez Islas et al., 2014). La solución numérica obtenida en estado estacionario proporciona los perfiles de velocidad y de temperatura en el lecho empacado que se analizan a continuación. Las simulaciones se efectuaron en una estación de trabajo dual Intel Xeon E-2625 a 2.53 GHz, 32 Gb, de memoria RAM, sistema Windows[®] 7 y compilador Intel Fortran Composer 2013[®]. Los valores empleados para las simulaciones se muestran en la tabla 5.1.

Table 5.1. Valores adimensionales usados en las simulaciones numéricas.			
Número de Reynolds, Rep	630		
Número de Peclet, Pe	14.15		
Número de Prandtl., $\mathbf{Pr}^{(t)}$	0.85		
Número de Darcy, Da	$f(r, \phi)$		
Número de Forchheimer, F	$f(r, \phi)$		
Presión adimensional. \overline{P}	$f(z, \phi)$		
Número adimensional de la gravedad. Gn	0.46		
	208		
A	3.2		
В			



temperatura.

5.1 Hidrodinámica en el lecho empacado

Una estrategia para modelar reactores catalíticos de lecho empacado con baja relación de d_{i}/d_{p} , donde ocurren reacciones altamente exotérmicas, es emplear las mediciones experimentales de la fracción vacía y de temperatura radial y axial en ausencia de reacciones químicas, para diferentes condiciones de operacion. En este trabajo se pretende investigar el papel de la turbulencia en la transferencia de momentum y calor en ausencia de reacciones químicas.

A continuación se comparan las simulaciones de modelos en las que se consideran los efectos de la turbulencia en las ecuaciones de transporte de momentum y calor, con las que asumen flujo laminar y con aquellas no toman en cuenta estos efectos (flujo pistón).

Un lecho empacado con baja relación de d_t/d_p , presenta dos regiones con altas fracciones vacías, como se muestra en la **Figura 4.1** y en estas regiones es de esperarse que la velocidad intersticial del fluido sea más grande así como el transporte convectivo de calor (Castillo-Araiza et al., 2007). Típicamente la magnitud de los perfiles de velocidad y temperatura dependen del número de Reynolds de partícula promedio (Rep), por lo cual en la siguiente sección, se presentan los perfiles radiales para la componente de velocidad axial, calculados con la aproximación de flujo laminar y turbulento, con el objetivo de analizar las diferencias en los perfiles de velocidad calculados con ambos modelos. Dixon y Cresswell (1979) y Nijemeisland y Dixon (2004b) encontraron que en lechos empacados con baja relación de d_t/d_p están presente tres regiones de flujo que dependen del Rep promedio; la región de flujo laminar (Rep<110), la transición de flujo laminar a turbulento (110 < Rep < 300), y el flujo turbulento completamente desarrollado (Rep >300) (Dixon et al., 2006).

5.1.1 Régimen de flujo laminar

Las **Figuras 5.2 y 5.3** muestran los perfiles radiales para la componente de velocidad axial para tres diferentes valores de Rep (25, 60,160) calculados con los modelos de flujo laminar y turbulento respectivamente. Como se esperaba y debido a los perfiles de fracción vacía calculados y que se muestran en la Figura 3.2, los cuales ocasionan que los perfiles de velocidad axial muestren dos grandes picos en las regiones donde la fracción vacías son mayores. La comparación entre las Figuras 5.2 y 5.3 muestran que los perfiles de velocidad calculados con la aproximación de flujo laminar en una posición axial de 10 cm, (donde los gradientes radiales de temperatura son mayores) son más de tres veces la magnitud de los calculados con el enfoque turbulento. En la Figura 5.3 se puede observar que para los números de Rep de 25 y 60, los valores máximos de la velocidad axial se encuentran en la región cercana a la pared, semejante a los calculados con el modelo de flujo laminar. Mientras que para el caso del número de Rep=160, el máximo valor de la componente de velocidad axial se encuentra en el centro del lecho contrariamente a la calculada con el modelo de flujo laminar. Estos resultados concuerdan con los reportados por Stevenson (2003) que observó valores altos en los perfiles de velocidad en el centro del lecho que en regiones más cercanas a la pared y afirma que este patrón está presente cuando hay una transición de flujo laminar a flujo turbulento. En cualquier caso, se espera que los modelos que incluyen la turbulencia no se desempeñen bien dentro de la región laminar. También podría argumentarse que se debe esperar una diferencia en la magnitud de las velocidades axiales calculadas a bajos Rep, como se muestran en las **Figuras 5.2** y **5.3**, debido a una sobreestimación de las pérdidas de energía calculadas con el modelo de flujo turbulento.



Figura 5.2 Perfiles axiales de velocidad calculados para diferentes Rep, utilizando la aproximación de flujo laminar.



Figura 5.3 Perfiles axiales de velocidad calculados para diferentes Rep, utilizando la aproximación de flujo turbulento.

5.1.2 Régimen de flujo turbulento

Latifi et al., (1989) basado en mediciones experimentales en un lecho empacado de forma rectangular con esferas de 5 mm, concluye que la transición a flujo turbulento ocurre a un Rep~400. En el trabajo de Seguin et al., (1998a, 1998b) mostraron la existencia de velocidades locales no homogéneas, y encontraron que el flujo turbulento en un lecho empacado con esferas se alcanzó para un Rep~600, mientras que la transición de flujo laminar a flujo turbulento ocurre en el rango de 110<Rep<600.

En las **Figuras 5.4** y **5.5** se muestran los perfiles axiales de velocidad calculados bajo las aproximaciones de flujo laminar y turbulento, respectivamente para diferentes Rep (630, 767,1000), y esta comparación muestra la misma tendencia que se encontró anteriormente para los diferentes Rep en el régimen de flujo laminar. En este caso, el modelo de flujo laminar predice de nuevo velocidades locales más altas donde se localizan grandes fracciones vacías, con un máximo en la velocidad del fluido localizada en la zona cercana a la pared, lo que produce un aumento en la transferencia de calor en esta región.

Para el caso del modelo de flujo turbulento las velocidades calculadas son más pequeñas, con máximos situados junto al centro del lecho empacado en lugar de la región cercana a la pared. Esto a su vez indica que en la zona cercana a la a pared existe una menor transferencia de calor en comparación con la predichas por el modelo de flujo laminar. Yang *et al.*, (2016) encontraron un comportamiento similar en un estudio de CFD para lechos empacados con esferas uniformes con baja relación de d_t/d_p .

Las grandes diferencias en la magnitud de las velocidades axiales calculadas con ambos modelos pueden resolverse calculando el flujo masico promedio en diferentes posiciones axiales y comparándolo con los datos experimentales del flujo másico experimental, como se muestra en la **Tabla 5.2.** El modelo de flujo turbulento muestra valores cercanos al flujo másico experimental, lo cual valida que los perfiles de velocidad calculados con esta aproximación son adecuados, lo que hace que el cálculo con el modelo de flujo laminar sea altamente incierto.



Figura 5.4 Perfiles axiales de velocidades calculadas para diferentes Rep, utilizando la aproximación de flujo laminar.



Figura 5.5 Perfiles axiales de velocidades calculadas para diferentes Rep, utilizando la aproximación de flujo turbulento.

a la entrada del tubo.			
	Flujo másico promedio	Flujo másico promedio	Flujo másico promedio
Rep	$G (kg/m^2 s)$	$G (kg/m^2 s)$	$G (kg/m^2 s)$
	(Experimental)	(Flujo Laminar)	(Flujo turbulento)
630	2.197	4.48	2.18
767	2.930	5.46	2.72
1000	3.662	7.13	3.67

Tabla 5. 2. Flujo masico experimental *vs* los calculados con las aproximaciones de flujo laminar y turbulento a la entrada del tubo.

5.1.3 Transporte de calor en el lecho empacado

Es de esperarse que al incorporar la hidrodinámica al modelo de transporte de calor en el modelado del lecho empacado, podría producir una mejor descripción de las observaciones experimentales de temperatura en ausencia de reacciones químicas (Lerou y Froment, 1977; Papageorgiou y Froment, 1995; Castillo-Araiza y López-Isunza, 2008). Por lo cual con el objetivo de evaluar el papel de la turbulencia en el transporte de calor en el lecho empacado, a continuación, se compararon los perfiles de temperatura (radiales y axiales), predichos con las aproximaciones de flujo laminar (Castillo-Araiza et al., 2007) y turbulento con los perfiles experimentales de temperatura, obtenidos en un lecho empacado a escala industrial para un Rep=630 (Lopez-Isunza, 1983).

Las predicciones con ambas aproximaciones se ajustan adecuadamente a los datos experimentales de temperatura, los resultados muestran un ajuste ligeramente mejor, de los perfiles de temperatura (en las direcciones axial y radial), cuando se utiliza la conductividad térmica turbulenta k_t , que está relacionada directamente con la hidrodinámica del fluido mediante la μ_t , lo cual produce una disminución de los perfiles de temperatura debido a un aumento en los términos difusivos de la ecuación de transferencia de calor (Wilcox, 2006). Mientras que las predicciones con la aproximación de flujo laminar que considera la transferencia de calor en términos de los parámetro efectivos h_w y k_{eff} , muestra una ligera sobreestimación en los perfiles radiales y axiales de temperatura, lo cual era de esperarse de acuerdo con los perfiles de velocidad calculados con esta aproximación (**Ver Figura 5.6**).

En la **Figura 5.6** se puede observar que la diferencia en la predicción de los perfiles de temperatura producida por los modelos de flujo laminar y turbulento es bastante pequeña. Por lo tanto resulta muy difícil, basándose en estos resultados, evaluar cualquier papel de la turbulencia en la hidrodinámica dada por las ecuaciones RANS y acopladas al modelo κ - ϵ , en comparación con las predichas con el modelo de flujo laminar. Esta falta de sensibilidad de los perfiles de temperatura a la hidrodinámica calculada con ambos modelos, sugiere que es necesaria una conductividad térmica efectiva que explique apropiadamente la dispersión radial de calor, tal vez debería estar en función de las variaciones radiales de la fracción vacía y de los componentes de velocidad radial y axial. Por otra parte es importante mencionar que la conductividad térmica efectiva h_w y k_{eff} , el coeficiente de transferencia de

calor en la pared utilizados en este trabajo se estimó a partir de mediciones experimentales de temperatura en el radio interno del tubo a diferentes posiciones axiales presentadas en la **Figura 5.6 b**, utilizando el algoritmo de Levenberg-Marquardt (Martínez *et al.*, 2018), obteniendo un número de Biot de pared de 0.86 y un numero de Peclet de 14.15, que está en concordancia con los valores reportados previamente por (López-Isunza, 1983; Castillo-Araiza *et al.*, 2007).

En la **Figura 5.7**, se observa que existe una asimetría en los datos de temperatura experimentales en z=10, que disminuye cuando aumenta z. Esto se debe al bien conocido efecto de entrada conocido en el flujo de fluidos a través de tubos circulares, que origina distribuciones de temperatura en 3D. Este efecto disminuye a medida que z aumenta y los perfiles de temperatura prácticamente exhiben simetría desde z=20 cm cuando se alcanza el flujo completamente desarrollado, y las predicciones del modelo están en concordancia con los datos experimentales.





Figura 5.6 Comparación de los perfiles experimentales de temperatura con los predichos utilizando la aproximación de flujo laminar y turbulento (a) perfiles radiales, (b) perfiles axiales, para las condiciones de operación: Rep=630; $T_o=192^{\circ}$ C; $T_b=394^{\circ}$ C.

En la **Figura 5.8** se comparan los perfiles radiales de temperatura con los predichos utilizando diferentes valores de conductividad térmica, utilizando la aproximación de flujo turbulento, que se obtiene en el lecho a escala industrial para un Rep=630, como se puede observar el uso de k_t produce resultados comparativamente similares en comparación con aquellos que solo usan el parámetro de la k_{eff} , y con los que agregan el valor de k_{eff} al de k_t . Estos resultados se han reportado en otros trabajos donde definen la conductividad termica efectiva en términos del promedio geométrico de las conductividades térmicas de la fase sólida (k_s) y de la fluida (k_{fluid}) y se incluyen en la conductividad térmica turbulenta k_t (Liu *et al.*, 2008; Tsotsas y Schlunder 1990).

Con base en lo anterior en la **Tabla 5.3** se compararon los valores calculados de \tilde{k}_t y k_{eff} para diferentes valores de Rep, donde se puede observar que solo para Rep =630, dentro del régimen de flujo turbulento, los valores de los parámetros anteriores son similares.



Figura 5.7 Comparación de los perfiles experimentales de temperatura con los predichos utilizando la aproximación de lujo laminar y turbulento para diferentes profundidades del lecho empacado, para las condiciones de operación: Rep=630; $T_o=192^{\circ}$ C; $T_b=394^{\circ}$ C.



Figura 5.8 Comparación de los perfiles radiales de temperatura con los predichos utilizando diferentes valores de conductividad térmica, utilizando la aproximación de flujo turbulento, para las siguientes condiciones de operación: $T_o=192^{\circ}$ C; $T_b=394^{\circ}$ C.

Tabla 5.3 Valores calculados de las conductividades térmicas efectivas y turbulentas.		
Rep	$k_{e\!f\!f}$ (W/m K)	${oldsymbol{\widetilde{k}}}_t \left({ m W/m} \; { m K} ight)$
25	0.36*	0.93
60	0.62*	1.35
160	1.31*	1.95
630	2.63#, 2.47*	2.92

[#]López-Isunza, (1983); * Castillo-Araiza et al. (2007).

De acuerdo con los resultados anteriores el uso de modelos pseudo-homogéneos, pueden considerarse como métodos simplificados para el cálculo de los perfiles de velocidad y de temperatura para lechos empacados con baja relación de d_t/d_p , debido a que reduce considerablemente los tiempos de computo, sin embargo también es importante mencionar la dependencia de la conductividad térmica efectiva con las variaciones radiales de la fracción vacía y las componentes de las velocidades las cuales deberían ser incorporadas al modelo de este tipo de lecho empacados (Aparicio-Mauricio et al., 2017).

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

En este trabajo se propuso un modelo matematico basado en las ecuaciones de Navier-Stokes temporalmente promediadas para flujo turbulento RANS que contienen los términos de Darcy y de Forchheimer junto con el modelo de turbulencia κ - ϵ , para calcular los perfiles de velocidad y de temperatura de un lecho empacado a escala industrial con una relación de $d_t/d_p \approx 3.05$. Estos resultados se compararon con los calculados usando las ecuaciones de Navier-Stokes con los términos de Darcy y Forchheimer considerando flujo laminar. Los cálculos mostraron que se tienen predicciones similares para los perfiles de temperatura radial y axial con ambos modelos cuando se comparan con los datos experimentales de temperatura del lecho empacado a escala industrial a pesar de las grandes diferencias en los perfiles radiales de velocidad de la componente de velocidad axial, cuando se emplean ambos enfoques lo que sugiere la importancia de la dispersión radial de calor determinada por la magnitud de la conductividad térmica efectiva. El modelo de turbulencia al utilizar una conductividad térmica turbulenta calculada en términos del número de Prandtl, muestra una mejor concordancia con los datos experimentales (error del 0.77% en el balance de flujo masico para un Rep=630). Por lo cual se concluye que este enfoque podría usarse de una manera sencilla para la predicción de la hidrodinámica en el diseño y escala de equipos de lechos empacados para diversas aplicaciones industriales como reactores catalíticos, intercambiadores de calor, filtros, torres de absorción de gas, etc.

Recomendaciones para trabajos futuros

El modelo es susceptible a incrementar el grado de sofisticación, incorporando la cinética de reacción, acoplando las ecuaciones de transporte de masa y añadiendo el efecto de la coordenada angular para mejorar la descripción de los perfiles de velocidad, temperatura y de concentración que ocurren en el reactor catalítico de forma acoplada. Así como comparar las predicciones del modelo de turbulencia con otros modelos similares por ejemplo el modelo κ - ω .

REFERENCIAS

Abbot, M B., Basco, D.R., 1992.Computational Fluid Dynamics, Ed. Longman.

- Aparicio-Mauricio, G., Ruíz-Martínez, R., 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 a MoVNbTeO formulation. Chem. Eng. J. 321, 584-599.
- Argo, W. B., Smith, J. M., 1953. Heat Transfer in Packed Beds. Chem. Eng. Progress 49,443-451.
- Balakrishnan, A. R., Pei, D.C.T., 1979. Heat transfer in Gas-Solid Packed-Bed Systems 1. A Critical Review, Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev., 18, 30-410.
- Baoyu, GUO., Aibing, Yu., Bryan W., Paul Z., 2003. Comparison of several turbulence models applied to the simulation of gas flow in a packed bed. Third International conference on CFD in the Minerals and Process Industries.
- Beavers, G., S, Joseph, D., D. 1967. Boundary Conditions at a Naturally Permeable Wall. J. Fluid Mech., 30, 197. Third International conference on CFD in the Minerals and Process Industries.
- Beek, J., 1962. Design of packed catalytic reactors. Advances in chemical engineering. Vol 3, Eds., Academic Press, New York.
- Benenati, R.F., Brosilow, C.B., 1962. Void fraction distribution in beds of spheres. AIChE Journal. 8, 359-361.
- Bey, O., Eigenberger, G., 1997. Fluid Flow and through catalyst filled tubes. Chem. Eng. Sci. 52, 1365-1376.
- Bird, R. B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., 1960. Transport Phenomena. J. Wiley Int. Ed. Tokyo, Japan.
- Brinkman, H. C., 1947a. On the permeability of Media Consisting of Closely Packed Porous Particles. Appl. Sci. Res. AI. 81-86.
- Brinkman, H. C., 1974b. A calculation of the Viscous Force Exerted by a Flowing Fluid on a Dense Swarm of Particles. Appl. Sci. Res. AI. Vol. Al., 27-34.

- Brunnell, D. G., Irvin, H. B., Olson, R. W., Smith. J. M., 1949. Effective thermal conductivities in gas-solid systems. Ind. Eng. Chem. 41, 1977-1981.
- Calderbank, P.H., Chandrasekharan, K., Fumagalli, C., 1977. The prediction of the performance of packed-bed catalytic reactors in the air-oxidation of o-xylene. Chem. Eng. Sci. 32, 1435-1443.
- Castillo-Araiza, O., Jiménez-Islas H., López-Isunza F., 2007. Heat transfer studies in packed bed catalytic reactors of low tube/particle diameter radio. Ind. Eng. Chem. Res. 46, 7426-7435.
- Castillo-Araiza, C., 2007. Estudio del comportamiento del reactor de Oxidación de o-xileno a anhídrido ftálico. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, Tesis Doctoral México.
- Castillo-Araiza, C.O., López-Isunza, F., 2008. Hydrodynamic Models for Packed Beds with Low Tube-to-Particle Diameter Ratio. International Journal of Chemical Reactor Engineering Vol.6, Article 1.
- Castillo-Araiza, C.O.; López-Isunza, F., 2010. Modeling the Partial oxidation of Oxylene in an Industrial Packed-Bed Catalytic Reactor: The Role of Hydrodynamics and Catalyst Activity in the Heat Transport, Ind. Eng. Chem. Res. 49, 6845-6853.
- Celić, A., 2004. Performance of Modern Eddy-Viscosity Turbulent Models. Institut fűr Aerodynamik und Gasdynamik Universität Stuttgart Aachen.
- Chou, P. Y., 1945. On the velocity Correlations and the Solutions of the Equations of Turbulent Fluctuation. Quart. Appl. Math. Vol. 3, 38-46.
- Chu, Y.C., Storrow, J.A., 1952. Heat transfer to air flowing through packed tubes. Chem. Eng. Sci. 1, 230-237.
- Coberly, C.A., Marshall, W.R., Jr., 1951. Temperature gradients in gas streams flowing through fixed granular beds. Chem. Eng. Progress 47, 141-150.
- Colburn, A. P. Transfer and pressure drop in empty baffled and packed tubes. Industrial and Engineering Chemistry 23 (8) 910.
- Cresswell, D. L., 1986. Heat Transfer in Packed Bed Reactors. In Chemical Reactor Design and Technology. Nato Series E No. 110, 110 H. I. de Lasa, Ed., Martinus Nijhoff Dordrecht 687-728.

- Crider, J.E., Foss, A.S., 1965. Effective Wall Heat Transfer Coefficients and Thermal Resistances in Mathematical models of Packed Beds. AIChE 11, 1012-1019.
- Cybulski, A., G., Eigenberger, G., Stankiewicz, A., 1997. Operational and Structural Noidealities in Modelling and Design. *AIChE J.* 44, 484-490.
- Daszkowski, T., Eigenberger, G., 1992. A re-evaluation of fluid flow, heat transfer and chemical reaction in catalyst filled tubes. Chem. Eng. Sci. 60, 4105-4117.
- Davidod, B., I. 1961. Second-Order Corrections of the κ-ε Models to Account for Non Isotropic Effects due to Buoyancy. Int. J. Heat Mass Transfer. Vol. 33, 2566-2608.
- Darcy, H., 1856. Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon. Delmon Paris.
- De Klerk, A., 2003. Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratios. AIChE J. 49, 2022-2029.
- De Wash, A.P., Froment, G.F., 1972. Heat Transfer in Packed Beds. Chem. Eng. Sci. 27, 567-576.
- Dixon, A.G., Paterson, W. R., Cresswell, D.L., 1978. Heat transfer in packed beds of low tube/particle diameter ratio. Chemical Reactor Engineering Houston. ACS Symposium Series 65, 238-253.
- Delmas, H., Froment, G.F., 1988. A simulation model accounting for structural radial no uniformities in fixed bed reactors. Chem. Eng. Sci. 43(8), 2281-2287.
- Dixon, A. G., Cresswell, D., L., 1978. Heat transfer in packed beds of low tube/particle diameter ratio. Chemical Engineering-Houston. ACS Symposium Series 65, 238-253.
- Dixon, A. G., Cresswell, D. L., 1979. Theoretical prediction of effective heat transfer parameter in packed beds. AIChE J. 25 (4), 663.
- Dixon, A.G., 2001. Local transport and reaction rates in a fixed bed reactor tube: Endothermic steam methane reforming. Chem. Eng. Sci. 168, 156-177.

- Dixon, A., Nijemeisland, E.H., Stitt, E.H., 2006. Packed tubular reactor modelling and catalyst Design using computational fluid dynamics. Advances in Chemical Engineering 31, 307-389.
- Dixon, A. G., 2012. Fixed Bed Catalytic Reactor Modelling –The Radial Heat Transfer Problem. The Canadian Journal of Chemical Engineering 90.
- Eigenberger, G., 1972. On the dynamic behavior of the catalytic fixed-bed reactor in the region of multiple steady states-I The influence of heat conduction in two phase model. Chem. Eng. Sci. 27, 1897.
- Eisfeld, B., Schnitzlein, K., 2001. The influence of confining walls on the pressure drop in packed beds. Chem. Eng. Sci. Vol.56, 4321-4329.
- Ergun, S. 1952. Fluid flow through packed columns. Chem. Eng. Progress 48, 89-94.
- Flores-Martínez, N.L., Perez-Perez, M.C.I., Oliveros-Muñoz, J.M., López-González, M.L., Jiménez-Islas, H., 2018. Estimation of diffusion coefficients of essential oil of *Pimenta dioica* in edible films formulated with aloe vera and gelatin, using Levenberg Marquardt method. *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, 17(2), 463-484.
- Ferziger, J.H., 1983. Higher-level simulations of turbulent flows. In Esser J.A. (eds) Computational methods for turbulent, transonic and viscous flow. Hemisphere. New York, 93-182.
- Ferziger, J.H., Milovac, 1996. Computattional Methods for Fluid Dynamics. Springer Germany.
- Finlayson, B. A., 1980. Nonlinear Analysis in Chemical Engineering. McGraw-Hill book Co. USA.
- Forchheimer, 1935. Tratado de Hidráulica. Ed Labor Barcelona Spain.
- Froment, G.F., 1962. Design of Fixed-Bed Catalytic Reactors Based on Effective Transport Model. Chem. Eng. Sci. 17, 849-859.
- Froment y Bischoff, 1990. Chemical Reactor Analysis and Design. Wiley New York.

- Foumeny, E., Ma, J., 1994. Non-Darcian non-isothermal compressible flow and heat transfer in cylindrical packed beds. Chemical Engineering Technology 17, 50-60.
- Gatski, T., Speziale, C., 1993. On Explicit Algebraic Stress Models for Complex Turbulent Flows. J. Fluid Mech. Vol., 254, 59-78.
- Ghia, U., Ghia, K., Shin, S., 1982. High-Re Solution for Compressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method. J. Computational Physics. Vol. 48, 387-411.
- Gebhart, B., Jaluria, Y., Mahajan, R., L., Sammakia, B., 1998. Buoyancy-Induced Flows and Transport. Hemisphere Publishing Co. New York, N.Y.
- Giese, M, Rottshafer, K., Vortmeyer, D., 1998. Measured and modeled superficial flow profiles in packed beds with liquid flow. AIChE J. 44, 484-490.
- Govindrao, V.M., Froment, G.F., 1986. Voidage profiles in packed beds of spheres. Chem. Eng. Sci. 41 533-539.
- Govindrao, V.M., Ramrao, K.V., Rao, A.V., 1992.Structural characteristics of packed bed of law aspect ratio. Chem. Eng. Sci., 47, 2544-4545.
- Gunn, D.J., Khalid, M., 1975. Thermal Dispersion and Wall Heat Transfer in Packed Beds, Chem. Eng. Sci. 30, 261-267.
- Greenkorn, R. A., 1983. Flow Phenomena in Porous Media. Marcel Dekker Inc. N.Y.
- Hinze, J.O., 1975. Turbulence Model. Mc Graw Hill, New York.
- Harlow, F., Nakayama, P., 1968. Transport of Turbulence Energy Decay Rate. Los Alamos Sci. Lab., University of California Report LA-3854.
- Hoffmann, K. 1975. Improved Form of thee Low-Reynolds-Number $\kappa \epsilon$ Turbulence Model. Physics of Fluids, Vol. 18, 309-312.
- Hoffmann, K. 1996. Fundamental Equations of Fluid Mechanics. Engineering Education System, USA.
- Hsu, C.T., Cheng, P., 1990. Thermal dispersion in a porous medium. Int. J. Heat Mass Transfer. 33, 1587-1597.

- Hlavacek, V., 1970. Aspects in design of packed bed reactors. Industrial and Engineering Chemistry 62, 8-26.
- Jiménez-Islas, H., 1999. Modelamiento matematico de los procesos de transferencia de momento, calor y masa en medios porosos. UAM-Iztapalapa. Tesis Doctoral México.
- Jiménez-Islas, H., Calderón Ramírez, M., Molina Herrera, F. I., Martínez González, G. M., Navarrete Bolaños, J. L., Castrejón González, E.O., 2014. Low -Ram Algorithm for solving 3-D Natural Convection Problems Using Orthogonal Collocation. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* Vol. 13, No.1.
- Jones, W., P., Launder, B., E., 1972. The prediction of laminarization with a twoequation model of turbulence. *Int. J. Heat Mass Transfer* Vol.15, Pp. 301-314.
- Kershenbaum, L.S., López-Isunza, F., 1982. Dynamic behavior of an industrial fixed-bed catalytic reactor. Chapter 10. In Chemical Reaction Engineering-Boston, Wei. J, Georgakis K, Eds. ACS Symposium Series 196, 109-120.
- Kolmogorov, A.N., 1941. The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds Numbers. Proc. Math. Phys. Sci. 434, 9–13.
- Kolmogorov, A.V., 1945. Precisions sur la structure locale de la turbulence dans un fluide visqueux aux nombres Reynolds élevés. In Mecanique de la Turbulence; Colloques internationaux du Centre National de la Recherche scientifique. CNRS. 447-448.
- Koning, G.W., Kronberg, A.E., Van Swaaij, W.P.M., 2006. Improved One-Dimensional Model of a Tubular Packed Bed Reactor. *Chem.Eng.Sci.* 61, 3167-3175.
- Kufner, R., Hofmann, H., 1990. Implementation of radial porosity and velocity distribution in a reactor model for heterogeneous catalytic gas phase reactions. Chem. Eng. Sci. 8, 2141-2147.
- Kulkarni, B. D., Doraiswamy L. K., 1980. Estimation of effective Transport Properties in Packed Bed Reactors. Cat. Rev. Sci. Eng. 22,431-483.

- Kunii, D., Smith, J. M., 1961. Heat transfer characteristics of porous rocks. AIChE J. 29.
- Latifi. A.A., Midoux, A., Stork, K., Gence, J.N., 1989. The use of micro-electrodes in the study of the flow regimes in packed bed reactor with single phase liquid flow. Chem. Eng. Sci. Vol. 44, 2501-2508.
- Launder, B., Sharma, B., 1973. Application of the energy Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow Near a Spinning Disc. Letters in Heat and Mass Transfer, Vol. 1, 131-138.
- Launder, B., Spalding, D., 1974. "The Numerical Computation of Turbulent Flows" Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol. 3, 269-289.
- Lerou, J.J., Froment, G.F., 1977. Velocity temperature and conversion profiles in fixed bed catalytic reactors. Chem. Eng. Sci. 32, 853-861.
- Lerou, J.J., Froment, G.F., 1978. Estimation of heat transfer parameters in packed beds from radial temperature profiles. Chem. Eng. J. 15(2), 233-237.
- Leva, M. Wen, C.Y., 1959. Fluidized-bed heat transfer correlation. AIChE J. 5, 7-9.
- Li, C. H., Finlayson, B.A., 1997. Heat Transfer in Packed-beds. A reevaluation. Chem. Eng. Sci. 32, 1055-1066.
- Logtenberg, S. A., Dixon A. G., 1998. Computational fluid dynamics studies of fixed bed heat transfer. Chemical Engineering and Processing Vol. 37, 7-21.
- Logtenberg, S. A., Nijemeisland, M., Dixon, A. G., 1999. Computational fluid dynamics simulation of fluid flow and heat transfer at the wall-particle contact points in fixed-bed reactor. Chem. Eng. Sci. 54, (13), 2433-2439.
- López-Isunza, F., 1983. Steady State and Dynamic Behavior of an Industrial Fixed Bed Catalytic Reactor. Ph.D. Thesis, University of London. Available on request to felipe@xanum.uam.mx.
- Magnico, P., 2003. Hydrodynamic and transport properties of packed beds in small tube-to-sphere diameter ratio: Pore scale simulation using an Eulerian and a Lagrangian approach, Chem. Eng. Sci. 58, 5005-5024.

- Mascazzini, N.O., Barreto, G.F., 1989. Development of Overall Heat Transfer Coefficients From the Heterogeneous Two Dimensional (2D) Model for Catalytic Fixed Bed Reactors. A Comparison Between 1-D and 2-D Models. Chem. Eng. Commun 80, 11-32.
- Michelsen, M. L., 1979. Estimation of heat transfer parameters in packed beds from radial temperature measurements Chem. Eng. J. 18, 67-72.
- Mongkhonsi, T., Lopez Isunza H. F., 1992. Kershenbaum L.S. The distortion of measured temperature profiles in fixed-bed reactors. Trans. Inst. Chem. Eng. 70, 255.
- Morales, M., Spinn, C. W., Smith, J. M., 1951. Velocities and effective thermal conductivities in packed beds, Ind. Eng. Chem.43, 225-232.
- Neale, G., Nader, W., 1974. Practical Significance Extension of Darcy's Law: Coupled Parallel Flows within a Channel and a Bounding Porous medium. The Canadian J. of Chemical Engineering, Vol. 52, 475-478.
- Nield, D. A., Bejan, A., 1992. Convection In Porous Media. Springer-Verlag, USA.
- Mueller, G.E., 1991. Prediction of radial porosity distribution in randomly packed fixed of uniformly sized spheres in cylindrical containers. Chem. Eng. Sci. Vol. 8, 706-712.
- Nielsen, P. V., 1974. Prediction of temperature and velocity distribution in an air conditioned room. Proceeding of the second symposium the use of computers for environmental engineering related to building, Paris.
- Nijemeisland, M., Dixon, A.G., 2001. Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed. Chem. Eng. Sci. 82-23.
- Nijemeisland, M.; Dixon, A.G., 2004a. CFD study of fluid flow and wall heat transfer in a fixed bed of spheres. AIChE J. 50, 906-921.
- Nijemeisland, M., Dixon, A.G., Stitt, E. H., 2004b. Catalyst design by CFD for heat transfer and reaction in steam reforming. Chem. Eng. Sci. 59, 5185-5191.

- Nijemeisland, M., Stitt, E. H., 2008. CFD Study of the Influence of Catalyst Particle Design on Steam Reforming Reaction Heat in Narrow Packed Tubes. Ind. Eng. Chem. Res. 47, 5966-5975.
- Papageorgiou, J. N., Froment, G, F., 1995. Simulation models accounting for radial voidage profiles in fixed-bed reactors. Chem. Eng. Sci. 50 (19).
- Paterson, W.R. Carberry, J.J., 1983. Fixed bed catalytic reactor modelling- The heat transfer problem. Chem. Eng. Sci. 38(1), 175-180.
- Pereira Duarte, S.I., Martínez, O.M., Ferretti, O. A., Lemcoff, N.O., 1985. Theorical Prediction of Heterogeneous One-Dimensional Heat Transfer Coefficients for Fixed-Bed Reactors. AIChE J. 31, 868-870.
- Pope, S.B., 2002. Turbulent Flows. University Press, Cambridge.
- Prandtl, L., 1945. Ube rein neues formelsystem fur die augebidete turbulenz, Nach. Akad Wiss Gottingen Mth-Phys Klasse.
- Taylor, G., I., 1915. I. Eddy Motion in the Atmosphere. Philosophical Transactions of the Royal Society A.
- Takeda, K., 1994. Mathematical Modelling of Pulverised coal combustion in a blast Furnace, PhD THESIS, Imperial College, London.
- Tennekes, H.; Lumley. J. L., 1972. A first course in turbulence, MIT Press Cambridge.
- Teruel, F.E., 2016. Entrance effect on the interfacial heat transfer and the thermal dispersion in laminar flows through porous media. International Journal of Thermal Sciences, 104, 172-185.
- Tobis, J., Ziolkowski. 1998. Modelling of Heat Transfer at the Wall of a packed Bed Apparatus. Chem. Eng. Sci. 3031-3036
- Tsang, T.H., Edgar, T.F., Hougen, J.O., 1976. Estimation of heat transfer parameters in a packed bed. The Chemical Engineering Journal 11, 57.
- Tsotsas, E., Schlunder, E., 1990. Heat transfer in packed beds with fluid flow: remarks on the meaning and the calculation of a heat transfer coefficient at the wall. Chem. Eng. Sci. 45 (4), 819-837.

- Reynolds, O., 1895. On the Dynamics theory of incompressible viscous fluid and the determination of the criterion. Philosophical transaction of the Royal Society of London, Series A. 186-123.
- Rodi, W., 1985. Turbulence Dynamics theory of incompressible viscous fluid and the determinations of the criterion. Philosophical transaction of the Royal Society of London.
- Van Driest, E.R., 1956. On Turbulent Flow Near a Wall. J. Aeronaut. Sci. 23, 1007–1011.
- Vortmeyer, D., Schuster, J., 1983. Evaluation of steady flow profiles in rectangular and circular packed by variational method. Chem. Eng. Sci. Vol. 38 No. 10, 1691-1699.
- Schlunder, E.U., 1978. Transport phenomena in packed bed reactors. In Chemical Reaction Engineering-Reviews-Houston, Chapter 4. Symposium Series 72, 110-161.
- Schmitt, G. F., 2007. About Boussinesq's turbulent viscosity hypothesis: historical remarks and direct evaluation of its validity. Comptes Rendus Mécanique, Elsevier Masson 335 (9-10), 617-627).
- Seguin, D., Montillet, A., Comiti, J., 1998a. Experimental characterization of flow regimes in various porous media- I Limit of Laminar flow regime. Chem. Eng. Sci. 53, 3751.
- Seguin, D., Montillet, A., Comiti, J., Huet, F., 1998b. Experimental characterization of flow regimes in various porous media- II Transition to turbulent regime. Chem. Eng. Sci. 53, 3751.
- Smith, J.M., 1973. Heat transfer in fixed-bed reactors. Chem. Eng. J. 5, 109-116.
- Stevenson, P., 2003. Physical insight into the Ergun and Wen & Yu equations for fluid flow in packed and fluidized beds. Chem. Eng. Sci. 58, 5379.
- Surfarazhussain, S.H., Arunkumar, S., Prabhu, S.V., 2017. Measurement of local wall heat transfer coefficient in randomly packed beds of uniform sized spheres using infrared thermography (IR) and water as working medium. Applied Thermal Engineering 126, 358-378.

- Wen D.; Ding Y., 2006. Heat transfer of gas flow through a packed bed. Chem. Eng. 61, 3532.
- Wilcox, D., Rubesin, M., 1980. Progress in Turbulence Modeling for Complex Flow Fields Including Effects of Compressibility. NasTp-1517.
- Wilcox, D., C. 1993. Turbulence modeling for CFD. Second Edition. DWC, Industries, Inc.
- Wilcox, D., C. 2006.Turbulence Modeling for CFD. Third Edition. DWC, Industries, Inc.
- Winterberg, M., Tsotsas, E., Krischke, A., Vortmeyer, D., 2000. A simple and coherent set of coefficients for modeling of heat and mass transport with and without chemical reaction in tubes filled with spheres. Chem. Eng. Sci. 55, 967-979.
- Yang, J., Wu, J., Zhou, L., Wang, Q. 2016.Computational study of fluid flow and heat transfer in composite packed beds of spheres with low tube to particle diameter ratio. Nuclear Engineering and Design, 300, 85-96.
APENDICE A: DEDUCCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO DE MOMENTUM Y CALOR EN RÉGIMEN LAMINAR PARA EL LECHO EMPACADO

Factores para la Adimensionalización de las ecuaciones de transporte.

Relaciones adimensionales de los componentes de la velocidad.

$$U_{r} = \frac{u_{r}}{u_{0}}$$

$$u_{r} = u_{0} \cdot U_{r}$$

$$\partial u_{r} = u_{0} \cdot \partial U_{r}$$

$$u_{z} = u_{0} \cdot U_{z}$$

$$\partial u_{z} = u_{0} \cdot \partial U_{z}$$

Relaciones adimensionales de las coordenadas espaciales.

$$\xi = \frac{r}{R} \qquad r = \xi \cdot R \qquad \partial r = R \cdot \partial \xi$$
$$\zeta = \frac{z}{L} \qquad r = \xi \cdot R \qquad \partial r = R \cdot \partial \xi$$

Relaciones adimensionales para la temperatura.

$$\theta = \frac{T}{T_0} \qquad T = T_0 \cdot \theta \qquad \partial T = T_0 \cdot \partial \theta$$

$$\tau = \frac{u_0 t}{L} \qquad t = \frac{L \cdot \tau}{u_0} \qquad \partial t = \frac{L}{u_0} \partial \tau$$

$$a = \frac{L}{R} \qquad t = \frac{L \cdot \tau}{u_0} \qquad \operatorname{Rep} = \frac{u_0 \rho R}{3\mu}$$

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0$$
(A.11)

Aplicando las relaciones adimensionales a la ecuación de continuidad.

$$\frac{u_0}{R}\frac{\partial U_r}{\partial \xi} + \frac{u_0}{R\xi}U_r + \frac{u_0}{L}\frac{\partial U_z}{\partial \zeta} = 0$$

Multiplicando la ecuación anterior por R/u_0 y sustituyendo la relación geométrica.

$$\frac{\partial U_r}{\partial \xi} + \frac{1}{\xi} U_r + \frac{1}{a} \frac{\partial U_z}{\partial \zeta} = 0$$
(A.12)

Ecuaciones de momentum

Coordenada radial

$$\rho\phi\left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r\frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}\right) = -\phi\frac{\partial p}{\partial r} + \phi\mu\left[\frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}\right] - \phi\frac{\mu}{K}u_r - \phi^2\frac{\rho}{K_z}u_r^2 \quad (A.13)$$

Aplicando las relaciones adimensionales.

$$\rho \phi \left(\frac{u_0^2}{L} \frac{\partial U_r}{\partial \tau} + U_r \frac{u_0^2}{R} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} + U_z \frac{u_0^2}{L} \frac{\partial U_r}{\partial \zeta} \right) = -\frac{\phi}{R} \frac{\partial p}{\partial \xi} + \phi \mu \left[\frac{u_0}{R^2} \frac{\partial^2 U_r}{\partial \xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{U_r}{\xi^2} \right] + \frac{u_0}{L^2} \frac{\partial^2 U_z}{\partial \zeta^2} \left[-\phi \frac{\mu}{K} u_0 U_r - \phi^2 \frac{\rho}{K_z} u_0 U_r^2 \right]$$
(A.13)

Factorizando la ecuación anterior.

$$\rho \phi \left(\frac{u_0^2}{L} \frac{\partial U_r}{\partial \tau} + U_r \frac{u_0^2}{R} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} + U_z \frac{u_0^2}{L} \frac{\partial U_r}{\partial \zeta} \right) = -\frac{\phi}{R} \frac{\partial p}{\partial \xi} + \phi \mu \left[\frac{u_0}{R^2} \frac{\partial^2 U_r}{\partial \xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} + \frac{u_0}{R^2 \xi} + \frac{u_0}{R^2 \xi} + \frac{u_0}{$$

Multiplicando la ecuación anterior por $L/u_0^2 \rho \phi$.

$$\frac{\partial U_{r}}{\partial \tau} + U_{r} \frac{1}{R} \frac{\partial U_{r}}{\partial \xi} + U_{z} \frac{\partial U_{r}}{\partial \zeta} = -\frac{L}{\rho R u_{0}} \frac{\partial p}{\partial \xi} + \frac{\mu}{u_{0} \rho R} \frac{L}{R} \left[\frac{\partial^{2} U_{r}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial U_{r}}{\partial \xi} - \frac{U_{r}}{\xi^{2}} + \frac{R^{2}}{L^{2}} \frac{\partial^{2} U_{z}}{\partial \zeta^{2}} \right] -\phi \frac{\mu L}{\rho u_{0} K} U_{r} - \phi \frac{L}{K_{z}} U_{r}^{2}$$

Números adimensionales que pueden sustituir grupos de constantes.

Re p =
$$\frac{\rho u_0 R}{3\mu}$$
, $Da = \frac{L}{d_p} \alpha \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3}$, $P = \frac{p}{\rho u_0^2}$, $F = \phi \frac{L}{K_z}$, $Gn \frac{Lg_z}{u_0^2}$

Sustituyendo los números adimensionales y la relación geométrica.

$$\frac{\partial U_r}{\partial \tau} + aU_r \frac{\partial U_r}{\partial \xi} + U_r \frac{\partial U_r}{\partial \zeta} = -A \frac{\partial P}{\partial \xi} + \frac{A}{\operatorname{Rep}} \left[\frac{\partial^2 U_r}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial U_r}{\partial \xi} - \frac{U_r}{\xi^2} + \frac{1}{A^2} \frac{\partial^2 U_z}{\partial \zeta^2} \right] - \frac{U_r}{Da} - FU_r^2 \qquad (A.14)$$

Coordenada axial

$$\rho\phi\left(\frac{\partial u_{z}}{\partial t}+u_{r}\frac{\partial u_{z}}{\partial r}+u_{z}\frac{\partial u_{z}}{\partial z}\right)=-\phi\frac{\partial p}{\partial z}+\phi\mu\left[\frac{\partial^{2}u_{z}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial u_{z}}{\partial r}+\frac{\partial^{2}u_{z}}{\partial z^{2}}\right]-\phi\frac{\mu}{K}u_{z}-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}u_{z}^{2}$$

$$+\phi\rho g$$
(A.15)

Aplicando las relaciones adimensionales.

$$\rho \phi \left(\frac{u_0^2}{L} \frac{\partial U_z}{\partial \tau} + U_r \frac{u_0^2}{R} \frac{\partial U_z}{\partial \xi} + U_z \frac{u_0^2}{L} \frac{\partial U_z}{\partial \zeta} \right) = -\phi \frac{\partial p}{\partial z} + \phi \mu \left[\frac{u_0}{R^2} \frac{\partial^2 U_z}{\partial \xi^2} + \frac{u_0}{R^2 \xi} \frac{\partial U_z}{\partial \xi} + \frac{u_0}{L^2} \frac{\partial^2 U_z}{\partial \zeta^2} \right] \\
-\phi \frac{\mu}{K} u_0 U_z - \phi^2 \frac{\rho}{K_z} u_0^2 U_z^2 + \phi \rho g_z$$

Factorizando la ecuación anterior.

$$\rho\phi\frac{u_0^2}{L}\left(\frac{\partial U_z}{\partial \tau} + U_r\frac{1}{R}\frac{\partial U_z}{\partial \xi} + U_z\frac{\partial U_z}{\partial \zeta}\right) = -\frac{\phi}{L}\frac{\partial p}{\partial \zeta} + \phi\mu\frac{u_0}{R^2}\left[\frac{\partial^2 U_0}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial U_0}{\partial \xi} + \frac{R^2}{L^2}\frac{\partial^2 U_z}{\partial \zeta^2}\right] -\phi\frac{\mu}{K}u_0U_z - \phi^2\frac{\rho}{K_z}u_0^2U_z^2 + \phi\rho g_z$$

Multiplicando la ecuación anterior por $L/u_0^2 \rho \phi$.

$$\frac{\partial U_z}{\partial \tau} + U_r \frac{L}{R} \frac{\partial U_z}{\partial \xi} + U_z \frac{\partial U_z}{\partial \zeta} = -\frac{1}{\rho u_0^2} \frac{\partial p}{\partial \zeta} + \frac{\mu}{\rho u_0 R} \frac{L}{R} \left[\frac{\partial^2 U_z}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial U_z}{\partial \xi} + \frac{R^2}{L^2} \frac{\partial^2 U_z}{\partial \zeta^2} \right] -\frac{\mu L}{\rho u_0 K} U_z - \phi \frac{L}{K_z} U_z^2 + \frac{Lg_z}{u_0^2}$$

Números adimensionales que pueden sustituir grupos de constantes.

Re p =
$$\frac{\rho u_0 R}{3\mu}$$
, $Da = \frac{L}{d_p} \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3}$, $P = \frac{p}{\rho u_0^2}$, $F = \phi \frac{L}{K_z}$, $Gn \frac{Lg_z}{u_0^2}$

Sustituyendo los números adimensionales y la relación geométrica.

$$\frac{\partial U_{z}}{\partial \tau} + aU_{r}\frac{\partial U_{z}}{\partial \xi} + U_{z}\frac{\partial U_{z}}{\partial \zeta} = -\frac{\partial P}{\partial \zeta} + \frac{A}{\operatorname{Rep}} \left[\frac{\partial^{2}U_{z}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial U_{z}}{\partial \xi} + \frac{1}{a^{2}}\frac{\partial^{2}U_{z}}{\partial \zeta^{2}} \right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}}U_{z}$$

$$-FU_{z}^{2} + Gn$$
(A.16)

Ecuación de energía

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k_{eff} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$
(A.17)

Aplicando las relaciones adimensionales.

$$\rho c_p T_0 \frac{u_0}{L} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + U_z \frac{1}{R} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + U_z \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right) = k_{eff} T_0 \left(\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{R^2 \xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2} \right)$$

Números adimensionales que pueden sustituir grupos de constantes.

$$\alpha = \frac{k_{eff}}{\rho c_p}, \quad Pe = \frac{u_0 R}{\alpha}$$

Sustituyendo los números adimensionales y la relación geométrica.

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau} + AU_r \frac{\partial\theta}{\partial\xi} + U_z \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} = \frac{A}{Pe} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial\theta}{\partial\xi} + \frac{1}{A^2} \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \right)$$
(A.18)

$$\rho\phi\left(\frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r\frac{\partial u_r}{\partial r} + u_z\frac{\partial u_r}{\partial z}\right) = -\phi\frac{\partial p}{\partial r} + \phi\mu\left[\frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2}\right] - \phi\frac{\mu}{K}u_r - \phi^2\frac{\rho}{K_z}u_r^2 \quad (A.13)$$

RESUMEN DE ECUACIONES ADIMENSIONALES PARA FLUJO EN RÉGIMEN LAMINAR

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial U_r}{\partial \xi} + \frac{1}{\xi} U_r + \frac{1}{A} \frac{\partial U_z}{\partial \zeta} = 0$$
(A.19)

Ecuaciones de momentum

Coordenada radial

$$\frac{\partial U_{r}}{\partial \tau} + AU_{r} \frac{\partial U_{r}}{\partial \xi} + U_{r} \frac{\partial U_{r}}{\partial \zeta} = -A \frac{\partial P}{\partial \xi} + \frac{A}{\operatorname{Rep}} \left[\frac{\partial^{2} U_{r}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial U_{r}}{\partial \xi} - \frac{U_{r}}{\xi^{2}} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} U_{z}}{\partial \zeta^{2}} \right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}} U_{r} - FU_{r}^{2}$$
(A.20)

Coordenada axial

$$\frac{\partial U_{z}}{\partial \tau} + AU_{r} \frac{\partial U_{z}}{\partial \xi} + U_{z} \frac{\partial U_{z}}{\partial \zeta} = -\frac{\partial P}{\partial \zeta} + \frac{A}{\operatorname{Rep}} \left[\frac{\partial^{2} U_{z}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial U_{z}}{\partial \xi} + \frac{1}{a^{2}} \frac{\partial^{2} U_{z}}{\partial \zeta^{2}} \right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}} U_{z}$$

$$-FU_{z}^{2} + Gn$$
(A.21)

Ecuación de energía

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau} + AU_r \frac{\partial\theta}{\partial\xi} + U_z \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} = \frac{A}{Pe} \left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial\theta}{\partial\xi} + \frac{1}{A^2} \frac{\partial^2\theta}{\partial\zeta^2} \right)$$
(A.22)

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k_{eff} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$
(A.17)

APENDICE B: DEDUCCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO DE MOMENTUM Y CALOR EN RÉGIMEN TURBULENTO PARA EL LECHO EMPACADO

Ecuación de cantidad de momentum y calor en notación vectorial.

$$\nabla \cdot \overline{\mathbf{u}} = 0 \tag{B.1}$$

$$\rho \phi \left(\frac{\partial \overline{\mathbf{u}}}{\partial t} + \overline{\mathbf{u}} \cdot \nabla \overline{\mathbf{u}} \right) = -\phi \nabla p + \phi \nabla \cdot \left[\mu_t \left(\nabla \overline{\mathbf{u}} + \nabla \overline{\mathbf{u}}^T \right) \right] - \phi R_0 \overline{\mathbf{u}}$$
(B.2)

$$\rho c_p \left(\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \overline{\mathbf{u}} \cdot \nabla \overline{T} \right) = k_t \nabla^2 \overline{T}$$
(B.3)

Dónde:

$$R_0 = \alpha \mu \frac{150(1-\phi)^2 L}{\phi^3 d_p^2} + \beta \rho \frac{(1-\phi)}{\phi^3 d_p} \overline{\mathbf{u}}$$
(B.4)

$$\mu_t = \rho c_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \tag{B.6}$$

$$k_t = C_p \frac{\mu_t}{\Pr^{(t)}}$$
(B.7)

Ecuaciones del modelo de turbulencia κ - ϵ .

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\kappa}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{u}}\kappa\right) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa}\right)\nabla\left(\phi\kappa\right)\right] + \phi\mu_t\nabla\overline{\mathbf{u}}\cdot\left(\nabla\overline{\mathbf{u}} + \nabla\overline{\mathbf{u}}^T\right) + \phi S_\kappa$$

$$-\rho\phi_\kappa$$
(B.8)

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{\mathbf{u}}\varepsilon\right) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\varepsilon}}\right)\nabla\left(\phi\varepsilon\right)\right] + c_1\phi\mu_t\nabla\overline{\mathbf{u}}\cdot\left(\nabla\overline{\mathbf{u}} + \nabla\overline{\mathbf{u}}^T\right)\frac{\varepsilon}{\kappa} + c_2\phi\left[S_{\varepsilon} - \rho\frac{\varepsilon^2}{\kappa}\right]$$
(B.9)

Donde S_{κ} y S_{ε} se definen de acuerdo con Takeda (1994), en función de la ecuación de Ergun.

$$S_{\kappa} = c_{\kappa} \left(\alpha \mu \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3 d_p^2} + \beta \rho \frac{(1-\phi)}{\phi^3 d_p} u_0 \right) u_0^2$$
(B.10)

$$S_{\varepsilon} = c_{\kappa} \left(\alpha \mu \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3 d_p^2} + \beta \rho \frac{(1-\phi)}{\phi^3 d_p} u_0 \right) \frac{\varepsilon}{\kappa} u_0^2$$
(B.11)

Ecuaciones de momentum y calor en coordenadas cilíndricas (r, z).

$$\frac{\partial \overline{u}_r}{\partial r} + \frac{\overline{u}_r}{r} + \frac{\partial \overline{u}_z}{\partial z} = 0$$
(B.12)

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial t}+\overline{u}_{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\overline{u}_{z}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)=-\phi\frac{\partial\overline{p}}{\partial r}+\phi\left(\mu+\mu_{r}\right)\left[\frac{\partial^{2}\overline{u}_{r}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\frac{\partial^{2}\overline{u}_{r}}{\partial z^{2}}\right]-\phi\frac{\mu}{K}\overline{u}_{r}-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}\overline{u}_{r}^{2} \quad (B.13)$$

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial t}+u_{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\overline{u}_{z}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)=-\phi\frac{\partial p}{\partial z}+\phi\left(\mu+\mu_{t}\right)\left[\frac{\partial^{2}\overline{u}_{z}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial z}+\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r}+\frac{\partial^{2}\overline{u}_{z}}{\partial z^{2}}\right]-\phi\frac{\mu}{K}u_{z}$$

$$-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}u_{z}^{2}+\phi\rho g_{z}$$
(B.14)

$$\rho c_{p} \left(\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \overline{u}_{r} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} + \overline{u}_{z} \frac{\partial \overline{T}}{\partial z} \right) = \left(k_{eff} + k_{t} \right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} + \frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial z^{2}} \right)$$
(B.15)

Ecuaciones del modelo de turbulencia κ - ϵ en coordenadas cilíndricas (r, z).

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \overline{u}_{r}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + \overline{u}_{z}\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\right) = \phi\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\kappa}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\varepsilon}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + \frac{\partial^{2}\varepsilon}{\partial z^{2}}\right) + c_{1}\phi\left(\mu + \mu_{t}\right)\left(2\left(\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2}\right) + 2\left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r}\right)^{2}\right)\frac{\varepsilon}{\kappa} + c_{2}\phi\left[S_{\varepsilon} - \rho\frac{\varepsilon^{2}}{\kappa}\right]$$

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \overline{u}_{r}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + \overline{u}_{z}\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\right) = \phi\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\kappa}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\varepsilon}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + \frac{\partial^{2}\varepsilon}{\partial z^{2}}\right) + c_{1}\phi\left(\mu + \mu_{t}\right)\left(2\left(\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2}\right) + 2\left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r} + \frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r}\right)^{2}\right)\frac{\varepsilon}{\kappa} + c_{2}\phi\left[S_{\varepsilon} - \rho\frac{\varepsilon^{2}}{\kappa}\right]$$

$$(B.17)$$

$$(B.17)$$

ECUACIONES ADIMENSIONALES DE TRANSFERENCIA DE MOMENTUM Y CALOR EN EL LECHO EMPACADO EN RÉGIMEN TURBULENTO:

Factores para la Adimensionalización de las ecuaciones de transporte. Relaciones adimensionales de los componentes de la velocidad.

$$\overline{U}_{r} = \frac{\overline{u}_{r}}{u_{0}} \qquad \qquad \overline{u}_{r} = u_{0} \cdot \overline{U}_{r} \qquad \qquad \partial \overline{u}_{r} = u_{0} \cdot \partial \overline{U}_{r}$$

$$\overline{U}_{z} = \frac{\overline{u}_{z}}{u_{0}} \qquad \qquad \overline{u}_{z} = u_{0} \cdot \overline{U}_{z} \qquad \qquad \partial \overline{u}_{z} = u_{0} \cdot \partial \overline{U}_{z}$$

Relaciones adimensionales de las coordenadas espaciales.

$$\xi = \frac{r}{R} \qquad \qquad r = \xi \cdot R \qquad \qquad \partial r = R \cdot \partial \xi$$
$$\zeta = \frac{z}{L} \qquad \qquad z = \zeta \cdot L \qquad \qquad \partial z = L \cdot \partial \zeta$$

Relaciones adimensionales para la temperatura.

$$\theta = \frac{\overline{T}}{T_0} \qquad \qquad \overline{T} = T_0 \cdot \theta \qquad \qquad \partial \overline{T} = T_0 \cdot \partial \theta$$

$$\tau = \frac{u_0 t}{L} \qquad \qquad t = \frac{L \cdot \tau}{u_0} \qquad \qquad \partial t = \frac{L}{u_0} \cdot \partial \tau$$

$$A = \frac{L}{R} \qquad \qquad B = \frac{L}{d_p} \qquad \qquad Re p = \frac{u_0 \rho R}{3\mu}$$

Relaciones adimensionales para el modelo de turbulencia κ - ϵ .

Ecuación de continuidad

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial t}+\overline{u}_{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\overline{u}_{z}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)=-\phi\frac{\partial\overline{p}}{\partial r}+\phi\left(\mu+\mu_{t}\right)\left[\frac{\partial^{2}\overline{u}_{r}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\frac{\partial^{2}\overline{u}_{r}}{\partial z^{2}}\right]-\phi\frac{\mu}{K}\overline{u}_{r}-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}\overline{u}_{r}^{2} \qquad (B.18)$$

Aplicando las relaciones adimensionales a la ecuación de continuidad.

$$\frac{u_0}{R}\frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \xi} + \frac{u_0}{R}\frac{\overline{U}_r}{\xi} + \frac{u_0}{L}\frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \zeta} = 0$$

Multiplicando la ecuación anterior por R/u_0 y sustituyendo la relación geométrica.

$$\frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \xi} + \frac{1}{\xi} \overline{U}_r + \frac{1}{A} \frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \zeta} = 0$$
(B.19)

Ecuaciones de momentum

Coordenada radial

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial t}+\overline{u}_{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\overline{u}_{z}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)=-\phi\frac{\partial\overline{p}}{\partial r}+\phi\left(\mu+\mu_{r}\right)\left[\frac{\partial^{2}\overline{u}_{r}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\frac{\partial^{2}\overline{u}_{r}}{\partial z^{2}}\right]-\phi\frac{\mu}{K}\overline{u}_{r}-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}\overline{u}_{r}^{2} \qquad (B.20)$$

Aplicando las relaciones adimensionales.

$$\phi \left(\frac{u_0^2}{L}\frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \tau} + U_r \frac{u_0^2}{R}\frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \xi} + U_z \frac{u_0^2}{L}\frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \zeta}\right) = -\frac{\phi}{R}\frac{\partial \overline{p}}{\partial \xi} + \phi \left(\mu + u_0 R\rho c_\mu \frac{\tilde{\kappa}^2}{\tilde{\varepsilon}}\right) \left[\frac{u_0}{R^2}\frac{\partial^2 \overline{U}_r}{\partial r^2} + \frac{u_0}{R^2\xi}\frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \xi} + \frac{u_0}{L^2}\frac{\partial^2 \overline{U}_r}{\partial \zeta^2}\right] - \phi \frac{\mu}{K}u_0\overline{U}_r - \phi^2 \frac{\rho}{K_z}u_0^2\overline{U}_r^2$$

Factorizando la ecuación anterior.

$$\rho\phi\frac{u_{0}^{2}}{L}\left(\frac{\partial\overline{U}_{r}}{\partial\tau}+U_{r}\frac{L}{R}\frac{\partial\overline{U}_{r}}{\partial\xi}+U_{z}\frac{u_{0}^{2}}{L}\frac{\partial\overline{U}_{r}}{\partial\zeta}\right)=-\frac{\phi}{R}\frac{\partial\overline{p}}{\partial\xi}+\phi\frac{\rho u_{0}^{2}}{R}\left(\frac{\mu}{R\rho u_{0}}+c_{\mu}\frac{\tilde{\kappa}^{2}}{\tilde{\varepsilon}}\right)\left[\frac{\partial^{2}\overline{U}_{r}}{\partial\xi^{2}}+\frac{1}{\xi}\frac{\partial\overline{U}_{r}}{\partial\xi}+\frac{R^{2}}{L^{2}}\frac{\partial^{2}\overline{U}_{r}}{\partial\zeta^{2}}\right]$$
$$-\phi\frac{\mu}{K}u_{0}\overline{U}_{r}-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}u_{0}^{2}\overline{U}_{r}^{2}$$

Multiplicando la ecuación anterior por $L/u_0^2 \rho \phi$.

$$\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \tau} + U_{r} \frac{L}{R} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} + U_{z} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} = -\frac{L}{\rho R u_{0}^{2}} \frac{\partial \overline{p}}{\partial \xi} + \frac{L}{R} \left(\frac{\mu}{R \rho u_{0}} + c_{\mu} \frac{\tilde{\kappa}^{2}}{\tilde{\varepsilon}} \right) \left[\frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} + \frac{R^{2}}{L^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \zeta^{2}} \right] \\ - \frac{\mu L}{u_{0} \rho K} \overline{U}_{r} - \phi \frac{L}{K_{z}} \overline{U}_{r}^{2}$$

Números adimensionales que pueden sustituir grupos de constantes.

$$\operatorname{Re}_{p} = \frac{u_{0}\rho R}{3\mu}, \ Da = \frac{L}{d_{p}} \alpha \frac{\left(1-\phi\right)^{2}}{\phi^{3}}, \ \overline{P} = \frac{\overline{p}}{\rho u_{0}^{2}}, \ F = \frac{L}{K_{z}}$$

Sustituyendo los números adimensionales y la relación geométrica.

$$\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} = -A \frac{\partial \overline{P}}{\partial \xi} + A \left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \left[\frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \zeta^{2}} \right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}} \overline{U}_{r} - \phi F \overline{U}_{r}^{2}$$
(B.21)

Coordenada axial

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial t}+u_{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}+\overline{u}_{z}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)=-\phi\frac{\partial\overline{p}}{\partial z}+\phi\left(\mu+\mu_{t}\right)\left[\frac{\partial^{2}\overline{u}_{z}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial z}-\frac{1}{r}\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial r}+\frac{\partial^{2}\overline{u}_{z}}{\partial z^{2}}\right]-\phi\frac{\mu}{K}\overline{u}_{z}$$

$$-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}\overline{u}_{z}^{2}+\phi\rho g_{z}$$
(B.22)

Aplicando las relaciones adimensionales.

$$\rho\phi\left(\frac{u_{0}^{2}}{L}\frac{\partial\overline{U}_{z}}{\partial\tau}+\overline{U}_{r}\frac{u_{0}^{2}}{R}\frac{\partial\overline{U}_{z}}{\partial\xi}+\overline{U}_{z}\frac{u_{0}^{2}}{L}\frac{\partial\overline{U}_{z}}{\partial\zeta}\right)=-\phi\frac{1}{L}\frac{\partial\overline{p}}{\partial\zeta}+\phi\left(\mu+Ru_{0}\rho c_{\mu}\frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right)$$

$$\left[\frac{u_{0}}{R^{2}}\frac{\partial^{2}\overline{U}_{z}}{\partial\xi^{2}}+\frac{u_{0}}{\xi R^{2}}\frac{\partial\overline{U}_{z}}{\partial\xi}-\frac{u_{0}}{LR\xi}\frac{\partial\overline{U}_{z}}{\partial\zeta}+\frac{u_{0}}{L^{2}}\frac{\partial^{2}\overline{U}_{z}}{\partial\zeta^{2}}\right]-\phi\frac{\mu}{K}u_{0}\overline{U}_{z}-\phi^{2}\frac{\rho}{K_{z}}u_{0}^{2}\overline{U}_{z}^{2}+\phi\rho g_{z}$$
(B.22)

Números adimensionales que pueden sustituir grupos de constantes.

Rep =
$$\frac{u_0 \rho R}{3\mu}$$
, $Da = \frac{L}{d_p} \alpha \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3}$, $\overline{P} = \frac{\overline{p}}{\rho u_0^2}$, $F = \frac{L}{K_z}$, $Gn = \frac{Lg_z}{u_0^2}$

Sustituyendo los números adimensionales y la relación geométrica.

$$\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \tau} + a\overline{U}_{r}\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z}\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial \zeta} + A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu}\frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right)\left[\frac{\partial^{2}\overline{U}_{r}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} - \frac{A}{\xi}\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{1}{A^{2}}\frac{\partial^{2}\overline{U}_{z}}{\partial \zeta^{2}}\right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}}\overline{U}_{z} - \phi F\overline{U}_{z}^{2} + Gn$$
(B.23)

Ecuación de producción de energía cinética κ.

$$\rho\left(\frac{\partial\kappa}{\partial t} + \bar{u}_{r}\frac{\partial\kappa}{\partial r} + \bar{u}_{z}\frac{\partial\kappa}{\partial z}\right) = \left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\kappa}}\right) \left(\frac{\partial^{2}\kappa}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial\kappa}{\partial r} + \frac{\partial^{2}\kappa}{\partial z^{2}}\right) + (\mu + \mu_{t}) \left(2\left(\frac{\partial\bar{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2} + 2\left(\frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2}\right) + \left(\frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial z} + \frac{\partial\bar{u}_{z}}{\partial r}\right)^{2}\right) + \phi S_{\kappa} - \rho \varepsilon$$
(B.24)

Aplicando las relaciones adimensionales.

$$\frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \tau} + \overline{U}_{r} \frac{L}{R} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \zeta} = \frac{L}{R} \left(\frac{\mu}{u_{0}\rho R} + \frac{c_{\mu}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \left(\frac{\partial^{2}\overline{\kappa}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \frac{R^{2}}{L^{2}} \frac{\partial^{2}\overline{\kappa}}{\partial \zeta^{2}} \right) + \frac{L}{R} \left(\frac{\mu}{u_{0}\rho R} + \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \left(2 \left(\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} \right)^{2} + 2 \frac{R^{2}}{L^{2}} \left(\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} \right)^{2} + \left(\frac{R}{L} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} \right)^{2} \right) + c_{\kappa} \frac{L}{d_{p}} \left(\alpha \mu \frac{(1-\phi)^{2}}{\phi^{3}\rho u_{0}d_{p}} + \beta \frac{(1-\phi)}{\phi^{3}} \right) - \frac{L}{R} \overline{\varepsilon}$$

Multiplicando la ecuación anterior por $L/u_0^3 \rho \phi$.

$$\frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \tau} + \overline{U}_{r} \frac{L}{R} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \zeta} = \frac{L}{R} \left(\frac{\mu}{u_{0}\rho R} + \frac{c_{\mu}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \left(\frac{\partial^{2}\overline{\kappa}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \frac{R^{2}}{L^{2}} \frac{\partial^{2}\overline{\kappa}}{\partial \zeta^{2}} \right) + \frac{L}{R} \left(\frac{\mu}{u_{0}\rho R} + \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \left(2 \left(\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} \right)^{2} + 2 \frac{R^{2}}{L^{2}} \left(\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} \right)^{2} + \left(\frac{R}{L} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} \right)^{2} \right) + c_{\kappa} \frac{L}{d_{p}} \left(\alpha \mu \frac{(1-\phi)^{2}}{\phi^{3}\rho u_{0}d_{p}} + \beta \frac{(1-\phi)}{\phi^{3}} \right) - \frac{L}{R} \overline{\varepsilon}$$

Sustituyendo los números adimensionales y las relaciones geométricas.

$$\frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \zeta} = A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{c_{\mu}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(\frac{\partial^{2}\overline{\kappa}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2}\overline{\kappa}}{\partial \zeta^{2}}\right) + A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(2\left(\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi}\right)^{2} + \frac{2}{A^{2}}\left(\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta}\right)^{2} + \left(A\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi}\right)^{2}\right) + c_{\kappa}B\left(\frac{\alpha}{\operatorname{Rep}} \frac{(1-\phi)^{2}}{\phi^{3}} + \beta\frac{(1-\phi)}{\phi^{3}}\right) - A\tilde{\varepsilon}$$
(B.25)

Ecuación de disipación de energía cinética ε .

$$\rho\phi\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \overline{u}_{r}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + \overline{u}_{z}\frac{\partial\varepsilon}{\partial z}\right) = \phi\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\kappa}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\varepsilon}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r}\frac{\partial\varepsilon}{\partial r} + \frac{\partial^{2}\varepsilon}{\partial z^{2}}\right) + c_{1}\phi\left(\mu + \mu_{t}\right)\left(2\left(\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2} + 2\left(\frac{\partial\overline{u}_{z}}{\partial z}\right)^{2} + \left(\frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial z} + \frac{\partial\overline{u}_{r}}{\partial r}\right)^{2}\right)\frac{\varepsilon}{\kappa} + c_{\kappa}\phi\left[S_{\kappa} - \rho\frac{\varepsilon^{2}}{\kappa}\right]$$
(B.26)

Aplicando las relaciones adimensionales.

$$\begin{split} \rho\phi &\left(\frac{u_0^4}{RL}\frac{\partial\overline{\varepsilon}}{\partial\tau} + \overline{U}_r \frac{u_0^4}{R^2}\frac{\partial\overline{\varepsilon}}{\partial\xi} + \overline{U}_z \frac{u_0^4}{RL}\frac{\partial\overline{\varepsilon}}{\partial\zeta}\right) = \phi \left(\mu + R\rho u_0 \frac{c_\mu}{\sigma_\kappa}\frac{\kappa^2}{\tilde{\varepsilon}}\right) \left(\frac{u_0^3}{R^3}\frac{\partial^2\overline{\varepsilon}}{\partial\xi^2} + \frac{u_0^3}{R^3}\frac{\partial\overline{\varepsilon}}{\partial\xi} + \frac{u_0^3}{RL^2}\frac{\partial^2\overline{\varepsilon}}{\partial\zeta^2}\right) \\ &+ \phi c_2 \left(\mu + u_0 \rho R c_\mu \frac{\kappa^2}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(2\frac{u_0^2}{R^2}\left(\frac{\partial\overline{U}_r}{\partial\xi}\right)^2 + 2\frac{u_0^2}{L^2}\left(\frac{\partial\overline{U}_z}{\partial\zeta}\right)^2 + \frac{u_0^2}{R^2}\left(\frac{R}{L}\frac{\partial\overline{U}_r}{\partial\zeta} + \frac{\partial\overline{U}_z}{\partial\xi}\right)^2\right) \frac{u_0}{R}\frac{\overline{\varepsilon}}{\kappa} \\ &+ c_1 \phi \left[c_\kappa \left(\alpha\mu \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3 d_0^2}u_0^2 + \beta\rho \frac{(1-\phi)}{\phi^2 d_p}u_0^3\right) \frac{u_0}{R}\frac{\overline{\varepsilon}}{\kappa} - \rho \frac{u_0^2}{R^2}\frac{\overline{\varepsilon}^2}{\kappa}\right] \end{split}$$

Multiplicando la ecuación anterior por $RL/u_0^4 \rho \phi$.

$$\begin{split} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \tau} + \overline{U}_r \frac{L}{R} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} + \overline{U}_z \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta} &= \frac{L}{R} \left(\frac{\mu}{u_0 \rho R} + \frac{c_\mu}{\sigma_\kappa} \frac{\overline{\kappa}^2}{\overline{\varepsilon}} \right) \left(\frac{\partial^2 \overline{\varepsilon}}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} + \frac{R^2}{L^2} \frac{\partial^2 \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta^2} \right) + c_1 \frac{L}{R} \left(\frac{\mu}{u_0 \rho R} + c_\mu \frac{\overline{\kappa}^2}{\overline{\varepsilon}} \right) \\ & \left(2 \left(\frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \xi} \right)^2 + 2 \frac{R^2}{L^2} \left(\frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \zeta} \right)^2 + \left(\frac{R}{L} \frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \xi} \right)^2 \right) \frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{\kappa}} \\ & + c_2 \left[c_\kappa \frac{L}{d_p} \left(\alpha \mu \frac{(1-\phi)^2}{\rho u_0 \phi^3 d_p} + \beta \frac{(1-\phi)}{\phi^3} \right) \frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{\kappa}} - \frac{L}{R} \frac{\overline{\varepsilon}^2}{\overline{\kappa}} \right] \end{split}$$

Sustituyendo los números adimensionales y las relaciones geométricas.

$$\frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta} = A \left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{c_{\mu}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{\varepsilon}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta^{2}} \right) + ac_{1} \left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \\ \left(2 \left(\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} \right)^{2} + \frac{2}{a^{2}} \left(\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} \right)^{2} + \left(\frac{1}{A} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} \right)^{2} \right) \frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{\kappa}}$$

$$+ c_{2} \left[Bc_{\kappa} \left(\frac{\alpha}{\operatorname{Rep}} \frac{(1 - \phi)^{2}}{\phi^{3}} + \beta \frac{(1 - \phi)}{\phi^{3}} \right) \frac{\widetilde{\varepsilon}}{\overline{\kappa}} - A \frac{\widetilde{\varepsilon}^{2}}{\overline{\kappa}} \right]$$
(B.27)

Ecuación de Energía

$$\rho c_{p} \left(\frac{\partial \overline{T}}{\partial t} + \overline{u}_{r} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} + \overline{u}_{z} \frac{\partial \overline{T}}{\partial z} \right) = \left(k_{eff} + k_{t} \right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial r^{2}} + \frac{1}{r} \frac{\partial \overline{T}}{\partial r} + \frac{\partial^{2} \overline{T}}{\partial z^{2}} \right)$$
(B.28)

Aplicando las relaciones adimensionales.

$$T_0 \left(\frac{u_0 \rho R}{L} \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \overline{U}_r \frac{u_0 \rho R}{R} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \overline{U}_z \frac{u_0 \rho R}{L} \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right) = \frac{1}{R} \left(k_{eff} + k_t \right) \left(\frac{T_0}{R^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{T_0}{\xi R^2} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{T_0}{L^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2} \right)$$

Factorizando la ecuación anterior.

$$\frac{T_0}{L} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \overline{U}_r \frac{L}{R} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \overline{U}_z \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} \right) = \frac{T_0}{R^2} \left(k_{eff} + k_t \right) \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{R^2}{L^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2} \right)$$

Multiplicando la ecuación anterior por $L/u_0\rho c_p T_w$.

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \overline{U}_r \frac{L}{R} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \overline{U}_z \frac{\partial \theta}{\partial \zeta} = \frac{L}{R\rho c_p} \left(k_{eff} + k_t \right) \left(\frac{\partial \theta}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{R^2}{L^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \zeta^2} \right)$$

Sustituyendo los números adimensionales y la relación geométrica.

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau} + A\overline{U}_{r}\frac{\partial\theta}{\partial\xi} + \overline{U}_{z}\frac{\partial\theta}{\partial\zeta} = A\left(\frac{1}{Pe} + \frac{c_{\mu}}{\Pr^{(t)}}\frac{\tilde{\kappa}^{2}}{\tilde{\varepsilon}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\theta}{\partial\xi^{2}} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\theta}{\partial\xi} + \frac{1}{A^{2}}\frac{\partial^{2}\theta}{\partial\zeta^{2}}\right)$$
(B.29)

RESUMEN DE ECUACIONES ADIMENSIONALES PARA RÉGIMEN DE FLUJO TURBULENTO

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \overline{U}_r}{\partial \xi} + \frac{1}{\xi} \overline{U}_r + \frac{1}{A} \frac{\partial \overline{U}_z}{\partial \zeta} = 0$$
(B.30)

Ecuaciones de momentum

Coordenada radial

$$\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} = -\frac{\partial \overline{P}}{\partial \zeta} + A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left[\frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} - \frac{A}{\xi} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{U}_{z}}{\partial \zeta^{2}}\right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}} \overline{U}_{r} - \phi F \overline{U}_{z}^{2} + Gn$$
(B.31)

Coordenada axial

$$\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} = -A \frac{\partial \overline{P}}{\partial \xi} + A \left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \left[\frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{U}_{r}}{\partial \zeta^{2}} \right] - \frac{Da}{\operatorname{Rep}} \overline{U}_{r} - \phi F \overline{U}_{r}^{2}$$

$$(B.32)$$

Ecuaciones del modelo de turbulencia κ-ε:

Ecuación de producción de energía cinética turbulenta κ.

$$\frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \tau} + A\overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \zeta} = A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{c_{\mu}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{\kappa}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\kappa}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{\kappa}}{\partial \zeta^{2}}\right) + A\left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}}\right) \left(\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} + \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi}\right)^{2} + \left(A \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi}\right)^{2}\right) + c_{\kappa}B\left(\frac{\alpha}{\operatorname{Rep}} \frac{(1-\phi)^{2}}{\phi^{3}} + \beta \frac{(1-\phi)}{\phi^{3}}\right) - A\overline{\varepsilon}$$
(B.33)

Ecuación de disipación de energía cinética turbulenta ε.

$$\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial \tau} + A \overline{U}_{r} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} + \overline{U}_{z} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta} = A \left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + \frac{c_{\mu}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \left(\frac{\partial^{2} \overline{\varepsilon}}{\partial \xi^{2}} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial \overline{\varepsilon}}{\partial \xi} + \frac{1}{A^{2}} \frac{\partial^{2} \overline{\varepsilon}}{\partial \zeta^{2}} \right) + ac_{1} \left(\frac{1}{\operatorname{Rep}} + c_{\mu} \frac{\overline{\kappa}^{2}}{\overline{\varepsilon}} \right) \\ \left(2 \left(\frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \xi} \right)^{2} + \frac{2}{a^{2}} \left(\frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \zeta} \right)^{2} + \left(\frac{1}{A} \frac{\partial \overline{U}_{r}}{\partial \zeta} + \frac{\partial \overline{U}_{z}}{\partial \xi} \right)^{2} \right) \frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{\kappa}} \quad (B.34) \\ + c_{2} \left[Bc_{\kappa} \left(\frac{\alpha}{\operatorname{Rep}} \frac{(1-\phi)^{2}}{\phi^{3}} + \beta \frac{(1-\phi)}{\phi^{3}} \right) \frac{\tilde{\varepsilon}}{\kappa} - A \frac{\tilde{\varepsilon}^{2}}{\kappa} \right]$$

Ecuación de energía

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau} + A\overline{U}_{r}\frac{\partial\theta}{\partial\xi} + \overline{U}_{z}\frac{\partial\theta}{\partial\zeta} = A\left(\frac{1}{Pe} + \frac{c_{\mu}}{\Pr^{(t)}}\frac{\tilde{\kappa}^{2}}{\tilde{\varepsilon}}\right)\left(\frac{\partial^{2}\theta}{\partial\xi^{2}} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial\theta}{\partial\xi} + \frac{1}{A^{2}}\frac{\partial^{2}\theta}{\partial\zeta^{2}}\right)$$
(B.35)

