

**Modelado de reactores de lecho fijo de
baja relación de aspecto asistido por
Fluidodinámica Computacional (CFD)**



Tesis de Doctorado

DANIELA ANABEL ASENSIO

Presentada ante la Facultad de Ingeniería de la
Universidad Nacional de La Plata
como requisito para la obtención del grado académico de

DOCTOR EN INGENIERIA

Dirección de tesis:

Director: Dr. Germán Mazza

Co-director: Dr. Guillermo Barreto

Jurado de tesis:

Dr. Daniel Borio

Dra. Norma Amadeo

Dr. Rodolfo Mascheroni

La Plata, 20 de Diciembre de 2017

MI AGRADECIMIENTO

al Dr. Germán Mazza, quien me dio la oportunidad para realizar esta tesis doctoral bajo su dirección. Su apoyo y confianza han sido un aporte invaluable para el desarrollo de esta tesis.

al Dr. Guillermo Barreto, por su ayuda, dedicación y consejos. La generosidad y amabilidad demostrada en cada momento han sido un gran apoyo para la finalización de este trabajo.

A mis compañeros de trabajo, Mariana Zambon, José Soria, Claudia Mora, Florencia Toschi y Amelia Lapuente, quienes me brindaron su desinteresada colaboración y ayuda.

A mi familia y amigos por su constante apoyo, especialmente a mis padres, que nunca han dejado de animarme en continuar con mi formación.

Finalmente a las instituciones que hicieron posible la realización de esta tesis, Universidad Nacional del Comahue y Universidad Nacional de la Plata.

Daniela A. Asensio

TESIS DOCTORAL

Modelado de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto asistido por Fluidodinámica Computacional (CFD)

Esta tesis fue realizada en el laboratorio del Grupo de Ingeniería de Reactores y Procesos Químicos (GIRPQ) del Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías Alternativas (PROBIEN), unidad de doble dependencia del CONICET (Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas) y la Universidad Nacional del Comahue (UNCo) y en el Departamento de Química de la Facultad de Ingeniería de la UNCO (Neuquén, Argentina). También se llevaron a cabo algunas actividades en el Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge. J. Ronco" (CINDECA, CONICET-UNLP) y en el Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata.

El financiamiento de este trabajo correspondió a la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT) mediante una Beca Doctoral encuadrada en el Proyecto de Formación de Doctores en Áreas Tecnológicas Prioritarias-PFDT, PRH N° 33 y al Programa Doctor@r Ingeniería. Adicionalmente, se contó con el financiamiento de los proyectos PI I191(UNCO), PI I158 (UNCo), PIP 0304(CONICET), PICT 2014-2078 (FONCyT) y subsidios del programa de Recursos Humanos UNCo y programa de movilidad de docentes UNCo.

RESUMEN

Los reactores de lecho fijo son el tipo de reactor más utilizado en la industria de procesos, principalmente como reactores catalíticos, con catalizadores sólidos granulares convencionales. Cuando el reactor requiere transferencia de calor simultánea al proceso de reacción, es frecuente utilizar reactores *multitubulares* con baja relación de aspecto ($N=D_t/D_p$), siendo $5 \leq N \leq 10$ un rango típico de valores de N en unidades industriales. Los reactores multitubulares permiten cumplir, simultáneamente, con condiciones operativas de baja pérdida de carga y apropiadas velocidades de transferencia de calor al fluido de intercambio térmico.

En esta tesis doctoral, se estudia el modelado y simulación de este tipo de unidades, mediante la formulación de un modelo heterogéneo de dos zonas (2R2D) que enfatiza el rol de la capa de partículas adyacente a la pared de tubo y su interacción con el resto del lecho, a nivel de la componente convectiva del fluido. El modelo formulado involucra diferentes parámetros térmicos y fluidodinámicos que se determinan mediante la utilización de la fluidodinámica computacional (CFD) como herramienta de experimentación virtual.

En el desarrollo de la tesis se proponen correlaciones, obtenidas a partir del análisis de los campos de variables generados por CFD, para la predicción de los parámetros: h_{wf} , h_f , $\lambda_{ef,c}$ y G_1/G_c .

Se discute la conveniencia de utilización del modelo 2R2D frente al modelo clásico bidimensional pseudohomogéneo (S2D), en función de la relación de aspecto. Asimismo, se estudia la influencia de la geometría (recinto de paredes planas o tubo cilíndrico) y del arreglo de partículas (regular o aleatorio), mediante los correspondientes esquemas estructurales que conforman el lecho y la celda de cálculo.

Se utiliza el caso de la síntesis de amoníaco para la construcción de un estudio comparativo del comportamiento del modelo 2R2D frente al modelo S2D y finalmente se formulan recomendaciones y perspectivas para la consideración del comportamiento del sólido.

ÍNDICE

CAPITULO 1

INTRODUCCIÓN GENERAL..... 1.3

- 1.1 Presentación de la temática
- 1.2 Objetivos del trabajo
- 1.3 Descripción del contenido del trabajo

CAPITULO 2

REACTORES DE LECHO FIJO-DESCRIPCIÓN Y MODELOS..... 2.3

- 2.1 Introducción
- 2.2 Modelado de reactores catalíticos de lecho fijo
 - 2.2.1 Modelos unidimensionales y bidimensionales - Formulación
- 2.3 Discusión acerca del modelo S2D y sus parámetros de transferencia de calor
- 2.4 Modelos bidimensionales de dos zonas
- 2.5 Conclusiones del capítulo

CAPITULO 3

MODELO DE DOS ZONAS PROPUESTO (2R2D)..... 3.3

- 3.1 Introducción
- 3.2 Formulación del modelo 2R2D propuesto
 - 3.2.1 Distribución de partículas y flujo de fluido en la sección transversal del lecho
 - 3.2.2 Ecuaciones de conservación de calor y masa
 - 3.2.3 Discusión sobre las principales suposiciones y parámetros térmicos introducidos en el modelo propuesto
- 3.3 Conclusiones del capítulo

Apéndice 3.1

Reformulación del modelo propuesto 2R2D introduciendo canales centrales interiores y exteriores

Apéndice 3.2

Transferencia de calor en la primera capa de partículas, evaluación de los coeficientes h_s , h_{ws} y h_{sL}

CAPITULO 4

FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL (CFD)..... 4.3

4.1 Introducción

PARTE I

4.2 Conceptos básicos de la CFD

4.2.1 Definición general

4.2.2 Características principales y aplicabilidad de la CFD

4.2.3 Ventajas y Desventajas

4.2.4 Estructura de *software* CFD

4.2.4.1 Pre-procesamiento

4.2.4.2 Resolución

4.2.4.3 Post-procesamiento

PARTE II

4.3 Simulación de lechos fijos

4.3.1 Procedimiento de resolución

4.3.1.1 Arreglos regulares

4.3.1.2 Arreglos al azar

4.4 Conclusiones del capítulo

CAPITULO 5

ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS DEL MODELO 2R2D-CORRELACIONES FORMULADAS EN BASE A ARREGLOS REGULARES..... 5.3

5.1 Introducción

5.2 Adecuación del modelo 2R2D para geometría plana

5.3 Geometrías utilizada para los arreglos regulares

5.4 Resultados y correlaciones formuladas para arreglos regulares

- 5.4.1 Coeficiente de transferencia de calor h_{wf}
- 5.4.2 Coeficiente de transferencia de calor h_f
- 5.4.3 Relación de velocidades superficiales másicas G_1/G_c entre las regiones de pared y central
- 5.5 Comparación de los coeficientes h_{wf} y h_f con correlaciones de literatura
- 5.6 Conclusiones del capítulo

CAPITULO 6

ANALISIS COMPARATIVO DEL COMPORTAMIENTO DE LOS MODELOS S2D Y 2R2D: REACTOR DE SINTESIS DE AMONIACO..... 6.3

- 6.1 Introducción
- 6.2 Contextualización de la comparación entre el modelo 2R2D y el modelo S2D
 - 6.2.1 Modelo 2R2D
 - 6.2.2 Modelo S2D
- 6.3 Expresión cinética del sistema de reacción seleccionado, condiciones operativas y estimación de los parámetros para el análisis comparativo de modelos
- 6.4 Resultado numérico y análisis comparativo
- 6.5 Conclusiones del capítulo

Apéndice 6.1

Evaluación del coeficiente de transferencia de calor en la pared para el modelo S2D

CAPITULO 7

APLICACIÓN DE LA CFD AL ANÁLISIS DE LECHOS RELLENOS AL AZAR..... 7.3

- 7.1 Introducción
- 7.2 Procedimientos para generar empaques aleatorios

- 7.2.1 Algoritmo propuesto por Salvat y col., 2005
- 7.3 Definición de la geometría de estudio
 - 7.3.1 Tratamiento de los puntos de contacto
 - 7.3.2 Metodología para aplicar el procedimiento de Eppinger y col., 2011 y evaluación de resultados
 - 7.3.3 Construcción de la geometría en el dominio de cálculo para el caso de estudio con $N=5$
- 7.4 Generación del mallado de la geometría
 - 7.4.1 Conformación y aspecto de la malla resultante para el caso $N=5$
- 7.5 Conclusiones del capítulo

CAPITULO 8

EVALUACIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL MODELO 2R2D A PARTIR DE LOS DATOS OBTENIDOS POR CFD..... 8.3

- 8.1 Introducción
- 8.2 Posibilidad y significado del empleo del modelo 2R2D para relaciones $N < 5$
- 8.3 Reducción de los datos de simulaciones por CFD para calcular los parámetros del modelo 2R2D
- 8.4 Simulación y análisis para lecho relleno con relación de aspecto $N = 5$
 - 8.4.1 Resultados para G_1/G_c
 - 8.4.2 Resultados para h_{wf}
 - 8.4.3 Coeficiente de transferencia de calor h_f
 - 8.4.4 Conductividad efectiva radial $\lambda_{ef,c}$
 - 8.4.4.1 Discusión de los resultados obtenidos para $\lambda_{ef,c}$
 - 8.4.4.2 El efecto de G_c/G y propuesta tentativa para predecir $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ y $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$
- 8.5 Conclusiones del capítulo

Apéndice 8.1

Efecto de la curvatura de la pared sobre G_1

CAPITULO 9

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS..... 9.3

9.1 Relevancia de los objetivos alcanzados

9.2 Tareas realizadas

9.3 Sugerencias para la continuación de los trabajos de investigación en la
temática

NOMENCLATURA..... N.1

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... B.1

CAPITULO 1

INTRODUCCIÓN GENERAL

1.1 Presentación de la temática

1.2 Objetivos del trabajo

1.3 Descripción del contenido del trabajo

CAPITULO 1

INTRODUCCIÓN GENERAL

1.1.- Presentación de la temática

Los lechos rellenos son dispositivos de permanente aplicación en la industria de procesos, particularmente como reactores de lecho fijo, con catalizadores sólidos granulares convencionales.

La mayoría de los procesos químicos actuales se llevan a cabo, o incluyen en su tren de producción, la utilización de reactores de lecho fijo (RLF) en sus diferentes variantes operacionales: reactores multifásicos, de recipiente único, multitubulares, adiabáticos, con intercambio de calor simultáneo, lechos múltiples con intercambio de calor entre etapas, entre otros.

Algunos de estos procesos, ocurrientes en presencia de un catalizador sólido, se listan en la tabla 1.1, incluyendo la naturaleza del catalizador y las condiciones de operación (presión y temperatura).

Proceso químico	Catalizador utilizado	Condiciones operativas (temperatura y presión)
Hidrogenación de benceno $C_6H_6 + 3H_2 \rightleftharpoons C_6H_{12}$	Pt/Al ₂ O ₃	T < 300°C P → 20 – 30 atm
Oxidación parcial de etileno $2C_2H_4 + O_2 \rightleftharpoons 2C_2H_4O$	Ag/Al ₂ O ₃	T → 200 – 280°C P → 10 – 20 atm
Reformado de gas natural $CH_4 + H_2O \rightleftharpoons CO + 3H_2$	Ni/Al ₂ O ₃	T > 500°C P = 30 atm
Síntesis de amoníaco $N_2 + 3H_2 \rightleftharpoons 2NH_3$	Fe – K ₂ O/Al ₂ O ₃	T → 450-550°C P > 200 atm
Oxidación de dióxido de azufre $2SO_2 + O_2 \rightleftharpoons 2SO_3$	V ₂ O ₅	T → 380-427°C P = 2 – 15 atm

Tabla 1.1: Algunos procesos químicos llevados a cabo en reactores de lecho fijo.

Cuando el reactor requiere transferencia de calor simultánea al proceso de reacción, es frecuente utilizar reactores *multitubulares* con baja relación de aspecto ($N = D_t/D_p$, siendo $5 \leq N \leq 10$ un rango típico de valores de N en unidades industriales). Los reactores multitubulares permiten cumplir, simultáneamente, con

condiciones operativas de baja pérdida de carga y apropiadas velocidades de transferencia de calor al fluido de intercambio térmico para reacciones que presentan elevada exotermicidad (Froment y Bischoff, 1990). Estos reactores están formados por un elevado número de tubos ubicados en posición vertical, rellenos con partículas catalíticas que pueden variar en tamaño y forma (cilíndricas, esféricas, etc.).

Cuando se lleva a cabo la modelización de reactores de lecho fijo, es fundamental el conocimiento profundo de la conformación estructural del lecho, del flujo del (o de los) fluido (s) y la transferencia de calor en el reactor. En tal sentido, el modelado preciso del lecho fijo reviste considerable dificultad, particularmente para relaciones de aspecto pequeñas, en el rango 5-10. En tal sentido, una concepción deseable es la de presentar un modelo accesible, que no requiera una excesiva cantidad de parámetros, a fin de permitir la evaluación rápida del comportamiento o respuesta del reactor ante diferentes perturbaciones o condiciones operativas diferentes, en el caso de chequeo de la performance del reactor. Del mismo modo, para el caso de diseño del mismo, también es conveniente utilizar modelos de complejidad moderada.

Si bien existen diferentes estudios reportados en la bibliografía, que se mencionarán en el Capítulo 2 es claro el interés existente en el desarrollo de modelos matemáticos aplicables al fin enunciado para reactores de baja relación de aspecto.

La fluidodinámica computacional (CFD por sus iniciales en inglés *Computational Fluid Dynamics*) es una técnica de gran utilidad en el estudio de reactores químicos y, sobre esta problemática, existen diferentes antecedentes en la bibliografía específica, referidos a la utilización de la CFD con la finalidad de elaborar herramientas predictivas que permitan determinar los campos de velocidad, composición y temperatura en lechos fijos (Ranade, 2002; Nijemeisland y Dixon, 2004; Guardo y col., 2005; Eppinger y col., 2011; Dixon, 2017). Si se reconoce la heterogeneidad del medio de partículas, se debe señalar que su representación geométrica y la generación del dominio de cálculo, constituyen aspectos de considerable dificultad en la implementación de modelos en este marco. Su resolución numérica posterior conduce a requerimientos de tiempo computacional considerable, lo que en conjunto permite concluir que la utilización de la CFD en la simulación microscópica de este tipo de reactores es de difícil implementación práctica.

A pesar de lo expuesto en el párrafo precedente, la CFD constituye una valiosa herramienta para la obtención de información confiable sobre diversos aspectos del

comportamiento del RLF, esencialmente en la influencia de la estructura del mismo sobre los procesos de transporte y reacción química (Nijemeisland y Dixon, 2004; Guardo et al., 2005, Romkers et al., 2003, Dixon, 2017). Se la utiliza, en este tipo de aplicaciones, como una *metodología de experimentación virtual*, de gran versatilidad y bajo costo, que reemplaza, en el debido contexto, a las determinaciones experimentales y de rápida respuesta (Joshi y Ranade, 2003).

Las plataformas de CFD contribuyen en gran medida al conocimiento de los campos de las variables en la operación de reactores de lecho fijo, definiendo sus valores en todo el dominio de la unidad.

En síntesis, la ampliación permanente del espectro de utilización de los reactores de lecho fijo conduce al requerimiento creciente de conocimiento de potencialidades tecnológicas de su aplicación, necesidades de mejoras en la instalación, operación y controlabilidad de unidades existentes y de nuevos reactores para procesos innovadores en etapa de diseño. En tal contexto, las herramientas de modelado revisten un interés central y se realizan permanentes esfuerzos en tal sentido, fundamentalmente en el marco de la fluidodinámica computacional Dixon, 2017; Dudukovic y col., 2002.

1.2.- Objetivos del trabajo

La motivación fundamental de este trabajo reside en formular un modelo para la representación del comportamiento de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto, constituyendo una herramienta de utilidad en el diseño y verificación de unidades existentes. Se ha puesto especial énfasis en la cantidad de parámetros involucrados (el mínimo posible) y en la obtención de correlaciones para la determinación de los mismos, basados en un amplio conjunto de experiencias numéricas en la plataforma de *ANSYS FLUENT 14.5*.

Si bien existen numerosos trabajos reportados en la literatura específica sobre el modelado y simulación de reactores de lecho fijo, se observa aún una importante dispersión entre las expresiones predictivas propuestas para los parámetros involucrados. Sin embargo, en los casos de lechos de baja relación de aspecto ($N < 10$) la existencia de los llamados “efectos de pared” provoca perturbaciones que se extienden sobre toda la sección transversal del LF y requieren de consideraciones particulares.

La finalidad principal de esta tesis es el planteo de un modelo matemático que permita representar el comportamiento de un lecho fijo de baja relación de aspecto con

consideración de la geometría cilíndrica del tubo, incluyendo la formulación de expresiones predictivas para sus parámetros.

El modelo que constituye el interés central de esta tesis y que se desarrollará en detalle en los sucesivos capítulos de la misma, se denomina “Modelo Heterogéneo de Dos Zonas” (2R2D). En él, un lecho se representa como una zona anular adyacente a la pared cuyo espesor es de un radio de partícula, seguida de una segunda zona, denominada central, que constituye el seno del lecho. En ambas zonas, la porosidad será esencialmente diferente, con un elevado valor en la región periférica.

Se propondrá como metodología para la obtención de las correlaciones para la determinación de los parámetros térmicos y fluidodinámicos del modelo, la utilización de la Fluidodinámica Computacional (CFD) en carácter de experimentación virtual, que permite la obtención de información de alta calidad.

1.3.-Descripción del contenido del trabajo

En esta sección se presenta una descripción breve de los contenidos del trabajo de tesis, con referencia a cada capítulo del mismo.

Con el fin de contextualizar los sistemas estudiados, el Capítulo 2 contiene una descripción somera de los reactores de lecho fijo e incluye una revisión de los diferentes modelos y enfoques reportados en la bibliografía. El trabajo se centra en la modelización de reactores catalíticos multitubulares de lecho fijo que operan en régimen estacionario. Los modelos que se describen se hallan clasificados en dos grandes grupos: modelos Pseudohomogéneos y modelos Heterogéneos. Se analiza la potencial evaluación de los parámetros de transferencia de calor, y particularmente se discute el uso habitual del modelo estándar bidimensional pseudo-homogéneo (S2D) para dicha evaluación. El Capítulo 2 incluye, además, la descripción de los llamados “modelos bidimensionales de dos zonas”, que constituyen antecedentes relevantes para el objetivo de la tesis.

El Capítulo 3 se destina a la presentación de la formulación completa del modelo heterogéneo de dos zonas (2R2D) para lechos cilíndricos rellenos de partículas esféricas catalíticas de tamaño uniforme. El modelo ha sido concebido a fin de permitir la corrección de las deficiencias más significativas del modelo S2D en lechos de baja relación de aspecto.

Los conceptos básicos que rigen la aplicación de la técnica de fluidodinámica computacional (CFD) se describen someramente en la Parte I del Capítulo 4. Se explica

el tratamiento del flujo de fluidos, a través de la resolución de las ecuaciones de conservación y los modelos específicos utilizados por la CFD. Dicho capítulo, en su Parte II, describe la aplicación de la CFD a la simulación de lechos de baja relación de aspecto con arreglos regulares y arreglos al azar de partículas en el tubo que las contiene. Se desarrollan los aspectos esenciales del mallado y la validación de la estructura de malla, a fin de constituir las bases de la aplicación de la técnica al sistema en estudio.

En el Capítulo 5 se describe el modelado de un lecho relleno utilizando el enfoque de *partículas discretas* mediante la simulación por CFD, en base a rellenos descritos geoméricamente por arreglos regulares de partículas esféricas contenidos entre paredes planas. A partir de las simulaciones se genera la información necesaria para la obtención de expresiones predictivas para los parámetros h_{wf} , h_f y la relación G_l/G_c del modelo 2R2D. Se realiza una comparación de los coeficiente de transferencia de calor del modelo 2R2D aplicados a lechos rellenos al azar, con correlaciones de literatura.

El Capítulo 6 contiene los resultados que permiten apreciar la diferencia de comportamiento del modelo pseudo-homogéneo bidimensional clásico (S2D) descrito en el Capítulo 2 y el modelo 2R2D presentado en el Capítulo 3. Como sistema de referencia para la comparación, se utiliza el proceso de síntesis de amoníaco.

En el Capítulo 7 se aplica la CFD al caso de lechos rellenos al azar, se describe la metodología y adaptación del dominio de cálculo a lechos de baja relación de aspecto, pero con rellenos al azar. Se utilizan métodos previamente desarrollados en el grupo de trabajo para la generación de los rellenos aleatorios. Los resultados y correlaciones obtenidas para los parámetros del modelo 2R2D a partir de estos lechos se presentan y discuten en el Capítulo 8.

Finalmente, el Capítulo 9 resume las conclusiones y observaciones generales, como así también las perspectivas y sugerencias para la realización de futuros trabajos vinculados al tema de la presente tesis doctoral.

Parte de los desarrollos y resultados presentados en esta Tesis han sido publicados, en los siguientes artículos:

- D. A. Asensio, M. T. Zambon, G. D. Mazza y G. F. Barreto. "Heterogeneous Two-Region Model for Low-Aspect-Ratio Fixed-Bed Catalytic Reactors. Analysis of Fluid-Convective Contributions". *Ind. Eng. Chem. Res.*, **53**(9), 3587 (2014).

- M. T. Zambon, D. A. Asensio, G. D. Mazza y G. F. Barreto. "Application of computational fluid dynamics (CFD) for the evaluation of fluid-convective radial heat transfer parameters in packed beds". *Ind. Eng. Chem. Res.*, **53**(49), 19052 (2014).
- M. T. Zambon, D. A. Asensio, G. F. Barreto y G. D. Mazza. "Análisis de perfiles radiales de temperatura para lechos fijos de baja relación de aspecto por fluidodinámica computacional". *Mecánica Computacional*, **27**, 1767 (2008).

En las contribuciones en Congresos de la especialidad que se listan a continuación:

- M. T. Zambon, D. A. Asensio, G. F. Barreto y G. D. Mazza. "Evaluación de parámetros térmicos y Fluidodinámicos por CFD para la representación de la transferencia de calor en lechos fijos de baja relación de aspecto". *Actas del IX Congreso Interamericano de Computación Aplicada a la Industria de Procesos (CAIP' 2009)*, cap. VII, pp. 353-358 (2009).
- M. Zambon, D. Asensio, G. F. Barreto y G. D. Mazza. "Application of Computational Fluid Dynamics (CFD) for an Efficient Evaluation of Pressure Drop and Heat Transfer in Fixed Beds". *XIIème Congrès de la Société Française de Génie des Procédés (SFGP2009)* Publicado en Récents Progrès en Génie des Procédés, **ISSN 2-910239-72-1**, **98**, 159.1-159.6 (2009).
- M. T. Zambon, D. Asensio, G. F. Barreto y G. D. Mazza. "Modelización de la transferencia de calor en lechos fijos de baja relación de aspecto. Análisis de la determinación de la conductividad efectiva radial". *Actas (en CD) del VI Congreso Argentino de Ingeniería Química (CAIQ' 2010)*, **ISSN 1850-3519**, trabajo completo 01E-1166 (2010).
- D. Asensio, M. Zambon, G. Barreto y G. Mazza. "Evaluación por CFD del comportamiento hidrodinámico en reactores de lecho fijo con baja relación de aspecto". *Actas del Congreso Latinoamericano de Ingeniería y Ciencias Aplicadas (CLICAP)*, **ISBN 978-987-575-196-4**, San Rafael, Mendoza, Argentina, Trabajos completos CD, TCQ29, pp. 1-7 (2012).

CAPITULO 2

REACTORES DE LECHO FIJO - DESCRIPCIÓN Y MODELOS

2.1 Introducción

2.2 Modelado de reactores catalíticos de lecho fijo

2.2.1 Modelos unidimensionales y bidimensionales - Formulación

2.3 Discusión acerca del modelo S2D y sus parámetros de transferencia de calor

2.4 Modelos bidimensionales de dos zonas

2.5 Conclusiones del capítulo

CAPITULO 2

REACTORES DE LECHO FIJO - DESCRIPCIÓN Y MODELOS

2.1.- Introducción

El reactor de lecho fijo es, en general, el tipo de reactor más utilizado en la industria de procesos. En los casos en que la corriente de fluido corresponde a un gas y en el proceso no se genera una desactivación rápida del catalizador, el lecho fijo es la opción primaria como reactor. Si bien el RLF puede incluir más de una fase fluida en su concepción y operación, en esta tesis doctoral se circunscribe el tratamiento al caso en que se emplee una única fase fluida.

Un lecho fijo, como se ha mencionado, está constituido por un relleno compacto e inmóvil de pastillas de sólido (catalizador en el caso de reactores catalíticos) ubicado en el interior de un recipiente, generalmente vertical. Las pastillas de catalizador poseen un diámetro equivalente generalmente comprendido entre 1 y 5 mm. Los RLF poseen sencillez en relación a la construcción, particularmente en cuanto a sus características mecánicas por la ausencia de elementos móviles.

La transferencia de calor con el medio externo constituye un aspecto fundamental en el modelado de RLF. En tal contexto, se pueden diferenciar, esencialmente, dos formas de operación: operación adiabática y operación no-adiabática. En la tabla 2.1 se resumen operaciones típicas en RLF, las situaciones en las que las mismas deben ser aplicadas y algunos ejemplos pertinentes.

La alternativa que más se aplica en la industria de procesos, cuando ello es factible, es la del lecho fijo adiabático (figura 2.1a) debido a su mayor simplicidad. En el uso de lechos adiabáticos, se instalan, generalmente, disposiciones multilecho con intercambio de calor entre etapas (con fluido independiente) o inyección de alimentación fría entre etapas (*quenching*). Este intercambio de calor entre etapas es particularmente imprescindible a fin de alejar la operación de la curva de equilibrio químico, limitante de los niveles de conversión alcanzables. Cuando se realiza el intercambio de calor mencionado, la mezcla de corrientes debe realizarse en recintos de mezcla que presenten adecuada turbulencia, a fin de reingresar al sistema con temperatura uniforme en la corriente. Especial atención merece la temperatura de alimentación de la corriente de reactivos, en acuerdo a la diferencia de temperatura

esperable en todo el lecho: el nivel térmico impuesto a la alimentación deberá ser adecuado para que la reacción comience a producirse.

Identificación	Situaciones para su utilización	Aplicaciones típicas
Lecho fijo adiabático único	Reacciones químicas con efecto térmico asociado moderado (exo o endotérmicas) y no limitadas por el equilibrio químico.	<ul style="list-style-type: none"> • Hidrogenaciones moderadas
Lechos adiabáticos en serie con enfriamiento o calentamiento intermedio	Reacciones químicas limitadas por la posición del equilibrio químico en las que se requiera una conversión elevada.	<ul style="list-style-type: none"> • Oxidación de SO₂ • Reformado de naftas
Reactor multitubular no-adiabático	Reacciones químicas de elevado efecto térmico (preferentemente exotérmicas). Se requiere un control apropiado de temperatura para asegurar alta selectividad	<ul style="list-style-type: none"> • Hidrogenaciones • Oxidaciones parciales
Reactor no-adiabático con calentamiento directo en zona de horno	Reacciones de considerable endotermicidad, elevada temperatura de reacción requerida	<ul style="list-style-type: none"> • Reformado de gas natural

Tabla 2.1: Reactores de lecho fijo y aplicaciones típicas.

Reactores con intercambio de calor por la pared

Cuando es necesario transferir calor simultáneamente a la ocurrencia de la reacción química, la tecnología más frecuente es la del denominado reactor multitubular (figura 2.1b). En este caso, el catalizador se ubica en un conjunto de tubos, colocados en paralelo y en contacto con un fluido que permite la transferencia de calor. Este fluido puede ser el mismo que contiene la mezcla de reactivos e ingresará luego a la zona de reacción del lecho catalítico. En este caso se utilizará el calor generado por el sistema reactivo (exotérmico) para precalentar la corriente de reactivos y se está en presencia del denominado reactor multitubular autotérmico.

Los reactores tubulares con intercambio de calor por la pared del tipo multitubular constan de tubos que, en la práctica, no superan un diámetro de 50 mm. Su

construcción mecánica es compleja, fundamentalmente cuando los tubos se instalan en un horno, como en el caso de reactores de reformado de gas natural. Con respecto a la fluidodinámica, los reactores multitubulares presentan un problema particular, consistente en la carga de catalizador de cada tubo, que debe ser idéntica, a fin de garantizar el mismo caudal en cada uno de ellos.

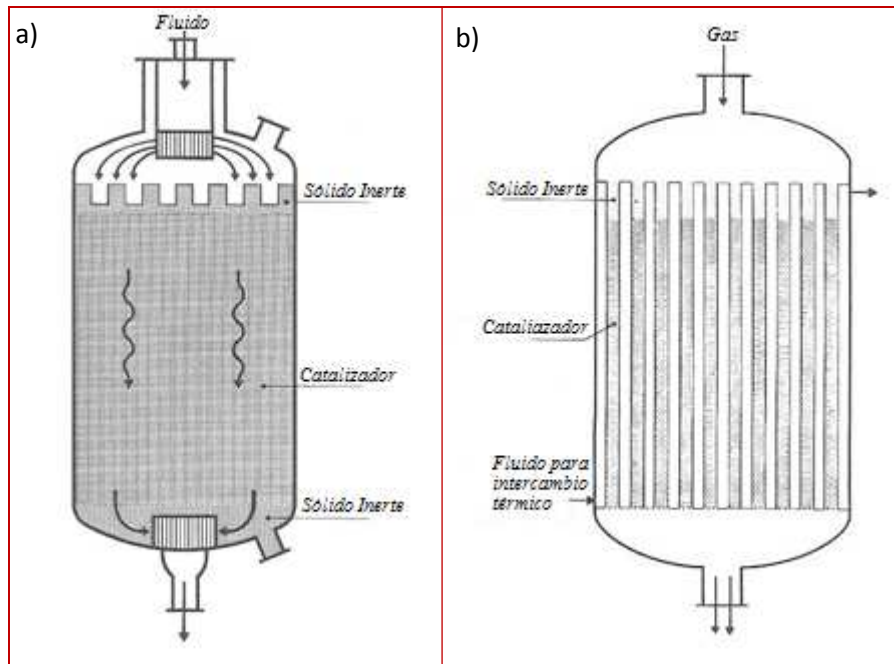


Figura 2.1: a) Esquema de un reactor catalítico adiabático monofásico b) Esquema de un reactor multitubular de lecho fijo monofásico (Trambouze y col., 1984).

El planteo y resolución de modelos es un aspecto de vital importancia en el diseño de reactores multitubulares, como también el chequeo del funcionamiento de unidades existentes. En tal sentido, a fin de contextualizar el objetivo general de la presente tesis doctoral, en la sección 2.2 se describirán diferentes modelos para representar el comportamiento de los reactores catalíticos de lecho fijo de flujo axial (la corriente de fluido se desplaza en el sentido del eje principal del tubo).

En la sección 2.3 se analiza la relevancia de los parámetros de transferencia de calor del modelo *estándar bi dimensional* (S2D). Con el propósito de una mejor descripción conceptual del mecanismo de transferencia de calor, en la sección 2.4 se introducirá una primera descripción de modelos denominados modelos bidimensionales de dos zonas, incluyendo ejemplos representativos.

2.2.- Modelado de reactores catalíticos de lecho fijo

En esta sección se describirán los aspectos principales de la formulación de modelos para reactores catalíticos de lecho fijo con intercambio de calor. En el modelado de reactores catalíticos de lecho fijo es necesario considerar una compleja interacción de fenómenos físicos y químicos. Con el fin de comprender los diferentes aspectos que, integrados, dan lugar al modelo, es conveniente separar y estudiar en forma aislada cada uno de los mecanismos. Es posible establecer una división en tres niveles o escalas de modelización, que se corresponden con la realidad física del sistema: escala del sitio catalítico, escala de la pastilla del catalizador y escala del lecho relleno (Barreto y Martínez, 1992).

Este trabajo apunta al desarrollo de un modelo a escala de lecho relleno de particular geometría y relación de aspecto (N). Esta escala del modelado es la que puede ser más extensamente desarrollada sin recurrir a estudios experimentales sobre el reactor y la reacción en estudio. Existe abundante información bibliográfica sobre los parámetros de transferencia de calor y materia que surgen en los diversos modelos que se pueden plantear para el análisis de esta escala. Teniendo en cuenta la posibilidad de establecer previamente un modelo para la escala del lecho actuando como reactor, se han planteado diversos modelos del mismo y se ha analizado profusamente el tema en bibliografía. En cualquier caso de análisis las otras escalas mencionadas deben ser incorporadas, dado que en este punto se pretende analizar exclusivamente la escala del lecho relleno, se considerará que las otras escalas están adecuadamente modeladas.

Cuando se desarrolla un modelo a escala del lecho fijo, se debe atender a ciertas metas esenciales que pueden sintetizarse en los objetivos reportados por Shinnar, 1978:

- ✓ un mejor conocimiento del sistema, lo cual puede conducir a lograr mejoras en el diseño del reactor.
- ✓ predicción de la dinámica del sistema para propósitos de control.
- ✓ optimización de las condiciones operativas de estado estacionario.
- ✓ análisis de la influencia de diferentes alimentaciones, catalizadores y condiciones de reacción sobre la distribución de productos.
- ✓ cambio de escala desde reactores en escala piloto a reactores industriales.

Se analizará particularmente el caso de reactores en estado estacionario, por lo tanto el análisis no será automáticamente válido para establecer la dinámica del sistema

y su aplicación a control; no obstante puede servir de base para el desarrollo de un modelo que contemple la dinámica del reactor.

A fin de satisfacer las metas planteadas por [Shinnar, Hoffman, 1979](#) puntualizó algunos criterios a seguir:

- el modelo no debe ser más detallado que lo absolutamente necesario para el propósito particular para el cual se desarrolla. Si bien es previsible que un modelo más detallado describa en forma más realista el comportamiento del reactor, también requerirá mayor información a ingresar.

- el modelo debe contener el menor número de parámetros posible, lo que minimizará la información necesaria para su resolución.

- deben existir (o desarrollarse) correlaciones confiables para estimar los parámetros del modelo seleccionado.

- la resolución matemática de las ecuaciones del modelo debe requerir el menor esfuerzo computacional compatible con la calidad y precisión de los resultados que se busque.

En función de estas pautas, se puede afirmar que un modelo no es *a priori* bueno o malo en sí mismo. Debe considerarse en relación al objetivo que se persigue. En consecuencia, las pautas mencionadas son de carácter general. La selección final con relación al modelo y su complejidad se deben contextualizar en una situación concreta.

Los modelos pueden clasificarse, en primera instancia, en determinísticos o estocásticos. Estos últimos han sido descriptos de manera escasa en la bibliografía y no han sido muy utilizados para los propósitos prácticos mencionados anteriormente. Una breve revisión de los mismos fue presentada por [Schnitzlein y Hoffman, 1987](#).

Los modelos determinísticos, a su vez, pueden agruparse en dos categorías: modelos discretos y modelos continuos. Los modelos discretos identifican una celda elemental que debe representar el comportamiento del lecho en una escala del orden del tamaño de las pastillas. Se asume que el lecho se compone ensamblando las celdas elementales. En cada una de ellas se reconoce la existencia discreta de una o más pastillas y se modela el comportamiento de las mismas y la forma de interacción con las celdas vecinas. La resolución de los balances de conservación en todas las celdas permite determinar las variables de estado en el lecho, las que debido a la naturaleza del modelo no presentan distribuciones continuas. Los modelos de celda propuestos por

Deans y Lapidus, 1960 y estudiados posteriormente por Hlavacek y Votruba, 1977 pertenecen a esta categoría.

Los modelos determinísticos continuos, han sido ampliamente estudiados y utilizados en las aplicaciones mencionadas anteriormente como objetivo del desarrollo de un modelo. Se supone que existe una distribución continua de velocidades de fluido de acuerdo a líneas paralelas al eje del tubo. Esta suposición permite que se obtenga una variación continua de las variables temperatura y composición y que el transporte de materia y energía pueda representarse mediante expresiones tipo Fick y Fourier, respectivamente. El efecto de mezclado causado por las deflexiones laterales del flujo de fluido se considera mediante la evaluación de difusividades y conductividades térmicas efectivas del lecho (a veces denominados coeficientes de dispersión).

En este trabajo, se restringirá el análisis a modelos determinísticos. Los modelos continuos más simples se basan en considerar valores de temperatura y concentración promediados en cada sección transversal del lecho. En ellos, la transferencia de calor hacia (o desde) la pared del tubo se cuantifica mediante coeficientes globales de transferencia de calor que pueden agrupar los efectos de los mecanismos de transporte que operan a través del lecho, mientras que la velocidad de reacción se evalúa en los valores promedio de temperatura y concentración. Los balances de materia y energía se formulan mediante ecuaciones de variación axial de concentración y temperatura, arrojando los perfiles de dichas variables a lo largo de la coordenada longitudinal del reactor. Estos modelos se denominan modelos unidimensionales (1D), en los cuales se considera un perfil de velocidad radialmente plano (uniforme), ignorando el efecto de no uniformidad en la fracción de huecos. Ello arroja un mezclado total radial, para dar lugar a los perfiles exclusivamente axiales de las variables principales.

Alternativamente, los modelos continuos que predicen los perfiles axiales y radiales de composición y temperatura, se conocen como modelos bidimensionales (2D). En los modelos bidimensionales *clásicos* se supone que el perfil de velocidad y los coeficientes de dispersión térmica y de materia son radialmente constantes, pero se introducen parámetros de resistencia térmica en la pared del tubo que tienden a compensar dicha suposición.

Este trabajo se orienta a la modelización de reactores catalíticos multitubulares industriales con fuertes efectos exotérmicos, en la condición de estado estacionario, concentrando la atención en el caso en que el fluido que contiene la mezcla reactiva es un gas. Para este tipo de unidades, los valores del número de Reynolds son

relativamente elevados y un rango razonable es $100 < Re < 1000$. Es necesario también mantener una caída de presión relativamente baja, así como una buena transferencia de calor, por lo cual surgen limitaciones en las relaciones geométricas y condiciones operativas del reactor.

Los modelos bidimensionales (2D) tienen en cuenta la mayoría de los efectos significativos que se esperan en los mencionados reactores, pero no es posible garantizar que los parámetros efectivos sean estimados adecuadamente. En particular el efecto de no uniformidad del lecho en el rango de condiciones mencionadas anteriormente y en particular para bajas relaciones de aspecto.

A partir de las restricciones mencionadas, se discutirán algunos aspectos relativos en el uso de los modelos. A las descripciones que anteceden, debe sumarse la potencial discriminación de los campos de composición y/o temperatura entre fases. Esta opción llevará a una nueva distinción entre categorías de cada modelo 1D o 2D: la mención a modelos pseudohomogéneo o heterogéneo. Finalmente, es necesario discutir, junto a la aplicabilidad del modelo elegido, la potencial estimación de los parámetros que el mismo requiera, así como la incertidumbre en el uso de correlaciones existentes.

A lo largo de esta tesis se considerará que existe una única reacción catalítica y que la composición del sistema puede establecerse en función de la concentración molar C de una especie clave y de relaciones estequiométricas. Además, sin pérdida de generalidades se tomará un coeficiente estequiométrico (-1) para la especie clave. Este enfoque se adopta a fin de simplificar la formulación de los modelos de reactores catalíticos multitubulares. Sin embargo, los modelos que se describirán no están restringidos a esta suposición y pueden extenderse sin dificultad incluyendo las ecuaciones de conservación para un número mayor de especies, como resulta necesario en el caso de reacciones múltiples.

2.2.1.- Modelos unidimensionales y bidimensionales - Formulación

El modelo bidimensional clásico más detallado tiene en cuenta los perfiles radiales de temperatura y concentración, y diferencia los campos de las variables de estado en las fases sólida y fluida, que se supone se comportan como medios continuos. El intercambio de calor y masa entre las fases sólida y fluida se representa a través de los coeficientes de transferencia de calor y masa (h_{fs}, α_{fs}) que se basan en la fuerza impulsora definida por la diferencia entre los valores locales de la temperatura en el gas y concentración molar de la especie clave en el gas (T, C) y sobre la superficie de la

partícula (T^s, C^s). Los efectos de dispersión radial son evaluados por separado en ambas fases ($\lambda_{ef}, \lambda_{es}, D_e$) con excepción de la masa en la fase sólida que se desprecia debido a que el mecanismo de transferencia de materia dentro de los poros de las partículas es lento. Se introduce una resistencia a la transferencia de calor en la pared para ambas fases que se cuantifica a través de los coeficientes de transferencia de calor h_{wf} y h_{ws} .

En esta tesis el modelo mencionado se referirá como **modelo bidimensional heterogéneo (2H)** (Olbrich, 1970 ; de Wash y Froment, 1971). En la forma general de este modelo, se introducen también, los términos de dispersión en la dirección axial. No obstante, en este trabajo no serán incluidos debido a que estos efectos tienen alcance despreciable en las condiciones de operación para los reactores industriales considerados (Young y Finlayson, 1973; Mears, 1976 ; Hofmann, 1979 , Odendaal y col., 1987). Se debe notar que los términos de dispersión axial modifican la estructura de las ecuaciones de conservación, generando la necesidad de un esfuerzo significativo en la resolución numérica. Las ecuaciones de conservación para el modelo 2H se resumen en la tabla 2.2, junto a las correspondientes condiciones iniciales y de contorno.

En la tabla 2.2 r_e es la velocidad de reacción efectiva, ecuación 2.1

$$r_e = \eta r^s \quad (2.1)$$

donde r^s es la velocidad de reacción por unidad de volumen de catalizador en las condiciones de concentración y temperatura (C^s y T^s) de la superficie externa de las pastillas y η es el factor de efectividad interno. El mismo podrá contemplar eventuales variaciones de temperatura en el interior de las pastillas. Se desprende que $r_e = r_e(C^s, T^s)$. Las ecuaciones de la tabla 2.2 se completan con $\alpha_{fs} a_v (C - C^s) = (1 - \varepsilon) r_e(C^s, T^s)$ para la evaluación de C^s .

Se puede obtener una simplificación del modelo 2H al despreciar la diferencia de temperatura entre la fase sólida y fluida ($T^s = T$). En este caso $\alpha_{fs} a_v (C - C^s) = (1 - \varepsilon) r_e(C^s, T)$ proporciona el valor de C^s . Surge, en este contexto, el usualmente llamado **modelo bidimensional pseudohomogéneo (2P)**. Las ecuaciones de conservación se obtienen a partir de las ecuaciones del modelo 2H considerando que el coeficiente $h_{fs} \rightarrow \infty$ y adicionando los parámetros térmicos, $h_w = h_{wf} + h_{ws}$, $\lambda_e = \lambda_{ef} + \lambda_{es}$. En muchas situaciones prácticas no puede asegurarse que el modelo 2H proporcione mejor acercamiento a la realidad que el modelo 2P, razón por la cual este último ha sido el modelo más utilizado en la bibliografía toda vez que sea necesario

considerar perfiles radiales de temperatura. Por esta razón, nos referiremos al modelo 2P como modelo *estándar bi-dimensional (S2D)*.

Balances de materia y energía MODELO 2H	
$G \frac{\partial (C / \delta_f)}{\partial z} = \frac{D_e \partial (\rho \partial C / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} - (1 - \varepsilon) r_e (C^s, T^s)$	2.2
$G c_{pf} \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\lambda_{ef} \partial (\rho \partial T / \partial \rho)}{\partial \rho} - h_{fs} a_v (T - T^s)$	2.3
$h_{fs} a_v (T^s - T) = \frac{\lambda_{es} \partial (\rho \partial T^s / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + (-\Delta H) (1 - \varepsilon) r_e (C^s, T^s)$	2.4
<i>Condiciones de borde</i>	
$C = C_o \quad T = T_o \quad \text{en } z = 0 \quad \forall \rho$	2.5
$\frac{\partial C}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} = \frac{\partial T^s}{\partial \rho} = 0 \quad \text{en } \rho = 0 \quad \forall z$	2.6
$\frac{\partial C}{\partial \rho} = 0, \quad -\lambda_{ef} \frac{\partial T}{\partial \rho} = h_{wf} (T - T_w),$	2.7
$-\lambda_{es} \frac{\partial T^s}{\partial \rho} = h_{ws} (T^s - T_w) \quad \text{en } \rho = R_t$	

Tabla 2.2.: Balances de materia y energía del modelo 2H (reacción única).

En la tabla 2.3 se presentan los balances de materia y energía, junto a las condiciones de contorno necesarias para cada ecuación diferencial, una en la dirección axial y dos en dirección radial (ecuaciones 2.10, 2.11, 2.12).

Los modelos unidimensionales (1D) se desarrollan bajo la hipótesis de la no existencia de gradientes radiales de temperatura y concentración, es decir, aunque varían en la dirección axial, para cada posición axial del reactor se considera un único valor de temperatura y concentración. Las versiones unidimensionales de los modelos 2H y 2P se denominan modelo unidimensional heterogéneo (1H) y pseudohomogéneo (1P), respectivamente.

Balances de materia y energía MODELO 2P (S2D)	
$G \frac{\partial (C / \delta_f)}{\partial z} = \frac{D_e (\rho \partial C / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} - (1 - \varepsilon) r_e (C^s, T)$	2.8
$G c_{pf} \frac{dT}{dz} = \frac{\lambda_e \partial (\rho \partial T / \partial \rho)}{\partial \rho} + (-\Delta H)(1 - \varepsilon) r_e (C^s, T)$	2.9
<i>Condiciones de borde</i>	
$C = C_o \quad T = T_o \quad \text{en } z = 0 \quad \forall \rho$	2.10
$\frac{\partial C}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} = 0 \quad T = T_o \quad \text{en } \rho = 0 \quad \forall z$	2.11
$\frac{\partial C}{\partial \rho} = 0 \quad -\lambda_e \frac{\partial T}{\partial \rho} = h_w (T - T_w) \quad \text{en } \rho = R_t \quad \forall z$	2.12

Tabla 2.3.: Balances de materia y energía del modelo 2P (reacción única).

Las ecuaciones del modelo 1H (Pereira Duarte y col., 1984) se presentan en la tabla 2.4. Se puede observar que en este modelo se deben estimar los coeficientes de transferencia de calor (hacia la pared) del sólido y del fluido y los coeficientes de transferencia de calor y materia sólido-fluido. Si bien el modelo está representado por ecuaciones diferenciales ordinarias, al considerar la diferencia de temperatura y concentración entre las fases es necesario resolver, en adición, ecuaciones algebraicas no lineales en cada altura del lecho. Además, $\alpha_{fs} a_v (\bar{C} - \bar{C}^s) = (1 - \varepsilon) r_e (\bar{C}^s, \bar{T}^s)$, mientras que h_{wf}^G y h_{ws}^G son coeficientes de transferencia globales entre el fluido y la pared y entre el sólido y la pared.

Balances de materia y energía MODELO 1H	
$G \frac{\partial (\bar{C} / \delta_f)}{\partial z} = -(1 - \varepsilon) r_e (\bar{C}^s, \bar{T}^s)$	2.13
$G c_{pf} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} = -\frac{2h_{wf}^G}{R_t} (\bar{T} - T_w) - h_{fs} a_v (\bar{T} - \bar{T}^s)$	2.14
$h_{fs} a_v (\bar{T}^s - \bar{T}) = -\frac{2h_{ws}^G}{R_t} (\bar{T}^s - T_w) + (-\Delta H)(1 - \varepsilon) r_e (\bar{C}^s, \bar{T}^s)$	2.15
<i>Condiciones de borde</i>	
$\bar{C} = \bar{C}_o \quad \bar{T} = \bar{T}_o \quad \text{en } z = 0$	2.16

Tabla 2.4.: Balances de materia y energía del modelo 1H (reacción única).

Finalmente, se puede mencionar el **modelo pseudo-homogéneo unidimensional (1P)**, el cuál describe una única temperatura \bar{T} para ambas fases, sólida y fluida. Este modelo resulta del 1H suponiendo que $h_{fs} \rightarrow \infty$, adicionando los coeficientes de transferencia con la pared, $h_w^G = h_{wf}^G + h_{ws}^G$ y, además $\alpha_{fs} a_v (\bar{C} - \bar{C}^s) = (1 - \varepsilon) reCs, T$. El modelo 1P es el más sencillo de las alternativas analizadas. En la tabla 2.5 se presentan las ecuaciones de balance de materia y energía, así como las condiciones de borde necesarias.

Balances de materia y energía MODELO 1P	
$G \frac{\partial (\bar{C} / \delta_f)}{\partial z} = -(1 - \varepsilon) r_e (\bar{C}^s, \bar{T})$	2.17
$G c_{pf} \frac{d\bar{T}}{dz} = -\frac{2h_w^G}{R_t} (\bar{T} - T_w) + (-\Delta H)(1 - \varepsilon) r_e (\bar{C}^s, \bar{T})$	2.18
<i>Condiciones de borde</i>	
$\bar{C} = \bar{C}_o \quad \bar{T} = \bar{T}_o \quad \text{en } z = 0$	2.19

Tabla 2.5.: Balances de materia y energía del modelo 1P (reacción única).

De los cuatro modelos descritos precedentemente, es evidente que el modelo 2H proporciona la descripción más detallada de los fenómenos ocurrientes en un reactor catalítico de lecho fijo. Desde el punto de vista de la resolución matemática de las ecuaciones de cada modelo, es también el modelo 2H el que requiere mayor tiempo y esfuerzo de computo; [Pereira Duarte y col., 1984](#) indicaron que el tiempo de cálculo para resolver las ecuaciones de los cuatro modelos varía de la progresión siguiente: $2H > 2P \gg 1H > 1P$. Esta relación sugiere la conveniencia de utilizar los modelos unidimensionales en la medida que los resultados cumplan con la precisión requerida para el propósito de la simulación.

2.3. Discusión acerca del modelo S2D y sus parámetros de transferencia de calor

Los parámetros de transferencia de calor en lechos rellenos fueron obtenidos generalmente en sistemas sin reacción química. Para estos casos, se puede recurrir a numerosos trabajos teóricos donde se busca establecer la relación más adecuada entre los parámetros básicos, (denominándose de esta manera a los parámetros

correspondientes al modelo 2H) y los parámetros propios de los restantes modelos (Dixon y Cresswell, 1979; Olbrich, 1970; Martínez y col., 1987; Lemcoff y col., 1990). En consecuencia, considerando exclusivamente la transferencia de calor, es factible a partir de la disponibilidad de correlaciones para los parámetros básicos y, a través de las relaciones apropiadamente deducidas, calcular los parámetros de los restantes modelos. Sin embargo, dado que el modelo S2D es el más empleado, en lo que sigue de esta sección se analizarán la relevancia de los parámetros térmicos empleados por el mismo, es decir, la conductividad efectiva radial λ_e y el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared h_w . Cabe enfatizar en este punto que la necesidad de introducir una resistencia localizada sobre la pared (la inversa del coeficiente h_w) resulta del hecho que los mecanismos de transferencia de calor se encuentran limitados en la cercanías de la pared, y por lo tanto se alcanza una mejor descripción de los perfiles radiales de temperatura al incluir tal resistencia térmica adicional.

Las primeras investigaciones reportadas con el fin de evaluar h_w fueron realizadas por Coverly y Marshall, 1951 y Brötz, 1951. Desde entonces, se han llevado a cabo numerosos esfuerzos para medir y correlacionar ambos parámetros, λ_e y h_w (debe notarse que estos parámetros térmicos encierran la contribución de las partículas y del fluido o, equivalentemente, las contribuciones estanca y convectiva). Algunas referencias relevantes en la estimación de λ_e y h_w han sido recientemente discutidas por Dixon, 2012. Aunque la necesidad de introducir h_w puede justificarse, en principio, por la existencia de una película de fluido en contacto con la pared, se ha reconocido que surgen efectos adicionales resultantes del arreglo de las partículas cerca de la pared. De esta manera, se puede identificar un estrato de partículas considerablemente ordenadas, (en particular para partículas esféricas de un único tamaño), posicionado sobre la superficie de la pared.

El efecto de ordenamiento de la pared se ve atenuado cuando se desplaza el observador desde la pared del tubo hacia el interior del lecho, hasta alcanzar un empaquetamiento virtualmente al azar, como puede apreciarse en la figura 2.2 en términos del perfil de porosidad $\varepsilon(y^*)$ siendo y^* la distancia desde la pared, medida en unidades de D_p , a partir de datos experimentales de Mueller, 1993 y también a partir de las simulaciones de la estructura de un lecho fijo (línea continua) llevada a cabo por Salvat y col., 2005a. En la figura 2.3 se pueden observar perfiles de velocidades superficiales axiales $u(y^*)$ que acompañan la variación de porosidad. Estos perfiles de

velocidad se obtuvieron, en este caso, a partir de los datos experimentales de Giese y col., 1998. La velocidad superficial axial $u(y^*)$ sigue aproximadamente una onda atenuada que define $\varepsilon(y^*)$, con la existencia de un máximo absoluto en la adyacencia de la pared.

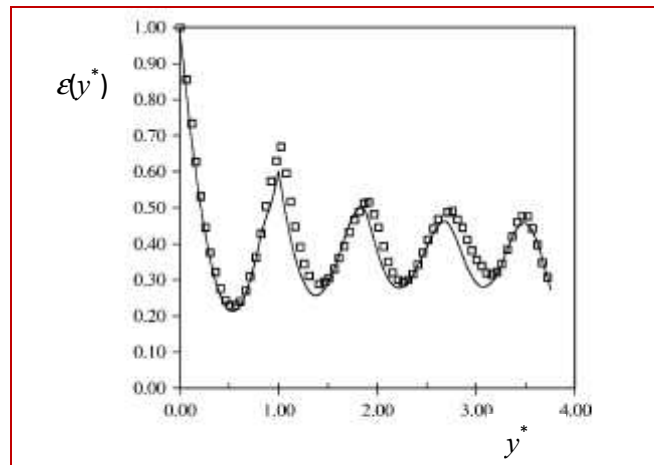


Figura 2.2: Perfiles de porosidad experimental (símbolos, Mueller, 1993) y predichos (curva continua, Salvat y col., 2005a) para relación de aspecto $N = 7.99$.

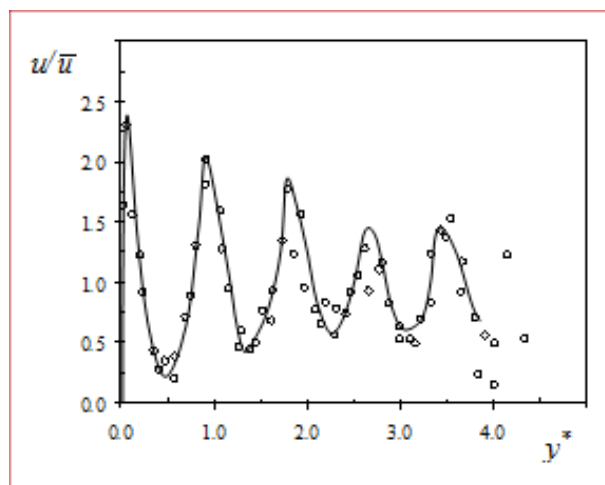


Figura 2.3: Perfil de velocidad superficial axial local medido por Giese y col., 1998 para $Re_p=532$ y $N=9.3$. La línea continua es una curva de tendencia.

El ordenamiento de las partículas adyacentes a la pared, así como las variaciones inducidas en el campo de velocidad, dificultan la acción de los mecanismos de transferencia de calor radial, dando origen a resistencias localizadas a lo largo de una distancia finita desde la superficie de la pared del tubo hacia el interior, que se adicionan a la impuesta por la película de fluido individualizada contra la superficie de la pared.

En el modelo S2D, todos estos efectos están considerados en el valor del coeficiente h_w y, en consecuencia, su evaluación se torna fuertemente dependiente de

las técnicas específicas de medidas y de las condiciones experimentales, que de hecho provocan la dispersión general de resultados. Solamente para valores altos del números de Reynolds Re_p los efectos del film de fluido son dominantes y Nu_w (el correspondiente número de Nusselt para h_w) puede ser correlacionado razonablemente con Re_p (véase, por ejemplo el trabajo de Tsostas y Schlünder, 1990), pero los datos poseen una fuerte dispersión para valores de Re_p moderados o bajos (menor que 500, aproximadamente), como por ejemplo se pone de manifiesto en el trabajo de Li y Finlayson, 1977, cuando los diferentes efectos actúan simultáneamente sobre Nu_w .

La mencionada dispersión en los datos de Nu_w ha causado controversia acerca de la utilidad del modelo S2D. De acuerdo a lo reportado por algunos autores, (principalmente la opinión de Tsotsas y Schlünder, 1990), el modelo S2D y el uso de h_w debe ser abandonado y sustituido por modelos basados en conductividad térmica efectiva variable en sentido radial. Por otro lado, otros investigadores consideran que los esfuerzos que conducen a obtener resultados experimentales rigurosamente medidos y adecuada evaluación de los mecanismos que agrupa y cuantifica el valor del coeficiente h_w , harían posible el desarrollo de correlaciones apropiadas para Nu_w como afirmó recientemente Dixon en su trabajo de revisión (Dixon, 2012).

Sobre la base de partir de valores de λ_e y h_w correctamente evaluados, el modelo S2D podrá predecir correctamente el flujo de calor hacia (o desde) la pared, cuando el lecho fijo opera estrictamente como un intercambiador de calor (sin efectos de calor asociados a la reacción química), aun cuando el perfil de temperatura en la zona adyacente a la pared no pueda ser evaluado con precisión. Sin embargo, cuando se desea simular un reactor catalítico, el perfil de temperatura ve incrementada su significación, por cuanto el intercambio de calor que debe tener lugar es la consecuencia de los requerimientos de eliminar o aportar calor impuestos por la reacción química, más que un proceso de calentamiento o enfriamiento de la corriente fluida.

Siguiendo el propósito de conseguir una mejor descripción conceptual del mecanismo de transferencia de calor o motivados por las limitaciones del modelo S2D en relación a la simulación de reactores catalíticos de lecho fijo, surgieron varios modelos en la literatura, intentando desacoplar los efectos agrupados en el parámetro h_w del modelo S2D. Estos modelos serán denominados modelos bidimensionales de dos

zonas. En la siguiente sección de este capítulo se incluyen ejemplos representativos y breves descripciones de los mismos.

2.4.- Modelos bidimensionales de dos zonas

Los modelos bidimensionales de dos zonas intentan desacoplar los efectos agrupados en el parámetro h_w del modelo S2D. Con este fin, se distribuyen los efectos sobre una pequeña porción de la sección transversal del mismo, que se denominará región de pared. El resto del lecho, hasta el eje del lecho, se define como región central, cuyo comportamiento térmico se modela apelando a propiedades uniformes, en forma análoga a la que se estipula en la formulación del modelo S2D. En tal sentido, se puede mencionar una excepción a esta descripción general, dada por la formulación de dos zonas propuesta por [Ahmed y Fahien, 1980](#) que considera un valor de conductividad efectiva térmica variable radialmente en la región central.

A continuación se mencionan y comentan brevemente las principales características de algunos modelos de dos zonas reportados en la literatura, en adición al modelo mencionado de [Ahmed y Fahien, 1980](#). La tabla 2.6 sintetiza las principales características de diferentes modelos bidimensionales de dos zonas presentados en la literatura. El subíndice "c" empleado en la tabla 2.6 para la conductividades efectivas indica el valor correspondiente a la zona central.

El modelo de [Legawiec y Ziólkowski, 1995](#) diferencia los campos de temperatura de partículas y fluido, constituyendo un modelo heterogéneo. Si bien este modelo emplea una diversidad de parámetros que lo hacen de difícil aplicación, la distinción de temperatura entre las fases es una característica deseable, ya que se pueden esperar diferencias significativas de temperaturas en la región adyacente a la pared (aun sin reacciones catalíticas), como una consecuencia de la presencia de una fuente/sumidero de calor representada por la pared y también de las diferencias en las capacidades de transferencia de calor de ambas fases. Los cálculos reportados por [Magnico, 2009](#), realizados con CFD muestran claramente estas diferencias.

En los restantes modelos de dos zonas que se muestran en la tabla 2.6, la conductividad efectiva se evalúa como $\lambda_e = \lambda_{e0} + \lambda_{eD}$, donde λ_{e0} es la contribución estática (sin flujo de fluido) y λ_{eD} es la contribución por dispersión, debido a la mezcla lateral de fluido.

La mayor parte de los modelos está formulada sobre la base de partículas de geometría esférica de tamaño único. Aun así, [Winterberg y col., 2000](#) proponen una formulación específica para cilindros y los enfoques de [Gunn y col., 1987](#) y [Smirnov y col., 2003](#) fueron reportados por los autores para simular experiencias con cilindros.

Los diferentes modelos reseñados en la tabla 2.6 difieren ampliamente en la descripción de las propiedades en la región de la pared, como se puede apreciar en la tabla 2.6 para los parámetros térmicos. Por otro lado, algunos modelos eliminan el uso de h_w sustituyendo y compensando su efecto mediante el empleo en la región de la pared, de una variación decreciente de λ_e hasta un valor cercano a λ_f sobre la pared. En los modelos restantes h_w se tiene en cuenta bajo la concepción de que básicamente representa el efecto de una capa delgada de fluido no mezclado en contacto con la pared. Como se puede apreciar en la tabla 2.6, la modificación al modelo S2D propuesta por [Gunn y col., 1987](#) y [Smirnov y col., 2003](#) solo consiste en asignar una región finita a la resistencia térmica $1/h_w$.

Entre los distintos modelos no resulta factible indicar un criterio común para la definición de la región de la pared y_w^* (distancia desde la pared, en unidades de D_p , donde termina la región de pared). Para los modelos de [Gunn y col., 1987](#) y [Smirnov y col., 2003](#), y_w^* puede ser asignada a la extensión cubierta por $1/h_w$ definida por ajuste de datos experimentales. Para los modelos restantes y_w^* puede definirse como el espesor de las regiones en donde se admite la variación de la conductividad efectiva radial. En este sentido, surge un rango para y_w^* resultando: $0.25 < y_w^* < 3.5$ (tabla 2.6)

Por otro lado, los modelos bidimensionales de dos zonas listados en la tabla 2.6 adoptan diferentes valores de porosidad y velocidad superficial en la región de la pared (variando continuamente o manteniéndose constante por tramos), con excepciones correspondientes a los enfoques ya señalados de [Gunn y col., 1987](#) y [Smirnov y col., 2003](#).

A pesar de las diferencias entre sí, los modelos en la tabla 2.6 describen los perfiles de temperatura en forma más apropiada que el modelo S2D- como puede constatarse en las publicaciones originales- para experiencias de transferencia de calor sin reacción química. Por lo tanto, la tendencia induce a pensar que las predicciones de perfiles de temperatura en las cercanías de la pared del tubo se pueden mejorar si se establece una razonable distribución espacial de la resistencia térmica. Únicamente los modelos de [Ahmed y Fahien, 1980](#) y [Winterberg y col., 2000](#) fueron utilizados por los

autores para simular un número limitado de pruebas experimentales bajo condiciones de reacción catalítica.

Referencia	Parámetros de transferencia de calor radial en la región de pared	Extensión de la región de pared
Botterill y Denloye (1978)	$1/h_w$ (concentrado), λ_e uniforme	$y_w^* = 1/2$ (espesor para alcanzar $\lambda_{e,c}$)
Ahmed y Fahien (1980)	perfil lineal $\lambda_e(y^*)$ entre $\sim\lambda_f$ y $\lambda_{e,c}$.	$y_w^* = 2$ [$\lambda_e(y^*)$ alcanza $\lambda_{e,c}$]
Gunn y col. (1987)	$1/h_w$ (cubriendo una distancia finita y_w^* desde la pared).	$y_w^* = 0.3$
Borkink y Westerterp (1994)	$1/h_w$ (concentrada), λ_e uniforme	$3/4 < y_w^* (N) < 5/4$ (espesor para alcanzar $\lambda_{e,c}$)
Legawiec y Ziólkowski (1995)	<i>Fluido</i> : $1/h_{wf}$ (concentrado), λ_{ef} constante por tramos en 4 sub-regiones. <i>Sólido</i> : conducción en tres capas de partículas de espesor D_p y resistencia de filetes gaseosos entre ellas .	$y_w^* = 3.5$ (para usar $\lambda_{ef,c}$) $y_w^* = 3.0$ (comienza usando $\lambda_{es,c}$)
Winterberg y col. (2000)	$\lambda_e(y^*) = \lambda_{e0}(\mathcal{E}(y^*)) + \lambda_{eD}(y^*)$, perfil cuadrático $\lambda_{eD}(y^*)$, entre 0 y $\lambda_{eD,c}$.	$y_w^* = 2$ ($Re_p=66$) $y_w^* \approx 0.44$ ($Re_p > 500$) [$\lambda_{eD}(y^*)$ dada por $\lambda_{eD,c}$] $y_w^* \approx 1$ [$\lambda_{e0}(\mathcal{E}(y^*))$ dada por $\lambda_{e0,c}$]
Smirnov y col. (2003)	$1/h_w$ (cubriendo una distancia finita y_w^* desde la pared).	$y_w^* = 0.25$

Tabla 2.6: Principales características de modelos bidimensionales de dos zonas propuestos en la literatura.

2.5.- Conclusiones del capítulo

En este capítulo se presentó un panorama descriptivo de las principales características de los reactores de lecho fijo, particularmente de los reactores gas-sólido catalíticos. Posteriormente, con el fin de contextualizar el trabajo de modelado que constituye el eje de la presente tesis, se incluyó una síntesis de los principales enfoques y modelos que se pueden utilizar en el modelado de reactores catalíticos de lecho fijo. Se analizaron criterios y metas a considerar en el momento de seleccionar un modelo apropiado, junto con la clasificación de los mismos.

Se describieron las bases que conducen a las diferentes categorías de la clasificación de modelos unidimensionales, bidimensionales, heterogéneos, pseudohomogéneos, así como las formulaciones de los modelos bidimensionales y unidimensionales. Se consideraron las características heterogéneas y homogéneas de cada modelo a partir de las cuales se resumieron las ecuaciones de conservación (tablas 2.2-2.5), junto con las condiciones iniciales y de contorno para cada caso.

Luego se analizaron ciertas limitaciones de los modelos clásicos, particularmente del modelo S2D, que condujeron a proponer modelos que modifican al S2D mediante la identificación de dos zonas para describir el comportamiento del lecho. De esta manera, tales modelos evitan localizar la resistencia térmica adicional sobre la pared, permitiendo que la misma se manifieste en una zona de espesor finito, del orden del tamaño de la pastilla, mientras que el resto del lecho (zona central) se describe con un valor apropiado de la conductividad efectiva.

CAPITULO 3

MODELO DE DOS ZONAS PROPUESTO (2R2D)

3.1 Introducción

3.2 Formulación del modelo 2R2D propuesto

3.2.1 Distribución de partículas y flujo de fluido en la sección transversal del lecho

3.2.2 Ecuaciones de conservación de calor y masa

3.2.3 Discusión sobre las principales suposiciones y parámetros térmicos introducidos en el modelo propuesto

3.3 Conclusiones del capítulo

Apéndice 3.1

Reformulación del modelo propuesto 2R2D introduciendo canales centrales interiores y exteriores

Apéndice 3.2

Transferencia de calor en la primera capa de partículas, evaluación de los coeficientes h_s , h_{ws} y h_{sL}

CAPITULO 3

MODELO DE DOS ZONAS PROPUESTO (2R2D)

3.1.- Introducción

El principal objetivo de este capítulo es presentar un nuevo modelo heterogéneo de dos zonas, que será identificado como modelo 2R2D para lechos rellenos de partículas esféricas catalíticas de tamaño uniforme. El modelo ha sido concebido a fin de permitir la corrección de las deficiencias más significativas del modelo S2D (capítulo 2) provocadas por la presencia de resistencias térmicas considerables localizadas en la zona adyacente a la pared y por el elevado ordenamiento de la capa de partículas sobre la misma (primera capa de partículas). Como se ilustra en la figura 3.1, la pared del recipiente ejerce un efecto ordenador, por lo que las pastillas esféricas se acomodan formando una capa adyacente a la pared con sus centros muy aproximadamente ubicados a una distancia $D_p/2$. Es decir, prácticamente todas las esferas tocan la pared. Este estrato altamente ordenado induce que se forme un segundo estrato, aunque más imperfecto. La identificación de estratos más internos es cada vez más difícil y a distancias superiores a 4-5 D_p puede considerarse que se alcanza un lecho "al azar".

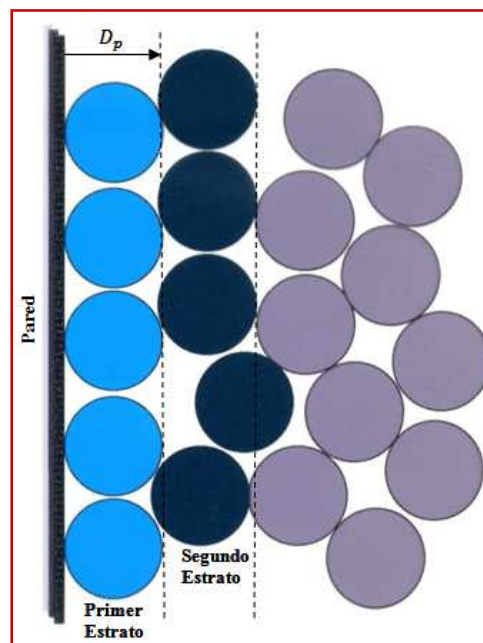


Figura 3.1: Representación esquemática del ordenamiento de las pastillas en diferentes estratos con respecto a la pared.

Sobre esta base, se identifican dos canales de flujo del fluido, con una frontera establecida en una distancia $D_p/2$ de la pared, es decir $y^* = 1/2$ posición donde calor y materia experimentan ostensibles resistencias para su transporte radial.

El modelo 2R2D reconoce campos diferenciados de temperatura en la fase sólida y en la fase fluida (característica heterogénea). Su formulación ha sido realizada considerando pastillas catalíticas de geometría esférica de diámetro uniforme D_p en un recipiente de diámetro D_t .

Considerando que la conducción de calor a través de las partículas sólidas es relativamente rápida, las principales resistencias para la transferencia de calor a través de la primera capa de partículas son causadas por filetes delgados de fluido que rodean el punto de contacto de cada partícula con la pared y los puntos de contacto con partículas interiores. Luego, resulta razonable considerar solamente dos niveles de temperatura dentro de la capa de partículas.

La dispersión radial del fluido que contribuye al transporte de calor se anula en la pared y se restringe fuertemente alrededor de $y^* = 1/2$, donde el fluido está esencialmente confinado por partículas circundantes y consecuentemente muestra poco movimiento, como lo revelan las velocidades superficiales axiales muy bajas (acorde a lo descrito en el capítulo 2 y representado en la figura 2.3). Luego, se identifica un canal de pared para el flujo de fluido, desde la pared hasta una distancia $y^* = 1/2$, donde la temperatura promedio de mezclado de taza representará el nivel térmico del fluido, y se consideran dos resistencias térmicas concentradas: una en la pared (película de fluido no mezclado en la pared) cuantificada por $1/h_w$ y la otra en $y^* = 1/2$ cuantificada por $1/h_f$ donde h_f es el coeficiente de transferencia de calor entre el fluido en el canal de la pared y la región central adyacente.

El resto del lecho, que abarca el fluido en $y^* > 1/2$ y las partículas que no están en la primera capa, constituyen la región central, la cual se trata básicamente como en el modelo S2D. Sin embargo, se retiene una descripción heterogénea, discriminando los campos de temperatura de fluido y sólido, para guardar consistencia con la región de la pared, suponiendo que ambas, fases sólida y fluida, se compartan como un medio pseudo-continuo. En las regiones $0 < y^* < 1/2$ y $y^* > 1/2$, se adoptan diferentes valores representativos de velocidad superficial y porosidad. El modelo se formula detalladamente en la sección 3.2.

Es importante señalar las principales diferencias entre el enfoque del modelo 2R2D y la mayoría de los modelos previos de dos zonas (capítulo 2).

Ellos son:

- Considerar una descripción térmica heterogénea para las fases sólida y fluido (esta característica se comparte con el modelo de Legawiec y Ziolkowski, 1995 tabla 2.6)
- Reconocer que la contribución de la dispersión radial de fluido para la transferencia de calor presenta dos mínimos (localizados en $y^* = 0$ y en $y^* = 1/2$), sobre una distancia de $1D_p$ de la pared. En los modelos de dos zonas descritos en el capítulo 2 que discriminan esta contribución en la región de la pared se considera una tendencia decreciente hacia la pared.
- No se introducen parámetros espaciales ajustables para definir la región de la pared, porque los mecanismos de calor transferido están directamente relacionados con la estructura del lecho cerca de la pared. Se espera que esta característica facilite el desarrollo de correlaciones confiables para los parámetros de transferencia de calor.

El concepto de una resistencia térmica significativa localizada en $D_p/2$ entre el canal de la pared y el fluido en la región central ha sido empleado en algunas contribuciones previas (Mariani y col., 2003; Martin, 1978; Yagi y Kunii, 1960).

3.2.- Formulación del modelo 2R2D propuesto

El esquema que se presenta en la figura 3.2 permite describir el modelo 2R2D propuesto, en el cual, como se mencionó previamente, se adopta la geometría definida por partículas esféricas de diámetro uniforme D_p en un recipiente cilíndrico de diámetro D_t . Algunos aspectos de la formulación serán restringidos a valores de $N \geq 5$.

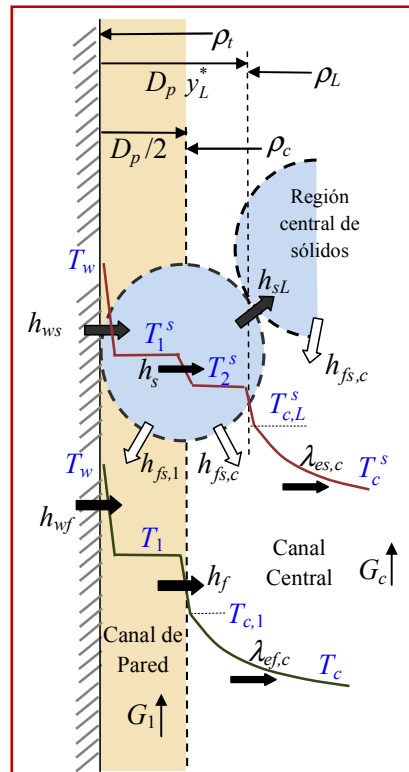


Figura 3.2: Representación esquemática de los elementos que definen el modelo 2R2D. El contorno de la partícula tocando la pared representa la primera capa de partículas. Los perfiles esquematizados de temperatura para el fluido y las partículas se grafican en diferentes niveles.

3.2.1.- Distribución de partículas y flujo de fluido en la sección transversal del lecho

La distribución de las pastillas esquematizadas en la figura 3.1 se ha confirmado cuantitativamente en estudios experimentales y de simulación de empaquetamiento que describen la distribución de los centros de partículas. En la figura 3.3 se presentan los resultados por simulación de [Salvat y col., 2005](#) para $N = 5.04$. El anillo exterior de centros de partículas perfectamente definido se ubica en $y^* = 1/2$; esencialmente todas las partículas están en contacto con la pared. Se considera que estas partículas pertenecen a la primera capa de partículas.

Cabe señalar que se observa una dispersión significativa en los centros de la segunda capa, así como algunos centros de partículas alrededor de $y^* = 1$ entre ambas capas, mientras que no se observa prácticamente ningún centro en la zona media, es decir $1/2 < y^* < 0.9$. Estos resultados concuerdan con las observaciones de [Legawiec y Ziolkowski, 1995](#), quienes además reportaron que los centros alrededor de $y^* = 1$ equivalen a aproximadamente el $\cong 10\%$ de los correspondientes a la primera capa. Estas

partículas constituyen la causa principal de ciertos defectos en la disposición espacial de la primera capa de partículas, como puede visualizarse en la figura 3.4.

En lo que resta del presente capítulo, por razones de practicidad y conveniencia, la posición radial será descrita ya sea por la distancia adimensional y^* desde la pared o por la coordenada radial ρ , considerando que $\rho = \rho_t - D_p y^*$, siendo $\rho_t = D_t/2$.

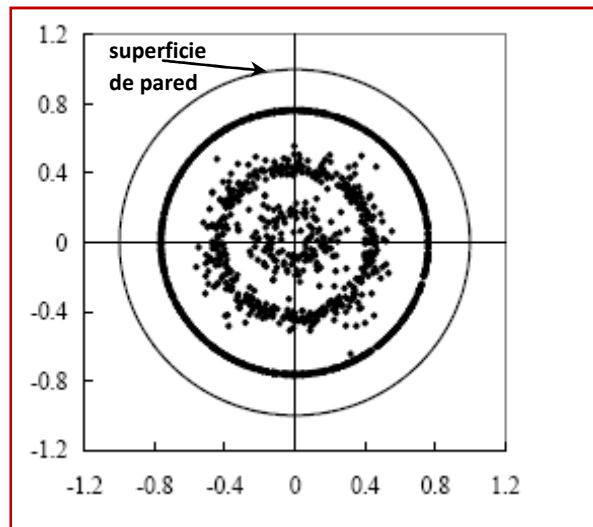


Figura 3.3: Distribución de los centros de partículas a partir de la simulación de carga del lecho mediante la utilización del algoritmo de [Salvat y col., 2005](#) con $N=5.04$. Las coordenadas cartesianas fueron normalizadas con el radio del tubo.

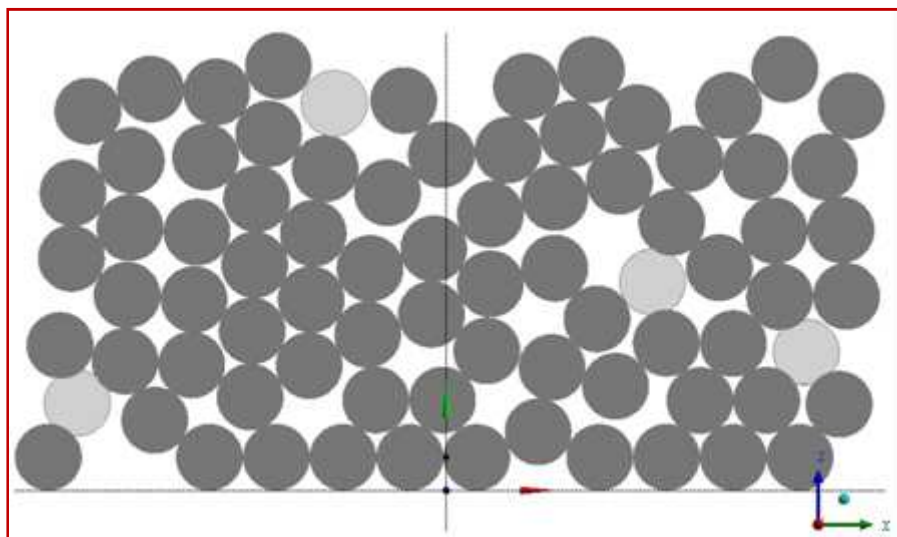


Figura 3.4: Proyección de las esferas con centros comprendidos en el intervalo $1/2 \leq y^* \leq 1$ sobre el plano $x-z$, a partir de la simulación de lecho relleno desarrollada mediante el algoritmo de [Salvat y col., 2005](#) para $N=5.04$ y altura de lecho de aproximadamente $6 D_p$. Los círculos oscuros corresponden a las esferas que tocan la pared y los círculos claros, a las esferas cuyos centros están cercanos a $y^*=1$.

El número de centros de partículas en la primera capa ($y^* = 1/2$) por unidad de área de la superficie cilíndrica de radio $\rho_c = \rho_t - D_p/2$ (ver figura 3.2) se define como *densidad superficial* n_p . De acuerdo con el análisis desarrollado por [Mariani y col., 2002](#), la densidad normalizada $n_p^* = n_p D_p^2$ es relativamente insensible a los valores de la relación de aspecto N cuando $N \geq 5$ y es muy cercana a la unidad.

La figura 3.4 es también útil para visualizar el confinamiento del fluido alrededor de la posición radial donde $y^* = 1/2$ en las aberturas que dejan las partículas de la primera capa, con movimiento de fluido muy restringido (como se detalló en el capítulo 2, sección 2.3 y se observó en la figura 2.3). El canal de la pared puede ser definido por la región entre la pared y la posición de la porosidad local mínima y_{min}^* . Para partículas que tocan la pared, y_{min}^* es ligeramente mayor que $1/2$ para pequeños N , debido a los efectos de curvatura. Por la misma razón, la fracción ω de volumen de partícula interceptadas entre la pared e y_{min}^* es algo mayor que $V_p/2$. Restringiendo la condición de análisis a valores $N > 5$, se aproximará $y_{min}^* = 1/2$ y la fracción ω en esta posición puede ser evaluada aproximadamente como

$$w = 0.5(1 + 0.3/N) \quad (3.1)$$

La porosidad promedio ε_1 en la región del canal $0 < y^* < 1/2$ ($\rho_c < \rho < \rho_t$) puede ser evaluada entonces a partir de

$$(1 - \varepsilon_1)(\rho_t^2 - \rho_c^2) = \omega n_p \left(\frac{\pi}{6} D_p^3\right) 2\rho_c \quad (3.2a)$$

En términos adimensionales,

$$(1 - \varepsilon_1)(N - 1/2) = \omega \frac{\pi}{3} n_p^* (N - 1) \quad (3.2b)$$

El promedio de velocidad másica superficial axial del fluido en el canal de la pared será denotada por G_1 . Por lo tanto, el flujo de fluido en el canal de pared será $G_1 \pi (\rho_t^2 - \rho_c^2) = G_1 (\pi/4) D_p^2 (2N - 1)$. En cuanto al flujo de fluido, de la parte restante del lecho ($y^* > 1/2$) se define como el canal central, donde el promedio de la velocidad másica superficial es G_c y la porosidad promedio ε_c . La relación G_1/G_c es un parámetro del modelo, cuya evaluación es uno de los objetivos de la presente tesis. En

los trabajos de [Bey y Eigenberger, 1997](#) y de [Giese y col., 1998](#) se informan resultados experimentales para la relación G_1/G_c que indican valores de por lo menos 1.5.

Por otro lado, ε_c se puede calcular restando el volumen de sólidos en el canal de pared del volumen total de sólidos en el lecho:

$$(1 - \varepsilon_c) \rho_c^2 = (1 - \varepsilon) \rho_t^2 - \omega n_p \left(\frac{\pi}{6} D_p^3 \right) 2 \rho_c \quad (3.3a)$$

donde ε es la porosidad promedio del lecho. Usando la ecuación 3.2a para reemplazar n_p se obtiene la siguiente relación entre las porosidades de los canales y global:

$$(1 - \varepsilon_c)(N - 1)^2 = (1 - \varepsilon)N^2 - (1 - \varepsilon_1)(2N - 1) \quad (3.3b)$$

Para valores de N y de un par de propiedades relacionadas con la distribución de partículas (por ejemplo, ε y n_p^*), las dos propiedades restantes (por ejemplo, ε_c y ε_1) se determinarán utilizando las ecuaciones 3.2b y 3.3b.

Como se ha indicado en las hipótesis del modelo, las partículas que no corresponden a la primera capa serán consideradas como una fase pseudo-continua con propiedades uniformes (región central de sólidos). Para determinar la distancia y_L^* en la que comienza la región central (ver figura 3.2), se considera que las partículas de la región central (todas, menos las de la primera capa) deben empacarse en la región $0 < \rho < \rho_L = \rho_t - D_p y_L^*$ con una fracción volumétrica $(1 - \varepsilon_c)$:

$$(1 - \varepsilon_c) \rho_L^2 = (1 - \varepsilon) \rho_t^2 - n_p \left(\frac{\pi}{6} D_p^3 \right) 2 \rho_c \quad (3.4a)$$

Alternativamente, usando la ecuación 3.2a para reemplazar n_p y expresando la ecuación en términos adimensionales

$$(1 - \varepsilon_c)(N - 2y_L^*)^2 = (1 - \varepsilon)N^2 - (1 - \varepsilon_1)(2N - 1) / \omega \quad (3.4b)$$

Los valores usuales de y_L^* obtenidos de la ecuación 3.4b están comprendidos en el intervalo 0.85 – 0.95.

Una interpretación geométrica útil de y_L^* surge considerando un lecho de valor muy alto de $N (\rightarrow \infty)$ construido a partir de capas de partículas idénticas a la primera,

que mantienen una separación uniforme L . Luego, eliminando el término en $1 - \varepsilon$ entre las ecuaciones 3.3a) y 3.4a) y adoptando $N = D_t/D_p \rightarrow \infty$ y $\omega \rightarrow 1/2$ en el resultado, se obtiene finalmente $(1 - \varepsilon_c) L/D_p = (\pi/6)n_p^*$, con $L/D_p = (2y_L^* - 1)$. Además, suponiendo que la separación entre las capas se determina por el contacto entre partículas de capas vecinas, L es también la distancia entre planos consecutivos que contienen puntos de contacto. De esta manera, se concluye que, para el caso descrito que y_L^* corresponde a la distancia desde la pared a la que las partículas de la primera capa mantienen contacto con las partículas internas. Aunque aproximada para lechos cilíndricos de N finito, esta interpretación para y_L^* es significativa, ya que la temperatura de partículas adyacentes sufre un salto alrededor del punto de contacto (debido a la presencia del filete de fluido) y por lo tanto parece ser la frontera natural entre la primera capa de partículas y la región central de sólidos.

En la figura 3.2, a ambos lados de y_L^* , se puede apreciar que pequeños casquetes esféricos de partícula de la primera capa penetran en la región central de sólidos y viceversa. Ello implica que en la región central de sólidos definida por $0 < \rho < \rho_L$ existirá una pequeña fracción volumétrica de partículas de la primera capa y en la región de lecho asignada a la primera capa, $\rho_L < \rho < \rho_t$, existirá la misma fracción de pastillas del interior del lecho. Este detalle no es contemplado por el modelo, y puede razonarse que solo tendrá un efecto sobre el intercambio de energía y materia con el fluido. Sin embargo, el efecto será a lo sumo secundario y no generará ninguna consecuencia práctica, debido al pequeño volumen de los casquetes interpenetrados.

Es conveniente destacar que en ambos intervalos, $0 < \rho < \rho_L$ (región central de sólidos) y $0 < \rho < \rho_c$ (canal central), los valores de porosidad se han supuesto iguales a ε_c . Por lo tanto, en la zona intermedia $\rho_L < \rho < \rho_c$ la porosidad tendrá también el valor ε_c .

3.2.2.-Ecuaciones de conservación de calor y masa

El comportamiento térmico en el canal de pared se describe mediante un enfoque agrupado (*lumped*) (temperatura media de mezclado de taza T_1 ; ver figura 3.2).

Se supone que la fracción de la superficie externa de las partículas en la primera capa que intercambia calor con el fluido en el canal de la pared es ω (ecuación 3.1), es decir, igual valor que la fracción de volumen de partículas intersectado por en el canal

de pared, y la temperatura promedio de la superficie con fracción ω es T_1^S . La fracción restante $(1 - \omega)$ intercambia calor con el fluido en el canal central dentro de $1/2 < y^* < y_L^*$, y la temperatura promedio en la superficie de la fracción $(1 - \omega)$ es T_2^S (figura 3.2).

Se utilizan perfiles de temperatura distribuidos para el canal central $T_c(\rho)$, y la región central de sólidos $T_c^S(\rho)$ (temperatura en la superficie de partícula), ver figura 3.2.

Los mecanismos de intercambio de calor propuestos entre las regiones de sólido y fluido así como sus parámetros, se ilustran en el esquema de la figura 3.2.

Las áreas de las superficies sobre la que se definen los coeficientes de calor transferido/intercambiado son las siguientes:

h_{wf}, h_{ws} : superficie de la pared en $\rho = \rho_t (y^* = 0)$

h_f, h_s : superficie cilíndrica en $\rho = \rho_c (y^* = 1/2)$

h_{sL} : superficie cilíndrica en $\rho = \rho_L (y^* = y_L^*)$

$h_{fs,1}, h_{fs,c}$: superficie externa de las partículas

Se considera que se lleva a cabo una única reacción catalítica con especie clave definida por el reactivo limitante (coeficiente estequiométrico -1), para el cual se plantearán los balances de conservación en términos de su concentración molar C , suponiendo que la concentración de las restantes especies pueden establecerse vía relaciones estequiométricas. Vale la misma observación realizada en el capítulo 2 para los distintos modelos de literatura: el modelo 2R2D no queda restringido a esta suposición y pueden, en caso general, incorporarse tantos balances por componentes como sean necesarios.

Se supone que $r_e(T^S, C^S)$ es la velocidad de reacción efectiva evaluada sobre una partícula esférica de diámetro D_p , con temperatura y concentración uniformes (T^S y C^S) sobre su superficie externa. Se asume que la evaluación de $r_e(T^S, C^S)$ incluye la resistencias internas en las pastillas para el transporte de materia y calor, por lo que podrá contemplar cualquier desviación de la temperatura en el interior de la partícula con respecto al valor T^S .

Siguiendo argumentos similares a los empleados para el intercambio de calor, se adopta una resistencia concentrada a la transferencia de masa ($1/\alpha_f$) en $y^* = 1/2$ para contemplar diferencias entre las concentraciones en ambos canales (C_1 y $C_{c,1}$). A su vez, debido a la distinción de temperaturas T_1^s y T_2^s sobre las fracciones ω y $(1 - \omega)$ de las partículas de la primera capa, surgen diferentes valores de concentración sobre la superficie, C_1^s y C_2^s , respectivamente. Puede utilizarse la analogía entre transferencia de calor y materia para evaluar α_f a partir de un valor conocido de h_f (ver sección 6.3 del capítulo 6). Los coeficientes de transferencia de masa fluido/partícula en el canal de pared y en el canal central, $\alpha_{fs,1}$ y $\alpha_{fs,c}$ se relacionan también con los coeficientes de transferencia de calor análogos $h_{fs,1}$ y $h_{fs,c}$ (ver figura 3.2).

En acuerdo con las consideraciones previas y sobre la base del esquema de la figura 3.2, se escriben los balances de conservación de masa y calor para condiciones de estado estacionario e ignorando los efectos de dispersión / conducción axial:

En el canal de pared:

$$c_{pf}G_1 \frac{dT_1}{dz} = (1 - \varepsilon_1) \frac{6h_{fs,1}}{D_p} (T_1^s - T_1) + \frac{2\rho_t h_{wf}(T_w - T_1) + 2\rho_c h_f(T_{c,1} - T_1)}{\rho_t^2 - \rho_c^2} \quad (3.5a)$$

$$G_1 \frac{d(C_1 / \delta_f)}{dz} = (1 - \varepsilon_1) \frac{6\alpha_{fs,1}}{D_p} (C_1^s - C_1) + \frac{2\rho_c \alpha_f (C_{c,1} - C_1)}{\rho_t^2 - \rho_c^2} \quad (3.5b)$$

En la primera capa de partículas, sobre los lados ω y $1 - \omega$:

$$(1 - \varepsilon_1)(\rho_t^2 - \rho_c^2) \left[(-\Delta H) r_e(T_1^s, C_1^s) - \frac{6h_{fs,1}}{D_p} (T_1^s - T_1) \right] \quad (3.6a)$$

$$= 2\rho_t h_{ws} (T_1^s - T_w) + 2\rho_c h_s (T_1^s - T_2^s)$$

$$(1 - \varepsilon_c)(\rho_c^2 - \rho_L^2) \left[(-\Delta H) r_e(T_2^s, C_2^s) - \frac{6h_{fs,c}}{D_p} (T_2^s - T_2) \right] \quad (3.6b)$$

$$= 2\rho_L h_{sL} (T_2^s - T_{c,L}^s) + 2\rho_c h_s (T_2^s - T_1^s)$$

En la ecuación 3.6b T_2 es el valor promedio de T_c en la zona de sección transversal definida por $1/2 < y^* < y_L^*$ (figura 3.2), esto es, $\rho_L < \rho < \rho_c$

En el canal central ($y^* > 1/2, \rho < \rho_c$):

$$-\lambda_{ef,c} \frac{\partial(\rho \partial T_c / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + c_{pf} G_c \frac{\partial T_c}{\partial z} = (1 - \varepsilon_c) \frac{6h_{fs,c}}{D_p} (T^s - T_c) \quad (3.7a)$$

$$-D_{e,c} \frac{\partial(\rho \partial C_c / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + G_c \frac{\partial(C_c / \delta_f)}{\partial z} = (1 - \varepsilon_c) \frac{6\alpha_{fs,c}}{D_p} (C^s - C_c) \quad (3.7b)$$

en $\rho = \rho_c$

$$T_c = T_{c,1}, \quad -\lambda_{ef,c} \frac{\partial T_c}{\partial \rho} = h_f (T_{c,1} - T_1) \quad (3.7c)$$

$$C_c = C_{c,1}, \quad -D_{e,c} \frac{\partial C_c}{\partial \rho} = \alpha_f (C_{c,1} - C_1)$$

En las ecuaciones 3.7a y 3.7b

$$(T^s, C^s) \begin{cases} (T_c^s, C_c^s) & \text{si } \rho < \rho_L \\ (T_2^s, C_2^s) & \text{si } \rho_L < \rho < \rho_c \end{cases} \quad (3.7d)$$

En la región central de sólidos ($y^* > y_L^*, \rho < \rho_L$):

$$-\lambda_{es,c} \frac{\partial(\rho \partial T_c^s / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} = (1 - \varepsilon_c) \left[\frac{6h_{fs,c}}{D_p} (T_c - T_c^s) + (-\Delta H) r_e(T_c^s, C_c^s) \right] \quad (3.8a)$$

$$T_c^s = T_{c,L} \quad -\lambda_{es,c} \frac{\partial T_c^s}{\partial \rho} = h_{sL} (T_{c,L}^s - T_2^s) \quad \text{en } \rho = \rho_L \quad (3.8b)$$

Para evaluar la concentración en la superficie de la partícula C^s

$$r_e(T^s, C^s) = \frac{6\alpha_{fs}}{D_p} (C - C^s) \quad (3.9)$$

donde $C = C_1$ en el canal de la pared o $C = C_c$ en el canal central.

El flujo de calor en la pared se evalúa mediante la siguiente expresión:

$$q_w = h_{wf} (T_1 - T_w) + h_{ws} (T_1^s - T_w) \quad (3.10)$$

A partir de sus definiciones, la extensión espacial del canal de la pared y de la región central de sólidos difieren ($y^* = 1/2$ e $y^* = y_L^*$, respectivamente), y por lo tanto las correspondientes ecuaciones diferenciales de balance, ecuaciones 3.7a, 3.7b, y 3.8a,

también cubren diferentes dominios. Tal desfase puede generar complicaciones en la solución numérica del problema. Una alternativa para equiparar los dominios de las ecuaciones diferenciales es dividir el canal central en dos: un *canal central exterior* en el rango $1/2 < y^* < y_L^*$ y un *canal central interior* en la parte restante, $y^* > y_L^*$. La extensión del canal central exterior es pequeña y se consideran variables agrupadas T_2 y C_2 para su descripción. De esta manera, desde el punto de vista resolutivo, la sección transversal del tubo queda dividida en tres zonas: $\rho_c < \rho < \rho_t$ con el canal de pared y la fracción ω de partículas de la primera capa; $\rho_L < \rho < \rho_c$ con el canal central exterior y la fracción $(1 - \omega)$ de partículas de la primera capa; $0 < \rho < \rho_L$ con el canal central interior y la zona central de sólidos (ambos con variables distribuidas). La formulación modificada, que no agrega ningún parámetro adicional, se presenta en el Apéndice 3.1.

3.2.3.- Discusión sobre las principales suposiciones y parámetros térmicos introducidos en el modelo propuesto

El modelo propuesto se basa en identificar la primera capa de partículas y los efectos que la misma provoca sobre la distribución del flujo de fluido, sobre la dispersión radial, y, consecuentemente, sobre los mecanismos de transferencia de calor (y masa).

Es razonable pensar que un tratamiento similar podría haberse dado a la segunda capa de partículas. Un primer punto a señalar sobre este aspecto, es el hecho de que la segunda capa es considerablemente más dispersa que la primera, como se evidencia al analizar la distribución de centros de partículas (ver figura 3.2). De acuerdo con [Mariani y col., 2002](#), los centros pueden asumirse distribuidos más o menos uniformemente entre $1/2 < y^* < 1.5$. Por lo tanto, la dispersión de centros en tal zona facilitará el pasaje de fluido a través de la misma. En realidad, los valores mínimos de las velocidades superficiales axiales casi duplican los valores correspondientes al extremo interno del canal de pared ($y^* = 1/2$, ver figura 2.3 del capítulo 2). La dispersión radial ocurrirá también en forma más significativa que en la zona alrededor de $y^* = 1/2$, debido a las deflexiones de las líneas de flujo, y puede esperarse que la dispersión radial de calor sea más efectiva que la evaluada por el coeficiente de transferencia de calor h_f . La conducción de calor a través de las partículas de la segunda capa será también más efectiva que a través de las partículas de la primera capa de partículas, si se considera

que entre partículas de la primera y segunda existe mayor número de puntos de contacto que entre partículas de la primera capa y la pared (un único punto por partícula). Si, en adición a los mecanismos mejorados, se considera que el gradiente de temperatura se incrementa desde el centro del lecho hacia la pared, las variaciones de temperatura en el nivel de la segunda capa de partículas serán menores que en la zona de la primera capa. Se puede concluir que la discriminación para describir el comportamiento de la segunda capa proporcionaría una significativa complejidad sin que simultáneamente aporte mayor precisión en los resultados predichos. También deben considerarse las dificultades prácticas para la evaluación de los nuevos parámetros que la discriminación de la segunda capa requerirá.

Como ha sido indicado claramente por [Borkink y Westerterp, 1994](#) los modelos como el aquí considerado que emplean "propiedades efectivas" serán, en última instancia, inapropiados en condiciones en la que los reactores catalíticos muestren elevada sensibilidad paramétrica, lo que vuelve injustificado la introducción de detalles difíciles de evaluar y de dudosa significación. La aplicación de CFD será la alternativa apropiada para tratar satisfactoriamente tales situaciones.

En la primera capa de partículas se consideraron dos niveles de temperatura, T_1^s y T_2^s . Esta discriminación se realizó debido a la posibilidad que se presenten variaciones de temperatura significativas a través de las partículas de la primera capa, en especial a velocidades altas de transferencia de calor hacia la pared. Como consecuencia, se debe incorporar un coeficiente de transferencia de calor h_s entre la fracción frontal ω y la fracción posterior $(1 - \omega)$ de las partículas de la primera capa. En el Apéndice 3.2 se desarrolla para h_s una expresión simple: $h_s = \frac{\pi}{2} n_p^* \lambda_p / D_p$ (ecuación A3.2.5), que resultará suficientemente precisa a condición que la diferencia $(T_1^s - T_2^s)$ no sea demasiado elevada.

El uso de valores promedio para las temperaturas de las partículas a nivel de su superficie (T_1^s y T_2^s para las partículas de la primera capa y T_c^s en la región central) en lugar de valores promedio de temperatura en el volumen de partículas amerita una explicación adicional. Esta elección permite evaluar la transferencia de calor entre el fluido y la partícula sólida sobre la base de los coeficientes $h_{f,s,1}$ (en el canal de pared) y $h_{f,s,c}$ (en el canal central), considerando estrictamente la resistencia térmica en el lado del fluido. De lo contrario, el uso de la temperatura promedio en el volumen de

partículas requerirá obligatoriamente utilizar coeficientes de transferencia de calor que incluyan la influencia de la resistencia térmica en el interior de las partículas. Debe notarse, además, la diferenciación realizada para h_{fs} en ambos canales del fluido ($h_{fs,1}$ y $h_{fs,c}$) se adoptó sobre la base de las diferentes velocidades superficiales, porosidades, y configuraciones geométricas. Expresiones como las de [Gunn \(1978\)](#) , [Martin \(1978\)](#) introduciendo el efecto de la fracción de huecos sobre h_{fs} pueden ser útiles a tal efecto.

Las ecuaciones de conservación de energía en los sólidos (ecuaciones 3.6a, 3.6b, 3.8a y 3.8b) se escriben bajo la suposición que el calor intercambiado entre la pared y la partícula y entre partículas entre sí, puede ser expresado con los mismos parámetros de transferencia de calor (h_{ws} , h_{sL} y $\lambda_{es,c}$) como en el caso de calor transferido en un lecho estanco sin reacción química. Esto constituye una aproximación, debido a que los valores de los parámetros están asociados con una cierta distribución de temperatura en el interior de las partículas, que se verá modificada como consecuencia de la simultaneidad de los efectos de reacción química y transferencia de calor con la corriente de fluido. No obstante, para elevados valores de Re_p el mecanismo convectivo del fluido dominará y esta aproximación será de menor importancia. Por el contrario, condiciones con bajos valores de Re_p implican bajos valores de velocidad de transferencia de calor con el fluido y , en la práctica, bajas velocidades de generación de calor por reacción química. De esta forma, el calor intercambiado pared/ partícula/ partícula dominará y la velocidad de transferencia de calor será bien estimada mediante el uso de correlaciones estándar para h_{ws} h_{sL} y $\lambda_{es,c}$ En cualquier caso, las incertidumbres serán menores para partículas con alta conductividad térmica, situación donde se llegará a diferencias de temperatura más atenuadas a través de las partículas.

La expresión analizada por [Bauer y Schlünder, 1978](#) se considera apropiada para estimar $\lambda_{es,c}$. Además, h_{sL} puede escribirse en términos de $\lambda_{es,c}$ como se explica en el Apéndice 3.2 (ver ecuaciones A3.2.8b y A3.2.9), donde también se discute la evaluación de h_{ws} (ver ecuación A3.2.8a).

Los restantes parámetros térmicos del modelo son los que se cuantifican el transporte de calor radial a través de la fase fluida, h_{wf} h_f y $\lambda_{ef,c}$. Con excepción de condiciones de muy bajos valores de Re_p , donde la conducción es el mecanismo de transferencia de calor dominante, es fundamental contar con un conjunto coherente de

expresiones para h_{wf} , h_f y $\lambda_{ef,c}$ que describan apropiadamente el aporte convectivo, a fin de llevar a cabo predicciones precisas.

Las correlaciones disponibles para el coeficiente de pared son aquellas empleadas en los modelos S2D, denotadas h_w en el capítulo 2, donde se señaló que incluyen una variedad de efectos, tanto conductivos como convectivos. A partir de las mismas (ver, por ejemplo, [Dixon, 2012](#)), fácilmente se puede diferenciar la contribución conductiva, pero la convectiva incluye el efecto de la película térmica en contacto con la pared (h_{wf} de acuerdo al modelo 2R2D), el efecto asociado con la disminución de la dispersión radial en las cercanías de la pared (h_f , de acuerdo al modelo 2R2D) y, en adición, la falta de discriminación entre las velocidades superficiales en la zona de pared y en el interior del lecho (relación G_1/G_c , de acuerdo al modelo 2R2D). Por lo tanto, la información disponible para h_w no resulta apropiada en forma directa para el modelo propuesto.

Respecto al aporte convectivo de la conductividad térmica efectiva $\lambda_{ef,c}$ existe abundante información en la bibliografía. Aún así, se deberá comprobar consistencias con los restantes parámetros h_{wf} y h_f .

3.3.- Conclusiones del capítulo

En este capítulo, se formula un modelo bidimensional con el objetivo de proponer una alternativa para la representación apropiada de la transferencia de calor en lechos rellenos catalíticos en disposición multitubular. El modelo, que en su estado actual se limita a partículas esféricas en el relleno, es un modelo bidimensional de dos zonas y es identificado como modelo 2R2D. Este modelo discrimina los diferentes efectos concentrados en la resistencia térmica sobre la pared ($1/h_w$) del llamado modelo estándar 2D (S2D) y los localiza de acuerdo a la distribución real del relleno, considerablemente ordenada en las cercanías de la pared del recipiente/tubo. En este sentido, se identifican claramente un canal de fluido desde la pared hasta una profundidad (distancia radial) $D_p/2$ y una capa de partículas en contacto con la pared. La formulación del modelo se presenta en la sección 3.2.2, aunque la alternativa desarrollada en el Apéndice 3.1 es fuertemente recomendada para su implementación numérica.

El modelo 2R2D introduce parámetros térmicos efectivos de transporte cuya significación y posibilidad de evaluación fue discutida en la sección 3.2.3. Se puede concluir que la mayoría de tales parámetros han sido estudiados en bibliografía y que a partir de diversas fuentes se dispone de la posibilidad de predecirlos en forma directa, o bien a través de relaciones desarrolladas específicamente, como se detalla en el Apéndice 3.2. Las excepciones de mayor significación las constituyen los coeficientes h_{wf} y h_f . Esfuerzos preliminares para la estimación de estos dos parámetros en arreglos regulares de partículas se presentan en el capítulo 5, empleando la técnica de CFD, mientras que por la misma vía en el capítulo 8 se realiza su estimación en lechos rellenos al azar. Las evaluaciones descritas en el capítulo 8 también aportan datos respecto a la relación de velocidades superficiales G_1/G_c y sobre la conductividad efectiva $\lambda_{ef,c}$.

Apéndice 3.1: Reformulación del modelo propuesto 2R2D introduciendo canales centrales interiores y exteriores

Con el fin de igualar el tamaño de las regiones centrales para fluido y sólido, es posible adoptar una descripción agrupada (*lumped*) para el fluido en la zona $1/2 < y^* < y_L^*$, que será identificado como el canal central exterior. En términos de la variable radial, esta zona se extiende sobre $\rho_L < \rho < \rho_c$ con espesor es $\rho_c - \rho_L = D_p(y_L^* - 1/2)$, y sus niveles de temperatura y concentración se denotan como T_2 y C_2 respectivamente. El canal central interior se extiende sobre $0 < \rho < \rho_L$, ajustándose al tamaño de la región central de sólidos.

El esquema original de la figura 3.2 se modifica, conforme se muestra en la figura A3.1.1.

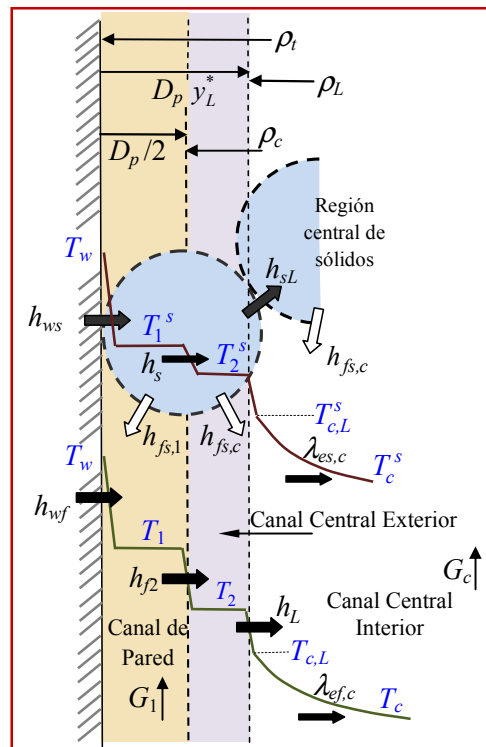


Figura A3.1.1: Esquema modificado para el modelo 2R2D (ver figura 3.2) introduciendo un canal central exterior ($\rho_L < \rho < \rho_c$) y un canal central interior ($0 < \rho < \rho_L$).

La resistencia térmica radial del canal central exterior se divide en dos y cada mitad se concentra en las fronteras con el canal de pared y con el canal central interior. Por lo tanto, en la frontera con el canal de pared el coeficiente de intercambio de calor h_f se corrige de acuerdo a

$$h_{f2} = \left[\frac{1}{h_f} + \rho_c \frac{\ln(\rho_c / \rho_L)}{2\lambda_{ef,c}} \right]^{-1} \quad (\text{A3.1.1a})$$

y el coeficiente de transferencia de calor h_L entre los canales central interior y exterior se puede expresar como

$$h_L = \frac{1}{\rho_L} \frac{2\lambda_{ef,c}}{\ln(\rho_c / \rho_L)} \quad (\text{A3.1.1b})$$

Los coeficientes análogos de transferencia de materia α_{f2} y α_L se obtienen a partir de las ecuaciones A3.1.1a y A3.1.1b utilizando α_f en lugar de h_f y $D_{e,c}$ en lugar de $\lambda_{ef,c}$.

Las ecuaciones de conservación para la primera capa de partículas y los sólidos de la regiones centrales permanecen igual que en texto principal del presente capítulo (ecuaciones 3.6a, 3.6b, 3.8a y 3.8b), mientras que para el fluido en los canales de pared y central, la formulación se transforma para las ecuaciones 3.5a, 3.5b, y 3.7a -3.7d en:

En el canal de la pared ($\rho_c < \rho < \rho_t$):

$$c_{pf} G_1 \frac{dT_1}{dz} = (1 - \varepsilon_1) \frac{6h_{fs,1}}{D_p} (T_1^s - T_1) + \frac{2\rho_t h_{wf} (T_w - T_1) + 2\rho_c h_{f2} (T_2 - T_1)}{\rho_t^2 - \rho_c^2} \quad (\text{A3.1.2a})$$

$$G_1 \frac{d(C_1 / \delta_f)}{dz} = (1 - \varepsilon_1) \frac{6\alpha_{fs,1}}{D_p} (C_1^s - C_1) + \frac{2\rho_c \alpha_{f2} (C_2 - C_1)}{\rho_t^2 - \rho_c^2} \quad (\text{A3.1.2b})$$

En el canal central exterior ($\rho_L < \rho < \rho_c$)

$$c_{pf} G_c \frac{dT_2}{dz} = (1 - \varepsilon_c) \frac{6h_{fs,c}}{D_p} (T_2^s - T_2) + \frac{2\rho_L h_L (T_{c,L} - T_2) + 2\rho_c h_{f2} (T_1 - T_2)}{\rho_c^2 - \rho_L^2} \quad (\text{A3.1.3a})$$

$$G_c \frac{d}{dz} (C_2 / \delta_f) = (1 - \varepsilon_c) \frac{6\alpha_{fs,c}}{D_p} (C_2^s - C_2) + \frac{2\rho_L \alpha_L (C_{c,L} - C_2) + 2\rho_c \alpha_{f2} (C_1 - C_2)}{\rho_c^2 - \rho_L^2} \quad (\text{A3.1.3b})$$

En el canal central interior ($\rho < \rho_L$)

$$-\lambda_{ef,c} \frac{\partial(\rho \partial T_c / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + c_{pf} G_c \frac{\partial T_c}{\partial z} = (1 - \varepsilon_c) \frac{6h_{fs,c}}{D_p} (T^s - T_c) \quad (\text{A3.1.4a})$$

$$-D_{e,c} \frac{\partial(\rho \partial C_c / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + G_c \frac{\partial(C_c / \delta_f)}{\partial z} = (1 - \varepsilon_c) \frac{6h_{fs,c}}{D_p} (C^s - C_c) \quad (\text{A3.1.4b})$$

en $\rho = \rho_L$:

$$\begin{aligned} T_c = T_{c,L}, & \quad -\lambda_{ef,c} \frac{\partial T_c}{\partial \rho} = h_L (T_{c,L} - T_2) \\ C_c = C_{c,L}, & \quad -D_{e,c} \frac{\partial C_c}{\partial \rho} = \alpha_L (C_{c,L} - C_2) \end{aligned} \tag{A3.1.4c}$$

Debe remarcarse que las modificaciones presentadas en este apéndice no introducen ningún nuevo parámetro de transferencia de calor ni de materia, ya que los coeficientes h_{f2} y h_L en las ecuaciones A3.1.1a y A3.1.1b únicamente dependen de parámetros ya definidos. La misma observación es pertinente para α_{f2} y α_L .

Apéndice 3.2: Transferencia de calor en la primera capa de partículas, evaluación de los coeficientes h_s , h_{ws} y h_{sL}

Con el fin de evaluar el coeficiente h_s se considerará para la primera capa de partículas, un caso de referencia definido por $N \rightarrow \infty$ ($\omega = 1/2$), efectos térmicos asociados a la reacción química despreciables, así como también se supondrá despreciable el intercambio de calor con la superficie de la pared y con las partículas adyacentes de la región central. Esta situación puede interpretarse como la ocurrente a altos valores del números de Reynolds, Re_p , donde el intercambio de calor por mecanismo convectivo con el fluido determinará el comportamiento térmico de la primera capa de partículas. Se supone, además, que $h_{fs,1} = h_{fs,c} = h_{fs}$.

Teniendo en cuenta las ecuaciones 3.2a-3.4b en el texto principal de este capítulo, bajo las condiciones definidas previamente, las ecuaciones 3.6a y 3.6b se reducen de la siguiente manera:

$$\frac{\pi}{2} n_p^* h_{fs} (T_1^s - T_1) + h_s (T_1^s - T_2^s) = 0 \quad (\text{A3.2.1a})$$

$$\frac{\pi}{2} n_p^* h_{fs} (T_2^s - T_2) + h_s (T_2^s - T_1^s) = 0 \quad (\text{A3.2.1a})$$

Se supone que la temperatura del fluido presenta una variación lineal con la coordenada y^* (normal a la superficie de la pared):

$$T = (T_1 + T_2)/2 + (y^* - 1/2)(T_2 - T_1) \quad (\text{A3.2.2})$$

$$0 < y^* < 1$$

donde T_1 y T_2 son las temperaturas promedio en el canal de la pared ($0 < y^* < 1/2$) y en la parte de la zona del canal central definido por $1/2 < y^* < 1$, respectivamente. El balance de energía dentro de una partícula esférica determinada se expresa como

$$\nabla^2 \theta = 0 \quad \text{en } V_p \quad (\text{A3.2.3a})$$

$$-\lambda_p \nabla_n \theta = h_{fs} (\theta - T) \quad \text{en } S_p \quad (\text{A3.2.3b})$$

donde ∇_n es la proyección del gradiente sobre la normal a la superficie externa, θ es la temperatura local de la partícula y λ_p es la conductividad térmica de la partícula.

La solución del problema (ecuaciones A3.2.2, A3.2.3a y A3.2.3b) para θ puede escribirse como

$$\theta = (T_1 + T_2)/2 + \frac{Bi_{fs}}{1 + Bi_{fs}/2} (y^* - 1/2)(T_2 - T_1) \quad (A3.2.4)$$

donde $Bi_{fs} = h_{fs}D_p/\lambda_p$ es el número de Biot.

Debe señalarse que la dependencia de θ exclusivamente con la coordenada y^* no es una simplificación, sino una característica que surge del tipo de condición de borde en este problema (como se define mediante las ecuaciones A3.2.2 y A3.2.3b).

A partir de la ecuación A3.2.4, se obtienen las siguientes formulaciones para la temperatura promedio de la superficie sobre los hemisferios a cada lado de $y^* = 1/2$:

$$T_1^s = (T_1 + T_2)/2 - \frac{Bi_{fs}}{1 + Bi_{fs}/2} (T_2 - T_1)/4$$

$$T_2^s = (T_1 + T_2)/2 + \frac{Bi_{fs}}{1 + Bi_{fs}/2} (T_2 - T_1)/4$$

Mediante la sustitución de T_1^s y T_2^s en alguna de las ecuaciones A3.2.1a o A3.2.1b, resulta la siguiente expresión para h_s :

$$h_s = \frac{\pi}{2} n_p^* \lambda_p / D_p \quad (A3.2.5a)$$

El coeficiente h_s^1 para una partícula individual basado en el área $\pi D_p^2/4$ (área de intersección entre una partícula y un plano a $y^* = 1/2$) se relaciona con h_s mediante

$$h_s = \frac{\pi}{4} n_p^* h_s^1 \quad (A3.2.5b)$$

Por consiguiente

$$h_s^1 = \lambda_p / (D_p/2) \quad (A3.2.5c)$$

La ecuación A3.2.5c expresa claramente que la resistencia térmica en el interior de la partícula es equivalente a la de un cilindro de diámetro de D_p y longitud $D_p/2$.

Como se expresó en el texto principal del presente capítulo, es esperable que el modelo propuesto sea adecuado cuando la diferencia $(T_1^s - T_2^s)$ no resulte demasiado elevada. En este caso, los resultados no serán sensibles a los valores de h_s , y por lo tanto, probablemente no sería necesario llevar a cabo un mayor refinamiento para las ecuaciones A3.2.5a-A3.2.5c.

Respecto a los coeficientes de la primera capa h_{ws} y h_{sL} en los balances expresados por las ecuaciones 3.6a y 3.6b del capítulo 3, es necesario recordar que las fuerzas impulsoras para los mismos se basan en las temperaturas promedio en la

superficie a cada lado de la partícula, T_1^s y T_2^s , respectivamente. Existen referencias en la literatura (por ejemplo, Legawiec y Ziolkowski, 1995) donde se definen coeficientes similares, aquí denotados h_{wp} y h_{pL} , respectivamente, pero con fuerzas impulsoras basadas en la temperatura promedio sobre toda la superficie externa de la partícula, que se denota T^s . Por lo tanto, los coeficientes h_{ws} deben ser más pequeños que h_{wp} en virtud de sus respectivas fuerzas impulsoras: $T_1^s - T_w$ y $T^s - T_w$, respectivamente. Un comentario similar se aplica para el par h_{sL} y h_{pL} , definido con las fuerzas impulsoras $(T_2^s - T_{c,L}^s)$ y $(T^s - T_{c,L}^s)$, respectivamente.

Para establecer las relaciones entre cada par de coeficientes, se considera que la primera capa de partícula intercambia calor solo con la pared y partículas adyacentes, sin efectos térmicos asociados a la reacción química (calor de reacción), y sin intercambio de calor con el fluido (una situación que correspondería a bajos valores del número de Reynolds, Re_p). De esta forma, las ecuaciones 3.6a y 3.6b del texto principal resultan:

$$0 = 2\rho_t h_{ws} (T_1^s - T_w) + 2\rho_c h_s (T_1^s - T_2^s) \quad (\text{A3.2.6a})$$

$$0 = 2\rho_L h_{sL} (T_2^s - T_{c,L}^s) + 2\rho_c h_s (T_2^s - T_1^s) \quad (\text{A3.2.6b})$$

A su vez, el flujo de calor sobre la pared se expresa como $q_w = h_{ws} (T_1^s - T_w)$.

Alternativamente, en base a la descripción empleando T^s y los coeficientes h_{wp} y h_{pL} , un balance sobre toda la primera capa, en las condiciones antedichas (despreciando los términos correspondientes al calor de reacción y intercambio partícula/fluido) resulta:

$$0 = 2\rho_t h_{wp} (T^s - T_w) + 2\rho_L h_{pL} (T^s - T_{c,L}^s) \quad (\text{A3.2.6c})$$

Los términos en la ecuación A3.2.6c cuantifican la velocidad de intercambio con la pared ($\rho = \rho_t$), $q_w = h_{wp} (T^s - T_w)$, y con las partículas adyacentes de la zona central en $\rho = \rho_L$. Para establecer la relación entre los pares de coeficientes h_{wp} y h_{ws} y entre h_{pL} y h_{sL} , se impone que ambos enfoques provean la misma temperatura y el mismo flujo sobre la pared:

$$\omega T_1^s + (1 - \omega) T_2^s = T^s \quad (\text{A3.2.7a})$$

$$h_{ws} (T_1^s - T_w) = h_{wp} (T^s - T_w) \quad (\text{A3.2.7b})$$

Las ecuaciones A3.2.6a,b,c y A3.2.7a,b pueden considerarse un sistema de 5 ecuaciones con 5 incógnitas, h_{wp} , h_{pL} , T_1^s , T_2^s , T^s , para valores dados de las restantes variables. La solución, en particular, permite establecer las relaciones entre los parámetros térmicos:

$$\frac{1}{h_{wp}} = \frac{1}{h_{ws}} - \frac{(1-\omega)\rho_t}{\rho_c h_s} \quad (\text{A3.2.8a})$$

$$\frac{1}{h_{pL}} = \frac{1}{h_{sL}} - \frac{\omega\rho_L}{\rho_c h_s} \quad (\text{A3.2.8b})$$

Debe enfatizarse que ambos enfoques resultan exactamente equivalentes solo cuando la generación de calor y el intercambio de calor con el fluido son despreciados.

En la bibliografía se han reportado expresiones para estimar el coeficiente de transferencia de calor h_{wp} , como por ejemplo, la propuesta por [Legawiec y Ziółkowski, 1994](#). Los autores desarrollaron la expresión para h_{wp} teniendo en cuenta la curvatura de la superficie de la pared del tubo y suponiendo líneas de flujo en la dirección de la coordenada radial. Aunque, la suposición sobre líneas de flujo puede no resultar adecuada para sólidos de alta conductividad, constituye una simplificación razonable para su aplicación a gran parte de los materiales catalíticos.

Debido a que cada partícula que pertenece a la primera capa comparte más de un punto de contacto las partículas adyacentes, es esperable que h_{pL} esté vinculado a la conductividad térmica efectiva partícula - partícula $\lambda_{es,c}$ que, a su vez, puede estimarse a partir de, la correlación analizada por [Bauer y Schlümder, 1978](#) entre otras. Suponiendo que el lecho pueda considerarse como un conjunto de capas sucesivas de partículas separadas por una distancia $L = D_p(2y_L^* - 1)$, como fue expresado en la sección 3.2.1, la relación entre h_{pL} y $\lambda_{es,c}$ puede ser escrita como

$$h_{pL} = 2\lambda_{es,c}/L = 2\lambda_{es,c}/\left[D_p(2y_L^* - 1)\right] \quad (\text{A3.2.9})$$

Para valores finitos de N , los efectos de curvatura pueden introducir cierta incertidumbres con respecto a la superficie de referencia adecuada para h_{pL} dada por la ecuación A3.2.8. El siguiente razonamiento conduce a la conclusión de que la superficie

adecuada es la que corresponde a la posición $\rho = \rho_L$ (en $y^* = y_L^*$, ver figura 3.2), lo que significa adoptar, la superficie definida como referencia para h_{pL} en el texto principal del presente capítulo. Debido a que el valor de la conductividad $\lambda_{es,c}$ se supone constante en la región central de sólidos en la formulación del modelo 2R2D propuesto, y considerando que la principal resistencia térmica cuantificada por $1/\lambda_{es,c}$ es la que se localiza alrededor de los puntos de contacto, el balance de conservación de energía para la región central de sólidos (ecuación 3.8a) implícitamente supone que en cualquier posición radial, el número de puntos de contacto es proporcional al perímetro $2\pi\rho$. Si esta descripción se aplica a la frontera entre la primera capa de partículas y la región central de sólidos, donde pueden identificarse los puntos de contacto en $y^* = y_L^*$, la relación entre $\lambda_{es,c}$ y h_{pL} , tal como expresa la ecuación A3.2.8, se determina que resulta apropiado mantenerla en $y^* = y_L^*$ (en lugar de hacerlo, por ejemplo, en $y^* = 1/2$).

Las ecuaciones A3.2.5a-A.3.2.5c, A3.2.8a, A3.2.8b, y A3.2.9 son los principales resultados de este apéndice.

CAPITULO 4

FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL (CFD)

4.1 Introducción

PARTE I

4.2 Conceptos básicos de la CFD

4.2.1 Definición general

4.2.2 Características principales y aplicabilidad de la CFD

4.2.3 Ventajas y Desventajas

4.2.4 Estructura de *software* CFD

4.2.4.1 Pre-procesamiento

4.2.4.2 Resolución

4.2.4.3 Post-procesamiento

PARTE II

4.3 Simulación de lechos fijos

4.3.1 Procedimiento de resolución

4.3.1.1 Arreglos regulares

4.3.1.2 Arreglos al azar

4.4 Conclusiones del capítulo

CAPITULO 4

FLUIDODINÁMICA COMPUTACIONAL (CFD)

4.1.- Introducción

La fluidodinámica computacional (CFD) es una rama de la mecánica de fluidos que tiene su origen en la combinación complementaria de dos disciplinas: la mecánica de los fluidos en sí misma y el cálculo numérico. En tal sentido, constituye una potente herramienta para la resolución de sistemas de ecuaciones que conforman la simulación numérica del comportamiento de sistemas de flujo de fluido, transferencia de calor, reacción química y otros fenómenos físicos relacionados. Por esta técnica, se resuelven las ecuaciones de flujo de fluido y fenómenos simultáneos en la región o dominio de interés, sujetas a condiciones especificadas en los contornos del dominio.

En este capítulo, se sintetizan las principales características y elementos que enmarcan la técnica de CFD, que posee un rol preponderante en los esquemas de modelado y obtención de información sobre el sistema estudiado en esta tesis doctoral. Por otra parte, se describen modelos, enfoques y experiencias numéricas llevadas a cabo en el marco de la plataforma *ANSYS-FLUENT*, a fin de cumplimentar los objetivos específicos relacionados a CFD en el trabajo.

Con el fin de describir cada aspecto en un contexto propicio para su clara apreciación, el presente capítulo consta de dos Partes.

La Parte I incluye la presentación de conceptos básicos de la CFD, algunas de sus aplicaciones en la Ingeniería Química y otras ramas del conocimiento. Además, sintetiza las principales ventajas y desventajas que trae aparejadas la utilización de CFD, finalizando la descripción de las diferentes etapas y secuencias involucradas en el proceso de simulación.

La Parte II, que se focaliza en el marco teórico y de aplicación al caso de interés en la presente tesis doctoral, abarca la descripción de diferentes modelos y enfoques disponibles en el *software ANSYS-FLUENT 14.5* de implicancia directa en los objetivos planteados en la misma.

PARTE I

4.2.- Conceptos básicos de la CFD

4.2.1.- Definición general

Una definición precisa de la técnica de fluidodinámica computacional, CFD (*Computational Fluid Dynamics*), permite establecer que constituye una disciplina cuya finalidad radica en predecir, mediante esquemas numéricos, el flujo de fluidos, los fenómenos conexos de transferencia de calor, transferencia de masa, cambios de fase, reacciones químicas y aspectos relacionados. Para dicha finalidad, recurre a la resolución numérica del conjunto de ecuaciones matemáticas que gobiernan esos procesos, en base al método de volúmenes finitos. La región o dominio de interés se divide en pequeñas subregiones llamadas *volúmenes de control*. Las ecuaciones son discretizadas y resueltas iterativamente para cada volumen de control. De esta forma se obtienen valores para cada una de las variables en el dominio. La resolución numérica se lleva a cabo computacionalmente, a fin de simular la interacción de los fluidos con las estructuras complejas usadas en la ingeniería. Las ecuaciones de gobierno utilizadas, en un marco general, son:

- ecuación de continuidad (conservación de masa).
- balance de materia por componentes.
- balance de cantidad de movimiento.
- balance de energía.

Los resultados numéricos de CFD, son aplicables al:

- El estudio de nuevos diseños.
- Desarrollo de productos particulares.
- Resolución de problemas.
- Rediseño.

El análisis por CFD es complementario de la experimentación, pudiendo reducirse el esfuerzo y el costo total requeridos para llevar adelante proyectos piloto y el posterior escalado. El método de resolución rigurosa de las ecuaciones que conforman los esquemas de modelado en la plataforma de CFD conduce, frecuentemente, a calificar a ésta como un *sistema de experimentación virtual*.

4.2.2.- Características principales y aplicabilidad de la CFD

La fluidodinámica computacional (CFD) presenta un amplio espectro de aplicaciones. Comenzando por su utilización en la industria aeroespacial en los años 60', pueden mencionarse, a modo de ejemplo, diversas aplicaciones vinculadas a la aerodinámica de vehículos, refrigeración de dispositivos electrónicos, piezas mecánicas, reactores químicos, biomecánica, medicina, biotecnología, etc.

La Ingeniería Química en sus diferentes campos de aplicación, debe analizar, diseñar y optimizar procesos industriales en los que tienen lugar simultáneamente fenómenos de transferencia de calor, reacciones químicas, flujos bifásicos, cambios de fase, transferencia de masa, interacciones fluido-sólido, entre otros aspectos. A nivel de modelado y simulación, ello requiere contar con técnicas de elevada precisión y eficiencia para la resolución de los esquemas numéricos implicados. Con el desarrollo de equipos informáticos de alta performance y los avances en técnicas numéricas y desarrollos de nuevos algoritmos, los Ingenieros Químicos comenzaron a explotar el potencial de las herramientas contenidas en las plataformas de CFD.

De forma general, la CFD permite el diseño detallado, la optimización y el diagnóstico de:

- Reactores multifásicos (catalíticos o no) de lecho fijo, lecho móvil y lecho fluidizado: gas-líquido, gas-sólido, líquido-sólido. Reactores tipo tanque homogéneos y heterogéneos.
- Equipos de transferencia de calor y/o transferencia de materia: intercambiadores, hornos, calderas, secadores, entre otros.
- Tanques agitados (mezcladores).
- Separadores (decantadores, filtros, ciclones, membranas, etc.).
- Máquinas rotativas (extrusoras, bombas, compresores, turbinas, etc.).
- Mezcladores estáticos, distribuidores gas-líquido, tuberías, válvulas, etc.
- Sistemas de calefacción, ventilación, climatización y refrigeración.

En el campo del diseño de equipos, es particularmente útil a la Ingeniería Química, la posibilidad de desarrollar modelos que permitan predecir la performance de nuevos diseños a partir del conocimiento de la geometría y los parámetros de operación. Esta capacidad permite el análisis de equipos potenciales diseñados que, de no realizarse por vía de la CFD, hubiesen quedado relegados por falta de recursos para los ensayos experimentales requeridos. La incorporación de paquetes con potencial de

tratamiento de sistemas con reacciones químicas en sus programas, favoreció la adopción de la técnica en el campo de la Ingeniería de las Reacciones Químicas (Ranade 2002).

4.2.3.- Ventajas y Desventajas

El uso de la CFD permite a los científicos, tecnólogos y profesionales de la ingeniería, obtener soluciones para problemas con geometrías y condiciones de borde complejas, obteniendo como resultado los campos de presión, velocidad de fluido, temperatura, concentración de especies y distribución de fases.

Las principales ventajas de la CFD pueden sintetizarse de la siguiente forma:

- Se basa en esquemas computacionales de resolución rigurosa de conjuntos de ecuaciones diferenciales, que permiten obtener las respuestas de los sistemas frente a modificaciones en los parámetros de diseño, sin implicar costos adicionales. Ello otorga a la CFD ventajas ostensibles en sustitución de experimentación de laboratorio o campo, permitiendo a profesionales de la ingeniería (entre otros) ensayar alternativas de diseño con costo ínfimo.
- La ejecución de simulaciones en la plataforma CFD requiere tiempos menores que la realización de experimentos en laboratorio o planta piloto, para fines semejantes. Ello no significa que la experimentación real pueda suprimirse.
- Presenta la factibilidad relativa de resolver un mismo problema con diferentes condiciones de contorno. Ello permite la realización de análisis de sensibilidad casi inmediato, haciendo factible contar con una cantidad considerable de escenarios posibles y consecuencias potenciales de la ocurrencia de diferentes fenómenos.
- Brinda la posibilidad de analizar sistemas bajo condiciones inestables, de riesgo potencial o sobrepasando condiciones límite de funcionamiento, lo cual permite predecir o evitar accidentes, sin requerir la exposición directa a su ocurrencia real.
- Provee información detallada del campo de flujo y variables asociadas, especialmente en regiones donde las mediciones son difíciles o imposibles de obtener.

Los inconvenientes de mayor significación en la utilización de la CFD se deben a:

- El requerimiento de alta performance de las computadoras utilizadas. Recientemente, la tendencia a la aplicación de *clusters* y el costo que implica tal equipamiento. No obstante, es un costo que debe relativizarse con respecto al beneficio del resultado.
- Limitaciones en los modelos existentes en el *software*. Puede salvarse mediante la inclusión de rutinas programadas (*User Defined Functions*) por el usuario.
- Requiere usuarios con amplia experiencia y formación especializada y los consumos de recursos de *hardware* y *software* en algunas ocasiones pueden ser elevados.

4.2.4.- Estructura de *software* CFD

Los paquetes de *software* de CFD están estructurados alrededor de algoritmos numéricos que pueden abordar problemas de fenómenos de transporte. Todos los paquetes de *software* de CFD comerciales requieren, en su utilización, llevar a cabo, secuencialmente tres etapas principales, que permiten introducir los parámetros del problema, resolver los esquemas de ecuaciones formuladas y visualizar los resultados:

1. Pre-Procesamiento
2. Resolución
3. Post-Procesamiento

4.2.4.1.- Pre-procesamiento

Esta es la primera etapa e incluye las siguientes actividades:

- Desarrollo de la geometría, lo cual da forma y delimita el dominio del problema.
- Generación del mallado: la subdivisión del dominio en pequeños volúmenes de control, no superpuestos.
- Especificación de las propiedades del fluido y/o sólidos.
- Definición de las condiciones de frontera apropiadas en los volúmenes de control que coinciden o tocan los bordes del dominio.

En el presente trabajo todas las actividades antes mencionadas se desarrollaron utilizando el *software ANSYS FLUENT* partiendo desde el ambiente de trabajo *Workbench* e iniciando un Sistema de Análisis con la opción *Fluid Flow (FLUENT)*. De esta manera, se habilitan las opciones sucesivas para desarrollar la geometría y luego el mallado.

Una vez construida la geometría, del dominio del problema a estudiar, se procede al mallado. Se presentan diferentes alternativas en la selección del tipo de celdas que constituirán luego la malla, dependiendo de la adopción de enfoque bi o tridimensional (2D o 3D) y de la complejidad de la geometría. Asimismo, las celdas pueden ser uniformes o irregulares a lo largo del mallado e incluso pueden combinarse.

Debido a que el proceso de resolución implica la evaluación de la solución de las ecuaciones de gobierno en cada uno de los volúmenes de control, los resultados obtenidos son altamente dependientes del tamaño y cantidad de volúmenes de control. Si el tamaño de los volúmenes de control es grande se requerirá una pequeña cantidad de ellos para cubrir la geometría, en este caso la cantidad total de ecuaciones a resolver será pequeña y por lo tanto requerirá de pocos recursos computacionales y el tiempo de cómputo será pequeño. No obstante, los resultados no serán precisos debido a que se cuenta con pocos puntos de cálculo para conformar la solución final. Por otro lado si el tamaño de los volúmenes de control es pequeño, se requerirá una gran cantidad de ellos para cubrir la geometría, en este caso la cantidad total de ecuaciones a resolver será muy alta y por lo tanto requerirá de una gran cantidad de recursos computacionales y tiempo de cómputo. En este caso, sin embargo, los resultados obtenidos tendrán una alta precisión debido a que se cuenta con una gran cantidad de puntos de cálculo para construir la solución final. Por este motivo se debe buscar un equilibrio entre la cantidad de volúmenes de control, recursos computacionales, tiempo de cómputo y grado de precisión requerido en los resultados, para lo cual se lleva a cabo el proceso de validación de la malla a utilizar.

Proceso de validación de la malla

El proceso de validación de la malla consiste en realizar una serie de simulaciones, todas ellas con los mismos parámetros y modelos, pero cambiando la malla utilizada en cada una de las simulaciones. Durante las mismas, se realiza el seguimiento de algunos parámetros de interés (presión, temperatura, velocidad, entre otros.), para analizar comparativamente los valores de estos parámetros obtenidos con las distintas mallas utilizadas. Finalmente, se selecciona y adopta aquella malla que

posea la menor cantidad de volúmenes de control y que sea capaz de conducir a la reproducción de los resultados con una precisión similar a la de la malla constituida con la mayor cantidad de volúmenes de control que se haya simulado. Para la aceptación de la malla se establece una tolerancia o error máximo sobre los parámetros de testeo.

4.2.4.2.- Resolución

Luego de cumplida la etapa de generación y validación de la malla, se da comienzo a la fase de resolución propiamente dicha. Para ello se deben establecer las condiciones de contorno, condiciones iniciales, propiedades de los materiales fluido y sólido que intervienen en la simulación, modelos de turbulencia, métodos de resolución y parámetros de convergencia.

Como se ha señalado, en este trabajo se utilizó la versión académica del *software ANSYS FLUENT 14.5*. Este programa cuenta con dos algoritmos de resolución, *Pressure-Based Solver* y *Density-Based Solver*, de los cuales se escogió el esquema *Pressure-Based Solver*, ya que es el más adecuado para el caso particular en estudio (*Theory Guide ANSYS FLUENT 14.5*).

Para todos los tipos de flujo, el código *ANSYS FLUENT* resuelve las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento. En los casos en que el flujo involucre transferencia de calor o compresibilidad, se adiciona una ecuación a resolver, para cuantificar la conservación de energía. Las ecuaciones básicas de conservación, derivadas para sistemas de flujo que involucran una única fase, se presentan en la tabla 4.1.

<i>Ecuaciones de conservación a resolver por CFD</i>	
$\frac{\partial \delta_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\delta_f u) = S_m$	4.1
$\frac{\partial}{\partial t} (\delta_f u) = -[\nabla \cdot \delta_f uu] - \nabla p + [\nabla \cdot \tau] + \delta_f g + F$	4.2
$\frac{\partial}{\partial t} (\delta_f E) + \nabla \cdot (u (\delta_f E + p)) = \nabla \cdot \left(\lambda_e \nabla T - \sum_j h_j J_j + (\tau_e \cdot u) \right) + S_h$	4.3

Tabla 4.1: Ecuaciones de conservación de materia, cantidad de movimiento y energía que resuelve el programa *ANSYS FLUENT* en la plataforma CFD.

La ecuación de conservación de materia (ecuación 4.1), es válida tanto para flujos compresibles como incompresibles. El término S_m representa la masa

incorporada a la fase continua proveniente de una segunda fase dispersa (ej. vaporización de gotas de líquido) o alguna otra fuente definida por el usuario. En las simulaciones que se presentan en este trabajo este término será considerado nulo.

La ecuación 4.2 establece el balance de conservación de cantidad de movimiento donde, p es la presión estática, τ es el tensor de esfuerzo de corte y los términos $(\delta_f g)$ y F representan la fuerza gravitatoria que actúa sobre el cuerpo y las fuerzas externas aplicadas al mismo, respectivamente.

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

$$\tau = \mu_f \left[\left(\nabla u + \nabla u^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot u I \right) \right] \quad (4.4)$$

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

Para un fluido newtoniano con densidad y viscosidad constantes la ecuación 4.2 puede simplificarse incorporando la ecuación de continuidad, $(\nabla \cdot u) = 0$, para obtener la ecuación 4.5, conocida como ecuación de Navier-Stokes.

$$\delta_f \frac{\partial u}{\partial t} = -\delta_f [\nabla \cdot uu] - \nabla p + \mu_f \nabla^2 u + \delta_f g \quad (4.5)$$

La ecuación 4.3 representa la expresión general del balance de energía que emplea el programa, donde λ_e es la conductividad térmica efectiva ($\lambda + \lambda_t$, expresión en la cual λ_t es la conductividad térmica turbulenta definida según el modelo de turbulencia adoptado) y J_j es el flujo difusivo de las especies j . Los tres primeros términos del lado derecho de la ecuación 4.3 representan la energía transferida por conducción, difusión de especies y disipación viscosa, respectivamente. El término S_h incluye el calor de reacción y cualquier otra fuente de calor volumétrica existente.

En la ecuación 4.3,

$$E = h - \frac{p}{\delta_f} + \frac{u^2}{2} \quad (4.6)$$

$$h = \sum_j x_j h_j + \frac{p}{\delta_f} \quad (4.7)$$

En la ecuación 4.7 x_j es la fracción másica de las especies j , y $h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{p,j} dT$, donde T_{ref} es 298.15 K.

Discretización en la técnica CFD

La resolución de las ecuaciones de gobierno se puede realizar de diferentes formas, de acuerdo al esquema de discretización utilizado. Se entiende por discretización a la acción de reemplazar las ecuaciones diferenciales que gobiernan el flujo del fluido por un conjunto de ecuaciones algebraicas que son resueltas en distintos puntos del dominio del problema

El método de discretización utilizado por *ANSYS FLUENT* es el de volúmenes finitos (MVF), basados en la forma integral de las ecuaciones diferenciales de conservación de cada volumen elemental, también denominado *volumen de control* o *celda*. Cada celda introduce como incógnita el valor de las variables en el centroide de la misma. Los flujos en los contornos de la celda se expresan por interpolación con los valores de las celdas contiguas o bien conforme a las condiciones de borde estipuladas, cuando algún contorno de la celda pertenece a los límites del sistema. Un proceso iterativo permite finalmente evaluar las variables en cada celda. Por lo tanto, la solución alcanzada es de naturaleza discreta.

Resumiendo, el método de volúmenes finitos consiste en:

- División del dominio en volúmenes de control, usando una malla computacional.
- Integración de las ecuaciones de gobierno en los volúmenes de control individuales para construir ecuaciones algebraicas para las variables dependientes discretas (“*incógnitas*”) tales como velocidades, presión temperatura, etc.
- Linealización de las ecuaciones discretizadas y solución del sistema de ecuaciones lineales resultante para dar valores actualizados de las variables dependientes.

Algoritmo de cálculo

El algoritmo de resolución, *Pressure-Based Solver* se utiliza para efectuar las simulaciones. Este algoritmo, resuelve secuencialmente las ecuaciones de transporte. Dado que las ecuaciones son no lineales y están acopladas, el proceso de resolución es iterativo, resolviéndose el conjunto completo de ecuaciones de gobierno en forma reiterada hasta que la solución alcanza la condición de convergencia.

Cada iteración, en el proceso de resolución, incluye los siguientes pasos:

1. Se actualizan las propiedades del fluido (tales como, densidad, viscosidad, calor específico) en base a la última solución hallada. En caso que el proceso de cálculo recién comience, las propiedades serán actualizadas en base a los valores de inicialización.
2. Se resuelven las ecuaciones de momento, en forma secuencial, usando los valores recientemente actualizados de presión y flujos de masa en las caras de las celdas, para obtener el campo de velocidades.
3. Se resuelve la ecuación de corrección de presión usando el campo de velocidades y flujos de masa recientemente obtenidos.
4. Se corrigen los flujos de masa en las caras de las celdas, presión y campo de velocidades usando la corrección de presión obtenida en el paso 3.
5. Se resuelven ecuaciones adicionales para escalares, si se incluye alguno, tales como, turbulencia, energía y especies usando los valores actualizados de las variables del paso anterior.
6. Se actualizan los términos fuente originados de las interacciones entre las diferentes fases.
7. Se verifica la convergencia de las ecuaciones.

Estos pasos se realizan hasta que se alcanza el criterio de convergencia escogido.

Condiciones de Borde

Establecer las condiciones de borde consiste en fijar los valores de ciertas variables en los límites del dominio. Adicionalmente deben establecerse las condiciones iniciales de las variables, a partir de cuyos valores comenzará el proceso iterativo. Existen diversos tipos de condiciones de fronteras disponibles en el programa *FLUENT*. A continuación se describen las principales características las que se utilizan con mayor frecuencia.

- ✓ *Fronteras de entrada y salida de flujo:* *FLUENT* permite definir diez tipos diferentes de fronteras para la especificación de flujos que ingresan o salen del sistema. Las utilizadas con mayor frecuencia son:

Velocidad en la entrada: se utiliza para definir la velocidad y las propiedades del flujo en la frontera de entrada al sistema.

Presión en la entrada: se utiliza para definir la presión absoluta y propiedades del flujo de fluido en la frontera de entrada del sistema.

Presión de salida: se utiliza para definir la presión en la frontera de salida del sistema.

✓ *Paredes y fronteras repetitivas*

Paredes: estas fronteras se utilizan para limitar regiones sólidas y fluidas. A este tipo de fronteras se les puede ingresar información sobre los siguientes aspectos:

- Condiciones térmicas.
- Condiciones de cizallamiento (para deslizamientos de pared).
- Rugosidad de pared (para flujos turbulentos).
- Presencia de reacciones químicas.

Fronteras simétricas: son utilizadas cuando tanto la geometría del sistema de interés como los patrones de flujo y térmico esperados para la solución, presentan simetría especular.

Fronteras periódicas: son utilizadas cuando tanto la geometría del sistema de interés como los patrones de flujo y térmico esperados para la solución, presentan una naturaleza repetitiva de tipo periódico.

✓ *Fronteras internas*

Este tipo de fronteras se definen sobre las caras de los volúmenes de control, lo que significa que no poseen un espesor finito. Permiten introducir un cambio abrupto en las propiedades del fluido. Se las utiliza generalmente para implementar modelos para la simulación de ventiladores y membranas porosas delgadas.

Una vez establecidas las condiciones de borde, se debe formular la condición inicial. Para lograr una convergencia rápida, es deseable que el valor inicial esté próximo al valor de la solución final. Determinadas las condiciones de contorno, el modelo físico está definido y se puede alcanzar la solución numérica.

Caracterización de las celdas

Las celdas que conforman el dominio pueden definirse como zonas: fluido, sólida, o porosa. Dichas zonas caracterizan el dominio de cálculo y se definen en el módulo de resolución de *FLUENT*. Es posible distinguir una o más zonas con comportamientos diferentes dentro de un único dominio de cálculo.

Fluido: una zona definida como fluido es un grupo de volúmenes de control para los cuales todas las ecuaciones previamente activadas son resueltas. El único requisito de entrada para una zona fluida es que se debe indicar el tipo de fluido.

Sólido: una zona sólida es un grupo de volumen de control para los cuales sólo se resuelve la ecuación de transferencia de calor por conducción, sin incluir componentes de flujo. Se deben precisar las propiedades del material que lo constituye.

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

Modelos de turbulencia

Un aspecto específico de la CFD es el tratamiento de la turbulencia, dado que el régimen turbulento aparece en una gran cantidad de los casos prácticos. El régimen turbulento se establece debido a que el flujo se inestabiliza y se generan componentes aleatorios de velocidad, los que deben ser evaluados para la obtención de buenos resultados en una simulación por CFD. En principio con las ecuaciones de Navier-Stokes se podría resolver cualquier campo de velocidad. Sin embargo, en el caso que el flujo sea turbulento, el tamaño de la malla debería ser inferior al tamaño de los torbellinos más pequeños. Ello provocaría, que el número de nodos planteados fuese enorme e inaplicable a problemas de escala industrial. Por esta razón se utilizan los denominados modelos de turbulencia, que por medio de aproximaciones (ecuaciones de transporte adicionales, correlaciones, funciones de filtro) permiten resolver los flujos turbulentos en forma práctica. Sin embargo, el comportamiento de estos modelos es dependiente del problema que se quiere resolver, y se requiere cierta experiencia para la selección del modelo adecuado para cada aplicación, así como para llevar a cabo el ajuste de los coeficientes implicados.

La opción práctica en el análisis del problema de fluidos es plantear un número de celdas razonables o abordables en función de los recursos computacionales disponibles. Sin embargo, la consecuencia probable es que las celdas tengan un tamaño excesivo para capturar la pequeña escala de la turbulencia, de manera tal que requieren modelos específicos que capturen sus efectos. Existen dos grandes grupos de modelos de turbulencia, aunque también existen combinaciones de ambos.

- Modelos RANS (*Reynolds-Averaged-Navier Stokes*): las variables se consideran como resultado de la suma de un valor promediado más un término que supone una fluctuación temporal. Esta descomposición se introduce en la ecuación de Navier Stokes y el nuevo término fluctuante

da lugar a ecuaciones diferenciales adicionales de nuevas variables relacionadas con la turbulencia (parte fluctuante). Además, las herramientas se simplifican al despreciar los términos con productos cruzados de velocidad. Dentro de esta gama de modelos se encuentran los clásicos modelos RANS de una ecuación Spalart-Allmaras y dos ecuaciones como el k- ϵ o k- ω .

- Modelos LES (*Large Eddy Simulation*): se realiza un filtrado de las contribuciones a la ecuación de Navier Stokes que la malla no puede captar, es decir, las contribuciones de los torbellinos más pequeños. La ecuación que queda planteada captura los torbellinos de gran escala. Sin embargo, los de pequeña escala también afectan el resultado, de manera que sus efectos se tienen en cuenta añadiendo un nuevo término en la ecuación.

La elección del modelo de turbulencia dependerá de las condiciones específicas del flujo de fluido, de la capacidad de cálculo computacional y del tiempo disponible del recurso informático para realizar la simulación.

Tratamiento de la región cercana a la pared en flujos turbulentos

Para flujos turbulentos, la presencia de paredes afecta en gran medida el comportamiento del fluido. Los perfiles de velocidad son afectados por la condición de no-deslizamiento que debe cumplirse sobre la pared. Sin embargo, la presencia de la pared también modifica de forma no trivial la turbulencia. En la zona muy cerca a la pared el amortiguamiento viscoso reduce las fluctuaciones de la velocidad tangencial, mientras el bloque cinemático reduce las fluctuaciones normales. Hacia la parte externa de la región cercana a la pared, sin embargo, la turbulencia se incrementa rápidamente por la producción de energía cinética turbulenta debida a los elevados gradientes de la velocidad media (*Theory Guide ANSYS FLUENT 14.5*).

El modelado de la región cercana a la pared impacta significativamente en la exactitud de las soluciones numéricas, ya que las paredes son la fuente principal de la generación de vórtices y de turbulencia. Es necesario por lo tanto, efectuar una representación de la capa límite de manera precisa para obtener una buena predicción de los flujos turbulentos delimitados por dichas superficies.

Numerosos experimentos han demostrado que la región cercana a la pared puede ser subdividida en tres capas:

- Capa interna, denominada "subcapa viscosa", el flujo es prácticamente laminar y la viscosidad molecular juega un rol dominante en la transferencia de momento, calor o materia.
- Capa externa, denominada "subcapa completamente turbulenta", la turbulencia juega el rol principal.
- Capa de transición, denominada "subcapa intermedia", es una región entre la subcapa viscosa y la capa completamente turbulenta, donde los efectos de la viscosidad molecular y la turbulencia poseen una relevancia semejante.

La figura 4.1 esquematiza las subdivisiones de la región cercana a la pared, en un gráfico semi-logarítmico, donde u_t es la velocidad característica sobre la pared, definida como $u_t = \sqrt{\tau_w/\delta_f}$ e $y^+ = u_t y/\nu$ es la distancia adimensional normal a la pared, donde y es la distancia normal a la pared.

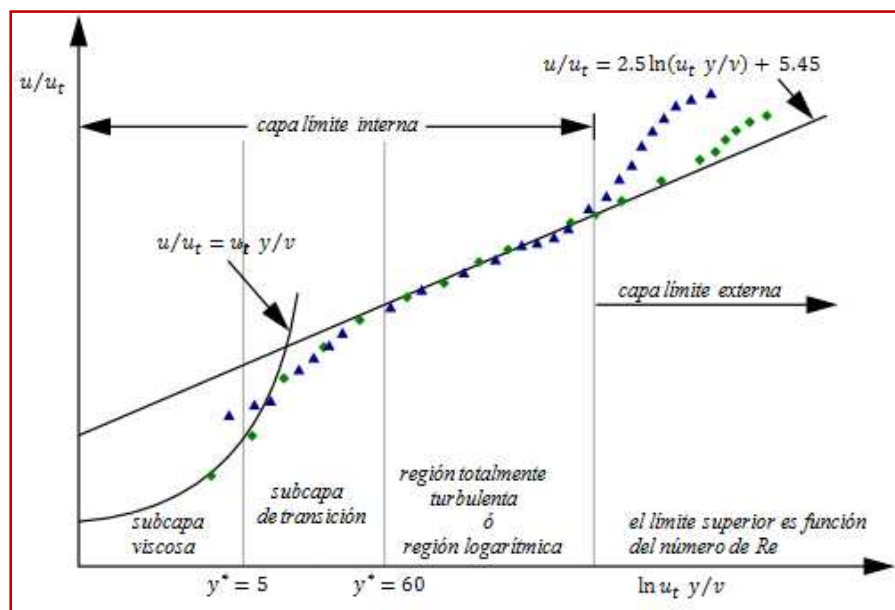


Figura 4.1: Esquema de la capa turbulenta, subdivisiones de la región cercana a la pared (*Theory Guide-ANSYS FLUENT 14.5*).

El parámetro y^+ se utiliza para determinar el refinamiento necesario que debe tener la malla en la zona cercana a la pared, de manera de cumplir las condiciones necesarias para un correcto tratamiento de la región cercana a la pared seleccionado en la herramienta *ANSYS FLUENT*. Independientemente de las condiciones del flujo o del espesor de la capa límite, el mismo valor de y^+ siempre se encontrará en la misma zona proporcional de la capa límite. Como se menciona anteriormente, la capa límite

turbulenta se puede dividir en tres subcapas bien diferenciadas. De esta manera, cada subcapa se encuentra en un rango de y^+ determinado, los valores se muestran en la figura 4.1 de manera aproximada.

Parámetros de iteración

Existen dos parámetros de iteración principales cuyos valores deben establecerse antes de comenzar la simulación: los factores de sub-relajación (que determinan el ajuste de la solución luego de cada iteración) y los valores de corte del residuo (que indican cuándo finalizar el proceso de iteración).

Debido a la no linealidad del sistema de ecuaciones que conforman el esquema de la CFD, es necesario controlar el cambio de cada una de las variables (masa, cantidad de movimiento, densidad). Esto se logra mediante el factor de sub-relajación, el cual reduce el cambio de la variable producido durante cada iteración. Un valor alto de este factor resultará en una rápida convergencia, siempre y cuando el procedimiento iterativo sea estable. Para sistemas fuertemente no lineales un valor alto de sub-relajación puede provocar la divergencia de la solución. Al disminuir este factor se reduce la magnitud de los cambios entre iteraciones, necesiéndose un mayor número de iteraciones, pero se alcanza la convergencia.

El segundo parámetro, el valor residual, determina cuándo la solución ha convergido. Éste, de modo general, representa la diferencia entre los valores de las variables a resolver entre dos iteraciones. Si la solución converge, estas diferencias tiende a reducirse hasta alcanzar un valor muy pequeño en el que se estabilizan. En un caso ideal, debería hacerse cero, pero los ordenadores tienen precisión finita, por lo que se puede conseguir que los residuos se estabilicen en torno a seis órdenes de magnitud respecto a los valores iniciales (cálculos de simple precisión).

4.2.4.3- Post-procesamiento

Esta es la etapa final de un trabajo de modelado por CFD, y permite la visualización de los resultados obtenidos. La CFD proporciona información referida a presión, velocidad, densidad, temperatura y otras variables o propiedades en todos los puntos del dominio de flujo simulado. En consecuencia, al finalizar la simulación se debe realizar el tratamiento de estos datos, con el fin de obtener sólo aquellos pertinentes al trabajo en curso. *ANSYS-FLUENT* cuenta con una serie de herramientas muy útiles para la visualización de los resultados, entre las que se incluyen:

- Diagramas vectoriales del campo de velocidades.
- Diagramas de contorno, de presión, fracción de sólido, etc.
- Trazado de superficies en 2D y 3D.
- Trazado de líneas de corriente.

El programa también brinda la posibilidad de exportar los resultados para poder ser analizados con otro *software* para diferentes finalidades.

PARTE II

4.3. - Simulación de lechos fijos

En los últimos quince años, la utilización de la CFD para el estudio del comportamiento de lechos fijos se ha incrementado significativamente. Ello incluye la predicción de las variables intersticiales e, incluso, intraparticulares.

Los trabajos reportados incluyen diversos aspectos, tales como técnicas de implementación y procedimientos seguidos para la validación de predicciones con información experimental. Las variables predichas involucran campos de velocidad de fases en movimiento, caída de presión, velocidades de transferencia de calor y materia y comportamiento de catalizadores (en los sistemas que implican trabajar con catalizadores sólidos) [Dixon y col., 2006](#) discutieron las diferentes contribuciones realizadas hasta el año 2005, mientras que, recientemente [Dixon, 2012](#), en su trabajo de revisión, sobre la transferencia de calor radial actualizó los aportes de CFD en ese aspecto. Actualmente, con los recursos computacionales estándar, no es posible llevar a cabo la simulación de reactores de lecho relleno catalítico con intercambio de calor radial en gran escala.

[Behnam y col., 2013](#) propusieron un modelo que evita el uso de los parámetros de transporte efectivo debido al flujo convectivo. Este enfoque emplea directamente la información de CFD, haciendo uso de las velocidades radiales y axiales promediadas a partir de las simulaciones de CFD. Por otro lado, un número considerable de trabajos donde se aplica la CFD se dedicaron al estudio de aspectos específicos del transporte de calor radial (por ejemplo [Romkers y col., 2003](#); [Nijemeisland y Dixon, 2004](#); [Guardo y col., 2005](#); [Magnico, 2009](#); [Dixon y col., 2012](#)), pero la información provista no es adecuada para estimar los parámetros tales como h_{wf} y h_f del modelo 2R2D propuesto en esta tesis, como se explicara en el capítulo 3.

Para el modelado de un lecho fijo existen dos enfoques en las plataformas de CFD. En el primero de ellos el lecho se representa mediante un medio poroso efectivo, con parámetros efectivos de dispersión y transporte de calor y campos de velocidad promediados en una escala que involucra un número de partículas suficiente como para representar el comportamiento de todo el lecho. Este enfoque permite predecir el campo de velocidad en la escala del lecho, y sus consecuencias sobre los distintos procesos que tienen lugar en el mismo, sin apelar de antemano a suposiciones tales como la de flujo pistón.

El segundo enfoque es aquel sobre el cual se describió la técnica de CFD en el presente capítulo, es decir aquel que identifica la posición de todas las partículas del lecho, la geometría de los espacios inter-particulares y se aborda el planteo y la resolución de las ecuaciones de conservación microscópicas en los intersticios y, de ser necesario en cada pieza de relleno. Frecuentemente esta modalidad se denomina de *partículas discretas*. Consecuentemente, la generación de la malla se convierte en un paso considerablemente más complejo y delicado, debido a un significativo incremento de la demanda computacional. Frecuentemente, y con el fin de reducir la geometría del sistema a simular, se puede emplear la opción de fronteras periódicas como condiciones de borde para un conjunto acotado de pastillas, con la expectativa que el mismo sea representativo del lecho en su totalidad. A partir de estas simulaciones, es posible estudiar patrones de flujo a través de la estructura de un lecho y comprender su influencia sobre el transporte de materia y energía. Los resultados de estas simulaciones "rigurosas" pueden ser luego utilizados para ajustar adecuadamente parámetros efectivos para los modelos de medio poroso efectivo comentados más arriba en esta sección.

4.3.1.- Procedimiento de resolución

En este trabajo se utilizó la técnica de CFD de partículas discretas, referida en la sección anterior. Si bien, en general, el volumen de cada partícula puede dividirse en volúmenes de control para evaluar, por ejemplo, el campo de temperatura en su interior, para el presente trabajo solo se discretizan las superficies externas de las partículas a fin de establecer la condición de contorno de no deslizamiento requerida para describir el campo de la velocidad de fluido intersticial. Esta simplificación se ha podido adoptar porque el objetivo de la investigación planteada es evaluar las contribuciones

convectivas del fluido a la transferencia de calor radial, para lo cual se adoptan partículas sólidas no conductoras de calor.

A partir de las consideraciones descritas, se concluyó que no resultaba factible llevar a cabo la simulación del lecho completo. En este contexto, se debió acotar la geometría a tratar. Se decidió, en primer lugar, llevar a cabo las simulaciones sobre lechos estructurados conformados por partículas esféricas y dispuestas según arreglos geométricos regulares, los cuales serán descritos en el capítulo 5. En segundo lugar, se analizó un lecho relleno al azar con relación de aspecto $N=5$, conformado por partículas esféricas de un único tamaño, contenidas en un tubo circular, como se presentará en detalle en el capítulo 7. Para el mismo se empleó el máximo número de pastillas que permitió la capacidad computacional disponible.

4.3.1.1.- Arreglos regulares

En esta sección, se describirán los aspectos de mayor significación en el marco del programa *ANSYS-FLUENT* 14.5, relevantes para llevar a cabo las simulaciones de lechos fijos con arreglos regulares.

La modalidad utilizada para la construcción de la celda de cálculo requiere, secuencialmente, adoptar un esquema estructural (geométrico) para el lecho y definir una alternativa metodológica específica, que incluye la determinación de las condiciones de borde, para su resolución por CFD.

Una vez definido el esquema estructural (capítulo 5), se construyeron celdas de cálculo utilizando la condición de borde de fronteras repetitivas, en la modalidad periódica y simétrica. A modo de ejemplo, en la figura 4.2, se ilustra la geometría adoptada y las condiciones de contorno para un segmento de lecho fijo conformado por dos paredes planas a temperatura constante con siete estratos de partículas sólidas en su interior, dispuestas de acuerdo a un arreglo espacial romboédrico.

Los campos de flujo de las variables a lo largo de una cara de una frontera periódica se vinculan numéricamente con una segunda cara de manera idéntica. Por lo tanto, el flujo que "sale" a través de la primera frontera periódica puede considerarse que "ingresa" a través de la segunda con propiedades idénticas (velocidad) o dependientes solo de la variable axial (presión, temperatura). Estas fronteras permiten trabajar con un dominio computacional mucho menor que el campo de flujo completo y, por lo tanto, se ahorren recursos.

La condición de frontera de simetría se utiliza cuando la geometría física de interés y los patrones de flujo/térmico esperados para la solución tienen simetría especular. *ANSYS FLUENT* asume un flujo nulo de todas las cantidades en la frontera de simetría, considerando que no existen flujos convectivos ni difusivos a través del plano de simetría. Por lo tanto la componente normal de velocidad al plano de simetría, y los gradientes en todas las variables de flujo en la dirección normal al plano de simetría son cero en ambos casos. Para flujos físicos con uno o más planos de simetría, esta condición de frontera permite modelar solamente parte del dominio de flujo físico, reduciendo de esta manera los requerimientos computacionales.

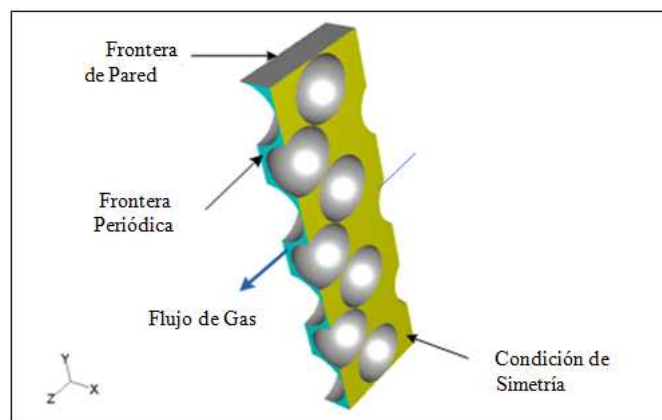


Figura 4.2: Condiciones de borde en la celda de cálculo seleccionada.

Como se mencionó en la sección 4.2.4, la generación de la malla que define las celdas en las que se calculan las variables de flujo en todo el dominio computacional es probablemente el paso más importante. Las mallas que se emplean en este estudio se originaron con el paquete de generación de malla *Meshing*, provisto por el *software ANSYS FLUENT*.

Las mallas pueden ser estructuradas o no estructuradas. Una malla no estructurada consta de celdas de varias formas, tetraedros o hexaedros (3D). Se debe enfatizar la calidad de la malla requerida, compatible con soluciones confiables de la CFD. En particular, debe verificarse que ninguna celda se encuentre "sesgada" porque ello podría crear dificultades en convergencia de la solución numérica.

Para la generación de la malla se emplearon volúmenes de control tetraédricos, y se observó que, en las zonas que rodean los puntos de contacto entre las partículas y entre las partículas y la superficie de pared, se generan elementos extremadamente sesgados. Ello conduce a mallas con muy baja calidad. Para evitar este inconveniente es necesario, introducir alguna modificación geométrica sobre las partículas esféricas. De

esta manera, se realizó una disminución del 1 % del diámetro de las esferas, pero manteniendo su posición en la celda. En estas regiones resultó necesario el refinamiento de la malla.

A tal fin, en las zonas identificadas como críticas se utilizó el método definido como "funciones de tamaño", las cuales administran el tamaño de los elementos en que se divide el volumen para su tratamiento numérico. La función de tamaño varía de acuerdo a tres parámetros:

- Tamaño inicial (*start size*), determina el tamaño de partida para el mallado en los puntos de la geometría que requieren de una malla más refinada.
- Velocidad de crecimiento (*growth rate*), determina la modalidad de incremento de tamaño de los elementos a partir de la célula inicial.
- Tamaño límite (*size limit*), impide la generación de elementos de volumen de mayor tamaño al especificado.

Las funciones de tamaño se aplican a todos los puntos críticos. A partir de ellos, se construye la malla en tres dimensiones con el refinamiento centrado en dichos puntos y una malla con volúmenes de control de mayor tamaño en las zonas menos críticas (*Theory Guide ANSYS FLUENT 14.5*).

Para la simulación numérica, es imprescindible contar con una malla de alta calidad. En el proceso de su definición, se debe comprobar la independencia de la misma. El método estándar para probar la independencia de la malla es incrementar la resolución (en un factor de 2 en todas las direcciones si es posible) y repetir la simulación. Si los resultados no cambian de manera considerable, es probable que la malla original sea la adecuada. Si, por otro lado, surgen diferencias importantes entre las dos soluciones, la malla original es quizá de resolución inadecuada. En este caso, debe probarse inclusive una malla más fina hasta que se resuelva de manera satisfactoria. El monitoreo del comportamiento de los resultados se lleva a cabo en función de los valores obtenidos para variables fundamentales, consideradas como criterio de aceptación de la malla. Debe señalarse que para flujos tridimensionales, duplicar el número de intervalos en cada dirección incrementa la cantidad de celdas en un factor de 8. Es posible ver cómo estudios de independencia de malla superan fácilmente los límites de capacidad de memoria de sistemas informáticos convencionales. Si no es posible duplicar el número de intervalos debido a las limitaciones del equipo

computacional, una buena regla empírica consiste en incrementar el número de intervalos en al menos 20% en todas las direcciones (Cengel y Cimbala, 2006).

En el caso de estudio, se llevó a cabo el proceso de validación del mallado, ensayando mallas de diferentes grado de refinamiento, para la condición fija definida por $Re_p = 1000$. Los parámetros de aceptación de malla seleccionados fueron la caída de presión y el flujo de calor transferido en la pared del tubo. De esta manera, se emplearon mallas con un número de volúmenes de control de alrededor de $2 \cdot 10^6$ en las celdas de cálculo de los arreglos de la figura 5.2 (capítulo 5). En la figura 4.3 se muestra el aspecto final de la malla para el arreglo hexagonal compacto (Hcp).

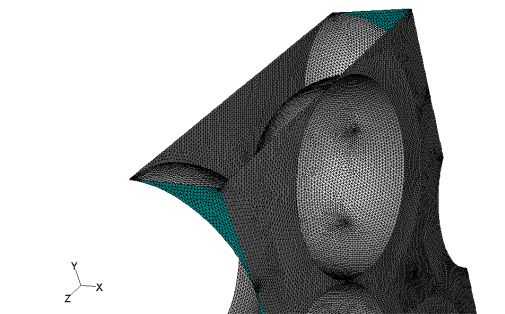


Figura 4.3: Apariencia de la malla para el arreglo Hcp, conformada por 2.331.396 volúmenes de control.

Para la selección del modelo de turbulencia se optó por el modelo Spalart-Allmaras, ya que se pudo observar que se logra una convergencia aceptable para el balance de energía, que no se obtuvo con los modelos de dos ecuaciones (k-epsilon o k-omega) y considerando las conclusiones reportadas por Guardo y col., 2005. Los autores analizan los modelos de turbulencia y concluyen que el modelo Spalart-Allmaras conduce a una mejor concordancia (con respecto a correlaciones empíricas de uso habitual) que el resto de los modelos ensayados, tanto en la evaluación de la pérdida de carga como en la estimación de los parámetros de transferencia de calor. Otra ventaja de este modelo reside en que selecciona automáticamente el tipo de tratamiento a aplicar para la consideración de la turbulencia en las zonas cercanas a las paredes.

A continuación se describe la metodología seguida en la implementación de las simulaciones en el programa *FLUENT* utilizadas en el caso de lecho con relleno en arreglo estructurado:

- Se utilizó el método *Pressure based* de resolución, que resuelve las ecuaciones de gobierno discretizadas en forma secuencial en cada ciclo de iteración. En todos los casos las iteraciones se realizaron inicialmente con esquemas de

discretización de primer orden, para luego pasar a esquemas de segundo orden que arrojan resultados con mayor precisión.

- Las simulaciones se realizaron en el modo de simple precisión. Mediante ensayos de prueba, se comprobó la inconveniencia de utilización de doble precisión, porque conduce a un incremento significativo del tiempo de cálculo sin proporcionar una mejora acorde en la calidad de los resultados.
- Se emplearon las dos modalidades de flujo: laminar y turbulento. Como se mencionó previamente, para las simulaciones bajo flujo turbulento se utilizó el modelo de turbulencia Spalart-Almaras. El valor promedio y^+ en la superficie de las esferas, en todos los casos, fue menor que 5, lo que constituye un requerimiento del *software* para asegurar resultados confiables. Los resultados a $Re_p = 100$ fueron obtenidos utilizando cálculos laminares, mientras que para valores superiores del número de Reynolds se utilizó el modelo turbulento.
- Los factores de sub-relajación se modificaron gradualmente durante las simulaciones. Los valores finales obtenidos fueron de 0.7 para presión, 0.3 para momento y 0.95 para energía. En el caso de las simulaciones de flujo turbulento, los factores de sub-relajación de las variables que controlan la turbulencia alcanzaron el valor de 0.88.
- Las iteraciones se interrumpieron y consideraron en su estado final cuando los residuos para las ecuaciones de momento y turbulencia alcanzaron valores del orden de 10^{-5} y se verificó que, simultáneamente, el gradiente de presión se mantuviera constante. El procedimiento de iteración para resolver la ecuación de conservación de energía se consideró finalizado cuando los valores de los residuos fueron del orden de 10^{-8} y también se exigieron valores prácticamente constantes de flujo de calor en la pared.
- El tiempo de simulación varió entre 24 y 36 horas, dependiendo de la malla utilizada para los arreglos regulares estudiados. En contraposición, para el arreglo al azar (se referirá en la sección siguiente) el tiempo de simulación requerido varió entre 7 y 10 días. En ambos casos, para alcanzar la condición de convergencia, se requirió un número de iteraciones comprendido entre 11000 y 150000.

Finalmente, debe mencionarse que todas las simulaciones se realizaron en estado estacionario y que para los diferentes caudales de gas en el rango de las simulaciones $100 < Re_p < 2000$, las propiedades del aire se consideraron uniformes.

4.3.1.2.- Arreglos al azar

Para la geometría del lecho relleno al azar se empleó la metodología descrita anteriormente para las distintas etapas del procedimiento de resolución. Las consideraciones específicas de los aspectos geométricos, así como la descripción de particularidades necesarias para la generación de la malla se detallarán en el capítulo 7.

4.4.- Conclusiones del capítulo

En este capítulo se describió una metodología de resolución para la simulación de lechos fijos en base a la utilización de CFD. Particularmente se realizó una síntesis breve de las etapas y modalidades necesarias para construcción de la celda de cálculo, generación de la malla e implementación de la simulación por CFD.

En particular, sobre el caso de interés en la tesis doctoral representado por lechos de baja relación de aspecto, se analizaron diferentes arreglos regulares, y se establecieron las condiciones de contorno de la celda de cálculo, utilizando fronteras repetitivas, en la modalidad periódica y simétrica. Se detallaron las consideraciones indispensables para la generación de la malla de cálculo y la independencia del mallado (condiciones de validación y parámetros de aceptación de la densidad de la malla).

Finalmente se discutió la selección del modelo de turbulencia más apropiado y se informaron los valores de diferentes parámetros que rigen la resolución numérica.

CAPITULO 5

ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS DEL MODELO 2R2D-CORRELACIONES FORMULADAS EN BASE A ARREGLOS REGULARES

5.1 Introducción

5.2 Adecuación del modelo 2R2D para geometría plana

5.3 Geometrías utilizada para los arreglos regulares

5.4 Resultados y correlaciones formuladas para arreglos regulares

5.4.1 Coeficiente de transferencia de calor h_{wf}

5.4.2 Coeficiente de transferencia de calor h_f

5.4.3 Relación de velocidades superficiales másicas G_1/G_c entre las regiones de pared y central

5.5 Comparación de los coeficientes h_{wf} y h_f con correlaciones de literatura

5.6 Conclusiones del capítulo

CAPITULO 5

ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS DEL MODELO 2R2D-CORRELACIONES FORMULADAS EN BASE A ARREGLOS REGULARES

5.1.-Introducción

En el capítulo 3 se presentó la formulación de un nuevo modelo de dos zonas para reactores de lecho fijo cilíndricos con pastillas catalíticas de geometría esférica, identificado como modelo bidimensional de dos zonas (2R2D) y se discutieron sus potenciales ventajas sobre modelos previos. El modelo 2R2D propuesto se formuló considerando los efectos causados por la presencia de la primera capa de partículas, lo que resulta en una corrección del modelo S2D. La primera capa de partículas se describe en forma discreta en la conformación del modelo, mientras que se supone que el resto de las partículas que conforman el lecho (partículas interiores) se comportan como un medio pseudo-continuo.

Las ecuaciones de balance de masa y energía térmica del modelo 2R2D para un lecho relleno cilíndrico considerando que se lleva a cabo una reacción catalítica sobre partículas de catalizador esférico, se describió en la sección 3.2.2 del capítulo 3.

En este capítulo se describe el modelado de un lecho relleno utilizando el enfoque de *partículas discretas* mediante la simulación por CFD. Esta modalidad de aplicación de la CFD implica la identificación de la ubicación de cada una de las partículas en el lecho relleno o en una parte representativa del mismo, y la discretización del volumen del fluido intersticial en elementos 3D, lo que permite resolver las ecuaciones de conservación subyacentes. Generalmente, cada volumen de partícula puede ser discretizado para tener en cuenta la masa de fluido-sólido y el calor intercambiado. En este trabajo, se realiza el mallado de la superficie externa de las partículas, exclusivamente. Ello permite establecer la condición de contorno de no deslizamiento, necesaria para describir el campo de velocidad del fluido. Esta simplificación se realizó debido a que el objetivo de los cálculos es evaluar la contribución convectiva del fluido a la transferencia de calor radial, para lo cual las partículas sólidas se consideran no conductoras.

La simulación de lechos fijos en base a modelos de partículas discretas implica un gran esfuerzo computacional. Particularmente, la aplicación de la técnica de CFD a este problema, fue descripta detalladamente, en el capítulo 4, haciendo mención

específica de la necesidad de refinar la malla de cálculo, con el fin de evaluar apropiadamente los perfiles de velocidad y temperatura. En tal contexto se consideró, en primer término, la representación del lecho fijo en base a rellenos descriptos geoméricamente por arreglos regulares de partículas esféricas contenidos entre paredes planas actuando como fuente de calor. Teniendo en cuenta que los efectos de extremos no influirían sobre los resultados (no deberían hacerlo en tubos de instalaciones industriales con valores considerables de la relación entre la altura del tubo y el diámetro de partícula), la elección de arreglos regulares permite utilizar celdas de cálculo conteniendo un número de partículas relativamente bajo, con fronteras periódicas a lo largo de la dirección de movimiento principal del fluido (axial).

En la sección 5.2 se presenta la formulación del balance de calor en la corriente de fluido, adecuado para una geometría simplificada, consistente en un lecho relleno contenido entre paredes planas, las que actúan como fuentes de calor a temperatura constante T_w y sin ocurrencia de reacción catalítica, con la suposición de partículas no conductoras de calor, tal como se utilizó en las simulaciones CFD que se describirán luego. Ello constituye un intento preliminar para llevar a cabo la estimación de los parámetros h_{wf} y h_f del modelo 2R2D. A tal fin, en la sección 5.3, se llevaron a cabo simulaciones por fluidodinámica computacional (CFD), utilizando diferentes arreglos regulares de partículas esféricas en lechos rellenos entre paredes planas.

En la sección 5.4 se presentan las regresiones que permiten obtener los parámetros h_{wf} , h_f y G_1/G_c , junto con las correlaciones propuestas en función de parámetros estructurales (ε_1 y ε_c), y números de Reynolds y Prandtl (Re_p , Pr).

Finalmente en la sección 5.5 se analizan correlaciones existentes en la bibliografía, que permiten evaluar el coeficiente de transferencia de calor en la pared h_w utilizando el modelo S2D, para comparar luego los valores obtenidos de este parámetro con los correspondientes valores de h_{wf} y h_f del modelo 2R2D.

5.2.-Adecuación del modelo 2R2D para geometría plana

En el capítulo 3 se remarcó la necesidad de estimar los parámetros convectivos del fluido h_{wf} y h_f del modelo propuesto. Para tal fin, en una primera etapa, se propone una simplificación en la geometría, utilizando lechos rellenos con arreglos regulares y paredes planas.

El esquema de la figura 5.1 permite describir el modelo 2R2D propuesto, para partículas esféricas de diámetro uniforme D_p contenidas en un dominio limitado por paredes planas. La figura permite visualizar la división de la corriente de fluido en una zona denominada "canal de pared" (definida entre la pared y una distancia perpendicular a la misma de longitud igual a $0.5D_p$), diferenciada de la zona o canal "central", en la cual no se discrimina la identidad de las partículas, utilizando un concepto de medio pseudo-homogéneo para la fase sólida. Bajo estas condiciones se muestra el comportamiento térmico de la corriente de fluido en el canal de pared adoptándose una descripción agrupada (*lumped*) para la temperatura (temperatura promedio de mezclado de taza T_1), donde la corriente de fluido intercambia calor con la superficie de la pared a una velocidad dada por el producto $[h_w(T_w - T_1)]$ y con la corriente del canal central a una velocidad $h_f(T_1 - T_{c,1})$. Para el canal central se propone un perfil de temperatura distribuido del fluido $T_c(y)$, con una conductividad efectiva uniforme $\lambda_{ef,c}$.

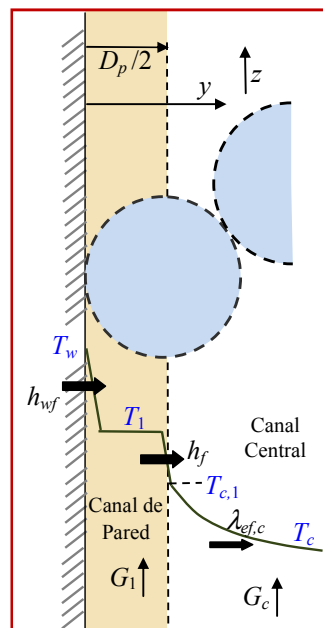


Figura 5.1: Representación esquemática del modelo 2R2D para geometría de paredes planas del recipiente.

En este desarrollo el énfasis será puesto sobre la contribución del fluido al transporte de energía térmica y se considerará que los mecanismos correspondientes son dominantes frente a la contribución de la fase sólida. Esta situación en la práctica, corresponde al caso de elevados valores de número de Reynolds, típicos de una importante variedad de procesos industriales. Debido que para la fase sólida se plantea

el concepto de medio pseudo-homogéneo, solo deberá ser considerada desde el punto de vista geométrico, cuando se realicen los cálculos de CFD.

Las siguientes ecuaciones de conservación de energía permiten evaluar los perfiles de temperatura $T_1(z)$ y $T_c(y,z)$, suponiendo que se analiza un lecho muy largo (en la coordenada x) para evitar la influencia de efectos externos en esa dirección.

En el canal de pared ($0 < y < D_p/2$):

$$c_{pf} G_1 \frac{dT_1}{dz} = \frac{2}{D_p} \left[h_{wf} (T_w - T_1) + h_f (T_{c,1} - T_1) \right] \quad (5.1a)$$

En el canal central ($y > D_p/2$):

$$c_{pf} G_c \frac{\partial T_c}{\partial z} = \lambda_{ef,c} \frac{\partial^2 T_c}{\partial y^2} \quad (5.1b)$$

En la frontera entre los canales de pared y central ($y = D_p/2$):

$$-\lambda_{ef,c} \frac{\partial T_c}{\partial y} = h_f (T_1 - T_{c,1}) \quad (5.2a)$$

Por simetría, en el centro del lecho ($y = W/2$)

$$\frac{\partial T_c}{\partial y} = 0 \quad (5.2b)$$

La resolución de las ecuaciones 5.1 y 5.2 para propiedades constantes del fluido y adoptando un perfil de temperatura arbitrario en un plano de referencia posicionado en $z = 0$ fueron reportadas por [Zambon, 2010](#) en forma de una serie infinita obtenida mediante el empleo de un enfoque de separación de variables. En este trabajo, se estudia el comportamiento para valores de z suficientemente grandes cuando el perfil de temperatura se desarrolla completamente. En este contexto, sólo se considera el término principal en la serie que constituye la solución:

$$T_1(z) = T_w + C \exp \left[-\beta^2 \frac{1}{Pe H} z \right] \left(\cos \beta - \frac{\beta \sin \beta}{Bi_f} \right) \quad (5.3a)$$

$$T_c(y, z) = T_w + C \exp \left[-\beta^2 \frac{1}{Pe H} z \right] \cos \left(\beta \frac{W - 2y}{W - D_p} \right) \quad (5.3b)$$

donde H es una altura determinada en el lecho (en el presente caso, la altura de la celda de cálculo empleada en los cálculos en CFD, véase capítulo 4, sección II), W es el ancho de la celda de de cálculo, C es una constante de integración y β es el autovalor positivo más pequeño de la solución, que se calcula mediante la resolución de:

$$\beta \tan \beta \left[\beta^2 - (Bi_{wf} + Bi_f) \frac{G_c (W - D_p)}{G_1 D_p} \right] = Bi_f \left[\beta^2 - Bi_{wf} \frac{G_c (W - D_p)}{G_1 D_p} \right] \quad (5.4)$$

En las ecuaciones 5.3b y 5.4 se incluyeron los grupos adimensionales siguientes:

$$Bi_f = \frac{h_f (W - D_p)}{\lambda_{ef,c} 2}; \quad Bi_{wf} = \frac{h_{wf} (W - D_p)}{\lambda_{ef,c} 2}; \quad Pe = \frac{(W - D_p)^2 c_{pf} G_c}{4H \lambda_{ef,c}} \quad (5.5)$$

Para el propósito de llevar a cabo la evaluación de los parámetros h_{wf} , h_f y G_1/G_c del modelo 2R2D a partir de cálculos instrumentados en la plataforma CFD, se utilizan valores promediados en la altura de la celda de cálculo H (que se denotan como $[\cdot]$). El valor promedio de flujo de calor $[Q_w]$ sobre la superficie de la pared de la celda de cálculo y el valor promedio de la temperatura de mezclado de taza $[T_1]$ en la región ($0 < y < D_p/2$) (esto es, en el canal de pared del modelo 2R2D) se evalúan a partir de los resultados de las simulaciones CFD. A partir de dichos valores, se calcula luego el coeficiente de transferencia de calor en la pared, del modelo 2R2D.

Partiendo del flujo de calor local en la pared, $Q_w = h_{wf}(T_w - T_1)$,

$$[Q_w] = h_{wf} (T_w - [T_1]) \quad (5.6)$$

Promediando las ecuaciones 5.3a y 5.3b sobre la altura H y usando la ecuación 5.6, se obtiene:

$$[T_c(y)] = T_w - \frac{[Q_w]}{h_{wf}} \frac{\cos\left(\beta \frac{W - 2y}{W - D_p}\right)}{(\cos \beta - \beta \operatorname{sen} \beta / Bi_f)} \quad (5.7)$$

La ecuación 5.7 permite obtener el perfil de temperatura $[T_c(y)]$ en la región central del lecho, de acuerdo al modelo 2R2D. A partir de las simulaciones llevadas a cabo por CFD, se obtienen los campos de temperatura y velocidad del fluido en todo el

dominio de la celda de cálculo, siguiendo la metodología descrita en el capítulo 4 de la presente tesis. Con los perfiles así obtenidos (correspondientes a valores de experimentación "virtual") se puede llevar a cabo una regresión, por mínimos cuadrados. De esta forma, los perfiles obtenidos por CFD permiten ajustar los parámetros h_f y $\lambda_{ef,c}$ contenidos en la expresión 5.7 del modelo 2R2D, en el número de Bi_f .

5.3.- Geometrías utilizadas para los arreglos regulares

Para las simulaciones por CFD se utilizaron cuatro arreglos regulares de esferas, los cuales se ilustran en la figura 5.2, junto con las denominaciones (siglas) y porosidades de acuerdo al modelo 2R2D. En la figura mencionada, el plano de "vista frontal" es paralelo a las superficies que contienen el relleno. La dirección del flujo de fluido en los esquemas de la figura 5.2 coincide con la coordenada z . Si la posición de los arreglos se mantiene y la dirección de flujo del fluido se rota alrededor de un eje perpendicular a los planos que representan a las paredes, el flujo principal de fluido enfrentará diferentes configuraciones de partículas. Por consiguiente, las simulaciones se llevaron a cabo con las direcciones de flujo representadas en la figura 5.2 y, adicionalmente, en situaciones rotadas 30 grados para Hcp y Orp y 45 grados para Ccp y Scp (nótese que un giro adicional con el mismo ángulo restablece la misma configuración representada en la figura 5.2). Los valores empleados para correlacionar h_{wf} , h_f y G_1/G_c son los promedios de ambas orientaciones del flujo de fluido.

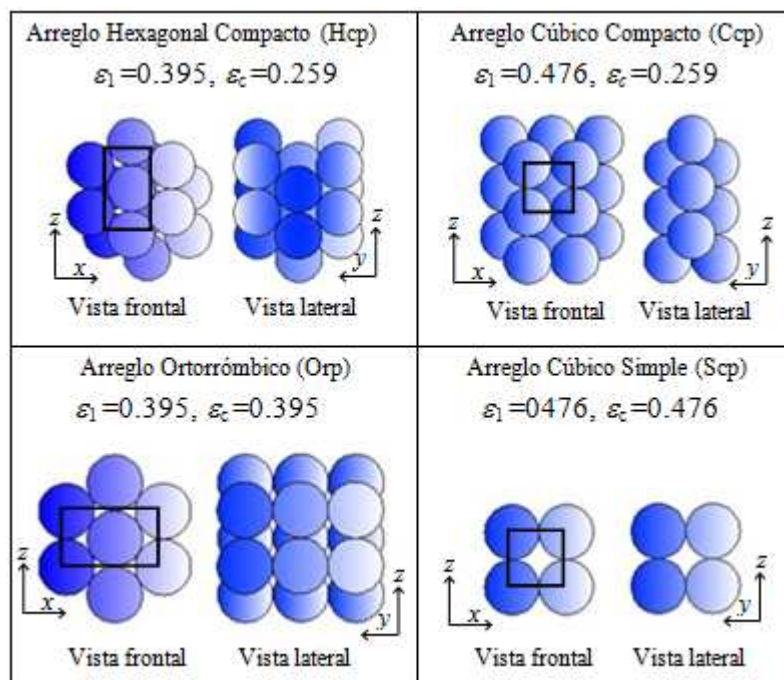


Figura 5.2: Arreglos regulares de partículas. La dirección del flujo de fluido es en la coordenada z .

Las secciones de los arreglos que conforman las celdas de cálculo en las simulaciones CFD se marcan con rectángulos de borde oscuro en la figura 5.2 para la orientación del flujo de fluido vertical.

Los valores resultantes de porosidad en la región de la pared y central para los cuatro arreglos de partículas considerados, se resumen en la tabla 5.1, junto con los valores promedio de la relación G_1/G_c calculados a partir de las simulaciones en el rango $100 < Re_p < 2000$, que serán utilizados como valores de referencia. Los arreglos esquematizados en la figura 5.2 proporcionan dos niveles de porosidad ε_1 , tres niveles de porosidad ε_c y tres niveles de la diferencia ($\varepsilon_1 - \varepsilon_c$).

Arreglo	ε_c	ε_1	G_1 / G_c
Hcp	0.282	0.412	2.41
Orp	0.415	0.414	0.84
Scp	0.491	0.492	0.96
Ccp	0.282	0.492	3.07

Tabla 5.1: Valores de porosidades y de la relación G_1 / G_c (promedio en $100 < Re_p < 2000$) para los arreglos espaciales representados en la figura 5.2.

Todas las simulaciones se realizaron bajo condiciones de estado estacionario. Para los diferentes caudales de gas en el rango de las simulaciones, las propiedades del aire se consideraron uniformes. En las simulaciones, se adoptaron diferentes valores de conductividad térmica del fluido, con el fin de analizar el comportamiento del sistema en el rango del número de Prandtl $0.4 < Pr < 3.5$.

5.4.- Resultados y correlaciones formuladas para arreglos regulares

Los campos de temperatura y velocidad correspondientes a diferentes condiciones de flujo para los cuatro arreglos regulares considerados se obtuvieron a partir de las simulaciones por CFD. Utilizando dichos resultados mediante la metodología descrita en las secciones precedentes de este capítulo, se obtuvieron las expresiones predictivas para los parámetros h_{wf} , h_f y la relación G_1/G_c en términos de parámetros estructurales del lecho (porosidad), parámetros fluidodinámicos (número de Reynolds) y de transporte (por ejemplo, número de Prandtl). En las siguientes secciones se presentan y discuten dichas correlaciones.

5.4.1.-Coeficiente de transferencia de calor h_{wf}

Para los arreglos representados en la figura 5.2, se presentan en la figura 5.3 los resultados en términos del número de Nusselt (Nu_{wf}) para todo el rango de número de Reynolds y $Pr = 0.814$ (figura 5.3).

El tipo de arreglo espacial ejerce un efecto considerable sobre el valor de Nu_{wf} . Con el fin de discriminar las razones básicas de este comportamiento, se considera en primer lugar, la porosidad en el canal de pared (ε_1). Los arreglos denominados Hcp y Orp arrojan valores más pequeños de porosidad ε_1 que los obtenidos para los casos de los arreglos Scp y Ccp (tabla 5.1), y los valores de Nu_{wf} son, en promedio, más grandes para el primer par. Esta tendencia puede atribuirse al hecho de que una baja porosidad implica que las partículas en la primera capa obstruirían con mayor intensidad el flujo de fluido en el canal de pared, evitando de esta manera, la formación de una capa límite de espesor elevado sobre la superficie de la pared. Por otra parte, el valor de Nu_{wf} depende de la velocidad superficial másica en el canal de pared G_1 (figura 5.1) en lugar de hacerlo la velocidad superficial másica global G , en el que se basa el Re_p global. A partir de los valores de referencia de la relación G_1/G_c que se muestran en la tabla 5.1, se puede inferir que para los arreglos Hcp y Orp, el valor de G_1 es sustancialmente mayor para el arreglo Hcp evaluados en el mismo valor de G , explicando de esta manera los valores más elevados de Nu_{wf} del arreglo Hcp. Se puede aplicar el mismo razonamiento para explicar las diferencias entre los arreglos Scp y Ccp y arribar a una conclusión similar.

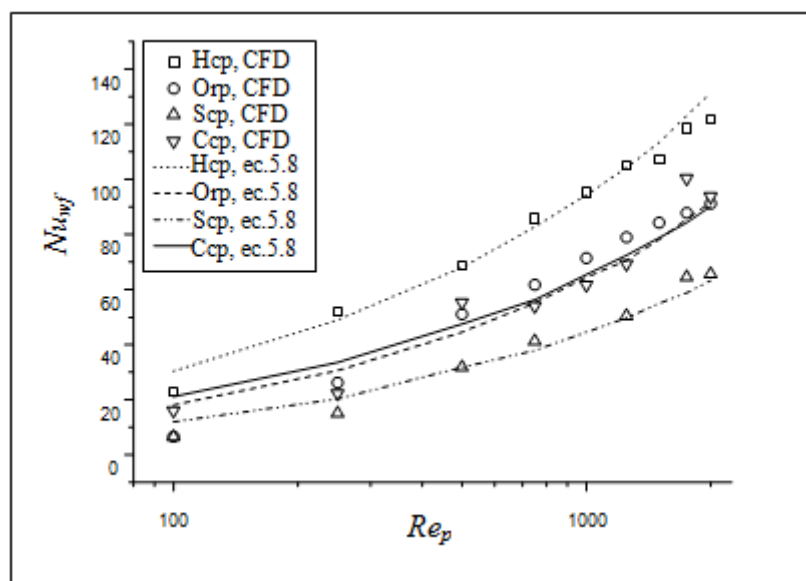


Figura 5.3: Nu_{wf} vs. Re_p para diferentes arreglos de partículas, $Pr = 0.814$.

Sobre la base de la discusión que antecede, se correlacionaron los resultados correspondientes con el valor del número de Nusselt Nu_{wf} .

$$Nu_{wf} = A \varepsilon_1^\alpha Re_{p1}^\beta Pr^\gamma \quad (5.8)$$

donde $Re_{p1} = G_1 D_p / \mu_f$ es el número de Reynolds basado en la velocidad másica superficial G_1 , y A , α , β son parámetros de ajuste. En la práctica, los valores de G_1 pueden obtenerse a partir de los valores correspondientes de G , mediante la ecuación 5.10 (sección 5.4.3).

Debe remarcarse que se generaron conjuntos de resultados similares a los presentados en la figura 5.3 para cuatro valores adicionales del número de Prandtl, cubriendo el rango $0.4 < Pr < 3.5$. A partir de un análisis de regresión de los resultados obtenidos por CFD, se obtienen los valores modales de los parámetros incluidos en la ecuación 5.8 y sus respectivos intervalos de confianza

$$A = 0.285 \pm 0.008, \quad \alpha = -2.4 \pm 0.4, \quad \beta = 0.5 \pm 0.05, \quad \gamma = 0.5 \pm 0.02$$

Se puede observar que con estos valores modales la ecuación 5.8 predice una proporcionalidad expresada por $Nu_{wf} \propto (Re_{p1} Pr)^{0.5}$, coincidiendo con la forma en que resulta la relación entre los tres números adimensionales involucrados por aplicación del Modelo de Penetración para transferencia de calor y/o masa. Asimismo, se constata un considerable efecto de ε_1 en la correlación. Los valores de Nu_{wf} calculados a partir de la ecuación 5.8 muestran buena concordancia con los resultados originados en las simulaciones CFD para todo el rango de Re_p (figura 5.3).

Si se considera el efecto de la orientación del flujo de fluido, discutido en la sección 5.3 se puede observar en la figura 5.3, que existen diferencias significativas en los valores de Nu_{wf} para los arreglos Ccp y Scp. En la representación de la orientación de flujo convectivo de gas representado en la figura 5.2, se desarrollan líneas de corriente aproximadamente rectas y paralelas a las cadenas de partículas, con capa límite de mayor espesor. Contrariamente, cuando el flujo de fluido se rota 45 grados con respecto al caso de la figura 5.2, las partículas interponen una obstrucción frontal para el flujo de fluido, aumentando la velocidad de transferencia de calor y, en consecuencia, incrementando el número de Nusselt alrededor de 100%.

5.4.2.-Coeficiente de transferencia de calor h_f

Como se describió en la sección 5.1, el modelo 2R2D introduce una resistencia térmica $1/h_f$ a fin de representar la restricción a la movilidad del fluido que tiene lugar en posiciones ubicadas a distancias desde la pared de alrededor de $D_p/2$. Para los arreglos analizados en este capítulo, la "vista frontal" de Orp y Scp (figura 5.2) se puede interpretar como un corte de la primera capa de partícula por un plano z, x a una distancia $y = D_p/2$. Los huecos pequeños y encerrados entre la superficie de las pastillas dificultan el movimiento del fluido. La magnitud pequeña de la componente y de la velocidad del fluido, responsable del transporte de calor por convección en la dirección radial, así como la pequeña área disponible para el pasaje de fluido (bajo valor del área transversal disponible), permiten definir la resistencia térmica $1/h_f$.

El efecto señalado se puede apreciar en las figuras 5.4 y 5.5 en las que se representan los campos de velocidad obtenidos a partir de las simulaciones en CFD. En la figura 5.4a se presenta un gráfico de vectores de velocidad sobre el plano y, z tangente a las superficies de las partículas del arreglo Scp para $Re_p = 1000$. El rectángulo en la base del diagrama corresponde a la superficie de la pared y los vectores se han coloreado de acuerdo a la magnitud de la velocidad. Pueden observarse claramente velocidades bajas en posiciones cercanas a $y = D_p/2$. El efecto también se evidencia si se comparan la representación de vectores sobre los planos x, z en las posiciones: $y = D_p/10, D_p/2$ y D_p de la figura 5.4b.

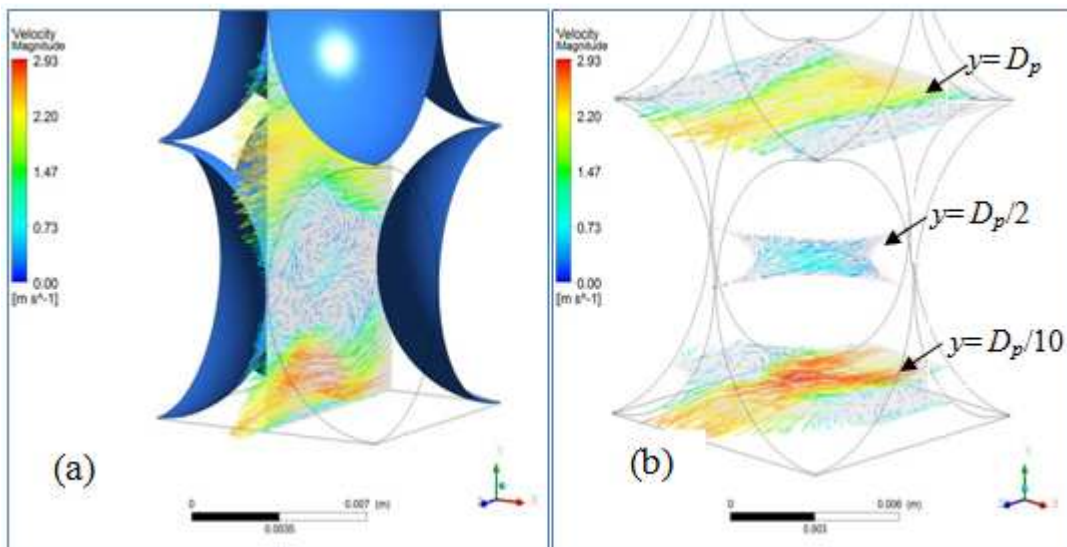


Figura 5.4: Vectores de velocidad correspondientes al arreglo Scp en $Re_p = 1000$. (a): en un plano z, y tangente a las superficies de partícula. (b) en los planos x, z en $y = D_p/10, D_p/2$ y D_p .

Es posible arribar a una conclusión similar a partir del gráfico presentado en la figura 5.5 para el arreglo Hcp a distancias $y = D_p/4, D_p/2$ y D_p .

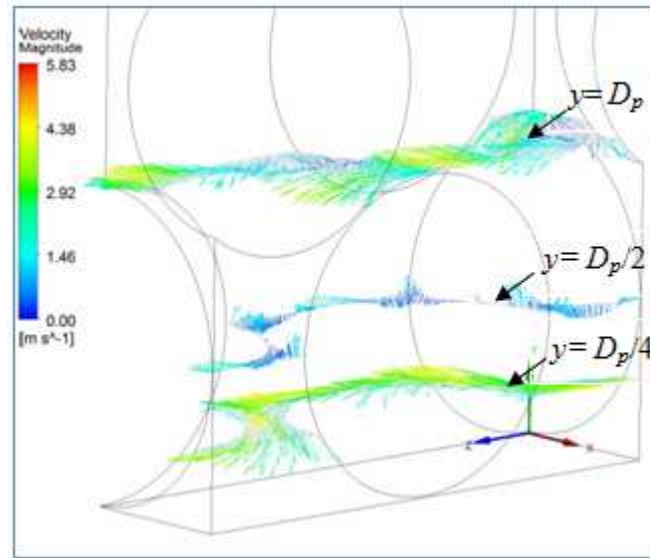


Figura 5.5: Vectores de velocidad para Hcp en los planos x,z en $y=D_p/4, D_p/2$ y D_p . $Re_p=1000$.

Con el fin de obtener los valores de h_f , se compara el perfil radial de temperatura en la región central ($y > D_p/2$) promediada en la altura de la celda de cálculo a partir de las simulaciones CFD, $[T_c(y)]$, con el perfil que arroja el modelo 2R2D, a partir de la ecuación 5.7, para cada arreglo y cada par de valores de Re_p y Pr . Los valores de la temperatura en zona distribuida $[T_c(y)]$ obtenidos de los cálculos por CFD correspondieron a promedios "mezclado de taza" en la celda de cálculo.

El coeficiente de transferencia de calor h_f y la conductividad efectiva en el canal central $\lambda_{ef,c}$ se ajustaron como parámetros, mediante la aplicación del método de mínimos cuadrados.

Antes de presentar los valores de h_f que se obtuvieron en base al procedimiento descrito previamente, resulta útil discutir los valores resultantes de $\lambda_{ef,c}$. Los cuatro arreglos regulares esquematizados en la figura 5.2 corresponden a series de esferas perfectamente ordenadas en capas paralelas a la superficie de pared. De esta manera, la restricción al flujo de fluido, y por lo tanto, al calor transferido radialmente, que se analizó anteriormente para la primera capa de partículas en posiciones distantes alrededor de $D_p/2$ de la pared, también se puede encontrar para la segunda capa de partículas, a una distancia del plano que contiene los centros de las partículas, correspondiendo $1.5D_p$ en el caso del arreglos Scp y $1.32D_p$ para el arreglo Hcp. Esta

situación se repetirá exactamente para la tercera y sucesivas capas de partículas. Gran parte del fluido fluye a lo largo de canales paralelos entre cada par de capas con poca desviación lateral y, como consecuencia, la contribución del fluido convectivo para la transferencia de calor radial será pobre en toda la sección transversal. Contrariamente, en un lecho con relleno al azar una segunda capa identificable ya muestra una dispersión significativa de los centros de partículas (capítulo 3) alrededor del promedio en la coordenada y , una tendencia que se refuerza más intensamente en el interior del lecho. De esta manera, las partículas actúan efectivamente como obstáculos para el flujo del fluido, que se desviará generando componentes laterales de velocidad y , por lo tanto, aumentando la transferencia de calor radial.

Un ejemplo de perfil de temperatura obtenido a partir de simulaciones en CFD para el arreglo Hcp se representa con símbolos en la figura 5.6. La curva de línea gruesa (negra) corresponde al ajuste con el modelo 2R2D. Se muestra claramente que el perfil CFD se mueve en fase con la sucesión de capas de partículas, cuya localización de centros de partícula se indican mediante líneas verticales.

El comportamiento térmico descrito de los arreglos regulares estudiados en este capítulo da lugar a valores muy pequeños para la conductividad efectiva radial $\lambda_{ef,c}$ en el ajuste, en comparación con los que arroja cualquiera de las correlaciones reportadas en la literatura para lechos con relleno al azar. Por esta razón, los valores de $\lambda_{ef,c}$ obtenidos en este capítulo no serán discutidos posteriormente.

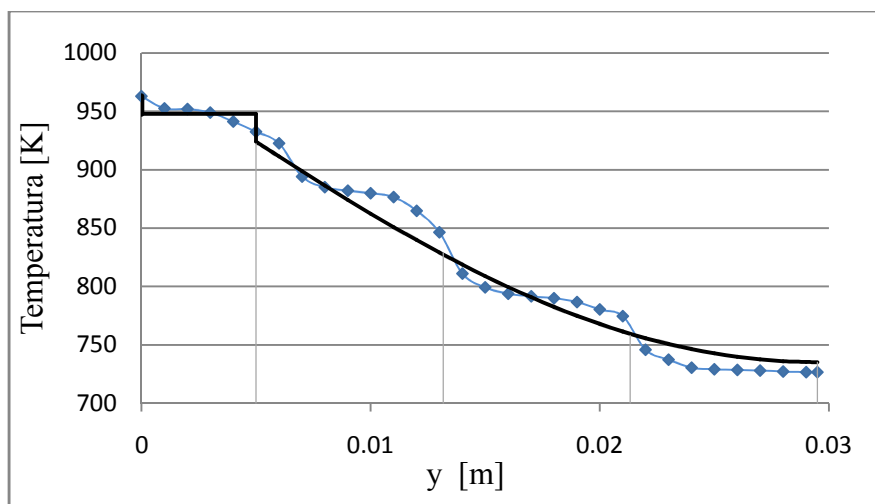


Figura 5.6: Perfiles de temperatura radial para el arreglo Hcp en $Re_p=1500$.

En la figura 5.7 se muestran los resultados de los valores de h_f , expresados en términos del correspondiente número de Nu_f , para $Pr = 0.814$, junto con los

correspondientes valores de Nu_{wf} . Sin hacer una discriminación entre los diferentes arreglos, la primera conclusión que surge a partir de la figura 5.7 consiste en observar que los valores de Nu_{wf} son considerablemente mayores que aquellos de Nu_f , lo que demuestra la significación de la resistencia térmica $1/h_f$. Los valores de Nu_f para los arreglos Orp y Hcp se ubican en la parte inferior del gráfico, una característica que puede atribuirse al menor tamaño de las aberturas en $y = D_p/2$ respecto al de los arreglos Ccp y Scp, que en promedio arrojan valores mayores de Nu_f . En particular, los valores de Nu_f para el arreglo Ccp alcanzan aún a ser mayores que Nu_{wf} a elevados Re_p . La diferencia entre los valores de Nu_f para los arreglos Ccp y Scp revela que, en adición al tamaño de las aberturas en la primer capa de partículas, se debe considerar otro efecto. Para el arreglo Ccp, las partículas de la segunda capa encajan profundamente entre las partículas de la primera capa, como se puede apreciar con claridad en la "vista lateral" presentada en la figura 5.2. Esta característica promueve que las principales líneas de corriente entre ambas capas de partículas pasen más cerca de las aberturas en $D_p/2$, incrementando de esta manera el calor intercambiado entre los canales de pared y central.

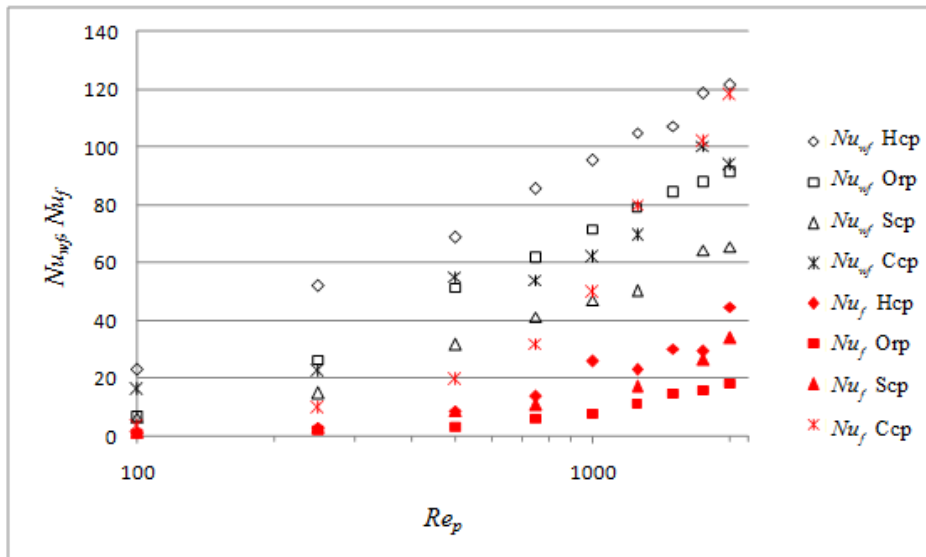


Figura 5.7: Nu_{wf} y Nu_f vs. Re_p , $Pr=0.814$.

Un efecto similar explica las diferencias entre los valores de Nu_{wf} para los arreglos Hcp y Ocp.

Con la intención de relacionar cuantitativamente los valores calculados de Nu_f con la estructura del lecho, el efecto del tamaño de las aberturas fue tenido en cuenta a través de la porosidad ε_1 del canal de pared y el efecto que se acaba de mencionar de la

inserción de las partículas de la segunda capa en el interior de la primera capa, se evalúa a través de la diferencia $(\varepsilon_1 - \varepsilon_c)$. De esta manera, se emplea la ecuación 5.9 para correlacionar los resultados.

$$Nu_f = A \varepsilon_1^\alpha [1 + B (\varepsilon_1 - \varepsilon_c)] Re_p Pr \tag{5.9}$$

En un primer análisis Re_p y Pr se consideraron elevados a exponentes considerados como parámetros de ajuste. Sin embargo, una vez finalizado el procedimiento, ambos exponentes no se apartaron significativamente de la unidad. Considerando que el mecanismo de transporte de calor entre la pared y los canales centrales debería ser de naturaleza convectiva, al menos a valores relativamente elevados del número de Reynolds como los aquí empleados, se decidió utilizar la correlación de la forma presentada en la ecuación 5.9.

Los mejores valores de los parámetros de ajuste correspondientes a la ecuación 5.9 α , A , B y sus intervalos de confianza son:

$$\alpha = 4 \pm 0.7, A = 0.34 \pm 0.05, B = 11.4 \pm 2.4$$

En la figura 5.8 se presentan los valores de Nu_f , los cuales se calcularon a partir de ecuación 5.9. Esta correlación ajusta correctamente los datos disponibles de Nu_f , obtenidos de las simulaciones CFD.

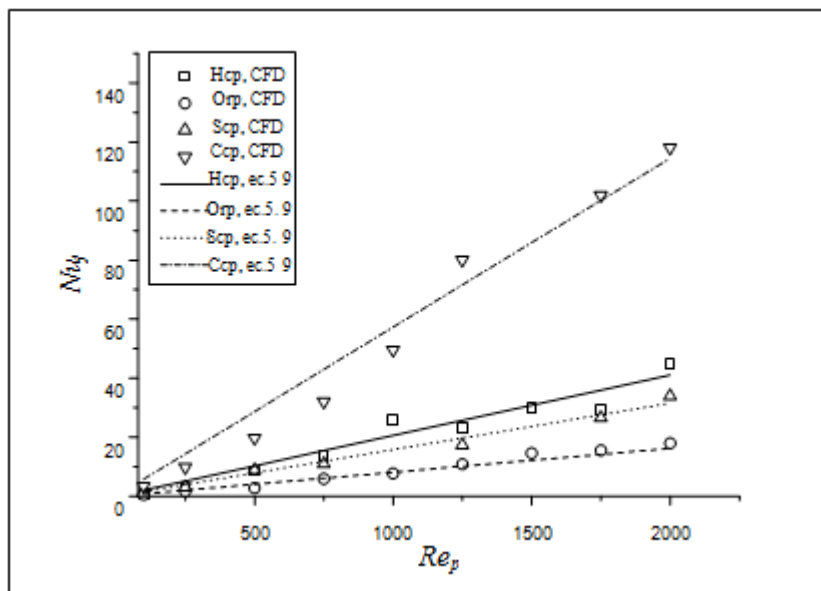


Figura 5.8: Nu_f vs Re_p , para diferentes arreglos de partículas.

5.4.3.-Relación de velocidades superficiales másicas G_1/G_c entre las regiones de pared y central

A partir de un valor determinado de velocidad superficial másica global G , es posible calcular, a través de las simulaciones CFD, la relación de velocidades superficiales másicas en los canales de la pared y central, G_1/G_c . Nótese que si S_1 es la sección transversal de la fracción de lecho comprendida entre la pared y una distancia $D_p/2$, se debe cumplir la relación: $SG = S_1G_1 + S_cG_c$ donde S es la sección transversal total de lecho y $S_c = S - S_1$ es la correspondiente sección transversal de la zona central.

En la figura 5.9 se muestran los valores de la relación G_1/G_c evaluados por CFD, junto con los calculados a partir de la ecuación 5.10, que se describe a continuación. Para los arreglos simulados en los que $\varepsilon_1 = \varepsilon_c$ (Orp y Scp, en la tabla 5.1), se obtienen valores de $G_1/G_c < 1$ como consecuencia de una fricción adicional ejercida por la pared. Debe señalarse, que en los resultados generados por CFD, si bien un par de resultados de la relación de caudales entre zonas superaron el valor unitario para el arreglo Scp, esta situación se atribuyó a cierta imprecisión en los cálculos del campo de velocidad y al procedimiento utilizado para promediar los valores.

Los arreglos Hcp y Ccp facilitan el flujo en la región de pared, debido a que ε_1 es significativamente mayor que ε_c y por lo tanto resultará $G_1/G_c > 1$. Los resultados obtenidos por CFD representados en la figura 5.9, fueron correlacionados por medio de la ecuación 5.10.

$$G_1/G_c = A \varepsilon_1^\alpha \varepsilon_c^\gamma Re_p^\beta \quad (5.10)$$

Los mejores valores de los parámetros de ajuste α , A , B y sus intervalos de confianza son:

$$A = 0.55 \pm 0.01, \quad \alpha = 1.5 \pm 0.3, \quad \gamma = -2.4 \pm 0.2, \quad \beta = -0.04 \pm 0.03$$

La expectativa que acompaña los resultados precedentes, sintetizados en la ecuación 5.10 y sus parámetros de ajuste, es de potencial aplicación a lechos rellenos al azar contenidos en recipientes cilíndricos (capítulo 8). De acuerdo con el análisis realizado sobre datos de lechos de partículas esféricas de un solo tamaño razonablemente bien compactados, con $N \geq 5$, los rangos de porosidades son $0.38 < \varepsilon_c < 0.41$ y $0.48 < \varepsilon_1 < 0.55$. A partir de la ecuación 5.10, adoptando el valor

$Re_p = 500$ se obtiene el rango $1.2 < G_1/G_c < 1.8$. Los valores resultantes para los arreglos regulares están por encima o por debajo de ese rango (figura 5.9), por lo tanto resulta necesario verificar si la ecuación 5.10 permite interpolar correctamente los resultados de los arreglos regulares en el rango propio de lechos al azar. Esta comparación se realiza en detalle en el capítulo 8, anticipándose no obstante que el comportamiento de la ecuación 5.10 es muy aceptable.

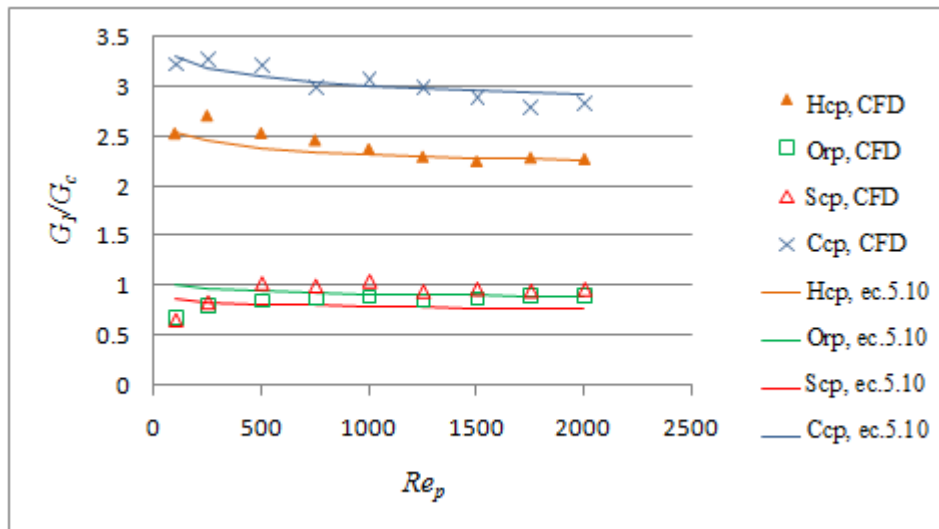


Figura 5.9: G_1/G_c vs. Re_p para diferentes arreglos de partículas (figura 5.2).

5.5.- Comparación de los coeficientes h_{wf} y h_f con correlaciones de literatura

En la gran mayoría de los trabajos que reportan experiencias de transferencia de calor desde el interior de un lecho fijo hacia la pared, para el caso de lechos rellenos al azar, los datos se reducen aplicando el modelo S2D, y de esta manera, se genera un número importante de correlaciones para el coeficiente de transferencias de calor sobre la pared h_w . Como se discutió en el capítulo 2, h_w engloba un conjunto de efectos, lo cual conduce a que no se pueda llevar a cabo su comparación con valores de los parámetros del modelo 2R2D en forma directa.

Un aspecto que debe tenerse presente es la dispersión que exhiben los datos y las correlaciones disponibles para h_w , tal como lo han remarcado [Li y Finlayson, 1977](#) y [Tsotsas y Schlünder, 1990](#). Estos autores señalan diferencias de más de un orden de magnitud en los coeficientes, para valores prácticos de Re_p . Las razones de estas discrepancias han sido ampliamente discutidas en una contribución reciente por [Dixon, 2012](#). El autor enfatizó que el enfoque adoptado originalmente por [Yagi y Kunii, 1960](#) para expresar h_w proporciona un marco adecuado para llevar a cabo la racionalización

de la información disponible. Además, como se discutirá a continuación, este enfoque es también muy útil para relacionar h_w con los coeficientes de transferencia de calor h_{wf} y h_f evaluados en este capítulo. La formulación de [Yagi y Kunii, 1960](#) (en términos de los diferentes números de Nusselt involucrados) es:

$$Nu_w = Nu_{w,0} + \frac{1}{1/Nu_w^* + 1/Nu_m} \quad (5.11)$$

La ecuación 5.11 adiciona contribuciones a la transferencia de calor generadas por mecanismos de conducción ($Nu_{w,0}$) y convección (el segundo término en el lado derecho de la ecuación). Esta discriminación resulta razonable ya que la contribución conductiva tiene lugar a través de pequeños puentes de fluido posicionados entre las partículas y la superficie de pared, con movimiento de fluido casi despreciable que, por lo tanto, actúan en paralelo con respecto a la zona restante involucrada en la contribución convectiva. Con referencia a la contribución convectiva, [Yagi y Kunii, 1960](#) identificaron las dos resistencias térmicas concebidas para el modelo 2R2D, la de una película térmica "verdadera" en la pared ($1/Nu_w^*$ en la ecuación 5.11) y aquella causada por la dispersión de fluido restringida alrededor de $D_p/2$ ($1/Nu_m$ en la ecuación 5.11). Como estas resistencias se encuentran actuando en serie en la dirección radial de transferencia de calor, es también razonable adicionarlas, tal como se ha formulado en la ecuación 5.11, suponiendo el mismo valor del flujo de calor a través de cada una de ellas.

Sin embargo, el esquema descrito constituye una aproximación, ya que el efecto del cambio de entalpía del fluido que se desplaza entre la pared y la distancia $D_p/2$ (en el canal de pared del modelo 2R2D), así como el asociado al calor liberado por reacción química en esa zona, no son tenidos en cuenta en su formulación. En cambio, esta situación se tiene en cuenta claramente en el modelo 2R2D. En lechos de alta relación de aspecto N , tales efectos pierden importancia, pero en lechos implicados en reactores multi-tubulares (por ejemplo, $N < 10 - 15$), esa zona transporta una fracción relevante del flujo total, y pueden surgir diferencias significativas en el comportamiento predicho por los modelos S2D y 2R2D, como se discutirá en el capítulo 6. A pesar de estas observaciones, los resultados de Nu_w expresados en términos de la ecuación 5.11 pueden ser utilizados, en una primera aproximación, para

comparar valores de h_w^* con h_{wf} y de h_m con h_f . Es pertinente mencionar que [Dixon, 2012](#) realizó la discusión de los esfuerzos subsiguientes empleando la ecuación 5.11, para la reducción de datos experimentales, y recomendando finalmente utilizar esta expresión para estimar el parámetro Nu_w del modelo S2D. A tal fin, [Dixon, 2012](#) sugiere emplear:

$$Nu_w^* = 0.3 Re_p^{3/4} Pr^{1/3} \quad (5.12 a)$$

$$Nu_m = 0.054 Re_p Pr \quad (5.12b)$$

La ecuación 5.12b es la misma propuesta originalmente por [Yagi y Kunii, 1960](#).

Existen en la bibliografía numerosas alternativas para estimar Nu_w , muchas de las cuales responden a la forma empírica siguiente

$$Nu_w = a Re_p^\beta Pr^\gamma \quad (5.13)$$

Este tipo de ecuaciones se ha empleado usualmente para ajustar datos de transferencia de calor, principalmente con flujo de gas, y también para reducir experimentos en los que se midió la velocidad de transferencia de masa entre la pared y las corrientes de líquido en movimiento, en términos de los números adimensionales análogos, número de Sherwood en vez de Nu_w y de Schmidt, Sc , en vez de Pr . A tal fin se empleó una sustancia parcialmente soluble depositada sobre la pared o usando técnicas electroquímicas (véase, por ejemplo, el trabajo de [Dixon 2012](#)). Los parámetros de algunas de estas expresiones se listan en la tabla 5.2. También se incluye en dicha tabla la correlación de [Olbrich y Potter, 1972](#) que está basada en experiencias de transferencia de masa, pero con flujo de gas.

Si se intenta interpretar expresiones de la forma de la ecuación 5.13 en términos de las contribuciones discriminadas en la ecuación 5.11, todas las correlaciones basadas en experiencias de transferencia de calor deberían incluir, de alguna manera, el efecto de los tres coeficientes $h_{w,0}$, h_w^* y h_m . Sin embargo, para experiencias de transferencia de masa, la contribución de $h_{w,0}$ está ausente. Además, debido a que los números de Schmidt para líquidos son del orden de 10^3 , h_m resulta mucho mayor que h_w^* para valores usuales del número de Reynolds. Por ejemplo, para $Re_p = 100$, $Pr = 1000$ (en

la práctica, Sc), los resultados de las ecuaciones 5.12 son $h_w^* = 95$, $h_m = 5400$ y, consecuentemente, se puede concluir que $Nu_w \approx Nu^*$ para experiencias de transferencia de masa con flujo de líquido. Por último, en la correlación de [Olbrich y Potter, 1972](#) únicamente $h_{w,0}$ puede despreciarse. Estas observaciones se resumen en la tabla 5.2.

Referencias	a	β	γ	Tipos de experiencias	Relación con la ec.5.11
Yagi y Wakao (1959)	0.2	0.80	1/3	Transferencia de calor	$h_{w,0}, h_w^*, h_m$
Li y Finlayson (1977)	0.17	0.79	0	Transferencia de calor	$h_{w,0}, h_w^*, h_m$
Peters y col. (1988)	$4.9(1/N)^{0.26}$	0.5	1/3	Transferencia de calor	$h_{w,0}, h_w^*, h_m$
Olbrich y Potter (1972)	8.9	0.34	1/3	Transferencia de masa / flujo de gas	h_w^*, h_m
Dixon y Labua (1985)	$1 - 1/N$	0.61	1/3	Transferencia de masa / flujo de líquido	h_w^*
Kunii y col. (1968)	$0.06 / \epsilon_w^2$	0.75	1/3	Transferencia de masa / flujo de líquido	h_w^*

Tabla 5.2: Valores de los parámetros de la ecuación 5.13 y características de las diferentes correlaciones para Nu_w .

Se deduce que Nu_{wf} , a partir de la ecuación 5.8, se puede comparar directamente con los valores arrojados por las correlaciones de [Kunii y col., 1968](#); [Dixon y Labua, 1985](#) y con los valores de la ecuación 5.12a. La ecuación 5.8 requiere que se adopten valores de ϵ_1 y ϵ_c (a través de Re_p y G_1/G_c , ecuación 5.10). A su vez, ϵ_1 y ϵ_c dependen de la relación de aspecto N . Para llevar a cabo la comparación, se consideraron valores de $N = 5$ y $N = 15$. A partir de las relaciones desarrolladas en el capítulo 3 (ecuaciones 3.2b y 3.3b), se obtienen los valores presentados en la tabla 5.3. Para la correlación de [Kunii y col., 1968](#), se adoptó el valor coincidente de porosidad en ambas zonas, $\epsilon_1 = \epsilon_c$. Además, debe señalarse que la comparación se llevó a cabo para el valor de $Pr = 0.814$.

N	ϵ_1	ϵ_c	ϵ
5	0.507	0.397	0.436
15	0.484	0.380	0.393

Tabla 5.3: Valores numéricos de las variables correspondientes a las figuras 5.10-5.14.

Los valores de los números de Nusselt en las figuras 5.10 y 5.11 muestran diferencias moderadas. Los valores de Nu_{wf} de la ecuación 5.8 quedan comprendidos claramente en el intervalo definido por los límites inferior y superior que surgen de las expresiones de Nu_w y Nu_w^* en todo el rango $100 < Re_p < 2000$, por lo que se puede concluir que la ecuación 5.8 es consistente con la información experimental.

Se discutió en párrafos anteriores que el coeficiente h_m , en la ecuación 5.11 es conceptualmente comparable con el coeficiente de transferencia de calor h_f evaluado en la sección 5.4.2. En la figura 5.12, se presentan valores de Nu_m obtenidos a partir de la ecuación 5.12 y de Nu_f calculados mediante la ecuación 5.9 con $Pr = 0.814$ y con dos valores de la relación de aspecto ($N = 5$ y $N = 15$, véase tabla 5.3). La concordancia entre los valores de Nu_m y Nu_f es muy buena, con valores prácticamente coincidentes para $N = 5$.

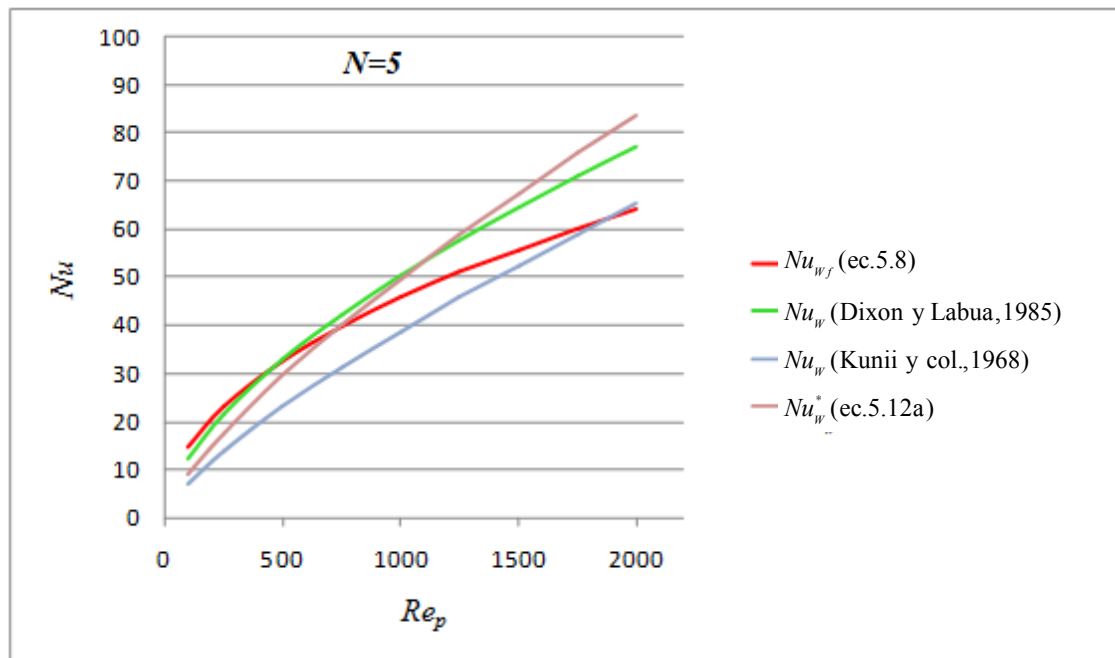


Figura 5.10: Comparación de valores de Nu_w (transferencia de masa/fluido líquido, ver tabla 5.2), Nu_w^* (ec.5.12a) y Nu_{wf} (ec. 5.8) para $Pr=0.814$, $N=5$.

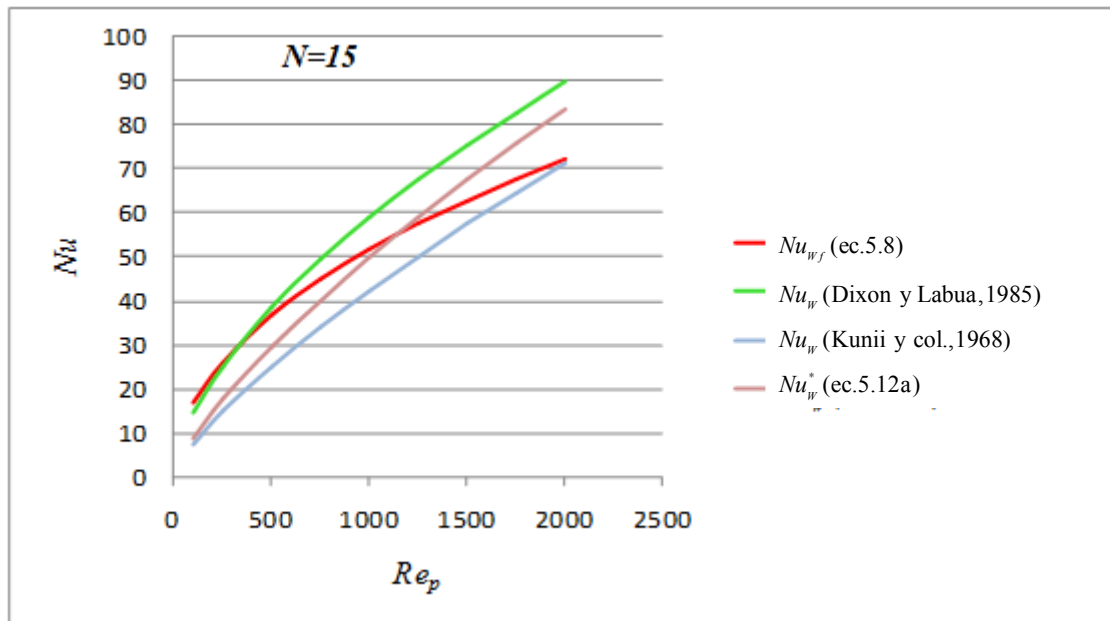


Figura 5.11: Comparación de valores de Nu_w (transferencia de masa/ fluido líquido, ver tabla 5.2), Nu_w^* (ec.5.12a) y Nu_{wf} (ec.5.8) para $Pr=0.814$, $N=15$.

Es de interés señalar que para el flujo de gas y valores típicos de, ε_1 y ε_c en lechos rellenos al azar, (tal como se usa en esta sección), los valores del coeficiente de transferencia de calor entre los canales h_f (figura 5.12) resultan menores que h_{wf} (figuras 5.10 y 5.11) al menos hasta valores de $Re_p = 1000$, un hecho que enfatiza la importancia de los efectos de la resistencia térmica $1/h_f$.

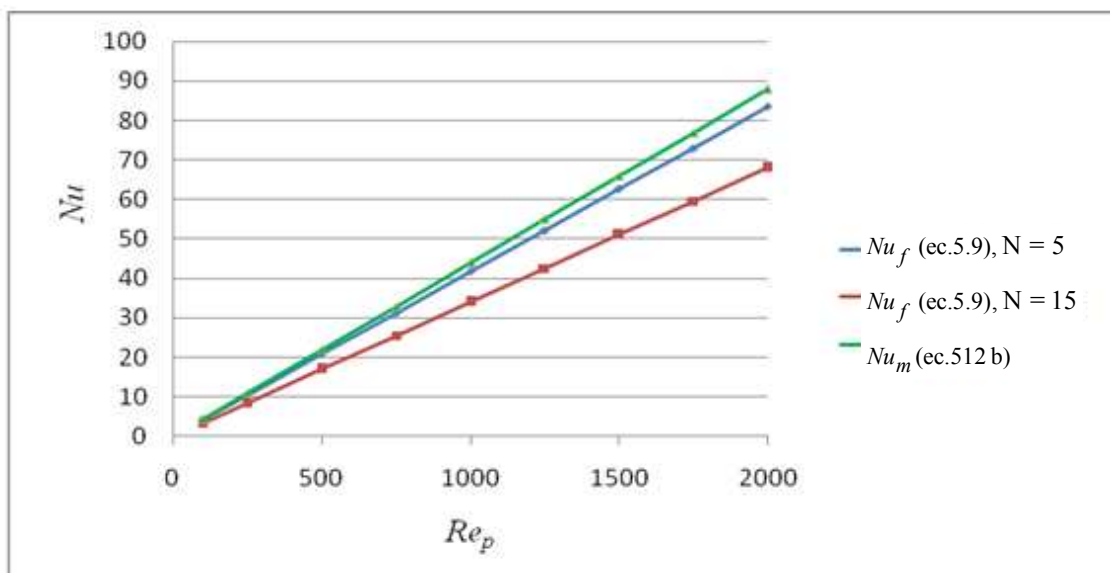


Figura 5.12: Comparación de valores de Nu_m (ec.5.12b) y Nu_f (ec.5.9) para $Pr=0.814$.

A fin de llevar a cabo una comparación adicional entre los resultados obtenidos por CFD que se presentan en este trabajo y la información recopilada de la bibliografía, se apela a determinar una relación de equivalencia entre los modelos S2D y 2R2D. A tal efecto, se parte de considerar un lecho que solo intercambia calor con la pared (es decir, suprimiendo la reacción química) y suponiendo dominante la contribución convectiva en ambos modelos (esto significa ignorar los mecanismos de conducción partícula-partícula y partícula-pared). Para evaluar la componente convectiva de la conductividad efectiva en ambos modelos se emplea la relación que surge del trabajo de [Bey y Eigemberger, 2001](#), en la forma $\lambda_{ef,c} = 0.1D_p c_{pf} G_c$ para el modelo 2R2D y $\lambda_{ef,c} = 0.1D_p c_{pf} G$ para el modelo S2D. De esta forma se intenta equiparar en ambos modelos la capacidad de transporte en el interior del lecho. Para el modelo 2R2D se emplean para Nu_{wf} y Nu_f y las ecuaciones 5.8 y 5.9 y la ecuación 5.10 para la relación G_1/G_c .

Finalmente, se exige que lejos del inicio del lecho (cuando los efectos de entrada se han extinguido), la temperatura promedio y el flujo de calor predichos por el modelo S2D sean iguales a los resultantes para el modelo 2R2D, para lo cual se considera como valor de ajuste al coeficiente h_w del modelo S2D, que en particular se denota h_w^0 . El valor resultante h_w^0 representará la descripción y cuantificación que el modelo 2R2D propone para el canal de pared, es decir, la combinación de efectos impuestos por Nu_{wf} y Nu_f acoplados con el aporte convectivo del canal de pared. Puesto que las correlaciones de bibliografía para h_w se generan interpretando resultados experimentales por medio del modelo S2D, el mismo rol le cabe a h_w^0 respecto al modelo 2R2D. En consecuencia, la comparación de h_w^0 con las correlaciones de bibliografía para h_w conducen a una comparación válida (aunque indirecta) del modelo 2R2D y sus parámetros propuestos con los resultados experimentales. La formulación completa para calcular h_w^0 se detalla en el Apéndice 6.1 del capítulo 6.

Recordando las condiciones de generación de Nu_w^0 , el mismo puede ser comparado con la ecuación 5.11, omitiendo $Nu_{w,0}$, y usando las ecuaciones 5.12a y 5.12b para Nu_w^* y Nu_m :

$$Nu_w = \frac{1}{1/Nu_w^* + 1/Nu_m} \quad (5.14)$$

Además, se incluyen en la comparación los valores de Nu_w de la ecuación 5.13 con parámetros a partir de las primeras cuatro referencias en la tabla 5.2. En el caso de los resultados de Orbrich y Potter, 1972, y recordando los mecanismos que esta contribución representa (tabla 5.2), la comparación entre Nu_w^0 y Nu_w incluye los mismos efectos. En cambio, se hace notar que las tres referencias restantes en la tabla 5.2, incluyen implícitamente a la contribución de $Nu_{w,0}$.

Los resultados se presentan en las figuras 5.13 y 5.14 (para $N = 5$ y $N = 15$), en donde también se incluyen los valores de $Nu_{w,\Sigma}$ definidos por

$$Nu_{w,\Sigma} = \frac{1}{1/Nu_{wf} + 1/Nu_f} \quad (5.15)$$

donde Nu_{wf} y Nu_f se evaluaron a partir de las ecuaciones 5.8 y 5.9 respectivamente. $Nu_{w,\Sigma}$ se formula a partir de Nu_{wf} y Nu_f siguiendo el mismo razonamiento que se describió para la ecuación 5.11, pero con las resistencias térmicas individuales evaluadas a partir de los resultados de este capítulo. Recordando las observaciones realizadas al comienzo de esta sección, las diferencias entre Nu_w^0 y $Nu_{w,\Sigma}$ deberían atribuirse al efecto del flujo de fluido en el canal de la pared del modelo 2R2D. El propósito de incluir $Nu_{w,\Sigma}$ en las figuras 5.13 y 5.14 reside en evaluar dichas diferencias.

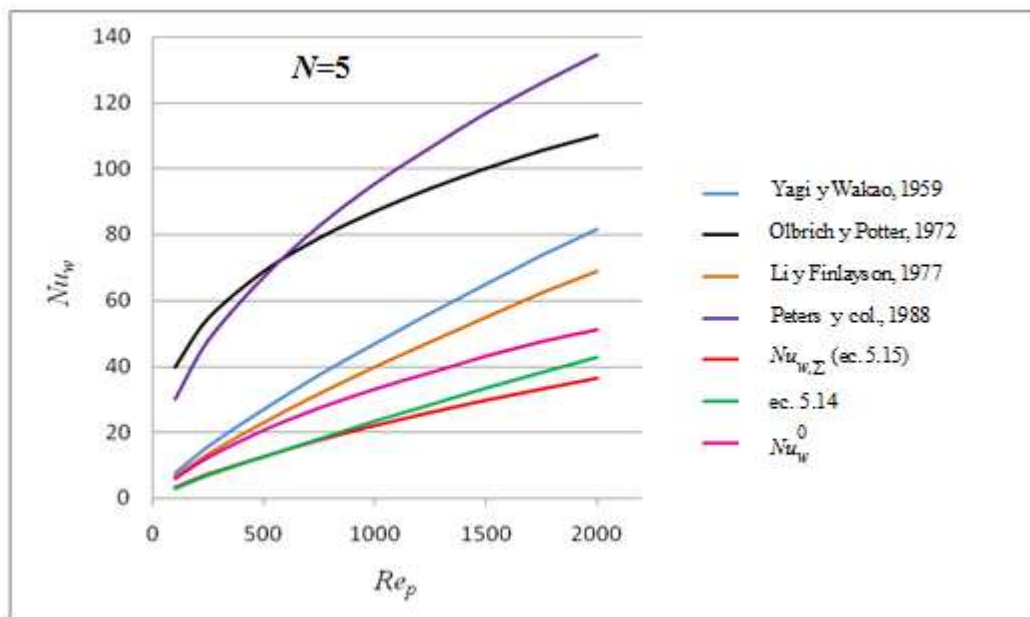


Figura 5.13: Comparación de resultados a partir de diferentes expresiones para la estimación de Nu_w , $Pr=0.814$, $N=5$.

La dispersión de datos de la literatura para Nu_w puede apreciarse claramente al observar las figuras 5.13 y 5.14. Los valores obtenidos a partir de las cuatro correlaciones (tabla 5.2) expresados por la ecuación 5.13 resultan definitivamente mayores que Nu_w^0 y que los correspondientes a la ecuación 5.14. Sin embargo, si las correlaciones de Yagi y Wakao, 1959 y Li y Finlayson, 1977 se les sustrae $Nu_{w,0}$, en el rango $8 < Nu_{w,0} < 25$ (como sugieren Tobis y Ziolkowski, 1998) las diferencia con Nu_w^0 disminuyen sensiblemente. En cambio, los valores elevados de las correlaciones de Olbrich y Potter, 1972 y Peters y col., 1988 no se pueden aproximar de esta manera.

Enfocándose ahora en los valores de Nu_w^0 y Nu_w de la ecuación 5.14, las diferencias son razonablemente pequeñas para $N = 5$ y casi desaparecen para $N = 15$. La concordancia entre Nu_w^0 y Nu_w a partir de la ecuación 5.14 es más relevante en la validación del procedimiento llevado a cabo en este trabajo para la evaluación de los parámetros del modelo 2R2D, si se recuerda que la ecuación 5.11 y por lo tanto la ecuación 5.14 fueron recomendadas a partir de una revisión crítica de la información existente en la literatura (Dixon, 2012).

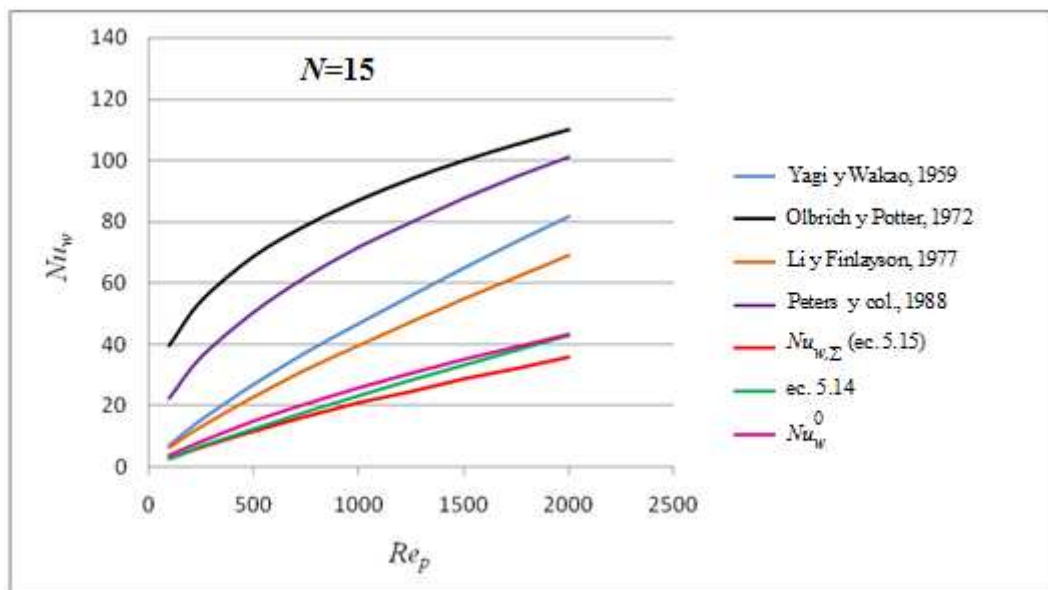


Figura 5.14: Comparación de los resultados a partir de diferentes expresiones para la evaluación de Nu_w , $Pr=0.814$, $N=15$.

La comparación entre Nu_w^0 y $Nu_{w,\Sigma}$ merece un comentario final. Para $N = 5$ (figura 5.14) las diferencias entre estos números de Nusselt revelan que, efectivamente, el flujo de fluido en el canal de pared ejerce un efecto significativo, aumentando la velocidad de transferencia de calor ($Nu_w^0 > Nu_{w,\Sigma}$), mientras que el efecto se debilita

claramente para $N = 15$. El efecto del flujo de fluido en la región de la pared para $N = 5$ permite explicar por qué las relaciones $Nu_w^* > Nu_{wf}$ y $Nu_m > Nu_f$ se manifiestan en las figuras 5.10 y 5.12, mientras que la tendencia se invierte entre el coeficiente global representativo del modelo 2R2D, Nu_w^0 , y el valor Nu_w de la correlación 5.14, como resulta de la figura 5.13.

5.6.- Conclusiones del capítulo

En el capítulo 3 se propuso un modelo que considera explícitamente la presencia de la primera capa de partículas contra la pared, con el objetivo de simular el comportamiento de los reactores catalíticos de lecho fijo multitubulares, con intercambio de calor a través de la pared. La característica básica del llamado Modelo Bidimensional de Dos Zonas (2R2D) es la identificación espacial de las resistencias térmicas relacionadas con la primera capa de partículas, en contraste con el extendido y frecuentemente utilizado modelo Bidimensional generalizado (identificado como Modelo Estándar de Dos Dimensiones, S2D), que incluye estas resistencias en una resistencia térmica aparente ($1/h_w$) localizada justo en la superficie de la pared.

En este trabajo de tesis, se focalizó el interés en las resistencias térmicas en la fase fluida, cuando la convección es dominante.

El modelo 2R2D identifica un canal en la pared, a una distancia desde la pared de $D_p/2$ en donde la corriente de fluido intercambia calor con la pared a través de una película térmica real (coeficiente de transferencia de calor h_{wf}), mientras que el calor intercambiado con el canal central (que se extiende desde $D_p/2$ hasta el centro del lecho) está limitado por una movilidad de fluido altamente restringida a distancias alrededor de $D_p/2$. La velocidad de transferencia de calor entre ambos canales se basa en un coeficiente de transferencia de calor efectivo h_f .

Se realizaron simulaciones por CFD con el principal objetivo de llevar a cabo la evaluación de los parámetros h_{wf} y h_f del modelo 2R2D y la relación entre las velocidades máxicas superficiales en ambos canales, G_1/G_c . Se analizó el caso de partículas no conductoras para aislar los mecanismos de transferencia de calor por convección. Para este fin, se emplearon cuatro arreglos regulares de esferas entre paredes planas, que proveen diferentes combinaciones de porosidades en los canales de pared y central, (ε_1 y ε_c), que constituyen los parámetros estructurales básicos, de los que dependen luego los parámetros h_{wf} , h_f y la relación de velocidades máxicas G_1/G_c .

Los arreglos regulares aportan, en las simulaciones CFD, la ventaja de requerir un número moderado de esferas, empleando condiciones de fronteras periódicas, para obtener resultados no afectados por los efectos asociados a la entrada y salida del lecho. De esta manera, las simulaciones pudieron llevarse a cabo cubriendo un rango considerable para el número de Reynolds de $100 < Re_p < 2000$ y también del número de Prandtl típico de gases $0.4 < Pr < 3.5$ con recursos computacionales estándar. Los resultados de h_{wf} y h_f fueron bien correlacionados con ε_1 , ε_c , Re_{p1} , Re_p y Pr (ecuaciones 5.8 y 5.9) y los de G_1/G_c con ε_1 , ε_c y Re_p (ecuación 5.10). Se constató un efecto considerable de las propiedades estructurales ε_1 y ε_c .

La sección 5.5 del presente capítulo presenta un primer intento para evaluar la aplicabilidad de los resultados de h_{wf} y h_f a lechos rellenos al azar. A tal fin, se utilizaron valores típicos de ε_1 , ε_c de lechos rellenos al azar en el rango ($5 < N < 15$) en las correlaciones desarrolladas para h_{wf} y h_f . En la literatura, existen trabajos que reportan experiencias de transferencia de calor radial o del proceso análogo de transferencia de materia en lechos rellenos al azar y reducen los resultados experimentales en base al modelo S2D. De esta manera, existe un considerable número de correlaciones para el coeficiente de transferencia de calor en la pared h_w , pero no se cuenta con datos individuales disponibles de h_{wf} y h_f . Sin embargo, la correlación recomendada por [Dixon, 2012](#) en su revisión (basada en el trabajo original de [Yagi y Kunii, 1960](#)) desagrega las contribuciones de transferencia de calor en h_w , y particularmente, la contribución de la convección del fluido se expresa en términos de una suma de resistencias, cada una de las cuales se identifica mecánicamente como correspondiente a $1/h_{wf}$ y $1/h_f$.

Aunque para el modelo 2R2D tales resistencias térmicas no operan estrictamente en serie, podría esperarse que los valores de cada una de ellas para ambos modelos estén estrechamente relacionados. La comparación entre los actuales valores calculados de h_f y los correspondientes valores recomendados por [Dixon, 2012](#), arroja que los mismos son prácticamente coincidentes.

Considerando el coeficiente h_{wf} , la comparación realizada puede incluir datos de experimentos de transferencia de masa en fase líquida sobre la pared. En este caso, la única resistencia relevante, por analogía, corresponde a $1/h_{wf}$. Los valores de h_{wf}

estimados en este trabajo resultaron comprendidos en el intervalo definido por los valores experimentales de las diferentes fuentes.

Pudo llevarse a cabo una última comparación entre la presente modalidad de evaluación de h_{wf} y h_f con los resultados experimentales, planteando que coincidan las velocidades de transferencia de calor de los modelos S2D y 2R2D lejos de la entrada del lecho. Esto se realizó omitiendo la presencia eventual de la reacción química y la conducción térmica en las partículas. De esta manera, los valores de ajuste de h_w del modelo S2D pudieron calcularse en términos de los parámetros del modelo 2R2D y compararse con diferentes correlaciones reportadas en bibliografía. Estas correlaciones (excepto la recomendada por [Dixon, 2012](#)) incluyen implícitamente la contribución de la conducción de la partícula y muestran grandes diferencias entre ellas. A pesar de este aspecto, se obtuvo una concordancia razonable con algunas de tales correlaciones, mientras que en particular la concordancia con la expresión recomendada por [Dixon, 2012](#) fue muy satisfactoria.

CAPITULO 6

ANALISIS COMPARATIVO DEL COMPORTAMIENTO DE LOS MODELOS S2D Y 2R2D: REACTOR DE SINTESIS DE AMONIACO

6.1 Introducción

6.2 Contextualización de la comparación entre el modelo 2R2D y el modelo S2D

6.2.1 Modelo 2R2D

6.2.2 Modelo S2D

6.3 Expresión cinética del sistema de reacción seleccionado, condiciones operativas y estimación de los parámetros para el análisis comparativo de modelos

6.4 Resultado numérico y análisis comparativo

6.5 Conclusiones del capítulo

Apéndice 6.1

Evaluación del coeficiente de transferencia de calor en la pared para el modelo S2D

CAPITULO 6

ANALISIS COMPARATIVO DEL COMPORTAMIENTO DE LOS MODELOS S2D Y 2R2D: REACTOR DE SINTESIS DE AMONIACO

6.1.- Introducción

En este capítulo se lleva a cabo la comparación de las capacidades predictivas del modelo pseudo-homogéneo bidimensional clásico (S2D) descrito en el capítulo 2 de este trabajo de tesis y del modelo 2R2D presentado en el capítulo 3.

A fin de analizar el comportamiento de ambos modelos frente a una situación de alta exigencia en lo referente a la generación y transferencia de calor, se seleccionó un caso típico consistente en la síntesis de amoníaco. Es importante señalar aquí, que el objeto de este capítulo no es presentar la simulación de una determinada unidad de síntesis de amoníaco, sino que se ha empleado este proceso en el marco de referencia para visualizar características del modelo 2R2D y su comparación con el modelo S2D, bajo condiciones reales y de interés industrial. Por lo tanto, algunos aspectos han sido simplificados o modificados para obtener una interpretación más clara de los resultados.

6.2.- Contextualización de la comparación entre el modelo 2R2D y el modelo S2D

6.2.1.- Modelo 2R2D

Con el fin de evaluar, para el modelo 2R2D la relevancia de discriminar las resistencias térmicas en la pared ($1/h_{wf}$) y en la frontera entre los canales de la pared y central ($1/h_f$), se supuso que los mecanismos asociados al intercambio radial de fluido predominan sobre la conducción en el interior de las partículas y entre superficies sólidas, una situación que, en la práctica, puede considerarse válida para valores de Re_p suficientemente elevados. Esta suposición lleva implícito aceptar que se alcanza el equilibrio térmico local entre partícula y fluido. Para mantener la consistencia, también se ignoran las diferencias entre las concentración C en la corriente del fluido y sobre la superficie del catalizador, C^s . De esta manera, en la formulación del modelo deberán considerarse exclusivamente las ecuaciones de conservación correspondientes a la fase fluida. Bajo esta situación, la formulación resultante, a partir de las ecuaciones 3.5-á-3.9 (descriptas en el capítulo 3) es la siguiente:

En el canal de pared:

$$c_{pf}G_1 \frac{dT_1}{dz} = (1-\varepsilon_1)(-\Delta H)r_e(T_1, C_1) + 2 \frac{\rho_t h_{wf}(T_w - T_1) + \rho_c h_f(T_{c,1} - T_1)}{\rho_t^2 - \rho_c^2} \quad (6.1a)$$

$$G_1 \frac{d(C_1/\delta_f)}{dz} = (1-\varepsilon_1)r_e(T_1, C_1) + 2 \frac{\rho_c \alpha_f (C_{c,1} - C_1)}{\rho_t^2 - \rho_c^2} \quad (6.1b)$$

En el canal central ($\rho < \rho_c$)

$$-\lambda_{ef,c} \frac{\partial(\rho \partial T_c / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + c_{pf}G_c \frac{\partial T_c}{\partial z} = (1-\varepsilon_c)(-\Delta H)r_e(T_c, C_c) \quad (6.1c)$$

$$-D_{e,c} \frac{\partial(\rho \partial C_c / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + G_c \frac{\partial(C_c/\delta_f)}{\partial z} = (1-\varepsilon_c)r_e(T_c, C_c) \quad (6.1d)$$

en $\rho = \rho_c$:

$$\begin{aligned} T_c &= T_{c,1} & -\lambda_{ef,c} \frac{\partial T_c}{\partial \rho} &= h_f (T_{c,1} - T_1) \\ C_c &= C_{c,1} & -D_{e,c} \frac{\partial C_c}{\partial \rho} &= \alpha_f (C_{c,1} - C_1) \end{aligned} \quad (6.1e)$$

6.2.2.- Modelo S2D

Bajo las suposiciones descritas precedentemente, la correspondiente formulación del modelo S2D resulta:

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial(\rho \partial T / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + c_{pf} G \frac{\partial T}{\partial z} = (1 - \varepsilon)(-\Delta H) r_e(C, T) \quad (6.2a)$$

$$-D_e \frac{\partial(\rho \partial C / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + G \frac{\partial(C / \delta_f)}{\partial z} = (1 - \varepsilon) r_e(C, T) \quad (6.2b)$$

$$-\lambda_{ef} \frac{\partial T}{\partial \rho} = h_w (T_w - T) \quad \frac{\partial C}{\partial \rho} = 0 \quad \text{en } \rho = \rho_t / 2 \quad (6.2c)$$

A fin de alcanzar la máxima compatibilidad entre los parámetros de ambos modelos, la velocidad másica superficial global G y la porosidad ε para el modelo S2D se evalúan a partir de los correspondientes parámetros discriminados del modelo 2R2D:

$$G = \left[\rho_c^2 G_c + (\rho_t^2 - \rho_c^2) G_1 \right] / \rho_t^2$$

$$\varepsilon = \left[\rho_c^2 \varepsilon_c + (\rho_t^2 - \rho_c^2) \varepsilon_1 \right] / \rho_t^2$$

Con el mismo propósito, el valor del coeficiente de transferencia de calor en la pared h_w del modelo 2SD se evalúo considerando el comportamiento del modelo 2R2D bajo dos condiciones de referencia alternativas. La primera de ellas, que conduce a un valor de h_w^0 del coeficiente, se establece igualando el valor asintótico del coeficiente global de transferencia de calor de ambos modelos a temperatura T_w constante y sin presencia de la reacción química (esto significa adoptar un valor nulo de la velocidad de generación de calor $Q \equiv (-\Delta H) r_e = 0$). Esta alternativa es la misma empleada en la sección 5.5 del capítulo 5 para comparar los parámetros del modelo 2R2D con correlaciones existentes para Nu_w . La segunda alternativa conducente al valor identificado como h_w^Q del coeficiente, se define de una manera similar, pero con un

valor uniforme de Q . Ambas formulaciones se resumen en el Apéndice 6.1 del presente capítulo.

En la sección siguiente resultará apropiado contar con valores promedio para discutir las diferencias en el comportamiento de los modelos S2D y 2R2D. La temperatura de mezclado de taza en el canal central y en toda la sección transversal del lecho se expresan como

$$\text{Modelo 2R2D} \quad \bar{T}_c = \frac{2 \int_0^{\rho_c} T_c \rho d\rho}{\rho_c^2} \quad \bar{T} = \frac{\rho_c^2 G_c \bar{T}_c + (\rho_i^2 - \rho_c^2) G_1 T_1}{\rho_i^2 G}$$

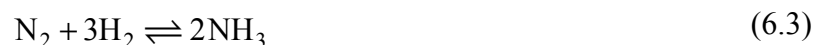
$$\text{Modelo S2D} \quad \bar{T} = \frac{2 \int_0^{\rho_i} T \rho d\rho}{\rho_i^2}$$

Para las concentraciones de mezclado de taza, es válido realizar definiciones similares.

Para resolver las formulaciones de los modelos 2R2D y S2D, se utilizó el Método de Colocaciones Ortogonales (Villadsen y col., 1978), para llevar a cabo la discretización de la coordenada radial, y el conjunto resultante de ecuaciones algebraicas y diferenciales ordinarias se integró a lo largo de la dirección axial usando el algoritmo STIFF3 modificado por Barreto y Mazza, 1989. Debe señalarse que, para todos los casos que se discutirán en la sección 6.4 de este capítulo, los resultados obtenidos utilizando tres o más puntos de colocación fueron virtualmente coincidentes. La programación computacional para la resolución numérica del problema se implementó en la plataforma Compact Visual Fortran 6.0.

6.3.- Expresión cinética del sistema de reacción seleccionado, condiciones operativas y estimación de los parámetros para el análisis comparativo de modelos

La reacción de síntesis de amoníaco



es moderadamente exotérmica (se utilizó un valor de $(-\Delta H) = 111.370 \text{ J/mol}$ en los cálculos), pero la velocidad de generación de calor es elevada, debido a que los reactivos N_2 y H_2 se alimentan casi estequiométricamente al lecho catalítico, incluyendo

adicionalmente solo cantidades menores de otras especies, por ejemplo, una pequeña fracción de NH_3 existente en el reciclo de reactivos no reaccionados empleados en el proceso industrial. En consecuencia, la elevación adiabática de temperatura para la conversión completa es de alrededor de 1000 K. Por ello, en algunas tecnologías, el proceso se lleva a cabo en reactores catalíticos multitubulares, caso considerado para el presente trabajo.

La expresión cinética empleada es la clásica expresión propuesta por [Temkin y Pyzhev, 1939](#) para catalizadores a base de Fe

$$r_e \left[\text{mol} / (\text{m}^3 \text{s}) \right] = f \left(k \frac{P_{N_2} P_{H_2}^{1.5}}{P_{NH_3}} - k' \frac{P_{NH_3}}{P_{H_2}^{1.5}} \right) \quad (6.4)$$

$$k \left[\frac{\text{mol}}{\text{atm}^{1.5} \text{m}^3 \text{s}} \right] = 8280 \exp \left(-\frac{10475}{T[\text{K}]} \right); \quad k' \left[\frac{\text{mol atm}^{0.5}}{\text{m}^3 \text{s}} \right] = 11.9 \times 10^{15} \exp \left(-\frac{23871}{T[\text{K}]} \right)$$

En la ecuación 6.4 f es el factor de actividad del catalizador, para el cual se empleó frecuentemente el valor $f = 1$, aunque otros valores fueron también usados y serán informados en la ocasión.

A pesar de que los efectos térmicos asociados a la reacción química pueden ser considerables, los reactores de síntesis de amoníaco no son propensos a evolucionar hacia condiciones operativas no controlables, debido a que la velocidad de la reacción inversa se incrementa fuertemente con el aumento de la temperatura. Además, como la relación molar N_2 / H_2 es casi estequiométrica en la alimentación, la velocidad de la reacción directa disminuye rápidamente cuando la conversión aumenta. El orden efectivo de la reacción directa es superior a 2.5, si se tiene en cuenta el efecto de $P_{NH_3}^{-1}$. También se realizó un análisis de la situación de reacción hipotéticamente irreversible (a partir de la expresión de la ecuación 6.4, considerando $k' = 0$).

La tabla 6.1 resume los valores de variables operativas, características geométricas y propiedades utilizados en las simulaciones. Las propiedades termodinámicas se evaluaron en las condiciones de entrada del tubo y se consideraron constantes a lo largo del mismo. Se analizaron también los resultados obtenidos con valores de temperatura de entrada y de pared diferentes de 650 K, para lo cual los valores de las propiedades termofísicas de la tabla 6.1 se mantuvieron invariables.

<i>Condiciones Operativas</i>	<i>Propiedades Termo-físicas</i>	<i>Dimensiones de tubo y pastilla</i>
$P [\text{atm}] = 300$	$\delta_f [\text{kg m}^{-3}] = 49.05$	$H [\text{m}] = 3.00$
$T_w [\text{K}] = 650$	$C_{pf} [\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}] = 3356$	$D_t [\text{m}] = 0.04$
$G [\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}] = 0.786$	$\mu_f [\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}] = 2.225 \times 10^{-5}$	$D_p [\text{m}] = 0.008$
$(Re_p = 283)$	$\lambda_f [\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}] = 0.1858$	$(N = 5)$
	$(Pr = 0.401)$	
<i>Condiciones de entrada:</i> $T_0 [\text{K}] = 650$; $N_2 [\text{mol}\%] = 0.228$; $H_2 [\text{mol}\%] = 0.677$; $NH_3 [\text{mol}\%] = 0.054$		

Tabla 6.1: Condiciones y propiedades empleadas para la simulación del caso base.

La relación de diámetro tubo a diámetro de partícula en la tabla 6.1 (caso base) es $N = 5$. Considerando que N es un parámetro clave para comparar el comportamiento de ambos modelos, las simulaciones se llevaron a cabo para dos valores adicionales de la relación de aspecto, $N = 10, 20$. A tal fin, el diámetro de partícula D_p se redujo mientras que D_t se mantuvo en el valor reportado en la tabla 6.1. Sin embargo, al realizar este cambio en el tamaño de partícula, el número de Reynolds disminuiría a $Re_p = 70$, un valor demasiado bajo para las condiciones de comparación indicadas en el comienzo de la sección 6.2.1 y fuera del rango de las correlaciones presentadas en el capítulo 5. Por lo tanto, las variaciones de N fueron también acompañadas por dos modificaciones adicionales en variables fundamentales. En primer lugar, se incrementó el valor de la velocidad de flujo másico, a fin de mantener el nivel del número de Reynolds en $Re_p = 283$. Resultó entonces, $G [\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}] = 0.786 (N/5)$. De esta forma, el tiempo de residencia disminuye, causando que la temperatura y la conversión resulten mucho menores que los valores correspondientes a $N = 5$. Como ello constituye una condición inapropiada para evaluar los efectos de N , el factor de actividad f en la ecuación 6.4 también se incrementó con el fin de mantener niveles de temperatura similares. Para $N = 5$ el factor de actividad se fijó en el valor $f = 1$ y los valores para $N > 5$ serán informados en la sección 6.4.

Para evaluar los parámetros estructurales del modelo 2R2D, se utilizó $n_p^* = 1$ de acuerdo con [Mariani y col., 2002](#), $\varepsilon_c = 0.371 + 0.13/N$ ([Mariani y col., 1998](#)), y la fracción ω se estimó mediante la ecuación 3.1 presentada en el capítulo 3. Para estimar el valor de λ_{ef} se utilizó la correlación de [Bey y Eigemberger, 2001](#) y se empleó el

mecanismo de "recorrido aleatorio" de [Baron, 1952](#) para calcular el valor del coeficiente D_e :

$$\lambda_{ef} = \frac{1}{10}(c_{pf}G)D_p \quad (6.5a)$$

$$D_e = \frac{1}{8}(G/\delta_t)D_p \quad (6.5b)$$

Al usar las ecuaciones 6.5a y 6.5b para estimar los parámetros del modelo 2R2D ($\lambda_{ef,c}$ y $D_{e,c}$), se reemplazó G por el valor de G_c .

Se utilizaron las expresiones del capítulo 5 (ecuaciones 5.8, 5.9 y 5.10) para calcular los coeficientes h_f , h_{wf} y G_1/G_c . La analogía entre la transferencia de calor y masa (ecuación 6.6), se utilizó para calcular α_f , mientras que h_w fue evaluado a partir del procedimiento de ajuste que se explica en el Apéndice 6.1

$$\alpha_f = h_f / \delta_f c_{pf} \quad (6.6)$$

6.4.- Resultados numéricos y análisis comparativo

Los valores de los parámetros térmicos de los modelos 2R2D y S2D para el caso base y los dos valores adicionales de N se muestran en la tabla 6.2. Resulta conveniente realizar una breve discusión sobre aspectos relevantes de los valores numéricos resumidos en la tabla 6.2 antes de presentar y discutir los resultados de las simulaciones de cada caso.

N	Modelo 2R2D						Modelo S2D			
	ε_1	ε_c	G_1/G_c	$\lambda_{ef,c}$	h_f	h_{wf}	ε	λ_{ef}	h_w^0	h_w^Q
5	0.507	0.401	1.43	1.83	133	401	0.436	2.11	173	213
10	0.489	0.388	1.47	1.94	225	897	0.407	2.11	252	292
20	0.482	0.381	1.50	2.01	424	1942	0.391	2.11	420	484

Tabla 6.2: Parámetros del modelo, $[\lambda_{ef}] = Wm^{-1}K^{-1}$, $[h_i] = Wm^{-2}K^{-1}$.

La relación h_{wf}/h_f para los valores del modelo 2R2D en la tabla 6.2 varía en el rango $3 < h_{wf}/h_f < 4.5$ debido a los diferentes valores de ε_1 y ε_c como consecuencia de la modificación del valor de N . Ese rango claramente revela que la resistencia

térmica entre los canales es varias veces mayor que en la pared. La relación h_{wf}/h_f decrece a altos Re_p , pero puede comprobarse a partir de las correlaciones del capítulo 5 que, aún para $Re_p = 2000$, la relación h_{wf}/h_f sigue siendo mayor que 1. Luego, es de prever para los reactores de lecho fijo a escala comercial que la resistencia térmica entre los canales sea por lo menos del orden, y frecuentemente mayor, que en la pared.

Los valores de los coeficientes ajustados del modelo S2D h_w^0 y h_w^Q son más cercanos a h_f que a h_{wf} . Esta situación es esperable de antemano, ya que las resistencias térmicas $1/h_f$ y $1/h_{wf}$ del modelo 2R2D operan en serie (canal de pared mediante) y la primera es mucho mayor. Sin embargo, $1/h_w^0$ y (especialmente) $1/h_w^Q$ son significativamente menores que $1/h_f$ en el caso base de $N = 5$, a pesar que podría haberse esperado cierta contribución de la resistencia $1/h_{wf}$. La extensión finita (y significativa para valores pequeños N) del canal de pared promueve los relativamente importantes valores ajustados de h_w^0 y h_w^Q resulten mayores que los esperables en base al concepto de suma de resistencias en serie. Este efecto es más débil para $N = 20$ y h_w^0 se torna muy cercano a h_f (tabla 6.2). Los correspondientes valores del número de Nusselt muestran un efecto significativo de N , por ejemplo, $Nu_w^0 = 7.5$ para $N = 5$ y $Nu_w^0 = 4.5$ para $N = 20$, aun cuando para las evaluaciones Re_p y Pr se mantuvieron constantes. Este efecto contrasta con las correlaciones de bibliografía analizadas en el capítulo 5, las que o bien no presentan efecto alguno de N o bien solo un efecto marginal (Peters y col., 1988 y Dixon y Labua, 1985). Por otro lado, las diferencias entre h_w^0 y h_w^Q son evidentes en la tabla 6.2. En conjunto, estas observaciones enfatizan que la falta de significado físico preciso del parámetro h_w del modelo S2D ocasiona que el valor "apropiado" del mismo varíe significativamente de acuerdo a la condición operativa específica para la cual es evaluado.

Es relevante visualizar los perfiles radiales de temperatura de ambos modelos en la condición de ajuste del parámetro h_w . En la figura 6.1 se representan los perfiles estacionarios resultantes para el caso de generación uniforme de calor $Q = 1700 \text{ kW m}^{-3}$ y $T_w = 650 \text{ K}$ para los modelos 2R2D y S2D, este último con $h_w^Q = 213 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ (tabla 6.2). De acuerdo con el criterio de ajuste, ambos perfiles en la figura 6.1 presentan el mismo valor de $\bar{T} = 717.7 \text{ K}$ y el mismo flujo sobre la pared ($q_w = 2Q/\rho_t$). A pesar de presentar el mismo valor de \bar{T} , la variación de la temperatura

del fluido desde el eje a la pared es significativamente mayor para el modelo 2R2D que para el modelo S2D.

Esto se debe principalmente a que el ajuste del modelo S2D traslada el efecto del valor elevado de la resistencia térmica ($1/h_f$) entre los canales hacia la pared, y en consecuencia genera un perfil radial más suavizado de temperatura. La misma conclusión cualitativa se alcanza cuando h_w^0 se utiliza para el modelo S2D.

Si se considera que ocurre una reacción catalítica exotérmica bajo los perfiles de temperatura de la figura 6.1, la velocidad de reacción promedio dependerá de la forma en que r_e depende de T . Si $\partial^2 r_e / \partial T^2 > 0$, como ocurre normalmente para una reacción irreversible, la mayor variación de T alrededor de \bar{T} causará que la velocidad de reacción promedio a partir del modelo 2R2D sea mayor que la resultante a partir del modelo S2D. Puede esperarse, entonces, un máximo más elevado de \bar{T} a lo largo del tubo (punto caliente). En cambio, las reacciones fuertemente reversibles, tales como la reacción de síntesis de amoníaco, pueden presentar $\partial^2 r_e / \partial T^2 < 0$ en los rangos prácticos de temperatura y la temperatura en el punto caliente puede ser mayor para el modelo S2D.

En relación a las diferencias esperables entre los valores de \bar{T} predichos por ambos modelos en condiciones de reacción química, pueden mencionarse otros efectos. Por ejemplo, la mayor fracción de sólidos en la región central [$(1 - \varepsilon_c) > (1 - \varepsilon_1)$] tenderá a aumentar la diferencia discutida anteriormente.

Por otro lado, la concentración de reactivos en el canal central del modelo 2R2D será menor que en la zona correspondiente del modelo S2D. Esto es debido a que el tiempo de residencia a una distancia z en el canal central, $z/(G_c \varepsilon_c)$, resulta mayor que en el canal de pared, $z/(G_1 \varepsilon_1)$, y el intercambio de materia entre ambas zonas (que promueve uniformidad de composición) se ve restringido por la resistencia localizada en la frontera de los mismos ($1/\alpha_f$). Si bien este efecto juega un rol cualitativamente opuesto a los descriptos anteriormente, es de esperar que no sea determinante para establecer diferencias entre ambos modelos, ya que la resistencia ($1/\alpha_f$) resulta en la práctica suficientemente rápida para evitar perfiles de concentración radiales significativos.

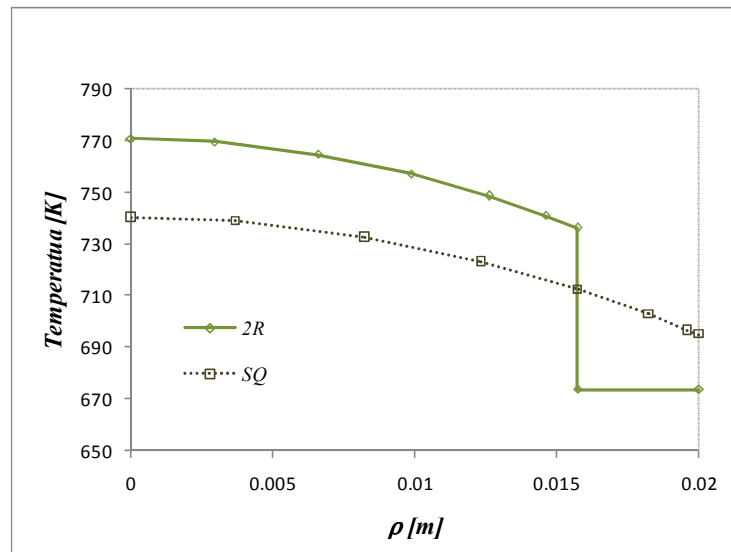


Figura 6.1 : Perfiles radiales estacionarios de temperatura a partir del modelo 2R2D (2R) y del modelo S2D utilizando h_w^Q (SQ), para $Q = 1700 \text{ kWm}^{-3}$ y $T_w = 650 \text{ K}$.

Los perfiles axiales de temperatura y de conversión de N_2 resultante del modelo 2R2D, correspondientes a valores promedios en el canal central (\bar{T}_c y \bar{x}_c), a valores promedios de mezclado de taza en toda la sección transversal (\bar{T} y \bar{x}), y en el canal de pared (T_1 y x_1), se presentan en la figura 6.2 para el caso base definido en la tabla 6.1. Las posiciones axiales (puntos calientes) donde \bar{T}_c y \bar{T} muestran valores máximos, siempre son virtualmente coincidentes; por lo tanto no se hará ninguna distinción a partir de ahora en este sentido. En el punto caliente, también surgen las diferencias máximas entre las temperaturas (\bar{T}_c y T_1) y las conversiones de N_2 (\bar{x}_c y x_1) en ambos canales. Las diferencias ($\bar{T}_c - T_1$) y en menor grado ($\bar{x}_c - x_1$) alrededor del punto caliente son muy significativas. La diferencia ($\bar{x}_c - x_1$) responde a dos causas: los diferentes valores de velocidad de fluido en los canales de pared y central, como se discutiera previamente, y a la diferencia $\bar{T}_c - T_1$. Esta última es mucho más relevante para la mayoría de las condiciones en este estudio.

La influencia de las variables del canal de pared T_1 y x_1 sobre los promedios \bar{T} y \bar{x} son muy marcados para el caso de $N = 5$ en la figura 6.2. Esto no debe sorprender, si se recuerda que la relación entre el área de sección transversal del canal de pared y el área total de sección transversal es del 36% y, teniendo en cuenta la relación G_1/G_c (tabla 6.2), las contribuciones de mezclado de taza del canal de pared aumentan hasta casi 45%.

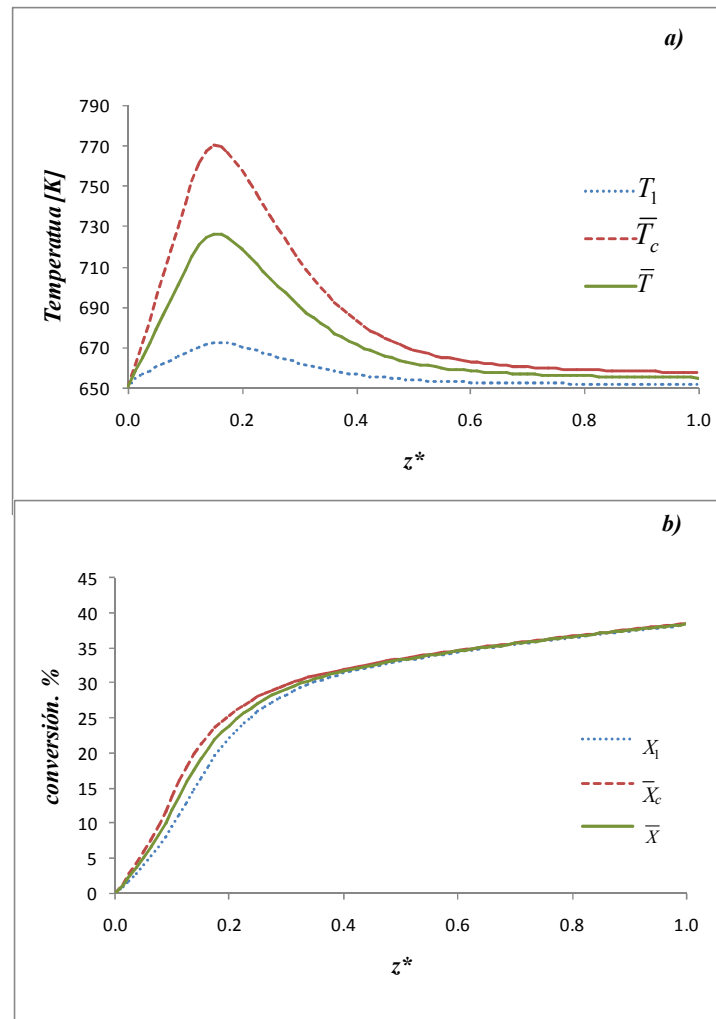


Figura 6.2: Temperaturas axiales (a) y conversiones de N_2 (b) a partir del modelo 2R2D. $T_0 = T_w = 650$ K, $N=5$, r_e (ecuación 6.4) con $f=1$.

También para el caso base (tabla 6.1), los perfiles de temperatura de \bar{T} y \bar{x} de ambos modelos, 2R2D y S2D, se comparan en la figura 6.3. Los resultados del modelo 2R2D se identifican con el subíndice "2R", los del modelo S2D con h_w^0 (sin fuente de generación de calor, $Q = 0$) se identifican con "S0" y aquellos con h_w^Q (Q , uniforme) se identifican con "SQ".

En la figura 6.3a se puede apreciar que los valores del punto caliente de \bar{T} obtenidos a partir de ambos modelos, difieren significativamente. Las diferencias entre los valores de los puntos calientes $\bar{T}_{2R} - \bar{T}_{S0}$ y $\bar{T}_{2R} - \bar{T}_{SQ}$ alcanzan, respectivamente, alrededor de 20 y 35%, del aumento de la temperatura del modelo 2R2D $\Delta\bar{T}_{2R} = \bar{T}_{2R} - T_w$. Por otra parte, las diferencias en la conversión de N_2 (figura 6.3b) comienzan a ser significativas alrededor del punto caliente y mantienen niveles relevantes aun en la salida del reactor ($z^* = 1$).

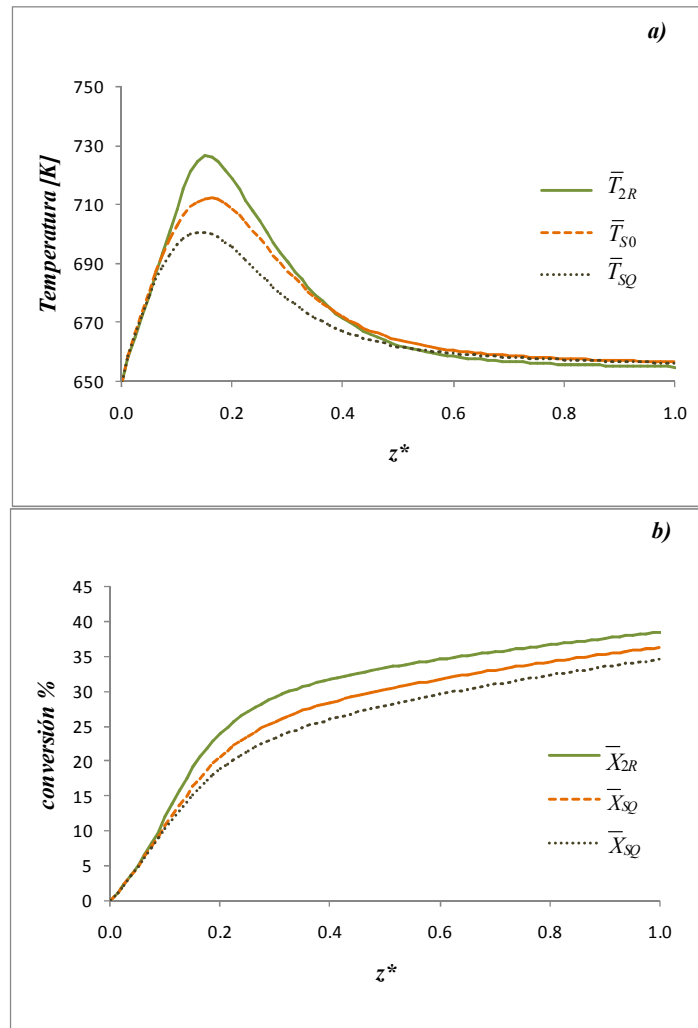


Figura 6.3: Perfiles de (a) \bar{T} y (b) \bar{x} predichos por los modelos 2R2D y S2D. $T_0=T_w=650$ K, $N=5$, r_e (ecuación 6.4) con $f=1$.

Los perfiles radiales de temperatura en el punto caliente predicho para cada modelo en la figura 6.3a se representan en la figura 6.4a. Los perfiles radiales de conversión correspondientes se presentan en la figura 6.4b.

En la figura 6.4b se observan cambios moderados en la conversión obtenida a partir del modelo 2R2D, debido principalmente a la resistencia a la transferencia de masa entre los canales ($1/\alpha_f$), mientras que el modelo S2D arroja variaciones despreciables. Estas observaciones son válidas para todos los casos que se discuten en esta sección.

Los perfiles radiales de temperatura en la figura 6.4a muestran que las temperaturas máximas en el eje (T^{ax}) predichas por los modelos resultan muy diferentes. Esta característica es importante, ya que T^{ax} define el nivel térmico más alto

en el lecho y, por lo tanto, su predicción acertada es fundamental para comprobar los límites de temperatura admisibles. Por ejemplo, la diferencia $T_{2R}^{ax} - T_{SQ}^{ax} = 71.7K$ en la figura 6.4a es muy significativa ya que representa el 50% de la elevación de temperatura en el eje predicha por el modelo 2R2D ($T_{2R}^{ax} - T_w = 142.5K$).

Ya se ha discutido previamente en esta sección, que puede esperarse que el signo de $\partial^2 r_e / \partial T^2$ pueda determinar cuál de los modelos generará la predicción de mayor valor de \bar{T} a lo largo del tubo. En el caso ilustrado en las figuras 6.3 y 6.4, los campos de temperatura y concentración involucrados en el modelo S2D desde la entrada del lecho hasta el punto caliente son tales que siempre se verifica $\partial^2 r_e / \partial T^2 > 0$. Casi idéntica situación se produce a partir de los resultados del modelo 2R2D, aunque al aproximarse al punto caliente, el signo de $\partial^2 r_e / \partial T^2$ cambia a lo largo de la variable radial (en la figura 6.4a $\partial^2 r_e / \partial T^2 > 0$ en el canal de la pared, pero $\partial^2 r_e / \partial T^2 < 0$ en casi todo el canal central). Como resultado, el valor máximo de \bar{T} es predicho por el modelo 2R2D.

Este análisis sugiere que, si $T_0 = T_w$ se eleva hasta un cierto valor, el máximo valor de \bar{T} se encontrará a partir del modelo S2D, ya que la aceleración de la reacción inversa (véase la ecuación 6.4) hará que el signo de $\partial^2 r_e / \partial T^2$ se torne negativo en una etapa anterior durante la elevación de temperatura a lo largo del lecho. En la figura 6.5, se representan los perfiles axiales de temperatura y conversión para las mismas condiciones que en la figura 6.3, pero con $T_0 = T_w = 700K$. De acuerdo con las expectativas, los valores más altos de \bar{T} en el punto caliente se obtienen a partir del modelo S2D (ya sea, usando h_w^0 o h_w^Q). Incrementos adicionales de $T_0 = T_w$ hasta alrededor de $800K$ no modifican significativamente la magnitud ni el signo de las diferencias entre modelos. Finalmente ($T_0 = T_w > 850K$), se alcanza rápidamente una conversión de equilibrio muy baja cerca de la entrada del lecho. Se puede concluir que una reacción fuertemente reversible, como la que se trata aquí, modera el efecto de la temperatura, y los fenómenos descriptos como "reactor fuera de control" o "reactor encendido" apenas se pueden identificar. Como consecuencia, las diferencias entre los modelos son también moderadas.

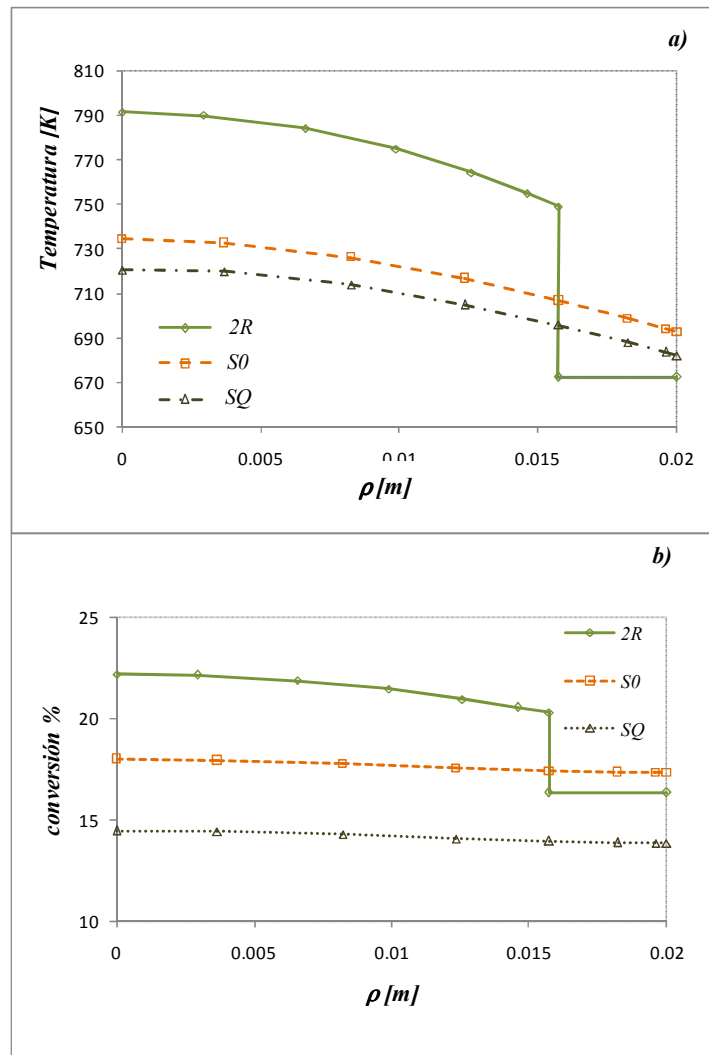


Figura 6.4: Perfiles de temperatura radial (a) y conversión de N_2 (b) predichos por los modelos 2R2D y S2D en el punto caliente. $T_0 = T_w = 650$ K, $N=5$, r_e (ecuación. 6.4) con $f=1$.

Por lo tanto, es importante explorar diferencias entre modelos para el caso de reacciones exotérmicas irreversibles, como son muy comunes en muchos otros reactores multitubulares industriales (por ejemplo, oxidaciones parciales de hidrocarburos u oxideshidrogenaciones). Para evitar el cambio en toda la plataforma de cálculo, se consideró, simplemente el mismo caso presentado en la sección 6.3, pero despreciando la velocidad de reacción inversa en la ecuación 6.4. Se mantuvieron los valores utilizados de las propiedades (tabla 6.1) y de los parámetros (tabla 6.2). Además, la diferencia adiabática de la temperatura usando $(-\Delta H) = 111.370 \text{ J/mol}$ y la energía de activación de la reacción directa en la ecuación 6.4 se ubican claramente en el rango de las que corresponden, por ejemplo, para reacciones de oxidación parcial.

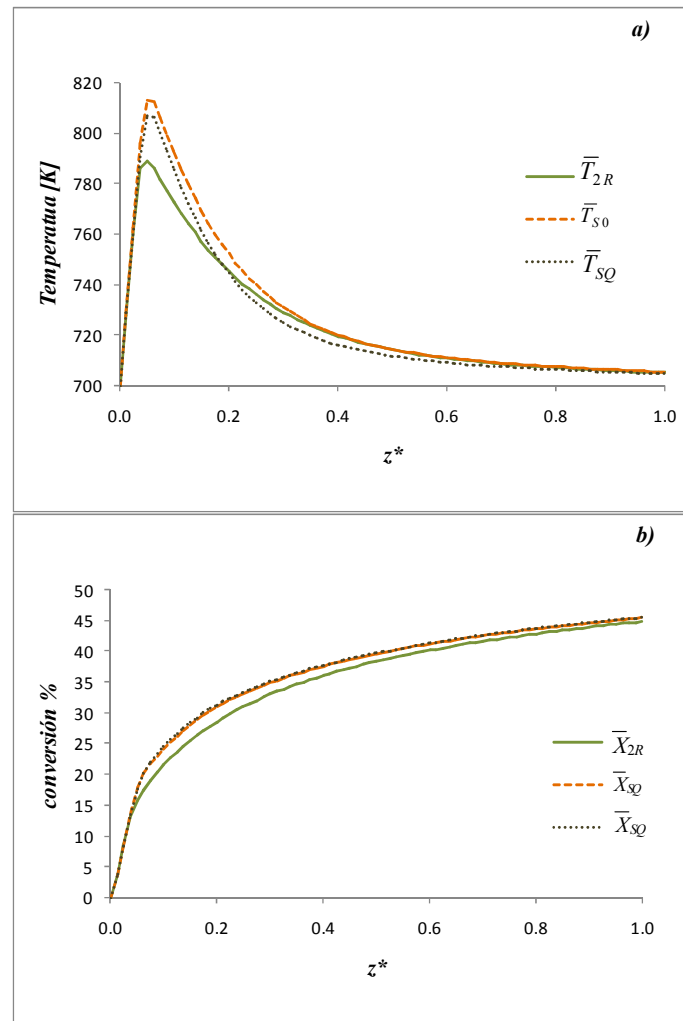


Figura 6.5: Perfiles de \bar{T} (a) y \bar{x} (b) predichos por los modelos 2R2D y S2D. $T_0 = T_w = 700$ K, $N=5$, r_e (ecuación 6.4) con $f=1$.

Como el comportamiento de la restricción $\partial^2 r_e / \partial T^2 > 0$ está garantizado por la irreversibilidad de la reacción, la primera evaluación con la reacción irreversible es verificar si a $T_0 = T_w = 700$ K el signo de las diferencias entre los valores de temperatura en los puntos calientes $\bar{T}_{2R} - \bar{T}_{S0}$ y $\bar{T}_{2R} - \bar{T}_{SQ}$ cambian con respecto al caso reversible en la figura 6.5a. Para llevar a cabo este análisis, sin embargo, resulto necesario disminuir el valor del factor de actividad f (véase la ecuación 6.4); de lo contrario, la reacción irreversible hipotética se enciende (incluso por debajo del nivel $T_0 = T_w = 700$ K) y la temperatura se eleva, consecuentemente, a niveles muy altos (~ 1500 K). El valor $f = 0.4$ conduce a valores máximos de \bar{T} similares a los del caso reversible en la figura 6.5a (alrededor de 800 K). Los perfiles de \bar{T} y \bar{x} así obtenidos se muestran en las figuras 6.6. El modelo 2R2D predice efectivamente temperaturas más altas, y la magnitud de las diferencias con las predicciones del modelo S2D es considerable. Los valores en los puntos calientes $\bar{T}_{S0} - T_w$ y $\bar{T}_{SQ} - T_w$ únicamente

alcanzan el 50% del valor de $\bar{T}_{2R} - \bar{T}_w$ del modelo 2R2D. Las conversiones predichas mediante ambos modelos también son significativamente diferentes: los valores del modelo S2D son alrededor de 25% inferiores a los del modelo 2R2D en la salida del lecho.

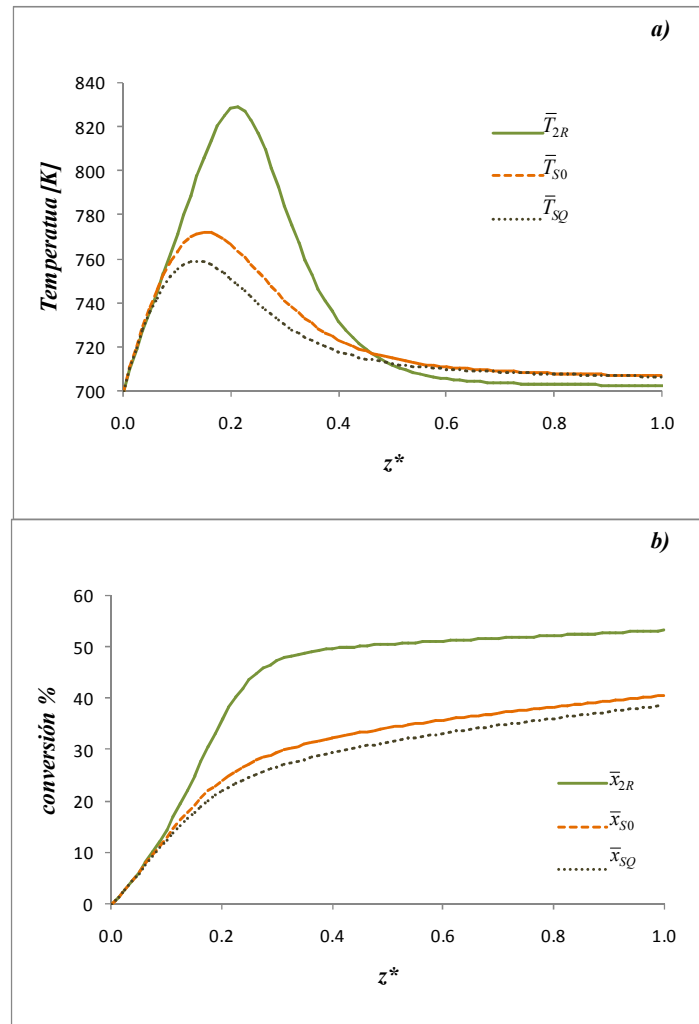


Figura 6.6: Perfiles de (a) \bar{T} y (b) \bar{x} predichas por los modelos 2R2D y S2D. $T_0=T_w=700$ K, $N=5$, r_e (ecuación 6.4) con $k'=0$ (caso irreversible) y $f=0.4$.

En la práctica, la diferencia entre modelos parece ser gobernada por la capacidad de predecir velocidades de reacción promedio, que a su vez se han relacionado con $\partial^2 r_e / \partial T^2$. La magnitud del efecto será cuantificada con mayor propiedad, por el producto adimensional $(\partial^2 r_e / \partial T^2)(\bar{T} - T_w)^2 / r_e$, con $\bar{T} - T_w$ evaluada en el punto caliente y $(\partial^2 r_e / \partial T^2) / r_e$ en alguna posición apropiada entre la entrada del lecho y el punto caliente. Si $\bar{T} - T_w$ es lo suficientemente bajo, los modelos deberían predecir elevaciones de temperaturas muy similares, si h_w se ha evaluado correctamente. Como ejemplo, el mismo caso (irreversible) de la figura 6.6, pero con $T_0 = T_w = 650$ K, da

lugar a un máximo aumento de temperatura $\bar{T}_{2R} - \bar{T}_w \approx 18K$ y los valores correspondientes del modelo S2D (ya sea con h_w^0 o h_w^Q) sólo se diferencian en alrededor de $\pm 1K$. Otras condiciones que implican valores suficientemente bajos de $\bar{T} - T_w$ están siempre acompañadas por diferencias despreciables entre los modelos, evidenciando que los valores de h_w^0 o h_w^Q elegidos para la comparación son, en efecto, adecuados.

En este punto se discutirá el efecto de modificar la relación de aspecto N para el caso base (figuras 6.2-6.4) y para el caso irreversible a $T_0 = T_w = 700K$ (figura 6.6). Debe tenerse presente que los valores de los parámetros corresponden a los incluidos en la tabla 6.2. El factor de actividad catalítica f se modificó para cada N a fin de mantener el mismo valor de punto caliente \bar{T}_{2R} que se produjo para $N = 5$. Los resultados de las temperaturas promedio \bar{T} y las temperaturas en el eje T^{ax} en la posición del punto caliente y la conversión promedio \bar{x} a la salida del lecho, se presentan en las tablas 6.3 (caso base, reversible) y 6.4 (caso irreversible). Para apreciar mejor la significación de las diferencias entre los modelos, las temperaturas promedio para los modelos S2D se expresan mediante las relaciones siguientes:

$$\bar{R}_{S0} \% = 100 \left(\frac{\bar{T}_{2R} - \bar{T}_{S0}}{\bar{T}_{2R} - T_w} \right) \quad \bar{R}_{SQ} \% = 100 \left(\frac{\bar{T}_{2R} - \bar{T}_{SQ}}{\bar{T}_{2R} - T_w} \right) \quad (6.6a)$$

y para las temperaturas del eje

$$R_{S0}^{ax} \% = 100 \left(\frac{T_{2R}^{ax} - T_{S0}^{ax}}{T_{2R}^{ax} - T_w} \right) \quad R_{SQ}^{ax} \% = 100 \left(\frac{T_{2R}^{ax} - T_{SQ}^{ax}}{T_{2R}^{ax} - T_w} \right) \quad (6.6b)$$

Para el caso base (tabla 6.3), las diferencias significativas entre las temperaturas predichas por los modelos se encuentran hasta $N = 10$, con valores del eje $R_{S0}^{ax} \%$ y $R_{SQ}^{ax} \%$ siendo siempre más importantes.

N	f	$\bar{T}_{2R} - T_w$	$\bar{R}_{S0} \%$	$\bar{R}_{SQ} \%$	$T_{2R}^{ax} - T_w$	$R_{S0}^{ax} \%$	$R_{SQ}^{ax} \%$	$\bar{x}_{2R} \%$	$(\bar{x}_{2R} - \bar{x}_{S0})\%$	$(\bar{x}_{2R} - \bar{x}_{SQ})\%$
5	1.0	76.4	18.6	33.6	142.5	40.9	49.9	38.4	2.10	3.80
10	1.25	76.6	13.3	23.9	132.8	25.9	33.1	35.4	2.06	3.49
20	1.68	76.5	3.1	11.9	137.8	10.7	16.0	32.6	0.75	1.86

Tabla 6.3: Temperaturas promedio y en el eje en la posición del punto caliente y conversión media a la salida. Relaciones R_{S0} y R_{SQ} definidas en las ecuaciones (6.6 a, 6.6 b). $T_0 = T_w = 650 K$, r_e (ecuación 6.4).

Para $N = 20$, valor que constituye ya una relación de aspecto elevada para los reactores multitubulares industriales, las diferencias pueden considerarse casi despreciables para fines prácticos. Por otro lado, los valores de conversión de salida, muestran bajas diferencias, aún para $N = 5$.

Cuando se suprime la reacción inversa (tabla 6.4), los niveles térmicos predichos por los modelos siguen siendo significativamente diferentes, incluso para $N = 20$. El comportamiento de las conversiones de salida es marcadamente diferente del caso reversible, con diferencias notables también para $N = 20$.

Los resultados presentados en esta sección sugieren que las diferencias intrínsecas en las descripciones térmicas de los modelos 2R2D y S2D se reflejarán en la precisión de sus predicciones para una variedad de casos prácticos.

N	f	$\bar{T}_{2R} - T_w$	$\bar{R}_{S0} \%$	$\bar{R}_{SQ} \%$	$T_{2R}^{ax} - T_w$	$R_{S0}^{ax} \%$	$R_{SQ}^{ax} \%$	$\bar{x}_{2R} \%$	$(\bar{x}_{2R} - \bar{x}_{S0}) \%$	$(\bar{x}_{2R} - \bar{x}_{SQ}) \%$
5	0.40	128.3	43.0	53.9	253.2	61.2	67.1	53.2	12.6	14.6
10	0.535	128.2	31.7	40.9	237.8	44.4	50.7	50.7	10.3	12.6
20	0.714	128.5	18.8	28.8	256.1	28.1	35.9	49.1	6.92	9.80

Tabla 6.4: Promedios y temperaturas de eje en el punto caliente y conversión media a la salida. Relación R_{S0} y R_{SQ} definida en las ecuaciones 6.6. $T_0 = T_w = 700$ K, r_e (ecuación 6.4) con $k' = 0$ (caso irreversible).

6.5.- Conclusiones del capítulo

Con el objetivo de evaluar las diferencias entre las descripciones proporcionadas por el modelo 2R2D propuesto y el modelo 2SD, se analizó el comportamiento de un reactor multitubular de lecho relleno catalítico destinado a la síntesis de amoníaco, como caso base para las simulaciones. A fin de enfatizar la discriminación entre las resistencias térmicas $1/h_{wf}$ y $1/h_f$ se supuso que los mecanismos de intercambio radial de fluido predominan sobre la conducción en el interior de las partículas y entre las superficies sólidas, situación que en la práctica puede asegurarse a valores suficientemente altos de Re_p .

La capacidad de intercambio de calor global de ambos modelos se fija ajustando el parámetro h_w del modelo 2SD, utilizando dos criterios alternativos (Apéndice 6.1). Los valores de h_w resultan relacionados con h_f y h_{wf} pero no se les puede asignar un significado físico claro.

La comparación entre los modelos 2R2D y S2D se realizó bajo dos esquemas cinéticos: la velocidad real de reacción reversible para la síntesis de amoníaco (caso reversible) y la velocidad de reacción irreversible que resulta de ignorar la reacción inversa (caso irreversible). El último se realizó para simular aplicaciones importantes que implican reacciones irreversibles, tales como oxidaciones parciales de hidrocarburos, y también para visualizar determinadas características exhibidas por reacciones químicas limitadas severamente por el equilibrio químico, tal como el caso de la síntesis de amoníaco.

Las diferencias entre ambos modelos se han discutido principalmente en términos de diferentes valores de temperaturas predichos en el punto caliente. El análisis de las características de ambos modelos y de los resultados numéricos permitió concluir que la principal causa de las diferencias de temperatura es la elevada resistencia térmica $1/h_f$ entre los canales del modelo 2R2D. A un valor determinado de la relación de aspecto N , la magnitud de las diferencias está determinada por el producto $(\partial^2 r_e / \partial T^2)(\bar{T} - T_w)^2 / r_e$ donde $\bar{T} - T_w$ se evalúa en la posición del punto caliente mediante, por ejemplo, el modelo 2R2D, y $(\partial^2 r_e / \partial T^2) / r_e$ se evalúa en alguna posición apropiada entre la entrada del lecho y el punto caliente. Si el modelo 2R2D arrojará un valor más alto o más bajo de la temperatura del punto caliente, ello está definido por el signo de $\partial^2 r_e / \partial T^2$. La derivada segunda es siempre positiva para una reacción irreversible, y las temperaturas obtenidas a partir del modelo 2R2D son siempre más elevadas. Además, la elevada sensibilidad paramétrica y el fenómeno de "encendido" que se manifiestan para reacciones irreversibles están asociados con valores estrictamente positivos de $\partial^2 r_e / \partial T^2$. La comparación numérica de los modelos 2R2D y S2D para el caso irreversible mostró que las temperaturas promedios y en el eje en el punto caliente, resultan significativas bajo condiciones operativas razonables (lejos del "encendido" del reactor) y se incrementa monótonamente a medida que se elevan las temperaturas de referencia $T_0 = T_w$, hasta alcanzar el encendido del reactor. Las conversiones finales también difieren significativamente. Las diferencias entre los modelos siguen siendo considerables en el rango de relación de aspecto $5 < N < 10$, y decrecen significativamente sólo cuando $N = 20$.

El comportamiento del caso reversible (analizado con la velocidad de reacción para la síntesis de amoníaco original) es bastante diferente. El signo de las diferencias entre las temperaturas predichas en el punto caliente por ambos modelos cambia cuando

las temperaturas de referencia $T_0 = T_w$ alcanzan algún valor específico, como consecuencia del cambio en el signo $\partial^2 r_e / \partial T^2$. Incrementos posteriores en $T_0 = T_w$ no modifican demasiado la magnitud de las diferencias entre los modelos. Aunque en el caso reversible la elevación de la temperatura por encima de $T_0 = T_w$ es moderada, para $N = 5$ aún se encuentran diferencias significativas entre ambos modelos en los valores de temperatura promedio y en el eje, en la posición del punto caliente. Sin embargo, el efecto de N es más fuerte que en el caso irreversible : para $N = 10$, las diferencias entre los modelos decrecen significativamente y casi desaparecen para el valor de $N = 20$.

Apéndice 6.1: Evaluación del coeficiente de transferencia de calor en la pared para el modelo S2D

Bajo las condiciones de comparación entre los modelos 2R2D y S2D en la sección 6.2 del capítulo 6, se recuerda que para el primer modelo su formulación está dada por las ecuaciones 6.1a-6.1e para y por las ecuaciones 6.2a-6.2c para el segundo.

Si se ignora la ocurrencia de una reacción química ($Q \equiv (-\Delta H)r_e = 0$) en las ecuaciones 6.1a, 6.1c y en la ecuación 6.2a, la corriente de fluido en el lecho intercambia calor, simplemente, con la pared que se supone que se encuentra a una temperatura uniforme T_w . En tales condiciones, la solución de las ecuaciones 6.2a y 6.2c para el modelo S2D puede expresarse mediante una conocida serie, que para un perfil de entrada de temperatura radial uniforme ($T = T_0$ en $z = 0$) se puede escribir en términos de la temperatura promedio en la sección transversal \bar{T} como

$$\frac{\bar{T}(z) - T_w}{T_0 - T_w} = 4 Bi_w^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp\left[-4\lambda_{ef} \beta_n^2 z / (G c_{pf} D_t^2)\right]}{\beta_n^2 (Bi_w^2 + \beta_n^2)} \quad (A6.1)$$

donde $Bi_w = D_t h_w / (2\lambda_{ef})$ es el número de Biot y β_n es el n -ésimo autovalor positivo definido por la raíz de la expresión

$$Bi_w J_0(\beta_n) = \beta_n J_1(\beta_n) \quad (A6.2)$$

J_0 y J_1 son las funciones de Bessel de orden cero y de primer orden, respectivamente.

Para posiciones axiales suficientemente alejadas de la entrada del reactor, únicamente el término correspondiente al menor autovalor β_1 en la ecuación A6.1 resulta significativo.

$$\frac{\bar{T}(z) - T_w}{T_0 - T_w} = 4 Bi_w^2 \frac{\exp\left[-4\lambda_{ef} \beta_1^2 z / (G c_{pf} D_t^2)\right]}{\beta_1^2 (Bi_w^2 + \beta_1^2)} \quad (A6.3)$$

Para describir la evolución de la temperatura media \bar{T} puede aplicarse la ecuación de conservación de calor global en una longitud diferencial $\pi D_t q_w dz = (1/4)(\pi D_t^2) G c_{pf} d\bar{T}$. Por definición, el coeficiente global de transferencia de calor h_T se define a partir de $q_w = h_T (T_w - \bar{T})$. Reemplazando q_w resulta:

$$h_T = \frac{D_t}{4} \frac{G C_{pf}}{T_w - \bar{T}} \frac{d\bar{T}}{dz} \quad (A6.4)$$

Si la expresión A6.3 se utiliza para evaluar \bar{T} y $d\bar{T}/dz$, se obtiene la siguiente expresión para h_T

$$h_T = \lambda_{ef} \frac{\beta_1^2}{D_t} \quad (\text{A6.5})$$

El criterio empleado para definir el coeficiente de transferencia de calor de pared h_w del modelo S2D puede expresarse ahora exigiendo que el modelo S2D exhiba la misma velocidad de transferencia de calor que el modelo 2R2D a valores elevados de z . De manera equivalente, se requiere el mismo valor de h_T (ecuación A6.5) para ambos modelos. Para completar la formulación de este criterio, resulta necesario la expresión de h_T para el modelo 2R2D. La solución en serie de las ecuaciones 6.1a, 6.1c y 6.1e ha sido dada por [Mariani y col., 2003](#). La expresión- equivalente a A6.3- para elevados valores de z puede escribirse como

$$\frac{\bar{T}(z) - T_w}{T_0 - T_w} = \Gamma_1 \exp\left[-4 \lambda_{ef,c} \mu_1^2 z / (G_c c_{pf} D_c^2)\right] \quad (\text{A6.6})$$

donde Γ_1 es una constante, irrelevante para el presente propósito, $D_c = D_t - D_p$, y μ_1 es el menor autovalor, que satisface la relación:

$$Bi_f J_0(\mu_1) \left(\mu_1^2 - \frac{D_t h_{w,f}}{\lambda_{ef,c}} \frac{G_c (N-1)^2}{G_1 (2N-1)} \right) = \mu_1 J_1(\mu_1) \left(\mu_1^2 - \frac{D_c h_f + D_t h_{w,f}}{\lambda_{ef,c}} \frac{G_c (N-1)^2}{G_1 (2N-1)} \right) \quad (\text{A6.7})$$

donde $Bi_f = D_c h_f / (2\lambda_{ef,c})$. Evaluando h_T de la ecuación A6.4 y utilizando la ecuación A6.6 para evaluar \bar{T} y $d\bar{T}/dz$

$$h_T = \lambda_{ef,c} \frac{\mu_1^2}{D_t} \frac{GN^2}{G_c (N-1)^2} \quad (\text{A6.8})$$

Finalmente, igualando las ecuaciones A6.5 y A6.8

$$\left(\frac{(N-1)\beta_1}{N\mu_1} \right)^2 = \frac{\lambda_{ef,c}}{\lambda_{ef}} \frac{G}{G_c} \quad (\text{A6.9})$$

La ecuación A6.9 debe satisfacerse ajustando el valor del parámetro h_w del modelo S2D, valor que se denota h_w^0 .

El segundo criterio mencionado en la sección 6.2 considera una velocidad de generación de calor uniforme Q (por unidad de volumen de catalizador). En las ecuaciones de conservación de calor de los modelos, las ecuaciones 6.1a, 6.1c y 6.2a,

$Q \equiv (-\Delta H)r_e$. A T_w constante y valores suficientemente elevados de z , se desarrolla un perfil estacionario de temperatura, que permite transferir toda la cantidad de calor generado hacia la pared. La ecuación 6.1c (con $\partial T_c/\partial z = 0$) se puede integrar fácilmente y la cantidad de calor transferido en la frontera $\rho = \rho_c$ se evaluó, entonces, como

$$2\pi\rho_c h_c (\bar{T}_c - T_{c,1}) = \pi\rho_c^2 Q(1 - \varepsilon_c) \quad (\text{A6.10})$$

donde $h_c = 4\lambda_{ef,c}/\rho$. La condición de contorno térmica en la ecuación 6.1e se expresa como

$$2\pi\rho_c h_f (T_{c,1} - T_1) = \pi\rho_c^2 Q(1 - \varepsilon_c) \quad (\text{A6.11})$$

La ecuación de conservación de energía en el canal de la pared (ecuación 6.1a), con $dT_1/dz = 0$, se convierte en

$$2\pi\rho_t h_{wf} (T_1 - T_w) = 2\pi\rho_c h_f (T_{c,1} - T_1) + \pi(\rho_t^2 - \rho_c^2) Q(1 - \varepsilon_1) \quad (\text{A6.12})$$

El coeficiente global de transferencia de calor h_T se define a partir de

$$2\pi\rho_t h_T (\bar{T} - T_w) = \pi\rho_t^2 Q(1 - \varepsilon) \quad (\text{A6.13})$$

De las ecuaciones A6.10-A6.13 y con las definiciones de G , ε y \bar{T} dadas en la sección 6.2

$$h_T = \frac{h_{wf}}{1 + \Psi} \quad \Psi = \left(\frac{\rho_c}{\rho_t}\right)^3 \left(\frac{G_c}{G}\right) \left(\frac{1 - \varepsilon_c}{1 - \varepsilon}\right) h_{wf} \left(\frac{1}{h_f} + \frac{1}{h_c}\right) \quad (\text{A6.14})$$

Siguiendo, ahora, para el modelo S2D (formulado en las ecuaciones 6.2a-6.2c) consideraciones similares a las del modelo 2R2D y usando la definición A6.13, se desprende que

$$h_T = \frac{h_w}{1 + h_w/h} \quad h = 8\lambda_{ef}/D_t \quad (\text{A6.15})$$

Igualando h_T a partir de las ecuaciones A6.14 y A6.15, puede evaluarse h_w (denotado h_w^Q) mediante

$$h_w^Q = \frac{h_{wf}}{1 + \Psi - h_{wf}/h} \quad (\text{A6.16})$$

De la ecuación A6.13 se concluye que, por la igualación de h_T , el valor estacionario \bar{T} también resulta el mismo en ambos modelos.

CAPITULO 7

APLICACIÓN DE LA CFD AL ANÁLISIS DE LECHOS RELLENOS AL AZAR

7.1 Introducción

7.2 Procedimientos para generar empaques aleatorios

7.2.1 Algoritmo propuesto por Salvat y col., 2005

7.3 Definición de la geometría de estudio

7.3.1 Tratamiento de los puntos de contacto

7.3.2 Metodología para aplicar el procedimiento de Eppinger y col., 2011 y evaluación de resultados

7.3.3 Construcción de la geometría en el dominio de cálculo para el caso de estudio con $N=5$

7.4 Generación del mallado de la geometría

7.4.1 Conformación y aspecto de la malla resultante para el caso $N=5$

7.5 Conclusiones del capítulo

CAPITULO 7

APLICACIÓN DE CFD AL ANÁLISIS DE LECHOS RELLENOS AL AZAR

7.1.- Introducción

Cuando un recipiente cilíndrico se carga con partículas sólidas conformando un lecho fijo, la posición relativa de las mismas genera diferentes empaquetamientos en los cuales se observa un orden apreciable en las cercanías de la pared del recipiente que va disminuyendo al avanzar radialmente hacia el centro.

El auge actual de la simulación rigurosa mediante una herramienta de gran potencial como la CFD, trae aparejada la necesidad de definir precisamente la posición espacial de todas las partículas. En un caso general, un conjunto de sólidos se dispone en el recipiente en forma aleatoria, conformando un "arreglo espacial de relleno al azar".

La distribución de las partículas en empaquetamientos al azar es irregular en las tres coordenadas espaciales, por lo que resulta necesario llevar a cabo experiencias y desarrollar algoritmos (herramientas computacionales) que permitan generar sistemáticamente empaques aleatorios de partículas y predecir las posiciones de las mismas. En la sección 7.2 se realiza una descripción de estos procedimientos.

Para las simulaciones por CFD, un análisis del esquema geométrico a utilizar es fundamental. La geometría del caso en estudio se define en la sección 7.3 conjuntamente con las propiedades geométricas necesarias para representar un lecho fijo con baja relación de aspecto y relleno al azar.

Otra etapa importante que tiene un gran impacto en la estabilidad y precisión de la solución en las simulaciones por CFD, es la calidad y densidad de la malla. En la sección 7.4 se describen las consideraciones indispensables para la generación de la malla de cálculo, y el proceso de validación de las mismas.

El capítulo finaliza con la enumeración de los aspectos más relevantes para el modelado por CFD, que permiten obtener resultados precisos y adecuados para la celda de cálculo de lechos rellenos de baja relación de aspecto.

7.2.- Procedimientos para generar empaques aleatorios

En la literatura específica se han reportado diferentes alternativas de base analítica, numérica y/o experimental, que permiten generar empaques aleatorios, algunas de las cuales se describen a continuación.

Enfoque Teórico

Los enfoques teóricos utilizan ecuaciones analíticas y métodos estadísticos para obtener información sobre la estructura del empaquetamiento. Debido a la complejidad de la geometría de un arreglo aleatorio, los datos que se obtienen a partir de procedimientos puramente teóricos es limitada (Mueller, 1997).

Técnicas Experimentales

Existen diferentes técnicas experimentales, que han sido utilizadas durante las últimas décadas, que pueden dividirse en dos grandes grupos: destructivas y no destructivas. La mayor parte de los primeros esfuerzos reportados en la bibliografía, tuvo como finalidad realizar la evaluación de la porosidad, derivando en expresiones empíricas para la predicción del valor global de porosidad del lecho y la determinación de perfiles radiales de porosidad (Mariani y col., 1998; Klerk, 2003). Las propiedades del lecho, tales como porosidad global, perfiles radiales y axiales de porosidad, distribución de los puntos de contacto, distribución de centros de partículas y perfiles de superficie expuesta, poseen valores que dependen de las posición de las partículas, definida a partir de las coordenadas de los centros de las partículas (Mariani y col., 2002), que constituyen una información básica sobre el lecho.

Para obtener la información referida en el párrafo precedente, se pueden aplicar diferentes técnicas, de las denominadas no-destructivas. Ellas permiten la generación de imágenes o esquemas digitalizados 3D del empaquetamiento, de las cuales se obtiene la información que permite reproducir el posicionamiento de las partículas que conforman el relleno del lecho fijo.

En primer lugar, puede mencionarse la técnica de rayos X. Uno de los primeros reportes de aplicación de esta técnica al estudio de lechos de partículas correspondió al trabajo de Mueller, 1992. Esta técnica permite identificar la posición de cada partícula en el relleno, a partir de una micro esfera de acero colocada en el centro de cada esfera

de la empaquetadura, las cuales deben ser transparentes a los rayos X, para poder detectar lo posición de la micro esfera por irradiación.

Otras técnicas que se pueden mencionar son: Tomografía Computada de Rayos X (Toye y col., 1998; Irazoqui y col., 2004; Suzuki y col., 2008), Tomografía Computada de Rayos Gamma (Wang y col., 2001), Imágenes por resonancia magnética, entre otros.

Las técnicas basadas en tomografías computadas (CT) permiten, por ejemplo, analizar estructuras densas dentro de arreglos conformados por partículas monodispersas suministrando una serie de imágenes que representan las secciones transversales de la estructura analizada. Cada elemento (pixel) en las imágenes puede ser considerado como un prisma rectangular tridimensional con dimensiones dadas por la resolución del *escaneo* en cada una de las direcciones de coordenadas. La intensidad del elemento (pixel) se relaciona con la densidad del material en el punto tridimensional de análisis, lo que permite obtener las coordenadas tridimensionales del centro de cada partícula (Wensrich, 2012).

Técnicas Numéricas

En lo que respecta a los métodos numéricos se describirán someramente las técnicas utilizadas para construir y reproducir configuraciones de relleno irregular de esferas en un lecho fijo para cualquier relación de aspecto.

Un aspecto de gran importancia a tener en cuenta, consiste en definir si la técnica que se emplea en los algoritmos 3D se considera el eventual solapamiento entre esferas. Sobre esta base el procedimiento se denominará *Soft Spheres Algorithm* (algoritmos de esferas blandas, considerando el solapamiento entre esferas) o *Hard Spheres Algorithm* (algoritmos de esferas duras, donde no se admite el solapamiento entre esferas).

Uno de los métodos numéricos más utilizados es el algoritmo conocido como Deposición Balística (Atmakidis y Keing, 2009), el cual se basa en una técnica que consta de dos etapas: la primera es el llenado del lecho, que consiste en colocar aleatoriamente partículas en forma de lluvia, generando un arreglo aleatorio y luego una etapa de compresión.

Otras alternativas que merecen ser mencionadas, son los métodos de Monte-Carlo y de Elementos Discretos (DEM).

El método de Monte-Carlo se basa en el algoritmo de Deposición Balística con modificaciones en la formulación de las técnicas que se emplean en la generación de las etapas necesarias para obtener arreglos aleatorios. Una gran ventaja al aplicar esta aproximación reside en que requiere un tiempo de cálculo significativamente inferior y posee mayor simplicidad para generar un arreglo al azar con esferas que no se solapan.

A diferencia del método de Monte-Carlo, el DEM utiliza un esquema numérico explícito que simula el comportamiento dinámico y estático de conjuntos de partículas basado en la mecánica de contacto, considerando el solapamiento de las esferas (Cundall y Strack, 1979; Bai y col., 2009).

Los métodos basados en simulación computacional son preferibles a los métodos experimentales debido a los elevados tiempos y recursos que estos últimos demandan. Se observa también que, luego de aplicar algoritmos numéricos, los arreglos espaciales aleatorios de partículas se reproducen de manera satisfactoria, lo que demuestra la conveniencia de esta metodología. Esto puede verificarse confrontando valores de propiedades relevantes de lecho, tales como la porosidad global o su distribución radial, con los correspondientes valores experimentales.

Los resultados de algunos procedimientos numéricos revelan diferencias no despreciables en los valores de porosidad global, debido a que los lechos resultan menos compactos como consecuencia de la metodología aplicada en la formulación de las etapas que constituyen los modelos numéricos.

Para determinar la información estructural del lecho que luego será simulado aplicando la técnica de CFD, en este trabajo se utiliza una metodología basada en el algoritmo numérico propuesto por Salvat y col., 2005. Este algoritmo fue desarrollado para proporcionar valores de porosidad muy similares a los de los lechos reales con un importante grado de compactación.

7.2.1.- Algoritmo propuesto por Salvat y col., 2005

Salvat y col., 2005 desarrollaron un algoritmo para simular en forma realista la estructura de un reactor de lecho fijo relleno con partículas esféricas de un único tamaño

contenidas en un recipiente cilíndrico. Los autores propusieron un esquema de caracterización cuyas consideraciones fundamentales se describen en los párrafos siguientes.

El algoritmo se basa en el enfoque de esferas blandas, y establece un equilibrio de fuerzas en cada esfera. Para su formulación, se consideran las siguientes hipótesis:

- esferas de un único tamaño (mono-esferas)
- se considera el campo gravitatorio
- se ignoran las fuerzas de fricción
- las esferas como así también la pared lateral se suponen deformables
- la base del recipiente es rígido
- las fuerzas de contacto entre esferas y entre las esferas y la pared se calculan a partir de la teoría de la elasticidad

Luego de determinar la relación de aspecto del lecho a simular, como así también el número de partículas N_p , el algoritmo conduce a definir un conjunto de posiciones para todas las partículas que conforman el arreglo aleatorio, para lo cual se verifica que la sumatoria de las fuerzas que actúan sobre cada una de las esferas sea aproximadamente igual a cero.

Continuando con el esquema propuesto, se describe la estructura del algoritmo que comprende una secuencia de cuatro etapas; generación, etapa inicial, intermedia y final. En la etapa de generación se necesita definir una distribución inicial aleatoria de las partículas, mientras que las otras tres etapas se caracterizan por un efecto específico sobre la estructura del relleno (expansión, compactación, equilibrio de fuerzas). Esta división en etapas, en cierta manera arbitraria, tiene como objetivo asegurar que el algoritmo sea lo suficientemente robusto y que la convergencia sea rápida. En la figura 7.1 se puede observar la estructura que adopta el empaquetamiento en cada una de las etapas, para $(D_t/D_p) = 5$, 500 partículas y porosidades 0.47 y 0.433 (inicial y final respectivamente).

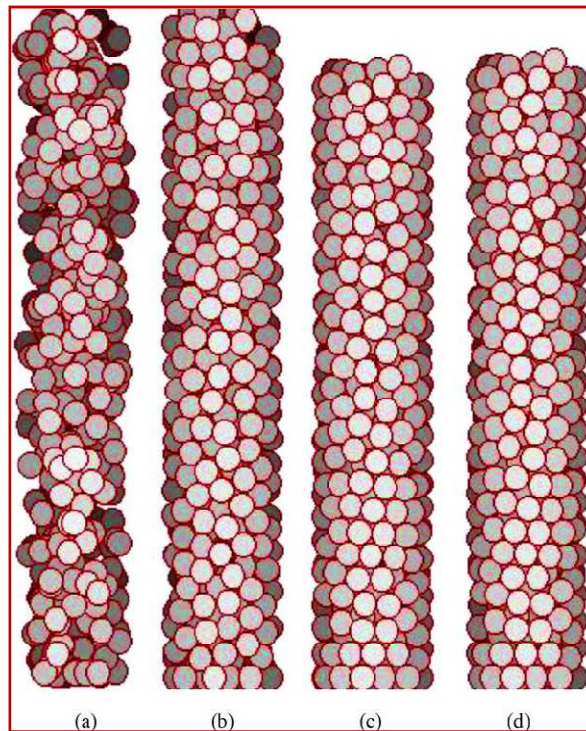


Figura 7.1: Secuencia de la estructura del lecho relleno $N=5$. (a) Generación, (b) Etapa inicial, (c) Etapa intermedia, (d) Etapa Final (Salvat y col., 2005).

Finalmente se genera un lecho compacto que permite obtener la ubicación exacta de cada partícula que conforma el arreglo irregular. Mediante la evaluación de propiedades globales y locales (por ejemplo, la porosidad) y su confrontación con resultados experimentales se puede apreciar la calidad de los resultados obtenidos al aplicar el algoritmo.

7.3.-Definición de la geometría en estudio

En esta sección se describe la geometría adoptada para representar un lecho relleno al azar con relación de aspecto $N = 5$, conformado por partículas esféricas de un único tamaño, contenidas en un tubo de sección circular. Sabiendo que el esquema geométrico es una de las etapas críticas para la utilización de la CFD como herramienta de simulación, la construcción del mismo requiere la mayor aproximación posible a la realidad.

La aplicación del algoritmo requiere la definición de ciertos criterios. En primer lugar solo una pequeña fracción del lecho relleno puede incluirse en el estudio, de manera tal de resultar compatible con los recursos computacionales disponibles para la

resolución del problema por CFD. Simultáneamente, dicha fracción debe representar las propiedades promedio del lecho completo. El parámetro utilizado para elegir dicha sección de lecho es el valor de la porosidad el cual será lo más cercano al valor de porosidad que corresponde a todo el lecho (Bai y col., 2009). Una práctica recomendada consiste en seleccionar la posición del segmento que tenga una desviación mínima con respecto a la porosidad de todo el lecho relleno.

En función de lo descrito, y teniendo en cuenta que el lecho simulado que se estudiará está conformado por 1500 esferas, la porción seleccionada del mismo contiene 204 esferas, que alcanzan a cubrir, aproximadamente, 10 veces el diámetro de las esferas. En la sección seleccionada, el valor de la porosidad es representativo de la porosidad real del lecho, con una desviación menor al 1 %.

Por último, aunque no menos importante, se debe consignar la necesidad de modificar las regiones de contacto entre sólidos, ya sea entre las partículas mismas o las partículas y la pared del tubo. Debido a la geometría de los filetes de fluido alrededor de los puntos de contacto, su discretización en elementos no resulta eficiente y con frecuencia causan problemas de convergencia en las simulaciones. En los últimos años se han estudiado diferentes alternativas para tratar dichas áreas de contacto, comúnmente denominadas puntos de contacto, basándose en distintas metodologías que cuentan con ventajas y desventajas, que deben ser ponderadas en cada caso particular.

Todas las alternativas para modificar geoméricamente las regiones de contacto que se discutirán en los siguientes párrafos, ocasionan una severa dificultad para evaluar la transferencia de calor por conducción pastilla-pastilla o pastilla - pared, puesto que la misma está fuertemente condicionada por la resistencia térmica que ejerce el gas alrededor de los puntos de contacto y en consecuencia por la geometría real. De esta forma, cualquier distorsión introducida modificará seriamente la magnitud de los intercambios térmicos mencionados. En el presente trabajo se ignoran estas contribuciones, por lo que no será necesario contemplar esa deficiencia o las correcciones necesarias para evitarla.

7.3.1.-Tratamiento de los puntos de contacto

En esta sección se detallan las cuatro técnicas reportadas en la bibliografía para resolver el problema de los puntos de contacto, requerimiento previo a la discretización de la geometría en elementos. Cuando se genera la malla de cálculo, los elementos en la región de contacto entre superficies sólidas resultan extremadamente asimétricos, conduciendo a la obtención de mallas de muy baja calidad y, consecuentemente, a problemas de convergencia durante las simulaciones. Para evitar estos inconvenientes, es necesario introducir modificaciones de carácter geométrico sobre las partículas esféricas, lo cual puede llevarse a cabo con un enfoque global o local. A tal efecto se consideraron cuatro enfoques: dos globales y dos locales analizados por [Dixon y col., 2013](#) en su trabajo de revisión.

Enfoque global

a) Reducir ligeramente el tamaño de las partículas (*Gaps*)

[Calis y col., 2001](#) y [Nijemesland y Dixon, 2001](#) demostraron la necesidad de introducir una brecha (*gap*) en el punto de contacto entre las partículas y entre las partículas y la pared del tubo (figura 7.2a), asegurando de esta manera la convergencia de las simulaciones. A tal efecto, los autores disminuyeron al 99 % el tamaño original de las partículas, sin modificar las posiciones espaciales de las mismas, dado que el *gap* generado entre los sólidos es tan pequeño que no afecta el patrón de flujo.

Teniendo en cuenta que el volumen de la partícula es proporcional a su diámetro al cubo, una reducción en el tamaño de partícula, da lugar a cambios significativos en la fracción sólida, lo que influye directamente en la porosidad del lecho. La desviación de la porosidad es linealmente proporcional a la reducción del diámetro de la partícula: por ejemplo, una reducción del 1% implicará que la porosidad del empaquetamiento aumente aproximadamente un 4.4% para valores usuales de porosidad (alrededor de 0.4), afectando notablemente la caída de presión a través del lecho (debido a la fuerte dependencia de la misma con la porosidad), cuyo estimación será inferior a alrededor de 15% del valor real (dependiendo del régimen fluido-dinámico). Tal nivel de error no es justificable para evaluaciones rigurosas como las que se esperan al aplicar la técnica CFD. Sería necesario entonces, una reducción del tamaño de partícula

considerablemente inferior al 1%, pero de esta manera se produciría un aumento significativo, del tiempo y recursos requeridos para el procesamiento computacional.

b) Aumentar ligeramente el tamaño de las partículas

[Guardo y col., 2006](#) propusieron incluir los puntos de contacto reales en la geometría, generando la superposición de las esferas (*overlap*) (figura 7.2b), para lo cual es necesario incrementar en un 0.5% el diámetro de las mismas y producir un solapamiento en los lugares donde se encuentran las regiones de contacto esfera-esfera y esfera-pared. Este enfoque conduce a disminuir la porosidad del lecho, por lo que introduce variaciones de signo contrario al método anterior cuando se evalúa la caída de presión.

Enfoque Local

c) Generar pequeños puentes cilíndricos entre partículas

[Ookawara y col., 2007](#) y [Kuroki y col., 2007](#) consideraron modificaciones locales al modelo geométrico, insertando un pequeño puente cilíndrico alrededor de los puntos de contacto (figura 7.2c), entre las partículas que se encuentren en contacto o a una distancia por debajo de un valor predefinido, eliminando los puntos de contacto y aumentan localmente el tamaño de las partículas.

En la bibliografía se reporta que, en estudios numéricos pertinentes se pudo demostrar que las propiedades de flujo macroscópico, tales como la caída de presión, no fueron influenciadas por la adición de los pequeños cilindros mencionados. Por ejemplo [Dixon y col., 2013](#) reportaron un error menor que 0.3% en la porosidad al aplicar este enfoque, lo que corresponde a un error en la caída de presión inferior al 1 %.

d) Aplanar las esferas localmente en la proximidad de los puntos de contacto (Caps)

El método de aplanamiento de las partículas fue formulado por [Eppinger y col., 2011](#) (figura 7.2d), en contraposición a la metodología que se describió en el apartado precedente. El mismo consiste en aplanar las partículas en los puntos de contacto partícula-partícula y partícula-pared, resultando en una disminución local en el tamaño de la partícula. Si la distancia entre dos superficies sólidas cae por debajo de un valor predeterminado o están en contacto, se produce un aplanamiento (rebanado) local en la proximidad de los puntos de contacto, lo que genera un pequeño espacio entre las

superficies. Con este enfoque los *caps* removidos de las esferas no influyen significativamente sobre la porosidad y consecuentemente sobre la caída de presión del lecho, por lo que no será necesario una corrección posterior (Eppinger y col., 2011). Se han reportado desviaciones inferiores al 0.05% en la porosidad global del lecho lo que conlleva a un error insignificante de la caída de presión.

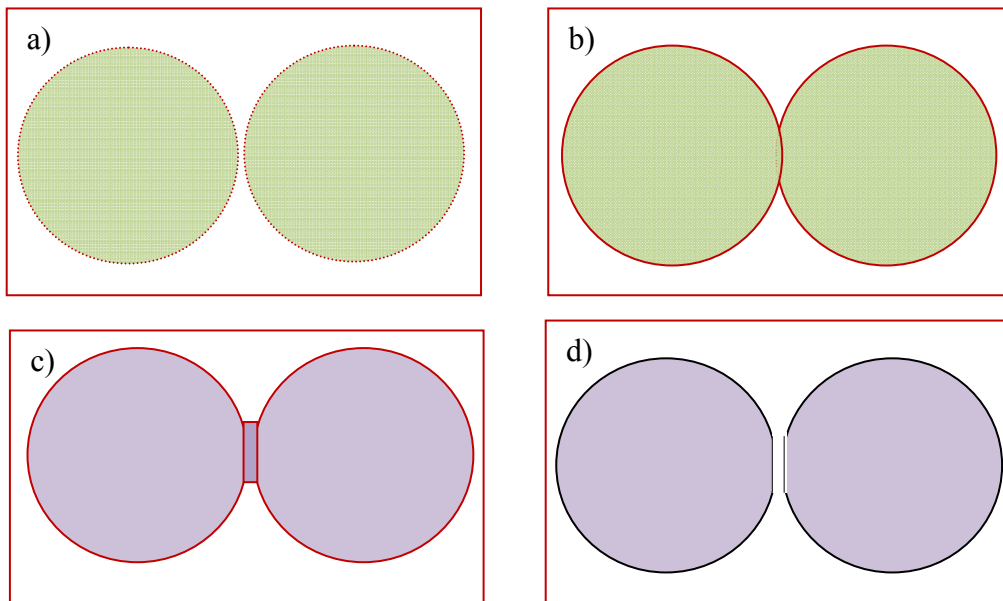


Figura 7.2: Esquemización del tratamiento de los puntos de contacto. a) disminución b) aumento c) puentes d) rebanado.

7.3.2.-Metodología para aplicar el procedimiento de Eppinger y col., 2011 y evaluación de resultados

El procedimiento de Eppinger y col., 2011 resulta especialmente interesante, debido a las pequeñas desviaciones que causa sobre la porosidad. Los autores emplearon diferentes programas computacionales para la creación de *caps*. En este trabajo, al no disponer de dichas herramientas computacionales, se desarrolló específicamente una modalidad análoga, mediante la opción de pre-procesamiento *DesignModeler*, que permite obtener las esferas localmente aplanadas. No obstante, la metodología debe aplicarse individualmente sobre cada uno de los puntos de contacto. Ello implica, para el caso de la porción de lecho con $N=5$ y 204 esferas que se desea simular, el tratamiento de alrededor de 600 puntos de contacto, situación que demanda un extenso tiempo de trabajo. Frente a esta circunstancia, para comprobar las ventajas del procedimiento de Eppinger y col., 2011, se optó por llevar a cabo un análisis sobre

un lecho *test* con cantidad de partículas y relación de aspecto menores que las del caso en estudio. Particularmente, se seleccionó un lecho con relación de aspecto $N=2$ con un arreglo regular de pastillas (figura 7.3a). Cabe mencionar que tal configuración se alcanza en la práctica si el lecho se carga lentamente y acompañado con ligeras vibraciones. De esta forma, solo 2 pastillas enteras y 4 mitades bastaron para realizar las evaluaciones. Debe destacarse, que la aplicación de un esquema particular del concepto de fronteras periódicas (sección 4.2.4.2 del capítulo 4), permitió reducir sensiblemente el tamaño de la geometría (véase figura 7.3b).

En primer lugar, se realizó la construcción de la geometría empleando como herramienta la interfase de pre-procesamiento *DesignModeler* disponible en el *software ANSYS 14.5*, a partir de la cual es posible la definición de la geometría en la región de interés (dominio computacional) que permite dibujar la celda de cálculo utilizando el diseño asistido por computadora.

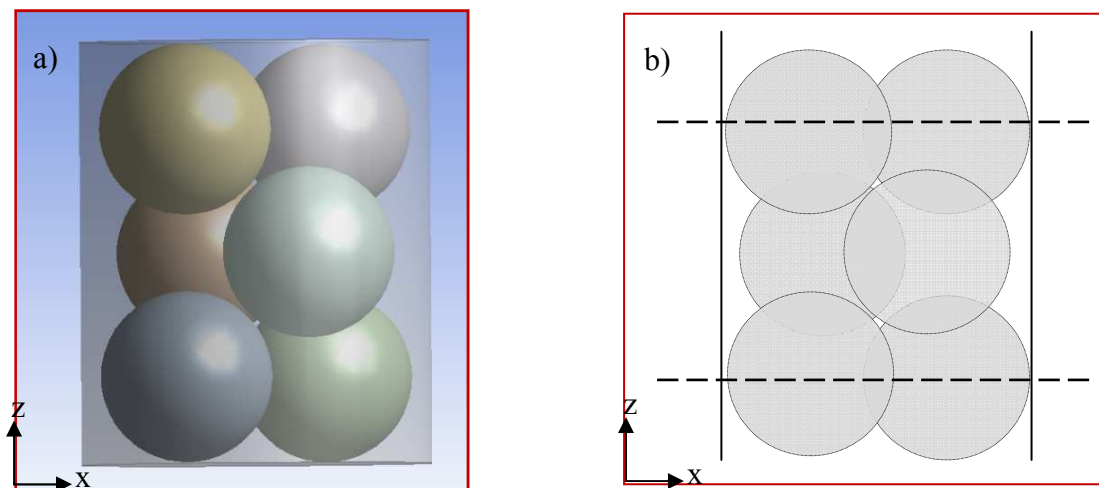


Figura 7.3: a) Configuración para un lecho fijo con relación de aspecto $N=2$, b) Porción del arreglo periódico utilizado el estudio de la geometría.

Posteriormente se determinó la cantidad de puntos de contacto entre partícula-partícula y partícula-pared, resultando 11 y 6 respectivamente. Para el tratamiento de dichos puntos, se utilizaron dos enfoques: enfoque global *gaps*, reduciendo 1% el tamaño de las partículas (figura 7.4a) y enfoque local *caps*, aplanando las esferas con contacto con un espesor establecido (figura 7.4b). Con respecto al último enfoque, en bibliografía se recomienda que la distancia mínima entre dos superficies se ajuste a valores comprendidos en el intervalo $(0.004D_p - 0.012D_p)$ (Eppinger y col., 2011),

mientras que Dixon y col., 2013 sugieren el intervalo $(0.005D_p - 0.012D_p)$. En este trabajo se adoptó el valor $0.02D_p$.

Metodología para la construcción de caps

Desde el punto de vista geométrico, los *caps* consisten en espacios volumétricos cilíndricos de sólido que posteriormente serán removidos del dominio, como consecuencia de la aplicación de la metodología basada en el enfoque local para el tratamiento de puntos de contacto.

Para la construcción de un *cap* el primer paso consiste en determinar los puntos de contacto donde las partículas se encuentran en contacto entre sí, para lo cual se calcula la distancia entre los centros de las esferas correspondientes. Luego se determina si resulta necesario realizar el aplanamiento local: si la distancia calculada es menor que la cota establecida por el intervalo definido $(0.02D_p)$, existirán *caps* que deben ser removidos. En lo que respecta a las partículas que se encuentran en contacto con la pared, se establece un canal de fluido libre de superficies de un espesor equivalente a $0.02D_p$ desde la pared hacia el centro del arreglo. De esta manera, todos los puntos de contacto que se encuentran en ese espacio deben ser localmente aplanados.

El segundo paso consiste en efectivizar la construcción de un *cap*. A tal fin, una vez que se ha identificado el punto de contacto entre las superficies analizadas, se construye un plano vertical que debe contener a dicho punto. Posteriormente, en ese plano se grafica un círculo cuyo centro coincida con el punto real de contacto. A partir de la posición mencionada, se representa un cilindro de altura total $0.02D_p$, simétrico desde el punto de contacto (contemplando una distancia de $0.01D_p$ hacia cada lado del punto). Finalmente, se remueve el cilindro, generando así el espesor de la brecha (*cap*).

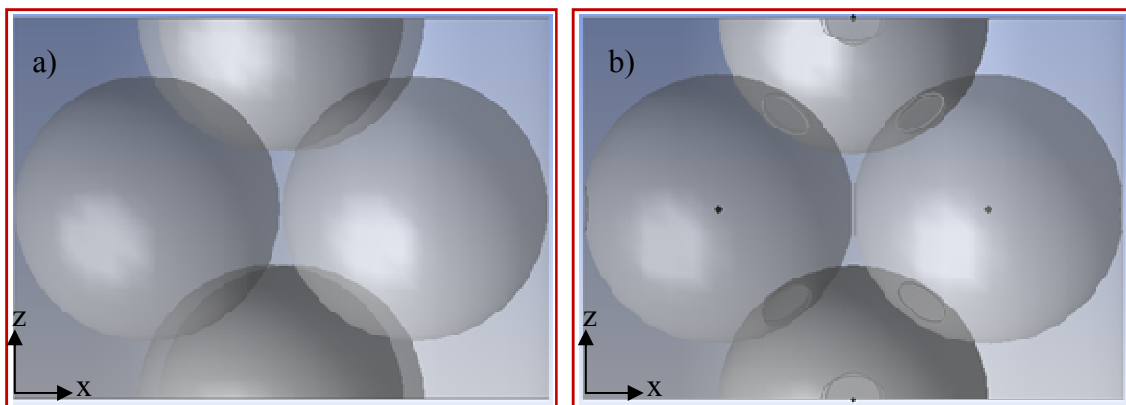


Figura 7.4: a) Enfoque global reducción 1% tamaño de partícula, b) Enfoque local aplanamiento local de las partículas espesor de la brecha $0.02D_p$.

El efecto de las modificaciones realizadas en las regiones de puntos de contacto debe ser evaluado a partir del cálculo de la porosidad global en cada uno de los dominios generados, utilizando los enfoques global y local, respectivamente y compararlo con los valores originales, antes de introducir las modificaciones. En la tabla 7.1 se puede observar que los cambios en la fracción de huecos causados por el procedimiento local (*caps*) son significativamente menores que los obtenidos por el enfoque global, resultando, en este caso, una desviación total de la porosidad del 0.47 % (el error correspondiente al enfoque global fue del 2.6 %).

N	N_p	$\epsilon_{\text{geométrica}}$	ϵ_{gap}	ϵ_{cap}
2	6	0.528	0.542	0.531

Tabla 7.1: Comparación de valores de porosidad del lecho $N=2$.

El análisis precedente, permite seleccionar el método local (*caps*) como el más adecuado para el tratamiento de las superficies de contacto en la porción de la geometría con relleno al azar a simular.

7.3.3.-Construcción de la geometría en el dominio de cálculo para el caso de estudio con $N=5$

En la figura 7.5a se puede observar el segmento de lecho empleado para el caso simulado con $N=5$, consistente en 204 pastillas esféricas de $D_p= 0.02$ m empacadas en un lecho con $D_t= 0.1$ m. La altura correspondiente del lecho fue de 0.204 m (aproximadamente $10D_p$).

Análogamente a lo explicado en la sección 7.3.2, en este caso, el procedimiento de [Eppinger y col., 2011](#) para el tratamiento de los puntos de contacto fue aplicado también generando brechas con un espesor igual a $0.02D_p$ en las proximidades de las superficies de contacto entre esferas y entre esfera-pared. En la figura 7.5b se puede observar la forma que finalmente tendrá la celda de cálculo creada, permitiendo concluir el diseño asistido por computadora para la definición de la geometría en la región de interés.

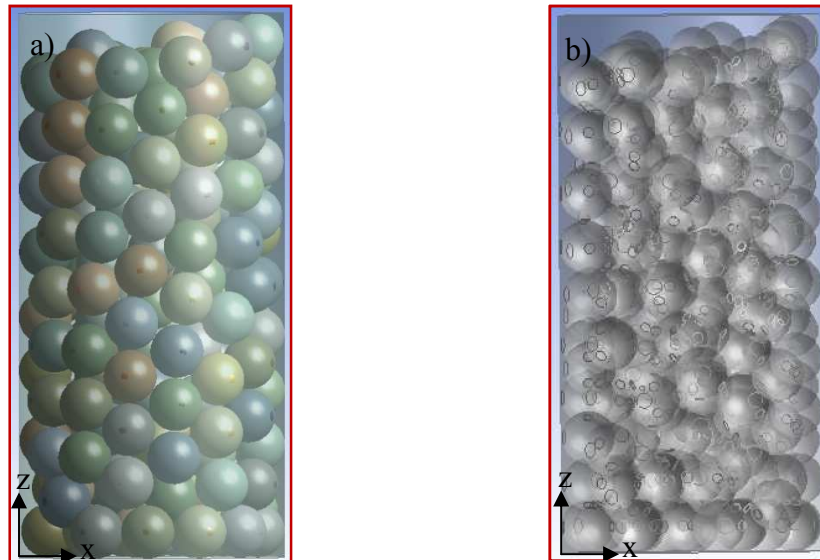


Figura 7.5: Representación geometría del lecho relleno al azar, $N=5$: a) fracción de la altura conformada por 204 partículas en su configuración original manteniendo los puntos de contacto entre ellas y con la pared del tubo, b) celda de cálculo con aplanamiento local en las superficies de contacto.

Finalmente se evaluó la porosidad global en el dominio generado para la celda de cálculo representada y se comparó con el valor original de porosidad definido antes de la remoción de los *caps* y, adicionalmente, con valores de correlaciones. En bibliografía existen diferentes correlaciones que permiten determinar la porosidad global de lechos fijos con relleno aleatorios en función de la relación de aspecto. En este trabajo, se utilizaron específicamente las correlaciones propuestas por Dixon, 1998, y Jeschar, 1993, para esferas y aplicables a bajas relaciones de aspecto. Los valores de porosidad obtenidos guardan una buena concordancia respecto del valor original, con una desviación de ± 0.02 . Los resultados se presentan en la tabla 7.2, donde también se incluye como referencia el valor de la porosidad resultante al aplicar el procedimiento de reducción del tamaño (*gaps*). El valor obtenido con el método *caps* sólo difiere en 0.4 % del valor original, mientras que la reducción de tamaño *gaps* arroja una desviación de aproximadamente 3 %. De esta manera se confirma que el procedimiento de Eppinger y col., 2011 es adecuado para la modificación de los puntos de contacto (caso $N=5$).

N	N_p	$\epsilon_{\text{experimental}}$	$\epsilon_{\text{correlaciones}}$	ϵ_{gap}	ϵ_{cap}
5	204	0.433 (Salvat y col., 2005)	0.443	0.445	0.435
			(Jeschar, 1993)		
			0.426 (Dixon y col., 1998)		

Tabla 7.2: Comparación valores de porosidad del lecho con $N=5$.

7.4.- Generación del mallado de la geometría

Para la utilización de la CFD como herramienta de simulación es necesario un minucioso estudio de la malla de cálculo, que consiste en la discretización del dominio computacional, en un número de pequeños elementos no superpuestos. Para cumplimentar los requerimientos de eficiencia, precisión y calidad que se desean imponer a la malla construida o a construir, resulta indispensable analizar, entre otros aspectos, la densidad óptima (cantidad y tamaño de los elementos), la topología de la malla (estructurada o no estructurada) y los elementos que conforman la misma (tetraedros, hexaedros).

Un aspecto crítico de la formulación del dominio y su mallado, consiste en la determinación del número de elementos de volumen en que quedará dividido el primero. Ello es fundamental en la cuantificación del esfuerzo y tiempo computacional implicado. Por lo tanto, la malla debería contener el mínimo número imprescindible de elementos que garantice la precisión requerida sin sobrevalorar la cantidad de celdas. El número de elementos definitivo se determina mediante el procedimiento de validación de la malla. Éste se basa en encontrar la condición de independencia de la solución con la variación del número de elementos de la malla. Con el objeto de verificar dicha independencia, se construyeron mallas de diferentes densidades hasta lograr identificar la de menor tamaño que lograra reproducir adecuadamente una variable que actúe como indicador, por ejemplo, la caída de presión.

A fin de disminuir el esfuerzo de cómputo durante la validación de la malla, se recurrió nuevamente al dominio de la geometría de lecho con relación de aspecto $N = 2$ (geometría *test*), que presenta una solución ágil y rápida. La geometría introducida por el tubo cilíndrico implica un tratamiento con un mallado no estructurado, opción específicamente apta a las superficies curvas.

Las zonas de los puntos de contacto fueron evaluadas y tratadas por el método de aplanamiento local de las esferas (*caps*). A pesar de eliminar los puntos de contacto, las zonas donde éstos se encontraban se consideraron críticas en la realización del mallado, ya que en esas regiones, la sección disminuye, dificultando el pasaje de fluido. En estas regiones se realizó un refinamiento de la malla. En posiciones alejadas de estas zonas, se decidió utilizar elementos de mayor tamaño en el mallado.

Se utilizó la función de tamaño avanzada (*advance size functions*), que permite controlar el crecimiento y la distribución de la malla en regiones críticas. Para refinar la malla en las zonas identificadas como críticas, se seleccionó la opción *proximity and curvature*, que permite especificar el número mínimo de capas de elementos creados en las regiones que constituyen las brechas del modelo y examinar la curvatura en los bordes y las caras, calculando los tamaños de los elementos para respetar el tamaño máximo o el ángulo de curvatura normal permitido.

Otro aspecto a tener en cuenta es la correcta resolución de la capa límite, para simulaciones en régimen turbulento, determinando la altura de dicha capa a partir de la función llamada *inflation*. Esta opción permite contemplar los gradientes de flujo de la capa límite adyacente a la pared, generando celdas de pequeño espesor y permite lograr una velocidad de cambio suave en el tamaño de los volúmenes que conforman la misma y el resto de la geometría.

Parámetros de la Malla (independencia de mallado)

Se generaron tres mallas de diferente densidad, mediante diferentes modificaciones en los valores predeterminados de los parámetros constructivos de la malla, según se sintetiza en la tabla 7.3. La misma incluye los valores de caída de presión que se obtuvieron a partir de la simulación ($R_{ep} = 1000$).

	<i>Proximity Accuracy</i>	<i>Num cell Across gap</i>	<i>Inflation (maximun layers)</i>	Cantidad de elemento	$\Delta P/L$ [Pa/m]
Malla 1 (Parámetros predeterminados: malla de referencia)	0.5	3	5	1.453.836	987.78
Malla 2	0.5	2	5	694.613	1025.18
Malla 3	0.3	2	3	467.653	1027.24

Tabla 7.3: Parámetros de las distintas mallas para validación ($N=2$).

Como surge de la tabla 7.3, la malla 1 fue generada a partir de los valores de referencia -que provee el *software* cuando se utilizan funciones avanzadas de tamaño- obteniéndose una malla de referencia. Se puede observar que la disminución de las opciones de precisión por proximidad (*proximity accuracy*) y número de celdas en el

gap (*num cell across gap*) generan mallas menos refinadas que arrojan, en las simulaciones, valores sensiblemente distintos de pérdida de carga (malla 2 y 3).

La variable caída de presión como parámetro indicador de referencia para la validación de la malla, permitió concluir que la malla 3 verifica la independencia de la solución, ya que conduce a un valor de $\Delta P/L$ que presenta una desviación menor de 4% respecto de la malla de referencia. La figura 7.6a muestra el aspecto final de la malla 3, conformada por 464.653 volúmenes de control. En la figura 7.6b se puede visualizar la calidad de los elementos en las zonas críticas (brecha artificial esfera-esfera y esfera pared) y la cantidad de capas máximas que conforma la capa límite.

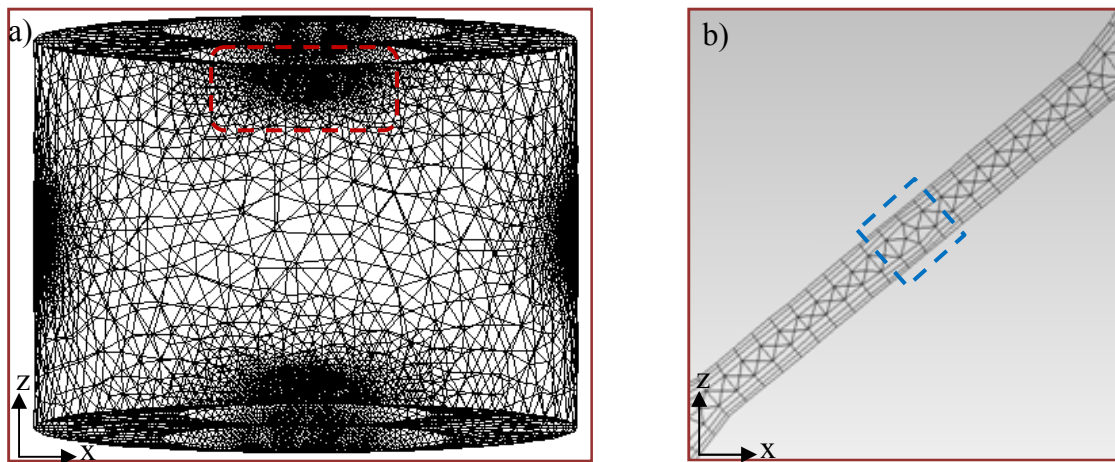


Figura 7.6: a) Malla tetraédrica (malla 3, $N = 2$). b) Representación detallada de elementos en zonas críticas y capa límite.

El procedimiento de validación llevado a cabo con $N=2$ debe considerarse con suma precaución en su extrapolación a $N=5$.

La malla de cálculo necesaria para el caso $N=5$ cuya geometría está conformada por 204 esferas, implicará un incremento considerable en la cantidad de elementos de la malla y un alto requerimiento computacional. Es necesario, en ese contexto, optimizar la malla disponible, para lo cual se propone utilizar mallas con elementos poliédricos, que reducirán notablemente el tamaño de malla y el tiempo de cálculo entre otros aspectos, con posterioridad al proceso de validación (puede incluirse una verificación a posteriori sobre el indicador validación de malla utilizado, en esta caso, la pérdida de presión).

La generación de mallas poliédricas se obtiene partiendo de mallas tetraédricas. El método consiste en discretizar el dominio de la malla generando elementos formados

por múltiples caras (poliedros) a partir de fusionar tetraedros. Se utiliza una herramienta específica provista por *ANSYS-FLUENT* en el menú de opciones de programación, la cual permite convertir todo el dominio de cálculo en forma automática.

Para verificar las ventajas que conlleva la conversión de elementos tetraédricos en poliédricos de una malla, se realizó un estudio de sensibilidad sobre la calidad (deformación) y el tamaño (cantidad) de una malla con elementos poliédricos. Este análisis se llevó a cabo utilizando particularmente la malla 3. Se observó una considerable reducción del número de elementos como consecuencia de la formación de poliedros a partir de la unión de varios tetraedros entre sí. La disminución del tamaño de la malla implica la lógica reducción del tiempo de cómputo, obteniéndose los mismos resultados y propiciando la convergencia en la mayoría de los casos. También se verifica una mejora evidente de la calidad de la malla en las zonas estrechas, debido a que el efecto de deformación (*skewness*) de los elementos tetraédricos disminuye considerablemente al ser reemplazados por un elemento poliédrico. El valor del parámetro indicador de *skewness* próximo a la unidad indica menor calidad de los elementos (mayor deformación). En la tabla 7.4 se resumen los parámetros cualitativos y cuantitativos característicos de ambas mallas.

Parámetro	Tipo de malla	
	Tetraédrica (<i>Malla 3</i>)	Poliédrica
Cantidad de Elementos	467.653	281.613
<i>Skewness</i> (sesgado)	0.7	0.2

Tabla 7.4: Parámetros cualitativos y cuantitativos de mallas en el caso *test* ($N=2$), elementos tetraédricos vs. elementos poliédricos.

En la figura 7.7a se puede observar el cambio en la densidad de la malla generada con elementos poliédricos, particularmente en las cercanías de las zonas consideradas críticas (rectángulo rojo de borde discontinuo en la figura). En estas regiones se logra mejorar considerablemente la deformación de los elementos tetraédricos, resultando una malla abierta pero con mejor calidad. Se obtiene una malla más fina en las zonas estrechas entre las superficies sólidas y en la capa límite, como se ilustra en la figura 7.7b, donde también se evidencia la disminución del sesgado al reemplazar los elementos tetraédricos, como así también una transición suave y ordenada

entre los elementos que conforma la capa límite y los elementos poliédricos del resto de la sección estrecha (rectángulo azul de borde discontinuo en la figura).

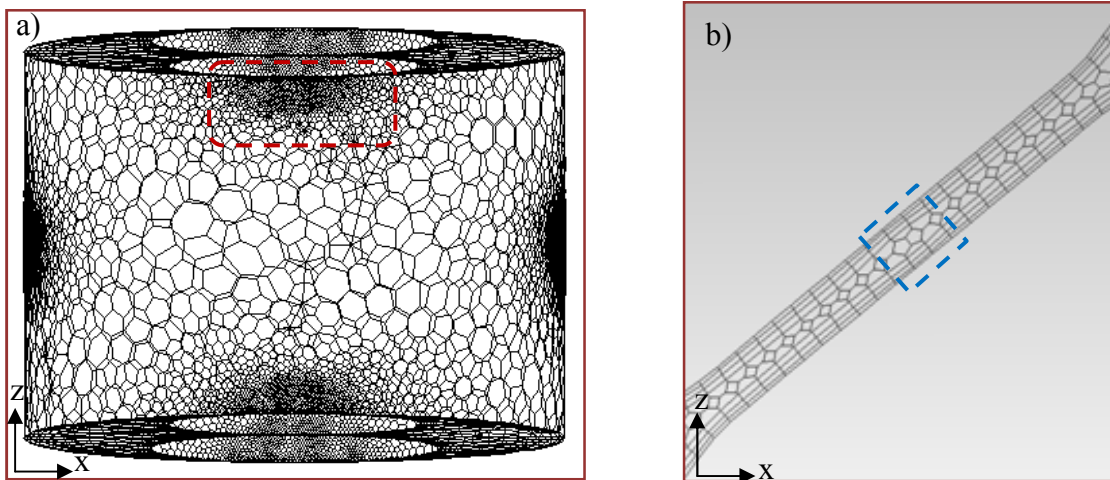


Figura 7.7: a) Malla poliédrica ($N=2$). b) Representación detallada de elementos en zonas críticas y capa límite.

La metodología descrita en esta sección permite establecer los valores más apropiados de los parámetros de la malla de acuerdo a los requerimientos y criterios de simulación y/o diseño. En la tabla 7.5 se listan los valores correspondientes para el caso $N=5$.

Malla Poliédrica	
Parámetro	Valor
<i>Proximity Accuracy</i>	0.3
<i>Num cell Across gap</i>	2
<i>Inflation (maximun layers)</i>	3
Sesgado (<i>Skwness</i>)	0.2

Tabla 7.5: Valores relativos de parámetros para la generación de la malla.

7.4.1.-Conformación y aspecto de la malla resultante para el caso $N=5$

La aplicación de los procedimientos ampliamente descritos en las secciones precedentes dio lugar a la conformación de una malla definitiva que permitirá realizar, apropiadamente, las simulaciones CFD planteadas como objetivo.

La figura 7.8a muestra la estructura final de la malla conformada por 11.311.162 elementos poliédricos y la figura 8.8b permite apreciar puntualmente el aspecto de la malla en las zonas críticas y la capa límite.

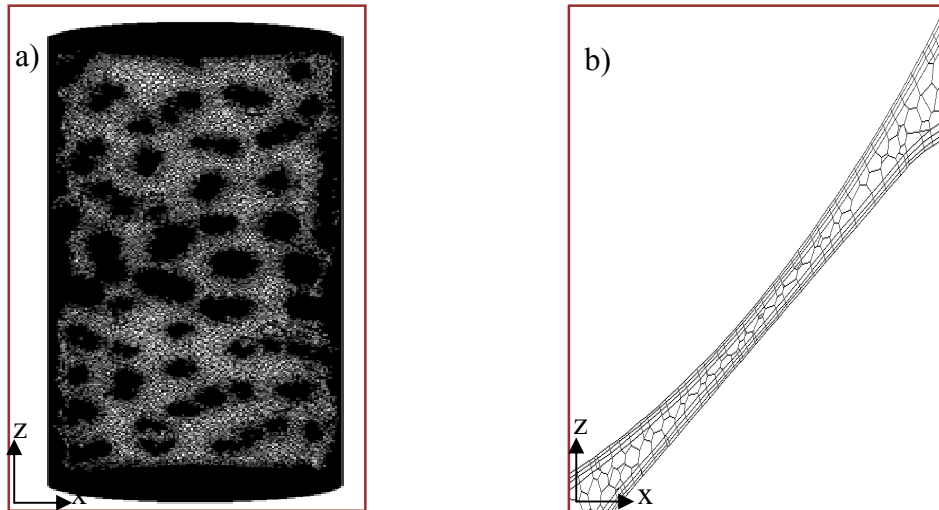


Figura 7.8: a) Malla poliédrica (celda de cálculo, $N=5$). b) *Cap* entre dos esferas, representación detallada de elementos en zonas críticas y capa límite.

7.5.- Conclusiones del capítulo

En este capítulo se presentan los procedimientos necesarios para la utilización de CFD en las simulaciones de lechos fijos de baja relación de aspecto, desde la construcción de la geometría hasta la generación de la malla, conforme a indicadores de precisión y aceptabilidad de resultados que dependen de cada condición.

Se seleccionó una pequeña fracción de un lecho relleno aleatorio de baja relación de aspecto $N=5$, conformada por esferas de un único tamaño contenidas en un tubo circular. Para la construcción de la estructura del lecho se utilizó el algoritmo numérico propuesto por [Salvat y col., 2005](#).

Se analizaron diferentes técnicas para el tratamiento de los puntos de contacto en la geometría, se utilizó una geometría *test* ($N=2$). Particularmente, se contrastaron las diferencias obtenidas en las propiedades estructurales del lecho, como resultado de la modificación en las áreas de contacto aplicando dos metodologías; global y local. Se decidió definir el aplanamiento local de los puntos de contacto como la alternativa más conveniente para la remoción de las superficies de contacto.

Se generaron distintas mallas, utilizando las herramientas disponibles del *software ANSYS FLUENT*, lo que permitió determinar valores satisfactorios de los parámetros para alcanzar la independencia del mallado (tabla 7.3) con un número

suficientemente bajo de elementos, compatible con las facilidades computacionales disponibles.

Finalmente se generó la malla de cálculo para el caso de estudio, que se utilizará como parte integral de las simulaciones por CFD.

CAPITULO 8

EVALUACIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL MODELO 2R2D A PARTIR DE LOS DATOS OBTENIDOS POR CFD

8.1 Introducción

8.2 Posibilidad y significado del empleo del modelo 2R2D para relaciones $N < 5$

8.3 Reducción de los datos de simulaciones por CFD para calcular los parámetros del modelo 2R2D

8.4 Simulación y análisis para lecho relleno con relación de aspecto $N = 5$

8.4.1 Resultados para G_1/G_c

8.4.2 Resultados para h_{wf}

8.4.3 Coeficiente de transferencia de calor h_f

8.4.4 Conductividad efectiva radial $\lambda_{ef,c}$

8.4.4.1 Discusión de los resultados obtenidos para $\lambda_{ef,c}$

8.4.4.2 El efecto de G_c/G y propuesta tentativa para predecir

$(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ y $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$

8.5 Conclusiones del capítulo

Apéndice 8.1

Efecto de la curvatura de la pared sobre G_1

CAPITULO 8

EVALUACIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL MODELO 2R2D A PARTIR DE LOS DATOS OBTENIDOS POR CFD

8.1.- Introducción

En el capítulo 3 se ha presentado la formulación completa del modelo 2R2D, junto con la identificación de los parámetros fluidodinámicos y de transporte introducidos por el mismo. En la sección 3.2.3, se realizó el análisis de la bibliografía, donde se ha reportado suficiente información para la estimación de varios de tales parámetros. La carencia más relevante corresponde a aquellos parámetros que caracterizan el comportamiento del canal sobre la pared, es decir el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared h_{wf} , la relación de velocidades superficiales máxicas G_I/G_c y, principalmente, el coeficiente de intercambio térmico h_f (en adición al coeficiente análogo de intercambio de materia) entre los canales sobre la pared y el resto del lecho.

Una elevada proporción de la labor informada en el presente trabajo fue dedicada a desarrollar expresiones que permitan predecir los mencionados parámetros, principalmente sobre la base de las evaluaciones de CFD. En tal sentido, la primera etapa fue llevada a cabo empleando arreglos regulares, que tal como se describió en el capítulo 5 permitieron con un moderado esfuerzo, computacional y analítico, alcanzar expresiones predictivas para h_{wf} , G_I/G_c y h_f en términos de los parámetros estructurales del lecho (porosidades), parámetros fluidodinámicos (números de Reynolds) y de transporte (x ej: número de Prandtl).

Puesto que casi la totalidad de las aplicaciones prácticas de los lechos rellenos implican recipientes cilíndricos rellenos al azar, en el capítulo 5 se enfatizó la necesidad de validar las expresiones desarrolladas con datos obtenidos en lechos rellenos al azar, ya sean experimentales o simulados por la aplicación de CFD. La información disponible en la literatura específica, principalmente de fuentes experimentales, fue analizada en el capítulo 5. Tal información, aunque limitada, arrojó una satisfactoria concordancia con las expresiones desarrolladas sobre rellenos estructurales. Este resultado permitió concluir, en primer término, que tales expresiones proporcionan una sólida base para alcanzar herramientas predictivas confiables en el empleo del modelo 2R2D. Por otra parte, la realización de simulaciones mediante CFD en lechos rellenos al

azar permitirá completar la validación de las expresiones desarrolladas o bien modificarlas convenientemente.

Sujeto a la extensión prevista para el presente trabajo, se decidió llevar a cabo la simulación por CFD de un lecho relleno al azar con una relación $N=5$, conforme a la modalidad explicada en el capítulo 7, y comparar los parámetros h_{wf} , G_l/G_c y h_f extraídos de los resultados con las expresiones desarrolladas en el capítulo 5. La descripción y conclusiones de esta labor constituyen la finalidad principal del presente capítulo. La relación $N=5$ fue elegida por corresponder al límite inferior del rango de valores de N para el cual el modelo 2R2D ha sido sugerido y para la cual los efectos de pared (cuantificados por h_{wf} , G_l/G_c y h_f) resultarán más significativos para definir el comportamiento de reactores de lecho fijo con intercambio de calor (capítulo 6).

En la sección 8.2 se ha considerado importante discutir las restricciones para el empleo del modelo 2R2D con relaciones $N<5$. En la sección 8.3 se describe la reducción de los datos resultantes de la aplicación de CFD para el presente caso con lechos en recipientes cilíndricos, a fin de obtener los valores de h_{wf} , G_l/G_c y h_f . Asimismo se informan las condiciones operativas estudiadas. En la sección 8.4 se discuten los resultados para $N=5$. Las conclusiones del capítulo se exponen en la sección 8.5.

Finalmente, cabe destacar que como resultado del procedimiento para obtener el coeficiente h_f , también resulta estimada la contribución convectiva $\lambda_{ef,c}$ a la conductividad efectiva radial. Se discutió en el capítulo 5 que tales valores obtenidos para los arreglos regulares no presentan significación para lechos rellenos al azar. Sin embargo, para las simulaciones que se discutirán, los valores $\lambda_{ef,c}$ sí presentan significación, razón por la cual serán discutidos y comparados con resultados de bibliografía (sección 8.4).

8.2.- Posibilidad y significado del empleo del modelo 2R2D para relaciones $N<5$

En el capítulo 3 se discutió que el modelo 2R2D fue concebido para relaciones $N\geq 5$. Desde el punto de vista práctico, se tuvo en cuenta el desconocimiento de aplicaciones a escala comercial con relaciones de aspecto N menores. Sin embargo, no resulta descartable la posibilidad de empleo de lechos con $N<5$ para fines experimentales o para aplicaciones de simulación CFD, debido al hecho de requerir un bajo número de pastillas y la consecuente realización con moderados esfuerzos de

implementación y en tiempos de cómputo accesibles. De esta manera, resulta conveniente analizar la posibilidad del uso del modelo 2R2D para lechos con $N < 5$.

Si en particular se considera el rango $1 \leq N \leq 2$, debe tenerse presente que todas las pastillas estarán en contacto con la pared, lo cual elimina la existencia de sólidos fuera del primer estrato. El mínimo de porosidad resulta cercano al eje, por lo que sólo debería considerarse el canal de pared y eliminarse la diferenciación de las regiones ω y $(1-\omega)$ de las pastillas del primer estrato. El modelo 2R2D resultaría prácticamente reducido a una descripción 1D, con un único nivel térmico para las pastillas y otro para el canal de la pared. Claramente tal situación desvirtúa el propósito y concepción del modelo 2R2D.

Por otra parte, cuando se considera el rango $2 \leq N \leq 5$, resultan de utilidad los resultados de [Salvat y col., 2005b](#). Empleando el algoritmo de simulación de acomodamiento de pastillas desarrollados por [Salvat y col., 2005a](#) y datos experimentales (de bibliografía y propios), se evaluó la porosidad global ε en dicho rango. Los resultados se presentan en la figura 8.1, donde los símbolos son medidas experimentales, la curva a trazos una correlación de literatura, la curva llena corresponde a los resultados del algoritmo y las barras indican la dispersión de estos últimos. Existe una gran variación de los valores de ε , entre aproximadamente 0.42-0.53, con la aparición de una sucesión de mínimos y máximos locales. Para explicar tal comportamiento [Salvat y col., 2005b](#) evaluaron, mediante el algoritmo de simulación, la cantidad de pastillas en “capas”, figura 8.2. La primera capa corresponde al primer estrato (con partículas virtualmente en contacto con la pared), la segunda capa incluye la pastillas con centros en el rango $0.5 < y^* < 1.5$ (muy fuertemente concentradas en $1.25 < y^* < 1.5$) y una tercera capa con centros a distancias superiores a $y^* = 1.5$. La aparición de la segunda capa será posible para $N > 2$ y la tercera para $N > 4$. La segunda capa es relevante en el rango analizado, y se puede apreciar que recién se inicia a partir de $N > 2.5$.

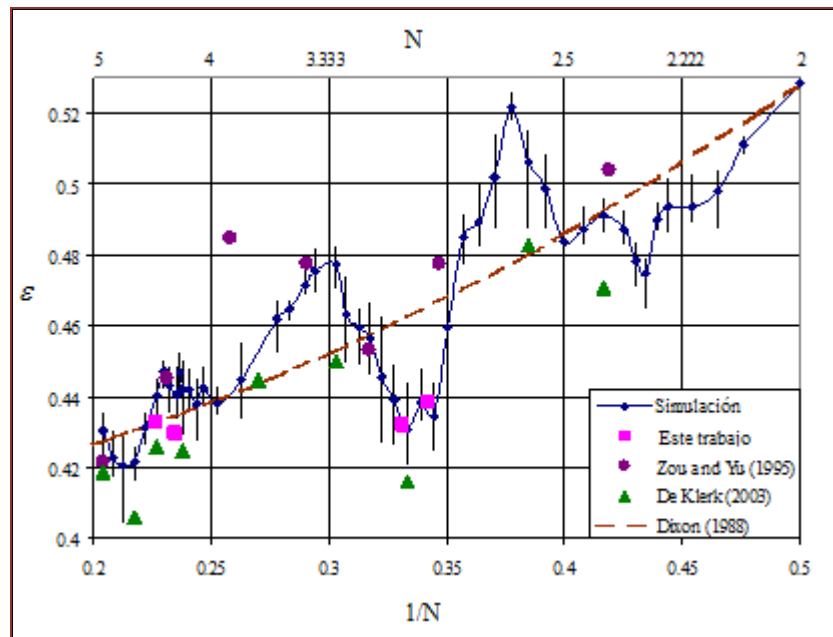


Figura 8.1: Resultados de porosidad global para relaciones $2 \leq N \leq 5$ (Salvat y col., 2005b).

Los valores de ϵ resultan fuertemente condicionados a que los espacios correspondientes a cada valor de N permitan acomodar compactamente las pastillas en cada capa. Valores cercanos a $N=3$ son óptimos en tal sentido, dado que las pastillas pueden acomodarse compactamente tanto en la primera como en la segunda capa (esta última resulta una hilera de pastillas centradas en el eje); consecuentemente, se presenta un fuerte mínimo local.

En relación al modelo 2R2D, debe recordarse que la restricción $N \geq 5$ permitió simplificar la estimación de las propiedades estructurales introducidas por el modelo (y_c^* , ω , n_p^* , y_L^*). Frente a la gran variación que experimenta el acomodamiento de pastillas en el rango $2 \leq N \leq 5$, como lo reflejan los valores de ϵ , tales propiedades deben ser re-evaluadas para cada N y es muy probable que su correlación con N resulte altamente compleja. Similar consideración es válida para todos los parámetros de transporte del modelo, con el agravante de requerir un extenso programa de simulaciones de CFD para su evaluación y, para su correlación, la dependencia adicional con la velocidad del fluido y con las propiedades de transporte de fluido y sólido.

Por otro lado, la existencia de una zona central para los sólidos queda en la práctica reducida para valores $N > 2.5$, cuando aparecen pastillas en la segunda capa. En el rango remanente, y particularmente en $2.5 \leq N \leq 4$ la fracción de pastillas

correspondientes a la zona central del modelo 2R2D es muy reducida, como así también la extensión del canal central. El modelo adopta una descripción continua para las variables temperatura y composición en tales regiones. La posibilidad de que tal descripción resulte adecuada cuando ocurran reacciones catalíticas resulta incierta y debería evaluarse con especial atención.

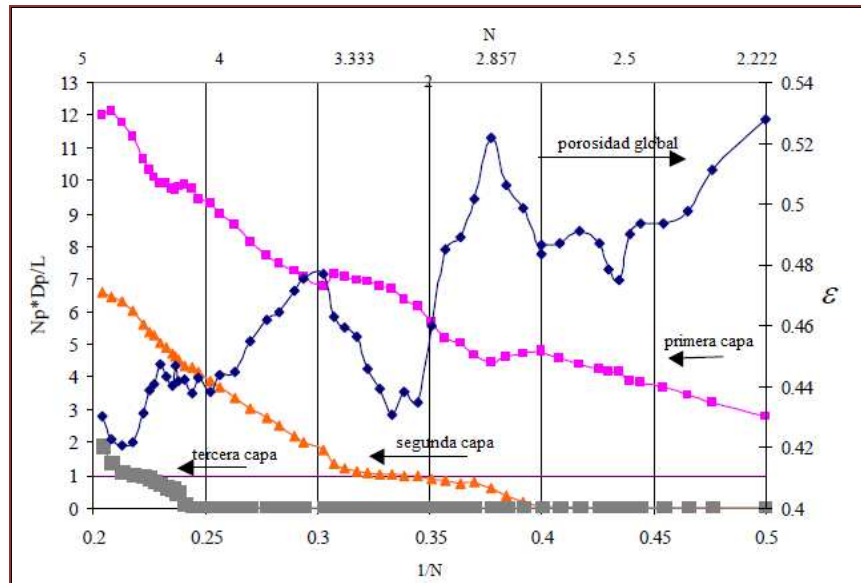


Figura 8.2: Porosidad global y número de partículas N_p en cada capa para relaciones $2 \leq N \leq 5$ (Salvat y col., 2005b).

Puede concluirse que la aplicación del modelo 2R2D para relaciones $N < 5$ implicaría significativos esfuerzos adicionales para la caracterización de sus parámetros, como así también para la comprobación de su potencialidad a los fines de simular el comportamiento de lechos catalíticos.

8.3.- Reducción de los datos de simulación por CFD para calcular los parámetros del modelo 2R2D

En el capítulo 5 se formuló el modelo 2R2D para geometría plana en donde se plantearon las ecuaciones 5.1a, 5.1b, 5.2a y 5.2b de conservación de energía que permiten describir $T_1(z)$ y $T_c(y, z)$ para la situación simulada por CFD que involucra ausencia de reacciones químicas y relleno adiabático. Considerando tales restricciones en el caso de lechos en recipientes cilíndricos, las ecuaciones de conservación de energía en la fase fluida, de acuerdo al modelo 2R2D, resultan ignorando los términos

de intercambio con las pastillas sólidas en las expresiones más generales planteadas en el capítulo 3 (ecuaciones 3.5a, 3.7a, 3.7c):

En el canal de la pared

$$c_{pf} G_1 \frac{dT_1}{dz} = 2 \frac{\rho_t h_{wf} (T_w - T_1) + \rho_c h_f (T_{c,1} - T_1)}{\rho_t^2 - \rho_c^2} \quad (8.1a)$$

En el canal central ($\rho < \rho_c$)

$$-\lambda_{ef,c} \frac{\partial(\rho \partial T_c / \partial \rho)}{\rho \partial \rho} + c_{pf} G_c \frac{\partial T_c}{\partial z} = 0 \quad (8.1b)$$

$$T_c = T_{c,1}, \quad -\lambda_{ef,c} \frac{\partial T_c}{\partial \rho} = h_f (T_{c,1} - T_1); \quad \text{en } \rho = \rho_c \quad (8.1c)$$

Un sistema equivalente al expresado por las ecuaciones 8.1 fue resuelto por [Mariani y col., 2003](#) en la forma de una serie infinita de términos, en la cual cada uno de ellos corresponde a un autovalor μ_i del sistema y a la autofunción $J_0(\mu, \rho)$ correspondiente, dependiente de la variable radial ρ . Cuando el perfil de temperatura se desarrolla completamente, sólo el primer término de la serie, correspondiente al menor autovalor, resulta relevante. En tales condiciones

$$T_1(z) - T_w = C_1 \exp\left[-\lambda_{ef,c} \mu_1^2 z / (G_c c_{pf} \rho_c^2)\right] \left[J_0(\mu_1) - \frac{\lambda_{ef,c}}{\rho_c h_f} \mu_1 J_1(\mu_1) \right] \quad (8.2a)$$

$$T_c(z, \rho) - T_w = C_1 \exp\left[-\lambda_{ef,c} \mu_1^2 z / (G_c c_{pf} \rho_c^2)\right] J_0(\mu_1 \rho) \quad (8.2b)$$

donde C_1 es una constante que depende del nivel de temperatura en el origen de coordenada axial $z=0$ y μ_1 es el autovalor mas pequeño, que satisface la ecuación:

$$\frac{\rho_c h_f}{\lambda_{ef,c}} J_0(\mu_1) \left(\mu_1^2 - \frac{2\rho_t h_{wf}}{\lambda_{ef,c}} \frac{G_c (N-1)^2}{G_1 (2N-1)} \right) = \mu_1 J_1(\mu_1) \left(\mu_1^2 - \frac{2(\rho_t h_{w,f} + \rho_c h_f)}{\lambda_{ef,c}} \frac{G_c (N-1)^2}{G_1 (2N-1)} \right) \quad (8.3)$$

La comparación de las ecuaciones 8.2 con los resultados de las simulaciones de CFD debe permitir el ajuste de los parámetros G_1/G_c , h_{wf} , h_f y $\lambda_{ef,c}$ del modelo 2R2D. El procedimiento es similar al empleado en el capítulo 5, pero aquí se presentará en forma explícita.

En primer lugar, debe tenerse en cuenta que el modelo 2R2D considera que todos sus parámetros son independientes de la variable axial z y de la radial ρ , lo cual trae como consecuencia que las autofunciones que definen el campo de temperatura sólo dependan de la variable ρ . En cambio, las evaluaciones de CFD se realizan en el interior de una celda periódica, dentro de la cual la distribución de las partículas y en consecuencia la de los huecos interparticulares dependen de la posición axial ζ en el **interior** de la celda y también de la variable radial (ρ). Si bien la solución para el campo de temperatura resultará aun expresable en términos de autovalores y autofunciones, los autovalores son diferentes a los del modelo 2R2D y las autofunciones dependerán de ambas variables ζ y ρ . Estas funciones no se encuentran disponibles analíticamente, pero los resultados de CFD proporcionan la solución para el campo de temperatura en forma numérica. A fin de compatibilizar el comportamiento del modelo 2R2D con los resultados de CFD, resulta satisfactorio comparar resultados promediados en un cierto segmento axial en el interior de la celda de cálculo. En principio, puede asimilarse tal segmento con la celda de cálculo entera. No obstante se supondrá, en general, que el segmento se inicia en una posición z_0 en el interior de la celda de cálculo y tiene una longitud H , de manera tal que la posición $z_0 + H$ se encuentre en el interior de la celda de cálculo. Integrando las ecuaciones 8.2 del modelo 2R2D sobre la longitud H en el interior de la celda de cálculo, resulta

$$\bar{T}_1(z_0, H) - T_w = C(z_0, H) \left[J_0(\mu_1) - \frac{\lambda_{ef,c}}{\rho_c h_f} \mu_1 J_1(\mu_1) \right] \quad (8.4a)$$

$$\bar{T}_c(z_0, H, \rho) - T_w = C(z_0, H) J_0(\mu_1 \rho) \quad (8.4b)$$

donde $\bar{Y}(z_0, H)$ expresa un promedio de la variable Y sobre valores $z \in [z_0, z_0+H]$. Para las ecuaciones 8.4 el promedio es aritmético,

$$\bar{Y}(z_0, H) = \frac{1}{H} \int_{z_0}^{z_0+H} Y dz \quad (8.5)$$

Además resulta,

$$C(z_0, H) = \frac{C_1}{H} \frac{(G_c c_{pf} \rho_c^2)}{\lambda_{ef,c} \mu_1^2} \left\{ \exp \left[-\lambda_{ef,c} \mu_1^2 z_0 / (G_c c_{pf} \rho_c^2) \right] - \exp \left[-\lambda_{ef,c} \mu_1^2 (H + z_0) / (G_c c_{pf} \rho_c^2) \right] \right\}$$

El promedio $\bar{q}(z_0, H)$, de acuerdo a (8.5), del flujo de calor sobre la pared para el modelo 2R2D se expresa

$$\bar{q}(z_0, H) = -\frac{h_{wf}}{H} \int_{z_0}^{z_0+H} (T_1 - T_w) dz,$$

que puede, a su vez, escribirse como:

$$\bar{q}(z_0, H) = -h_{wf} [\bar{T}_1(z_0, H) - T_w] \quad (8.6)$$

Resultará conveniente eliminar la constante $C(z_0, H)$ en la ecuación 8.4b, lo cual conduce a expresar, a partir de las ecuaciones 8.4a y 8.6:

$$\bar{T}_c(z_0, H, \rho) - T_w = -\frac{\bar{q}(z_0, H)}{h_{wf} \left[J_0(\mu_1) - \frac{\lambda_{ef,c}}{\rho_c h_f} \mu_1 J_1(\mu_1) \right]} J_0(\mu_1, \rho) \quad (8.7)$$

Las ecuaciones 8.6 y 8.7 serán relevantes para el ajuste de los parámetros.

A partir de los datos numéricos de CFD se evalúan los siguientes promedios:

Flujo de calor en la pared, promedio sobre $z \in [z_0, z_0+H]$

$[\bar{q}(z_0, H)]_{CFD}$: promedio aritmético del flujo de calor q sobre la pared.

En el canal de la pared, promedios sobre $z \in [z_0, z_0+H]$ y $\rho \in [\rho_c, \rho_t]$.

$[\bar{T}_1(z_0, H)]_{CFD}$: promedio de “mezclado en taza” de la temperatura en el fluido.

$[\bar{G}_1(z_0, H)]_{CFD}$: promedio aritmético de la velocidad másica G_z en el fluido.

En el canal central

$[\bar{T}_c(z_0, H, \rho_i)]_{CFD}$: promedio de la temperatura en el fluido de “mezclado en taza” sobre $z \in [z_0, z_0+H]$ y sobre el anillo de espesor $\Delta\rho$ centrado en ρ_i .

$[\bar{G}_c(z_0, H)]_{CFD}$: promedio aritmético de la velocidad másica G_z en el fluido sobre $z \in [z_0, z_0+H]$ y $\rho \in [0, \rho_c]$.

Teniendo en cuenta la disponibilidad de los valores numéricos de los promedios arriba listados, la estimación de los parámetros del modelo 2R2D se lleva a cabo en la siguiente secuencia.

Para G_1/G_c ,

$$G_1 / G_c = \left[\bar{G}_1(z_0, H) \right]_{CFD} / \left[\bar{G}_c(z_0, H) \right]_{CFD} \quad (8.9)$$

Para h_{wf} a partir de (8.6), con $\left[\bar{T}_1(z_0, H) \right]_{CFD} = \bar{T}_1(z_0, H)$ y $\bar{q}(z_0, H) = \left[\bar{q}(z_0, H) \right]_{CFD}$:

$$h_{wf} = - \frac{\left[\bar{q}(z_0, H) \right]_{CFD}}{\left[\bar{T}_1(z_0, H) \right]_{CFD} - T_w} \quad (8.10)$$

Para estimar h_f y $\lambda_{ef,c}$ se aplica un procedimiento de regresión basado en el ajuste de los perfiles radiales de temperatura en la zona central. Se identifica en la zona central un conjunto de $M = 20$ anillos delgados de espesor $\Delta\rho = D_p/10$. Definida la función de desviación S ,

$$S = \sum_{i=1}^M \left\{ \left[\bar{T}_c(z_0, H, \rho_i) \right]_{CFD} - \bar{T}_c(z_0, H, \rho_i) \right\}^2 \left[\left(\rho_i + \frac{1}{2} \Delta\rho \right)^2 - \left(\rho_i - \frac{1}{2} \Delta\rho \right)^2 \right]$$

se determinan los valores h_f y $\lambda_{ef,c}$ que minimizan el valor de S . En el proceso de regresión, los valores de $\bar{T}_c(z_0, H, \rho_i)$ se calculan de la ecuación 8.7, evaluando μ_1 mediante la ecuación 8.3, para valores de prueba h_f y $\lambda_{ef,c}$ y con los valores ya estimados de G_1/G_c y h_{wf} (ecuaciones 8.9 y 8.10).

Condiciones operativas estudiadas y modalidad empleada para la simulación por CFD

Las simulaciones por CFD para lechos en recipientes cilíndricos se llevaron a cabo con $D_p = 0.02\text{m}$, $D_t = 0.1\text{m}$ y para las condiciones operativas y las propiedades termofísicas que se informan en la tabla 8.1.

Condiciones operativas	Propiedades termofísicas
$P[\text{MPa}] = 2.5$	$\delta_f [\text{kg m}^{-3}] = 10.2$
$T_w [\text{K}] = 965$	$\mu [\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}] = 4.16 \cdot 10^{-5}$
$T_{0,prom} [\text{K}] = 845$	$c_{pf} [\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}] = 1108$
$100 < \text{Re}_p < 2000$	$\lambda_f [\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}] = 5.63 \times 10^{-2}$
	$Pr = 0.819$

Tabla 8.1: Condiciones operativas y propiedades termofísicas utilizadas en las simulaciones CFD.

Como se desprende de la tabla 8.1, el parámetro analizado en el curso de las evaluaciones es el número de Reynolds Re_p . Los valores para el resto de las variables son los mismos considerados en el capítulo 5 para los arreglos regulares. Asimismo, las simulaciones fueron realizadas con los mismos valores de los parámetros de control y el mismo modelo de turbulencia que fueran mencionados en el capítulo 4 para arreglos regulares.

8.4.- Simulación y análisis para lecho relleno con relación de aspecto $N=5$

Como se ha descrito en el capítulo 7, la celda de cálculo para la simulación por CFD contiene 204 esferas que cubren un longitud de aproximadamente $10D_p$. Esta celda incluye la base del lecho para el ingreso de la corriente, que impone una restricción para el acomodamiento de las pastillas, y el plano superior adoptado introduce una pequeña región libre de pastillas (véase figura 7.5). Por lo tanto, ambas regiones a la entrada y a la salida presentan un acomodamiento de pastillas diferenciado y se consideró conveniente eliminarlas a fin de que el comportamiento térmico del lecho no incluya efectos de contorno. Por lo tanto, se debió elegir un segmento de trabajo apropiado, para cuantificar las propiedades detalladas en la sección 8.3. En principio, se consideraron tres alturas H para el segmento, $8.2 D_p$, $6.2 D_p$ y $3.5 D_p$. La posición de cada segmento dentro de la celda de cálculo fue variada de manera que la porosidad global en su interior resulte muy próxima al valor en el lecho original con 1500 esferas, $\varepsilon = 0.435$ (capítulo 7). Los valores de la coordenada z_0 (a partir de la sección de ingreso del fluido) que satisfacen aproximadamente tal requerimiento fueron, $z_0 = (1, 1.5, 0.5) D_p$ para $H = (8.2, 6.2, 3.5) D_p$, respectivamente. Tales segmentos se ilustran en la figura 8.3

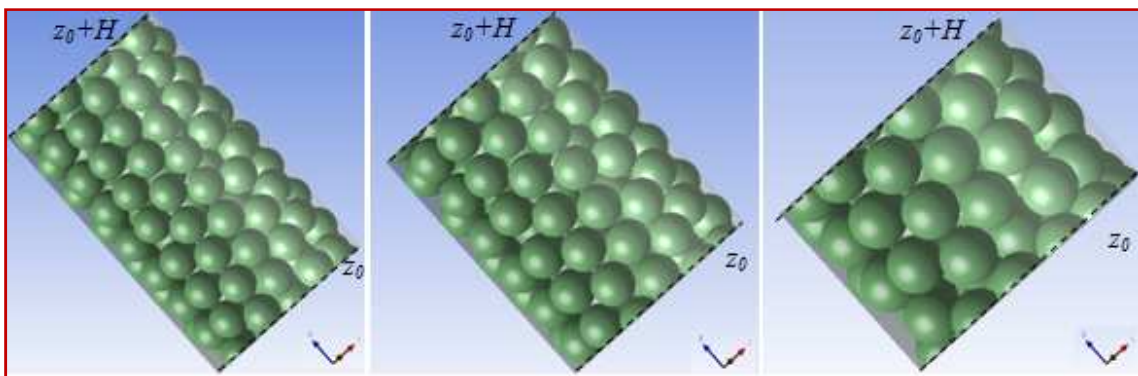


Figura 8.3: Alternativas consideradas para el segmento de trabajo, $H = (8.2, 6.2, 3.5) D_p$ para los esquemas a), b) y c), respectivamente.

El comportamiento de cada segmento fue evaluado teniendo en cuenta valores de los coeficientes h_{wf} y h_f resultantes de la simulación CFD, de acuerdo al procedimiento de la sección 8.3 para $Re_p=1000$. En la tabla 8.2 se muestran los resultados correspondientes junto a los valores de porosidad. Puede apreciarse que los valores de ε resultan muy próximos a 0.435.

H	$8.2 D_p$	$6.2 D_p$	$3.5 D_p$
ε	0.435	0.434	0.438
ε_1	0.538	0.532	0.541
ε_c	0.377	0.373	0.380
h_{wf} [$\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$]	107.7	109.3	107.9
h_f [$\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$]	206.3	204.3	239.2

Tabla 8.2: Valores de porosidad y coeficientes h_{wf} y h_f para los distintos segmentos analizados, $Re_p=1000$.

Los valores de h_{wf} son muy próximos entre sí, mientras que los valores de h_f guardan una concordancia satisfactoria, aun cuando para el menor H se presenta cierta sobrevaloración. La consistencia de los valores estimados aporta una importante evidencia para suponer que las irregularidades del relleno generan un bajo nivel de incertidumbre en la estimación de los parámetros.

En lo que resta del capítulo se empleará específicamente el conjunto de resultados para el segmento más extenso, es decir para $H=8.2 D_p$, que implica obtener los promedios sobre el mayor número de pastillas, evitando simultáneamente las regiones extremas.

Para el segmento elegido se determinó el perfil de porosidad radial promediado sobre toda la altura $H=8.2 D_p$, (figura 8.4). El mismo resulta similar a los resultados reportados en la bibliografía (ver por ejemplo, [Mariani y col., 2009](#)). Se observa que la primera capa de pastillas genera un mínimo de porosidad local de valor 0.23 a una distancia adimensional de la pared de $y^*=0.55$. Como es esperable, las pastillas contiguas a la primera capa aún conservan un significativo grado de alineamiento axial, con la consecuente aparición de un segundo mínimo de porosidad local de valor ligeramente superior a 0.3, ubicado aproximadamente en $y^*=1.4$. La particular relación de aspecto $N=5$ promueve también que una importante fracción de pastillas se acomode

en una hilera con centros cercanos al eje del tubo, razón por la cual se presenta un tercer mínimo de porosidad sobre el eje, de alrededor de 0.3.

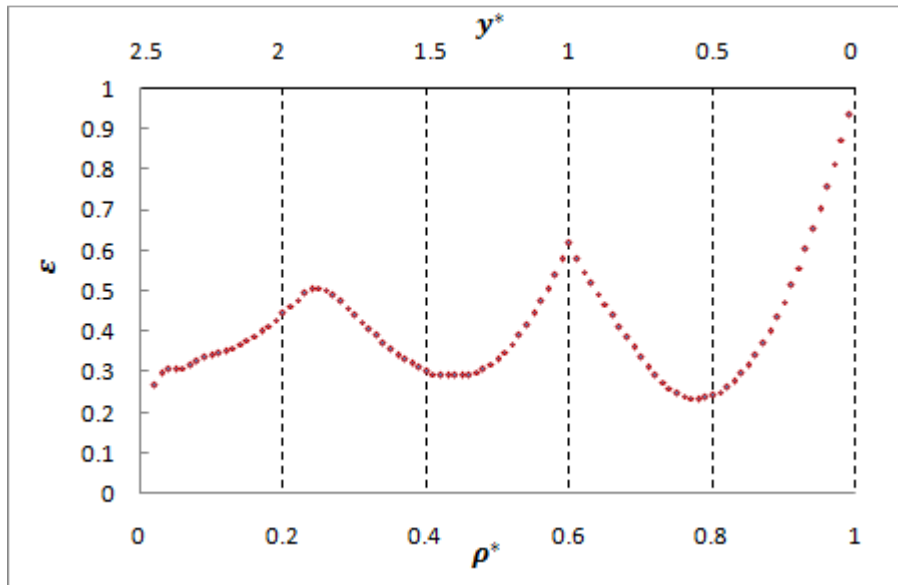


Figura 8.4: Perfil radial de porosidad, para $N=5$ en el segmento $H=8.2 D_p$.

Los valores de porosidad en el canal de la pared ($\rho_c < \rho < \rho_t$), ε_1 , y en el canal central ($0 < \rho < \rho_c$), ε_c , son los informados en la tabla 8.2 $\varepsilon_1=0.538$ y $\varepsilon_c=0.377$. En el capítulo 3 se planteó una expresión para ε_1 (ec.3.2b) en términos de la densidad adimensional de pastillas n_p^* , donde también se especificó que el valor de n_p^* es del orden de la unidad. Una estimación más precisa para n_p^* fue realizada en base al trabajo de [Mariani y col., 2002](#) resultando adecuado el valor $n_p^*=0.955$ para lechos bien compactados con $N \geq 5$, tal como fuera informado por [Suarez y col., 2017](#). Utilizando $\varepsilon_1=0.538$ en la ecuación 3.2b se obtiene $n_p^*=0.94$. Por otro lado, en el capítulo 6 se sugirió estimar $\varepsilon_c = 0.371 + 0.13/N$, que, para este caso, arroja $\varepsilon_c=0.40$. Puede concluirse que los valores resultantes para el segmento de trabajo, $\varepsilon_1=0.538$ y $\varepsilon_c=0.377$, guardan una satisfactoria consistencia con las predicciones de bibliografía, indicando que el arreglo de pastillas adoptado para la simulaciones es representativo del acomodamiento de pastillas esperado para $N=5$.

8.4.1.- Resultados para G_1/G_c

En la figura 8.5a se presentan los perfiles radiales de la velocidad axial superficial u_z a distintas alturas, para $Re_p=1000$. Cada valor fue promediado circunferencialmente, mientras que en la figura 8.5b se grafican los valores adicionalmente promediados entre $2D_p < z-z_0 < 8.2D_p$, que aproximadamente corresponde al segmento de trabajo H . Se puede apreciar, por comparación con la figura 8.4, la correspondencia de los extremos locales con los del perfil de porosidad, excepto por la posición de los máximos muy cercanos a la pared, cuya posición resulta por efecto de la fricción ejercida por la condición de no-deslizamiento sobre la misma. Es también importante notar (figura 8.5a) la importante dispersión a distintas alturas, debido principalmente a la aleatoriedad del relleno.

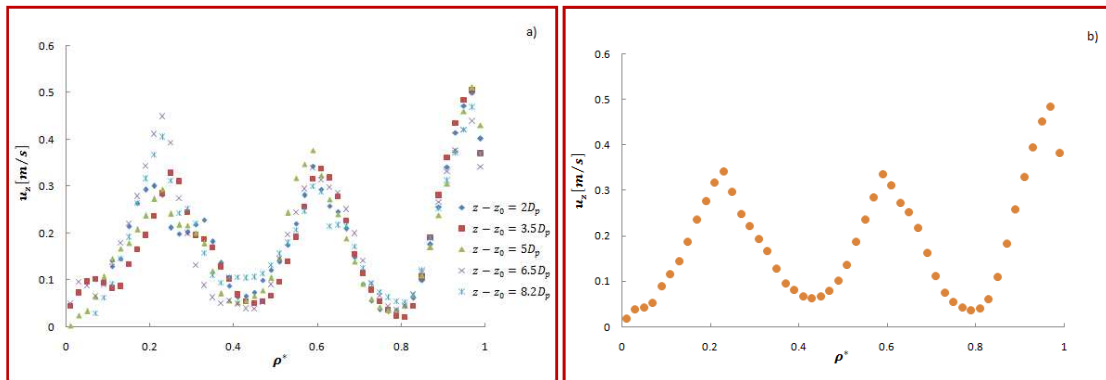


Figura 8.5: (a) Perfiles radiales de velocidad axial a distintas alturas y (b) perfil radial promediado entre $2D_p < z-z_0 < 8.2D_p$. $Re_p=1000$.

Los valores $(G_1/G_c)_{\text{simulación}} = [\bar{G}_1(z_0, H)]_{CFD} / [\bar{G}_c(z_0, H)]_{CFD}$ obtenidos por CFD para estimar la relación G_1/G_c del modelo 2R2D (ecuación 8.9) se listan en la tabla 8.3 en función de Re_p , como así también los valores (identificados como $(G_1/G_c)_{\text{correlación}}$) obtenidos mediante la correlación (5.10) del capítulo 5 para los arreglos regulares:

$$G_1 / G_c = 0.55 \varepsilon_1^{1.5} \varepsilon_c^{-2.4} Re_p^{-0.04} \quad (5.10)$$

empleando los valores medidos $\varepsilon_1=0.538$ y $\varepsilon_c=0.377$ para el segmento de trabajo.

Re_p	$(G_1/G_c)_{\text{simulación}}$	$(G_1/G_c)_{\text{correlación}}$
100	1.734	1.876
250	1.729	1.809
500	1.724	1.759
750	1.741	1.731
1000	1.720	1.711
1250	1.711	1.696
1500	1.710	1.684
1750	1.715	1.673
2000	1.713	1.664

Tabla 8.3: Relación G_1/G_c para lecho rellenos al azar, $N = 5$.

En la figura 8.6 se grafican los valores de la tabla 8.3, en donde se aprecia que la ecuación 5.10 estima, en promedio, de manera muy precisa los valores simulados. Por otro lado, es evidente que estos últimos no exhiben dependencia alguna con Re_p .

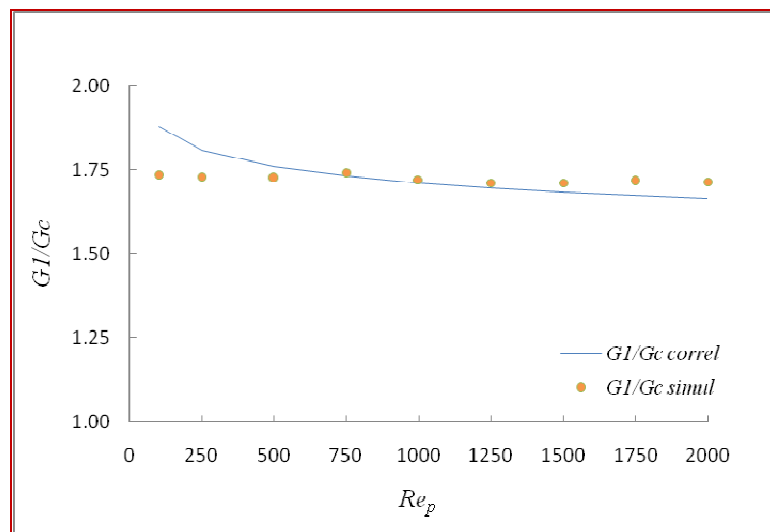


Figura 8.6: Comparación de la relación G_1/G_c vs Re_p .

La fricción ejercida por la pared afecta de manera casi exclusiva a la permeabilidad del canal de pared, y por lo tanto a G_l . Puesto que la ecuación 5.10 fue desarrollada en base a arreglos regulares contenidos entre paredes planas y en este punto se la compara con un lecho de baja relación de aspecto N , es posible prever que la pared ejerza una mayor resistencia de fricción, debido al efecto de curvatura, para un mismo

valor de porosidad ε_1 . Para evaluar si este efecto puede resultar significativo, en el Apéndice 8.1 se comparan los valores del radio hidráulico R_h en el canal de la pared para ambos casos, y teniendo en cuenta su efecto sobre el flujo para un mismo valor de la caída de presión, resulta que la velocidad másica para paredes planas será de sólo un 2% mayor que para el caso $N=5$ con el valor de porosidad medido $\varepsilon_1=0.538$. Por lo tanto, tal efecto es sólo marginal y permite emplear la ecuación 5.10 sin necesidad de corrección.

Respecto al efecto de Re_p , se debe enfatizar que de acuerdo a la ecuación 5.10 su exponente es pequeño y se recuerda que el mismo fue determinado con significativa incertidumbre (0.04 ± 0.03). Por lo tanto, no debería sorprender que los resultados para $N=5$ indiquen independencia con respecto a los valores de Re_p .

A fin de incorporar mayor información acerca de la relación G_l/G_c , se debe consignar que existen algunos trabajos en bibliografía que reportan perfiles de velocidad axial, similares a los graficados en la figura 8.5. Si bien no son muy numerosos, pueden dividirse en trabajos de carácter experimental y trabajos que utilizan CFD. Los resultados experimentales que merecen mayor confiabilidad son aquellos obtenidos por anemometría Laser-Doppler con flujo líquido. Los mismos son escasos y para el rango de número de Reynolds considerado en este trabajo, se pueden mencionar los resultados consignados por Giese y col., 1998, para $N=9.3$, $Re_p=77, 103, 532$ y los mencionados por Freund y col., 2003 para $N=6.15$ y $Re_p=50$. Estos resultados se informan para una sección transversal dada, en forma de valores locales, con elevada dispersión. Asimismo, como se ilustra en la figura 8.5a, los resultados en una determinada sección oscilan considerablemente alrededor de la media. Por lo tanto, resulta difícil recuperar de manera precisa las relaciones G_l/G_c . No obstante, se puede estimar que las mismas se ubican en un rango $1.4 < G_l/G_c < 1.8$, por lo que los valores de la tabla 8.3 resultan compatibles.

Con relación a resultados obtenidos a través de CFD, se han considerado dos grupos de resultados. Por un lado, los presentados por Behman y col., 2013 y Dixon, 2017 se obtuvieron en la plataforma *ANSYS FLUENT*, empleando la formulación RANS/k- ω para modelar la turbulencia, mientras que se usó el mismo algoritmo de Salvat y col., 2005a para generar la distribución del relleno, si bien con una modificación aplicable al acomodamiento de las pastillas cerca de la base del lecho. La misma, por lo tanto, no debería afectar los resultados de interés para el resto del lecho.

Por otro lado, [Eppinger y col., 2011](#) emplean una plataforma de CFD diferente, STAR-CCM+, y el relleno es acomodado de acuerdo al simulador DEM. En ambos casos los perfiles de velocidad radial fueron integrados para evaluar la relación G_1/G_c . Los resultados se muestran en la tabla 8.4, incluyendo los aquí presentados para $Re_p = 100, 1000$, como referencia. También se incluyen resultados obtenidos mediante la ecuación 5.10, para los cuales se usaron valores de ε_1 y ε_c evaluados, a partir de los perfiles de porosidad cuando estuvieran informados en las referencias, y en caso contrario se estimaron como se indica en la tabla 8.4.

Por un lado, puede observarse que los datos de [Behman y col., 2013](#) y [Dixon, 2017](#) resultan enteramente compatibles con los aquí obtenidos, todos ellos en el rango, 1.56-1.73 y muy precisamente estimados por la correlación 5.10.

Fuente	N	Re_p	$\varepsilon_1, \varepsilon_c, \varepsilon$	G_1/G_c	G_1/G_c (ec.5.10)
Este trabajo	5	100	0.538, 0.377, 0.435	1.73	1.88
		1000		1.72	1.71
Eppinger y col. (2011)	5	100	0.538, 0.377, 0.435 ⁽¹⁾	2.10	1.88
		1000		2.01	1.71
Behman y col. (2013)	5.96	240	0.554, 0.405, 0.451	1.69	1.59
Eppinger y col. (2011)	6	100	0.569, 0.395, 0.448	2.02	1.82
		1000		1.94	1.66
Eppinger y col. (2011)	7	100	0.527, 0.389, 0.426 ⁽²⁾	1.69	1.69
		1000		1.68	1.54
Behman y col. (2013)	7.99	240	0.538, 0.401, 0.433	1.56	1.56
Eppinger y col. (2011)	8	100	0.508, 0.392, 0.419	1.90	1.57
		1000		1.81	1.43
Dixon (2017)	9.3	532	0.531, 0.372, 0.404 ⁽³⁾	1.70	1.78

Tabla 8.4. Resultados de CFD propios y de bibliografía para la relación G_1/G_c .

(1): valores de porosidad de este trabajo

(2): valores de porosidad con correlación de [Mariani y col., 2002](#)

(3): valores de porosidad con algoritmo de [Mariani y col., 2009](#)

Por otro lado, los resultados de [Eppinger y col., 2011](#) resultan en general más elevados, con un nivel promedio de alrededor de 2 (con excepción de los datos para $N=7$). Resulta probable que la diferente plataforma de CFD empleada por estos autores cause la diferencia, aunque no se dispone de elementos para realizar una afirmación en este sentido. Cabe recordar que los valores experimentales comentados previamente

sugieren valores de G_l/G_c consistentemente inferiores a 2. También cabe resaltar que las diferencias de valores de G_l/G_c entre $Re_p=100$ y $Re_p=1000$, de acuerdo a estos autores, es escasa e inferior a la predicha por la ecuación 5.10.

Como conclusión global de la comparación realizada, puede afirmarse que la correlación 5.10 proporciona valores razonablemente precisos y aporta evidencia para sostener la hipótesis que el comportamiento de arreglos regulares se aproxima cercanamente al de lechos rellenos al azar, si se identifican correctamente las variables que representan ambos tipos de sistemas. Sin embargo, se puede intentar un proceso evolutivo para ajustar las correlaciones a medida que se incorporan datos en lechos rellenos al azar, teniendo en cuenta el objetivo final de aplicación de las mismas en este tipo de sistemas. De esta manera, si se privilegian los datos aquí presentados, se propone la siguiente modificación de la ecuación 5.10 para predecir valores G_l/G_c en el rango $5 < N < 10$ y $100 < Re_p < 2000$:

$$G_l / G_c = 0.464 \varepsilon_1^{1.5} \varepsilon_c^{-2.4} Re_p^{-0.015} \quad (8.11)$$

La ecuación 8.11 conserva la dependencia con ε_1 y ε_c , se modificó el exponente de Re_p , promediando la tendencia de los datos de Eppinger y los aquí obtenidos, y se ajustó el coeficiente numérico con los datos de la tabla 8.3. Para los mismos, la diferencia máxima es de 2.4% para $Re_p=100$.

8.4.2.- Resultados para h_{wf}

Los valores obtenidos a partir de las simulaciones de CFD conforme a la ecuación 8.10 en función de Re_p se identifican como $h_{wf, simulación}$ en la tabla 8.5 y en la figura 8.7, donde también se presentan los resultados predichos por la ecuación 5.8 del capítulo 5 (como $h_{wf, correlación}$), que fue desarrollada para arreglos regulares,

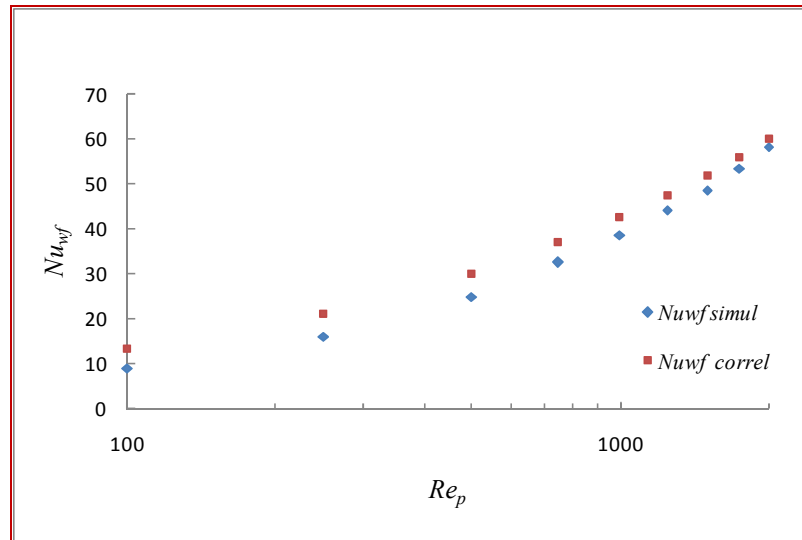
$$Nu_{wf} = 0.285 \varepsilon_1^{-2.4} Re_{p1}^{0.5} Pr^{0.5} \quad (5.8)$$

Para el uso de la ecuación 5.8 se emplearon los valores $(G_l/G_c)_{simulación}$ discutidos en la sección previa, a fin de evaluar Re_{p1} , junto con $\varepsilon_1=0.538$ para el segmento de trabajo.

Re_p	Re_{p1}	h_{wf} correlación	h_{wf} simulación	e%
100	137	37.6	24.8	51.6
250	342	59.5	44.6	33.4
500	684	84.2	69.4	21.3
750	1031	103.3	90.8	13.7
1000	1366	118.9	107.7	10.4
1250	1703	132.8	123.7	7.3
1500	2043	145.5	135.7	7.2
1750	2387	157.3	149.6	5.1
2000	2726	168.1	163.3	2.9

Tabla 8.5: Coeficiente de transferencia de calor sobre la pared $[h_{wf}] = \text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}$.

Se puede observar, tanto en la tabla 8.5 como en la figura 8.7, que el nivel de diferencias entre valores simulados y predichos resulta globalmente aceptable (el error promedio es de alrededor de 17%). Sin embargo, los valores de h_{wf} predichos por la ecuación 5.8 son significativamente más elevados para bajos valores de Re_p , mientras que las diferencias consistentemente se reducen a medida que se alcanza el máximo valor estudiado $Re_p = 2000$. No ha sido factible explicar, en forma contundente, las desviaciones observadas a bajos valores de Re_p . Cabe recordar, no obstante, que el ajuste proporcionado por la ecuación 5.8 presenta las mayores diferencias relativas para los diferentes arreglos regulares a bajos valores de Re_p , como se puede observar en la figura 5.3, hecho que indica la dificultad de cuantificar adecuadamente h_{wf} a bajos valores de Re_p , aproximadamente en el rango $100 < Re_p < 500$. Debe notarse que en este rango se produce la transición entre régimen estrictamente laminar y turbulento (ver, por ejemplo, [Magnico, 2009](#)), lo cual es previsible que introduzca para h_{wf} una dependencia con Re_p más compleja que la dependencia potencial usada en la ecuación 5.8.


 Figura 8.7: Comparación de Nu_{wf} vs Re_p .

También debe considerarse el importante efecto, señalado en el capítulo 5 que ocasiona la orientación de los arreglos regulares respecto a la dirección del flujo principal. La ecuación 5.8 está basada en un promedio de las direcciones, mientras que el arreglo de las pastillas en el primer estrato del lecho simulado puede responder a una cierta dirección preferencial. Finalmente, debe señalarse que la ecuación 5.8 predijo valores relativamente altos de Nu_{wf} a bajos valores de Re_p cuando se la comparó con correlaciones adecuadas de bibliografía (ver figura 5.10).

Aún con las diferencias apuntadas, los resultados para h_{wf} de los arreglos regulares y del lecho simulado con relleno al azar con $N=5$ sugieren un comportamiento muy similar para ambos sistemas, proveyendo evidencia que las correlaciones propuestas en base a los arreglos regulares constituyen una satisfactoria base para predecir el comportamiento de lechos rellenos al azar. Si el enfoque del proceso evolutivo para ajustar las correlaciones, señalado en la sección anterior para G_1/G_c , se aplica también a Nu_{wf} , se puede mantener el factor $(\varepsilon_1^{-2.4} Pr^{0.5})$ de la ecuación 5.8 y ajustar el factor de proporcionalidad y el exponente de Re_{p1} en base a los resultados de la tabla 8.5 para $h_{wf, simulación}$. Resulta la expresión:

$$Nu_{wf} = 0.124 \varepsilon_1^{-2.4} Re_{p1}^{0.6} Pr^{0.5} \quad (8.12)$$

La expresión 8.12 ajusta los valores $h_{wf, simulación}$ de la tabla 8.5 en forma muy precisa, con un error máximo de 8% para $Re_p=100$.

8.4.3.- Coeficiente de transferencia de calor h_f

Como se explicara en la sección 8.3, para estimar los valores de h_f y $\lambda_{ef,c}$ del modelo 2R2D a partir de los resultados de simulación CFD se aplica un procedimiento de regresión basado en el ajuste de los perfiles radiales de temperatura en la zona central del segmento de trabajo. Los valores así obtenidos para h_f , identificados como $h_{f, simulación}$, se reportan en la tabla 8.6 y se grafican en la figura 8.8, donde también se presentan los resultados predichos por la ecuación 5.9 del capítulo 5 (como $h_{f, correlación}$) desarrollada para arreglos regulares,

$$Nu_f = 0.346 \varepsilon_1^4 [1 + 11.4(\varepsilon_1 - \varepsilon_c)] Re_p Pr \quad (5.9)$$

Re_p	$h_{f, correlación}$	$h_{f, simulación}$	e%
100	18.2	16.1	15.9
250	46.8	51.7	-9.5
500	93.5	101.6	-7.9
750	140.3	159.9	-12.3
1000	187.1	206.3	-9.3
1250	233.9	276.2	-15.3
1500	280.6	283.5	-1.00
1750	327.4	356.4	-8.1
2000	374.2	363.7	2.1

Tabla 8.6: Coeficiente de transferencia de calor entre canales $[h_f] = W m^{-2}K^{-1}$.

Puede apreciarse una buena concordancia entre ambas series de resultados, como lo refleja el promedio de los errores relativos (tabla 8.6), (-5%). La pequeña subestimación introducida por la ecuación 5.9 puede juzgarse como totalmente tolerable.

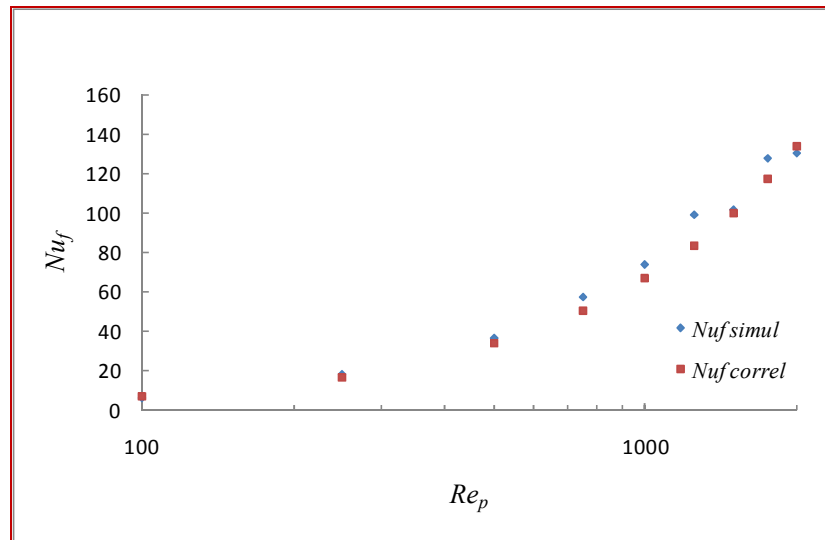


Figura 8.8: Comparación de Nu_f vs Re_p .

Un ejemplo del ajuste alcanzado para los perfiles de temperatura se ilustra en la figura 8.9 para el valor $Re_p=1000$.

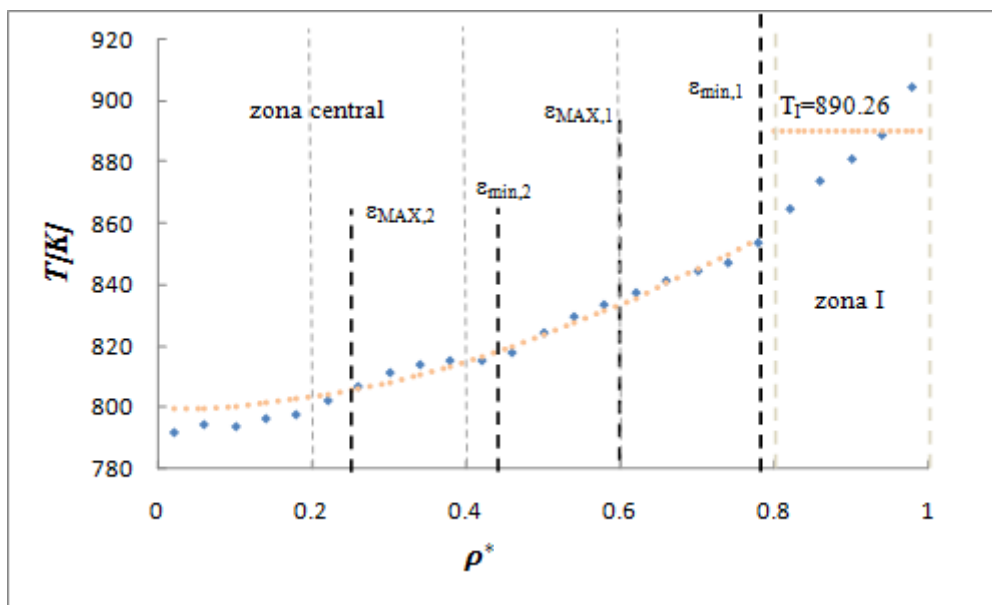


Figura 8.9: Perfil de temperatura radial, $Re_p = 1000$.

La diferencia de temperatura entre el valor promedio en el canal de la pared $[\bar{T}_1(z_0, H)]_{CFD} = \bar{T}_1(z_0, H) = 890.3$ K y el valor la temperatura T_{cl} en el extremo de la zona central ($\rho = \rho_c$) resulta de alrededor de 35 K, tanto para el modelo 2R2D como para los resultados de simulación. Este salto térmico es introducido por la resistencia ($1/h_f$) ejercida, principalmente, por las pequeñas aberturas que las pastillas del primer estrato originan alrededor de $\rho = \rho_c$, *i.e.* a una distancia $D_p/2$ de la pared. Debe recordarse que,

con proximidad a esta posición se produce el mínimo de porosidad local, $\epsilon_{\min,1}=0.23$, cuya posición se indica en la figura 8.4. Para el valor $Re_p=1000$ considerado en la figura 8.9, la resistencia sobre la pared $1/h_{wf}$ resulta superior a $(1/h_f)$, ocasionando un salto de temperatura $[T_w - \bar{T}_1(z_0, H)]$ de alrededor de 75 K.

8.4.4.- Conductividad Efectiva Radial $\lambda_{ef,c}$

Los valores de $\lambda_{ef,c}$ que surgen del procedimiento de regresión de los perfiles de temperatura obtenidos por CFD se detallan en la tabla 8.7 como $\lambda_{ef,c,simulación}$.

Re_p	Re_{pc}	$\lambda_{ef,c, simulación}$	$Pe_{r,\infty}$
100	79.1	0.345	13.3
250	198.0	0.727	15.7
500	398.6	1.448	15.8
750	592.0	2.111	16.3
1000	794.1	2.582	17.7
1250	995.2	3.154	18.1
1500	1195	3.689	18.6
1750	1392	4.348	18.4
2000	1591.5	5.214	17.6

Tabla 8.7: Conductividad efectiva radial a partir de los datos de CFD $[\lambda_{ef,c}] = \text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$.

Debe tenerse presente que las pastillas fueron consideradas adiabáticas en la simulación por CFD, por lo que si bien las mismas determinan el campo de velocidad, no participan de ninguna forma en el proceso de transporte de calor. Los valores $\lambda_{ef,c}$ por simulación, no obstante, incluyen un cierto aporte de la conducción molecular del fluido a través de los huecos del relleno. Tal aporte, de acuerdo a [Bauer y Schlünder, 1978](#) puede estimarse como $\lambda_f/4 = 0.014 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ (el factor 1/4 contempla la fracción de huecos y la tortuosidad), el cual es de alrededor del 4% del mínimo valor de $\lambda_{ef,c}$ en la tabla 8.7, por lo que para la discusión que sigue se lo ignorará, considerando que los valores obtenidos responden al efecto de la convección del fluido.

Las expresiones de bibliografía responden a experiencias de transporte de calor o transporte de materia radial. La diferencias entre ambas, muy especialmente en el caso de gases, reside en que la conductividad de las pastillas es relativamente muy elevada,

mientras que puede despreciarse la capacidad para transportar materia, aún para rellenos porosos. Sin embargo, se considera casi universalmente que la contribución térmica de las pastillas opera en forma aditiva con los efectos convectivos, a través del término $\lambda_{es,c}$ en la terminología del modelo 2R2D. Se recuerda que $\lambda_{es,c}$ cuantifica el transporte entre pastilla y pastilla, limitado por la conducción en los filetes de gas interpuestos, por lo que resulta estrictamente de naturaleza conductiva. Como resultado, surge que el efecto de la convección debería ser equivalente para transferencia de materia y calor, lo cual puede establecerse diciendo que el aporte convectivo $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ debe depender de Re_p y Pr de la misma forma que $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$ (D_m : difusividad molecular), lo hará de Re_p y Sc (número de Schmidt), para un dado lecho.

Puesto que en la simulación por CFD se excluyó la participación de las pastillas en el transporte, los resultados de la tabla 8.7 cuantifican, estrictamente, $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$, para un valor $Sc = Pr = 0.813$. Como se discutirá en la sección 8.4.4.1, se presentan razones para cuestionar la estricta validez de la equivalencia entre ambos procesos de transporte. Por lo tanto, para la comparación con correlaciones experimentales que se expone a continuación se distinguirá si las mismas provienen de experimentos con transporte de materia o calor. A fin de mantener uniformidad con la presentación en este trabajo, los resultados experimentales y correlaciones resultantes de transporte de materia se continuarán expresando en términos equivalentes de $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$, Re_p y Pr .

Los resultados para el aporte convectivo, sea de materia o calor, se expresan frecuentemente en la forma

$$\left(\lambda_{ef,c} / \lambda_f\right)_{conv} = \frac{Re_p Pr}{Pe_{r,\infty}} = \frac{Pe}{Pe_{r,\infty}} \quad (8.13)$$

donde el número de Peclet térmico es $Pe = c_{pf} G D_p / \lambda_f$ [para materia, el parámetro equivalente $Pe_m = G D_p / (\delta_f D_m)$].

La *Teoría de Dispersión Transversal al Azar* (TDLA) originalmente propuesta por [Baron, 1952](#) y [Ranz, 1952](#) predice para esferas un valor $Pe_{r,\infty} = 8$. Considerando el caso de lechos tri-dimensionales, el valor más realista es $Pe_{r,\infty} \cong 11$. La TDLA se aplica tanto para gases como para líquidos, para transporte de calor o materia, para rellenos estrictamente al azar (es decir, en ausencia de efectos de pared y por lo tanto para elevados N) y a valores suficientemente elevados de Re_p de manera tal que los efectos viscosos estén ausentes (observar que si $Pe_{r,\infty}$ es constante, la ecuación 8.13 excluye

todo efecto de μ). De acuerdo a resultados experimentales, los valores necesarios de Re_p para ignorar los efectos viscosos indican una fuerte dependencia con el tipo de fluido, gas o líquido (diferenciados por el rango de Pr , o de Sc para dispersión de materia). En el caso de líquidos (Pr , Sc del orden del 10^3) existe un rango muy elevado de valores de Re_p para el cual $Pe_{r,\infty}$ no se comporta como una constante, sino que resulta una función compleja de Re_p y de Pr o Sc (ver e.g. [Delgado, 2007](#), para transporte de materia). En el caso de gases, particularmente de interés en este trabajo (con valores de Pr , Sc del orden de la unidad) el comportamiento es más sencillo y los valores experimentales indican que a partir de Re_p de alrededor de 100, $Pe_{r,\infty}$ alcanza valores aproximadamente constantes.

En base a resultados experimentales de transporte de materia con gases, de siete fuentes diferentes, y para relaciones de aspecto N elevadas, [Delgado, 2007](#) concluye que el valor $Pe_{r,\infty}=12$ es satisfactorio. Los datos presentados por el autor en el rango $100 < Re_p < 1000$, no obstante, muestran una significativa dispersión con valores de $Pe_{r,\infty}$ entre aproximadamente 8 y 15, mientras que para $Re_p > 1000$ la dispersión disminuye y claramente se aproximan al valor $Pe_{r,\infty}=12$. La pequeña diferencia con el valor $Pe_{r,\infty}=11$ de la TDLA podría deberse al hecho que los datos empleados por [Delgado, 2007](#), si bien corresponden a elevados N , fueron obtenidos para relaciones de aspecto finitas.

El efecto de la relación de aspecto N sobre $Pe_{r,\infty}$ es muy relevante para los datos aquí presentados, dada la baja relación de aspecto $N=5$. La gran mayoría de los datos experimentales (para materia y calor) señalan que $Pe_{r,\infty}$ aumenta (es decir $\lambda_{ef,c}$ disminuye) conforme N decrece. El trabajo de [Fahien y Smith, 1955](#) para transporte de materia es una referencia estándar en este sentido. En base a datos experimentales propios de transporte de materia en rellenos esféricos o cercanamente esféricos los autores proponen el factor $(1+19.4/N^2)$ y su expresión resulta

$$\text{(Fahien y Smith, 1955): } Pe_{r,\infty} = 8.65 (1+19.4/N^2); \quad Pe_{r,\infty} = 15.3 (N=5) \quad (8.14a)$$

La ecuación 8.14a implica que $Pe_{r,\infty} \rightarrow 8.65$ para $N \rightarrow \infty$, un valor sensiblemente inferior a $Pe_{r,\infty}=12$ inferido por [Delgado, 2007](#) y al valor $Pe_{r,\infty}=11$ de la TDLA. Por lo tanto, a fin de comparar con los resultados aquí simulados para $N=5$, resulta razonable utilizar como alternativa el valor $Pe_{r,\infty}=11$ de la TDLA junto con el factor $(1+19.4/N^2)$ de [Fahien y Smith, 1955](#):

(TDLA corregida): $Pe_{r,\infty} = 11 (1+19.4/N^2)$; $Pe_{r,\infty} = 19.5 (N=5)$ (8.14b)

En la tabla 8.7 se consignan los valores puntuales de $Pe_{r,\infty}$ para las simulaciones de CFD con $N=5$. En la figura 8.10 se los compara con los valores de las ecuaciones 8.14, que resultan para $N=5$: $Pe_{r,\infty}$ **15.3** para (8.14a) y $Pe_{r,\infty}$ **19.5** para (8.14b). Claramente, todos los resultados de simulación, con excepción del valor para $Re_p=100$, resultan acotados por el par de valores de referencia, por lo que se puede concluir que los mismos son compatibles con resultados de bibliografía de dispersión de materia.

Se puede ahora intentar una comparación con resultados experimentales de transporte de calor. A tal efecto se consideran cuatro expresiones analizadas por Dixon, 2012 en su trabajo de revisión. Por un lado, la expresión propuesta por Specchia y col., 1980 para $Pe_{r,\infty}$ coincide con la ecuación 8.14a de Fahien y Smith, 1955 para transporte de materia. Specchia y col., 1980 incluyeron datos experimentales con rellenos de distinta forma, aunque de acuerdo a su análisis los mismos ofrecen un comportamiento similar al de esferas cuando su tamaño es evaluado como el diámetro de la esfera equivalente de igual superficie. Dixon, 1988 concluye que la dispersión de los datos experimentales no permite identificar claramente el efecto de N , y propone para esferas un valor constante. Las expresiones propuestas, específicamente para esferas, son:

(Dixon, 1988): $Pe_{r,\infty} = 12$ (8.15a)

(Bauer y Schlünder, 1978a): $Pe_{r,\infty} = 7 (1+4/N - 4/N^2)$; $Pe_{r,\infty} = 11.5 (N=5)$ (8.15b)

(Freiwald y Paterson, 1992): $Pe_{r,\infty} = 8 (1+2/N)$; $Pe_{r,\infty} = 11.2 (N=5)$ (8.15c)

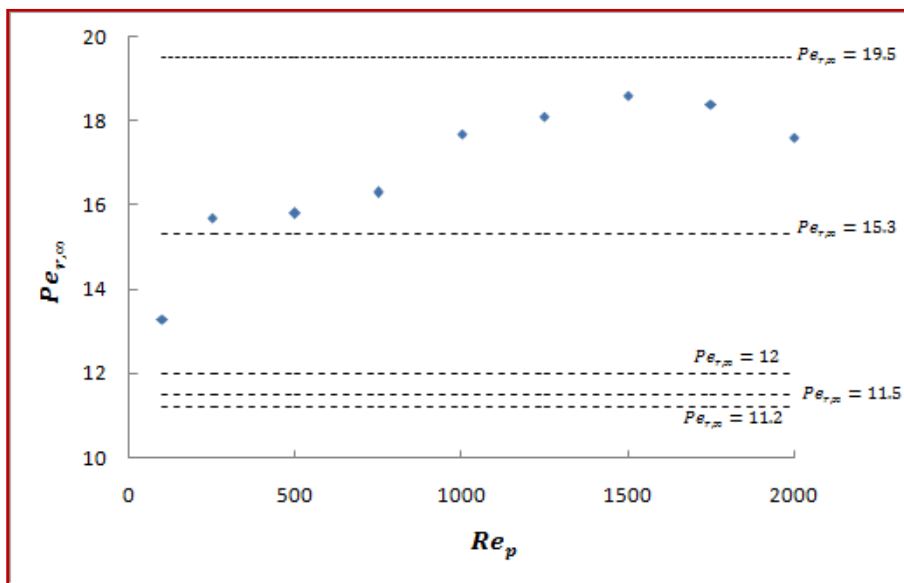


Figura 8.10: Comparación de valores $Pe_{r,\infty}$ vs. Re_p obtenidos a partir de CFD y correlaciones.

Merece destacarse la importante diferencia entre las ecuaciones 8.15 para $N \rightarrow \infty$, desde $Pe_{r,\infty}=7$ (ec. 8.15b) a $Pe_{r,\infty}=12$ (ec. 8.15a), aunque para $N=5$ los valores son similares entre sí (quizás fortuitamente) y se apartan de manera notoria de la predicción de (8.14a).

Los valores de las ecuaciones 8.15 para $N=5$ también se incluyen en la figura 8.10. Los resultados aquí obtenidos por simulación son consistentemente superiores (menores λ_{ef}) que los valores de las 4 correlaciones discutidas para datos de transporte de calor, contrastando con la conclusión obtenida para transporte de materia.

8.4.4.1.- Discusión de los resultados obtenidos para $\lambda_{ef,c}$

Sobre la base de suponer que la simulación aquí realizada, junto con la reducción de los datos, efectivamente refleja la realidad para dispersión de materia, y las expresiones 8.14b, 8.15a, 8.15b, 8.15c lo hagan para dispersión de calor, cabe plantear la posible razón para las diferencias, que contradicen la expectativa - al menos para la relación $N=5$ - de que ambos procesos de transporte sean equivalentes.

A tal efecto, en primer lugar, debe recordarse que en el capítulo 5 se discutió que los arreglos regulares conducen a predecir valores de $\lambda_{ef,c}$ muchos menores que los resultados experimentales en lechos cargados al azar. Las diferencias cuantitativas fueron presentadas por [Zambon, 2010](#) y resultan de hasta un orden de magnitud. Como se analiza en la sección 5.4.2 del capítulo 5, el efecto es introducido por el hecho que los arreglos regulares allí considerados presentan capas de pastillas paralelas al flujo de fluido, perfectamente ordenadas, generando canales longitudinales entre cada par de capas por donde el fluido circula preferencialmente y con muy escasa conexión entre canales contiguos. La figura 5.6 ilustra esta situación con el perfil radial de temperatura con sucesivos tramos de baja y elevada pendiente, estando los primeros claramente asociados con las zonas de alta porosidad, correspondientes a los canales, y los segundos con las de baja porosidad, alrededor del plano que une los centros de pastillas de cada estrato.

Si se hubiera considerado la posibilidad de que las pastillas condujeran el calor y teniendo en cuenta que aún para materiales cerámicos la relación de conductividad con respecto a un gas podrá alcanzar valores de hasta alrededor de 100, la temperatura en el interior de las mismas será aproximadamente uniforme en un valor intermedio entre la temperatura de ambos canales contiguos. Entonces, las pastillas pueden recibir calor del

fluido en el canal contiguo más caliente (por medio del coeficiente h_{fs} , capítulo 3), conducirlo con relativa facilidad a través del cuerpo de las mismas y “devolverlo” al otro canal contiguo a menor temperatura. De esta manera, las pastillas podrán actuar como un *punte térmico* entre canales pobremente interconectados, incrementando el valor de $\lambda_{ef,c}$. Tal efecto introducido por la conducción de las pastillas debe distinguirse del aporte de transporte entre pastilla y pastilla (tenido en cuenta por el parámetro $\lambda_{es,c}$ en el modelo 2R2D), y puede afirmarse que estará presente en el caso de los arreglos regulares considerados en el capítulo 5.

En contraposición, cuando las pastillas se ordenan estrictamente al azar, como en regiones bien apartadas de la pared en lechos con elevados valores de N , la sucesión hueco-pastilla en la dirección del flujo será la configuración dominante. Así, un filete de fluido emergente de un hueco enfrentará una pastilla y deberá desviarse para poder sortearla. Esto origina, la lateralización del flujo, la consecuente mezcla de filetes provenientes de distintas posiciones transversales y el incremento de $\lambda_{ef,c}$. Además, cada pastilla estará irrigada, principalmente, por la dispersión del filete que la enfrenta y en consecuencia a temperatura esencialmente uniforme. El efecto del *punte térmico* señalado para los arreglos regulares estará ausente o al menos minimizado.

Resta ahora considerar la situación en el caso simulado con $N=5$. Esta baja relación de aspecto permite que en toda la región central del lecho se presente una sucesión de mínimos y máximos de porosidad local (figura 8.4), causando que una importante cantidad de pastillas se agrupen formando un segundo estrato (adyacente al estrato sobre la pared), por un lado, y una hilera de pastillas con centros cercanos al eje del tubo, aun cuando tales disposiciones resulten con cierta irregularidad, debido a una imperfecta alineación de los centros de las pastillas, que se refleja en la atenuación de los máximos y mínimos. La posición de los máximos y mínimos locales de porosidad se indica en la figura 8.9 para el perfil de temperatura de la simulación de CFD. Tal perfil revela una secuencia de regiones de baja y elevada pendiente de la temperatura, en forma similar, cualitativamente, al caso de arreglos regulares. Sin embargo, los mismos no se encuentran estrictamente en fase con el perfil de porosidad. En este sentido, la situación más evidente es para la posición del máximo $\varepsilon_{MAX,2}$ cercano al eje, mientras que para la posición de $\varepsilon_{min,1}$, determinado por el primer estrato casi perfectamente alineado, se aprecia una máxima pendiente, de acuerdo a lo esperado. Puede concluirse que el comportamiento de un lecho al azar de $N=5$ presentará un comportamiento

intermedio entre el caso de los arreglos regulares, con la presencia y efectos de un cierto grado de canalización promovido por el perfil de porosidad, pero con la aparición de un significativo grado de lateralización del fluido, promovido por la imperfecta alineación de los centros de pastillas. Esta condición se refleja por los valores simulados de $\lambda_{ef,c}$. Los mismos son al menos entre 2 y 3 veces mayores que los valores equivalentes para arreglos regulares (Zambon, 2010), debido al significativo efecto de la lateralización. Al mismo tiempo, la permanencia de cierto grado de canalización, permite, al menos parcialmente, justificar el efecto de la relación de aspecto N reconocido en la mayoría de los trabajos específicos en la bibliografía. Finalmente, dado que las simulaciones no contemplan la participación de las pastillas, el efecto *punteo térmico* está ausente y permitiría justificar las diferencias apuntadas en la sección anterior entre los resultados experimentales de transporte de materia y calor.

8.4.4.2.- El efecto de G_c/G y propuesta tentativa para predecir $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ y $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$

La gran mayoría de las expresiones para predecir $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ o $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$, en particular aquellas discutidas en la sección 8.4.4, introducen la velocidad superficial G , promedio en el lecho, como variable para cuantificar el efecto de la convección. Sin embargo, para el canal central la medida del efecto de la convección debe estar cuantificado por su velocidad superficial G_c . Esta magnitud que se ha considerado a lo largo del presente trabajo es significativamente inferior para bajos valores de N (compárese, por ejemplo, los valores de Re_p vs. Re_{pc} en la tabla 8.7). Ello no elimina la validez de las expresiones dadas en la sección 8.4.4, puesto que puede asumirse que el factor corrector dependiente de N (e.g. $(1+19.4/N^2)$ en la ecuación 8.14a incluye implícitamente la relación G_c/G .

Varios autores (e.g. Tsotsas y Schlünder, 1988; Winterberg y colab., 2000) señalan la preferencia de expresar $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ o $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$ explícitamente en términos de G_c , o equivalentemente de Re_{pc} . Aquí se considera que ello es relevante para separar el efecto de N sobre la relación (G_c/G) del efecto que N ejerce a través del empaquetamiento del relleno, que se discutiera en la sección anterior. La relación (G_c/G) puede expresarse convenientemente en función de la relación fluidodinámica (G_1/G_c) :

$$\frac{G_c}{G} = \frac{1}{1 + [(G_1 / G_c) - 1](2N - 1) / N^2} \quad (8.16)$$

La expresión (8.13) quedaría re-formulada de la siguiente manera:

$$\left(\lambda_{ef,c} / \lambda_f \right)_{conv} = \frac{Re_{pc} Pr}{Pe_{rc,\infty}} \quad (8.17)$$

donde $Pe_{rc,\infty}$ debería coincidir con $Pe_{r,\infty}$ para elevados valores de N , dado que $G_c/G \rightarrow 1$, pero diferirá para bajos valores N .

Como resultado de la revisión bibliográfica realizada, de los resultados de la simulación por CFD y el análisis realizado con respecto al transporte convectivo en el canal central, se proponen, en esta instancia las siguientes expresiones para estimar $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ y $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$ cuando $Re_p > 100$ y para flujo de gases en lechos rellenos por esferas de igual tamaño:

$$\left(D_{e,c} / D_m \right)_{conv} = \frac{Re_{pc} Sc}{10(1 + \frac{2}{N})} \quad (8.18a)$$

$$\left(\lambda_{ef,c} / \lambda_f \right)_{conv} = \frac{Re_{pc} Pr}{9(1 + \frac{1}{2N})} \quad (8.18b)$$

Los valores de $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$ a partir de la ecuación 8.18a responden a los valores $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ aquí obtenidos por simulación con $N=5$. Usando la ecuación 8.17 con $(G_1/G_c)=1.72$ (valor promedio de los valores de simulación, tabla 8.3) para evaluar (G_c/G) , las equivalencias entre $(\lambda_{ef,c}/\lambda_f)_{conv}$ y $(D_{e,c}/D_m)_{conv}$ y entre Pr y Sc , surge a partir de las ecuaciones 8.18a y 8.13, el valor $Pe_{r,\infty}=17.6$. Este valor es muy próximo al valor promedio de **16.8**, consignado en la tabla 8.7.

Realizando un tratamiento similar entre las ecuaciones 8.18b y 8.13, para transporte de calor resulta para $N=5$ el valor $Pe_{r,\infty}=12.4$, que es totalmente compatible con los valores de las correlaciones discutidas en la sección 8.4.4.

Los valores resultantes de las ecuaciones 8.18 para $Pe_{r,\infty}$ cuando $N \rightarrow \infty$ ($Pe_{r,\infty}=10$ y $Pe_{r,\infty}=9$ para 8.18a y 8.18b, respectivamente) también guardan estrecha relación con los valores de correlaciones discutidos en la sección 8.4.4.

El factor $(1 + 2/N)$ en la ecuación 8.18a es la corrección que responde estrictamente al efecto del empaquetamiento del relleno discutido en la sección anterior, resultando 1.4 para $N=5$. Para transporte de calor, el factor análogo propuesto en la ecuación 8.18b resulta de 1.1 para $N=5$. La diferencia puede explicarse conceptualmente aceptando el efecto del *punte térmico* discutido en la sección 8.4.4.1, ausente para transporte de materia.

8.5.- Conclusiones del Capítulo

En base a resultados de bibliografía para la distribución del relleno en lechos con relaciones de aspecto $N < 5$, se evaluó la posibilidad de aplicación del modelo 2R2D en tal rango de valores de N . Se pudo concluir que tal posibilidad implicaría significativos esfuerzos adicionales para la caracterización de los parámetros estructurales y de transporte del modelo, como así también para la comprobación de su potencialidad a los fines de simular el comportamiento de lechos catalíticos.

En el resto del capítulo se presentaron y analizaron las simulaciones realizadas por CFD para un lecho cilíndrico relleno al azar con relación $N = 5$ descrito en el capítulo 7.

La reducción de los datos de simulación por CFD para estimar los parámetros G_1/G_c , h_{wf} , h_f y $\lambda_{ef,c}$ fue detallada en la sección 8.3. El objetivo primario fue evaluar si tales estimaciones resultan comparables con los valores obtenidos a partir de las correlaciones desarrolladas para arreglos regulares en el capítulo 5. Debido a que estas correlaciones no incluyeron al parámetro $\lambda_{ef,c}$, los resultados de CFD fueron analizados tomando como referencia las correlaciones de bibliografía.

La porosidad global, las porosidades en el canal de pared y central, y así como el perfil de porosidad se encuentran dentro de los valores esperados para una relación $N=5$. El perfil de porosidad indica un primer estrato de pastillas sobre la pared altamente ordenado, un segundo estrato bien identificable, pero con una apreciable dispersión en la posición de los centros y una hilera de pastilla centrada aproximadamente en el eje. Los valores de G_1/G_c , h_{wf} , h_f obtenidos por simulación resultaron, en general, aceptablemente predichos por las correlaciones del capítulo 5, lo cual aporta evidencia para emplearlas como una sólida referencia para predecir los parámetros del modelo 2R2D en el caso de lechos rellenos al azar. Sin embargo, se ha propuesto llevar a cabo un proceso evolutivo para ajustar las correlaciones a medida que se incorporan datos en lechos rellenos al azar. De esta forma, con la información disponible al presente, para

lechos rellenos al azar se propone aplicar la ecuación 8.11 para estimar G_1/G_c y la ecuación 8.12 para h_{wf} . En cambio, para la estimación de h_f resulta apropiado conservar la ecuación 5.9 obtenida para los arreglos regulares en el capítulo 5.

A fin de analizar los valores de $\lambda_{ef,c}$ obtenidos a partir de la simulación para $N=5$, se consideró en primer lugar que la conducción a través de los huecos resulta despreciable frente a los valores medidos, por lo que los mismos corresponden estrictamente al aporte convectivo. Por otro lado, dado que en las simulaciones se consideró comportamiento adiabático para las pastillas, las mismas no participan en el proceso de transporte. Por lo tanto, considerando la similitud entre los procesos de transporte de materia y energía, los resultados de las simulaciones para $\lambda_{ef,c}/\lambda_f$ cuantifican la relación $D_{e,c}/D_m$ respecto del coeficiente de dispersión de materia $D_{e,c}$. La comparación con datos experimentales fue llevada a cabo mediante las correlaciones propuestas en base a dichos datos. Para el coeficiente de dispersión de materia se identificó una sola correlación que tiene en cuenta la relación de aspecto N . Con respecto a la misma, los resultados de simulación mostraron una buena concordancia, con desviaciones de alrededor del 10%. Para transporte de calor, se dispone de mayor variedad de correlaciones y la comparación arrojó valores significativamente menores de los resultados de simulación. Se postula que la diferencia de comportamiento entre ambos procesos de transporte se debe a la interacción entre la conducción térmica de las pastillas y el transporte convectivo en el fluido. Tal mecanismo solo resultaría de significación a bajas relaciones de aspecto N , cuando el acomodamiento de las pastillas en la región central del lecho guarda un significativo grado de estratificación. Para el caso simulado con $N=5$, dicho mecanismo podría ser aplicable, teniendo en cuenta que las pastillas en el interior de lecho se agrupan en una corona bien identificable, aunque imperfecta, y en una hilera aproximadamente centrada en el eje.

Finalmente, como producto del análisis de la información de bibliografía, de los resultados de simulación y en consideración a las diferencias encontradas para el transporte radial de materia y energía, se proponen en primera aproximación las expresiones 8.18 para estimar la dispersión radial convectiva de energía $\lambda_{ef,c}/\lambda_f$ y de materia ($D_{e,c}/D_m$), con inclusión del efecto de la relación de aspecto N .

Apéndice 8.1: Efecto de la curvatura de la pared sobre G_1

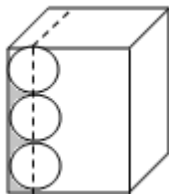
En la sección 8.4.1 se compararon los valores de la relación G_1/G_c a partir de las simulaciones de CFD para un lecho relleno al azar con $N=5$ y las predicciones a partir de la correlación obtenida con arreglos regulares entre paredes planas, esto es $N \rightarrow \infty$. Esta última caracteriza al canal de la pared sólo por su porosidad ε_1 y por lo tanto la comparación se realizó para el valor $\varepsilon_1=0.538$ observado en el segmento de trabajo del lecho con $N=5$. Sin embargo, para un mismo valor de ε_1 los lechos con valores finitos de N presentan una superficie de fricción superior al caso de paredes planas, debido a la curvatura de la pared. Para evaluar si este efecto puede resultar significativo, aquí se comparará el valor de radio hidráulico R_h en ambos casos, teniendo en cuenta que es frecuente expresar la caída de presión en términos de esta magnitud. Para los valores relativamente altos de Re_p , empleados, se puede suponer que los efectos inerciales o turbulentos son controlantes, y entonces resultará

$$\Delta P \propto G^2 / R_h \tag{A8.1}$$

El radio hidráulico R_h es la relación entre el volumen de huecos y la superficie total de sólidos. Se expresará R_h para el canal de la pared, comprendido entre la pared y un radio de pastilla desde la misma, en el caso de paredes planas y paredes curvas.

Paredes planas

El volumen de huecos por unidad de superficie de pared es $(\varepsilon_1 * \frac{1}{2} D_p)$. La superficie de sólidos, incluyendo la de la propia pared, por unidad de superficie de pared es $(1 + \frac{1}{2} \pi D_p^2 n_p)$. Realizando el cociente y expresando $n_p^* = \frac{6}{\pi} (1 - \varepsilon_1)$,



$$R_h = \frac{\varepsilon_1 D_p}{6(1 - \varepsilon_1) + 2} \tag{A8.2}$$

Figura A8.1.1: Esquema primer estrato frente a paredes planas.

Paredes curvas

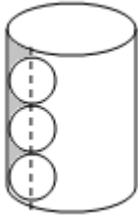
El volumen de huecos por unidad de superficie de pared es:

$$\varepsilon_1 [\rho_t^2 - \rho_c^2] / (2\rho_t) = \frac{1}{4} D_p \varepsilon_1 (2N - 1) / N$$

La superficie de sólidos, incluyendo la de la propia pared, por unidad de superficie de pared es:

$$1 + \omega \pi D_p^2 n_p (\rho_t - \rho_c) / \rho_t = 1 + \omega \pi n_p^* (N - 1) / N$$

Realizando el cociente y expresando $\omega n_p^* = \frac{3}{2\pi} (1 - \varepsilon_1) (2N - 1) / (N - 1)$ se obtiene



$$Rh = \frac{\varepsilon_1 D_p}{6(1 - \varepsilon_1) + 4N / (2N - 1)} \quad (A8.3)$$

Figura A8.1.2: Esquema primer estrato frente a paredes curvas.

Para el caso estudiado, $\varepsilon_1=0.538$, $N=5$, el radio hidráulico para paredes planas (ec. A8.2) resulta 1.047 veces el valor para paredes curvas (ec. A8.3). A partir de la ecuación A8.1, la velocidad másica G_I en el canal con paredes planas resultará $(1.047)^{0.5}=1.023$ veces el valor para una pared curva con $N=5$, suponiendo el mismo valor de ΔP .

CAPITULO 9

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

9.1 Relevancia de los objetivos alcanzados

9.2 Tareas realizadas

9.3 Sugerencias para la continuación de los trabajos de investigación en la temática

CAPITULO 9

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

9.1.- Relevancia de los objetivos alcanzados

En este trabajo de tesis se formuló un modelo bidimensional con el objetivo de proponer una alternativa para la representación apropiada de la transferencia de calor en reactores catalíticos multitubulares. El modelo, que en su estado actual se formuló para relleno constituido por partículas esféricas, es un modelo bidimensional de dos zonas, identificado como modelo 2R2D. La característica básica del modelo, es la identificación espacial de las resistencias térmicas relacionadas con la primera capa de partículas.

La fluidodinámica computacional se utilizó como herramienta para la obtención de información confiable sobre diversos aspectos del comportamiento de lechos rellenos. Esta técnica constituyó una metodología de *experimentación virtual*, que proporcionó los campos de velocidad y temperatura para su posterior tratamiento y desarrollo de correlaciones predictivas para los parámetros fluidodinámicos y térmicos del modelo 2R2D.

Con el fin de contextualizar el trabajo de modelado de lechos fijos de baja relación de aspecto que constituyó el eje de la presente tesis, se incluyó una síntesis de los principales enfoques y modelos que se pueden utilizar en el modelado de reactores catalíticos de lecho fijo. Debido a ciertas limitaciones de los modelos clásicos, particularmente del modelo S2D, se consideró la alternativa de modelos de dos zonas para describir el comportamiento del lecho (capítulo 2). Sobre esta base, el modelo 2R2D formulado discrimina los diferentes efectos concentrados de las resistencias térmicas sobre la pared ($1/h_w$) del modelo S2D y los localiza de acuerdo a la distribución de sólidos en el lecho, considerablemente ordenada en las cercanías de la pared del recipiente/tubo. En este sentido, se identificó claramente un canal de fluido desde la pared hasta una profundidad (distancia radial) $D_p/2$ y una capa de partículas en contacto con la pared.

Se discutió la significación y posibilidad de evaluar los parámetros térmicos efectivos de transporte que introduce el modelo 2R2D. Se concluyó que la predicción de

la mayoría de dichos parámetros ha sido reportada en bibliografía, pudiendo predecirse en forma directa o bien a través de relaciones desarrolladas específicamente. Las excepciones más significativas fueron los coeficientes h_{wf} y h_f .

A partir de simulaciones CFD se llevó a cabo una estimación preliminar de los coeficientes h_{wf} , h_f y la relación entre las velocidades máxicas superficiales entre ambos canales G_1/G_c , utilizando lechos rellenos con arreglos regulares de esferas contenidas entre paredes planas. Se analizó el caso de partículas no conductoras para aislar los mecanismos de transferencia de calor por convección. Se obtuvieron correlaciones para los tres parámetros en función de las propiedades estructurales básicas y números adimensionales pertinentes.

Se evaluaron las diferencias entre las predicciones obtenidas mediante el modelo 2R2D propuesto y el modelo 2SD, contextualizando dicha evaluación en el comportamiento de un reactor multitubular de lecho relleno catalítico en el cual se procesa la reacción de síntesis de amoníaco. Las diferencias entre ambos modelos se han discutido principalmente en términos de diferentes valores de temperaturas predichos en el punto caliente. El análisis de las características de ambos modelos y de los resultados numéricos permitió concluir que la principal causa de las diferencias de temperatura es la gran resistencia térmica $1/h_f$ entre los canales del modelo 2R2D. La comparación numérica de los modelos 2R2D y S2D para el esquema cinético irreversible mostró que las temperaturas promedio y en el eje en el punto caliente, probablemente serán muy diferentes bajo condiciones operativas razonables y se incrementan monótonamente a medida que se elevan las temperaturas de referencia $T_0 = T_w$, hasta el punto de reacción encendida. Las conversiones finales también difieren significativamente. Las diferencias entre los modelos siguen siendo considerables en el rango de relación de aspecto $5 < N < 10$, y decrecen significativamente sólo cuando $N = 20$. La consideración de la reversibilidad de la reacción puso en evidencia diferencias significativas entre ambos modelos a nivel de los valores de temperatura promedio y en el eje, en la posición del punto caliente aún para $N=5$.

Con el fin de comparar el comportamiento de lechos rellenos al azar con el predicho a partir de las correlaciones obtenidas para arreglos regulares entre paredes planas, se analizaron las simulaciones realizadas por CFD para un lecho cilíndrico relleno al azar con relación $N=5$. Se propuso llevar a cabo un proceso evolutivo para

ajustar las correlaciones a medida que se incorporen datos en lechos rellenos al azar. De esta forma, con la información disponible para $N=5$ en lechos rellenos al azar, se ajustaron nuevas correlaciones para estimar la relación G_1/G_c y el parámetro h_{wf} . En cambio para el parámetro h_f resulto apropiado conservar la correlación obtenida para arreglos regulares.

Los valores del parámetro $\lambda_{ef,c}$, que se obtuvieron de los resultados de CFD fueron analizados tomando como referencia las correlaciones preexistentes en bibliografía. A partir de dicho análisis y de las diferencias encontradas para el transporte radial de materia y energía se propuso una expresión para estimar la dispersión radial convectiva de energía ($\lambda_{ef,c}/\lambda_f$) y de materia ($D_{e,c}/D_m$), con inclusión del efecto de la relación de aspecto N .

De lo expuesto, puede concluirse que el modelo propuesto representa una mejora significativa en la calidad de los resultados de las simulaciones de lechos fijos con baja relación de aspecto, con relación a la realizada por modelos clásicos S2D. El enfoque propuesto en esta tesis permite evaluar adecuadamente la magnitud de los diferentes mecanismos presentes que determinan la velocidad de transferencia de calor entre zonas y entre el lecho y la pared. De esta manera, se puede construir un esquema más realista que el preexistente, con respecto a la cuantificación de los diferentes fenómenos locales ocurrentes y su influencia en el comportamiento global del reactor.

9.2.- Tareas realizadas

La labor realizada puede resumirse puntualizando las distintas etapas cumplidas:

- Descripción y clasificación de los modelos que se pueden utilizar en el modelado de reactores catalíticos de lecho fijo. Análisis de las limitaciones de los modelos clásicos, particularmente S2D. Revisión, discriminación y definición de las principales características de los modelos bidimensionales de dos zonas propuestos en la literatura.

- Formulación de un nuevo modelo heterogéneo de dos zonas (2R2D), para lechos rellenos de partículas esféricas catalíticas de tamaño uniforme con flujo de fluido. La descripción e hipótesis del modelo se presentan en el capítulo 3.
- Descripción de una metodología de resolución para la simulación de lechos fijos en base a la utilización de CFD. Síntesis de etapas y modalidades para: construcción de la celda de cálculo, generación de la malla e implementación de la simulación (capítulo 4).
- Análisis y definición del esquema estructural (geometría) de lechos estructurados conformado por partículas esféricas y dispuestas según arreglos geométricos regulares. Construcción de celdas de cálculo (utilización de fronteras repetitivas). Descripción de la generación de la malla y la independencia del mallado (condición de validación y parámetros de aceptación de la densidad de la malla). Selección del modelo de turbulencia y de los diferentes parámetros que rigen la simulación numérica (capítulo 4).
- Desarrollo de correlaciones para el cálculo de los parámetros del modelo 2R2D a partir de los valores obtenidos de las simulaciones por CFD para arreglos regulares. Evaluación de la aplicabilidad de los resultados de los coeficientes h_{wf} y h_f a lechos rellenos al azar. Comparación de los coeficientes de transferencia de calor del modelo 2R2D aplicados a lechos rellenos al azar, con correlaciones de literatura (capítulo 5).
- Comparación entre el modelo 2R2D propuesto y el modelo S2D frente a una situación de alta exigencia en lo referente a la generación y transferencia de calor. Análisis del comportamiento de un reactor multitubular de lecho relleno catalítico destinado a la síntesis de amoníaco. Los resultados numéricos se vuelcan en el capítulo 6.
- Construcción de una fracción de un lecho relleno aleatorio de baja relación de aspecto $N=5$, conformada por esferas de un único tamaño contenidas en un tubo circular. Aplicación de un algoritmo numérico para la construcción de la

estructura del lecho (geometría). Análisis de diferentes técnicas para el tratamiento de los puntos de contacto en la geometría. Aplicación de la metodología denominada enfoque local (construcción de *caps*) para la modificación en las áreas de contacto. Generación de la malla de cálculo para el caso de estudio (capítulo 7).

- Estimación de los parámetros G_1/G_c , h_{wf} , h_f y $\lambda_{ef,c}$ a partir de los datos obtenidos de las simulaciones por CFD para el lecho relleno aleatorio de relación de aspecto $N=5$. Evaluación y comparación de los valores calculados a partir de las correlaciones desarrolladas para arreglos regulares. Desarrollo de modificaciones de ajuste en las expresiones para estimar la relación G_1/G_c y el parámetro h_{wf} . Análisis de la información bibliográfica y de los resultados generados por CFD para los valores $\lambda_{ef,c}$.

9.3.- Sugerencias para la continuación de los trabajos de investigación en la temática

En base al análisis y las conclusiones obtenidas en este trabajo, pueden señalarse algunos aspectos que podrían constituir el eje de la continuación de actividades en el tema:

Un aspecto que debería abordarse es el análisis de lechos rellenos aleatorios con valores de relación de aspecto diferentes a $N=5$ a fin de extraer conclusiones con lechos de diferentes porosidades. En tal sentido, se prevé llevar a cabo la simulación del comportamiento de lechos rellenos al azar con distintas relaciones de aspecto ($6 \leq N \leq 15$) para la determinación de información de parámetros estructurales y aplicar los resultados en la evaluación de los parámetros del modelo 2R2D. Esto permitiría ajustar las correlaciones desarrolladas para el cálculo de dichos parámetros.

Por otra parte, si bien el modelo 2R2D propuesto incluye en su concepción la contribución del sólido, en este estudio (capítulos 5 y 9) se determinaron los parámetros del modelo considerando partículas no conductoras (para aislar los mecanismos de transferencia de calor por convección). Un próximo estudio destinado al efecto del

aporte del sólido al transporte de calor para diferentes valores de la relación de aspecto, enriquecería el resultado del modelado. Ello requerirá realizar el correspondiente mallado de las partículas sólidas.

Un tópico importante que podría abordarse es la comparación de los resultados del modelo 2R2D con valores experimentales de transferencia de calor, con y sin reacción química. Un interés particular revestiría ampliar la comparación del modelo 2R2D con otros modelos presentados en bibliografía considerando la contribución del relleno al transporte de calor y la reacción catalítica apropiadamente evaluada.

Adicionalmente, es de interés llevar a cabo el análisis de la potencial influencia de la geometría del catalizador, desarrollando las simulaciones para diferentes pastillas de geometrías diversas tales como: cilindros, cilindros con agujeros internos, cilindro con lóbulos, entre otras alternativas empleadas comercialmente.

NOMENCLATURA

a_v	= $(1 - \varepsilon) 6/D_p$, área interfacial fluido-sólido por unidad de volumen de lecho, m^{-1}
Bi	= $h D_p/\lambda_{ef}$, número de Biot
C	concentración molar de la especie clave en el fluido, $mol\ m^{-3}$
\bar{C}	concentración molar media radial de la especie clave, $mol\ m^{-3}$
C_l	concentración molar de la especie clave en el canal de pared, $mol\ m^{-3}$
C^s	concentración molar de la especie clave en la superficie de la partícula, $mol\ m^{-3}$
$C_{c,l}$	concentración molar de la especie clave del canal central en $\rho = \rho_c$, $mol\ m^{-3}$
c_{pf}	calor específico para el fluido, $J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
D_e	coeficiente de dispersión radial de materia, $m^2\ s^{-1}$
D_m	difusividad molecular, $m^2\ s^{-1}$
D_t	diámetro de tubo, m
D_p	diámetro de partícula, m
f	factor de actividad del catalizador
G	velocidad másica superficial axial (promedio en la sección transversal del lecho), $kg\ m^{-2}\ s^{-1}$
H	longitud del tubo, m / altura de la celda de simulación por CFD, m
h_f	coeficiente de transferencia de calor del fluido entre los canales de pared y central para el modelo 2R2D, $W\ m^2\ K^{-1}$
h_{fs}	coeficiente de transferencia de calor fluido-partícula, $W\ m^2\ K^{-1}$
h_s	coeficiente de transferencia de calor entre hemisferios de partícula, $W\ m^2\ K^{-1}$
h_{sL}	coeficiente de transferencia de calor entre el sólido de la región central y las partículas de la primera capa, $W\ m^2\ K^{-1}$
h_w	coeficiente de transferencia de calor en la pared para el modelo S2D, $W\ m^2\ K^{-1}$

h_w^0	valor de h_w calculado sin velocidad de generación de calor, $W m^2 K^{-1}$
h_w^Q	valor de h_w calculado con velocidad uniforme de generación de calor, $W m^2 K^{-1}$
h_w^*	coeficiente pelicular de transferencia de calor en la pared en las ecuaciones 5.11 y 5.12a, $W m^2 K^{-1}$
h_m	coeficiente de transferencia de calor a través de las restricciones impuestas por el lecho en $D_p/2$ en las ecuaciones 5.11 y 5.12a, $W m^2 K^{-1}$
$h_{w,0}$	coeficiente de transferencia de calor en la pared debido a las contribuciones conductivas, $W m^2 K^{-1}$
h_{wf}	coeficiente de transferencia de calor pared-fluido, $W m^2 K^{-1}$
h_{ws}	coeficiente de transferencia de calor pared-partícula, $W m^2 K^{-1}$
k	coeficiente específico de velocidad de reacción directa en la síntesis de amoníaco, $mol atm^{-1.5} m^{-3} s^{-1}$
k'	coeficiente específico de velocidad de reacción inversa en la síntesis de amoníaco, $mol atm^{0.5} m^{-3} s^{-1}$
L	distancia entre planos consecutivos que contienen puntos de contacto, m
N	$= D_t/D_p$, relación de aspecto
N_p	número de partículas
Nu	$= hD_p/\lambda_f$, número de Nusselt
$Nu_{w\Sigma}$	número de Nusselt calculado a partir de ecuación 5.15
n_p	número de centros de partículas en la primera capa por unidad de área de la superficie cilíndrica de radio ρ_c , m^{-2}
n_p^*	$= n_p D_p^2$, densidad normalizada de centros de partículas
P	presión, Pa
Pe	$= c_{pf} G D_p/\lambda_f$, número de Peclet térmico
Pe_m	$= G D_p/\delta_f D_m$, número de Peclet de materia
Pr	$= c_{pf} \mu_f/\lambda_f$, número de Prandtl

Q	velocidad de generación de calor, $W m^{-3}$
q	flujo de calor, $W m^{-2}$
Re_p	$= GD_p/\mu_f$, número de Reynolds de partícula
R_h	radio hidráulico, m
R_t	radio del tubo, m
S	sección transversal total del lecho, m^2
Sc	$= \mu_f/\delta_f D_m$, número de Schmidt
r_e	velocidad de reacción efectiva (por unidad de volumen de catalizador), $mol m^{-3} s^{-1}$
r^s	velocidad de reacción en condiciones de la superficie externa de la partícula (por unidad de volumen de catalizador), $mol m^{-3} s^{-1}$
T	temperatura en el fluido, K
\bar{T}	temperatura media radial evaluada en los modelos unidimensionales, K
$T_{c,1}$	temperatura en la región central en $\rho = \rho_c$, K
$T_{c,L}^s$	temperatura en la región central del sólido en $\rho = \rho_L$, K
T^s	temperatura de la superficie de partícula, K
T_1	temperatura media de mezclado de taza en el canal de pared, K
T_w	temperatura de la pared del tubo, K
u_t	$= \sqrt{\tau_w/\delta_f}$, velocidad característica sobre la pared, $m s^{-1}$
u	velocidad axial, $m s^{-1}$
V_p	volumen de partícula, m^3
W	ancho del lecho, m
x	$= 1 - C/C_1$ conversión de N_2 / coordenada transversal paralela a la pared, m
y	coordenada transversal normal a la pared, m
y^*	$= y/D_p$, distancia adimensional desde la pared

y_L^*	valor de y^* donde comienza la región central de sólidos en el modelo 2R2D (ecuación 3.4a)
y_w^*	extensión de la región de pared para modelos bidimensionales de dos zonas (tabla 2.6)
y^+	$= \rho u_t y / \mu$, donde y es la distancia adimensional normal a la pared
z	coordenada axial, m
z^*	$= z/H$ coordenada axial adimensional
z_0	posición de ingreso al interior de la celda de simulación CFD, m

Símbolos Griegos

α_f	coeficiente de transferencia de masa del fluido entre los canales de pared y central, $m\ s^{-1}$
α_{fs}	coeficiente de transferencia de masa fluido-partícula, $m\ s^{-1}$
β	autovalor positivo
ΔH	calor de reacción, $J\ mol^{-1}$
δ_f	densidad del fluido, $kg\ m^{-3}$
ε	porosidad (genérica o promedio en la sección transversal del lecho)
$\varepsilon(y^*)$	perfil radial de porosidad
ζ	posición axial en el interior de la celda periódica
η	factor de efectividad interno
λ_e	conductividad térmica efectiva radial en el lecho, $W\ m^{-1}K^{-1}$
λ_{e0}	aporte estático (sin flujo de fluido) a la conductividad efectiva λ_e , $W\ m^{-1}K^{-1}$
λ_{ef}	aporte del fluido a la conductividad efectiva λ_e , $W\ m^{-1}K^{-1}$
λ_{es}	aporte de las partículas a la conductividad efectiva λ_e , $W\ m^{-1}K^{-1}$
λ_f	conductividad térmica del fluido, $W\ m^{-1}K^{-1}$

λ_p	conductividad térmica de las partículas, $\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$
μ_f	viscosidad del fluido, $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
μ_1	autovalor resultante de la resolución de la ecuación 8.3
ρ	$= \rho_t - D_p y^*$, coordenada radial, m
ρ_t	$= D_t/2$
ρ^*	$= \rho/R_t$, coordenada radial adimensional
ρ_c	coordenada radial en $y^* = 1/2$, m
τ	tensor esfuerzo de corte, Pa
ν	viscosidad cinemática, $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
ω	fracción de volumen de partícula intersectada en $0 < y^* < 1/2$

Subíndices y Supraíndices

1	cantidad promedio evaluada en $1 < y^* < 1/2$
2	cantidad promedio evaluada en $1/2 < y^* < y_L^*$
2R	evaluado por el modelo 2R2D
ax	cantidad evaluada en el eje del tubo
c	relativo al canal central o a la región central de sólidos
G	cantidad evaluada globalmente
I	cantidad evaluada a la entrada del reactor
L	cantidad evaluada en y_L^*
SO	evaluado por el modelo S2D usando el coeficiente h_w^0
SQ	evaluado por el modelo S2D usando el coeficiente h_w^Q
t	cantidad evaluada en la pared del tubo
-	cantidad promedio de mezclado de taza
w	cantidad evaluada en la pared del tubo

o cantidad evaluada en las condiciones de entrada empleadas para las simulaciones CFD

Símbolos especiales

[·] valores promediados en $z \in [z_0, z_0 + H]$ y/o $\rho \in [\rho_c, \rho_t]$

Acrónimos

1D modelo unidimensional
2D modelo bidimensional
2H modelo bidimensional heterogéneo
1P modelo unidimensional pseudo-homogéneo
2P modelo bidimensional pseudo-homogéneo
2R2D modelo heterogéneo de dos zonas
Ccp arreglo cúbico compacto
CFD fluidodinámica computacional
DEM método de elementos discretos
Hcp arreglo hexagonal compacto
LES simulación de remolinos grandes
LF lecho fijo
MFV método de volúmenes finitos
Orp arreglo ortorrómbico
RANS *Reynolds-Averaged Navier Stokes*
RCLF reactor catalítico de lecho fijo
Scp arreglo cúbico simple
S2D modelo estándar bi-dimensional pseudo-homogéneo
TDLA teoría de dispersión transversal al azar

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- ANSYS, Inc., ANSYS FLUENT 14.5, "*Theory Guide*" (2014).
- Ahmed, M. y R.W. Fahien. "Tubular reactor design-I: two-dimensional model". *Chem. Eng. Sci.*, 35, 889 (1980).
- Atmakidis, A. y E. Kenig. "CFD-Based analysis of the wall effect on the pressure drop in packed beds with moderate tube/particle diameter ratios in the laminar flow regime". *Chem. Eng. J.*, 155, 404 (2009).
- Bai, H., Theuerkauf, J., Gillis, P. y P. Witt. "A Coupled DEM and CFD Simulation of Flow Field and Pressure Drop in Fixed Bed Reactor with Randomly Packed Catalyst Particles". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 48, 4060 (2009).
- Baron, T. "Generalized Graphical Method for the Design of Fixed Bed Catalytic Reactors". *Chem. Eng. Prog.*, 48, 118 (1952).
- Barreto, G.F. y G.D. Mazza. "On the use of incremental quotients in Michelsen's method for stiff ordinary differential equations". *Comput. Chem. Eng.*, 13, 967 (1989).
- Barreto, G.F. y G.M. Martinez. "Prediction of overall heat transfer coefficients for the simulation of multitubular catalytic fixed bed reactors". *Trend in Heat, Mass & Momentum Transfer*, 2, 1 (1992).
- Bauer, R. y E.U. Schlünder. "Effective radial thermal conductivity of packing in gas flow. Part II Thermal conductivity of the packing fraction without gas flow". *Int. Chem. Eng.*, 18, 189 (1978).
- Bauer, R. y E.U. Schlünder. "Effective radial thermal conductivity of packings in gas flow. Part I. Convective Transport Coefficient". *Int. Chem. Eng.*, 18, 181 (1978 a).
- Benham, M., Dixon, A.G., Nijemeisland, M. y E.H. Stitt. "A new approach to fixed bed radial heat transfer modeling using velocity fields from computational fluid dynamics simulations". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 52, 15244 (2013).

- Bey, O. y G. Eigenberger. "Fluid flow through catalyst filled tubes". *Chem. Eng. Sci.*, 52, 1365 (1997).
- Bey, O. y G. Eigenberger. "Gas flow and heat transfer though catalyst filled tubes". *Int. J. Therm. Sci.*, 40, 152 (2001).
- Borkink, J.G.H. y K.R. Westerterp. "Significance of the radial porosity profile for the description of heat transport in wall-cooled packed beds". *Chem. Eng. Sci.*, 49, 863 (1994).
- Botterill, J. S. M y A. O.O. Denloye. "A theoretical model of heat transfer to a packed or quiescent fluidized bed". *Chem. Eng. Sci.*, 33, 509 (1978).
- Brötz, W. "Untersuchungen über wärmeleitung, stofftransport und druckabfall in durchströmten schüttungem". *Chem. Eng. Technol.*, 23, 408 (1951).
- Calis, H.P., Nijenhuis, J., Paikert, B.C., Dautzenberg, F.M. y C.M. van den Bleek. "CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing". *Chem. Eng. Sci.*, 56, 1713 (2001).
- Cengel, Y.A, y J.M. Cimbala. "Mecánica de los fluidos, fundamentos y aplicaciones". *Mc Graw-Hill, México* (2006).
- Coberly, C.A. y W.R. Marshall. "Temperature gradients in gas streams flowing through fixed granular beds". *Chem. Eng. Prog.*, 47, 141 (1951).
- Cundall, P.A. y O.D.L. Strack. "A discrete numerical model for granular assemblies". *Geotechnique*, 29, 47 (1979).
- Deans, H.A y L. Lapidus. "A computational model for predicting and correlating the behavior of fixed-bed reactors: I. Derivation of model for nonreactive system, II. Extension to chemically reactive system". *AIChE J.*, 6, 656 (1960).
- Delgado, J.M. "Longitudinal and Transverse Dispersion in Porous Media". *Chem. Eng. Res. Des.*, 85, 1245 (2007).
- de Wash, A.P. y G. F. Froment. "A two dimensional heterogeneous model for fixed bed catalytic reactors". *Chem. Eng. Sci.*, 26, 629 (1971).
- Dixon, A.G. y D.I. Cresswell. "Theoretical Prediction of Effective Heat Transfer Parameters in Packed Beds". *AIChE J.*, 25, 663 (1979).

- Dixon, A.G. y L.A. Labua. "Wall-to-fluid coefficients for fixed bed heat and mass transfer". *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 28, 879 (1985).
- Dixon, A. "Wall and Particle-Shape Effects on Heat Transfer in Packed Beds". *Chem. Eng. Commun.*, 71, 217 (1988).
- Dixon, A. G. "Correlations for Wall and Particle Shape Effects on Fixed Bed Bulk Voidage". *Can. J. Chem. Eng.*, 86, 705 (1998).
- Dixon, A.G., Nijemeisland, M. y E.H. Stitt. "Packed tubular reactor modeling and catalyst design computational fluid dynamics". *Adv. Chem. Eng.*, 31, 307 (2006).
- Dixon, A.G., Walls, G., Stanness, H., Nijemeisland, M. y E.H. Stitt. "Experimental validation of high Reynolds number CFD simulations of heat transfer in a pilot-scale fixed bed tube". *Chem. Eng. J.*, 200-202, 344 (2012).
- Dixon, A.G. "Fixed bed catalytic reactor modeling - The radial heat transfer problem". *Can. J. Chem. Eng.*, 90, 507 (2012).
- Dixon, G., Nijemeisland, M. y E. Stitt. "Systematic mesh development for 3D CFD simulation of fixed beds: Contact points study". *Com. Chem. Eng.*, 48, 135 (2013).
- Dixon, A.G. "Local transport and reaction rates in fixed bed reactor tube: Endothermic steam methane reforming". *Chem. Eng. Sci.*, 168, 156 (2017).
- Dudukovic, M.P, Larachi, F. y P.L. Mills. "Multiphase catalytic reactors: a perspective on current knowledge and future trends". *Catalysis Reviews*, 44, 123 (2002).
- Eppinger, T., Seidler, K. y M. Kraume. "DEM-CFD simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios". *Chem. Eng. J.*, 166, 324 (2011).
- Fahien, R.W. y J.M. Smith. "Mass Transfer in Packed Beds". *AIChE J.*, 1, 28 (1955).

- Freiwald, M. G. y W. R. Paterson. "Accuracy of Model Predictions and Reliability of Experimental Data for Heat Transfer in Packed Beds". *Chem. Eng. Sci.*, 47, 1545 (1992).
- Freund, H., Zeiser, T., Heber, F., Klemm, E., Brenner, G., Durst, F. y G. Emig. "Numerical simulations of single phase reacting flows in randomly packed fixed-bed reactors and experimental validation". *Chem. Eng. Sci.*, 58, 903 (2003).
- Froment, G.F. y K. B. Bischoff. "Chemical reactor analysis and design". *John Wiley & Sons, 2^{da} Edition, Nueva York* (1990).
- Giese, M., Rottschäfer, K. y D. Vortmeyer. "Measured and modeled superficial flow profiles in packed beds with liquid flow". *AIChE J.*, 44, 484 (1998).
- Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M.A., Recasens, F. y E. Egusquiza. "Influence of the turbulence model in CFD modeling of wall-to-fluid heat transfer in packed beds". *Chem. Eng. Sci.*, 60, 1733 (2005).
- Guardo, A., Coussirat, M., Recasens, F., Larrayoz, M. y X. Escaler. "CDF study on particle-to-fluid heat transfer in fixed bed reactors: Convective heat transfer at low and high pressure". *Chem. Eng. Sci.*, 61, 4341 (2006).
- Gunn, D.J. "Transfer of heat or mass to particles". *Int. J. Heat Mass Transfer*, 21, 467 (1978).
- Gunn, D.J., Ahmad, M.M. y M.N. Sabri. "Radial heat transfer to fixed beds of particles". *Chem. Eng. Sci.*, 42, 2163 (1987).
- Hlavacek, V y J. Votruba. "Chemical reactor theory. A review". *Prentice Hall, New York* (1970),
- Hofmann, H. *Ger. Chem. Eng.*, 2, 258 (1979).
- Irazoqui, H., Isla, M., Brandi, R. y A. Cassano. "Packed-Bed Photocatalytic Reactors. A packing structure model and its experimental validation with Computerized Tomography". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43, 1430 (2004).
- Jeschar, R. "Wärmerückgewinnung in Industrieöfen". *Proceedings des 29. Metallurgischen Seminars der Gesellschaft Deutscher Metallhütten- und Bergleute*, Schwerin (1993).

- Joshi, J. y V. Ranade. "Computational fluid dynamics for designing process equipment: expectations, current status and path forward". *Ind. Eng. Chem. Res.*, 42, 1115 (2003).
- Klerk, A. "Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratio". *AIChE J.*, 49, 2022 (2003).
- Kunii, D., Suzuki, M. y N. Ono. "Heat and mass transfer from wall surface to packed beds". *Proceedings of Symposium on Heat and Mass Transfer, Minsk, USSR* (1968).
- Kuroki, M., Ookawara, S., Street, D. y K. Ogawa. "High fidelity CFD modeling of particle-to-fluid heat transfer in packed bed reactors". *Proceedings of European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6), Copenhagen* (2007).
- Legawiec, B. y D. Ziólkoeski. "Structure, voidage and effective thermal conductivity of solids within near-wall region of beds packed with spherical pellets in tubes". *Chem. Eng. Sci.*, 49, 2513 (1994).
- Legawiec, B. y D. Ziółkowski. "Mathematical simulation of heat transfer within tubular flow apparatus with packed bed by a model considering system inhomogeneity". *Chem. Eng. Sci.*, 50, 673 (1995).
- Lemcoff, N.O., Pereira Duarte, S. I. y O.M. Martínez. "Heat transfer in packed bed". *Rev. Chem. Eng.*, 6, 229 (1990).
- Li, C. H. y B. Finlayson. "Heat transfer in packed beds- A reevaluation". *Chem. Eng. Sci.*, 32, 1055 (1977).
- Magnico, P. "Pore-scale simulations of unsteady flow and heat transfer in tubular fixed beds". *AIChE J.*, 55, 849 (2009).
- Mariani, J.N., Mazza, G.D., Martínez, O.M. y G.F. Barreto. "The distribution of particles in cylindrical packed bed" . *Trends in Heat, Mass & Momentum Transfer*, 4, 95 (1998).
- Mariani, N. J., Salvat, W. L., Martínez, O.M. y G.F. Barreto. "Packed bed structure. Evaluation of radial particle distribution". *Can. J. Chem. Eng.*, 80, 186 (2002).

- Mariani, N. J., Mazza, G. D., Martínez, O.M., Cuckierman, A.L. y G.F. Barreto. "On the influence of liquid distribution on heat transfer parameters in trickle bed systems". *Can. J. Chem. Eng.*, 81, 814 (2003).
- Mariani, J.N., Salvat, W.I., Campesi, M.A., Barreto, G.F. y O.M. Martinez. "Evaluation of structural properties of cylindrical packed beds using numerical simulations and tomographic experiments". *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 7, A82 (2009).
- Martin, H. "Low Peclet number particle-to-fluid heat and mass transfer in packed beds". *Chem. Eng. Sci.*, 33, 913 (1978).
- Martinez, O.M., Pereira Duarte, S.I., Ferreti, O. A. y N.O. Lemcoff. "Estimation of the Pseudohomogeneous One-dimensional Heat Transfer Coefficient in a Fixed Bed". *Chem. Eng. Process*, 20, 245 (1987).
- Mears, D.E. "On criteria for axial dispersion in nonisothermal packed-bed catalytic reactors". *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15, 20 (1976).
- Muller, G.E. "Radial void fraction distributions in randomly packed fixed beds of uniformly sized spheres in cylindrical containers". *Powder Technol.*, 72, 269 (1992).
- Mueller, G.E. "Angular void fraction distribution in randomly packed fixed beds of uniformly sized spheres in cylindrical containers". *Powder Technol.*, 77, 313 (1993).
- Muller, G.E. "Numerical simulation of packed bed with monosized spheres in cylindrical containers". *Powder Technol.*, 92, 179 (1997).
- Nijemeisland, M. y A. Dixon. "Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed". *Chem. Eng. J.*, 82, 231 (2001).
- Nijemeisland, M. y A. Dixon. "CFD study of fluid flow and wall heat transfer in a fixed bed of spheres". *AIChE J.*, 50, 906 (2004).
- Odendall, W., Goble, W. y J. J. Carberry. "Thermal parameter sensitivity in the simulation of the non-isothermal, non-adiabatic fixed bed catalytic reactor- the two dimensional heterogeneous model". *Chem. Eng. Commun.*, 58, 37 (1987).

- Olbrich, W.E. "A two phase diffusional model to describe heat transfer processes in a non adiabatic packed tubular bed". *Proceeding Chemeca 70 Conference Londres*, 101-119 (1970).
- Olbrich, W. y O. Potter. "Mass transfer from the wall in small diameter packed beds". *Chem. Eng. Sci.*, 27, 1733 (1972).
- Ookawara, S., Kuroki, M., Street, D. y K. Ogawa. "High-fidelity DEM-CFD modeling of packed bed reactors for process intensification". *Proceedings of European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6), Copenhagen* (2007).
- Pereira Duarte, S. I., Ferreti, O. A. y N.O. Lemcoff. "A heterogeneous one-dimensional model for non-adiabatic fixed bed catalytic reactors". *Chem. Eng. Sci.*, 39, 1025 (1984).
- Peters, P.E, Schiffino, R. S. y P. Harriot. "Heat transfer in packed-tube reactors". *Ing. Eng. Chem. Res.*, 27, 226 (1988).
- Ranade, V. "Computational flow modeling for chemical reactor engineering". *Academic Press, Londres* (2002).
- Ranz, W.E. "Friction and Transfer coefficients for Single Particles and Packed Beds". *Chem. Eng. Prog.*, 48, 247 (1952).
- Romkers, S., Dautzenberg, F., van den Bleek, C.M. y H. Calis. "CFD modeling and experimental validation of particle-to-fluid mass and heat transfer in a packed bed at very low channel to particle diameter ratio". *Chem. Eng. J.*, 96, 3 (2003).
- Salvat, W.I., Mariani, N.J., Martínez, O.M. y G.F. Barreto. "On the analysis of packed bed structure at low aspect ratios", *Actas del 4th Mercosur Congress on Process Systems Engineering and 2nd Mercosur Congress on Chemical Engineering, Río de Janeiro, Brasil, 14-18*, ISBN: 85-7650-043-4 (2005).
- Salvat, W.I., Mariani, N.J., Barreto, G.F. y O.M. Martínez. "An algorithm to simulate packing structure in cylindrical containers". *Catalysis Today*, 107-108, 513 (2005).
- Schmidt, L.D. "The Engineering of Chemical Reactions". *Topics in Chemical Engineering, K. E. Gubbins Editor, New York, Oxford University Press* (1998).

- Schnitzlein, K. y H. Hofmann. "An alternative model of turbulence". *Chem. Eng. Sci.*, 42, 2569 (1987).
- Shinnar, R. "Chemical reactor modeling - The desirable and the achievable". *Luss, D & Weckmab Ed., ACS Symp. Ser.*, 72, 1-36 (1978).
- Smirnov, E.I., Muzykantov, A.V., Kuzmin, V.A., Kronberg, A.E y I.A. Zolotarskii. "Radial heat transfer in packed beds of spheres, cylinders and Rashing rings. Verification of model with a linear variation of λ_{ef} in the vicinity of the wall". *Chem. Eng. J.*, 91, 343 (2003).
- Specchia, V., Baldi, G. y S. Sicardi. "Heat Transfer in Packed Bed Reactors with one Phase Flow". *Chem. Eng. Commun.*, 4, 361 (1980).
- Suarez, F., Luzi, C.D., Mariani, N. J. y G.F. Barreto. "Effective parameters for conductive contributions to radial heat transfer in fixed beds under stagnant conditions". *Chemical Eng. Res. Des.*, 119, 245 (2017).
- Suzuki, M., Shinmura, T., Limura, K. y M. Hirota. "Study of the wall effect on particle packing structure using X-ray micro Computed Tomography". *Adv. Powder Technol.*, 19, 183 (2008).
- Temkin, M. I. y V. Pyzhev. "Kinetics of the synthesis of amonia on promoted iron catalyts. *J. Phys. Chem.*, 13, 851 (1939).
- Tobis, J. y D. Ziółkowski. "Modelling of Heat Transfer at the wall of a packed Bed apparatus". *Chem. Eng. Sci.*, 43, 3031 (1998).
- Toye, D., Marchot, P., Crine, M., Pelsser A. y G. L'Homme. "Local measurements of void fraction and liquid holdup in packed columns using X-ray Computed Tomography". *Chem. Eng. Process.*, 35, .511 (1998).
- Trambouze, P., van Landeghem, H. y J.P. Wauquier. "Les réacteurs chimiques, Conception, calcul et mise en oeuvre". *Publications de l'Institut Français du Pétrole, Collection Science et technique du pétrole, N°26, Éditions Technip, Paris* (1984).
- Tsotsas, E. y E.U. Schlünder. "Some remarks on channelling and radial dispersion in packed beds". *Chem. Eng. Sci.*, 43, 1200 (1998).

- Tsotsas, E. y E. U. Schlünder. "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, 819 (1990).
- Villadsen, J. y M. L. Michelsen. "Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximation". *Prentice Hall: Uper Saddle River, NJ* (1978).
- Yagi, S. y N. Wakao. "Heat and mass transfer from wall to fluid in packed beds". *AIChE. J.*, 5, 79 (1959).
- Yagi, S. y D. Kunii. "Studies on heat transfer near wall surface in packed beds". *AIChE J.*, 6, 97 (1960).
- Young, L.C. y B.A. Finlayson. "Axial Dispersion in Nonisothermal Packed Bed Chemical Reactors". *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 12, 412 (1973).
- Wang, Z., Afacan, A., Nandakumar, K. y K. Chuang. "Porosity distribution in random packed columns by gamma ray tomography". *Chem. Eng. Process.*, 40, 209 (2001).
- Wensrich, C.M. "Boundary Structure in dense random packing of monosize spherical particles". *Powder Technol.*, 219, 118 (2012).
- Winterberg, M., Tsotsas, E., Krischke, A. y D. Vortmeyer. "A simple and coherent set of coefficients for modelling of heat and mass transport with and without chemical reaction in tubes filled with spheres". *Chem. Eng. Sci.*, 55, 967 (2000).
- Zambon, M.T. "Modelización del comportamiento térmico de lechos fijos asistida por fluidodinámica computacional (CFD)". *Tesis Doctoral, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de la Plata, Argentina* (2010).