



Universidad
Zaragoza

Proyecto Fin de Carrera

Simulación mediante
fluidodinámica computacional de
reacciones catalíticas en fase gas
llevadas a cabo en termobalanza

Autora

María Ceras Arrese

Director

Antonio Monzón Bescós

Escuela de Ingeniería y Arquitectura

2015

Agradecimientos

Estar escribiendo estas líneas supone, a falta de la última gran batalla, el final de una etapa. Dicen que de la mejor, y yo me lo creo.

Han sido muchas las cosas que he aprendido en la Universidad, tanto académica como personalmente. En las horas de teoría, las de los laboratorios, las de después de clase... y con cada profesor y sus características. Además... ¡Quién me iba a decir a mí que iba a acabar tuteándome con el director de una pirotecnia! He aprovechado todas las oportunidades que esta Universidad me ha brindado, las becas (escasas), la vida social del campus Rio Ebro (incalculable)... y paso a paso he llegado hasta aquí. Y, cosas que pasan, después de cursar parte de la carrera lejos, y otra parte muy lejos, para elaborar este PFC he recalado en casa, en Pamplona.

Tengo que agradecer enormemente a los doctores Gurutze Arzamendi y Luis Gandía, de la Universidad Pública de Navarra, por brindarme la oportunidad de elaborar este PFC en su departamento, así como a Antonio Monzón por ser mi tutor.

Y cómo no a mis padres, a mi tía, mis hermanitos, Eva y Elsa y, por qué no... a mis sobrinitas! haber estado ahí. Bueno, sobre todo mi padre que se ha leído y releído esta memoria.

Y a mis amigos, que saben hasta la entonación que uso para decir “es que... estoy con el proyecto”.

Simulación Mediante Fluidodinámica Computacional de Reacciones Catalíticas en Fase Gas LLevadas a Cabo en Termobalanza

Resumen

Una termobalanza es un instrumento analítico que puede usarse como un reactor químico de flujo continuo, pudiéndose medir, a lo largo del tiempo, y de forma simultánea, la temperatura de la reacción y la variación de masa de la muestra estudiada. Resulta de gran utilidad en la monitorización de reacciones que implican la formación o desaparición de fases sólidas, así como en la medida rigurosa de la cinética de estos procesos. Por todo esto se utiliza en el estudio de procesos de descomposición de hidrocarburos para la formación de materiales carbonosos e hidrógeno. Durante el proceso, una corriente reactiva de hidrocarburo entra en contacto con el catalizador dispuesto en el interior de la termobalanza, y sobre éste se depositarán los materiales formados.

La posición relativa del catalizador en el interior de la termobalanza es un factor determinante en el transcurso de la reacción, comprometiendo la reproducibilidad de los experimentos.

Este Proyecto Fin de Carrera tiene como objetivo el estudio del comportamiento fluidodinámico de este tipo de reacciones en una termobalanza mediante simulación por dinámica de fluidos computacional, CFD. Para llevar a cabo estas simulaciones se ha empleado el software comercial ANSYS CFX 12.0.

Para la consecución de este objetivo se ha creado un modelo fluidodinámico en 3D del dispositivo de control. La creación de este modelo es difícil puesto que tiene lugar una reacción química. Una vez asegurado que el modelo es fiable, habiéndose comprobado la independencia de malla, de las condiciones de contorno, etc. se procede a variar los parámetros de estudio.

Se modelan dos familias de soportes para el catalizador, una basada en una cesta y la otra en una placa. A estos soportes se les realiza modificaciones para encontrar la influencia que éstas tienen en el transcurso de la reacción.

Sobre los casos más satisfactorios, se estudia cómo afecta la posición relativa del soporte en el transcurso de la reacción.

Por último, habiendo identificado las deficiencias fluidodinámicas que presentan los soportes estudiados, se proponen nuevas geometrías para suplirlas.

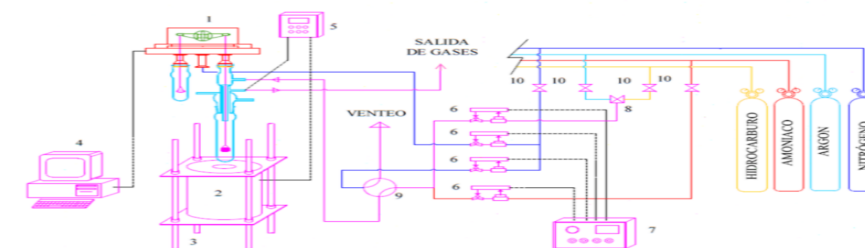
Índice

Capítulo 1: Introducción y Objetivos	1
Objetivos y estructura de la memoria	3
Capítulo 2: Definición de Modelos para Dinámica de Fluidos Computacional, CFD	5
2.1 Introducción a la dinámica de fluidos computacional	5
2.2 Implementación del modelo físico de una termobalanza a un preprocesador CFX	8
2.1 Optimización de la malla: independencia de malla y reducción del coste computacional	9
Capítulo 3: Estudio de Casos y Resultados	15
3.1 Comparativa de soportes	16
3.2 Comparativa de la posición del soporte	20
3.3 Comparativa de la orientación del soporte	21
3.4 Comparativa de la alineación del soporte	23
Capítulo 4: Propuesta de Mejoras	25
Conclusiones	31
Bibliografía	33
Anexo I: Código para la Nomenclatura de Soportes	35
Anexo II: Principios Fundamentales del CFD	35
Anexo III: Modelado con ANSYS® CFX 12.0	43
Anexo IV: Modificaciones Detalladas	50
Anexo V: Ampliación de Resultados	53
Índice de Figuras y Tablas	56

Capítulo 1: Introducción y Objetivos

Un sistema termogravimétrico o termobalanza es un instrumento analítico que permite registrar variación de masa en una muestra con respecto al tiempo y/o la temperatura. Las aplicaciones de estos dispositivos son muy diversas destacando el estudio de cinéticas de secado así como de estabilidad térmica de materiales. También pueden emplearse a modo de reactor, para el seguimiento de reacciones que implican la formación o desaparición de fases sólidas, pudiéndose medir, a lo largo del tiempo, y de forma simultánea, la temperatura de la reacción y la variación de masa de la muestra implicada.

El sistema termogravimétrico, tal y como se esquematiza en la figura 1, está compuesto del cuerpo de la termobalanza que va alojado en un horno, de los sistema de control y medida de la temperatura, así como de los de control y medida de flujos de gases y de los de adquisición de datos.



1. Termobalanza	6. Medidores de flujo másico
2. Horno	7. Control de flujo
3. Sistema de elevación del horno	8. Válvula de tres vías
4. Adquisición de datos	9. Válvula de cuatro vías
5. Control de temperatura	10. Válvulas de alimentación

Figura 1.- Esquema completo de un sistema termogravimétrico.

El cuerpo de la balanza (figura 2) es una parte fundamental del equipo ya que es donde tiene lugar los cambios de masa que se van a monitorizar, que en el caso del presente proyecto es donde tiene lugar la reacción química.

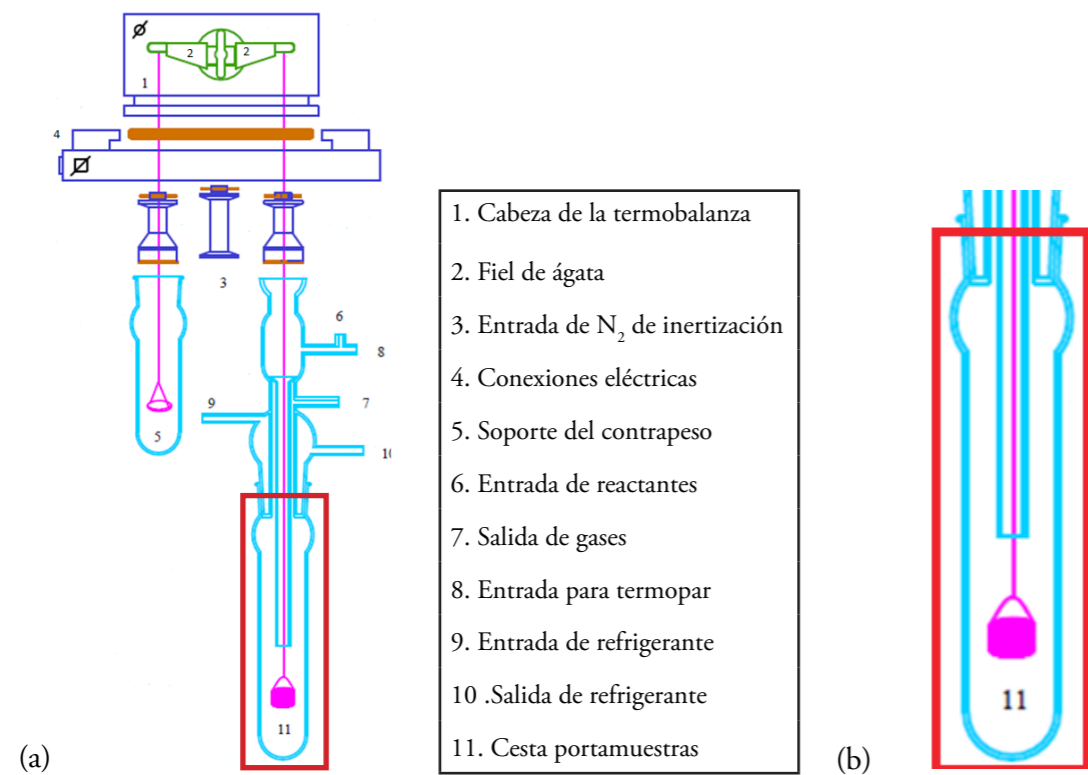


Figura 2.- Cuerpo de la termobalanza (a) y detalle de la parte que se va a estudiar (b).

Este proyecto se centra en el empleo de una termobalanza para la monitorización y determinación de las cinéticas de descomposición de hidrocarburos gaseosos a sólidos carbonosos en presencia de un catalizador heterogéneo (Dussault, Dupin *et al* 2007; Latorre, Cañaza *et al* 20011; Aso, 2014). Durante la operación, en la cesta portamuestras se dispone el catalizador, que entra en contacto con la corriente gaseosa reactiva a unas condiciones de operación fijadas previamente. Los sólidos carbonosos producidos durante la reacción quedan depositados sobre la superficie del catalizador contribuyendo a un aumento del peso de la muestra que registrará el elemento de medida y que cuantificarán los sistemas de control y adquisición de datos.

Estudios previos han encontrado que la falta de reproducibilidad en los experimentos es un factor determinante que puede comprometer la validez del equipo para realizar estudios cinéticos rigurosos.

La realización de un modelo de fluidodinámica computacional (CFD) que reproduzca el comportamiento de la termobalanza y que permita identificar los aspectos críticos que condicionan la reproducibilidad de los experimentos cinéticos es un paso muy importante en la validación de esta técnica como herramienta para el estudio de las cinéticas de las reacciones. Por un lado, tiene un menor coste económico que la experimentación, por otro lado, permite separar variables de operación, con lo que se puede alcanzar un mayor control sobre los experimentos y el análisis de los resultados puede ser más sencillo.

Los modelos CFD resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes, dada una geometría concreta y un flujo con unas características determinadas. Para su resolución, se plantea un procedimiento iterativo mediante el método de volúmenes finitos, que transforman las ecuaciones diferenciales en ecuaciones algebraicas, en subvolúmenes en los que se descompone el sistema y donde se asumen propiedades constantes. Por ello, el primer paso que hay que dar para la resolución de las ecuaciones es la selección de los subvolúmenes en los que se resolverán las ecuaciones, a este proceso de creación de subelementos se denomina discretización o, coloquialmente, mallado.

Partiendo de la suposición de unas condiciones iniciales, se realiza de forma iterativa la resolución de las ecuaciones de materia y cantidad de movimiento por el método de volúmenes finitos hasta alcanzar un grado de convergencia aceptable. El estudio se ha llevado a cabo en modo isoterma por lo que no es necesario resolver el balance de energía.

Objetivos y Estructura de la memoria

Este Proyecto Fin de Carrera, en adelante PFC, ha tenido como objetivo el estudio del comportamiento fluidodinámico de un medio reaccionante gaseoso en una termobalanza comercial mediante simulación por dinámica de fluidos computacional, CFD. Para llevar a cabo estas simulaciones se ha empleado el software comercial ANSYS® CFX 12.0.

Con este PFC se pretende determinar los factores críticos que afectan al sistema para minimizar las variaciones que se producen y mejorar, así, la reproducibilidad. En última instancia, se proponen mejoras en el diseño, tanto de la termobalanza como del elemento que contiene la muestra de sólido.

Tras esta breve introducción al tema del trabajo donde se ha planteado la justificación y objetivos del mismo, la memoria se estructura de la siguiente forma:

El punto 2 tratará sobre la definición de modelos en la dinámica de fluidos computacional y sobre el procedimiento seguido para definir el dispositivo estudiado. En el punto 3 se estudian y comparan los entornos creados con la simulación de fluidodinámica computacional para posteriormente, en el cuarto punto, proponer mejoras respecto a los casos anteriores. Posteriormente se expondrán las conclusiones de la memoria. Por último se citará la bibliografía consultada para la confección de la memoria.

Capítulo 2: Definición de Modelos para Dinámica de Fluidos Computacional, CFD

2.1 Introducción a la Dinámica de Fluidos Computacional

La dinámica de fluidos computacional, del inglés *Computational Fluid Dynamics (CFD)*, tiene sus orígenes en los años 60. Nace de la necesidad de disponer de una herramienta de simulación que dé solución a los complejos sistemas en dos y tres dimensiones (2D, 3D) que se presentan en el campo de los fluidos en movimiento. Se trata de una combinación de las leyes de la física de fluidos, métodos de cálculo numéricos y desarrollos informáticos que permiten alcanzar soluciones numéricas de las ecuaciones de transporte de materia, energía y cantidad de movimiento empleadas en la dinámica de fluidos. El desarrollo de los sistemas CFD ha avanzado de forma paralela al campo de la informática. La fabricación de ordenadores cada vez más potentes ha permitido la implantación de modelos de simulación de mayor complejidad, obteniendo resultados de mayor exactitud al mismo tiempo que con un coste económico y un tiempo inferiores al de la experimentación. Esta técnica se emplea en los más diversos campos, entre los que destacan la ingeniería química, la aeronáutica, el sector naval, motores o la ingeniería biomédica.

Para proporcionar un acceso sencillo a sus soluciones, los paquetes de CFD incluyen interfaces de usuario, tanto en la introducción de los parámetros necesarios del problema como para examinar los resultados. En el mercado existen distintos programas de CFD como ABAQUS, FLUENT, Comsol Multiphysics, ANSYS o Open FEM, que es un software libre.

Para realizar este proyecto se ha empleado el paquete ANSYS[®] CFX de la compañía ANSYS Inc., en concreto la versión CFX 12.0., que se compone a su vez de tres sub-programas o módulos comunicados entre sí por unas interfaces de manera que las salidas de un módulo son la entrada del siguiente:

1) La definición de pre-procesador (CFX-Pre) constituye el primer paso a la hora de diseñar el modelo fluidodinámico y consta de varias etapas:

- En primer lugar, la construcción de la geometría de los dominios de estudio. Para ello se ha utilizado la aplicación Geometry Design Modeler.
- En segundo lugar, la discretización de los dominios en subvolúmenes finitos, el mallado. Una malla bien construida ejerce una gran influencia en el cálculo numérico, evitando problemas que conducen a inestabilidad o difícil convergencia. Además, el número de elementos resultantes no debe ser excesivo ni por el contrario escaso. Un mallado cuyo número de elementos sea muy elevado ralentizaría el proceso computacional, mientras que si el número es demasiado bajo se perdería precisión. Por esta razón se ha buscado un compromiso entre el número de elementos de malla y el esfuerzo computacional, con mallas con un número de elementos de entre 100.000 y 1.000.000.

El tipo de mallado elegido para describir la termobalanza ha sido de tipo no estructurado y presenta elementos de diferentes tamaños según la región en la que se encuentre, tal y como se puede observar en la figura 3. Se aprecia cómo en la zona de la cesta (azul), donde tiene lugar la reacción y, consecuentemente, se producirán las mayores variaciones en cuanto a composición y sentido de flujo del reactivo, las celdas creadas tienen menor tamaño que en las zonas en las que no ocurren estos cambios, con el objetivo de conseguir una mejor descripción.

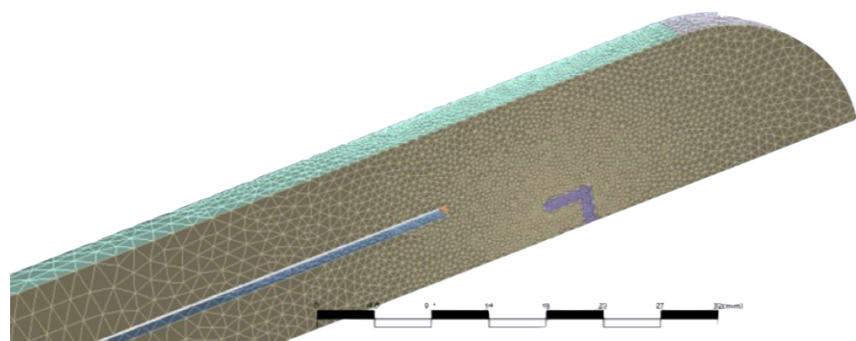


Figura 3.- Detalle de mallado no estructurado.

- En el preprocesador se define el modelo físico a resolver dependiendo de si es isotermo o no; con composición de las especies participantes constante o con variación debido a la presencia de una reacción química; con un régimen laminar o turbulento. También se incluyen todas las especificaciones que requerirá la simulación: propiedades de los materiales que componen el problema, variables de entorno, criterios de resolución, etc.
- Una opción que presenta este paquete y que es conveniente resaltar en este punto de la memoria por su importancia en este PFC es la definición de simetría. En ocasiones, los sistemas

físicos estudiados presentan simetría, lo que se puede aprovechar para modelar en CFX sólo una fracción del mismo y posteriormente, en el post-proceso, replicarla el número de veces necesario con el objetivo de reducir la extensión del modelo y el consiguiente esfuerzo computacional. La fracción seleccionada tiene que ser representativa no sólo de la geometría, sino que también se tiene que poder aplicar a todas las propiedades de transporte. La termobalanza presenta simetría circular.

2) El Procesador o paquete de resolución matemática (CFX-Solver) realiza el algoritmo iterativo de cálculo hasta alcanzar un grado de convergencia satisfactorio. Con el fin de asegurar la calidad de la solución es interesante proponer diferentes condiciones de inicio al proceso de iteración para detectar si la solución es la misma. La secuencia lógica de la etapa de resolución es la siguiente:

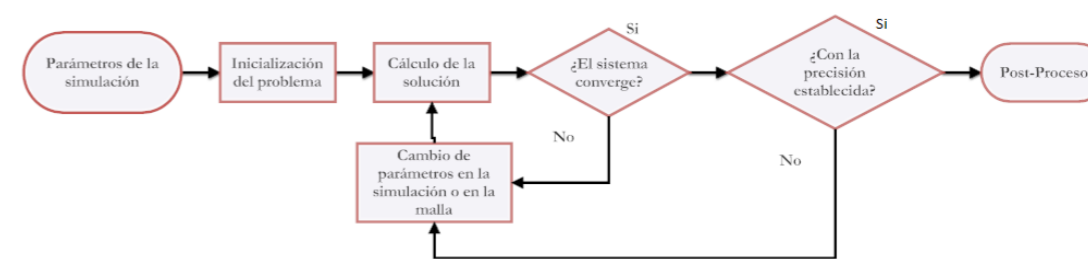


Figura 4.- Esquema del proceso de resolución.

3) El Post-procesador (CFD-Post) constituye el paso final en el análisis CFD. Hay que destacar que la información que se logra es muy amplia, ya que se dispone de la descripción en todos los subvolúmenes, por lo que es importante tener capacidad de gestionarla adecuadamente. Los resultados de las simulaciones pueden analizarse numérica y visualmente mediante el paquete CFX-Post. Se pueden definir gráficos a color que muestran los campos de las propiedades de transporte en líneas, superficies o volúmenes; representaciones de líneas de corriente e incluso animaciones.

Es muy importante realizar una cuidadosa interpretación de los resultados para constatar su coherencia, lo que normalmente lleva a realizar modificaciones en la malla, en el modelo, en el esquema de integración o en alguno de sus parámetros hasta que se obtiene un resultado con suficiente grado de confianza.

En el anexo II se detalla de manera teórico-práctica la metodología seguida en la realización de estos pasos.

2.2 Implementación del modelo físico de una termobalanza a un preprocesador CFX

Este proyecto se ha llevado a cabo con una estación de trabajo Lenovo ThinkStation, sistema operativo MS Windows 7 Professional[®] x64, con un procesador Intel[®] Xenon[®] CPU X5650 @ 2,67 GHz 2,66 GHz (2 procesadores) y una RAM de 64 GB.

El dispositivo modelado es el empleado en el grupo de investigación “Catálisis, Separaciones Moleculares e Ingeniería de Reactores” de la Universidad de Zaragoza. Tal y como se ha comentado, no se modela el dispositivo completo sino sólo el cuerpo de la termobalanza donde tiene lugar el proceso químico instalado.

En la cesta, se dispone el catalizador. Ésta es la parte crítica que se ha considerado de diseño crítico puesto que aquí se desencadena la reacción. El flujo reaccionante entra al dispositivo por el anillo interior, impacta con el soporte del catalizador para después abandonar el sistema por el tubo exterior.

Se ha considerado que el catalizador puede encontrarse soportado en una placa de acero de 0,5 mm de espesor (figura 5) o bien en el interior de una cesta (figura 6). En el caso de las cestas, el catalizador puede encontrarse en polvo, ya que la pared de la cesta lo sustenta. En el resto de situaciones, al no ser esto viable, se deposita sobre la superficie del soporte previa aplicación de un tratamiento para soportarlo. En el grupo de trabajo se han llevado a cabo estudios experimentales para ambos casos de manera que este trabajo intenta reproducir las condiciones empleadas.

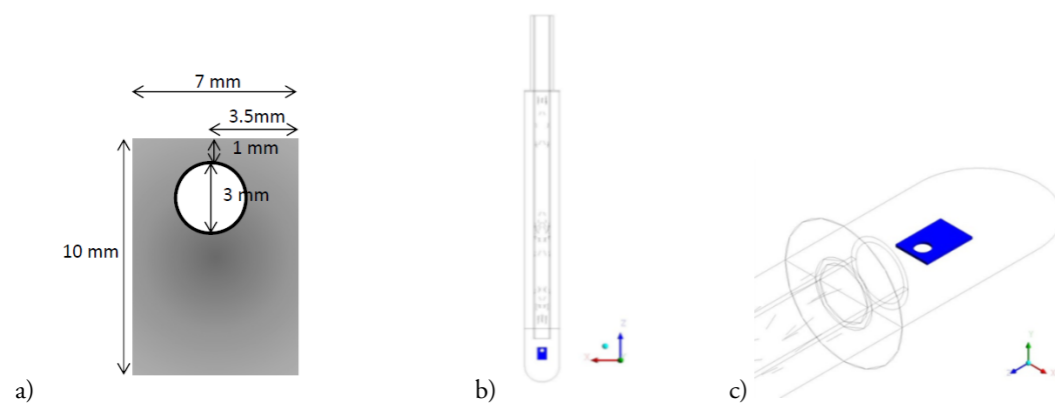


Figura 5.- a) Medidas de la placa; b) Alzado de la termobalanza con la placa; c) Zoom de un plano isométrico.

Experimentalmente se han utilizado unas láminas de un acero inoxidable austenítico 17-12-3 (17% de cromo, 12% de níquel y 3% de molibdeno) de 0,5 mm de espesor. La distancia entre la sección interanular y el origen de la placa es de 7 mm. El extremo inferior del tubo se encuentra a 18 mm del acabado de la placa.

En la Figura 6 se muestra la cesta que se ha considerado como de diseño de base. Tiene 1 mm de espesor, el mismo diámetro interno que el tubo por el que incide el gas, 10,6 mm y un diámetro externo de 12,6 mm. La altura de la cesta es de 4 mm, por lo que al tener su base un espesor de 1 mm, quedan 3 mm de altura libre en el interior de la misma. En el caso de que la altura de la cesta sea 1 mm, el diseño quedará reducido a un disco que también se estudiará.

Con respecto a la posición de la cesta, que será objeto de estudio, se ha considerado como caso base que la distancia entre la salida del tubo y la cara interior de la base de la cesta es de 10 mm, mientras que la distancia de la cara externa de la base de la cesta y el extremo inferior del tubo es de 22,5 mm.

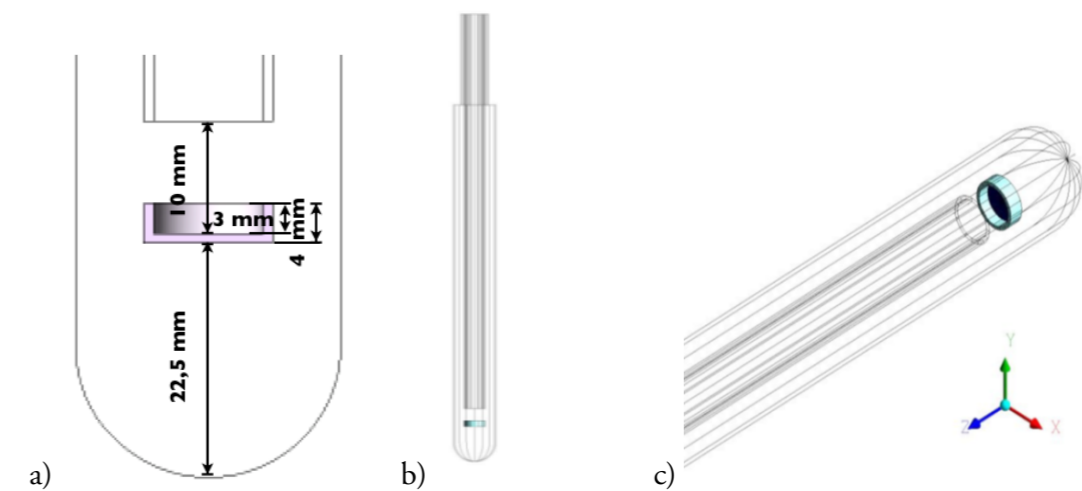


Figura 6.- a) Esquema de la posición de la cesta; b) Alzado de la termobalanza con la cesta; c) Zoom de un plano isométrico.

2.3 Optimización de la malla: Independencia de malla y reducción del coste computacional

En los estudios CFD es muy importante reducir el número de elementos finitos que describen el sistema y donde tendrá lugar la resolución matemática sin que ello suponga pérdida de precisión en el estudio. Para reducir el número de elementos se puede construir una malla con elementos de mayor tamaño o incluso se puede actuar sobre simplificar la geometría de estudio. Se han considerado varias opciones:

- i) La parte superior del dispositivo, que incluye un estrechamiento, es importante en la experimentación, ya que es el resultado de conexiones esmeriladas para conectar la termobalanza a los flujos de gas. No obstante, no parece determinante para el desarrollo de la reacción química, por lo que se considera un diseño CFX sin esta región (Figura 7b).

ii) De la misma forma, tampoco se presupone que varíe la composición de la mezcla en la parte más alejada del catalizador, por lo que se puede acortar un 30% la longitud del tubo en el diseño CFX (Figura 7c)

iii) Si el sistema presenta alguna geometría, como sucede en el dispositivo estudiado, se puede simular una fracción del dispositivo (Figura 7d) y luego, en la etapa de post-proceso, replicarla las veces que sea necesario (Figura 7e).

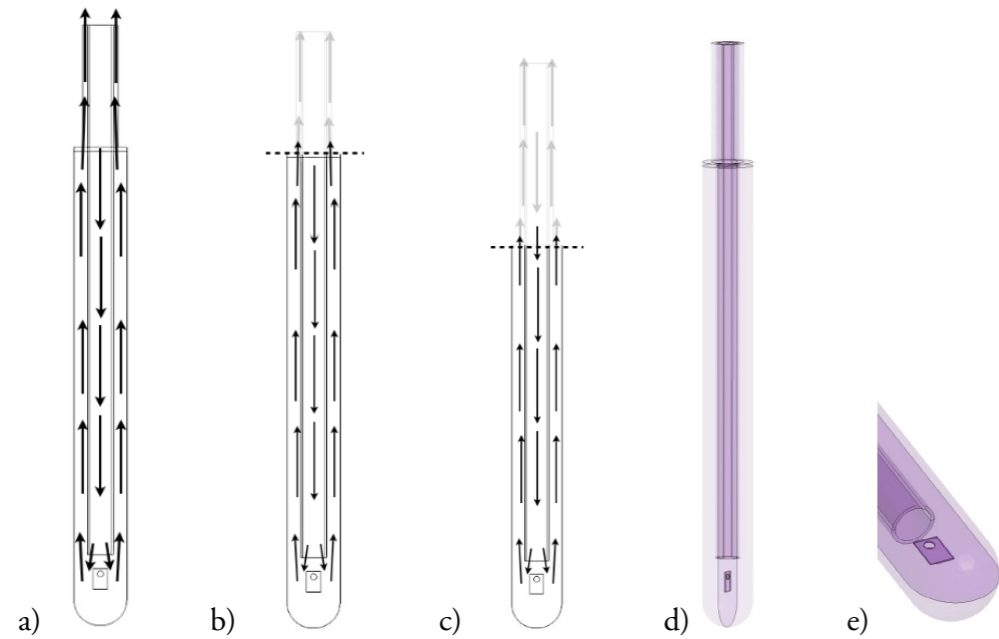


Figura 7.- Diseños CFX: a) completo; b) sin estrechamiento; c) sin estrechamiento y 30% más corto; d) geometría simplificada aprovechando la simetría cilíndrica y posterior composición global del dispositivo por la réplica de 1/2 del mismo; e) detalle de la composición replicada.

Para cada caso es necesario construir mallas que conduzcan a una solución única, o dicho de otro modo, que el resultado alcanzado no varíe con la malla considerada. A este proceso se le conoce como estudio de independencia de malla.

El modelo físico CFX de estudio considerado que al sistema se alimenta una corriente de N_2 con un contenido de CH_4 del 1% en peso y con un caudal volumétrico variable, Q . Se considera también que sobre la placa se produce un consumo de metano de acuerdo a una cinética de orden uno:

$$-R_{CH_4} = 1,6 \cdot 10^{-5} P_{CH_4} \text{ [kg}_{CH_4} \text{ s}^{-1} \cdot \text{atm}^{-1}]$$

Se ha iniciado el estudio de independencia de malla con un diseño que representa, gracias al uso de la simetría, de 1/2 del dominio fluido y, como elemento de soporte del catalizador,

una placa (Figura 7). Hay que tener presente que si se simula 1/2 del dispositivo, el caudal de alimentación será también el correspondiente a esta fracción, $Q/2$, y la velocidad de consumo también será la correspondiente a 1/2 de la superficie de la placa, $-R_{CH_4}/2$.

En la figura 8 se representa el valor de conversión alcanzada para distintos caudales de alimentación, empleando 4 mallas que discretizan o descomponen el volumen fluido con un número de sub-elementos creciente tal y como recoge la Tabla 1.

Tabla 1.- Mallas propuestas

Denominación malla	I	II	III	IV
Número de elementos	100.000	250.000	500.000	1,2x10 ⁶
Tiempo CPU (min)	25,9	128	304	656

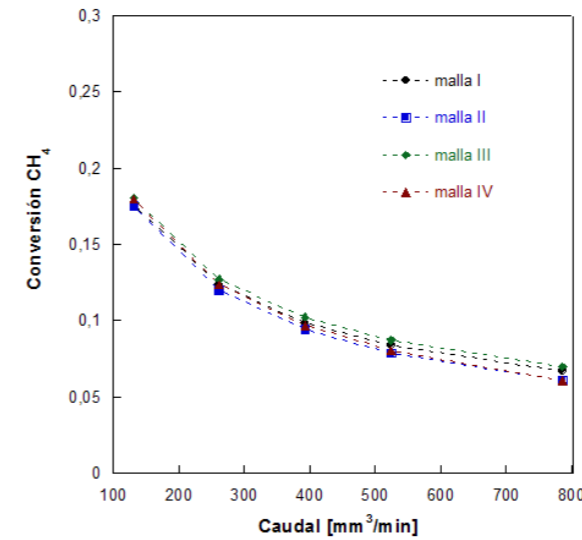


Figura 8.- Evolución de la conversión de metano alcanzada para las mallas I-IV.

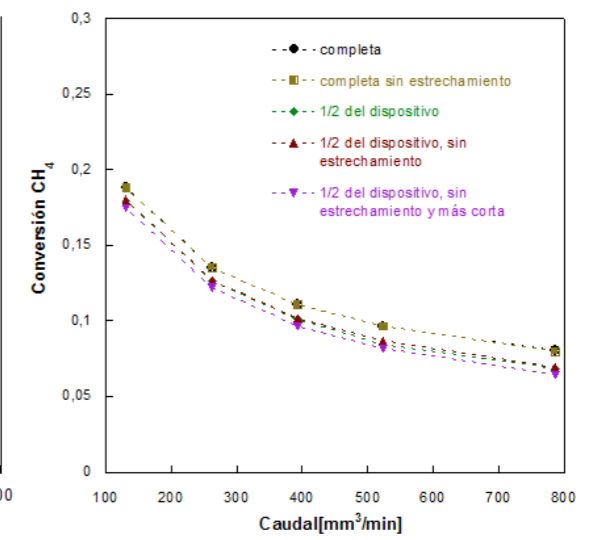


Figura 9.- Influencia del dominio fluido representado en CFX sobre la conversión de metano.

En la figura 8 se aprecia que al aumentar el caudal empleado, la conversión disminuye de forma similar para las cuatro mallas propuestas, aunque la coincidencia es muy buena para la malla II y la IV. Para continuar con el estudio se selecciona la malla II ya que el tiempo total de CPU usado es aceptable. En la figura 9 se estudia el efecto de los niveles de simplificación propuestos anteriormente (Figura 7). Se observa que emplear simetría conduce a unas conversiones ligeramente inferiores. Esta diferencia se hace más notable conforme aumenta el caudal. Acortar la longitud del tubo tiene un efecto similar. Sin embargo, el diseño del modelo con y sin estrechamiento no afecta de modo alguno a la conversión obtenida. Habrá que valorar, dependiendo de las condiciones de cada proceso, si el error que conlleva el uso de simetría compensa o no el tiempo de cálculo ahorrado.

Para valorar la conveniencia de una u otra malla, a la hora de plantear un conjunto de simulaciones, un factor también muy importante es el tiempo de CPU empleado en llevar a cabo cada simulación. Este tiempo es muy dependiente del número de elementos que contenga la malla, tal y como se observa en las Tabla 1. La Tabla 2 recoge, el tiempo de convergencia para la malla IV ($1,2 \times 10^6$ elementos) variando el dominio fluídico.

Tabla 2.- Mallas propuestas

Nivel de simplificación	Completo, sin estrechamiento			
Número de elementos	400.000	500.000	600.000	$1,0 \times 10^6$
Tiempo CPU (min)	45,8	207	656	2260

Comparando los valores obtenidos de tiempo de convergencia se evidencia que obtener una buena malla es un paso fundamental en la simulación, pues si bien el tiempo de cálculo aumenta de forma casi exponencial con el número de elementos, con una buena malla, el número de iteraciones necesarias para alcanzar los criterios de convergencia disminuye, haciendo que el tiempo total de uso de CPU sea menor de lo esperado.

Otra forma de comprobar la validez del estudio es que, dado que se emplea un método de resolución iterativo, las condiciones empleadas como punto de partida de la iteración no afecten a la solución final alcanzada. En la figura 10 se observa que, variando estas condiciones iniciales, la diferencia en los valores de conversión de metano obtenidos con caudales altos es inexistente. Para caudales bajos, la diferencia también es pequeña. Sin embargo, cuando la concentración que se toma como punto de partida es más cercana a la del valor final (casos de $[CH_4]_0$ igual a 0,007 y 0,009), la diferencia vuelve a desaparecer. Se escoge, por lo tanto, una $[CH_4]_0$ entre 0,007 y 0,009.

Otro parámetro del proceso iterativo es el factor de escala de tiempo (timescale factor). Este parámetro determina el incremento del valor de la variable estudiada entre una iteración y la siguiente. Para un mayor factor, el sistema convergerá más rápido. Sin embargo, si el factor es demasiado grande, no será capaz de detectar la solución, pudiendo llevar a la divergencia de la solución.

En la figura 11 se observa que no hay diferencia apreciable entre los distintos factores de iteración seleccionados en todo el rango de caudales. Se considera, por lo tanto, que la conversión de metano calculada a la salida del sistema es independiente del factor de iteración dentro del rango probado. Se escoge el factor de iteración 5 por ser el que menor tiempo computacional conlleva.

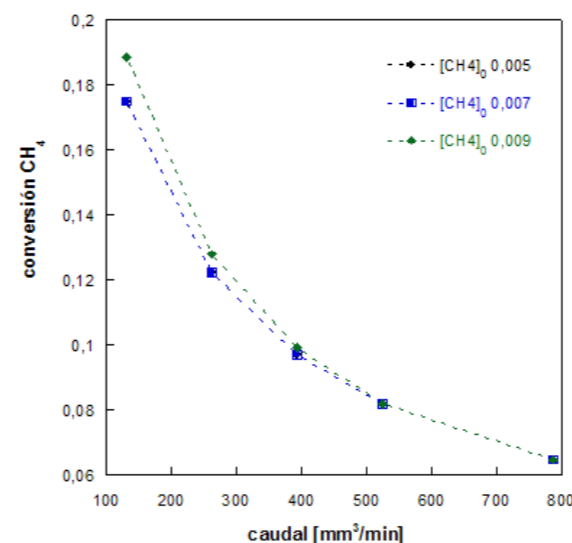


Figura 10.- Evolución de la conversión de metano alcanzada para diferentes valores iniciales de iteración.

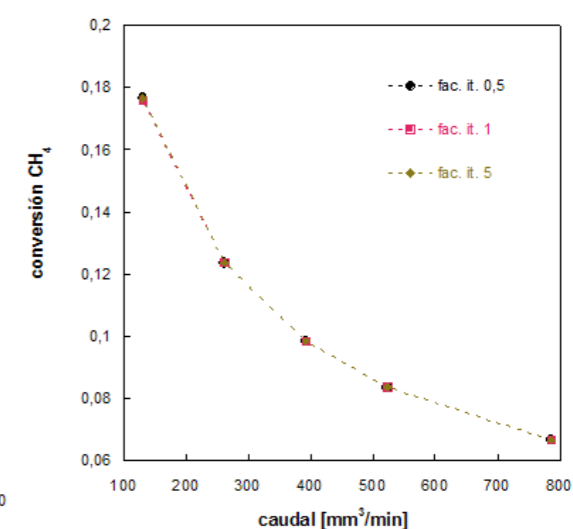


Figura 11.- Evolución de la conversión de metano alcanzada para diferentes factores de escala de tiempo.

En todas las simulaciones presentadas anteriormente, el régimen de flujo calculado es laminar. Incluso para los caudales más altos, el número de Reynolds calculado a la salida del dispositivo no se acerca a valores de régimen turbulento, situándose en torno a 200 para caudales de $524 \text{ mm}^3/\text{min}$. En el post-proceso se puede estudiar la trayectoria que sigue cada elemento del medio fluídico, y se observa cómo estas trayectorias corresponden, a lo largo de todo el dispositivo, a un flujo laminar, como en el ejemplo de la figura 12.

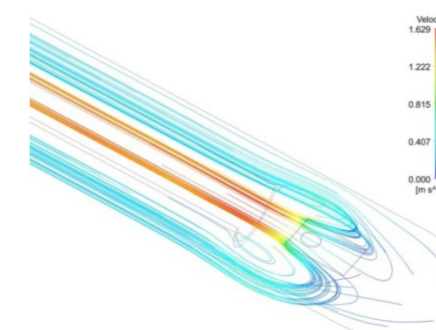


Figura 12.- Detalle de líneas de flujo en el dispositivo.

Capítulo 3: Estudio de Casos y Resultados

En este capítulo se estudia el comportamiento fluídico de una serie de soportes creados: placa, cesta y disco. Éstos se analizan y comparan entre sí y, para los que resulten más satisfactorios, se estudia la influencia que tienen sobre ellos distintos factores que se dan en la experimentación. La cinética no está referida ni a masa de catalizador ni a superficie de contacto. En todos los casos se ha considerado que la velocidad de consumo es la misma, lo que equivaldría a que el catalizador soportado es el mismo, aunque la superficie reactante varíe.

La metodología de trabajo seguida en cada soporte es la que sigue:

- Se parte de las opciones de modelado seleccionadas en el capítulo anterior: diseño del dispositivo completo obviando la parte más alejada del catalizador, llamada estrechamiento. La malla escogida es la denominada II, compuesta de 250.000 elementos.
- Los parámetros introducidos en el modelo CFX son: Timescale factor: 5; Concentración inicial de metano para el cálculo: 0,007; régimen laminar.

Para comprobar la independencia del uso de simetría y posterior replicado del dispositivo, se realiza para cada caso y cada caudal una simulación variando la fracción de dispositivo representado. Las figuras 13 y 14 recogen los resultados para el caso de los diseño de cesta y disco, ya que en el capítulo anterior se ha mostrado este tipo de análisis para el diseño de placa.

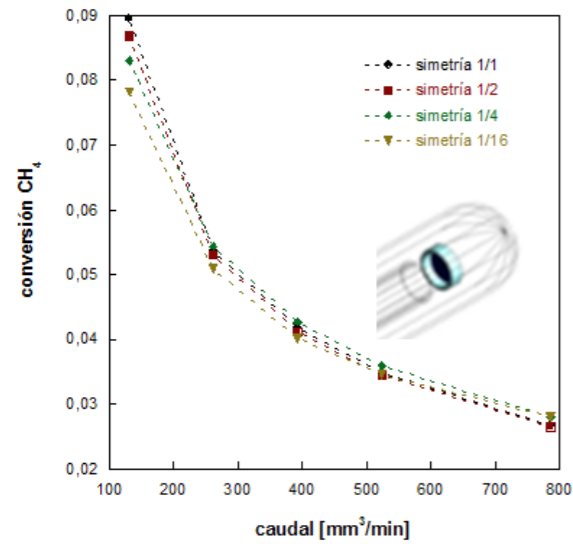


Figura 13.- Influencia de la fracción del dispositivo representado en CFX sobre la conversión de metano. Caso: cesta base (C_sd_sr_sh).

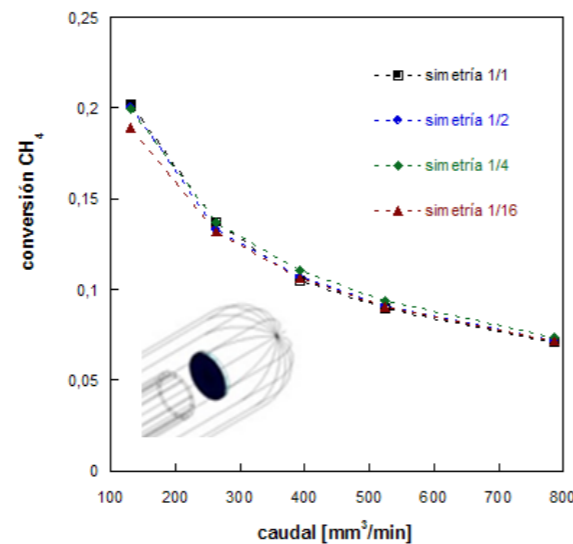


Figura 14.- Influencia de la fracción del dispositivo representado en CFX sobre la conversión de metano. Caso: disco base (D_sd_sr_sh).

En la figura 13 se observa cómo la diferencia en la conversión encontrada a la salida entre el modelado del dispositivo completo y con el uso de simetrías es mínima, sobre todo en un rango de caudales más elevado. La mayor diferencia se da en el caso de representar 1/16 del dispositivo, mientras que representando fracciones similares o iguales a 1/4, el resultado no varía significativamente. Analizando los resultados del disco (Fig.14) se corrobora la hipótesis anterior: representar la cuarta parte del dispositivo conduce a resultados similares que representar la totalidad del mismo en todo el rango de caudales. Siempre y cuando la geometría lo permita, se modelará la cuarta parte del dispositivo.

3.1 Comparativa de soportes

Tal y como recoge el anexo se ha estudiado el comportamiento de una reacción catalítica de orden 1 donde el catalizador está depositado sobre la superficie de una cesta, de un disco en posición horizontal y de una placa colocada verticalmente. En el caso de la cesta se han estudiado con 4 variantes, atendiendo a sus dimensiones y a su posición respecto al punto de liberación de un gas reactivo.

Tabla 3.- Soportes para catalizador

Diseño		Dimensiones		Localización
		Radio (mm)	Profundidad (mm)	Distancia entre el final del cilindro y la base del soporte (mm)
Cesta-base	C_sd_sr_sh	6,3	3	10
Mayor Radio	C_r8,3mm	8,3	3	10
Menor Radio	C_r_2,3mm	2,3	3	10
Más profunda	C_h6mm	6,3	6	10
Disco	D_sr	6,3	0	10
Placa	P_sd	-	-	-

Siguiendo el proceso detallado, se compara la evolución de la conversión en un rango de caudales Q para cada dispositivo de la tabla anterior.

En la figura 15 se observa que existen dos grupos diferenciados en cuanto al rendimiento de la reacción: Por un lado, los de bajo rendimiento: la cesta base, la de menor radio, la profunda y la alejada y, por otro, el de mejor rendimiento: el disco, la placa y la cesta de mayor radio.

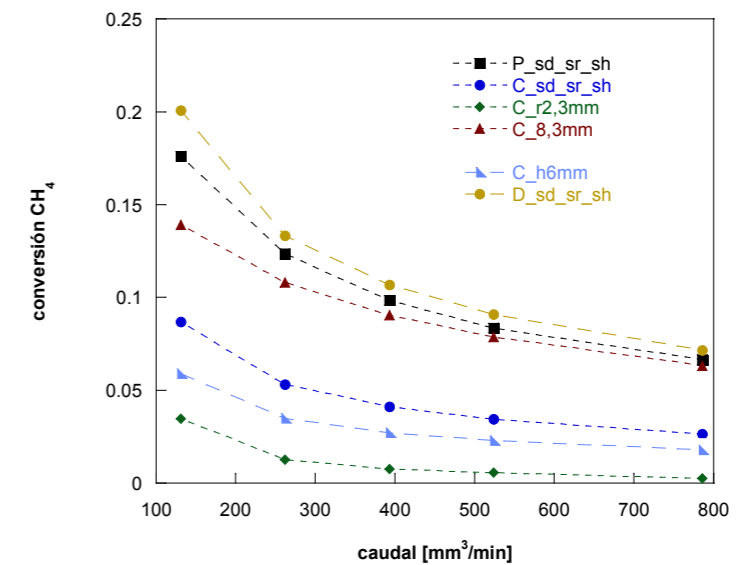


Figura 15.- Influencia del tipo de soporte del catalizador sobre la conversión de metano.

Se plantean hipótesis sobre las causas en la diferencia en las conversiones alcanzadas:

- By-pass elevado, entendiéndose by-pass como la fracción del fluido que abandona el dispositivo sin haber entrado en contacto con el catalizador
- Falta de contacto entre fluido y catalizador
- Presencia de volumen muerto

En la etapa de post-proceso se analizan los resultados obtenidos, agrupados por niveles de rendimiento, para detectar las principales deficiencias en cada dispositivo. A continuación en la figura 16 se representan se analizan los perfiles de velocidad en un plano central de la termobalanza con una cesta correspondiente al diseño base y otra de menor sección:



Figura 16.- Campos de velocidades de: a) C_r2,3mm y b) C_sd_sr_sh. Q 524 mm³/min.

Como se observa en la figura 16, el fluido incidente presenta una mayor velocidad que cuando retorna hacia la salida debido a la diferencia de secciones de paso. Una vez que impacta con la cesta cambia de sentido y abandona el dispositivo. La región por debajo de la cesta se mantiene con un fluido estancado. En el interior de las cestas la velocidad del fluido es muy baja, y se puede decir que el espacio libre sobre la base de éstas se convierte en una “capa límite”, donde los reactivos se transportan en régimen difusional incluso a caudales elevados.



Figura 17.- Líneas de flujo de: a) C_r2,3mm y b) Csd_sr_sh. Q 524 mm³/min.

En la cesta de menor radio (Fig.17a) se observa cómo las líneas de flujo de caudal no llegan a la base de la cesta por impedimento de las paredes de la misma. Así pues, la pequeña conversión que se produce es consecuencia del transporte difusional del reactivo. Al aumentar el radio (Fig.17b), el efecto negativo de la pared se hace menos notable y, como la superficie catalítica también es mayor, el transporte difusional global también aumenta, haciendo que la conversión final sea más alta.



Figura 18.- Campo de velocidades de: a) D_sd_sr_sh y b) C_r8,3 mm. Q 524 mm³/min.

Tal y como se aprecia en la figura 18, con el uso del disco la capa límite desaparece, llegando el flujo realmente hasta la superficie del soporte. Al impactar directamente el reactivo con el catalizador, y no reducirse la transferencia de materia al transporte difusional, el rendimiento de la reacción aumenta.

Aumentar el radio de la cesta (Fig18b) conduce a una situación intermedia. La capa límite disminuye respecto a los grupos de menor rendimiento, pero sigue teniendo su efecto; además, la existencia de paredes empeora el flujo aumentando el by-pass.



Figura 19.- P_sd, Campo de velocidades de: a) plano frontal y b) plano transversal del dispositivo. Q 524 mm³/min.

En la placa también se encuentra el impedimento de una capa límite (Fig19b). Sin embargo, al existir mayor superficie de contacto catalizador-reactivo y reducirse el nivel de by-pass y el volumen muerto (Fig.19a), la conversión global aumenta con este soporte.

Las imágenes evidencian que, con el uso de cestas y discos, la renovación de fluido en la parte inferior de la celda es casi inexistente, comportándose esta parte como un volumen muerto. Usar la placa como elemento soporte elimina en gran parte este volumen muerto.

3.2 Comparativa de la posición del soporte

En una termobalanza habitual, tal y como se ha comentado en la introducción, la cesta pende de un sistema de alambres. Esto implica que experimentalmente no sea posible controlar la posición exacta de la misma, pudiendo variar la altura a la que se sitúe, la inclinación y su posición respecto al centro.

Tabla 4.- Posición del soporte

Diseño		Dimensiones		Localización
		Radio (mm)	Profundidad (mm)	Distancia entre el final del cilindro y la base del soporte (mm)
Cesta-base	C_sd_sr_sh	6,3	3	10
	Más alejada	C_d20mm	6,3	3
Disco-base	D_sd	6,3	0	10
	Más cerca	D_d5mm	6,3	5
	Más alejado	D_d15mm	6,3	0

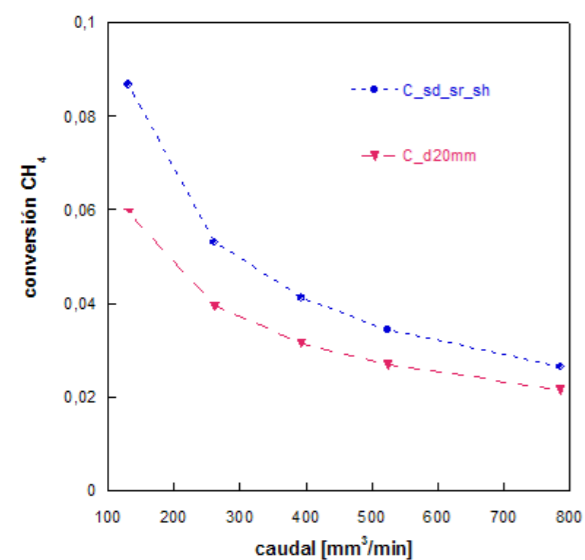


Figura 20.- Influencia de la localización del soporte sobre la conversión de metano. Caso: cesta base.

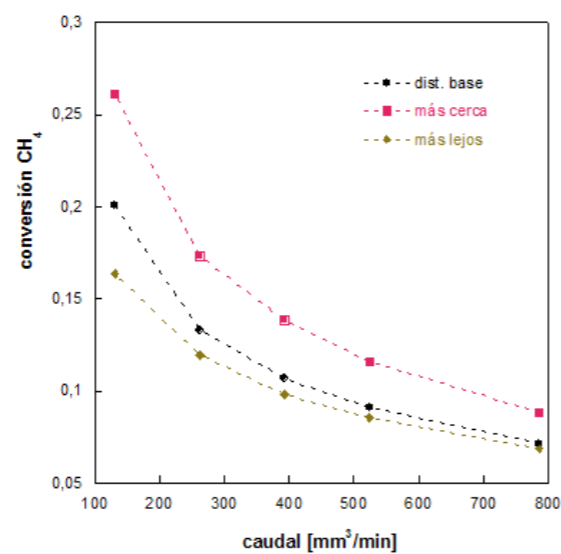


Figura 21.- Influencia de la localización del soporte sobre la conversión de metano. Caso: disco.

La figura 20 muestra los resultados obtenidos cuando la cesta está más o menos alejada del punto donde acaba el tubo interior de alimentación del gas. Se puede observar que cuanto más alejado se encuentra el resultado es peor. En la figura 21, se estudia la influencia de este factor de posición usando un disco como elemento soporte. Se observa también cómo en todo el rango de caudales la conversión alcanzada a la salida del dispositivo es mayor cuando el disco está situado más cerca de la salida del flujo del fluido reaccionante. Esta diferencia se hace más notable a caudales más bajos.

En la figura 22 se comparan las líneas de flujo encontradas en cada situación del disco para analizar la causa de esto:

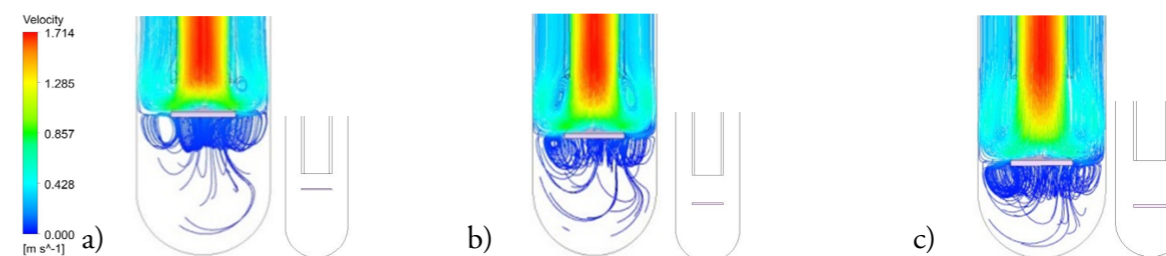


Figura 22.- Líneas de flujo para los soportes: a) D_d5mm; b) D_sd y c) D_15mm.

Cuanto más cerca se encuentra el disco del cilindro interanular (Fig. 22a), el by-pass disminuye, lo que provoca un aumento en la conversión. El volumen muerto encontrado en el dispositivo en este caso también es mayor.

3.3 Comparativa de la orientación del soporte

Para un rango de caudales Q , y llevándose a cabo la reacción descrita anteriormente sobre la descomposición de metano, las conversiones de metano obtenidas a la salida del dispositivo son las siguientes:

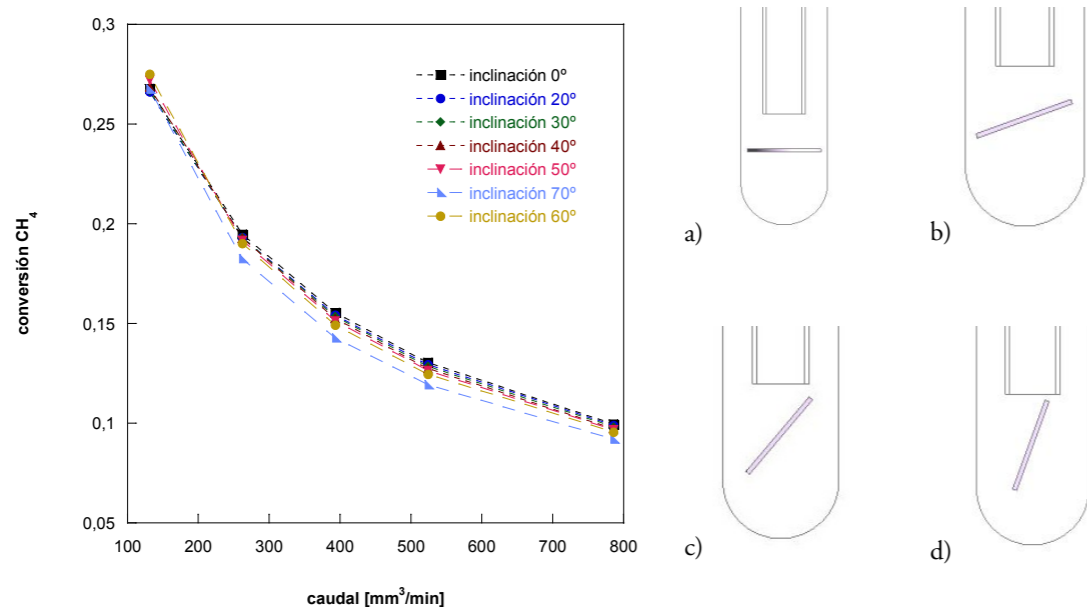


Figura 23.- Influencia del grado de inclinación del disco (D_r11) sobre la conversión de metano. A la derecha, representados esquemáticamente, los discos con: a) 0°; b) 30°; c) 50° y d) 70° de inclinación.

En la figura 23 se observa cómo, en todo el rango de caudales estudiados, el grado de inclinación del disco no afecta de forma significativa al transcurso de la reacción, si bien, conforme éste aumenta, el rendimiento disminuye.

Se buscan las causas de esta disminución estudiando las líneas de flujo encontradas para cada situación:

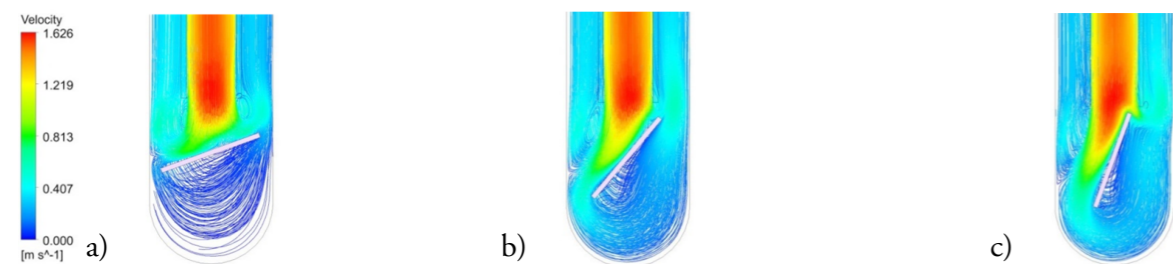


Figura 24.- Evolución de las líneas de flujo conforme aumenta el grado de inclinación del disco: a) 20°; b) 50° y c) 70° de inclinación.

Viendo la evolución de las líneas de flujo conforme aumenta el grado de inclinación (Fig.24), se observa que la dirección que toma el fluido al chocar con el soporte va variando. Si la inclinación es pequeña, el fluido sigue su distribución aproximadamente uniforme, impactando con el soporte y abandonando el dispositivo por el anillo exterior con una concentración uniforme en todo su área. Sin embargo, llega un punto en el que el soporte “dirige” al fluido, originando una zona de máximo impacto y otra donde se crea cierta “capa límite”, como se observa en las figuras 24b y 24c. Como consecuencia de este direccionamiento, el volumen muerto del reactor

se anula. En contrapartida, al no incidir el reactivo directamente en la superficie del reactante y al originarse cierto by-pass de la porción de fluido que “escapa” por un lateral del soporte (Fig.24c), el rendimiento disminuye con el grado de inclinación.

3.4.Comparativa de la alineación del soporte

Se estudia la influencia de que el soporte no se encuentre perfectamente centrado o alineado a la hora de operar. Para ello se comparan los resultados obtenidos cuando la cesta está perfectamente centrada, cuando se encuentra un poco desviada, y en una situación límite, con la cesta totalmente descentrada. La evolución de la conversión obtenida operando a las condiciones habituales es la que se representa en la figura 25.

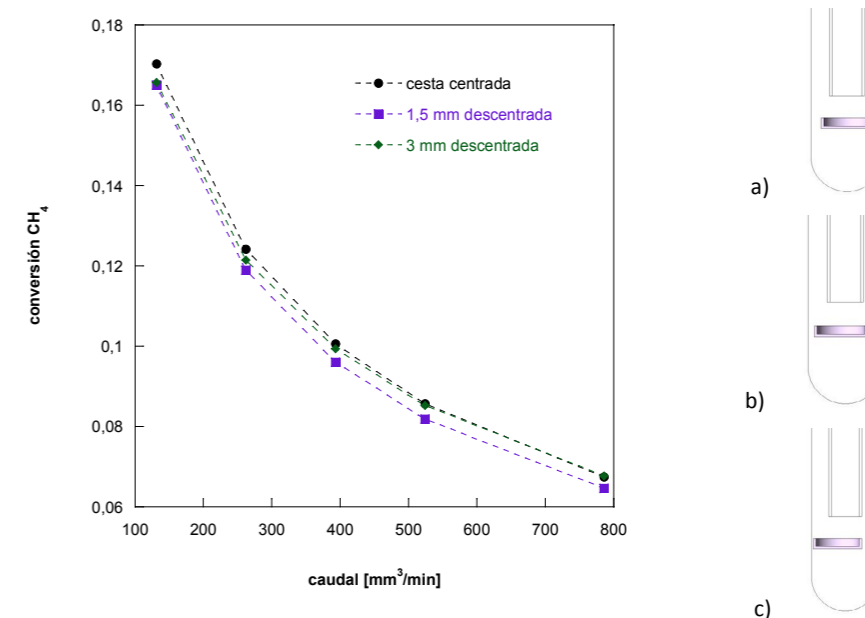


Figura 25.- Influencia de la posición de C_r8,3mm sobre la conversión de metano. Casos: a) centrada; b) 1,5 mm y c) 3 mm desplaza respecto al centro de la termobalanza.

En la figura 25 se observa cómo la posición de la cesta respecto al eje no influye prácticamente nada en el desarrollo de la reacción, si bien es posible que al no impactar el flujo equitativamente en el catalizador, los depósitos carbonosos se acumulen en zonas concretas, pudiendo resultar problemático en el transcurso del tiempo. Los campos de velocidades que ilustran cómo se mueve el fluido se encuentran en el anexo II

Capítulo 4: Propuesta de Mejoras

Las geometrías que mejor han funcionado en este análisis han sido las correspondientes al disco, la cesta de más radio y la placa. Partiendo de estas tres opciones, se han desarrollado variantes que traten de mejorar la eficacia de la reacción. Los criterios tenidos en cuenta han sido los siguientes: mejorar el flujo disminuyendo la “capa límite”, aumentar la superficie de contacto del fluido con el catalizador y disminuir el nivel de by-pass y el volumen muerto del dispositivo. Asimismo, se ha tenido presente que el elemento de soporte tiene que ser fácilmente reproducible y mecanizable, por lo que la geometría tampoco debe de ser muy compleja.

De este modo, para los soportes anteriormente mencionados, las propuestas realizadas son las siguientes:

1) Dado que el disco es el soporte más sencillo de mecanizar y el que a priori presenta las mayores ventajas. Se propone como mejora un aumento del radio, en la medida que sea posible.

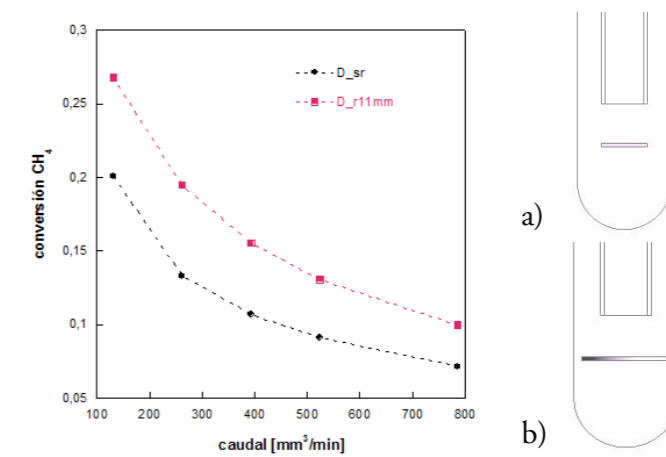


Figura 26.- Influencia del radio del disco sobre la conversión de metano. Casos: a) D_rs (5,3mm); b) D_r11mm.

En la figura 26 se observa cómo cuanto mayor es el disco, más se extiende la reacción. La figura 27 evidencia que, tal y como cabe esperar, al aumentar el radio del disco, aumenta la superficie de contacto fluido-catalizador y disminuye el by-pass, lo que hace que aumente la conversión de la reacción.



Figura 27.- Evolución de las líneas de flujo según el radio del disco: a) sr (5,3mm); b) r11mm.

2) Con respecto al diseño de placa, con el objetivo de aumentar la superficie de contacto, se incrementa un 20% la largura de la placa. A caudales más altos, se supone que las líneas de flujo llegarán hasta la parte más profunda del dispositivo. Si se dispone de catalizador en esta parte también, aumentará el grado de reacción y, además, disminuirá el volumen muerto.

También se ha pensado en la adición de una segunda placa de las mismas dimensiones que la placa base, pero girada 90°. El objetivo es doblar la superficie de contacto fluido-catalizador.

Con las mismas condiciones de operación que las anteriormente descritas, para un rango de caudales Q, las conversiones de metano encontradas a la salida de la termobalanza son las siguientes:

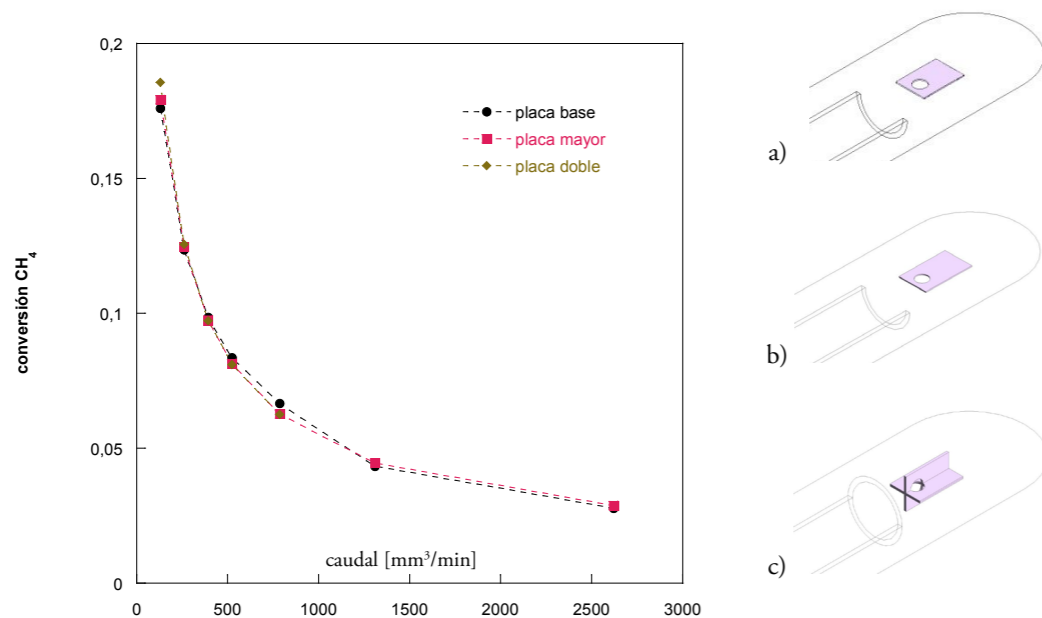


Figura 28.- Influencia de la geometría de la placa sobre la conversión de metano. Casos: a) P_s; b) P_más larga y c) doble placa.

En la figura 28 se observa que no hay diferencias significativas en las conversiones obtenidas incluso con caudales de hasta 2500 mm³/min. Para caudales más pequeños las conversiones obtenidas son ligeramente superiores con la doble placa.



Figura 29.- Campo de velocidades de: a) Placa 20% más larga y b) doble placa.

Con los campos de velocidades representados en la figura 29 se dilucida el por qué. La placa más larga (Fig.29a) no mejora el diseño en ningún aspecto, ya que en la parte añadida no hay apenas intercambio de fluido. Por otra parte, con la adición de una placa extra (Fig.29b), el flujo de fluido empeora, aumentando la dispersión del mismo. Así pues, el aumento de superficie de catalizador no compensa el peor intercambio de fluido.

3) Con respecto a la mejora que se propone en el cuerpo de la termobalanza es aumentar el diámetro del cilindro interanular con el objetivo de que el flujo de reactivo impacte de forma directa sobre más superficie del catalizador y no necesite dispersarse para llegar a él.

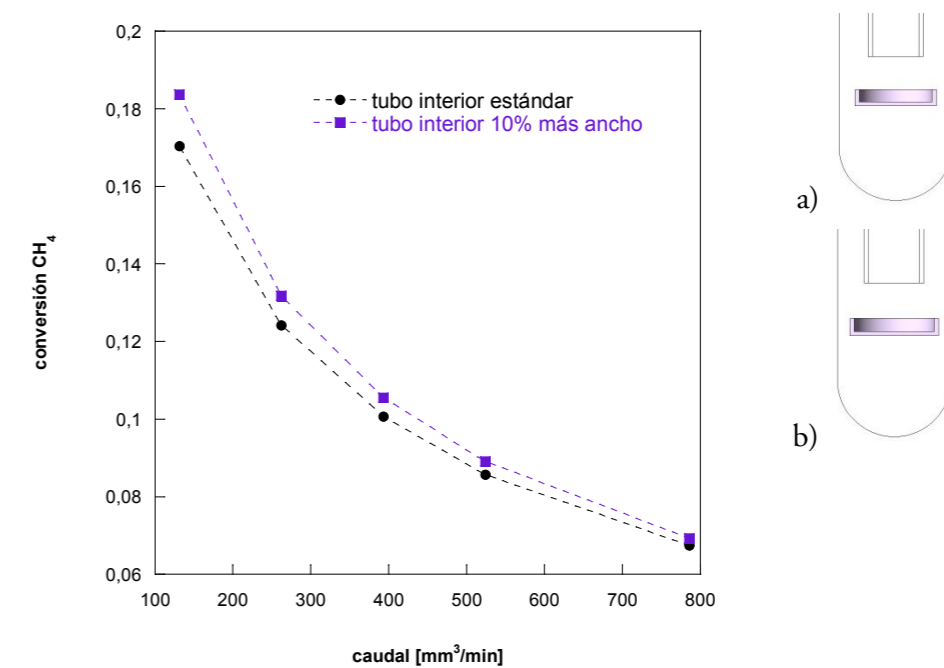


Figura 30.- Influencia del diámetro interno del cilindro interanular sobre la conversión de metano, usando como soporte C_8,3mm. Casos: a) diámetro estándar y b) 10% mayor.

En la figura 30 se observa que en todo el rango de caudales, las conversiones obtenidas cuando el diámetro del cilindro interanular aumenta son más altas.

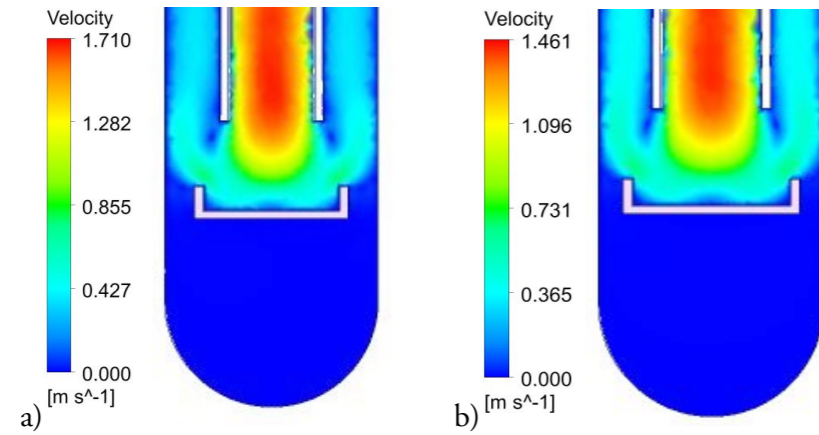


Figura 31.- Campos de velocidades para C_8,3mm con: a) cilindro interanular estándar y b) 10% más ancho.

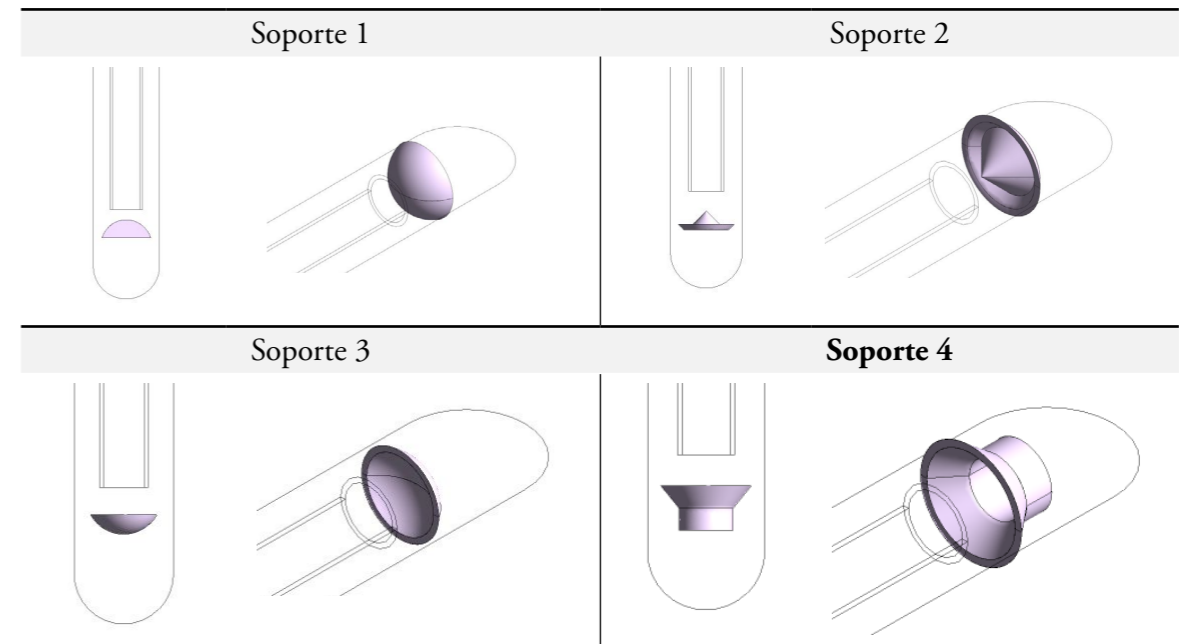
En la figura 31 se representan los campos de velocidades encontrados para estas dos situaciones. Se aprecia cómo cuando el tubo interior se ensancha, el perfil de velocidades se estrecha. El fluido fluye más despacio, generando el mismo efecto que si el caudal disminuyese, lo que se traduce en un aumento de la conversión de metano.

4) También se ha pensado sobre soportes que presenten nuevas geometrías, tal y como se recogen en las Tablas 5 y 6.

Tabla 5.- Nuevos soportes

Soporte	Objetivo
1	Sección esférica que servirá de soporte del catalizador, situada a la salida de la corriente de flujo reactante. Partiendo de la misma premisa que la geometría anterior, ésta aporta mayor superficie de contacto reactivo-catalizador.
2	Cono y cono invertido. El catalizador se dispone sobre la superficie expuesta de ambos tal y como representa la figura. Con esta geometría se pretende minimizar el by-pass.
3	Superficie esférica inversa. Variante del disco, con mayor superficie para mejorar el contacto reactivo-catalizador.
4	Tobera, donde la superficie reaccionante es el interior de la misma. Con esta geometría se pretende mejorar el flujo y eliminar el volumen muerto.

Tabla 6.- Representación de los nuevos soportes, alzado e isométrico



Para estas cuatro nuevas geometrías, repitiendo los parámetros de operación de estudios anteriores, la conversión de metano encontrada a la salida de la termobalanza, en un rango de caudales Q, se puede observar en la figura 32.

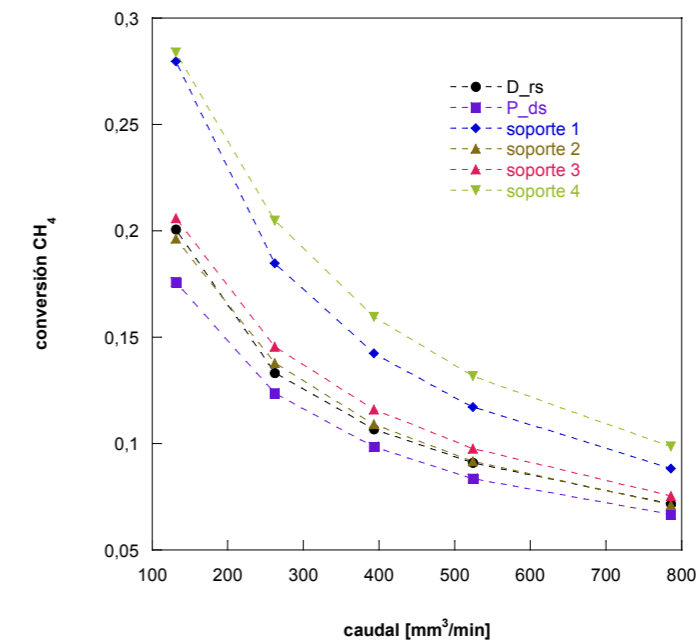


Figura 32.- Influencia del uso de nuevos soportes sobre la conversión de metano.

En la figura 32 se han representado también las conversiones obtenidas con el disco base y la placa base a modo de referencia. Se aprecia claramente que los nuevos soportes ideados conducen, en mayor o menor medida, a conversiones de metano más elevadas. La diferencia se hace más significativa a bajos caudales. De entre los nuevos soportes destacan los números 1 y 4.

Conclusiones

Se han desarrollado varios modelos de CFD en tres dimensiones con el fin de describir el comportamiento de una termobalanza utilizada como reactor para la descomposición de metano y formación de hidrógeno y materiales carbonosos.

En la cesta porta-muestras habitual de la termobalanza se deposita cierta cantidad de catalizador heterogéneo que reacciona con el flujo reactivo. La microbalanza de la termobalanza recoge la variación de peso consecuente de la deposición de materiales carbonosos en la superficie del catalizador como producto de la reacción. Al encontrar que el rendimiento de la reacción con el uso de la cesta es muy bajo, ésta se modifica y/o sustituye por diversos cuerpos que tratan de mejorar el desarrollo de la reacción.

Se han estudiado dos familias de soportes: las cestas, tomando como caso base la cesta habitual de la termobalanza, y las placas, constituyendo la placa base la que se utiliza actualmente en estudios de descomposición de metano en la Universidad de Zaragoza.

A estos casos base se les ha realizado modificaciones: en el caso de la cesta, en el radio y en la altura de pared; en el caso de la placa, su largura y disposición.

Los resultados fluidodinámicos obtenidos de estas variantes se han comparado entre sí mediante campos de velocidades, líneas de flujo o evolución de la conversión en el volumen del dispositivo.

Los casos más satisfactorios han sido los correspondientes a estas tres situaciones: la cesta con un radio mayor, la cesta sin paredes (disco), y la propia placa base. No obstante, incluso en estos casos, el alcance de la reacción es limitado, puesto que existen importantes impedimentos, como un considerable by-pass o la formación de una “capa límite” sobre la superficie del catalizador que dificulta el contacto directo entre reactivo y catalizador.

Para estas tres situaciones, se ha estudiado la influencia de la posición relativa del soporte respecto al brazo de la termobalanza. Por un lado, la importancia de la distancia entre el cilindro interanular por el que entra el flujo reaccionante y la base del soporte; por otro, la posición relativa del soporte respecto al centro; y, por último, la inclinación del soporte respecto a la horizontal. El factor crítico es el primero: la distancia entre cilindro interior y el soporte, siendo éste un factor determinante en el rendimiento de la reacción. Los otros dos factores, aunque influyen, lo hacen en menor medida.

El diámetro del tubo interior del brazo de la termobalanza también influye de manera considerable en el desarrollo de la reacción. No obstante, modificar este factor es mucho más costoso, ya que requiere cambios en el diseño de la termobalanza para el nuevo acople y se contemplaría llevarlo a cabo sólo en última instancia.

Finalmente, se proponen nuevos modelos de soporte que suplan las deficiencias encontradas anteriormente. Estos modelos, aunque de más compleja implementación y, sobre todo, manejo más dificultoso experimentalmente, conducen a conversiones más altas.

Cabe destacar el potencial que representa el CFD en general y esta herramienta, ANSYS®CFX en particular, para evaluar distintas opciones de geometría, condiciones de operación, cinéticas, etc. Como una buena aproximación a la experimentación.

Bibliografía

DUSSAULT, L., DUPIN, J.C., GUIMON, C., MONTHIOUX, M., LATORRE, N., UBIETO, T., ROMEO, E., ROYO, C., MONZÓN, A, 2007. *Development of Ni–Cu–Mg–Al catalysts for the synthesis of carbon nanofibers by catalytic decomposition of methane.*

LATORRE, N., CAZAÑA, F., MARTÍNEZ-HANSEN, V., ROYO, C., ROMEO, E., MONZÓN, A, 2011. *Ni-Co-Mg-Al catalysts for hydrogen and carbonaceous nanomaterials production by CCVD of methane.*

ASO, J. *Estudio del crecimiento de materiales nanocarbonosos grafénicos sobre sustratos metálicos (Acero AISI-316L), 2014.* Trabajo fin de grado, Universidad de Zaragoza.

ANSYS CFX, Release 10.0: Tutorials. 2009.

ANSYS, Modeling and Meshing Guide, Release 5.4. 1997.

BURILLO, J., *Estudio fluidodinámico de la fase gas en un Reactor de Lecho Fluidizado de Dos Zonas con Cambio de Sección (RLFDZ-CS): Experimentación, modelado matemático y simulación mediante CFD, 2012.* Trabajo fin de máster, Universidad de Zaragoza.

URIZ, I., ARZAMENDI, G., DIÉGUEZ, P. M., GANDÍA, L. M., 2013. Chapter 17 - *Computational Fluid Dynamics as a Tool for Designing Hydrogen Energy Technologies.*

ARZAMENDI, G., DIÉGUEZ, P.M., MONTES, M., ODRIOZOLA, J.A., FALABELLA SOUSA-AGUIAR, E., GANDÍA, L.M., 2009. *Methane steam reforming in a microchannel reactor for GTL intensification: A computational fluid dynamics simulation study.*

URIZ, I., ARZAMENDI, G., DIÉGUEZ, P.M., ECHAVE, F.J., SANZ, O. MONTES, M., GANDÍA, L.M, 2013. *CFD analysis of the effects of the flow distribution and heat losses on the steam reforming of methanol in catalytic (Pd/ZnO) microreactors.*

DUSSAULT, L., DUPIN, J.C., LATORRE, N., UBIETO, T., NOE, L., MONTHIOUX, M., ROMEO, E. ROYO, C., MONZÓN, A., GUIMON, C, 2006. *New Ni–Cu–Mg–Al-based catalysts preparation procedures for the synthesis of carbon nanofibers and nanotubes.*

BIRD, G.A., 1994. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Science Publications, Oxford, UK.

BIRD, R.B., STEWART, W.E., LIGHTFOOT, E.N., 2002. *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons,

Anexo I: Código para la Nomenclatura de Soportes

Para nombrar los soportes de catalizador recreados a lo largo de este PFC se utiliza el siguiente código:

Según la forma:

Geometría
Placa -> P
Cesta -> C
Disco -> D

Según sus medidas:

Longitudes	
Distancia entre la superficie del catalizador y la sección interanular	Distancia estándar -> sd (10 mm)
Radio interno de la cesta	Radio estándar -> sr (5,3 mm)
Altura libre de la cesta	Altura estándar -> sh (3 mm)

Por ejemplo, una cesta con todos los parámetros estándar será nombrada de la siguiente manera: C_sd_sr_sh; Una cesta que se encuentre más cerca de la sección interanular y de mayor radio se determinará así: C_d7mm_r8,3mm_sh o, simplificando: C_d7mm_r8,3mm.

Anexo II: Principios Fundamentales del CFD

Las ecuaciones que resuelven los modelos en CFD son los balances de cantidad de movimiento y materia total que determinan los campos de velocidad, presión y densidad. Dependiendo de la naturaleza del problema, estos balances se complementan con los de energía (total o térmica) y los balances a las especies individuales si tienen lugar reacciones químicas.

1. Modelado matemático

Las propiedades extensivas (materia, energía, cantidad de movimiento) están sujetas a leyes de conservación, de manera que es posible someterlas a balances para conocer los cambios de

propiedad que experimenta un sistema físico. El balance, por lo tanto, se corresponde con una consideración o visión “integral”. A partir de los balances se pueden “derivar” las ecuaciones de transporte, que consisten en ecuaciones diferenciales que describen la distribución espacial y temporal de magnitudes intensivas, referidas a la masa (fracciones másicas o molares, energía específica) o al volumen (densidad y concentración molar), es decir, una concentración de propiedad o magnitud de transporte que en el caso más general se representa como Φ . En estas condiciones se puede escribir la ecuación general de transporte como sigue:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\text{div}(\vec{v} \cdot \Phi) - \text{div} \vec{J}_\Phi + S_\Phi \quad (1)$$

Donde \vec{v} es la velocidad y el término $-\text{div}(\vec{v} \cdot \Phi)$ representa la entrada neta de propiedad por transporte advectivo; \vec{J}_Φ es el flujo de propiedad por difusión molecular y $-\text{div} \vec{J}_\Phi$ la entrada neta de propiedad asociada a este mecanismo de transporte. Finalmente S_Φ es un término “fuente” de propiedad (generación neta). En el caso del transporte de cantidad de movimiento, corresponde a fuerzas externas; en el transporte de energía, al intercambio entre unas formas y otras de energía, y para el transporte de materia, al consumo o formación de la especie de interés asociado a reacciones químicas.

Las ecuaciones de transporte de propiedad se deducen a partir de principios fundamentales; como por ejemplo, el principio de conservación de materia, del que se deduce la ecuación de continuidad en la que la propiedad de transporte es la densidad, ρ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div}(\vec{v} \cdot \rho) \quad (2)$$

Por otro lado, la ecuación del movimiento resulta del principio de conservación de la cantidad de movimiento, que viene a ser un balance de fuerzas, en el que la propiedad de transporte es la cantidad de movimiento referida al volumen $\rho \vec{v}$:

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} = -\text{div}(\rho \vec{v} \cdot \vec{v}) - \text{div} \tau - \text{grad} p + \rho \vec{g} \quad (3)$$

Esta ecuación es fundamental en CFD ya que el fin último es describir la dinámica de los fluidos. τ es el tensor esfuerzo cortante y $\text{grad} p$ es el gradiente de presión, que puede considerarse como un término fuente (caso de la ecuación 3) o bien ser tratado como un esfuerzo, en cuyo caso se suele incluir implícitamente en τ . Refiriéndose a la ecuación 3, el grupo $-\text{div} \tau - \text{grad} p$ representa el incremento neto de cantidad de movimiento por unidad de volumen asociado al transporte molecular. Finalmente, la acción de las fuerzas de la gravedad aparece en la ecuación como un término fuente. El manejo de la ecuación del movimiento es complicado fundamental-

mente por dos motivos: El primero es la estructura no lineal del término de transporte advectivo ($-\text{div}(\rho \vec{v} \cdot \vec{v})$); mientras que para el transporte de materia o energía térmica la velocidad se puede tratar como un parámetro, en la ecuación del movimiento es la incógnita. El segundo está relacionado con el término $\text{grad} p$, ya que no existe una ecuación de transporte para la presión. En el caso de fluidos compresibles, el uso de una ecuación de estado permite calcular la presión a partir del campo de densidades procedente de la ecuación de continuidad. Para fluidos incompresibles, la densidad es constante y la presión no se puede calcular a partir de una ecuación de estado.

Un caso particular de notable interés corresponde al caso de fluidos newtonianos con densidad y viscosidad (μ) constantes, para el que las ecuaciones 2 y 3 adoptan las siguientes expresiones:

$$\text{div} \vec{v} = 0 \quad (4)$$

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\rho \vec{v} \cdot \text{grad} \vec{v} + \mu \cdot \nabla^2 \vec{v} - \text{grad} p + \rho \vec{g} \quad (5)$$

Estas ecuaciones constituyen las ecuaciones de Navier-Stokes, cuya validez se limita a las condiciones indicadas ya que los cambios de temperatura y composición afectan a las propiedades del fluido y la velocidad; sin embargo, constituyen una primera aproximación razonable en muchos casos.

La ecuación de continuidad surge de un balance de materia total. En un sistema multicomponente se precisa conocer la concentración de las diferentes especies que intervienen por lo que, además de la ecuación de continuidad, se deben plantear tantas ecuaciones de concentración (c) como número de componentes menos uno:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\text{div}(c \cdot \vec{v}) + \text{div}(D \cdot \text{grad} c) + S_c \quad (6)$$

Donde D es el coeficiente de difusión molecular y S_c el término fuente asociado a las reacciones químicas y que viene dado por la cinética química. Este término incluye habitualmente expresiones no lineales dependientes de la temperatura y de la concentración del resto de especies, lo que complica en gran medida la resolución.

Por lo que respecta a la ecuación de la energía, en CFD, la ecuación para la energía interna específica (u) se emplea para calcular el perfil de temperaturas. La energía interna engloba la energía cinética de los átomos y moléculas, la energía potencial de las interacciones atómicas, la energía asociada a los enlaces químicos y la energía nuclear. La expresión de este balance es la siguiente:

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = -\text{div}(\rho u \cdot \vec{v}) - \text{div} \vec{q} - (\tau : \text{grad} \vec{v}) - p(\text{div} \vec{v}) + S_u \quad (7)$$

transporte molecular (conducción), $-(\tau : grad \vec{v})$ el aumento neto de energía por disipación viscosa, $-p(div \vec{v})$ el aumento por compresión y S_u el término fuente. Un caso de particular interés es cuando la única fuente procede del cambio de entalpía asociado a una reacción química (S_h); si además es posible despreciar la disipación viscosa y otros fenómenos como la radiación, se puede plantear una ecuación de la temperatura:

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} = -\vec{v} \cdot grad(\rho c_p T) - div(\lambda \cdot grad(\rho c_p T)) + S_h \quad (8)$$

Donde c_p es el calor específico y λ la conductividad térmica.

Las ecuaciones de transporte son ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y se precisa establecer las condiciones iniciales (para el tiempo) y de contorno (para el espacio) que permitan su resolución. Las condiciones de contorno más empleadas en CFD son:

- Entrada de fluido (Inlet): se define con la opción de flujo másico ('mass flow rate', en Kg/s) ya que, así, se erige una pared ficticia que impide el escape del gas por abajo. Especificar únicamente condiciones de velocidad de entrada de gas, implicaría el posible escape del mismo, tal y como se esquematiza en la figura 33:

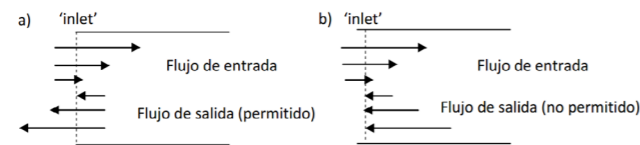


Figura 33.- Variable de contorno tipo "inlet", especificando: a) velocidad del gas, b) flujo másico del gas

- Pared: La mayoría de los sistemas físicos de interés están limitados, al menos en parte, por paredes sólidas que pueden ser estáticas o móviles. Son fronteras que no permiten el flujo de materia pero sí el de calor.

Con respecto a la velocidad, lo habitual es encontrarse en condiciones de flujo no deslizante, y por lo tanto, la velocidad del mismo será nula si la pared está estática. El carácter deslizante o no del flujo se evalúa a través del número de Knudsen (K):

$$K = \frac{\lambda_{mfp}}{l} \quad (9)$$

Donde λ_{mfp} es el recorrido libre molecular medio y l la dimensión característica del sistema. Si K es menor que 0,001 el fluido se considera como un medio continuo;

para valores de K entre 0,001 y 0,1 se considera flujo deslizante. Valores entre 0,1 y 10 corresponden al régimen de transición y por encima de 10 se considera flujo molecular libre, en el que pasan a dominar las interacciones (colisiones) de las moléculas con la pared. Para un gas simple, el recorrido libre molecular medio en el marco de la teoría cinética se puede calcular como sigue:

$$\lambda_{mfp} = \frac{\kappa \cdot T}{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot d_m^2 \cdot p} \quad (10)$$

Donde d_m es el diámetro molecular y κ la constante de Boltzmann. De estas ecuaciones se deduce que el flujo deslizante se ve favorecido, además de al disminuir la dimensión característica, al aumentar la temperatura y disminuir el tamaño de las moléculas y la presión.

- Salida (Outlet): Es frecuente establecer un caudal másico que garantice la conservación de la materia o bien establecer el valor de la presión a la salida.
- Simetría (Symmetry): En ocasiones, los sistemas físicos estudiados presentan simetría, lo que se puede aprovechar para reducir la extensión del modelo a la parte replicable con el consiguiente ahorro de esfuerzo computacional. La simetría no sólo debe ser geométrica sino que se tiene que poder aplicar a todas las propiedades de transporte

2. Discretización

Dada la complejidad y carácter acoplado de las ecuaciones diferenciales que constituyen el modelo matemático, éstas se tienen que resolver de forma numérica. Esto implica reemplazar las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, definidas de forma continua en el espacio y el tiempo, por un sistema de ecuaciones algebraicas que proporcionan la solución sólo en unos determinados puntos discretos.

La discretización del espacio ofrece muchas posibilidades. Los dos métodos más empleados en CFD, volúmenes finitos (FVM, finite volume method) y elementos finitos (FEM, finite element method), requieren la subdivisión del espacio computacional en una serie de celdas que no deben solaparse. El conjunto de celdas constituye una malla.

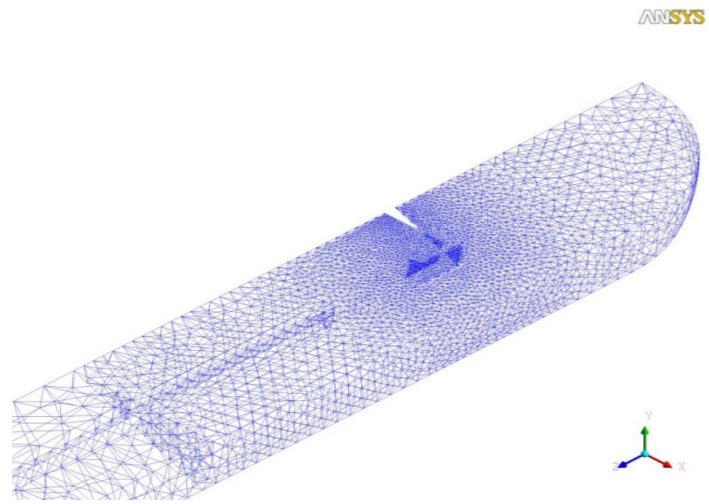


Figura 34.- Ejemplo de malla no estructurada.

Es importante que las mallas se ajusten a los siguientes requisitos:

- Geométricos: los bordes se deben ajustar lo mejor posible a los extremos del dominio físico para introducir las condiciones de contorno en los puntos correctos.
- Físicos: la densidad de celdas debe ser mayor en lugares donde se producen cambios bruscos. Por el contrario, aquellas zonas en las que las variaciones de las propiedades sean suaves admiten mallados más gruesos, con celdas de mayor tamaño.
- Numéricos: es preciso evitar cambios bruscos en el tamaño de las celdas, así como que su relación volumen/superficie sea muy pequeña.

Existen dos tipos de mallas: las estructuradas y las no estructuradas. Las primeras son regulares y fáciles de generar, y se adaptan bien a geometrías simples sin curvaturas. Las mallas no estructuradas son más flexibles, y permiten adaptarse a geometrías complejas, con curvaturas y ángulos pronunciados. Todas las mallas empleadas en este PFC son no estructuradas.

3. Resolución numérica. Método de los volúmenes finitos

El método de los volúmenes finitos (FM) es el más común en los códigos CFD. Se basa en considerar una serie de celdas en las que se asumen constantes todas las propiedades. Los balances se integran para cada elemento transformando las integrales de volumen en integrales de superficie a través del teorema de la divergencia.

Para expresar los valores de flujo de propiedad en la superficie de los elementos es posible seguir distintos procedimientos como por ejemplo:

- Upwind Differencing Scheme (UD): Resulta un procedimiento simple y matemáticamente muy estable aunque el error numérico es relativamente grande; además, se tiende a suavizar los gradientes de propiedad (difusión numérica).
- Central Differencing Scheme (CD): Más adecuado para describir cambios pronunciados en las propiedades, aunque los resultados tienden a mostrar oscilaciones numéricas que en ocasiones dificultan que la solución alcance la convergencia.
- QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics): Comparte aspectos de los dos esquemas anteriores. Las oscilaciones numéricas no son tan marcadas como para CD pero presenta limitaciones para sistemas con una marcada componente difusiva.

4. Análisis de los resultados

El CFD presenta una alta calidad en lo que a representaciones gráficas o generación de imágenes se refiere. Esta herramienta de diseño es considerada de gran valor ya que al mismo tiempo proporciona unos resultados computacionales de gran efectividad.

Gran parte de los resultados gráficos que proporciona CFD pueden ser clasificados en distintas categorías, las cuales proporcionan al usuario una mejor visualización de las características físicas del flujo del fluido. Los resultados obtenidos deben ser minuciosamente analizados e interpretados antes de considerarlos como válidos. Para obtener resultados satisfactorios es posible que se requiera ciertas modificaciones en el sistema, el mallado, el método de cálculo o los parámetros.

Finalmente, los resultados de la simulación tendrán que ser cotejados con los resultados experimentales para confirmarlos válidos.

Los principales tipos de errores que han de tenerse en cuenta al evaluar la calidad de los resultados de las simulaciones CFD son los siguientes:

- Errores de modelado:

Se refieren a las diferencias entre los valores reales de las propiedades de un sistema físico y los que resultan de una solución exacta del modelo matemático. Ni todos los fenómenos físicos o químicos se pueden formular con exactitud, ni cualquier modelo matemático se puede resolver exactamente. Es preciso introducir, por lo tanto, simplificaciones que llevan asociadas un error.

- Errores de discretización

Los errores de discretización se deben a la diferencia entre la solución exacta que proporcionan las ecuaciones y una solución numérica limitada en tiempo y espacio. Son fruto de soluciones numéricas aproximadas en lugar de soluciones exactas de las ecuaciones de transporte. Para una constante discretización de las ecuaciones algebraicas, se espera que los resultados computados se vayan aproximando a la solución exacta de las ecuaciones según aumente el número de elementos de compongan la malla. Los resultados se ven íntimamente ligados a la densidad que presenta la malla y a la forma de distribución de los nodos.

- Errores de truncamiento

Los procedimientos iterativos se emplean para resolver las ecuaciones discretizadas y una vez alcanzada la convergencia previamente establecida, proporcionan un resultado. El criterio de convergencia se determina muchas veces mediante el valor de los residuales. En algunos casos, este criterio se basa en tomar como referencia la diferencia de los resultados de dos iteraciones consecutivas. El problema radica en que para un tipo de convergencia lenta, la diferencia entre esas dos iteraciones es considerablemente pequeña, incluso estando lejos de la solución.

Anexo III: Modelado con ANSYS® CFX 12.0

Para la resolución de un caso CFD utilizando el programa ANSYS® CFX se deben seguir los siguientes pasos:

1. Definición del problema (Pre-Process).
2. Solución numérica (CFD Solver).
3. Visualización de los resultados (Post-Process).

En estos pasos se han utilizado diversos subprogramas que proporciona ANSYS®.

El acceso e interconexión de los distintos subprogramas de ANSYS® se lleva a cabo con ANSYS Workbench®, una interfaz de usuario muy eficiente e intuitiva.

1. Definición del problema (Pre-Process).

El pre-proceso constituye el primer paso a la hora de diseñar el modelo fluidodinámico a estudiar. Consta de tres etapas básicas:

- Definición o construcción de la geometría de los dominios de estudio.
- Discretización de los dominios en subvolúmenes finitos, etapa conocida como mallado.
- Definición del modelo CFX, donde sobre la geometría mallada se define el modelo físico a resolver incluyendo todas las especificaciones que requerirá la simulación:

- propiedades de los materiales que componen el problema, variables de entorno, criterios de resolución, etc

1.1. Geometría y mallado

Para el caso objeto de estudio de este proyecto, con la aplicación *Geometry Design Modeler*, se dibuja de forma simplificada el brazo de la termobalanza, empleando elementos de volumen sencillos como cilindros concéntricos acabados en una media esfera que emulan el tubo de entrada de gas reactivo, la región donde se instalará el dispositivo que soporta el catalizador y la zona de la cámara anular por la que el fluido abandona el brazo.

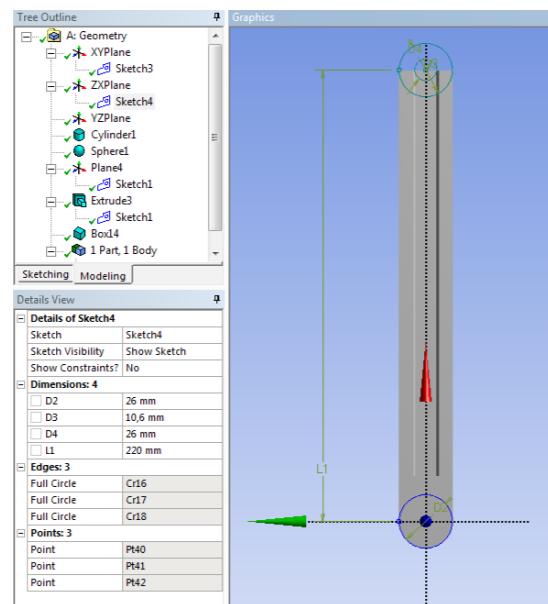


Figura 35.- Detalle de los cuerpos creados para construir la termobalanza.

En la figura 35 se aprecian los volúmenes creados en una primera etapa. Posteriormente hay que añadir a éstos el elemento soporte del catalizador.

Una vez finalizada la geometría, se procede a su discretización empleando la aplicación ANSYS® CFX- Mesh Method.

Para el tipo de geometría que se trata en este PFC, ANSYS®CFX recomienda un mallado de tipo no estructurado, con celdas de distinto tipo y/o de diferente tamaño que permiten modelar geometrías complicadas y optimizar el número de celdas usadas en cada región del dominio fluido.

Una malla bien construida ejerce una gran influencia en el cálculo numérico, evitando problemas que conducen a inestabilidad o difícil convergencia. Se ha buscado un compromiso entre el número de elementos de malla y el esfuerzo computacional, con mallas con un número de elementos de entre 100.000 y 1.000.000.

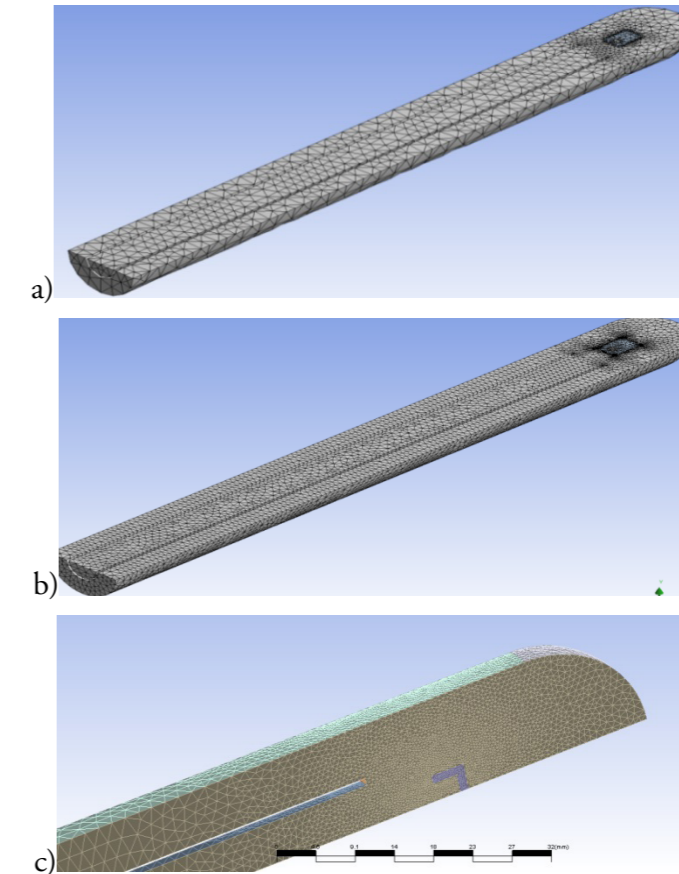


Figura 36.- Opciones de mallado: a) Mallado deficiente, b) Mallado apropiado y c) Detalle del mallado, con más elementos en la zona donde tiene lugar la reacción.

En la figura anterior se representa: a) un mallado grueso, que conducirá a una discretización deficiente y, por lo tanto, a una baja precisión; b) un mallado adecuado, que cumple el compromiso entre número de elementos y esfuerzo computacional, y c), donde se aprecia cómo en la zona del soporte (azul), donde tiene lugar la reacción y, consecuentemente, donde se producirán las mayores variaciones en cuanto a composición y sentido de flujo del reactivo, las celdas creadas tienen menor tamaño, con el objetivo de conseguir una mejor discretización.

1.2. Definición del modelo de preprocesador CFX

El primer paso consiste en importar la geometría del sistema ya mallada y en localizar los distintos dominios, regiones, etc. Las variables de entorno principales son las siguientes:

- Entrada de fluido (Inlet): Cilindro interanular; se define como flujo másico.
- Salida (Outlet): Cilindro exterior. La salida de gases del bulbo de la termobalanza está definida con la condición 'outlet', especificando así que la presión es la atmosférica.
- Pared (Wall): Barreras físicas de la Termobalanza: Cilindros interior y exterior, así como el soporte del catalizador.
- Simetría (Symmetry): El caso de la termobalanza presenta simetría circular.
- Interfases: Sirven para crear las transiciones entre dominio fluídico y dominio sólido. En el caso estudiado, el soporte del catalizador está constituido como elemento sólido. Para que el software interprete correctamente que el fluido abandona el dominio fluídico y se topa con un sólido es necesario la creación de estas interfaces. Así, por ejemplo, la superficie que soporta al catalizador se define como una interfase, sobre la cual tiene lugar una desaparición constante ("total source") de metano que responde a la cinética establecida.

1.3. Definición de flujo

El flujo tiene que estar definido tanto con la composición como con el caudal. El fluido empleado en este proceso es una mezcla de nitrógeno (99%) y metano (1%) en peso. En cuanto al caudal, como es interesante el estudio de la cinética en un rango de caudales y no en uno fijo, se define una variable para él. El caudal volumétrico escogido por defecto es el de 524 mm³/min por tratarse de un caudal plausible en muchas operaciones. Al tratarse de una mezcla reaccionante, se especifica que la composición de la mezcla no es constante, sino que variará a lo largo del sistema. Se supone, además, que se trata de una reacción isoterma que se lleva a cabo a una

temperatura de 25°C y que no hay cambio de presión, por lo que la sobrepresión a la salida de la termobalanza es de 0 pascales.

En cuanto al régimen de flujo, se presupone un flujo laminar.

1.4. Definición de variables y expresiones

En el diseño del CFX se definen las siguientes variables y expresiones para el procesador:

- Cinética: ecuación cinética de la reacción química que tiene lugar. Hay que especificar sobre qué superficie se produce.
- Factor que relaciona la simetría representada en el modelo de CFX con caudal entrante. Por ejemplo, si se representa ½ del dispositivo, el caudal entrante será también la mitad del total.
- Factor que relaciona el caudal entrante con la cinética. Del mismo modo que con el factor anterior, la cantidad de catalizador disponible para reaccionar será proporcional a la fracción del dispositivo representada.

1.5. Modelos físicos de integración (parámetro de "Solver")

La herramienta con la que se lleva a cabo la resolución de ecuaciones es "Solver Control". Ésta presenta 3 métodos de discretización: Upwind, High Resolution y Specified Blend Factor

El modelo empleado en este proyecto es Upwind (Upwind Differencing Scheme), por ser el que lleva a mejores resultados en la resolución. El método Upwind es un método de volúmenes finitos, que resulta un procedimiento simple y matemáticamente muy estable, aunque el error matemático es relativamente grande.

2. Solución numérica (CFD Solver).

En el módulo 'Solver' se realizan los cálculos sobre el flujo y se desarrollan los resultados. Tal y como se ha comentado, ANSYS® utiliza el método de los elementos finitos y resuelve el problema mediante un algoritmo numérico. Este algoritmo funciona iterativamente. Utilizando los parámetros que se han descrito en el apartado anterior, se calcula una solución y se verifica su convergencia. Si no se consigue reducir el error en el valor asignado, se sigue iterando hasta conseguir la precisión establecida.

Este módulo permite la visualización de la resolución del problema obteniendo gráficos transitorios de las variables que se hayan monitorizado anteriormente, así como de los errores en el cálculo de diferentes variables (representados en la fig. 37)

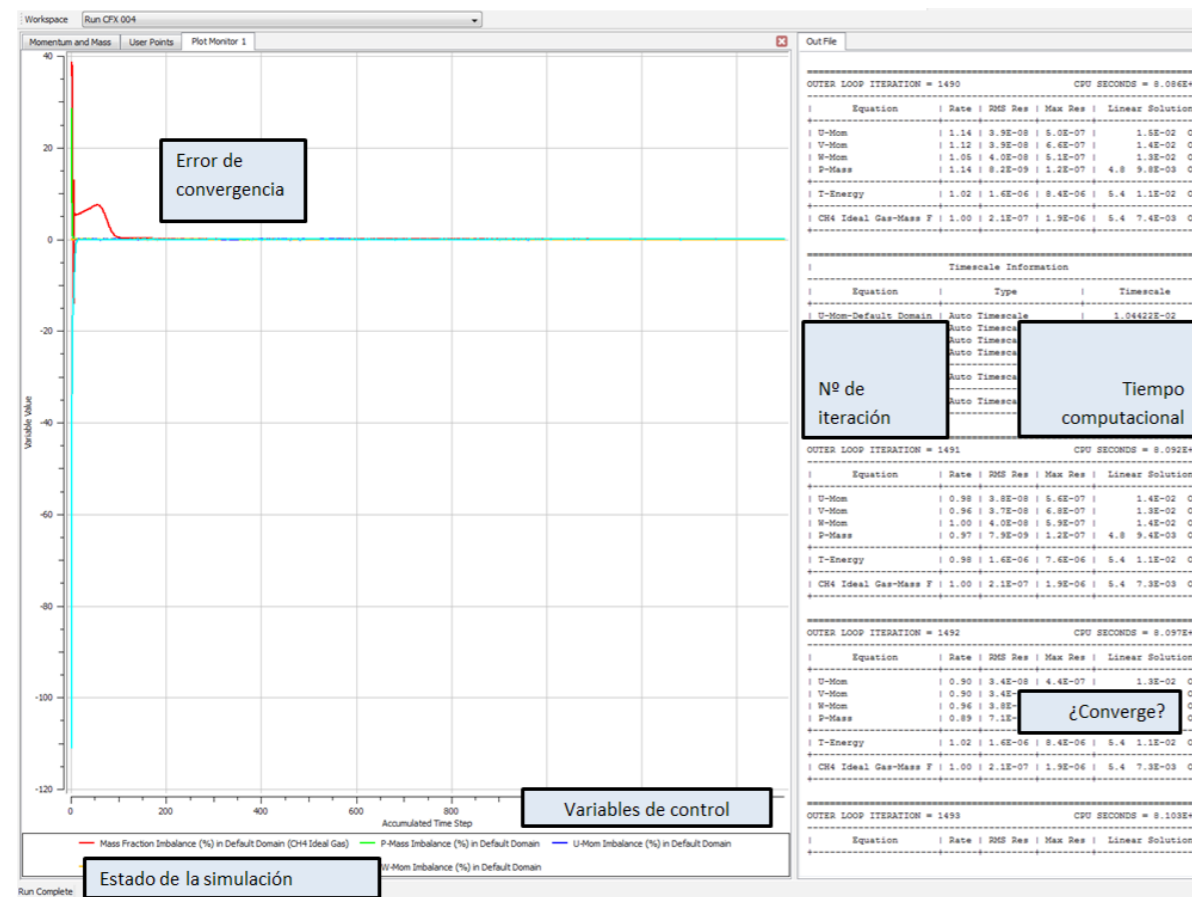


Figura 37.- Parámetros del Solver.

3. Visualización de los resultados (Post-Process).

El post-proceso constituye el paso final en el análisis CFD. Los resultados de las simulaciones pueden analizarse numéricamente y, además, de forma visual mediante el paquete CFX-Post. El volumen de resultados que proporcionan las simulaciones por CFD es enorme, al igual que las posibilidades que ofrecen los programas comerciales modernos para representarlo gráficamente. Se pueden definir gráficos a color que muestran los campos de las propiedades de transporte en líneas, superficies o volúmenes; representaciones de líneas de corriente e incluso animaciones.

Es muy importante realizar una cuidadosa interpretación de los resultados para constatar su coherencia, lo que normalmente lleva a realizar modificaciones en la malla, en el modelo, en el esquema de integración o en alguno de sus parámetros hasta que se obtiene un resultado con suficiente grado de confianza.

Anexo IV: Modificaciones Detalladas

1. Cesta de mayor radio (C_sd_r8,3mm_sh)

El primero de los cambios consiste en aumentar el diámetro interno de la cesta, pasando de 10,6 mm a 16,6 mm. La posición de la cesta respecto a la termobalanza se mantiene sin cambios.

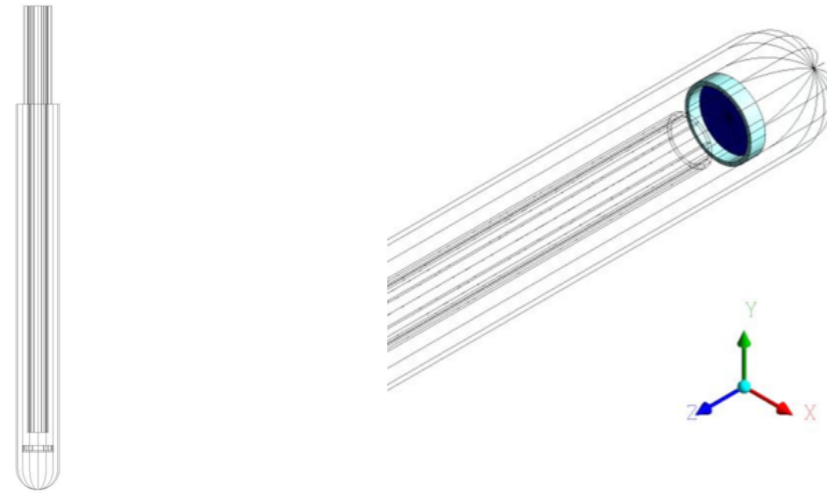


Figura 38.- Alzado de la termobalanza con la cesta con mayor radio y zoom de la zona principal.

2. Cesta de menor radio (C_sd_r2,3mm_sh)

Posteriormente se realiza la acción contraria, se reduce el diámetro interno de los 10,6 mm del caso base a 4,6 mm, manteniendo constante la posición relativa de la cesta.

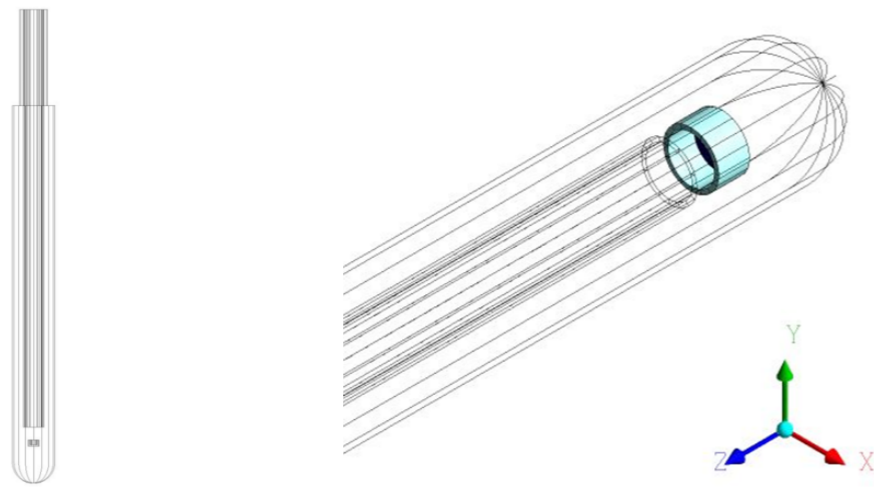


Figura 39.- Alzado de la termobalanza con la cesta con menor radio y zoom de la zona principal.

3. Cesta alejada (C_d20_sr_sh)

A continuación, se modifica la distancia entre la salida del tubo y la cara interior de la base de la cesta, pasando de 10 a 20 mm. El diámetro interno es el inicial, 10,6 mm.

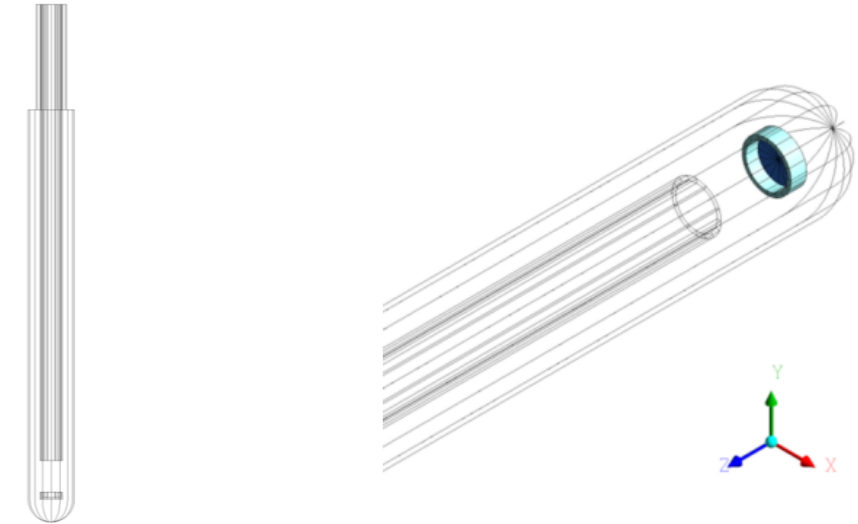


Figura 40.- Alzado de la termobalanza con la cesta alejada y zoom de la zona principal

4. Cesta más profunda (C_sd_sr_h6)

Partiendo del caso base, se modifica esta vez la profundidad de la cesta. La altura de la cesta pasa de 4 a 7 mm totales, o lo que es lo mismo, la altura libre pasa de 3 a 6 mm.

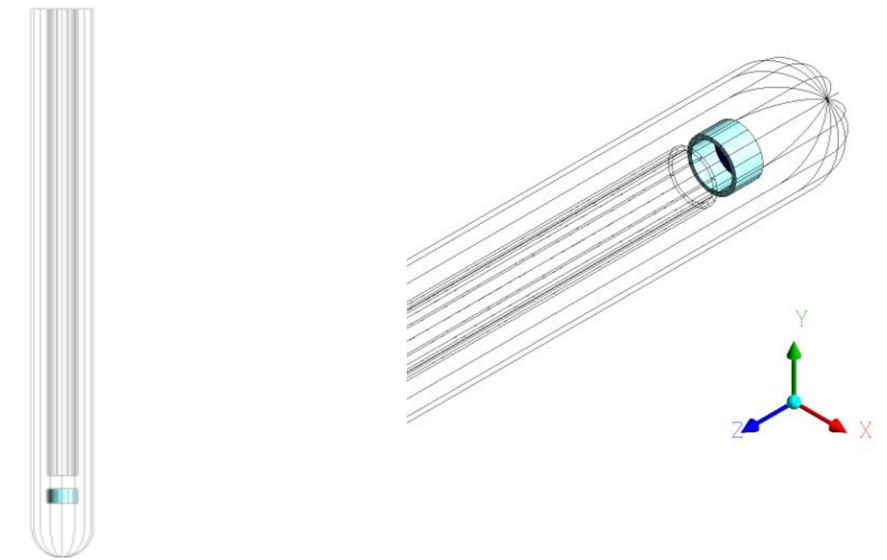


Figura 41.- Alzado de la termobalanza con la cesta alejada y zoom de la zona principal

5. Disco (D_sd_sr_sh)

La última modificación que se realiza es la eliminación de las paredes laterales, es decir, se convierte la cesta en un disco de 1 mm de espesor.

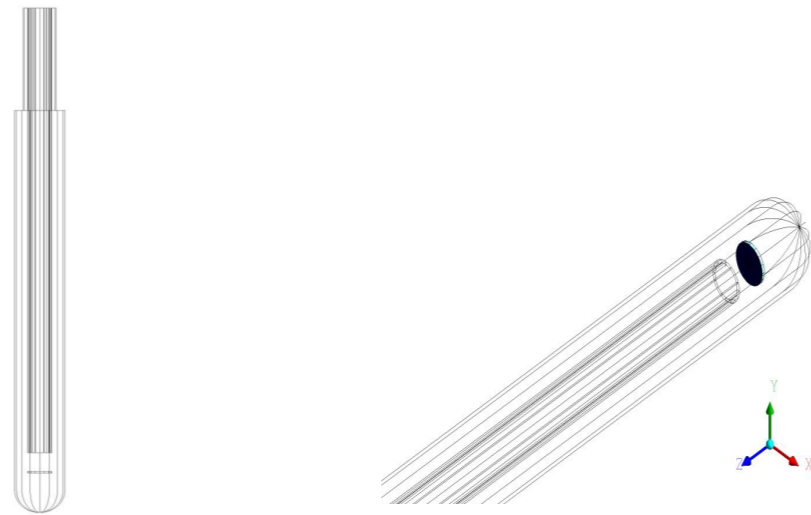


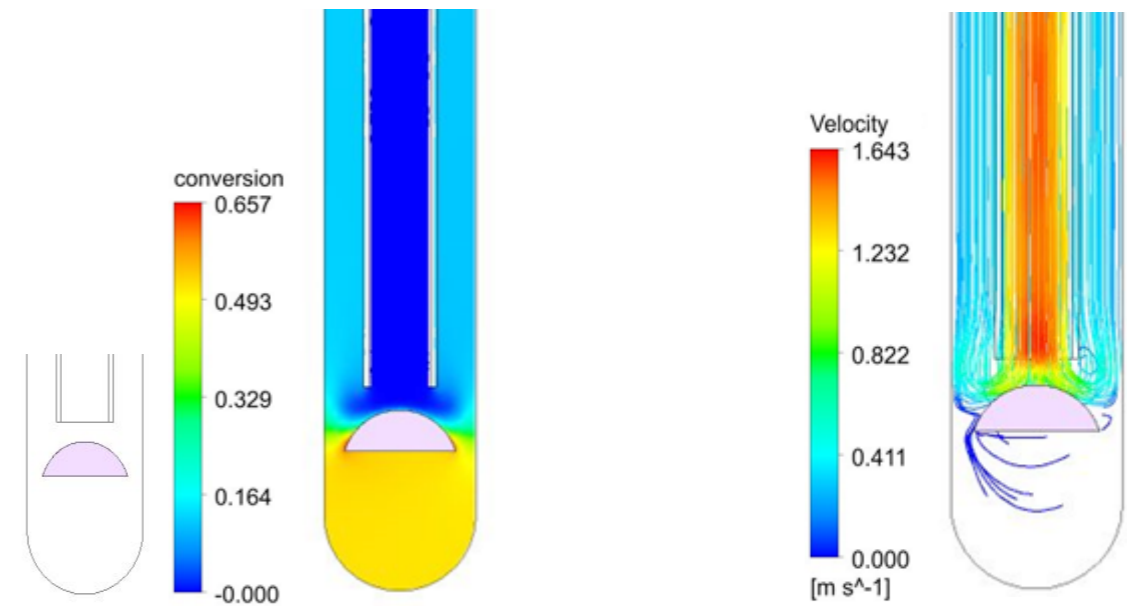
Figura 42.- Alzado de la termobalanza con el disco y zoom de la zona principal

Anexo V: Ampliación de Resultados

Mapas de conversión y Líneas de velocidad para nuevos soportes

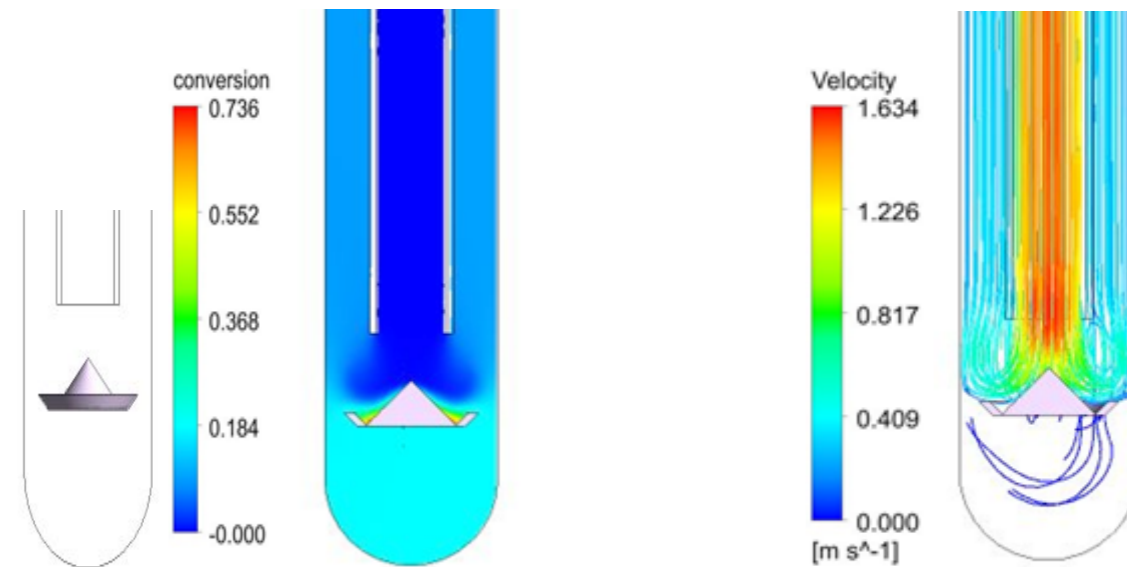
Soporte 1

Mapa de conversión	Lineas de flujo
--------------------	-----------------



Soporte 2

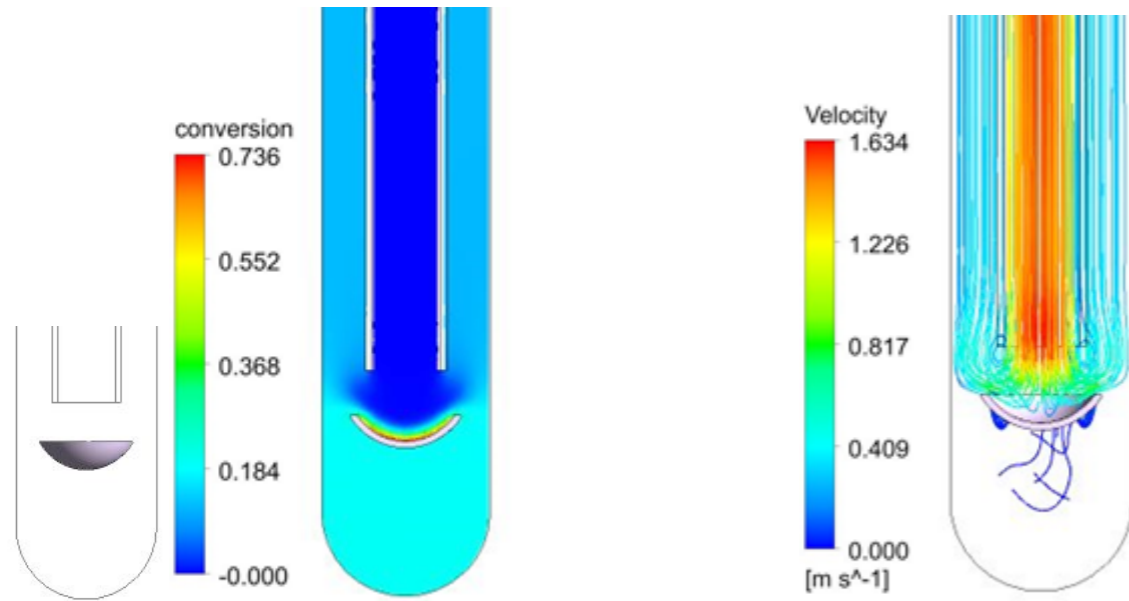
Mapa de conversión	Lineas de flujo
--------------------	-----------------



Soporte 3

Mapa de conversión

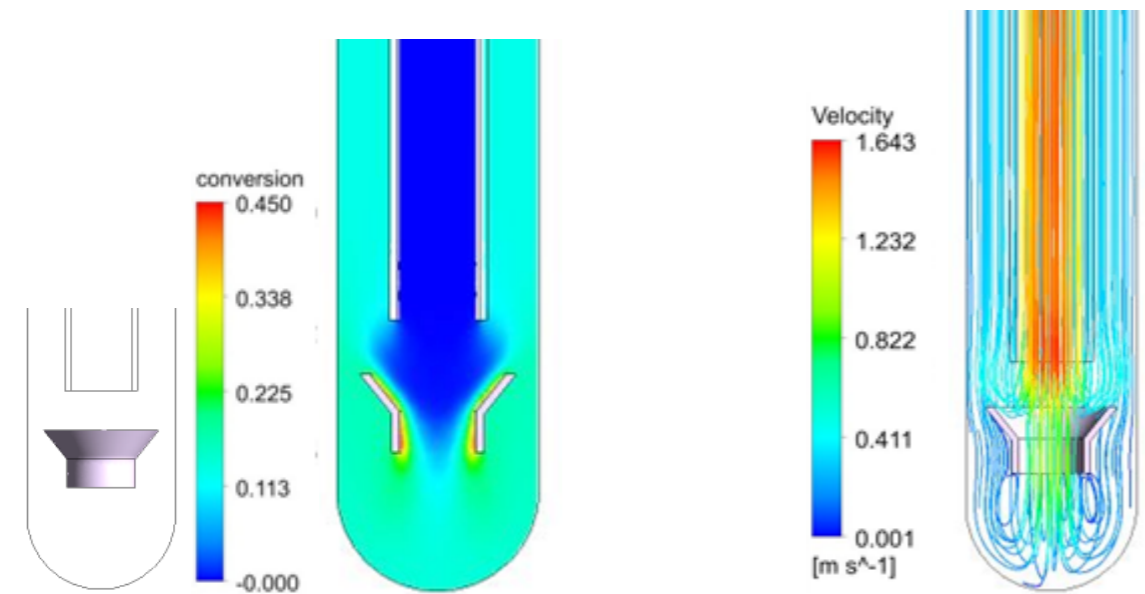
Lineas de flujo



Soporte 1

Mapa de conversión

Lineas de flujo



Índice de Figuras

Figura 1.- Esquema completo de un sistema termogravimétrico. (pág 1)

Figura 2.- Cuerpo de la termobalanza (a) y detalle de la parte que se va a estudiar (b).(pág 2)

Figura 3.- Detalle de mallado no estructurado.(pág 6)

Figura 4.- Esquema del proceso de resolución.(pág 7)

Figura 5.- a) Medidas de la placa; b) Alzado de la termobalanza con la placa; c) Zoom de un plano isométrico.(pág 8)

Figura 6.- a) Esquema de la posición de la cesta; b) Alzado de la termobalanza con la cesta; c) Zoom de un plano isométrico. (pág 8)

Figura 7.- Diseños CFX: a) completo; b) sin estrechamiento; c) sin estrechamiento y 30% más corto; d) geometría simplificada aprovechando la simetría cilíndrica y posterior composición global del dispositivo por la réplica de ½ del mismo; e) detalle de la composición replicada(pág9)

Figura 8.- Evolución de la conversión de metano alcanzada para las mallas I-IV. (pág11)

Figura 9.- Influencia del dominio fluídico representado en CFX sobre la conversión de metano. (pág 11)

Figura 10.- Evolución de la conversión de metano alcanzada para diferentes valores iniciales de iteración. (pág 13)

Figura 11.- Evolución de la conversión de metano alcanzada para diferentes factores de escala de tiempo. (pág 13)

Figura 12.- Detalle de líneas de flujo en el dispositivo. (pág 13)

Figura 13.- Influencia de la fracción del dispositivo representado en CFX sobre la conversión de metano. Caso: cesta base. (C_sd_sr_sh) (pág 16)

Figura 14.- Influencia de la fracción del dispositivo representado en CFX sobre la conversión de metano. Caso: disco base. (D_sd_sr_sh) (pág 16)

Figura 15.- Influencia del tipo de soporte del catalizador sobre la conversión de metano. (pág 17)

Figura 16.- Campos de velocidades de: a) C_r2,3mm y b) C_sd_sr_sh. Q 524 mm³/min. (pág18)

Figura 17.- Líneas de flujo de: a) C_r2,3mm y b) Csd_sr_sh. Q 524 mm³/min (pág18)

Figura 18.- Campo de velocidades de: a) D_sd_sr_sh y b) C_r8,3 mm. Q 524 mm³/min. (pág19)

Figura 19.- P_sd, Campo de velocidades de: a) plano frontal y b) plano transversal del dispositivo. Q 524 mm³/min. (pág 19)

Figura 20.- Influencia de la localización del soporte sobre la conversión de metano. Caso: Cesta base. (pág 20)

Figura 21.- Influencia de la localización del soporte sobre la conversión de metano. Caso: Disco. (pág 20)

Figura 22.- Líneas de flujo para los soportes: a) D_d5mm; b) D_sd y c) D_15mm. (pág 21)

Figura 23.- Influencia del grado de inclinación del disco (D_r11) sobre la conversión de metano. A la derecha, representados esquemáticamente, los discos con: a) 0°; b) 20°; c) 30° y d) 50° de inclinación. (pág 22)

Figura 24.- Evolución de las líneas de flujo conforme aumenta el grado de inclinación del disco: a) 20°; b) 50° y c) 70° de inclinación. (pág 22)

Figura 25.- Influencia de la posición de C_r8,3mm sobre la conversión de metano. Casos: a) centrada; b) 1,5 mm y c) 3 mm desplaza respecto al centro de la termobalanza. (pág 23)

Figura 26.- Influencia del radio del disco sobre la conversión de metano. Casos: a) D_rs (5,3mm); b)D_r11mm. (pág 25)

Figura 27.- Evolución de las líneas de flujo según el radio del disco: a) sr (5,3mm); b)r11mm. (pág 26)

Figura 28.- Influencia de la geometría de la placa sobre la conversión de metano. Casos: a) P_s; b) P_más larga y c) doble placa. (pág 26)

Figura 29.- Campo de velocidades de: a) Placa 20% más larga y b) doble placa. (pág 27)

Figura 30.- Influencia del diámetro interno del cilindro interanular sobre la conversión de metano, usando como soporte C_8,3mm. Casos: a) diámetro estándar y b) 10% mayor. (pág 27)

Figura 31.- Campos de velocidades para C_8,3mm con: a) cilindro interanular estándar y b) 10% más ancho. (pág 28)

Figura 32.- Influencia del uso de nuevos soportes sobre la conversión de metano. (pág 29)

Figura 33.- Variable de contorno tipo “inlet”, especificando: a) velocidad del gas, b) flujo másico del gas. (pág 38)

Figura 34.- Ejemplo de malla no estructurada. (pág 40)

Figura 35.- Detalle de los cuerpos creados para construir la termobalanza. (pág 44)

Figura 36.- Opciones de mallado: a) Mallado deficiente, b) Mallado apropiado y c) Detalle del mallado, con más elementos en la zona donde tiene lugar la reacción. (pág 45)

Figura 37.- Parámetros del Solver. (pág 48)

Figura 38.- Alzado de la termobalanza con la cesta con mayor radio y zoom de la zona principal. (pág 50)

Figura 39.- Alzado de la termobalanza con la cesta con menor radio y zoom de la zona principal. (pág 50)

Figura 40.- Alzado de la termobalanza con la cesta alejada y zoom de la zona principal. (pág 51)

Figura 41.- Alzado de la termobalanza con la cesta más profunda. (pág 51)

Figura 42.- Alzado de la termobalanza con el disco y zoom de la zona principal. (pág 52)

Índice de Tablas

Tabla 1: Mallas estudiadas (pág 11)

Tabla 2: Soportes para catalizador (pág 12)

Tabla 3: Nuevos soportes (pág 17)

Tabla 4: Representación de los nuevos soportes, alzo e isométrico (pág 20)

Tabla 5: Nuevos soportes (pág 28)

Tabla 6: Representación de los nuevos soportes, alzado e isométrico(pág29)

