



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO



Secretaría de Educación Pública
Tecnológico Nacional de México
Instituto Tecnológico de Veracruz
División de Estudios de Posgrado e Investigación

**“ESTUDIO DE LA TRASFERENCIA DE MASA Y ENERGÍA EN
COLUMNAS DE PURIFICACIÓN DE UNA PLANTA PILOTO DE
BIOCOMBUSTIBLE”**

Tesis para obtener el grado de:

**MAESTRIA EN EFICIENCIA ENERGÉTICA Y ENERGÍAS
RENOVABLES**

PRESENTA: ING. JOSÉ AGUSTÍN MOYA MONTIEL

DIRECTOR: DR. GUILLERMO EFRÉN OVANDO CHACÓN

CO-DIRECTOR: DR. JAVIER GÓMEZ RODRÍGUEZ



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO

Instituto Tecnológico de Veracruz
Subdirección Académica
División de Estudios de Posgrado e Investigación

El presente trabajo de tesis titulado "ESTUDIO DE LA TRANSFERENCIA DE MASA Y ENERGÍA EN COLUMNAS DE PURIFICACIÓN DE UNA PLANTA PILOTO DE COMBUSTIBLES" presentado por el (la) C. JOSÉ AGUSTÍN MOYA MONTIEL, ha sido aprobado por su comité tutorial como requisito parcial para obtener el grado de:

MAESTRO EN EFICIENCIA ENERGÉTICA Y ENERGÍAS RENOVABLES

DIRECTOR

DR. GUILLERMO EFREN OVANDO CHACON

CODIRECTOR

DR. ABELARDO RODRIGUEZ LEÓN

REVISOR

DR. MARIO DIAZ GONZÁLEZ

REVISOR

DR. JAVIER GÓMEZ RODRÍGUEZ



Calz. Miguel Ángel de Quevedo 2775, Col. Formando Hogar C.P. 91897, Veracruz, Ver.
Tel. (229) 954 1500
tecnu.mx | veracruz.tecnu.mx



ÍNDICE

ÍNDICE.....	1
RESUMEN.....	5
ABSTRACT.....	6
INTRODUCCIÓN.....	7
CAPITULO 1 GENERALIDADES.....	8
1.1 PLANTEAMIENTO.....	8
1.2 OBJETIVOS.....	10
1.2.1 Objetivo general.....	10
1.2.2 Objetivos específicos.....	10
1.3 JUSTIFICACIÓN.....	10
1.4 HIPÓTESIS.....	11
1.5 MARCO CONCEPTUAL.....	11
1.6 ESTADO DEL ARTE.....	15
1.6.1 Aplicación de modelos CFD en columnas de destilación.....	15
1.6.2 Estimación de la eficiencia.....	17
CAPITULO 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	18
2.1 DESCRIPCIÓN FÍSICA.....	18
2.2 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN.....	19
2.2.1 Ecuaciones de conservación para el modelo de mezcla.....	21
2.2.2 Ecuaciones de conservación para el modelo de transporte de especies concentradas.....	22
2.3 DESARROLLO DE LA METODOLOGÍA.....	24
2.3.1 Estructura de la metodología.....	24

2.3.2 Caracterización de la columna de destilación y sus componentes internos.	26
2.3.3 Modelado 3D de los elementos internos de la columna de destilación.....	26
2.3.4 Simulaciones en modelos 3D usando el método de elemento finito.....	26
2.3.5 Simulación acoplada de transferencia de masa y energía.....	28
2.3.6 Simulación del comportamiento hidrodinámico (vapor de etanol).....	29
2.3.7 Estudio en el modelo de la tapa de burbuja convencional.	29
2.3.8 Estudio en el modelo simplificado de la tapa de burbujas.	29
2.3.9 Elaboración del reporte escrito para publicar en el congreso SOMIM.	30
2.3.10 Elaboración de modelos 2D mediante el uso de elemento finito	30
2.3.11 Simulación multifísica 2D, flujo multifase, transferencia de masa y energía.	30
2.3.12 Análisis de los resultados y modificación de los parámetros de operación.....	31
2.3.13 Recomendaciones con base en los fenómenos simulados y datos recopilados.	31
CAPITULO 3. MÉTODO DE ELEMENTO FINITO.....	32
3.1 MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO PARA CFD.	32
3.2 METODO DE ELEMENTO FINITO	33
3.2.1 Elementos triangulares	35
3.2.2 Formulación débil del problema.....	35
3.2.3 Solución del problema de difusión	37
3.2.4 Integración de elemento finito.....	39
3.2.5 Convergencia.....	40
CAPITULO 4. RESULTADOS.....	42
4.1 APLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA.....	42
4.1.1 Caso de estudio.....	42
4.1.2 Caracterización de la columna de destilación y sus componentes internos.	42

4.1.3 Modelado 3D de los elementos internos de la columna de destilación.....	47
4.1.4 Simulaciones en modelos 3D.	53
4.1.5 Simulación del comportamiento hidrodinámico.....	55
4.1.6 Simulación acoplada de transferencia de masa y energía.....	62
4.1.7 Simulación multifásica 2D, flujo multifase, transferencia de masa y energía.....	75
CONCLUSIONES	81
ANEXO A.....	83
Elaboración del reporte escrito para publicar en el congreso SOMIM.	83
Referencias.....	86

RESUMEN

Este trabajo estudia el comportamiento hidrodinámico y el transporte de masa en el flujo de vapor de etanol a través de las tapas de burbuja dentro de una columna de destilación. El estudio se basa en simulaciones de dinámica de fluidos computacionales (CFD) con el método de elemento finito en geometrías tridimensionales y bidimensionales. Se analizan dos tipos de geometría de tapa de burbuja, una de las geometrías es una réplica del modelo real, el cual tiene ranuras y la otra es una geometría teórica simplificada sin ranuras. Las tapas de burbuja están instaladas en platos de 14.5 cm de diámetro y cada plato cuenta con 5 tapas de burbuja. Las primeras simulaciones se realizan en modelos de tapas individuales y en el modelo de un plato para diferentes velocidades de entrada en el rango de 5 m/s a 20 m/s. La segunda etapa de la investigación resuelve la dinámica de fluido y la transferencia de calor en modelos 3D de tapas individuales, un plato y dos platos.

Los estudios permitieron hallar los campos de velocidad y presión a través de la tapa de burbujas. La caída de presión se incrementa al aumentar la velocidad observándose una mayor caída de presión en la configuración con ranuras. La tercera etapa de la investigación se aplica a modelos 2D de las tapas individuales sin ranuras, se resuelven las ecuaciones para el flujo laminar de una mezcla de dos componentes gaseoso con acoplamiento de calor y transporte de especies químicas logrando obtener la distribución de la fracción de la fase dispersa en el modelo.

ABSTRACT

This work studies the hydrodynamic behavior and mass transport in the ethanol vapor flow through the bubble caps within a distillation column. The study is based on computational fluid dynamics (CFD) simulations with the finite element method in three-dimensional and two-dimensional geometries. Two types of bubble cap geometry are discussed, one of the geometries is a replica of the real model, which has grooves and the other is a simplified theoretical geometry without grooves. Bubble lids are installed on 5.5 " diameter plates and each plate has 5 bubble lids. The first simulations are carried out on individual cap models and on the model of a plate for different inlet speeds in the range of 5 m / s to 20 m / s. The second stage of the investigation solves fluid dynamics and heat transfer in 3D models of individual lids, one plate, and two plates.

The studies allowed the velocity and pressure fields to be found through the bubble cap. The pressure drop increases with increasing speed observing a greater pressure drop in the slotted configuration. The third stage of the investigation is applied to 2D models of the individual lids without grooves, the equations for the laminar flow of a mixture of two gaseous components with heat coupling and transport of chemical species are solved, obtaining the distribution of the fraction of the dispersed phase in the model.

INTRODUCCIÓN

A nivel mundial existe un interés general en el desarrollo de energías renovables alternas con respecto las energías producto de los combustibles fósiles. Esto responde a la tendencia del incremento de los precios de los energéticos fósiles y su eventual agotamiento derivado de la creciente demanda de energéticos. Las nuevas energías renovables ayudan a controlar y mitigar los efectos del cambio climático ocasionados por los gases de efecto invernadero ocasionado por los gases productos de la combustión como el CO_2 , CO y los NO_x . El etanol es un biocombustible que puede producirse de fuentes renovables como biomasa, jugo de caña o jugo de sorgo dulce. De manera específica el etanol anhidro por sus características puede ser utilizado en motores de los vehículos de transporte empleados en la mayoría del continente.

En México se han implementado programas para el desarrollo científico y tecnológico que dan soporte a la industria del etanol que responden a la tendencia global de desarrollar energías renovables que al mismo tiempo permita alcanzar la independencia energética y fortalecer sectores económicos e industriales. El Tecnológico Nacional de México por medio del Instituto Tecnológico de Veracruz desarrolla la tecnología necesaria para la producción de biocombustibles a partir de sorgo dulce o biomasa. El biocombustible para alcanzar el grado carburante se hace pasar por columnas de destilación y rectificación donde se destila, rectifica y deshidrata el biocombustible. Los estudios basados en CFD proporcionan una manera más eficiente y económica para analizar y comprender los fenómenos físicos desarrollados en el interior de las columnas de destilación sin requerir la construcción y operación de costosos prototipos.

El presente trabajo de investigación profundiza en los sistemas de purificación de etanol y se divide de la siguiente manera: en el capítulo 1 se presentan los antecedentes del trabajo de investigación, en el capítulo 2 se muestra el planteamiento del problema. El capítulo 3 aborda el método numérico empleado en la presente investigación y en el capítulo 4 se describen los resultados de las simulaciones realizadas. Finalmente, los resultados obtenidos al ser analizados confirman las condiciones de operación óptima de los equipos.

CAPITULO 1 GENERALIDADES

1.1 PLANTEAMIENTO

En Veracruz el Instituto Tecnológico de Veracruz (ITVER) cuenta con una planta piloto de etanol de sorgo dulce donde se desarrolla la tecnología para la producción industrial de este biocombustible. Dicha planta cuenta con tecnología de primera y de segunda generación que permite la obtención de mosto fermentado con concentraciones de etanol del 6%, siendo común el proceso de purificación. La destilación fraccionaria y la deshidratación en la etapa de purificación del etanol anhidro son ampliamente empleados en la industria química de manera industrial.

Los procesos de separación downstream en biotecnología son parte de las etapas que más inciden en el costo final del producto. En el mundo, la tendencia a reemplazar los combustibles fósiles por aquellos de origen renovable como el etanol, genera una demanda del mismo y la necesidad de optimizar los procesos de fermentación, tratamiento de vinazas y deshidratación [1].

En sintonía con el desarrollo de fuentes de energía renovable se encuentran los esfuerzos para crear procesos eficientes. El consumo de energía del proceso de purificación constituye la mayor parte de los costos variables y pueden llegar a ser el factor decisivo para la rentabilidad de un proyecto de una planta de producción de alcohol anhidro [2].

En los procesos de destilación se trabaja con mezclas que tienen aproximadamente 90% de agua, lo cual implica trabajar con grandes cantidades de producto que deben ser calentados hasta el punto de ebullición de la sustancia que se desea destilar. De acuerdo con Kiss para alcanzar la concentración de etanol del 93.5% del peso se emplean 2.6 KW h/Kg [3].

Estudios recientes donde se analiza el diseño de sistemas de destilación demuestran que la correcta determinación del número de platos, punto de alimentación y tasa de reflujo pueden reducir del costo de capital en 0.047% y el costo de operación en un 7.61% [4] e

independientemente de la fuente de suministro de calor, la configuración del proceso determinará la eficiencia del mismo.

En los procesos de destilación se han realizado numerosos estudios apoyados por la industria, estos estudios abordan temas como la capacidad de las columnas, eficiencia, disponibilidad y costos. La dinámica de fluidos computacionales (CFD) es una de las herramientas que mejores resultados ofrece. A pesar que la destilación se considera una tecnología madura, existen una gran área de oportunidad para los investigadores y desarrolladores debido a los problemas comunes y recurrentes en el diseño y operación. Estos podrían ser resueltos con una mejor comprensión del comportamiento hidrodinámico, termodinámico y químico de las columnas [5].

Para continuar con el mejoramiento de las columnas de destilación es necesario comprender el funcionamiento de las mismas y el comportamiento de los fenómenos que se desarrollan a través de sus componentes internos. La implementación de modelos CFD se han vuelto la mejor herramienta para la obtención de datos de manera económica y rápida con una aproximación muy cercana a los modelos físicos.

A nivel industrial es necesario garantizar la transferencia de masa y energía, debido a esto el empleo de simulaciones CFD es una práctica común. Sin embargo, en la literatura se encuentran pocos trabajos relacionados donde se estudien estas técnicas de manera intensiva. Por lo que existe una gran área de oportunidad para los investigadores [6].

Como se puede deducir de lo anterior, un problema válido a resolver es la optimización de la columna de destilación, resultando conveniente la implantación de herramientas computacionales que permitan responder a preguntas tales como: ¿Qué comportamiento hidrodinámico se desarrolla en los conductos internos de una columna de destilación?, ¿Cómo se desarrollan los procesos termodinámicos en una columna de destilación? ¿Qué variables influyen en la eficiencia del proceso?, ¿Qué tan eficiente es el proceso? Y finalmente podríamos responder ¿Con qué configuración se podrá obtener la mayor eficiencia en el proceso de purificación de etanol?

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo general

Aplicar modelos computacionales de CFD para analizar la transferencia de masa y energía involucradas en el proceso de purificación en una columna de destilación de etanol azeotrópico desde el punto de vista energético.

1.2.2 Objetivos específicos

- Caracterizar y modelar el flujo a través de los elementos que componen una columna de destilación.
- Caracterizar energéticamente la transferencia de calor del proceso de destilación con el apoyo de CFD.
- Determinar mejoras viables para su implementación en el proceso.

1.3 JUSTIFICACIÓN

- Obtener datos detallados del comportamiento hidrodinámico y térmico presentes en una columna de destilación, los resultados de las simulaciones permitirán realizar modificaciones a futuro en parámetros como los siguientes: tasa de recirculación, el punto de alimentación y la tasa de calor suministrado a la columna. La variación de estos parámetros permitirá observar su incidencia sobre la eficiencia del proceso.
- Hacer más eficiente el proceso de diseño de una planta piloto de biocombustible mediante el uso de software CFD (Computational Fluid Dynamics)
- Las simulaciones permitirán obtener los resultados deseados con ahorros significativos evitando la construcción de prototipos y pruebas físicas lentas y costosas.
- Los modelos CFD permitirán reproducir fenómenos como la transferencia de masa y energía, así como modelar el comportamiento hidrodinámico, entre otros. Haciendo posible obtener información que resulta imposible mediante métodos experimentales.

- Los datos obtenidos de las simulaciones también harán posible proponer a futuro modificaciones geométricas o dimensionales para el escalamiento del proceso, necesario para la implementación a nivel industrial de la tecnología de producción de bio-etanol.
- La metodología empleada en la simulación de esta columna de destilación, servirá de base para columnas con configuraciones de componentes internos diferentes o que trabajen con otros compuestos.

1.4 HIPÓTESIS

Mediante simulaciones computacionales de modelos CFD será posible caracterizar el comportamiento hidrodinámico y energético de la transferencia de calor de una columna de destilación utilizada en el proceso de purificación de un biocombustible, y realizar variaciones en los parámetros de operación como punto de alimentación, tasa de reflujo y la tasa de calor suministrado de manera independiente para determinar en qué medida afectan la eficiencia del proceso.

1.5 MARCO CONCEPTUAL

Clúster

Un cúmulo, granja o clúster de computadoras, se puede definir como un sistema de procesamiento paralelo o distribuido. Consta de un conjunto de computadoras independientes, interconectadas entre sí, de tal manera que funcionan como un solo recurso computacional. A cada uno de los elementos del clúster se le conoce como nodo. Estos son aparatos o torres que pueden tener uno o varios procesadores, memoria RAM, interfaces de red, dispositivos de entrada y salida, y sistema operativo. Los nodos pueden estar contenidos e interconectados en un solo gabinete, o, como en muchos casos, acoplados a través de una red de área local (LAN (Local Área Network)). Otro componente básico en un clúster es la interfaz de la red, la cual es responsable de transmitir y recibir los paquetes de datos, que viajan a través de la red entre los nodos. Finalmente, el lograr que todos estos elementos

funcionen como un solo sistema, es la meta a la que se quiere llegar para dar origen a un clúster [7].

CAE

La Ingeniería asistida por computadora es la tecnología que hace uso de los sistemas informáticos para evaluar, analizar, simular y optimizar la geometría generada por las aplicaciones CAD, permitiendo al diseñador estudiar el comportamiento del producto para depurar y mejorar su desempeño [8].

Método del elemento finito

El MEF se presenta como una técnica basada en variación para solucionar ecuaciones diferenciales, un volumen geoméricamente complejo se representa como una colección de subdominios geométricos, sobre cada elemento finito (EF) se deriva la función de aproximación usando el concepto básico de que toda función continua se puede representar como una combinación lineal de polinomios algebraicos, esta función de aproximación es derivada usando la idea de la teoría de interpolación, se designan como funciones de interpolación. El valor de las soluciones en un número finito puntos prescritos en el dominio o interior se llaman nodos [9].

Error

Es una deficiencia reconocible en un modelo CFD que no es causada por falta de conocimiento. Las causas de errores, así definidas, son:

- (i) Errores numéricos: errores de redondeo, errores de convergencia iterativa, errores de discretización
- (ii) Errores de codificación: errores o "fallas" en el software
- (iii) Errores de usuario: errores humanos debidos al uso incorrecto del software.[10]

Incertidumbre

Es una deficiencia potencial en un modelo CFD causada por la falta de conocimiento. Las principales fuentes de incertidumbre son:

- (i) Incertidumbre de entrada: inexactitudes debidas a información limitada o representación aproximada de geometría, condiciones de contorno, propiedades del material, etc.
- (ii) Incertidumbre del modelo físico: discrepancias entre los flujos reales y CFD debido a una representación inadecuada de los procesos físicos o químicos (por ejemplo, turbulencia, combustión) o debido a la simplificación de supuestos en el proceso de modelado (por ejemplo, flujo incompresible, flujo constante) [10].

Destilación con reflujo

La rectificación (fraccionada) o destilación por etapas con reflujo se puede considerar desde un punto de vista simplificado como un proceso en el cual se lleva a cabo una serie de etapas de vaporización instantánea, de manera que los productos gaseosos y líquidos de cada etapa fluyen a contracorriente. El líquido de una etapa se conduce o fluye a la etapa inferior y el vapor de una etapa fluye hacia arriba, a la etapa superior. Por consiguiente, en cada etapa entra una corriente de vapor Y y una corriente líquida L , que se mezclan y alcanzan su equilibrio, y de dicha etapa sale una corriente de vapor y una corriente de líquido en equilibrio [11].

Escurrecimiento

Se produce cuando la velocidad del vapor a través del área abierta de la bandeja es demasiado baja para evitar que el líquido se filtre a través del área abierta, pasando así por el área de contacto a la bandeja de abajo. La mayoría de las bandejas de válvulas y tamices presentan escurrecimiento en el funcionamiento normal. El escurrecimiento se considera excesivo cuando es suficiente para causar la pérdida de eficiencia, por lo general del 10% a 20% [12].

Azeótropo

El azeótropo (o mezcla azeotrópica), es una mezcla líquida de dos o más componentes que posee un único punto de ebullición constante y fijo, y que al pasar al estado vapor (gaseoso) se comporta como un compuesto puro, es decir como si fuera un solo componente. Ej. El azeótropo entre H₂O y Etanol (96%) y con punto de ebullición de 78.2 °C que está por debajo de los puntos de ebullición normales del agua y del etanol [13].

Tapa de burbuja

En las bandejas con tapa de burbuja, el vapor que fluye hacia arriba a través de la torre entra en contacto con el líquido al pasar a través de las tapas de burbuja. Cada conjunto de tapa de burbuja consta de un tubo ascendente y una tapa. El vapor que sube a través de la columna pasa a través del tubo ascendente en el piso de la bandeja y luego se gira hacia abajo para burbujear en el líquido que rodea la tapa. Debido a su diseño, las bandejas con tapa de burbuja no pueden llover. Sin embargo, las bandejas con tapa de burbuja también son más caras y tienen una menor capacidad / mayor caída de presión que las bandejas de válvulas o bandejas de tamiz [14].

Plato de destilación Nye:

El flujo de vapor de etanol es guiado para que pase a través de los elementos destinados a la separación de compuestos, los platos de Nye permiten guiar el etanol al bloquear el paso de vapor a través del bajante de condensados del plato. La bandeja fue nombrada Nye en honor a su inventor. La capacidad de flujo podría aumentarse del 10% al 30% utilizando esta bandeja. La estructura mejorada de la bandeja reduce la presión e incrementa la cantidad de vapor-líquido en la bandeja. La fabricación de estas bandejas implica una modificación en el bajante el cual permite liberar la espuma más rápido. Para esto utiliza un tamiz perforado que también evita que el vapor se desvíe [15].

1.6 ESTADO DEL ARTE

1.6.1 Aplicación de modelos CFD en columnas de destilación.

Existen relativamente pocas publicaciones de estudios de columnas de destilación de biocombustibles líquidos donde se haga uso de modelos CFD. Sin embargo, existen reportes de estudios con este método aplicado a diferentes configuraciones internas en torres de destilación. Algunas de estas torres se emplean en la industria química, petrolera o de alimentos.

El modelo de plato perforado es el más reportado en la literatura, donde diversos autores han realizado estudios del comportamiento hidrodinámico y de transferencia de masa. Entre las diferentes configuraciones de platos perforados están, por ejemplo, los platos inclinados, Nye, TRST por mencionar algunos de los modelos que más se aproximan a la configuración empleada.

Se investigó el comportamiento hidrodinámico de las columnas de platos perforados utilizando un modelo multifase Euler-Euler donde los fluidos de trabajo eran aire y agua, logro observar la distribución de la velocidad del líquido y la altura de líquido claro, los cuales fueron comparados con datos obtenidos de forma experimental. El modelo representa la interacción entre la altura del líquido claro y la velocidad del gas, esto permitió observar la caída de presión. Se observó que el comportamiento hidrodinámico no es simétrico por lo que se recomienda una representación geométrica completa para obtener datos más precisos [16].

Se realizó el estudio de platos perforados ondulados mediante simulación CFD, comparo los resultados obtenidos con datos experimentales de platos perforados planos. La caída de presión y la altura de líquido claro se usaron para comparar y validar la simulación. Se observó que era mayor la caída de presión en las bandejas onduladas, y que la dispersión de fase es más uniforme en los platos con perforaciones de menor diámetro. Se determinó que la simulación ofrece mayor precisión en la predicción de la caída de presión. Las zonas

de menor presión contribuyen al intercambio de masa entre fases. Los vórtices formados también contribuyen a la transferencia de masa y al efecto de autolimpieza [17].

Dentro de los platos perforados la tendencia más reciente investiga geometrías helicoidales que generan vórtices, llamados Tridimensional Rotational Flow Sieve Tray (TRST), con diferentes configuraciones estructurales y métodos de instalación. El estudio demostró que la distribución de flujo de gas es igual para cualquier ángulo de inclinación. También estudio el efecto de montar un segundo plato con un sentido de rotación contrario el cual ofrece un mejor rendimiento [18].

Otra opción para la configuración interna de columnas de destilación son las calotas y las válvulas. Esta configuración ofrece un mayor rango en el flujo de trabajo permitiendo la operación con una tasa de alimentación baja. Las calotas pueden tener diferente geometrías y dimensiones. Dos ejemplos de ellas son las cónicas y las planas que a continuación se comenta.

Se estudió una configuración hidrodinámica similar a los trabajos anteriores donde se empleó una geometría de conos que produce una variación de velocidad para generar una alta turbulencia que ayuda a dispersar la fase líquida. También estudio el efecto de la longitud del cono y la caída de presión se compara con datos obtenidos experimentalmente, también se propuso el estudio de una geometría que genere un movimiento centrifugo [19].

Se estudió un modelo de plato con calotas planas similar al que estudiaremos en nuestra investigación, para ello se empleó un modelo Euler de flujo multifase, se enfocó en el estudio del comportamiento hidrodinámico donde los fluidos empleados fueron aire y agua, donde se obtuvo un error promedio del 7.89% comparado con los datos obtenidos experimentalmente, logrando predecir acertadamente la fracción líquido-vapor, la altura de líquido claro, la distribución de velocidad y presión. Se observó que al incrementar la velocidad del gas y manteniendo el flujo de alimentación constante la altura de líquido claro se reduce [20].

1.6.2 Estimación de la eficiencia

Para determinar la eficiencia de cada geometría estudiada los investigadores se han basado en la observación del comportamiento de diferentes variables. Por ejemplo, en 2012 se determinó que la mayor eficiencia se obtiene cuando la transferencia de masa es mayor, sin embargo, no se observó el comportamiento hidrodinámico para comparar la caída de presión[21]. Por otra parte, en 2018 el estudio se basó en el comportamiento hidrodinámico y se observó la caída de presión y el escurrimiento para determinar la eficiencia de la columna. Estudios más recientes combinan observaciones del comportamiento hidrodinámico y la transferencia de masa [12]. Por ejemplo, Abbasnia en 2019 determinó que la eficiencia de los platos de Nye es 10% mayor que los platos perforados convencionales, para ello compara la altura de líquido claro y la transferencia de masa de ambos modelos [15].

CAPITULO 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

2.1 DESCRIPCIÓN FÍSICA

En la Figura 2.1 se muestra la columna de destilación donde se realizará el estudio de la transferencia de masa y energía en la purificación de una planta piloto de biocombustible ubicada en el ITVER. En la Figura 2.1(a) se muestra la columna completa, sin embargo, debido al costo computacional que implicaría simular toda la columna únicamente se simularan algunas secciones como se muestra en la Figura 2.1(b) y (d) donde los componentes internos de la columna de destilación son platos de tapas de burbuja ranuradas. La columna de destilación tiene un diseño que permite realizar ajustes en los puntos de alimentación y de recirculación, en la parte inferior de la misma se encuentra un calderín donde se suministra el calor para la destilación a través de un flujo de vapor que puede ser regulado y controlado por medio de termopares instalados a lo largo de las secciones, finalmente la columna cuenta con dos intercambiadores de calor que permiten atemperar el flujo de alimentación y condensar el flujo de vapor destilado, esto permite obtener etanol con 96% de pureza en fase líquida.

La columna de destilación que se estudia ver Figura 2.1, se compone de un calderín en la parte inferior y 5 secciones de diferentes tipos de bandeja instaladas en serie en la parte superior del calderín, combinando tres elementos internos distintos, la sección número 1 y 2 son platos perforados inclinados, la secciones número 3 y 4 son tapas de burbujas con un diámetro de 0.039 m, finalmente la sección No. 5 cuenta con tapas de burbuja de 0.025m de diámetro.



Figura 2.1 - columna de destilación. 1y 2 platos perforados inclinados, 3 y 4 tapas de burbuja grandes, 5 tapas de burbuja pequeñas

2.2 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN

Las ecuaciones de conservación empleadas en el modelo 3D de la sección 4 de la columna de destilación se aplican al dominio del fluido de trabajo de los modelos, estas ecuaciones recrean la dinámica del flujo de vapor de etanol sin cambio de fase, para la conservación de energía se incluyeron el módulo de transferencia de calor en fluidos, para resolver el flujo

turbulento el estudio se basa en las ecuaciones de conservación de momento de Navier-Stokes y se emplea el modelo K- ϵ con velocidad menor a un mach [22].

Las simulaciones numéricas fueron realizadas para una xyz en un dominio tridimensional Ω en el cual se analizó el comportamiento de la dinámica de fluidos y la transferencia de calor. Para ello, se resolvieron las ecuaciones de conservación que describen el problema de un flujo turbulento, incompresible y Newtoniano en el interior de una columna de destilación, las cuales son la ecuación de cantidad de movimiento, la ecuación de continuidad y la ecuación de energía:

$$\frac{\partial(\rho U_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\rho U_i U_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \rho U_i U_j \right] + B_T \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(\rho U_j T)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial}{\partial x_j} - \rho \overline{U_j T} \right] \quad (2.3)$$

En las ecuaciones anteriores P representa la presión, ρ es la densidad, U es la componente de velocidad, μ es la viscosidad dinámica, B_T es la fuerza de cuerpo, T es la temperatura y Pr es el número de Prandtl. En la ec. 2.4, se aplica la aproximación de Boussinesq:

$$B_T = -\rho_{ref} g_i \beta (T - T_{ref}) \quad (2.4)$$

En la expresión anterior β es el coeficiente de expansión volumétrica. De acuerdo con el modelo de viscosidad de remolino a través de la hipótesis de Boussinesq, el tensor de esfuerzos de Reynolds y el flujo de calor turbulento se aproximan como:

$$\overline{\rho U_i' U_j'} = -\mu_t \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right] + \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (2.5)$$

$$\overline{\rho U_j' T'} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2.6)$$

Donde Pr_t es el número de Prandtl turbulento y μ_t es la viscosidad turbulenta dada por:

$$\mu_t = C_\mu \frac{\rho k^2}{\varepsilon} \quad (2.7)$$

La energía cinética turbulenta k y la rapidez de disipación de energía cinética turbulenta ε , se calculan resolviendo las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial(\rho U_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k + G_k - \rho \varepsilon \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial(\rho U_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} (P_k + G_k) - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.9)$$

En las ecuaciones anteriores P_k es la rapidez de producción de energía cinética turbulenta y G_k es la generación o destrucción de turbulencia debido a las fluctuaciones de las fuerzas de cuerpo.

2.2.1 Ecuaciones de conservación para el modelo de mezcla.

En la interfaz del Modelo de mezcla, la combinación de partículas y fluidos se considera como un flujo continuo único con propiedades macroscópicas como densidad y viscosidad. Las dos fases constan de una fase dispersa y una fase continua [23]. El modelo de mezcla es válido si la fase continua es líquida y la fase dispersa consiste en partículas sólidas, gotitas de líquido o burbujas de gas. El modelo de mezcla se basa en los siguientes supuestos:

- La densidad de cada fase es aproximadamente constante.
- Ambas fases comparten el mismo campo de presión.
- El tiempo de relajación de las partículas es corto en comparación con las escalas de tiempo del flujo macroscópico.

La densidad de la mezcla viene dada por:

$$\rho = \varphi_c \rho_c + \varphi_d \rho_d \quad (2.10)$$

El flujo de volumen para cada fase es:

$$j_d = \varphi_d j_d \quad (2.11)$$

$$j_c = \varphi_c u_c \quad (2.12)$$

Donde u_c y u_d (unidades SI: m/s) son la velocidad de la fase continua y la fase dispersa respectivamente.

La ecuación de continuidad para la mezcla es:

$$\rho_t + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (2.13)$$

La ecuación de momento para la mezcla es:

$$\begin{aligned} \rho j_t + \rho (j \cdot \nabla) j + \rho_c \varepsilon (j_{slip} \cdot \nabla) j = \\ -\nabla p - \nabla \cdot \tau_{Gm} + \rho g + F - \nabla \cdot [\rho_c (1 - \varphi_c \varepsilon) u_{slip} j_{slip}^T] - \rho_c \varepsilon \left[(j \cdot \nabla) j_{slip} + (\nabla \cdot D_{md} \nabla \varphi_d) - \frac{m_{dc}}{\rho_d} \right] \end{aligned} \quad (2.14)$$

2.2.2 Ecuaciones de conservación para el modelo de transporte de especies concentradas.

El estudio de las mezclas gaseosas y líquidas se realiza mediante el módulo de transporte de especies concentradas donde las concentraciones de especies son del mismo orden de magnitud y no se puede identificar ninguna de las especies. como disolvente. En este caso,

las propiedades de la mezcla dependen de la composición y es necesario considerar las interacciones moleculares e iónicas entre todas las especies. La interfaz física incluye modelos para la difusión multicomponente, donde la fuerza impulsora de difusión de cada especie depende de la composición, temperatura y presión de la mezcla [23].

La interfaz física resuelve las fracciones de masa de todas las especies participantes. Se puede incluir el transporte por convección y difusión.

Admite simulaciones de transporte por convección, migración y difusión en 1D, 2D y 3D, así como para componentes axisimétricos en 1D y 2D. La interfaz física define las ecuaciones para las fracciones de masa de las especies, incluido un modelo de difusión (promedio de mezcla, Maxwell-Stefan o ley de Fick).

Algunos ejemplos de lo que se puede estudiar con esta interfaz de física incluyen:

- La evolución de especies químicas transportadas por convección y difusión.
- La migración en un campo eléctrico en el caso de especies iónicas, en mezclas y soluciones que no pueden considerarse diluidas.
- Soluciones concentradas o mezclas de gases, donde la concentración de todas las especies participantes es del mismo orden de magnitud, por lo que se debe considerar su interacción molecular e iónica entre sí.

Esto implica que el transporte difusivo de una sola especie depende de la composición de la mezcla y posiblemente de la temperatura, la presión o cualquier combinación.

La ecuación básica para una especie individual i es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega_i) + \nabla \cdot (\rho\omega_i\mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + R_i \quad (2.15)$$

La formulación mostrada cambia dependiendo de los mecanismos de transporte activos y el modelo de difusión seleccionado.

Mecanismo de transporte

La interfaz Transporte de especies concentradas siempre tiene en cuenta el transporte debido a difusión.

Modelo de difusión

- La opción Maxwell-Stefan emplea el modelo de difusión más detallado, pero también es el más costoso computacionalmente. El modelo está diseñado para modelos dominados por difusión y requiere que se conozcan las difusividades de Maxwell-Stefan multicomponente de todos los pares de componentes. No hay estabilización disponible al seleccionar este modelo.
- La opción de promedio de mezcla es menos costosa computacionalmente que el modelo de Maxwell-Stefan. Es un modelo más simple que se puede utilizar cuando se puede suponer que las variaciones en las presiones parciales y la temperatura no afectan la difusión multicomponente. El modelo incluye estabilización, pero requiere las difusividades de Maxwell-Stefan multicomponente de todos los pares de componentes.
- El modelo de la ley de Fick es un modelo general que debe usarse cuando la difusión se asume como Fickiana, o cuando no hay disponibles difusividades multicomponente. Además, cuando la difusión molecular no es el mecanismo de transporte dominante y se desea un modelo robusto, pero de bajo orden, se deben utilizar las opciones de la ley de Fick. El modelo incluye estabilización.

2.3 DESARROLLO DE LA METODOLOGÍA

2.3.1 Estructura de la metodología.

Para la consecución de los objetivos establecidos en el primer capítulo, la metodología propuesta para el desarrollo de la presente tesis se presenta esquemáticamente en la figura 2.1, donde se divide en etapas de acuerdo a la naturaleza de los medios empleados y los resultados específicos que se desea obtener.

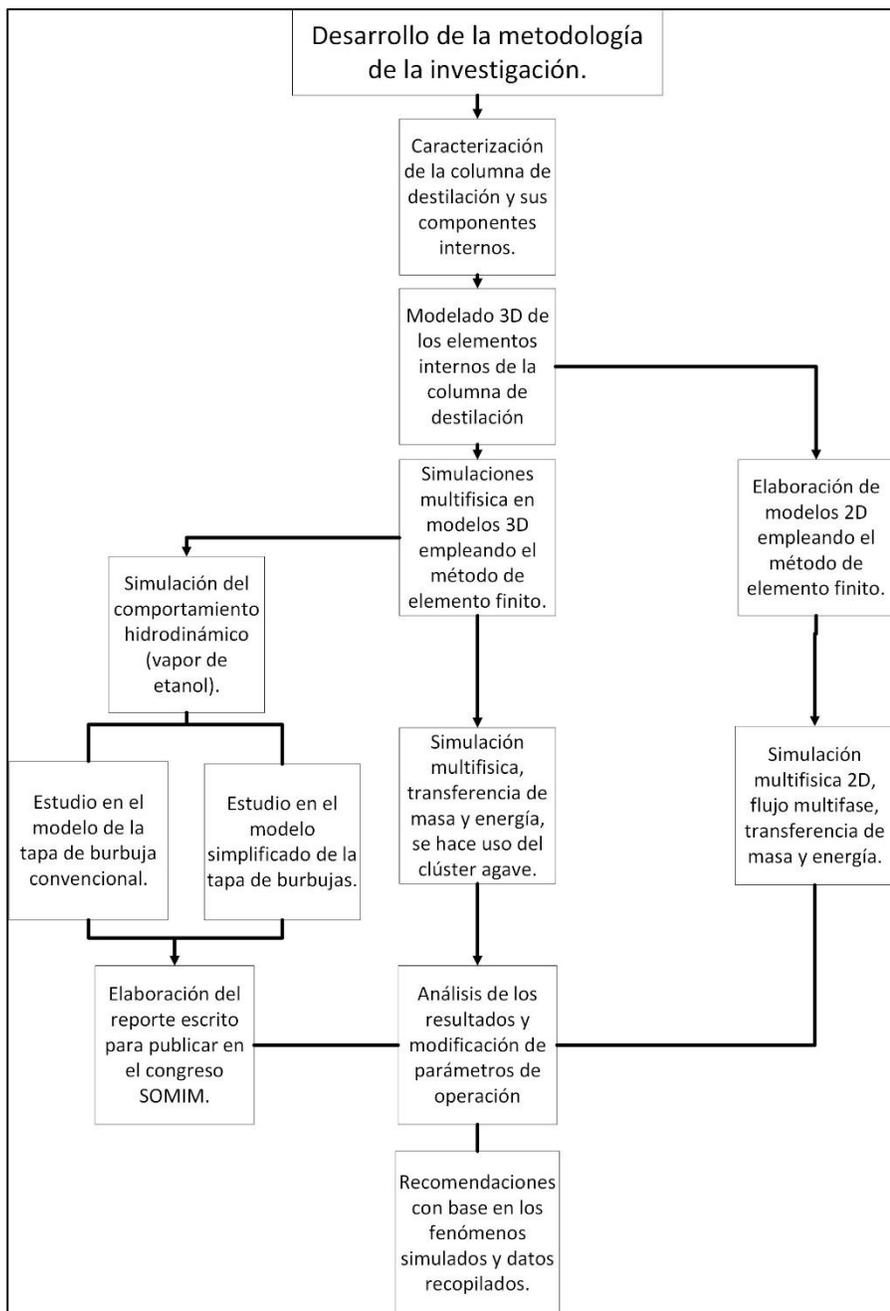


Figura 2.1 diagrama de la metodología de la investigación.

2.3.2 Caracterización de la columna de destilación y sus componentes internos.

Esta etapa consiste en obtener de manera directa la configuración real y las medidas específicas de cada uno de los elementos de la columna de destilación, la columna es empleada en el proceso de purificación de etanol de grado combustible; debido a que no existen planos ni especificaciones técnicas de la columna, será necesario desarmarla para tener acceso a los elementos internos y poder realizar las mediciones necesarias con instrumentos manuales de acuerdo a la magnitud y geometría de cada elemento; se hará uso de flexómetros, reglas, escuadras y calibradores.

En esta etapa se identificarán los puntos de alimentación de mosto, recirculación, drenaje de vinazas, alimentación y descarga del agua de enfriamiento, punto de entrada y salida de vapor; también se identificará el tipo de elemento interno presente en cada sección de la columna y se realizará una limpieza general antes de ser reensamblada.

2.3.3 Modelado 3D de los elementos internos de la columna de destilación.

Los modelos 3D de la columna de destilación se realizan con software de diseño asistido por computadora, el programa AutoCAD 2019 es la herramienta que se usara para el modelado, se cuenta con una licencia estudiantil, los modelos se dimensionarán a partir de los datos obtenidos en la etapa anterior, el modelado se hará específicamente para cada sección y cada elemento en particular.

2.3.4 Simulaciones en modelos 3D usando el método de elemento finito.

Para la simulación tridimensionales de la transferencia de masa y energía en la purificación de una planta piloto de biocombustible se requieren potentes equipos de cómputo, por esta razón se hará uso del clúster Agave del laboratorio de cómputo intensivo de la Unidad de Investigación en Mecánica (UDIM) del ITVER. Las simulaciones acopladas permiten modelar diversos fenómenos de manera simultánea. Cada fenómeno requiere un modelo especializado, de acuerdo al modelo matemático y geométrico 3D empleado serán los requerimientos del equipo. En el presente trabajo las ecuaciones de conservación se

discretizarán usando el método de elemento finito. Inicialmente el modelo se realizará en una laptop modelo inspiron 3583 y posteriormente se hará uso del clúster Agave el cual cuenta con 32 Cores y tiene una capacidad total de cómputo de 331.168 Gflops.

- **Módulo de flujo monofásico en régimen turbulento k- ϵ**

La interfaz de flujo turbulento k- ϵ , se utiliza para simular flujos monofásicos con altos números de Reynolds. La interfaz física es adecuada para flujos incompresibles y flujos compresibles con un bajo número de Mach (generalmente menos de 0.3).

Las ecuaciones resueltas por el flujo turbulento, la interfaz k- ϵ realizable son las ecuaciones de Navier-Stokes para la conservación del momento y la ecuación de continuidad para la conservación de la masa. Los efectos de turbulencia se modelan utilizando el modelo k- ϵ de dos ecuaciones realizables. El flujo cerca de las paredes se modela utilizando funciones de pared.

- **Módulo de flujo multifase para mezclas.**

Este modulo de mezcla contiene interfaces físicas para modelar flujos laminares y turbulentos de líquidos que contienen una fase dispersa. La fase dispersa puede ser burbujas, gotas líquidas o partículas sólidas. Este módulo resuelve un conjunto de ecuaciones de Navier-Stokes para la cantidad de movimiento de la mezcla, la distribución de presión se calcula mediante la ecuación de continuidad de la mezcla promedio y la velocidad de la fase dispersa se calcula por el modelo de deslizamiento.

- **Módulo de flujo multifase con modelo Euler - Euler.**

La interfaz del modelo Euler-Euler se puede utilizar para simular el flujo de dos fases continuas y totalmente Inter penetradas.

Este modelo resuelve dos conjuntos de ecuaciones de Navier-Stokes, uno para cada fase, con el propósito de calcular el campo de velocidad en cada fase, el intercambio de momento entre fases es descrito por el modelo de arrastre, la presión se calcula por la ecuación de

continuidad de la mezcla promedio y la fracción volumétrica de la fase dispersa se monitorea mediante la ecuación de transporte.

- **Módulo de transferencia de calor en fluidos.**

Las interfaces de transferencia de calor se utilizan para calcular la temperatura y los campos de intensidad radiante. Las interfaces también calculan otros campos físicos como la velocidad, la presión o los campos electromagnéticos.

La interfaz de transferencia de calor en fluidos se utiliza para modelar la transferencia de calor por conducción, convección y radiación. El modelo de fluido está activo en todos los dominios por defecto. Toda la funcionalidad está disponible para incluir otros tipos de dominio, como un dominio sólido.

La ecuación de temperatura definida en los dominios de fluidos corresponde a la ecuación de convección-difusión que puede contener contribuciones adicionales como fuentes de calor.

- **Módulo de química para transporte de sustancias concentradas**

La interfaz de transporte de especies concentradas se utiliza para estudiar mezclas gaseosas y líquidas donde las concentraciones de especies son del mismo orden de magnitud y ninguna de las especies se puede identificar como solvente. En este caso, las propiedades de la mezcla dependen de la composición y debe considerarse la interacción molecular e iónica entre todas las especies. La interfaz física incluye modelos para difusión multicomponente, donde la fuerza impulsora difusiva de cada especie depende de la composición de la mezcla, la temperatura y la presión.

2.3.5 Simulación acoplada de transferencia de masa y energía.

En esta etapa se simulará una sección completa de la columna de destilación, se estudiará la sección número cuatro de la columna, haciendo uso de un modelo 3D de esta sección, dicho modelo será cargado al clúster agave, se aplicarán los módulos CFD Euler-Euler

multifase para flujo turbulento, transferencia de calor en fluidos y transporte de sustancias concentradas. Con ello será posible simular la transferencia de masa y energía involucrados en el proceso de purificación.

2.3.6 Simulación del comportamiento hidrodinámico (vapor de etanol).

En esta etapa se realizará la simulación de una tapa de burbuja con el módulo de dinámica de fluidos (CFD por sus siglas en inglés). El modelo de la tapa de burbuja será tridimensional y el fluido de trabajo será vapor de etanol a temperatura de saturación. Se realizarán diversas simulaciones con variación de la velocidad de entrada. La velocidad de entrada a la tapa de burbuja varía de acuerdo al flujo masico el cual depende de las tasas de alimentación y recirculación.

2.3.7 Estudio en el modelo de la tapa de burbuja convencional.

Se hará uso del módulo mencionado en el capítulo anterior, sobre un modelo tridimensional de la tapa de burbuja, el modelo empleado se basa en la sección cuatro de la columna de destilación. La simulación contempla la fuerza de gravedad para el comportamiento hidrodinámico, la variable de la frontera de entrada será la velocidad del flujo, la frontera de salida tendrá una presión constante en todas las simulaciones.

2.3.8 Estudio en el modelo simplificado de la tapa de burbujas.

En esta etapa se simula el comportamiento hidrodinámico del flujo de vapor de etanol, en una tapa de burbujas sin ranuras, por lo que se considera un diseño simplificado, el cual tiene un costo computación menor, sin embargo, afecta al flujo de vapor reduciendo las turbulencias, las turbulencias contribuyen a la transferencia de masa, por lo que es interesante relacionar el efecto de las ranuras con el comportamiento hidrodinámico.

2.3.9 Elaboración del reporte escrito para publicar en el congreso SOMIM.

Se elaborará un reporte para el congreso SOMIM de las etapas 3.6 y 3.7, en el cual se reportarán los resultados obtenidos del comportamiento hidrodinámico del flujo de vapor a temperatura de saturación, presión atmosférica y con el efecto de la gravedad sobre el flujo, para ello se utilizará el formato para artículos proporcionados por la organización que están disponibles en el portal de internet.

2.3.10 Elaboración de modelos 2D mediante el uso de elemento finito

Se elaborarán cortes transversales de los modelos 3D, y se aplicaran los mismos módulos partiendo de un modelo preexistente, los modelos 2D permiten simular con un bajo costo computacional fenómenos complejos como la transferencia de masa, en equipos de cómputo de capacidad comercial, estos modelos 2D se generarán para las tapas de burbuja, con el propósito de determinar la eficacia de esta técnica en comparación con la simulación 3D del clúster agave.

Características de la computadora:

Procesador: Intel Core i5-2320 @ 3 GHz

Memoria RAM: 14 GB

Tarjeta de video: nvidia 2GB

Sistema operativo: Windows 7 Ultimate

2.3.11 Simulaciones multifísicas 2D, flujo multifase, transferencia de masa y energía.

En esta etapa se simulará la transferencia de masa y energía con los módulos de transferencia de calor en fluidos, el módulo de flujo multifase y el de transporte de especies concentradas, estas simulaciones se realizarán en un equipo de cómputo comercial, las condiciones de frontera de la simulación serán similares a las empleadas en la simulación 3D del clúster agave, lo cual permitirá verificar la consistencia de los resultados de cada método.

2.3.12 Análisis de los resultados y modificación de los parámetros de operación.

En esta etapa del estudio se analizarán los resultados obtenidos de las simulaciones, se modificarán los parámetros de operación para mejorar la eficiencia de la columna, para determinar la eficiencia de la columna de destilación observaremos el efecto de la geometría y condiciones del flujo sobre la caída de presión ocasionada. El objetivo de este análisis es determinar la mejor técnica para evaluar cada sección de la columna y aplicar las mejoras físicamente a la columna.

2.3.13 Recomendaciones con base en los fenómenos simulados y datos recopilados.

Con base en las observaciones de la etapa anterior se emitirán recomendaciones, las cuales se emitirán de acuerdo a los parámetros que se consideren ser modificados. Estos parámetros de diseño y operación, deberán ser tratados individualmente para hacer posible la implementación a corto y mediano plazo, también será posible proponer una geometría que desarrolle un flujo específico. Por otro lado, las diferentes técnicas de simulación harán posibles determinar en qué condiciones resultan ventajosas ya sean aproximaciones iniciales o modelos específicos.

CAPITULO 3. MÉTODO DE ELEMENTO FINITO.

3.1 MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO PARA CFD.

El elemento finito es una aplicación de los métodos numéricos para la resolución de problemas de ingeniería comúnmente empleado en problemas que involucran un alto grado de complejidad, es un método de aproximación de problemas continuos de tal forma que el elemento continuo se divide en un número definido de partes "elementos" cuyo comportamiento se define por un número conocido de parámetros asociados a los puntos característicos "nodos" y el comportamiento en el interior de cada elemento queda definido a partir del comportamiento de los nodos mediante las adecuadas funciones de interpolación o funciones de forma. El método nació de la aplicación a sistemas estructurales y evolucionó para la aplicación en la dinámica de fluidos computacionales.

La dinámica de fluidos computacionales consiste en el empleo de potentes computadoras y métodos numéricos para resolver ecuaciones de transporte en sistemas de fluidos. En el área de investigación existen pocos reportes de estudios con modelos CFD aplicados a procesos de producción de biocombustibles, siendo su mayoría modelos hidrodinámicos estacionarios, El análisis de los flujos de fluidos, especialmente los reactivos, es clave para garantizar y mejorar el rendimiento adecuado de los equipos, en términos de eficiencia energética, rendimiento del producto o incluso emisiones de dióxido de carbono. Además, para la implementación de los procesos de producción de biocombustibles a escala industrial, se debe garantizar la transferencia de masa y calor; Este aspecto tiene especial importancia cuando se considera un equipo intensificado, ya que se debe dar la misma experiencia de procesamiento a cada molécula. El CFD ha sido ampliamente utilizado para modelar y mejorar diferentes equipos de proceso, donde se han alcanzado logros importantes. Además, esta herramienta se ha aplicado al modelado y mejora de equipos para procesos de producción de biocombustibles [6].

3.2 METODO DE ELEMENTO FINITO

Inicialmente el método de elemento finito se enfocó a problemas de análisis estructural. Su uso en problemas de flujos es más reciente. El método se aplicó primero a problemas de flujo potencial a finales de los 60's. Actualmente se ha extendido, hasta incluir flujos más generales, ver [24]. El método de elemento finito es una técnica para resolver ecuaciones diferenciales parciales. El método requiere dividir el dominio de solución en un número finito de subdominios simples, llamados elementos, los cuales forman una malla, la cual no tiene que ser estructurada, es decir, los elementos que forman la malla no tienen que tener una forma regular, por lo que pueden manejarse fácilmente geometrías complejas. Usando conceptos variacionales se construye la aproximación de la solución sobre el conjunto de elementos finitos, de tal manera que este método no busca directamente una solución de la ecuación diferencial parcial, sino busca la solución de alguna forma integral de la ecuación. La formulación variacional consiste en considerar que la solución del problema discreto tiene una forma preestablecida y en reformular el problema de valor de frontera para que admita condiciones débiles en la solución y sus derivadas, lo cual implica que se tiene que encontrar una función de aproximación tal que la ecuación diferencial y las condiciones de frontera sean satisfechas en la forma de integrales de promedios ponderados con una función de prueba, esta formulación permite incorporar de manera natural condiciones de frontera de tipo diferencial. Las funciones de aproximación y de prueba deben ser lo suficientemente suaves de tal manera que sus primeras derivadas al cuadrado sean integrables. El método de elementos finitos proporciona una técnica general y sistemática para construir funciones base para aproximar el problema.

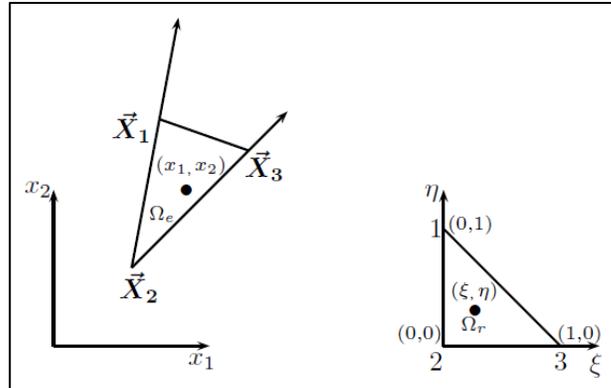


Figura 3.1- Mapa lineal desde un elemento triangular Ω_e a un elemento maestro Ω_r y un mapa inverso.

La idea principal es que las funciones base pueden ser definidas localmente parte por parte sobre subregiones del dominio llamados elementos finitos y que sobre cualquier subdominio las funciones base pueden ser funciones muy simples, tales como polinomios de orden bajo. La función base en un punto particular de una malla se obtiene combinando las funciones de forma definidas sobre los elementos conectados al nodo. Para poder definir localmente las funciones base se emplea un elemento de referencia donde se introducen los índices de los nodos locales y un sistema coordenado local, como se muestra en la figura (3.1). Las funciones de forma son aquellas que se definen en cada uno de los nodos de un elemento de referencia en términos de coordenadas locales. La función de forma de un nodo tiene un valor unitario en ese nodo y cero en los otros dos nodos.

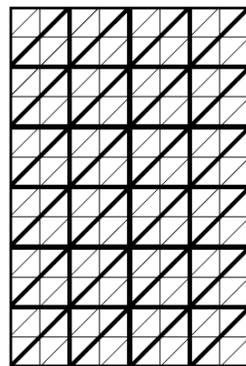


Figura 3.2 - Malla de presión gruesa y malla de velocidad fina.

3.2.1 Elementos triangulares

El triángulo es el polígono bidimensional más simple en el sentido de que tiene el menor número de lados y vértices, lo cual hace fácil elegir nodos lo suficientemente exactos para definir las funciones de forma, las cuales son polinomios completos de algún grado específico. El estudio de elementos finitos triangulares se comienza considerando el caso de triángulos arbitrarios generalizados Ω_e , como los que se tendrían en cualquier malla de elementos finitos y un triángulo de referencia Ω_r , isósceles recto, con lo que el mapeo de un triángulo a otro y la formulación con elemento finito se simplifican considerablemente. Una simple transformación lineal mapea el triángulo generalizado Ω_e en el triángulo de referencia isósceles-recto Ω_r , como se muestra en la figura (3.1). Las líneas coordenadas generalizadas 2-1 y 2-3 del elemento Ω_e corresponden a las coordenadas del elemento de referencia $\xi = 0$ y $\eta = 0$, es decir la transformación lineal describe el mapa desde un sistema generalizado a un sistema de referencia, ya que el mapa es lineal e invertible, el mapa inverso desde Ω_r a Ω_e existe y es también lineal. Esta linealidad implica también que una base polinomial en el plano x, y será transformado a una base polinomial en el plano ξ y η y viceversa. La transformación lineal desde Ω_e a Ω_r puede derivarse directamente haciendo que los lados generalizados mapeen los lados rectos de Ω_r . Las tres funciones de forma lineal para el elemento de referencia isósceles recto Ω_r puede escribirse por inspección, ya que cada uno debe tener el valor unitario en el correspondiente vértice y cero en el lado opuesto a ese vértice, obteniéndose:

$$\psi_1(\xi, \eta) = \eta \quad \psi_2(\xi, \eta) = 1 - \xi - \eta \quad \psi_3(\xi, \eta) = \xi \quad (3.1)$$

En general el método de elemento finito requiere el uso de dos mallas, una malla gruesa donde se calcula la presión y una malla fina donde se calcula la velocidad, ver figura (3.2).

3.2.2 Formulación débil del problema

La simulación numérica se llevó a cabo usando el método de elemento finito, con este fin, se definieron el paso de la discretización espacial, \tilde{h} , la triangulación de elementos finitos τ_h

del dominio poligonal $\bar{\Omega}$, el área polinomial P_1 en dos variables de grado menor o igual a uno, y el área de funciones continuas $C^0(\bar{\Omega})$ definida en $\bar{\Omega}$. Después se definió otro elemento finito de triangulación $\tau_{h/2}$ de $\bar{\Omega}$ que es dos veces más fino que τ_h , para subdividir cada triángulo de τ_h en cuatro subtriángulos similares de punto medio por cara. Los espacios funcionales se aproximan por los siguientes espacios de dimensión finita:

$$L_{0h} = \{q_h \in L_h \mid \int_{\Omega} q_h d\vec{X} = 0\} \text{ Con } L_h = \{q_h \mid q_h \in C^0(\bar{\Omega}), q_h|_{\tau} \in P_1, \forall \tau \in \tau_h\},$$

$$V_{0h} = \{\vec{v}_h \in V_h \mid \vec{v}_h = 0 \text{ on } \Gamma_1\} \text{ Con } V_h = \{\vec{v}_h \mid \vec{v}_h \in (C^0(\bar{\Omega}))^2, \vec{v}_h|_{\tau} \in P_1 \times P_1, \forall \tau \in \tau_{h/2}\},$$

$$W_{0h} = \{\theta_h \in W_h \mid \theta_h = 0 \text{ on } \Gamma_3\} \text{ Con } W_h = \{\theta_h \mid \theta_h \in C(\bar{\Omega}), \theta_h|_{\tau} \in P_1, \forall \tau \in \tau_{h/2}\},$$

Usando el anterior espacio de dimensión finita se obtiene la siguiente aproximación de las ecuaciones en su forma variacional (2.1-2.3), para más detalle ver referencia [18]-[19]. Para $t > 0$, encontramos $\vec{u}_h(t) \in V_h$ con $\vec{u}_h(t) = \vec{g}_{1h}(t)$ sobre Γ_1 , $p_h(t) \in L_h$ y $T_h(t) \in W_h = g_{3h}(t)$ sobre Γ_3 , tal que:

$$\int_{\Omega} [(\vec{u}_h \cdot \nabla) \vec{u}_h \cdot \vec{v}] d\vec{X} + \nu \int_{\Omega} \nabla \vec{u}_h : \nabla \vec{v} d\vec{X} - \int_{\Omega} p_h \nabla \cdot \vec{v} d\vec{X} = \int_{\Omega} \vec{f} \cdot \vec{v} d\vec{X} \quad \forall \vec{v} \in V_{0h} \quad (3.2)$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u}_h d\vec{X} = 0, \quad \forall q \in L_{0h}, \quad (3.3)$$

$$\int_{\Omega} [\rho C_p (\vec{u}_h \cdot \nabla) T_h \theta] d\vec{X} + k \int_{\Omega} \nabla T_h : \nabla \theta d\vec{X} = \int_{\Omega} Q \theta d\vec{X} \quad \forall \theta \in W_{0h}, \quad (3.4)$$

$$\vec{u}_h(\vec{X}, 0) = \vec{u}_{0h}(\vec{X}), \quad T_h(\vec{X}, 0) = T_{0h}(\vec{X}). \quad (3.5)$$

Por otro lado Γ_1 y Γ_3 son las condiciones de frontera de velocidad y temperatura tipo Dirichlet, respectivamente; \vec{g}_{1h} y g_{3h} son las aproximaciones de elemento finito de la velocidad y temperatura para las funciones \vec{g}_1 y g_3 , respectivamente. Similarmente, \vec{u}_{0h} y T_{0h} son aproximaciones de elemento finito de la condición inicial de las funciones \vec{u}_0 y T_0 , respectivamente.

3.2.3 Solución del problema de difusión

El problema de difusión consiste en una ecuación elíptica, una ecuación típica de este tipo para una componente u , se puede escribir como:

$$\bar{a}u - \nabla \cdot (V\nabla u) = f, \quad (3.6)$$

Al aplicar la formulación variacional a la ecuación anterior, la cual consiste en multiplicar por una función de prueba v e integrar sobre el dominio, se tiene:

$$\int_{\Omega} (\bar{a}u - \nabla \cdot (V\nabla u))v d\vec{x} = \int_{\Omega} fvd\vec{x}, \quad (3.7)$$

Desarrollando el primer miembro, se tiene:

$$\int_{\Omega} (\bar{a}uv - v\nabla \cdot (V\nabla u))d\vec{x} = \int_{\Omega} fvd\vec{x}, \quad (3.8)$$

Por la regla del producto para la diferencia, se obtiene:

$$v\nabla \cdot (V\nabla u) = \nabla \cdot (vV\nabla u) - V\nabla u \cdot \nabla v, \quad (3.9)$$

Así, la ecuación (3.8) se puede escribir como:

$$\int_{\Omega} (\bar{a}uv - \nabla \cdot (vV\nabla u) + V\nabla u \cdot \nabla v)d\vec{x} = \int_{\Omega} fvd\vec{x}, \quad (3.10)$$

Aplicando el teorema de la divergencia, se obtiene:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (vV\nabla u) d\vec{x} = \int_{\partial\Omega} (vV\nabla u) \cdot \vec{n}d(\partial\Omega), \quad (3.11)$$

Así, la ecuación (3.10), se puede escribir como:

$$\int_{\Omega} (\bar{a}uv + V\nabla u \cdot \nabla v)d\vec{x} - \int_{\partial\Omega} (vV\nabla u) \cdot \vec{n}d(\partial\Omega) = \int_{\Omega} fvd\vec{x}, \quad (3.12)$$

Pero

$$\nabla u \cdot \vec{n} = \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \quad (3.13)$$

Por lo tanto:

$$\int_{\Omega} (\bar{a}uv + V\nabla u \cdot \nabla v) d\vec{x} - \int_{\partial\Omega} uV \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} d(\partial\Omega) = \int_{\Omega} fvd\vec{x}, \quad (3.14)$$

Reordenando términos, se obtiene:

$$\int_{\Omega} (\bar{a}uv + V\nabla u \cdot \nabla v) d\vec{x} = \int_{\Omega} fvd\vec{x} + \int_{\partial\Omega} V \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} vd(\partial\Omega), \quad (3.15)$$

Sustituyendo

$$v = \sum_{i=1}^{nn} v_i \psi_i \quad (3.16)$$

Donde nn es el número de nodos, se tiene:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(\bar{a}u \left(\sum_{i=1}^{nn} v_i \psi_i \right) + V\nabla u \cdot \nabla \left(\sum_{i=1}^{nn} v_i \psi_i \right) \right) d\vec{x} \\ &= \int_{\Omega} f \left(\sum_{i=1}^{nn} v_i \psi_i \right) d\vec{x} + \int_{\partial\Omega} V \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \left(\sum_{i=1}^{nn} v_i \psi_i \right) d(\partial\Omega), \end{aligned} \quad (3.17)$$

Factorizando, se obtiene:

$$\sum_{i=1}^{nn} v_i \left[\int_{\Omega} (\bar{a}u\psi_i + V\nabla u \cdot \nabla \psi_i) d\vec{x} = \int_{\Omega} f\psi_i d\vec{x} + \int_{\partial\Omega} V \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \psi_i d(\partial\Omega) \right], \quad (3.18)$$

Lo cual es equivalente a escribir:

$$\int_{\Omega} (\bar{a}u\psi_i + V\nabla u \cdot \nabla \psi_i) d\vec{x} = \int_{\Omega} f\psi_i d\vec{x} + \int_{\partial\Omega} V \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \psi_i d(\partial\Omega) \quad i = 1, \dots, nn, \quad (3.19)$$

Empleando la aproximación:

$$u = \sum_{j=1}^{nn} v_j \psi_j \quad (3.20)$$

Y reordenando se tiene:

$$\sum_{j=1}^{nn} \left[\int_{\Omega} (\bar{a} \psi_i \psi_j + V \nabla \psi_i \cdot \nabla \psi_j) d\vec{x} \right] u_j = \int_{\Omega} f \psi_i d\vec{x} + \int_{\partial\Omega} V \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \psi_i d(\partial\Omega) \quad i = 1, \dots, nn, \quad (3.21)$$

Obteniéndose un sistema de ecuaciones lineales, de la forma:

$$\sum_{j=1}^{nn} k_{ij} u_j = f_i \quad i = 1, \dots, nn, \quad (3.22)$$

Donde

$$k_{ij} = \int_{\Omega} (\bar{a} \psi_i \psi_j + V \nabla \psi_i \cdot \nabla \psi_j) d\vec{x}, \quad (3.23)$$

Y

$$f_i = \int_{\Omega} f \psi_i d\vec{x} + \int_{\partial\Omega} V \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \psi_i d(\partial\Omega) \quad (3.24)$$

3.2.4 Integración de elemento finito

El cálculo de las entradas locales de las matrices y vectores definidos por las ecuaciones (3.23) a (3.24), se realiza, mediante integración de elemento finito. Un término muy utilizado en estos cálculos para cada uno de los elementos finitos en que se divide el dominio es el determinante de la matriz Jacobiana, el cual está dado por:

$$J_e = x_1(3,2)x_2(1,2) - x_1(1,2)x_2(3,2) \quad (3.25)$$

Así como la inversa de la matriz Jacobiana:

$$[J_e^{-1}] = \frac{1}{J_e} \begin{bmatrix} x_2(1,2) & -x_1(1,2) \\ -x_2(3,2) & x_1(1,2) \end{bmatrix}, \quad (3.26)$$

Donde:

$$x_1(1,2) = x_1(1) - x_1(2), \quad (3.27)$$

$$x_1(3,2) = x_1(3) - x_1(2), \quad (3.28)$$

$$x_2(1,2) = x_2(1) - x_2(2), \quad (3.29)$$

$$x_2(3,2) = x_2(3) - x_2(2), \quad (3.30)$$

La matriz definida por las entradas locales de la ecuación (3.23) se calculan como:

$$k_{ij}^e = \bar{a} J e \int \psi_i \psi_j d\vec{\xi} + \frac{V J e}{2} [\nabla \psi_i] [J e^{-1}] [J e^{-1}]^t [\nabla \psi_i]^t, \quad (3.31)$$

Donde

$$\int \psi_i \psi_j d\vec{\xi} = \frac{1}{24} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad (3.32)$$

$$\nabla \psi = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.33)$$

Suponiendo $\frac{\partial u}{\partial \bar{n}} = 0$, el vector definido por las entradas locales de la ecuación (3.24), se calcula como:

$$f_i^e = \frac{J}{24} \begin{bmatrix} 2f^{g(e,1)} + f^{g(e,2)} + f^{g(e,3)} \\ f^{g(e,1)} + 2f^{g(e,2)} + f^{g(e,3)} \\ f^{g(e,1)} + f^{g(e,2)} + 2f^{g(e,3)} \end{bmatrix}. \quad (3.34)$$

3.2.5 Convergencia

Las simulaciones se realizaron con una malla adaptable para todos los casos, con el fin de garantizar la independencia del mallado en la solución. La Figura 3.3, muestra el análisis de

convergencia mediante los perfiles de temperatura como función de la coordenada axial y para tres diferentes tamaños de malla: 15820, 18990 y 20150 elementos. La validación del código numérico se hizo considerando un canal con un escalón en expansión para el cual se calcularon los puntos de reencuentro los cuales coincidieron con una diferencia menor al 5% con los resultados presentados por Armaly *et al* [25]. Obteniéndose para $Re=100$ un punto de reencuentro en 2.82 (con el código utilizado en este trabajo) y 2.95 (Armaly *et al.* [25]) y para $Re=600$ se obtuvieron valores de 10.48 (con el código utilizado en este trabajo) y 11.0 (Armaly *et al.* [25]).

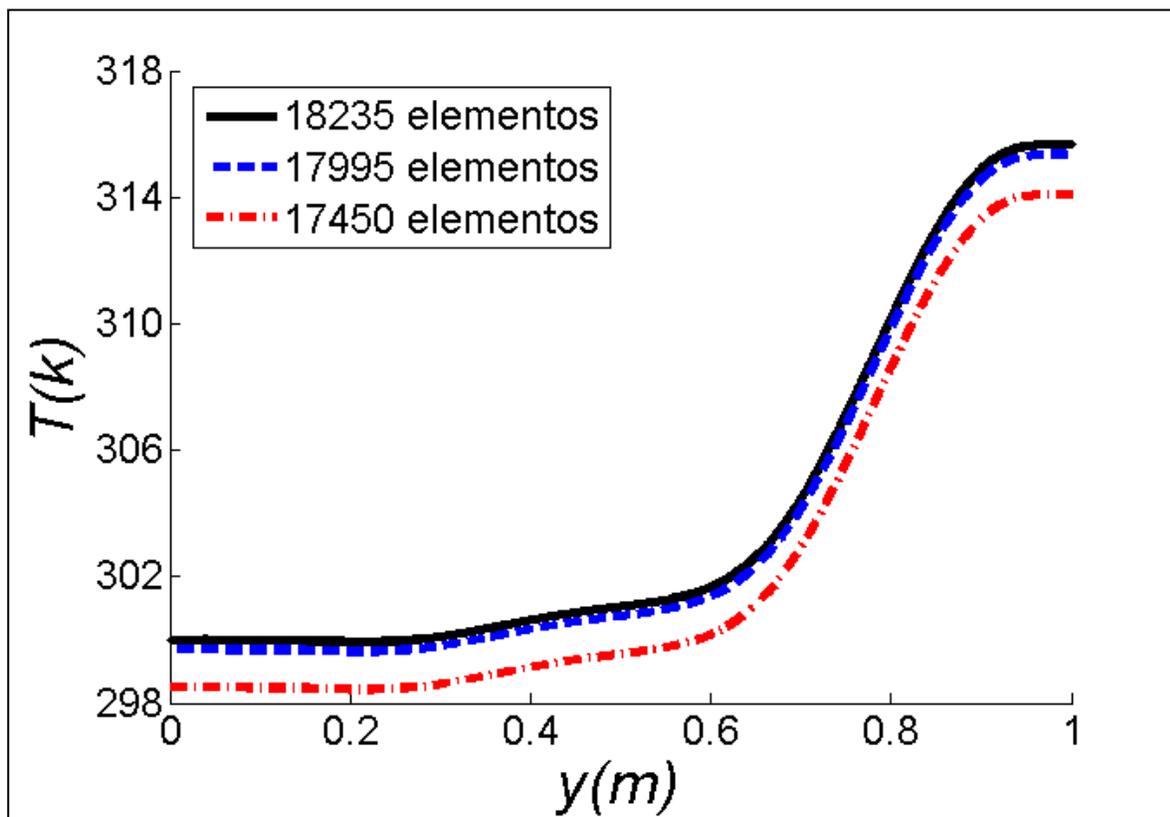


Figura 3.3 - Análisis de convergencia de los perfiles de temperatura en la línea media vertical de la cavidad con tres diferentes tamaños de malla para $Ri=1.0$, $Pr=0.1$, $Sc=0.5$ y entrada de flujo secundario en la pared izquierda.

CAPITULO 4. RESULTADOS

4.1 APLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA

4.1.1 Caso de estudio.

En esta investigación se simularon numéricamente los efectos hidrodinámicos de la geometría 3D de los platos en una columna de destilación sobre el flujo de etanol y mezclas de etanol-agua, también se realizaron simulaciones para la transferencia de masa y energía en modelos 2D. Se hicieron variaciones en la velocidad del flujo simulado y se observaron la caída de presión y transferencia de masa y energía entre las fases del fluido al pasar a través de la geometría del plato. Específicamente en esta tesis se hicieron las siguientes simulaciones: 1) dinámica del flujo 3D en una sola tapa de burbuja lisa y ranurada 2) dinámica del flujo 3D en un plato con múltiples tapas de burbujas ranuradas 3) dinámica del flujo con transferencia de calor 3D en una sola tapas de burbuja lisa y ranurada 4) dinámica del flujo con transporte de calor 3D en un plato con 5 tapas de burbujas lisas y ranuradas 5) dinámica del flujo con transporte de calor 3D en dos plato con 5 tapas de burbujas lisas y ranuradas 6) dinámica del flujo con transporte de calor y masa en dos fases en un modelo 2D en una sección de una tapa de burbuja Las condiciones de frontera y los datos utilizados en las simulaciones presentadas en este capítulo corresponden a los de una columna de destilación real ubicada en la planta piloto de biocombustible del Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico de Veracruz (TecNM-ITVer).

4.1.2 Caracterización de la columna de destilación y sus componentes internos.

La columna analizada tiene una altura de 4.2 m y 0.15 m de diámetro ver Figura 4.1, en la parte inferior cuenta con un calderín, el calderín es de forma cilíndrica y sus dimensiones son 0.5 m de diámetro y 0.36 m de alto y en la parte superior tiene 5 secciones para la destilación y rectificación del etanol, las secciones se enumeran de abajo hacia arriba, la sección 1 y 2

se compone de platos perforados inclinados, la sección 3 y 4 tienen 3 platos cada uno, cada plato tiene 5 tapas de burbuja de 0.039 m de diámetro en cada plato, la sección 5 se compone de 3 platos con 11 tapas de burbujas de 0.025 m de diámetro, el punto de alimentación del mosto se encuentra en la sección 2.

La sección 4 de la columna se compone de 3 platos con 5 tapas de burbuja cada uno, ver Figura 4.1(d), cada plato cuenta con un bajante con trampilla para la recirculación del destilado. Se considera que en la sección 4 la separación de la mezcla etanol-agua se encuentra en etapa de rectificación y el flujo del vapor de etanol es cercano al punto azeotrópico con una pureza 96% [2], por ello la simulación se realiza con etanol como fluido de trabajo y al estar cercano al punto azeotrópico la mezcla etanol agua se comporta como un solo fluido.

En la Tabla 4.1 se detallan las características dimensionales generales de la columna de destilación y las características de la sección 4 de la columna, en la Figura 4.2 se aprecian los detalles particulares de las tapas de burbuja con ranuras que componen los platos de la sección 3 y 4. La sección 4 de la columna está compuesta por 3 platos colocados a 180 grados como se muestra en la Figura 4.3.

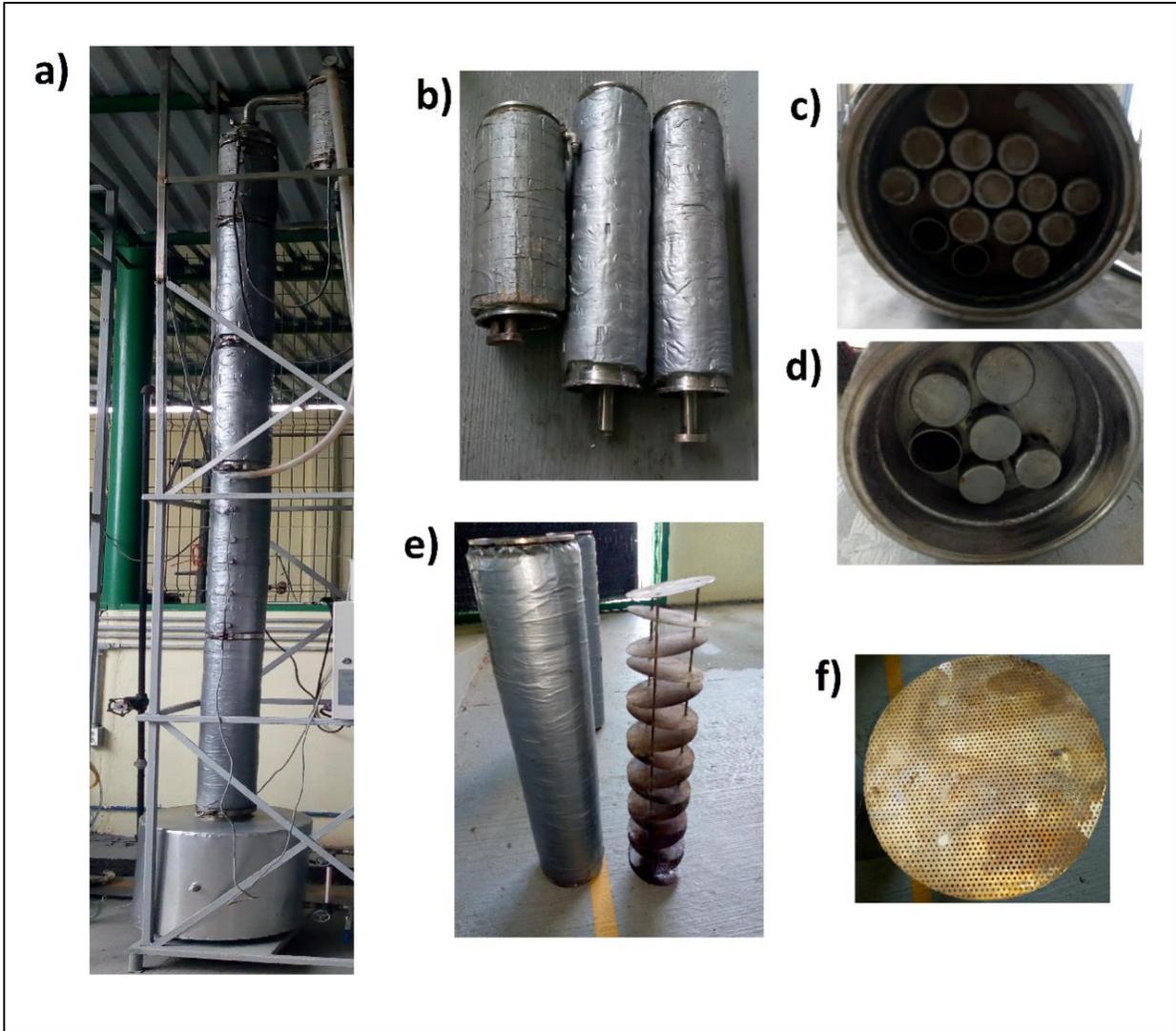


Figura 4.1 a) Columna de destilación, b) Secciones con tapas de burbuja, c) Vista superior de la sección 5 con 13 tapas de burbuja, d) Vista superior de la sección 4 y 5 con 5 tapas de burbujas, e) Sección 1 y 2 de la columna con platos perforados inclinados, f) Vista superior de un plato perforado.



Figura 4.2 – Detalle de las ranuras en una tapa de burbuja de las secciones 3 y 4.

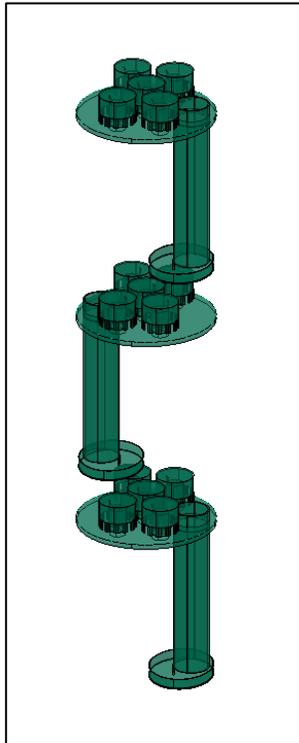


Figura 4.3 – Modelo 3D de la vista interna del de la sección 4, los platos se dispones en una rotación de 180 grados.

Tabla 4.1 – Características de la columna de destilación y de la sección 4.

Diámetro de la columna (m)	0.15
Diámetro del plato (m)	0.14
Altura de la columna (m)	4.2
Numero de secciones	5
Altura de la sección (m)	0.60
Numero de platos en la sección 4	3 platos
Tipo de tapa de los platos en la sección 4	Tapas ranuradas
Diámetro del tubo de subida (m)	0.016
Altura del tubo de subida (m)	2.4
Diámetro tapa (m)	0.039
Altura de la tapa (m)	0.028
Dimensiones de la ranura (mm)	5x10
Numero de ranuras	12

Las secciones de la columna de destilación permanecen unidas por bridas de presión, en las secciones 1 y 2 de platos perforados inclinados es posible desmontar el arreglo de platos, ver Figura 4.1 (e), en las secciones 3, 4 y 5 no es posible la separación de los componentes internos debido a que se encuentran unidos la carcasa de la columna, esta característica del diseño de la columna permite modificar el orden de los platos ranurados ya sean pequeñas o grandes, ver figura 4.4.

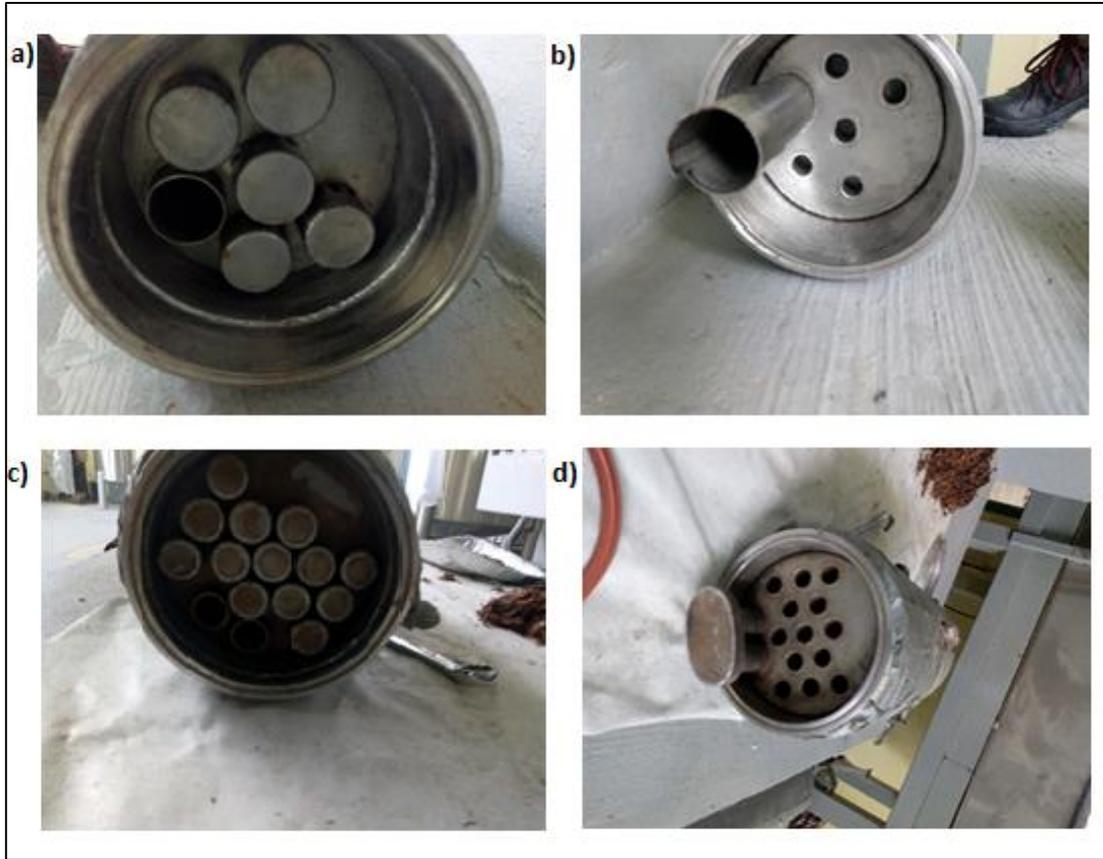


Figura 4.4 - Elementos internos sección 3, 4 y 5. a) Vista superior de un plato de tapas de burbujas 0.039 m Ø. b) Vista inferior de un plato de tapas de burbujas de 0.039 m Ø. c) Vista superior de un plato de tapas de burbujas de 0.025 m Ø. d) Vista inferior de un plato de tapas de burbujas de 0.025 m Ø.

4.1.3 Modelado 3D de los elementos internos de la columna de destilación.

Se desarrollaron los modelos 3D de los elementos internos caracterizados en el punto anterior, para la construcción de los modelos se empleó el software AutoCAD 2019 con licencia estudiantil. se generó un modelo para cada tamaño de calota, en la Figura 4.5 (a) se aprecia una tapa de burbujas con ranuras, la Figura 4.5 (b) muestra el modelo simplificado de tapa de burbuja sin ranuras, se modeló una tapa de burbujas sin ranuras con el objetivo de estudiar el efecto de las ranuras sobre el flujo de etanol en una configuración diferente, posteriormente se ensamblaron configuraciones de platos y plato doble en representación de la sección 4 de la columna con ambos diseños de tapas de burbuja, ver Figura 4.6 y 4.7. Para el estudio del comportamiento del fluido se generó un modelo del volumen que rodea las

tapas de burbujas, ver Figura 4.8, con el objetivo de ampliar la visualización de los fenómenos internos del fluido en la columna se amplió el modelo para la simulación de modelos con uno y dos platos, ver Figura 4.9 y 4.10. El estudio del fluido se ejecuta sobre el modelo 3D que es la representación del volumen de control propio del fluido dentro de la columna y alrededor de las tapas de burbuja, ver Figura 4.8.

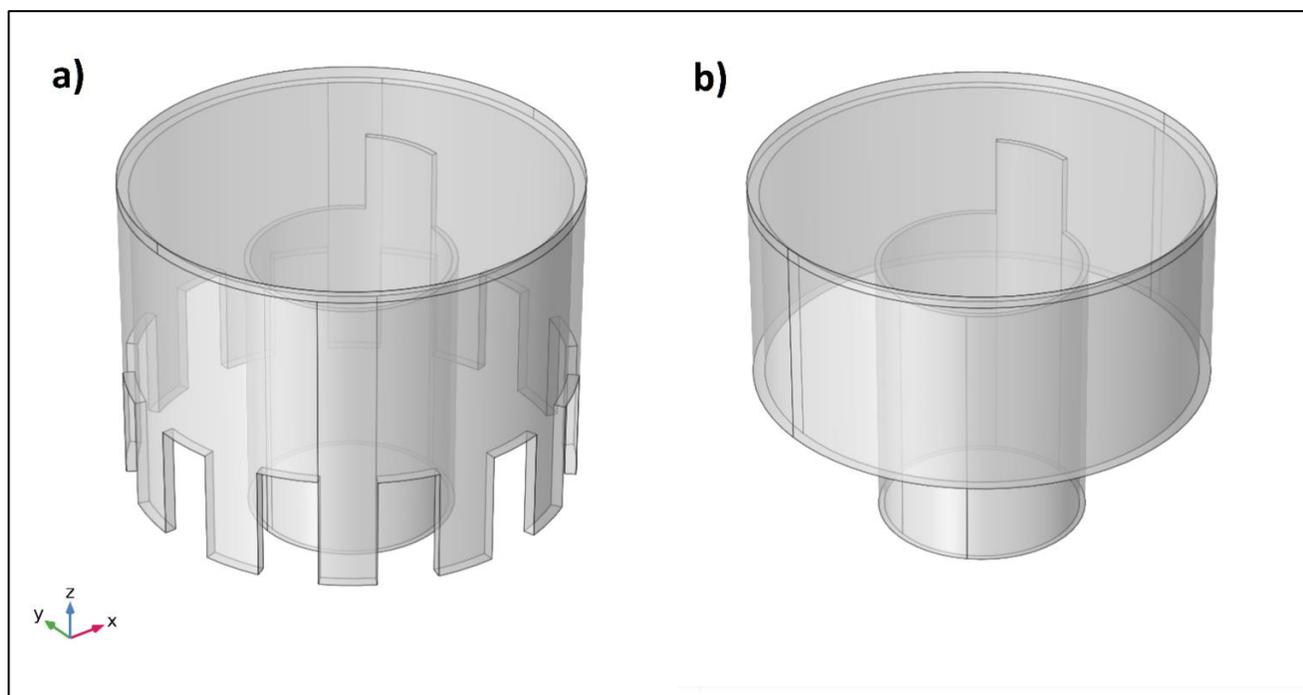


Figura 4.5 - a) Tapa de burbujas con ranuras. b) Tapa de burbujas sin ranuras.

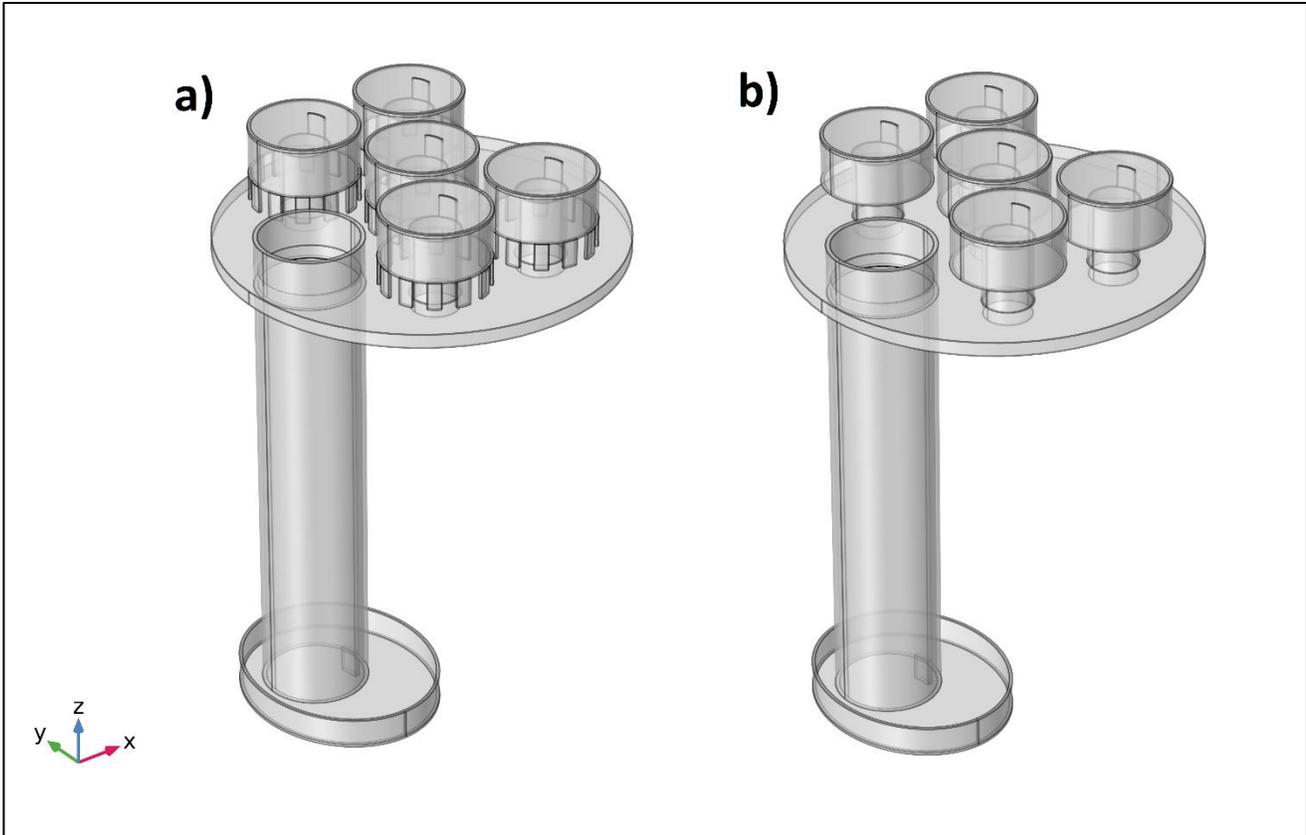


Figura 4.6 – a) Modelo 3D del arreglo de platos. a) tapara de burbuja ranurada. b) tapa de burbuja lisa.

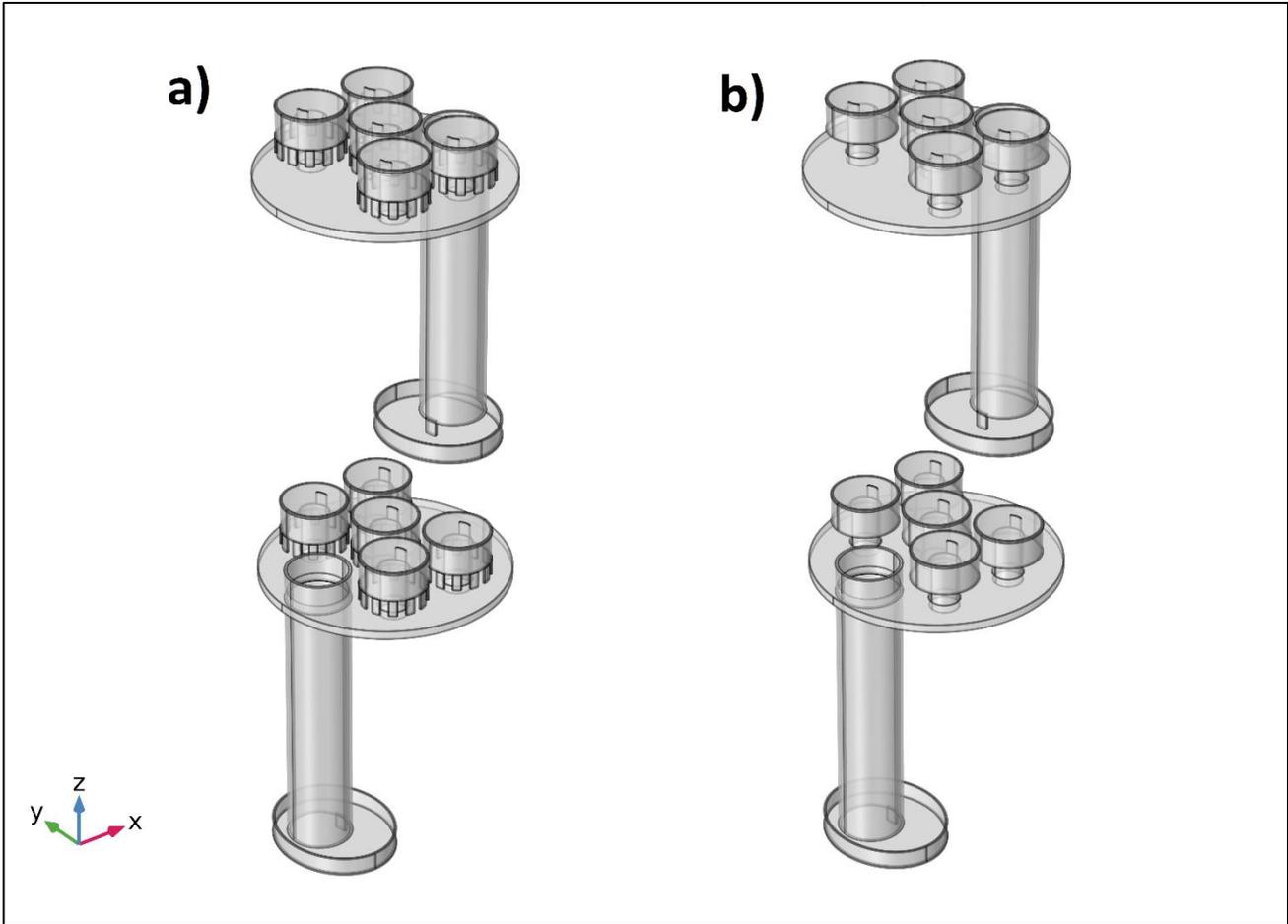


Figura 4.7 – a) Modelo 3D del arreglo de platos dobles. a) tapara de burbuja ranurada. b) tapa de burbuja lisa.

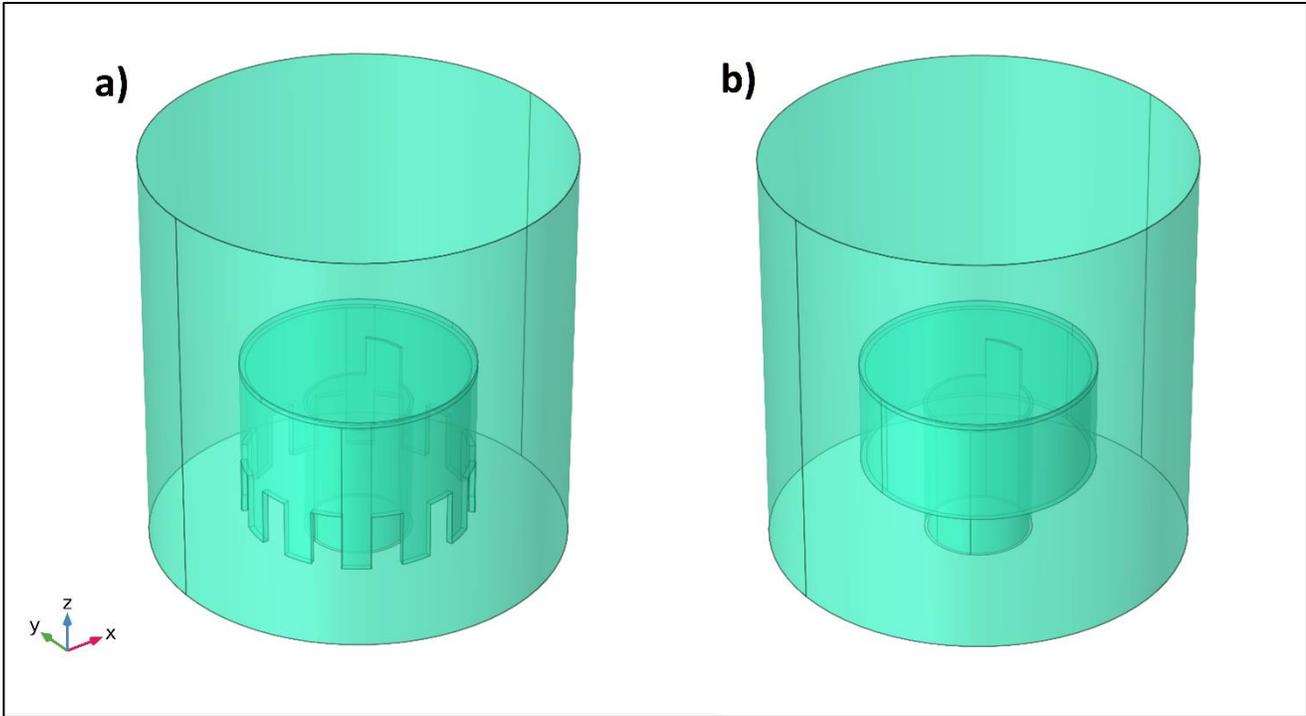


Figura 4.8 - a) Modelo 3D del volumen de control. a) Tapas de burbuja ranurada. b) Tapas de burbuja lisa.

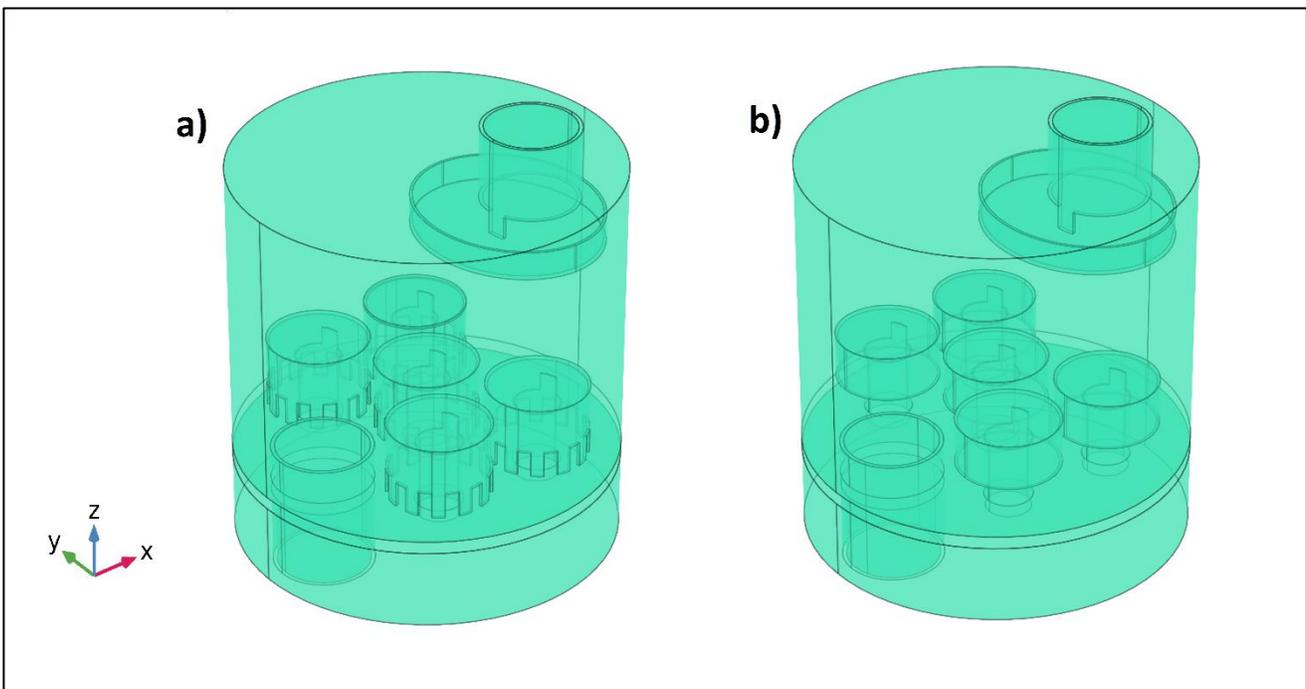


Figura 4.9 - a) Modelo 3D del volumen de control. a) plato de tapas de burbuja ranurada. b) plato de tapas de burbuja lisa.

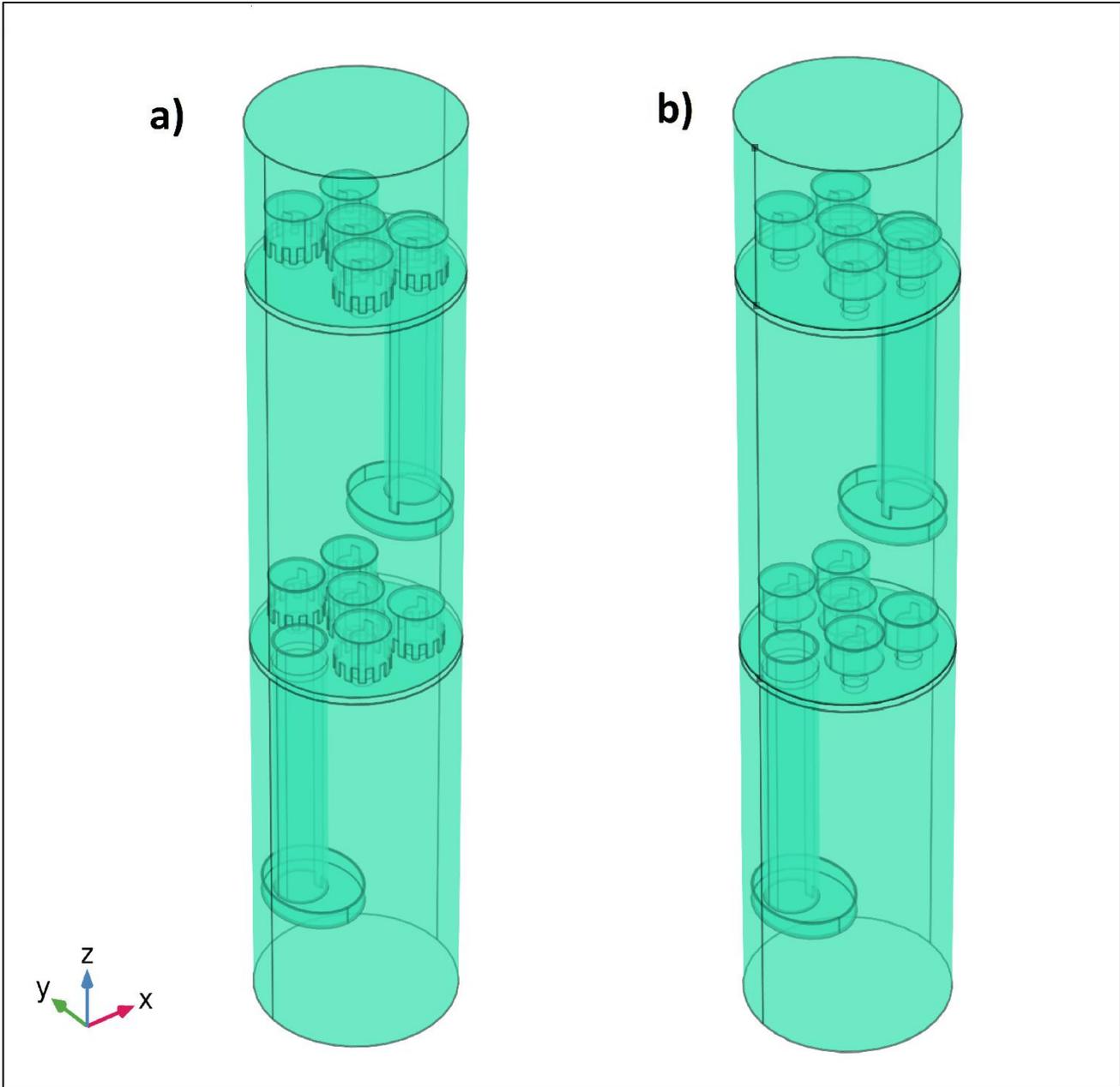


Figura 4.10 - a) Modelo 3D del volumen de control. a) plato doble de tapas de burbuja ranurada. b) plato doble de tapas de burbuja lisa.

4.1.4 Simulaciones en modelos 3D.

En la actualidad el método de elemento finito se emplea ampliamente en diferentes disciplinas debido a que sus elementos de discretización permiten ajustarse fácilmente a geometrías complejas como es el caso de las calotas y platos de burbujas de las columnas de destilación empleadas en el la purificación de plantas pilotos de biocombustible. Las simulaciones crean una malla para el método del elemento finito que se adapta a la geometría y tamaño de cada modelo, en las mallas es posible apreciar la densidad de nodos que se generan para cada modelo, estos nodos varían en cada simulación, el tamaño de los nodos está influenciado por el tamaño del modelo, el módulo de física implementado en la simulación y la calidad requerida del mallado. Para resolver los modelos matemáticos se genera una serie de nodos en el volumen del modelo que al interconectarse producen una malla que definen una serie de dominios donde se aplica el método de elemento finito, en la Figura 4.11 (a) se observa una malla para una tapa de burbujas con ranuras mientras que la Figura 4.11 (b) muestra la malla del volumen de control de una tapa de burbujas sin ranuras, la precisión del cálculo depende del número de nodos que se generen en cada malla, al incrementar la calidad del mallado se incrementa el costo computacional de las simulaciones, en la Tabla 4.2 podemos observar el número de dominios generados para cada modelo, las mallas se generan aplicando el modelo para análisis de flujos turbulentos, en el cual se seleccionó un tamaño estándar para los elementos. En la Figura 4.12 se aprecia un ejemplo de la densidad de malla para diferentes configuraciones de plato de la columna de destilación.

Tabla 4.2 – Número de nodos para los modelos 3D.

Modelo	Numero de dominios
Tapa de burbujas lisa	1,272,107
Tapas de burbuja ranuradas	1,929,631
Plato de tapas de burbuja lisa	4,123,677
Plato de tapa de burbujas ranuradas	5,405,759
Plato doble de tapa de burbuja lisa	8,826,207
Plato doble de para de burbuja ranurada	10,784,291

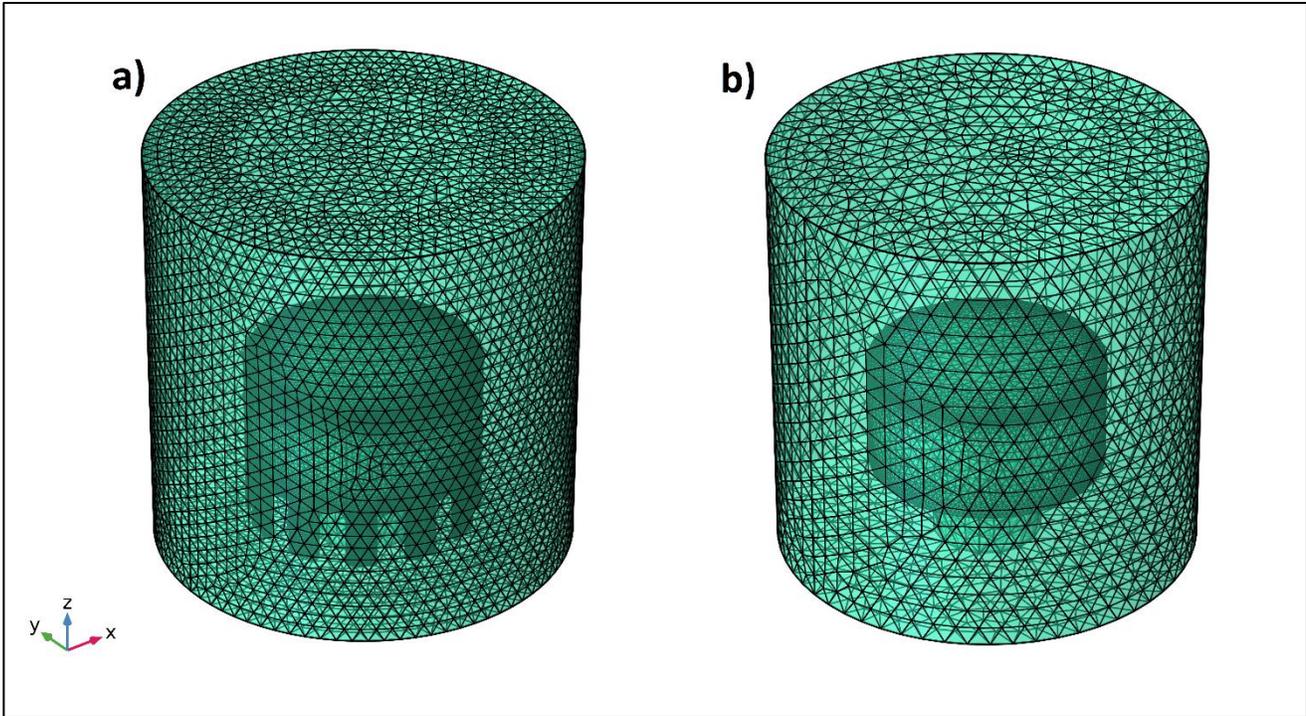


Figura 4.11 - Malla del volumen de control. a) Tapa de burbujas ranurada. b) Tapa de burbujas lisa.

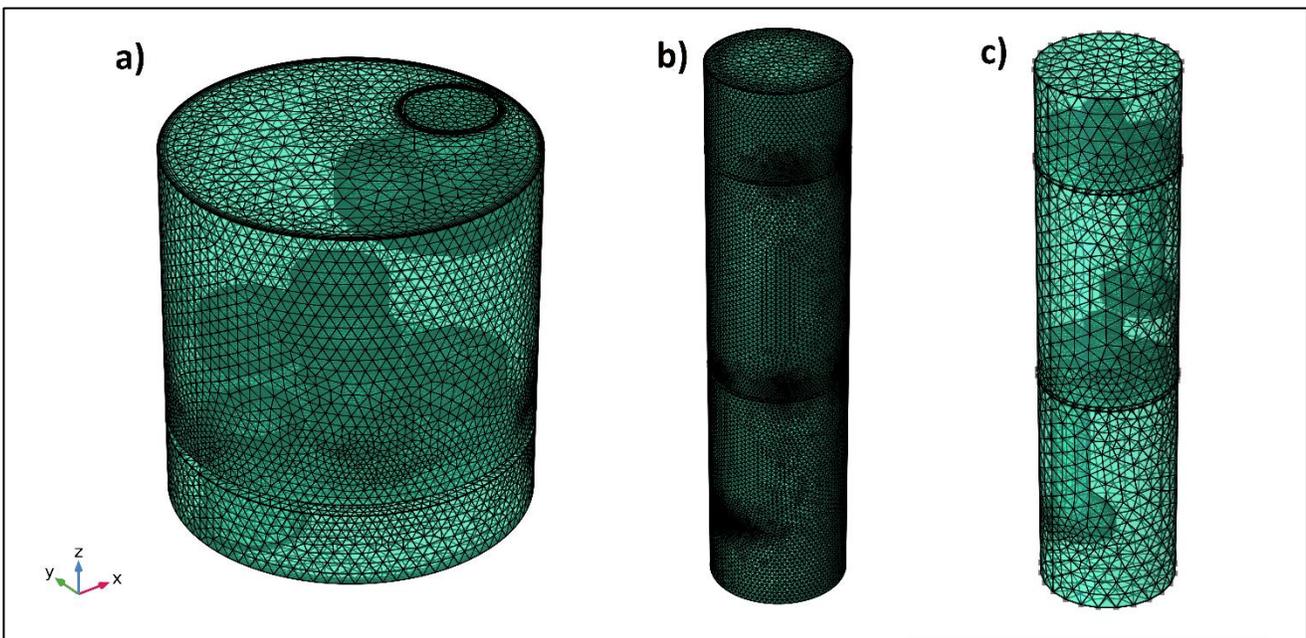


Figura 4.12 Proyección del mallado. a) Plato con 5 tapas de burbujas lisas. b) Plato doble con tapas de burbujas ranuradas. c) Plato doble con tapas de burbujas lisas.

4.1.5 Simulación del comportamiento hidrodinámico.

En la primera etapa las simulaciones realizadas con el modelo de dinámica de fluidos computacionales para flujo turbulento se utilizó la geometría de una sola tapa de burbuja grande comparándose el efecto de la velocidad del flujo de entrada del vapor de etanol sobre una tapa ranurada y una lisa, los resultados permitieron observar la caída de presión en el fluido de acuerdo al régimen de velocidad de entrada y la geometría del modelo.

Los resultados de la etapa inicial permiten apreciar las líneas de flujo, ver Figura 4.13, la magnitud de la velocidad del fluido debido a los cambios de dirección del mismo, así como la presión generada al pasar a través de la geometría de tapa de burbujas ranurada y la tapa lisa, ver figura 4.14. En la figura también se puede apreciar el campo de presiones, se puede establecer que existe mayor presión en la zona de entrada del fluido debido al choque del fluido contra la tapa de burbujas, al cambiar de dirección la presión se reduce considerablemente, siendo mayor en la periferia de la tapa de burbujas. Se observan zonas de estancamiento en la parte central interior de la tapa de burbujas y en la parte exterior del tubo de entrada en la zona donde el movimiento del fluido ha cambiado de dirección. Las líneas de corriente muestran mayor vorticidad en las calotas con ranura justo al salir el fluido de la tapa de burbujas, lo cual se debe al desprendimiento de la capa límite.

Las simulaciones del comportamiento hidrodinámico se realizaron con el modelo de flujo monofásico en régimen turbulento, se estudiaron los modelos de tapa de burbuja ranurada y lisa con condiciones de frontera idénticas para cada modelo. Se consideró como fluido de trabajo vapor de etanol, se incluyó el efecto de la gravedad sobre el flujo, y se realizó un mallado controlado automáticamente. La condición de frontera de salida fue de 103000 Pa, la cual se mantuvo constante en todas las simulaciones de tapas de burbujas. Como condición de frontera en la entrada se impuso la velocidad del flujo etanol, realizándose simulaciones con velocidades de 5 m/s, 7.5 m/s, 10 m/s, 12.5 m/s 15 m/s y 17.5 m/s. se realizó la simulación a la temperatura de operación normal de 371 K y a 293.15 K como marco de referencia. Las simulaciones sobre el comportamiento hidrodinámico se realizaron en el equipo de cómputo

descrito en el apartado 2.3.10, en la Tabla 4.3 se reportan los resultados obtenidos de la caída de presión de acuerdo a la velocidad y geometría de cada simulación.

Tabla 4.3 – Comportamiento hidrodinámico de tapas de burbuja.

Velocidad de entrada	Caída de presión a 293.15 K		Caída de presión a 371 K	
	Lisa	Ranurada	Lisa	Ranurada
5 m/s	18 Pa	21 Pa	15 Pa	21 Pa
7.5 m/s	39 Pa	45 Pa	31 Pa	36 Pa
10 m/s	67 Pa	79 Pa	54 Pa	63 Pa
12.5 m/s	104 Pa	122 Pa	83 Pa	97 Pa
15 m/s	149 Pa	175 Pa	118 Pa	139 Pa
17.5 m/s	202 Pa	236 Pa	161 Pa	188 Pa

En la Figura 4.13 se aprecia el detalle del efecto de las ranuras sobre el campo de velocidad del flujo de etanol para velocidades de entrada de 10 m/s. Para ambos casos las velocidades en el tubo de entrada alcanzan las mismas velocidades, sin embargo, en las salidas de la tapa de burbujas se observa diferencias en las magnitudes de velocidad. Para el caso sin ranura, figura 4.13 (b), se observan velocidades de aproximadamente 5 m/s, mientras que, para el caso con ranuras, figura 4.13 (a) las velocidades se incrementan hasta 7 m/s, lo anterior se debe a que la velocidad del flujo se descompone abruptamente al encontrarse con las ranuras, de tal manera que para este caso el fluido tendrá una componente de velocidad axial hacia abajo y una componente radial hacia el exterior.

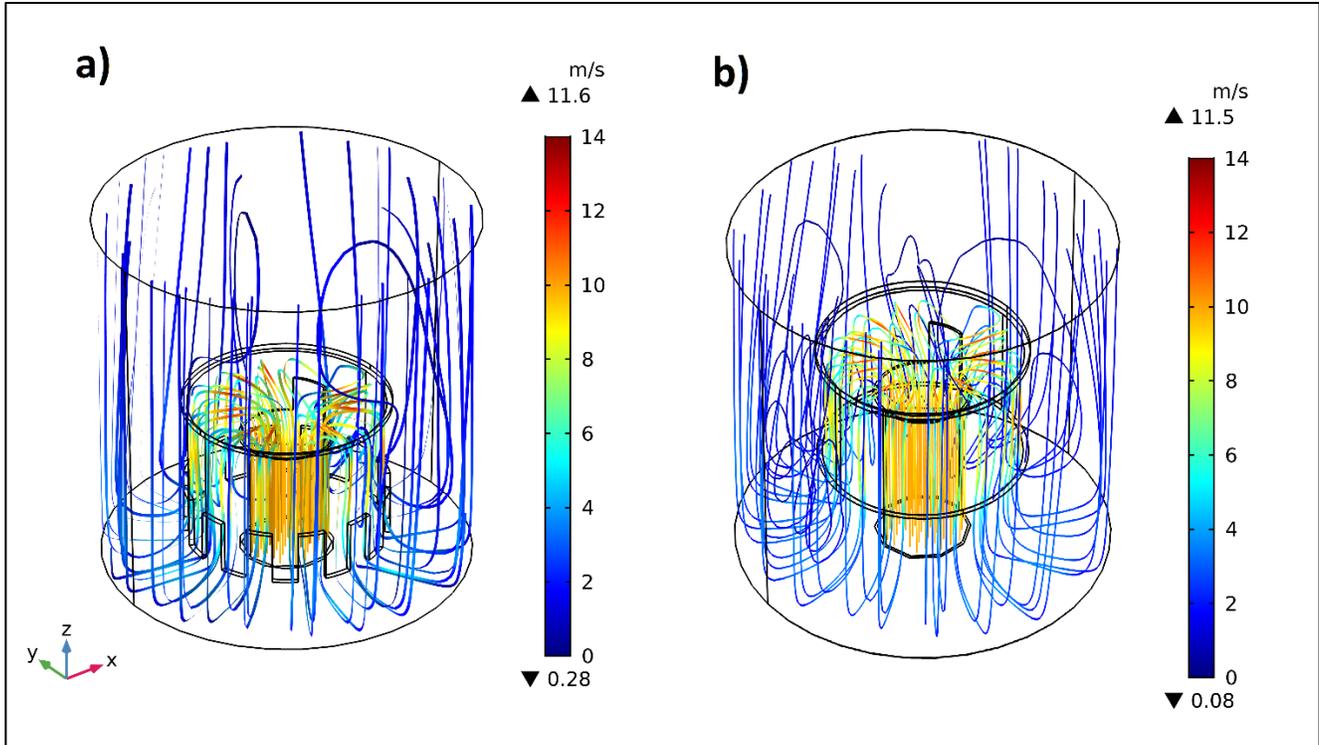


Figura 4.13 - a) Líneas de corriente en una tapa de burbuja ranurada con velocidad de entrada de 10m/s. b) Línea de corriente en una tapa de burbuja lisa con velocidad de entrada de 10m/s.

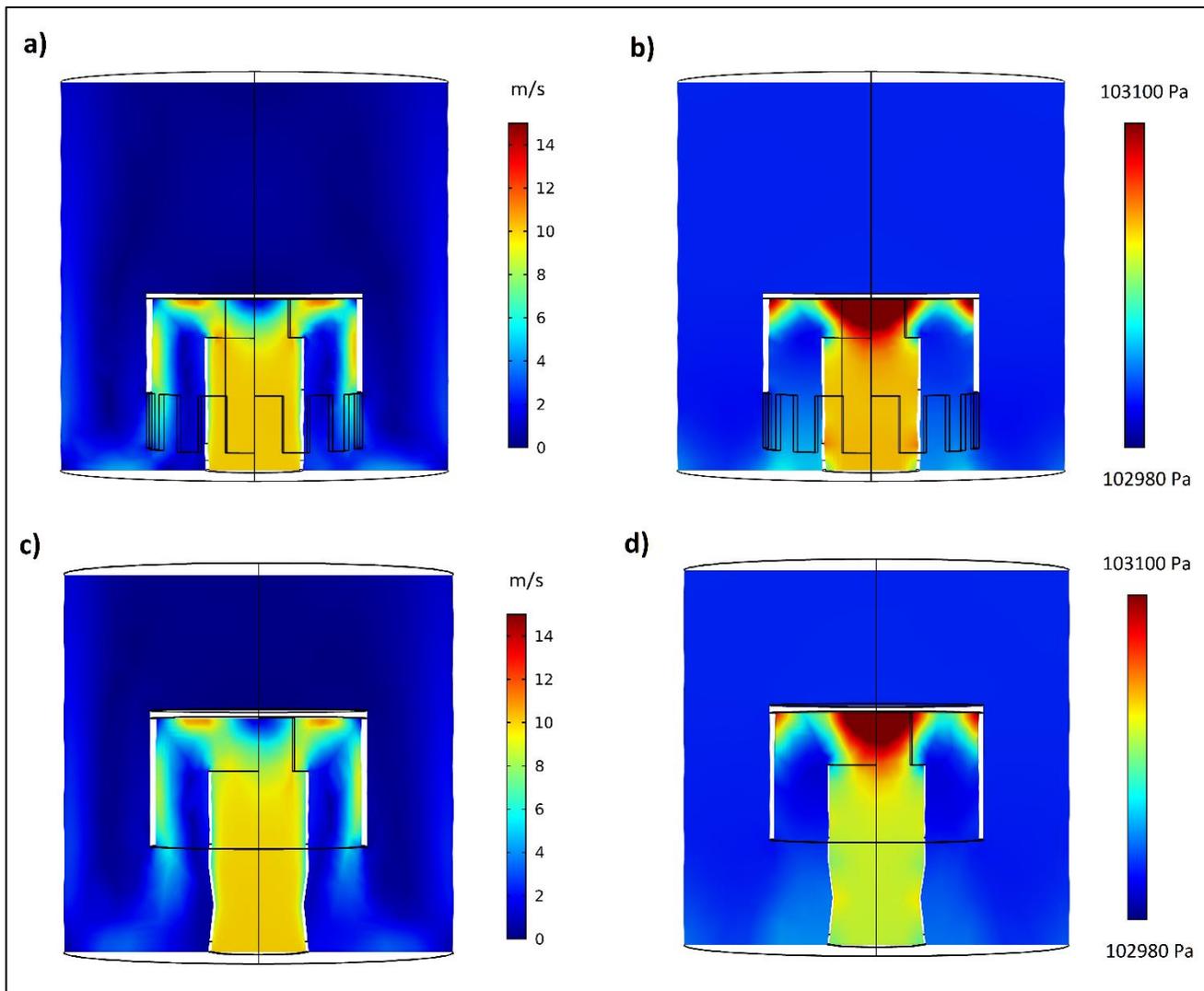


Figura 4.14 – a) Corte del plano XY del campo de velocidad para una tapa de burbuja sin ranuras con velocidad de entrada de 10m/s. b) Corte del plano XY del campo de presión para una tapa de burbuja con ranuras con velocidad de entrada de 10m/s. c) Corte del plano XY del campo de velocidad para una tapa de burbuja sin ranuras con velocidad de entrada de 10m/s. d) Corte del plano XY del campo de presión para una tapa de burbuja sin ranuras con velocidad de entrada de 10m/s.

La segunda etapa del estudio del comportamiento hidrodinámico se aplicó a una placa con varias tapas lisas y ranuradas. La condición en la frontera de salida fue de 103000 Pa, la cual se mantuvo constante en todas las simulaciones de tapas de burbujas. Como condición de frontera en la entrada se impuso la velocidad del flujo etanol, realizándose simulaciones con velocidades de 5 m/s, 7.5 m/s, 10 m/s, 12.5 m/s, 15 m/s, 17.5 m/s y 20 m/s. se realizó la simulación a la temperatura de operación normal de 318.15 K. Las simulaciones sobre el

comportamiento hidrodinámico se realizaron en el clúster agave, en la Tabla 4.4 se reportan las condiciones de entrada y los resultados obtenidos de la caída de presión de acuerdo a la velocidad y geometría de cada simulación, en las Figuras 4.15, 4.16 y 4.17 se aprecian las línea de flujo y las líneas de contorno de la presión en el modelo del plato con tapas ranuradas con velocidad de entrada de 5 m/s, 10 m/s y 15 m/s. se observa que la trayectoria del fluido permanece y no es afectada por el incremento de velocidad, por otra parte los contornos de presión se desarrollan más cerca de las ranuras conforme se incrementa la velocidad del fluido.

Tabla 4.4 – Comportamiento hidrodinámico de plato con cinco tapas de burbuja ranuradas con temperatura de operación de 318.15 k.

Velocidad de entrada	Caída de presión
5 m/s	10282 Pa
7.5 m/s	23115 Pa
10 m/s	41197 Pa
12.5 m/s	64305 Pa
15 m/s	92613 Pa
17.5 m/s	125899 Pa
20 m/s	164064 Pa

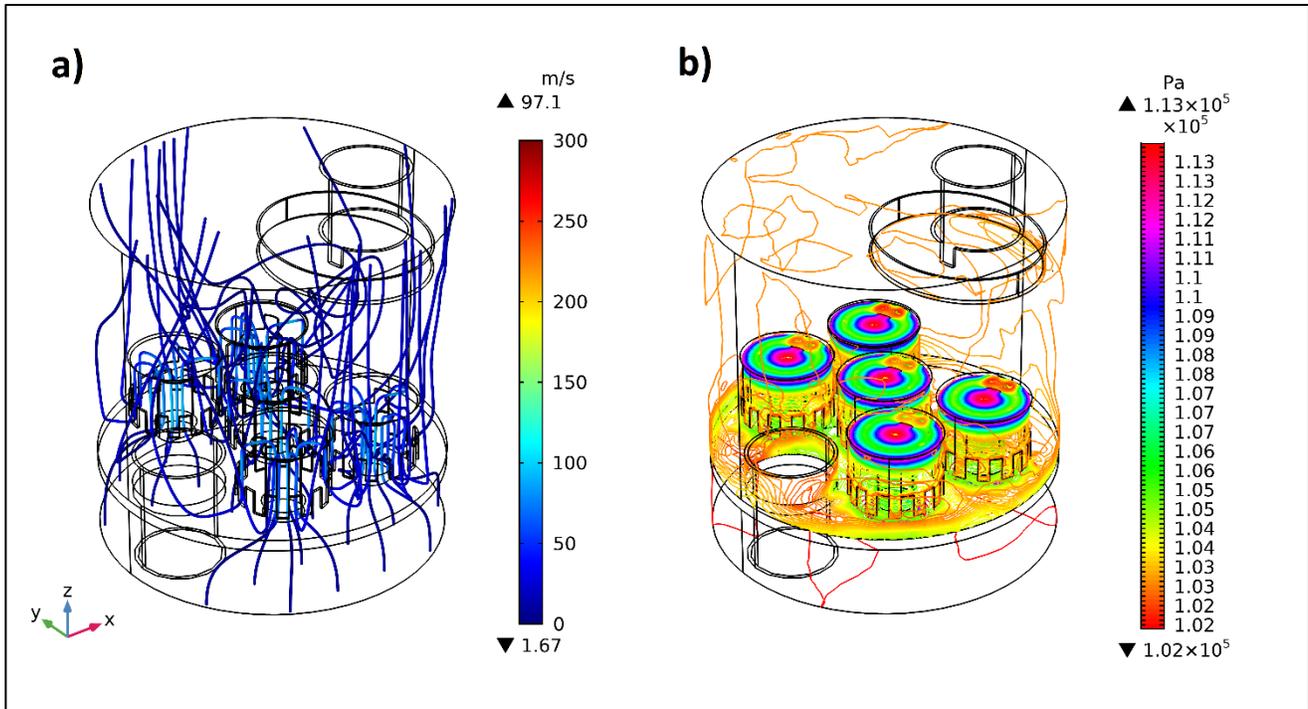


Figura 4.15 – a) Líneas de corriente en el modelo de plato de tapas de burbuja ranurada con velocidad de entrada a 5 m/s. b) Líneas de contorno de la presión en el modelo de plato con tapas de burbuja ranurada con velocidad de entrada a 5 m/s.

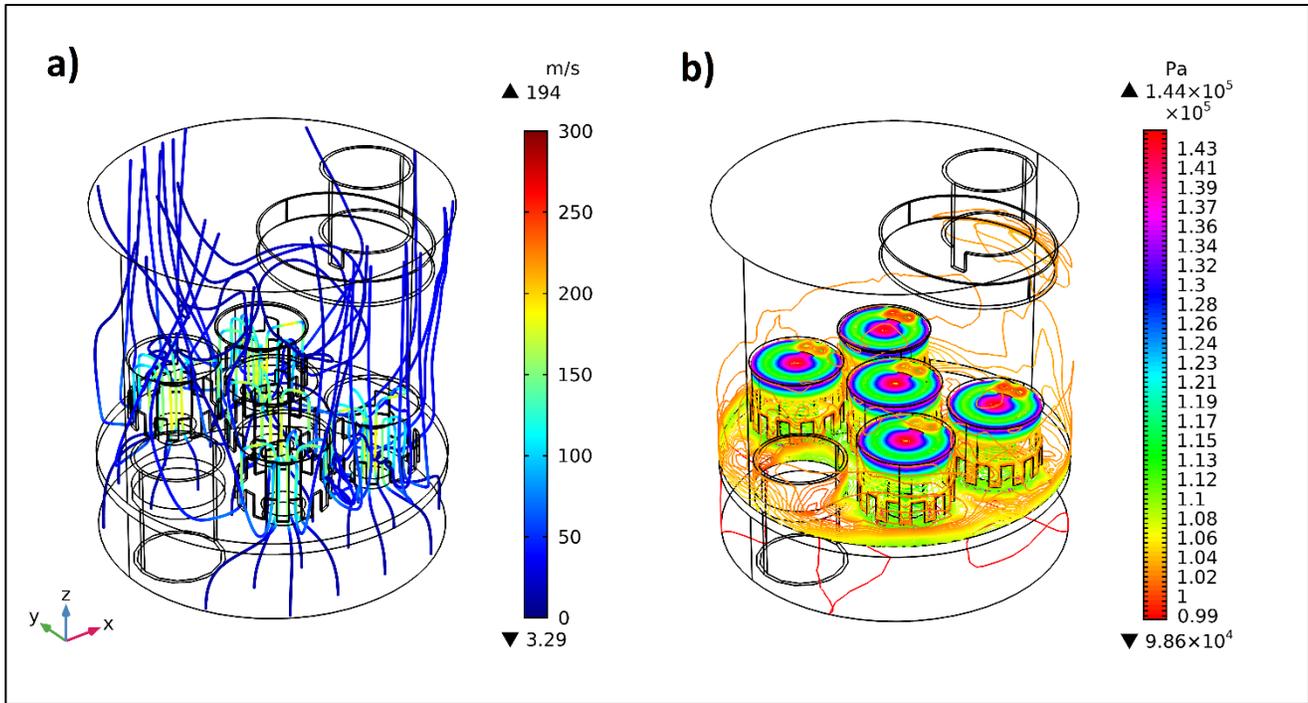


Figura 4.16 – a) Líneas de corriente en el modelo de plato de tapas de burbuja ranurada con velocidad de entrada a 10 m/s. b) Líneas de contorno de la presión en el modelo de plato con tapas de burbuja ranurada con velocidad de entrada a 10 m/s.

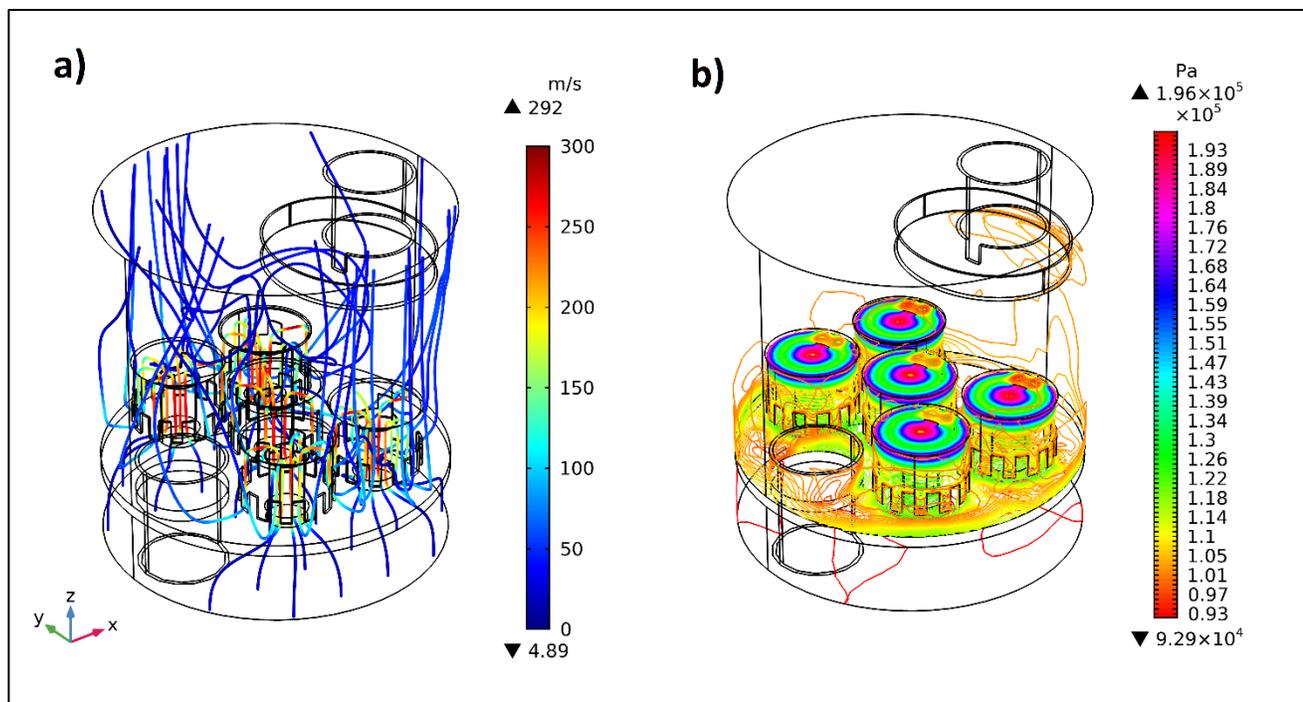


Figura 4.17 – a) Líneas de corriente en el modelo de plato de tapas de burbuja ranurada con velocidad de entrada a 15 m/s. b) Líneas de contorno de la presión en el modelo de plato con tapas de burbuja ranurada con velocidad de entrada a 15 m/s.

4.1.6 Simulación acoplada de transferencia de masa y energía.

La tercera etapa de la investigación estudia la transferencia de masa y la transferencia de energía térmica, en esta etapa se estudiaron 3 geometrías diferentes, la primera geometría revisa una sola tapa de burbuja, el segundo modelo es un plato con 5 tapas de burbuja cada uno y el tercer modelo es un arreglo de dos platos, las tapas se encuentran instaladas en un plato de 14.5 cm de diámetro, el flujo de vapor atraviesa las geometrías de tapa de burbuja ranurada y lisa. El modelo de un plato tiene 15 cm de altura, el modelo de dos platos mide 60 cm, estas dimensiones dan el espacio suficiente para estudiar el desarrollo del flujo de etanol dentro de la comuna y los cambios de dirección que se generan cuando entran en el segundo plato. Los modelos de transferencia de calor para fluidos y flujo turbulento se emplearon en esta etapa, los cuales se acoplaron a través de la fuerza de cuerpo gravitacional.

Los modelos de las tapas lisas y ranuradas en esta etapa cuentan con las interfaces de flujo no isotérmico y transferencia de calor conjugada que combinan la ecuación de calor con flujo

laminar o flujo turbulento y utilizan un modelo de dominio de transferencia de calor en fluidos o transferencia de calor en sólidos. La ventaja de utilizar las interfaces multifísicas es que los acoplamientos predefinidos están disponibles en ambas direcciones. En particular, las interfaces físicas utilizan la misma definición de densidad, que por tanto puede ser una función tanto de la presión como de la temperatura. La resolución de este sistema acoplado de ecuaciones generalmente requiere una estabilización numérica que tenga en cuenta los acoplamientos, que también establecen las interfaces multifísicas predefinidas. Debido al alto costo computacional esta interfaz no se aplica a los modelos de platos y las simulaciones son ejecutadas en el clúster agave.

Para el uso del clúster agave es necesario conocer los comandos de acuerdo al sistema operativo del clúster, los comandos del clúster son adicionales a los comandos y configuraciones propias de los módulos de código numérico de elemento finito. En primer lugar se implementan los modelos en una computadora convencional, posteriormente los archivos se transfieren preconfigurados a la memoria del clúster y se ejecutan por medio de líneas de comandos de manera individual, también es posible ejecutarlos de manera remota desde un archivo script, el uso de un archivo script permite guardar los resultados de la simulación en un archivo adicional con un nombre predefinido por el usuario, también es posible guardar los mensajes que genera el simulador durante el computo.

La capacidad del clúster permite simular elementos como platos dobles o secciones completas de la columna, usar múltiples modelos del simulador tiene un alto costo computacional, por lo tanto, el clúster es una herramienta ideal para estas simulaciones complejas. En la Figura 4.18 (a) se aprecia las líneas de flujo de un arreglo con dos platos con tapas de burbujas de 0.039 m de diámetro, en la figura 4.18 (b) se aprecia un corte xz de la presión del modelo y en la Figura 4.18 (c) se muestra un corte xz de la temperatura del modelo acoplado al módulo del flujo turbulento.

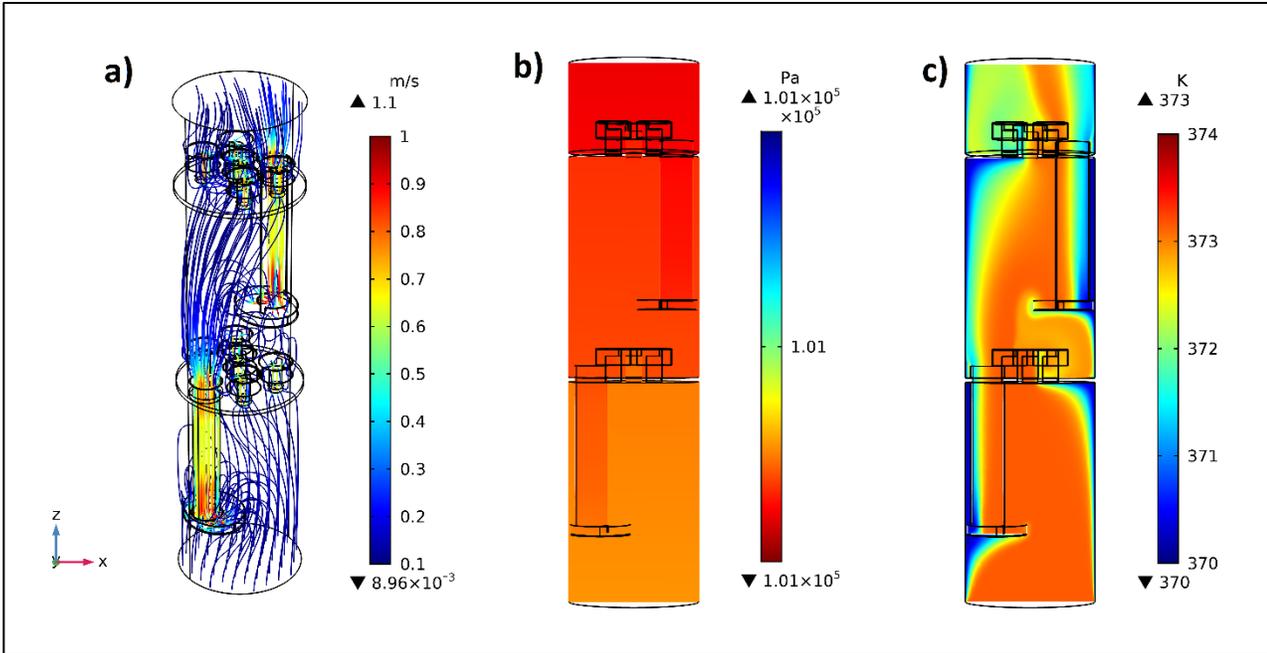


Figura 4.18 - Vistas para un arreglo de plato doble ranurado. a) Líneas de corriente, b) Campo de presión en el plano xz. C) Campo de temperatura en el plano xy.

A continuación, se analizan las simulaciones para un plato con una sola tapa de burbuja ranurada y lisa considerando la dinámica de fluidos acoplada al transporte de calor y masa. Los parámetros establecidos en los modelos de tapa de burbuja se definen de la siguiente manera: La temperatura de la pared del modelo se ajustó a la temperatura de 370.15 K, la temperatura en la frontera de entrada en 373.15 K, la condición de entrada del fluido se define en 0.0004386 kg/s de vapor de etanol, para la frontera de salida del fluido se define con 101325 Pa de presión. Los modelos de tapa de burbuja se simularon con el valor de la viscosidad dinámica real del vapor de etanol. En la Figura 4.19 se observan las líneas de corriente en tapas de burbuja lisa y con ranuras, en el modelo liso la velocidad mínima es de 0.02 m/s mientras que en el modelo ranurado apenas llega a 0.00662 m/s. En la tabla 4.5 se reportan los resultados obtenidos de las simulaciones acopladas de masa y energía la caída de presión entre ambos modelos es de 0.22 Pa, el efecto de las ranuras se puede observar en la Figura 4.20, donde se aprecia las ondulaciones sobre el contorno de presión del modelo. El salto térmico del vapor de etanol está reportado en la Tabla 4.5 y se pueden observar las líneas de contorno de la temperatura en la Figura 4.21, la tapa de burbujas con ranuras distribuye de manera más uniforme el fluido, este fenómeno se refleja en la temperatura del

etanol después de atravesar la tapa de burbujas, en la Figura 4.22 se observan cortes del plano xy donde se aprecia que la zona central del fluido alcanza 272.8 K de manera más uniforme en la tapa con ranuras.

Tabla 4.5 – Comportamiento hidrodinámico de tapas de burbuja con flujo no isotérmico.

Tipo de tapa	Caída de presión	Salto térmico
Lisa	2.78 Pa	0.64 K
Ranurada	3.0 Pa	0.65 K

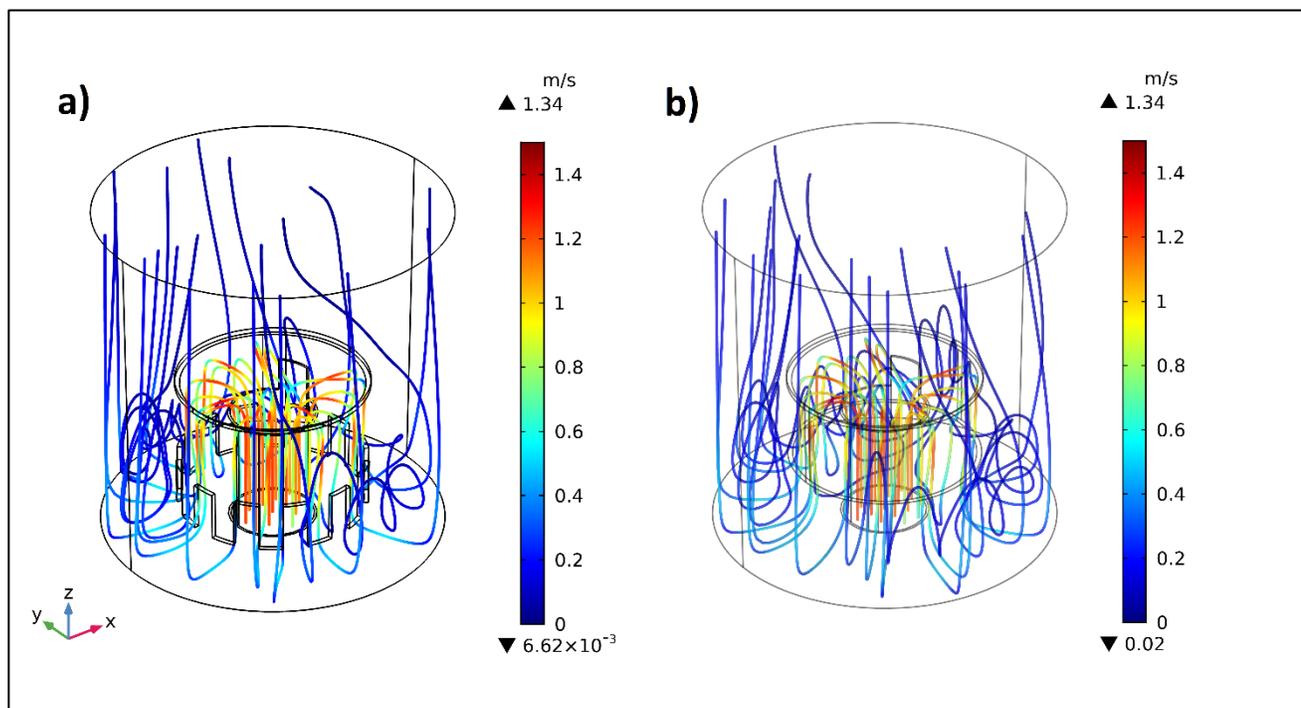


Figura 4.19 - a) Líneas de corriente en una tapa de burbuja ranurada. b) Línea de corriente en una tapa de burbuja lisa.

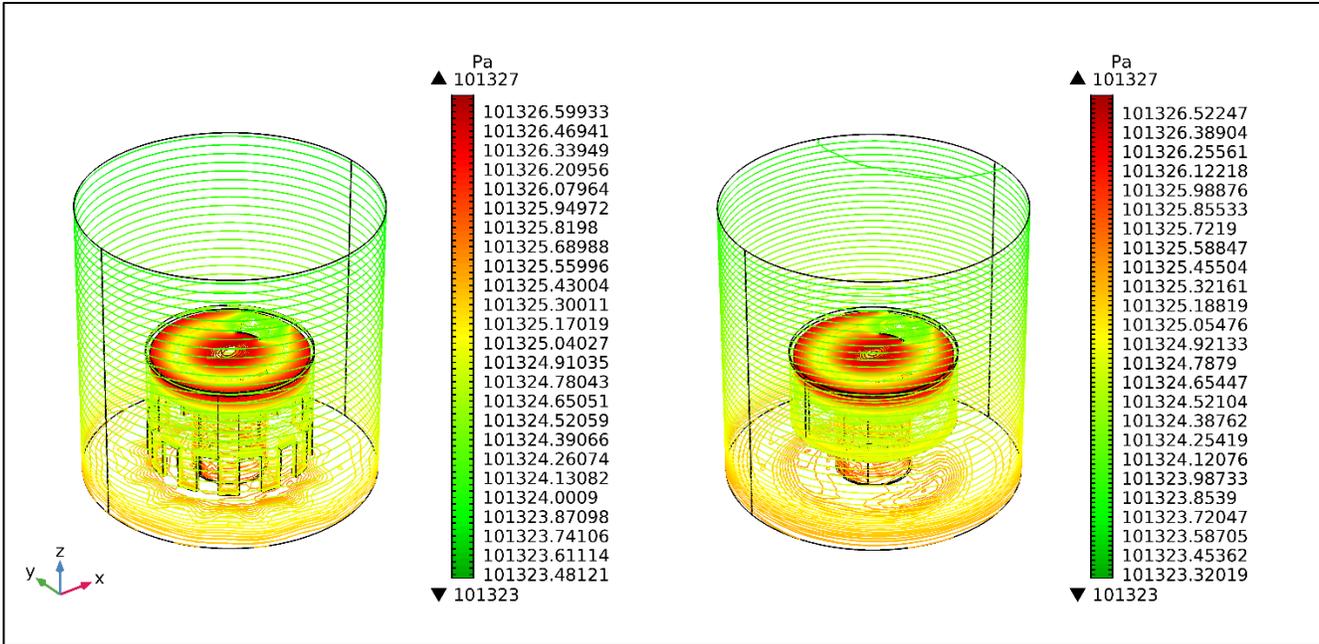


Figura 4.20 - a) Líneas de contorno de la presión en una tapa de burbuja ranurada. b) Líneas de contorno de la presión en una tapa de burbuja lisa.

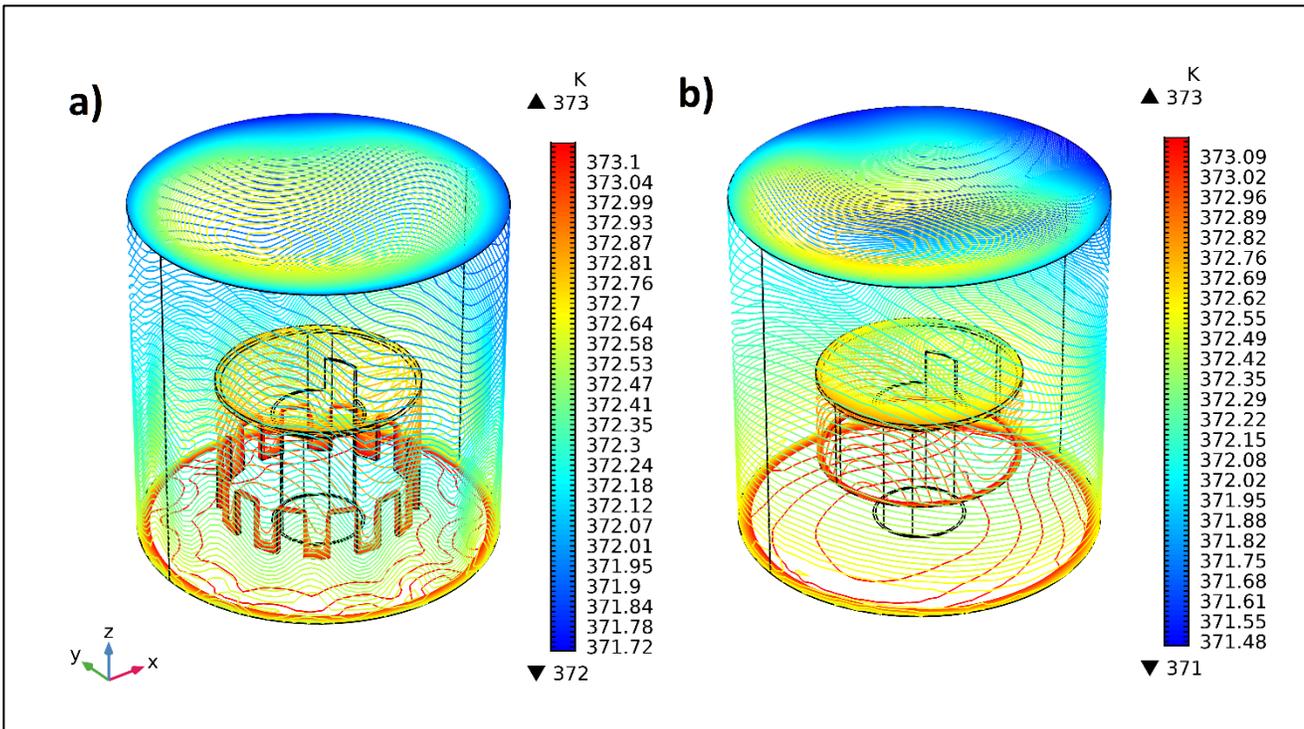


Figura 4.21 - a) Líneas de contorno de la temperatura en una tapa de burbuja ranurada. b) Líneas de contorno de la temperatura en una tapa de burbuja lisa.

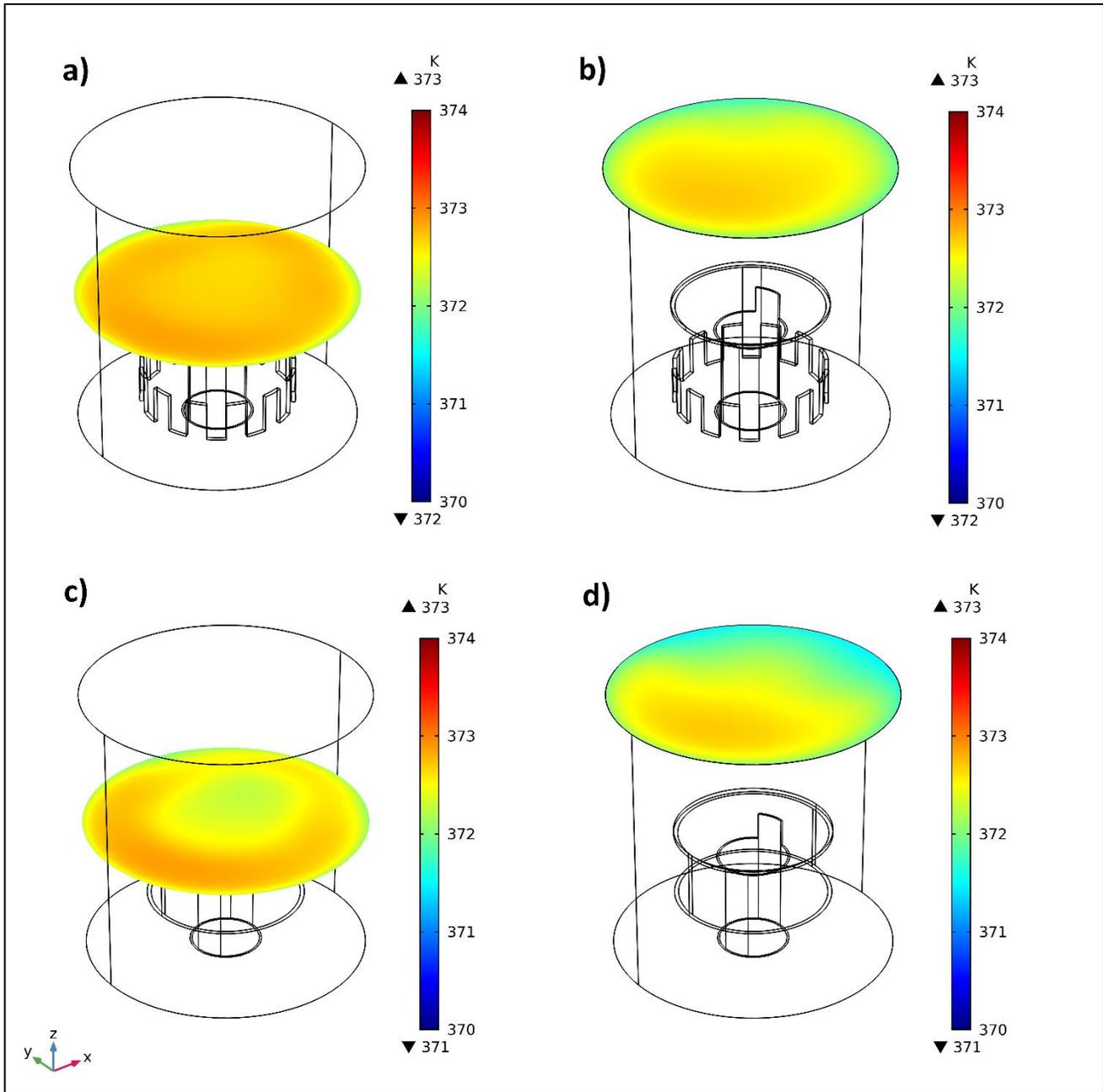


Figura 4.22 - a) Líneas temperatura en una tapa de burbuja ranurada. b) Líneas temperatura en una tapa de burbuja lisa.

Para el modelo de plato con tapas ranuradas y lisas se definen las fronteras para ambos modelos de la siguiente manera: La temperatura de la pared del modelo se ajustó a 370.15 K, la temperatura en la frontera de entrada en 373.15 K, la condición de entrada del fluido se define en 0.00219383 kg/s de vapor de etanol, para la frontera de salida del fluido se define

con 101325 Pa de presión. Los modelos de un plato con múltiples tapas de burbuja se simularon con el valor de la viscosidad dinámica incrementada cien veces para reducir el costo computacional debido a la complejidad de los modelos. En la Figura 4.23 se observan las líneas de corriente en plato de tapas de burbuja lisa y con ranuras, en el plato con tapas de burbujas lisas la velocidad mínima es de 0.02 m/s mientras que en el plato con tapas ranuradas apenas llega a 0.01 m/s. En la tabla 4.6 se reportan los resultados obtenidos de las simulaciones acopladas de masa y energía, la caída de presión entre de ambos modelos es de 1.0 Pa, el efecto de las ranuras se puede observar en la Figura 4.24, donde se aprecia las ondulaciones sobre el contorno de presión del modelo. Se observan las líneas de contorno de la temperatura en la Figura 4.25, en el modelo con tapas lisas la caída de temperatura es menor, la temperatura máxima en la salida de los modelos es de 373.09 K para el modelo ranurado y en el modelo liso de 373.2 K, se aprecia que la distribución del fluido caliente en la salida del plato se encuentra en un área menor en el arreglo de tapas lisas.

Tabla 4.6 – Comportamiento hidrodinámico de plato con tapas de burbuja con transferencia de masa y energía.

Tipo de plato	Caída de presión
Liso	19.00 Pa
Ranurado	20.00 Pa

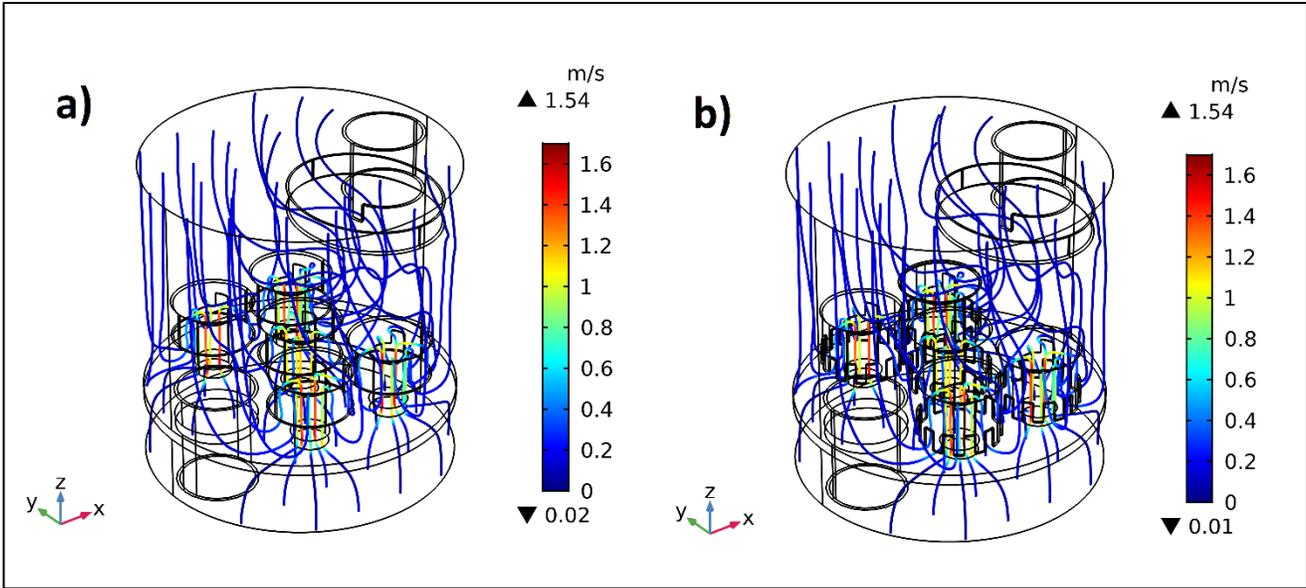


Figura 4.23 - a) Líneas de corriente en un plato de tapas de burbuja lisa. b) Línea de corriente en un plato de tapas de burbuja ranurada

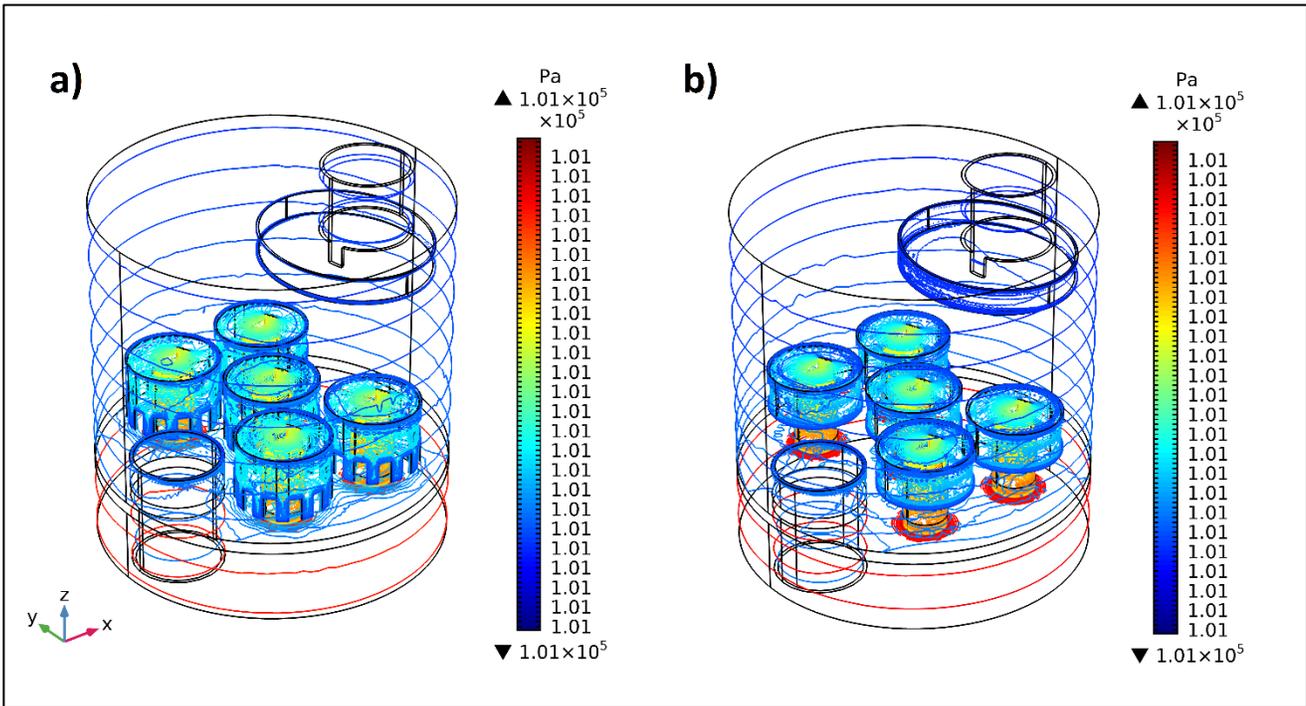


Figura 4.24 - a) Líneas de contorno de la presión en el modelo de plato con tapas de burbuja ranurada. b) Líneas de contorno de la presión en el modelo de plato con tapas de burbuja lisa.

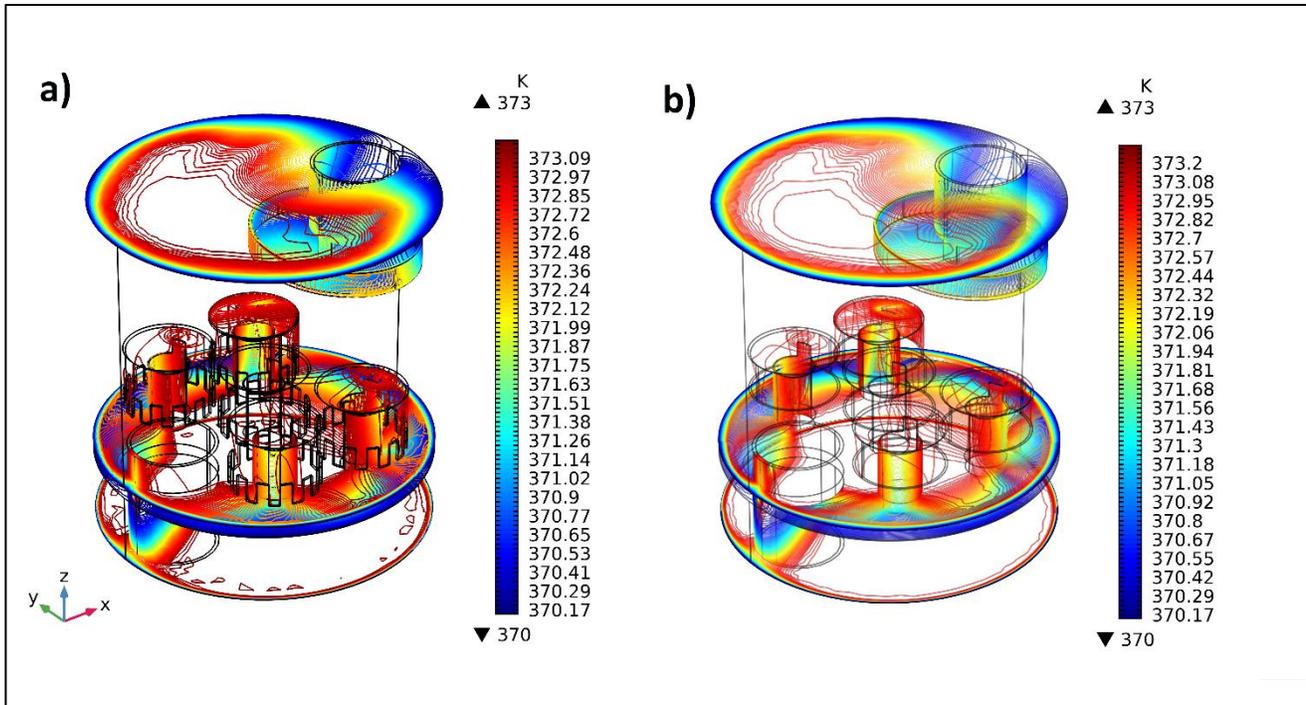


Figura 4.25 - a) Líneas de contorno de la temperatura en el modelo de plato con tapas de burbuja ranurada. b) Líneas de contorno de la temperatura en el modelo de plato con tapas de burbuja lisa.

Para los modelos de platos doble se definen las fronteras con valores similares a los modelos de un plato, los modelos de dos platos con flujo turbulento y transferencia de calor en fluidos tienen el mayor costo computacional de todo el estudio, en la Tabla 4.7 se muestra la información sobre los tiempos de cómputo y la memoria empleada para cada simulación, el tiempo de ejecución puede ser reducido al ejecutar cálculos adicionales sobre modelos previamente procesados.

Tabla 4.7 – Costo computacional de la simulación de platos dobles con tapas lisas y ranuradas.

Modelo	Numero de núcleos	Tiempo de ejecución	Memoria física	Memoria virtual
Liso	16	15:21:12	47.13 GB	70.13 GB
Ranurado	20	5:59:24	46.95 GB	69.16 GB

En la Figura 4.26 se observan las líneas de corriente en el arreglo de dos platos con tapas de burbuja lisa y con ranuradas, en ambos modelos la velocidad del fluido en el plato inferior y el plato superior se mantiene estable, la velocidad máxima de 1.15 m/s se alcanza en el modelo con tapas ranuradas. En la Figura 1.27 se aprecian las líneas de corriente desde la perspectiva del plano zx, las líneas de flujo muestran cómo se desvía el flujo a través de las bajantes de cada plato, ese efecto provoca que el arreglo desarrolle una velocidad máxima menor que el arreglo de un solo plato. En la tabla 4.8 se reportan los resultados obtenidos de las simulaciones acopladas de masa y energía, la caída de presión entre ambos modelos es de 1.06 Pa, el efecto del bajante instalado en cada plato se puede observar en la Figura 4.28, donde se aprecia el incremento de perturbaciones en la entrada del bajante el cual tiene una charola en posición horizontal la cual en condiciones de flujo multifase hace la función de un sello. Se observan las líneas de contorno de la temperatura en la Figura 4.29. En el arreglo de platos dobles la caída de temperatura entre ambos modelos es de apenas 0.02 K y la distribución del fluido caliente en la salida del modelo se desarrolla en un área similar en ambos modelos.

Tabla 4.8 – Comportamiento hidrodinámico de dos platos dobles con tapas de burbuja con transferencia de masa y energía.

Tipo de platos	Caída de presión
Lisos	28.90 Pa
Ranurados	29.96 Pa

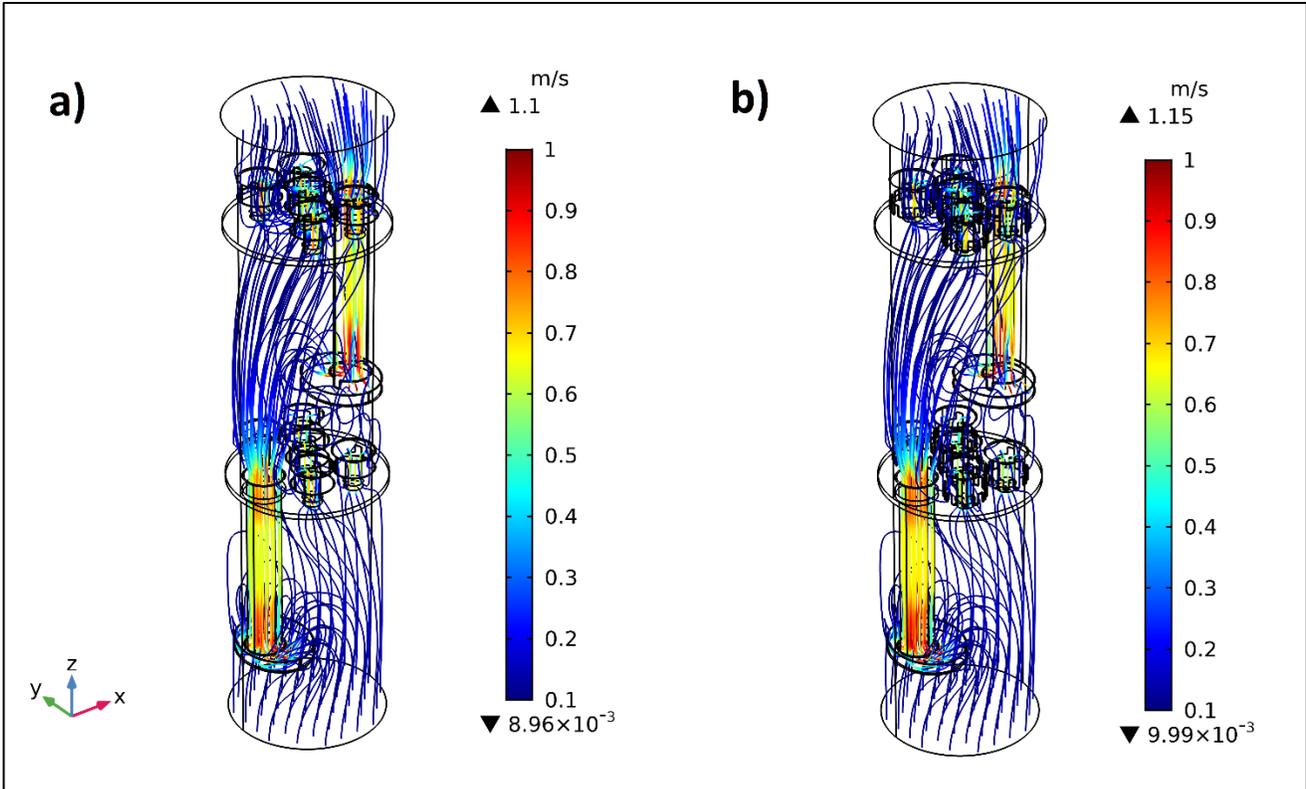


Figura 4.26 - a) Líneas de corriente en un plato doble de tapas de burbuja lisa. b) Línea de corriente en un plato doble de tapas de burbuja ranurada.

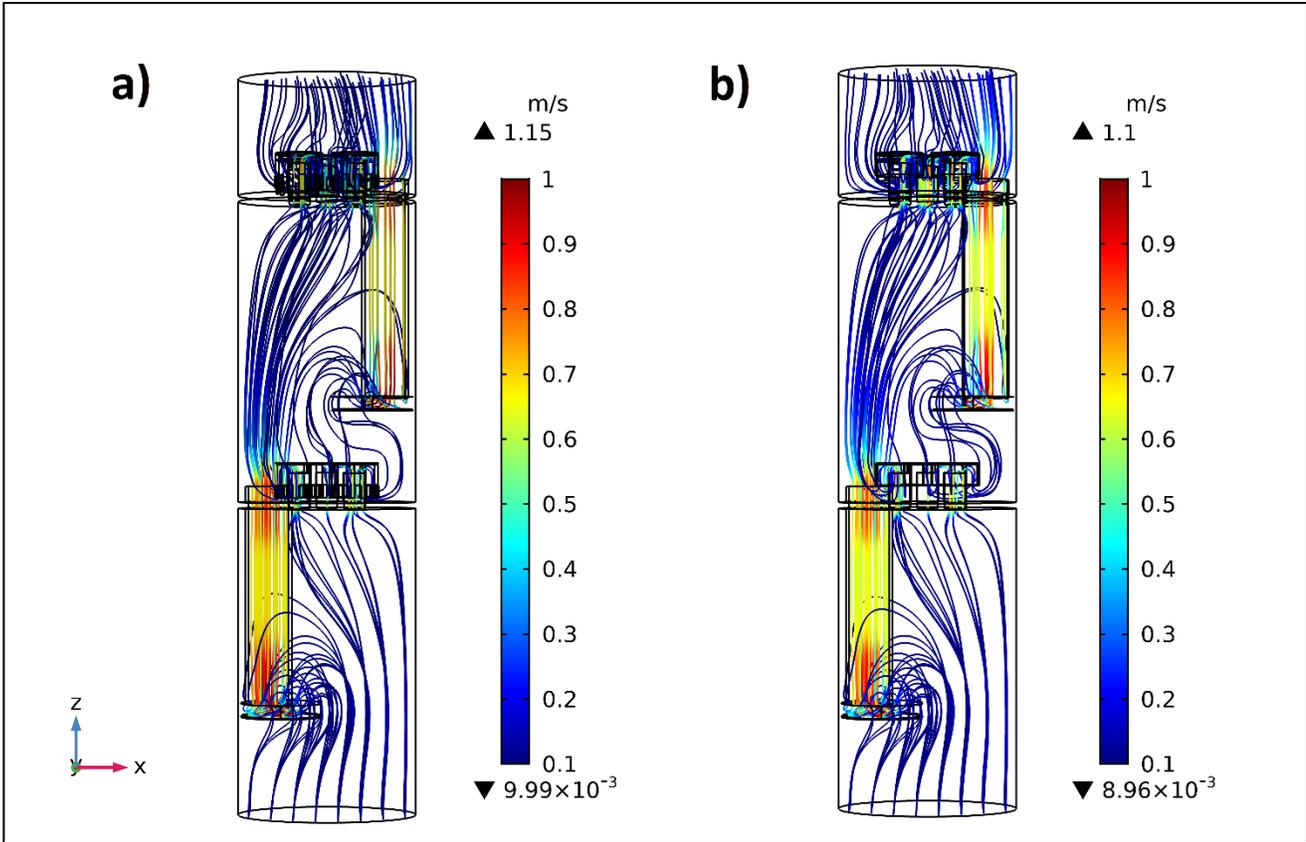


Figura 4.27 - a) Vista lateral de las líneas de corriente en un plato doble de tapas de burbuja lisa. b) Vista lateral de las líneas de corriente en un plato doble de tapas de burbuja ranurada.

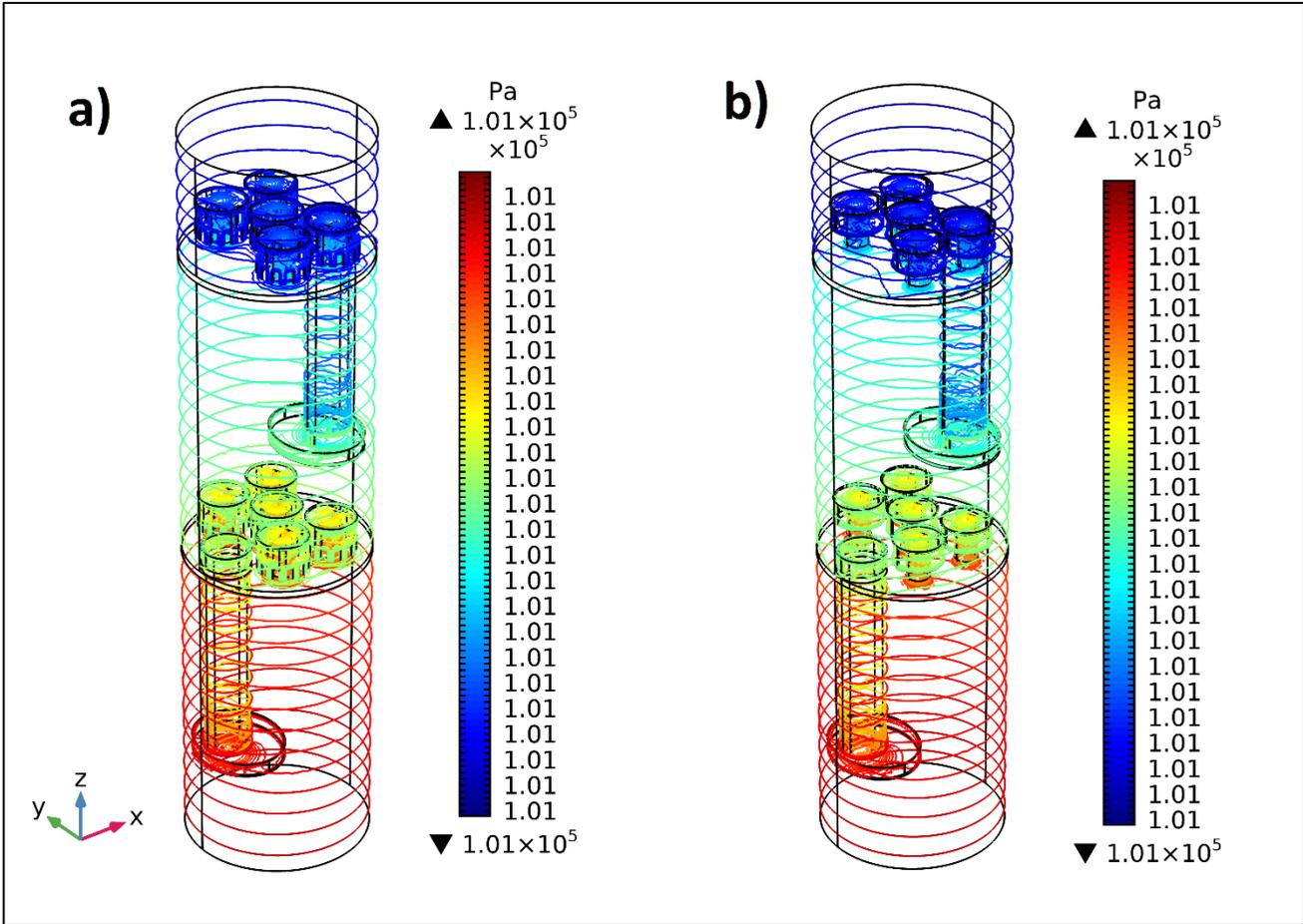


Figura 4.28 - a) Líneas de contorno de la presión en el modelo de plato doble con tapas de burbuja ranurada. b) Líneas de contorno de la presión en el modelo de plato doble con tapas de burbuja lisa.

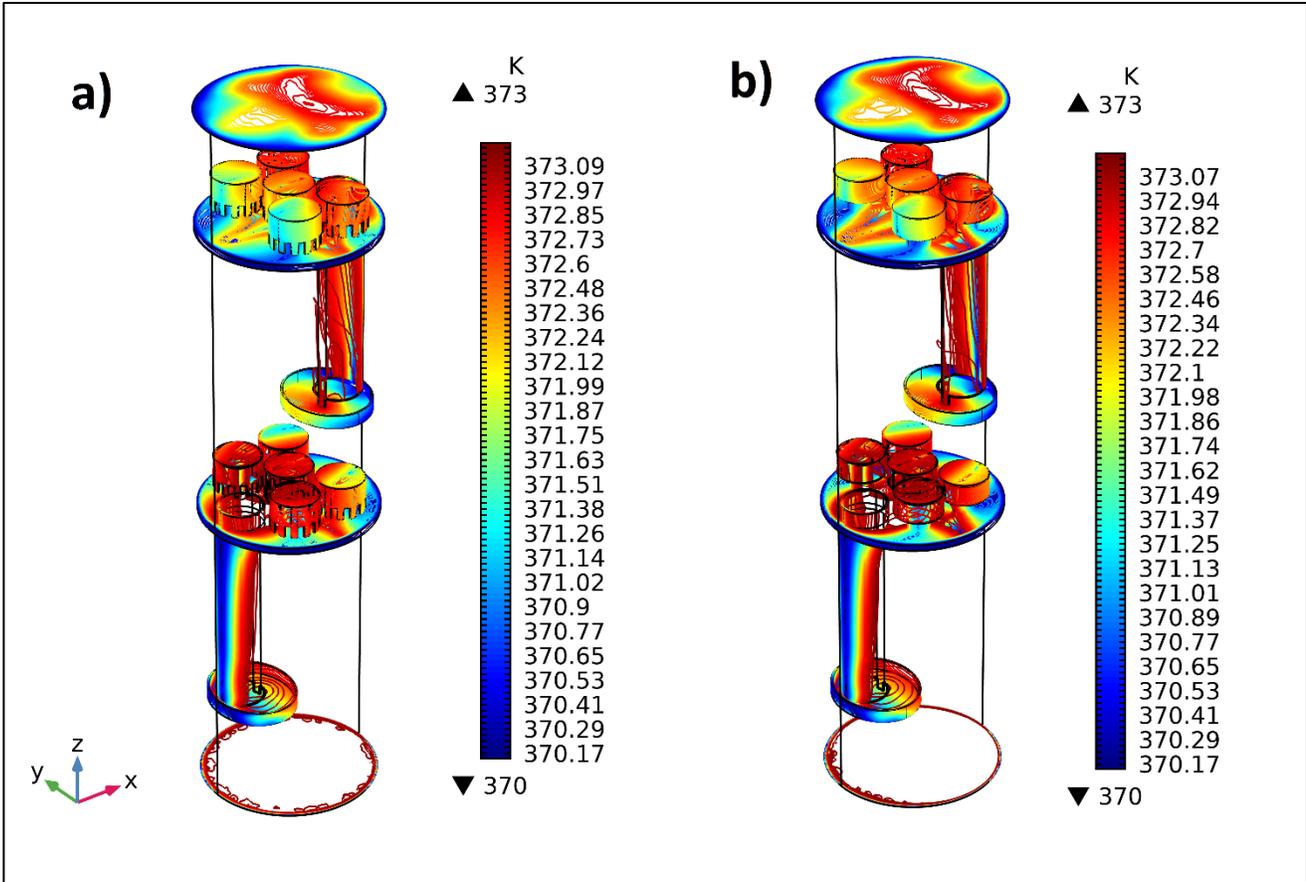


Figura 4.29 - a) Líneas de contorno de la temperatura en el modelo de plato doble con tapas de burbuja ranurada. b) Líneas de contorno de la temperatura en el modelo de plato doble con tapas de burbuja lisa.

4.1.7 Simulación multifásica 2D, flujo multifase, transferencia de masa y energía.

Debido al costo computacional también se realizaron simulaciones en 2D, estos modelos 2D permitieron acoplar y evaluar múltiples fenómenos en menor tiempo que los empleados con modelos 3D, sin embargo, los modelos 2D no permiten evaluar la diferencia del comportamiento del flujo ocasionado por ranuras en tapas de burbujas, ya que no es posible caracterizar espacialmente las tres componentes de velocidad del fluido ni sus tres coordenadas de posición. Los beneficios del modelo 2D es sin duda la reducción de tiempo de cómputo y la factibilidad de ser evaluados con equipo de cómputo sin características especiales. El modelo 2D permite evaluar elementos como los platos perforados o las tapas de burbuja sin ranuras, las tapas con ranuras no se pueden evaluar en simulaciones 2D.

Las simulaciones 2D evalúan la transferencia de masa y energía en tapas de burbujas sin ranuras, en la simulación se uso el modelo de flujo multifase en régimen turbulento, transferencia de calor en fluidos y el modelo de química para el transporte de sustancias concentradas. El campo de velocidad generado por las ecuaciones de CFD se utilizó en el módulo de transferencia de calor en fluidos para tomar en cuenta el fenómeno de transferencia de calor por convección. Las simulaciones 2D que se elaboraron para la tapa de burbujas permiten tener datos adicionales como la energía interna total del fluido o la fracción másica de cada uno de los componentes, los fluidos de trabajo son etanol como fase dispersa y agua como fase continua, es posible configurar el módulo para evaluar la energía necesaria para el cambio de fase, sin embargo, este fenómeno es mayor en el calderín y en los platos inclinados donde se evapora la mayor parte del etanol de mezcla. En la figura 4.30 se muestra el corte transversal empleado para simulación 2D respecto al modelo 3D, el cual consiste en una sección rectangular de 0.035 m de ancho por y 0.05 de alto. En la Figura 4.31 se aprecia la fracción en volumen de la fase dispersa, observándose como el etanol entra a la tapa de burbujas a la velocidad de 0.5 m/s con una concentración de 0.5, sin embargo, al salir de la tapa de burbujas el etanol que está en los alrededores y en contacto con la tapa comienza a tener una mayor concentración alcanzando su máximo valor de 0.9 arriba de la tapa, lo anterior se debe a dos efectos, el primero es el efecto de la transferencia de calor por convección entre la superficie de la tapa de burbujas y el fluido y el segundo es el efecto de la baja presión que hay en la parte lateral y superior exterior de la tapa de burbujas como se muestra en la figura 4.32, lo anterior concuerda con lo reportado por Yang (2015) [17] en el sentido de que las zonas de menor presión contribuyen al intercambio de masa entre fases. Debido a lo anterior, se puede decir que, aunque el transporte de masa se hizo en una geometría 2D, el modelo es capaz de reproducir la transferencia de masa y energía en la purificación de una planta piloto de biocombustible. Las simulaciones en los modelos 2D se realizaron con velocidad de entrada de 0.5 m/s, 1 m/s y 1.5 m/s, las 3 simulaciones se configuraron con las mismas condiciones de presión y temperatura en las paredes del modelo, la frontera de salida en la parte superior tiene 103000 Pa condicionada con la concentración de la fase dispersa en 0.9, la salida de fluido de la parte inferior del modelo está definido como salida de fluido sin flujo de la fase dispersa con presión igual a la

frontera superior, la temperatura de la mezcla en la frontera de entrada es de 374 K y la temperatura de la pared del modelo de 350 K.

De acuerdo con resultados obtenidos en las simulaciones de la etapa anterior la velocidad de operación de las tapas de burbuja varía entre 1.0 m/s y 1.5 m/s donde se ajustó el flujo de alimentación al flujo masico reportados por trabajos previos durante la operación y calibración de los equipos. Los resultados de las simulaciones en 2D permiten observar el perfil de la distribución de la fase dispersa donde se observa el efecto de la velocidad de entrada sobre el área de difusión de la fase, de acuerdo con los resultados obtenidos los cambios de presión y velocidad se desarrollan de manera temprana en la entrada de la tapa, ver Figuras 4.32, 4.33 y 4.34 y el cambio de temperatura ocurre en el borde de la tapa de burbuja sin entrar en contacto con la pared del modelo, por otra parte el área de difusión de la concentración de los compuesto presenta una variación significativa que responde a la velocidad de entrada, ver Figura 4.35. En las 3 simulaciones el área de difusión de la fase dispersa inicia en la salida de la tapa de burbuja de manera paralela al fondo del modelo, en el régimen de velocidad más bajo el área de dispersión se distribuye a lo largo de las paredes de la tapa de burbuja y se desprende del cuerpo de la tapa aproximándose al límite superior del modelo, en el modelo con la velocidad de 1.5 m/s se aprecia un remanente de fase dispersa de 0.7 en la parte superior de la tapa sin desprenderse del cuerpo de la misma. Finalmente, en el modelo simulado con velocidad de 1 m/s el área de difusión es menor, no se aprecian desprendimientos de fluido con concentración menor al 85 %. El mayor desprendimiento de etanol se alcanza a una velocidad de 1m/s, incrementos mayores de velocidad no aumentan sustancialmente la velocidad de purificación de etanol.

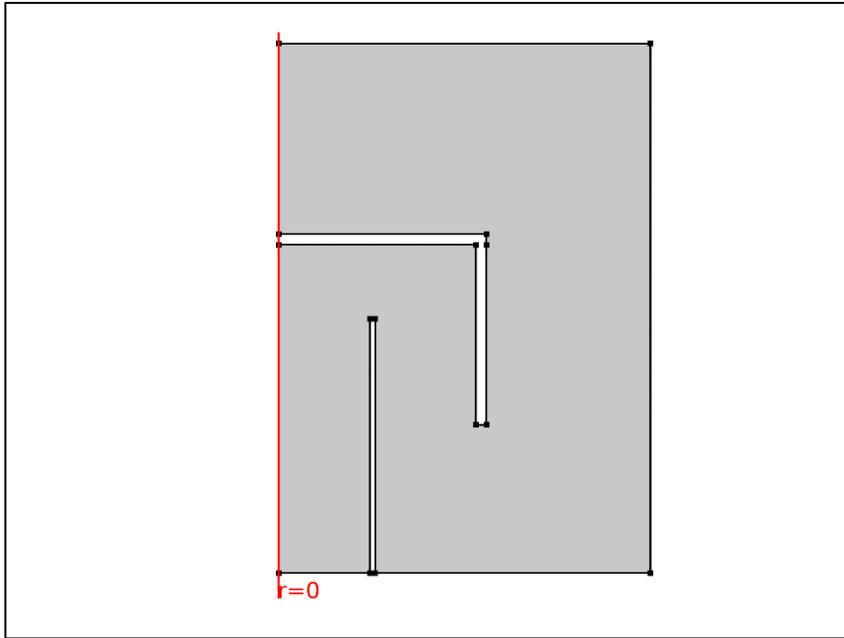


Figura 4.30 – Geometría 2D de una tapa de burbuja sin ranuras simétrica al eje r .

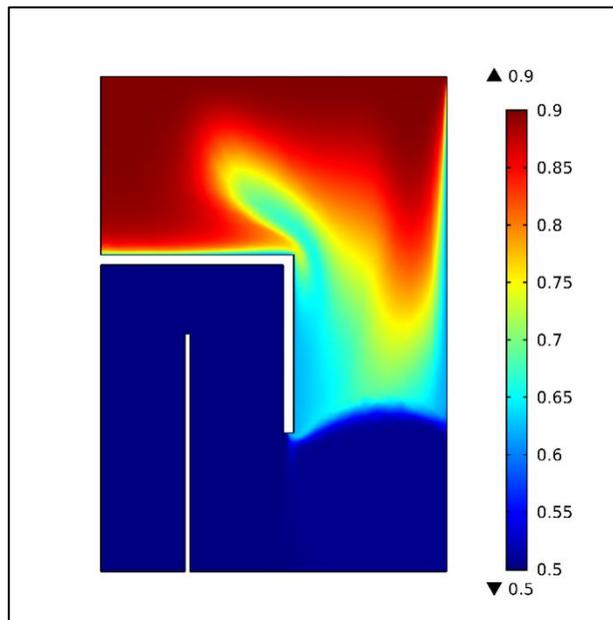


Figura 4.31 – Vista de la fracción de masa correspondiente a la fase dispersa.

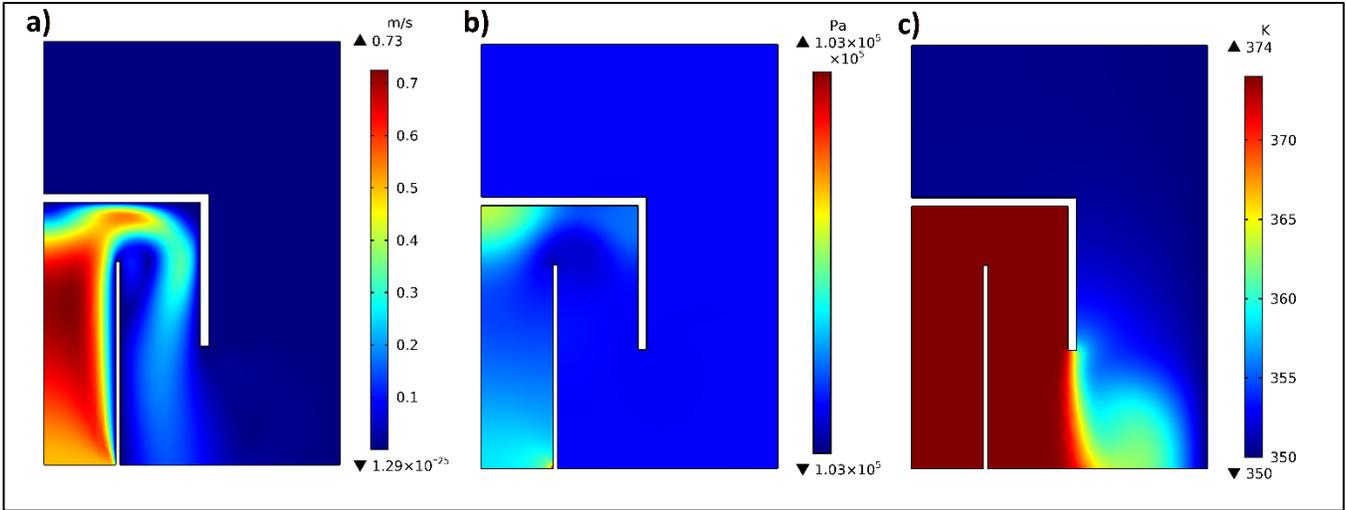


Figura 4.32 – Perfiles de a) velocidad, b) presión y c) temperatura del modelo con velocidad de alimentación de 0.5 m/s.

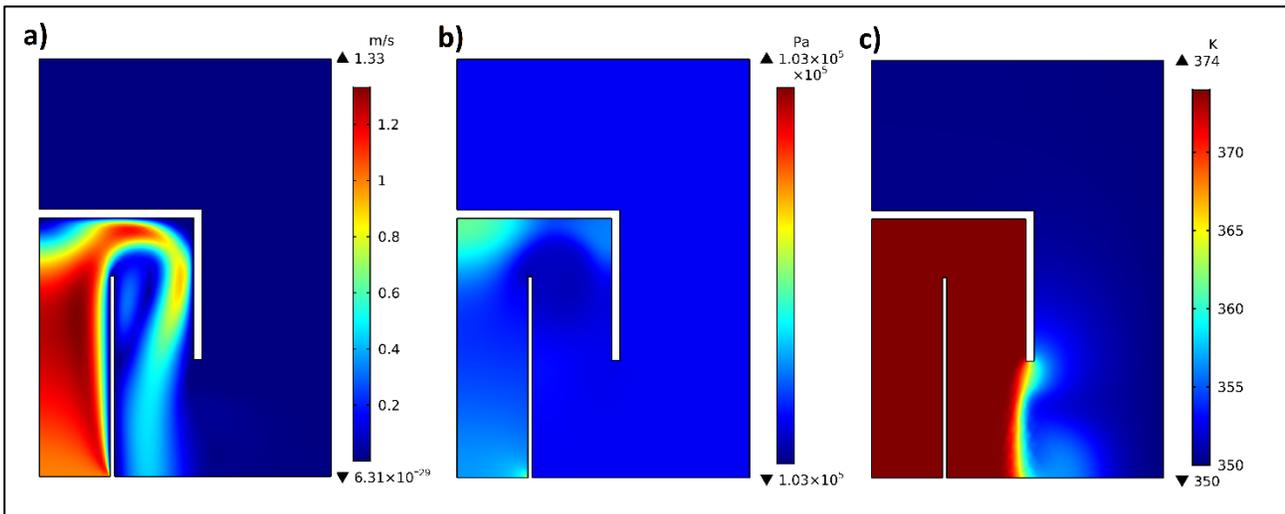


Figura 4.33 – Perfiles de a) velocidad, b) presión y c) temperatura del modelo con velocidad de alimentación de 1.0 m/s.

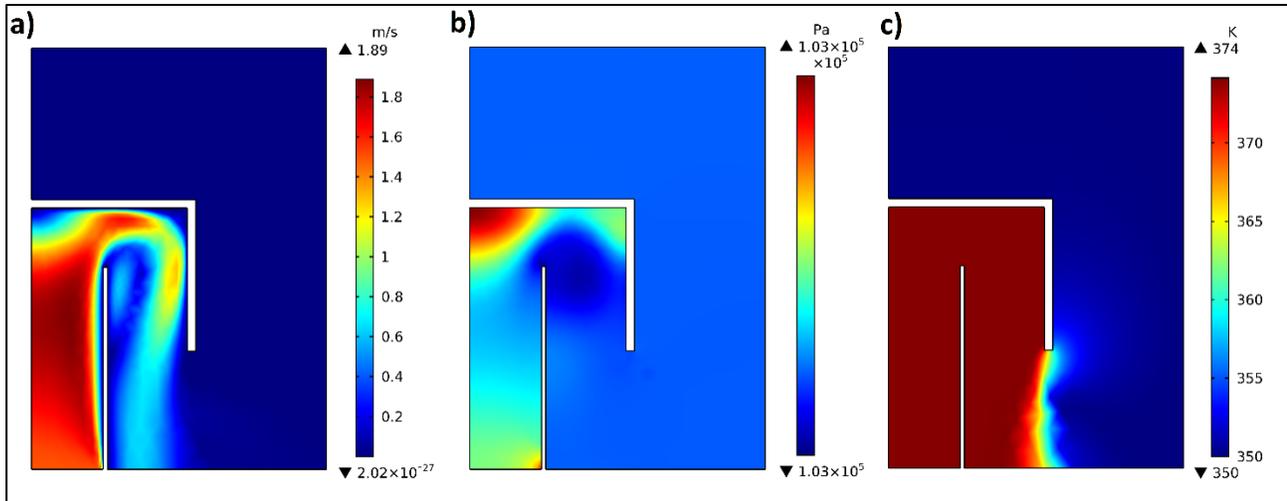


Figura 4.34 – Perfiles de a) velocidad, b) presión y c) temperatura del modelo con velocidad de alimentación de 1.5 m/s.

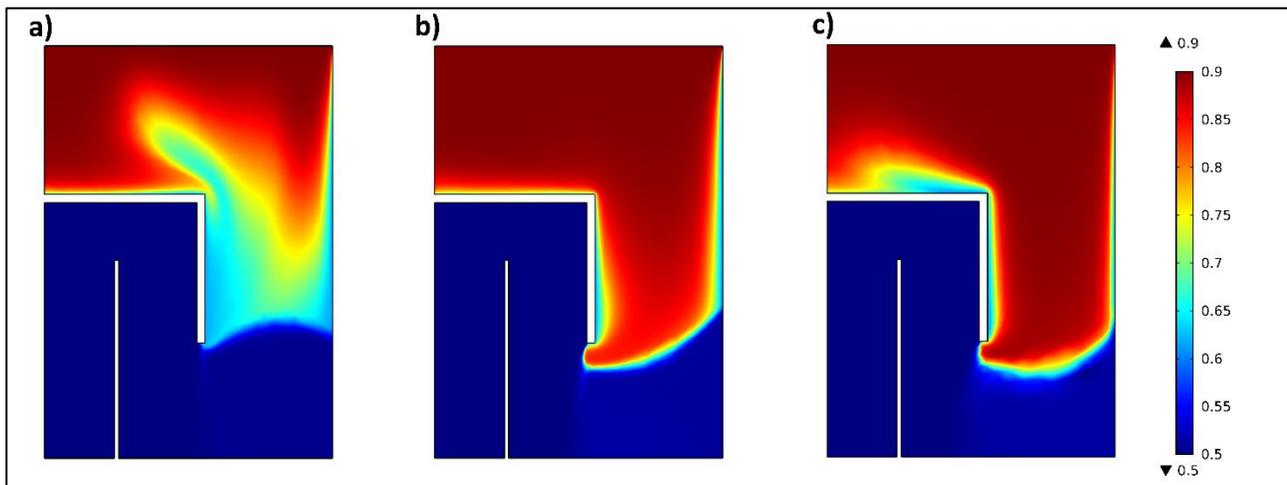


Figura 4.35 – Perfiles de fracción de fase dispersa a) velocidad de alimentación de 0.5 m/s, b) velocidad de alimentación de 1.0 m/s c) velocidad de alimentación de 1.5 m/s

CONCLUSIONES

En la presente tesis se modeló y simuló el movimiento del flujo a través de los componentes de la columna de destilación de la planta de biocombustibles localizada en el TecNM-ITVer. En el modelo se definieron condiciones reales de la columna de destilación. Se realizaron diferentes simulaciones tridimensionales en régimen turbulento en geometrías complejas tales como las que se presenta en la columna de destilación real. Adicionalmente, debido al costo computacional, se realizaron simulaciones bidimensionales en dos fases considerando la fase dispersa y continua. La validación del código numérico se presentó en la sección 3.2.5, mediante la comparación con el resultado de otro investigador.

De acuerdo a los resultados, la caída de presión es mayor en el modelo de tapas de burbuja con ranuras, la caída de presión aumenta de manera proporcional al incremento de velocidad del fluido, las simulaciones permiten predecir el comportamiento hidrodinámico de las geometrías estudiadas y facilitan las tareas de diseño. Las tapas con ranuras desarrollan mejor distribución de la energía en el fluido que las atraviesa, los estudios de la etapa 2 permiten observar que el arreglo de 2 platos disipa la energía en el fluido de manera similar en las tapas lisas y ranuradas.

Podemos concluir que las tapas con ranuras disipan el etanol de manera uniforme en una distancia menor, esto debido al cambio de dirección que producen las ranuras, Sin embargo, operar las tapas con ranuras se tiene mayor costo energético, debido a que la caída de presión es mayor en las tapas de burbuja ranuradas se recomienda operarlas con un régimen de velocidad bajo. Finalmente, el arreglo de platos dobles disipa de manera similar la energía térmica en los modelos de tapas con ranuras y lisas, esto debido a la distancia que recorre el fluido dentro de la columna entre los dos platos la cual permite que se mezcle antes de entra a las tapas de burbuja.

Por otra parte, la distribución de los compuestos químicos observados en la etapa 3 de la investigación en modelos 2D muestra que el área donde los compuestos químicos se separan responde principalmente al cambio de velocidad, la separación de los compuestos responde

en menor medida al cambio de temperatura y al incremento de la presión del fluido. Debido a que la caída de presión aumenta con la velocidad resulta de gran importancia determinar cuál es la velocidad óptima de operación para la purificación de etanol en la columna de destilación simulada, en este sentido las simulaciones con cambio de fase indicaron que una velocidad de 1 m/s es la velocidad óptima de operación, incrementos mayores no mejorarían la purificación de etanol y solo incrementarían la caída de presión. Por lo tanto, una velocidad de 1 m/s para la columna de destilación estudiada garantiza un consumo de energía eficiente y por consiguiente el cuidado del medio ambiente.

Finalmente, es recomendable realizar simulaciones de nuevas geometrías para tapas de burbujas que desarrollen condiciones de flujo específicos, siendo una de ellas simular el comportamiento de tapas de burbujas con ranuras que generan un flujo rotativo, también se deben realizar simulaciones 2D de los fenómenos en geometrías simples y en platos perforados, así como evaluar los modelos de manera individual para geometrías 3D, con el objetivo es reducir el tiempo de cómputo y aprovechar equipos comerciales.

ANEXO A

Elaboración del reporte escrito para publicar en el congreso SOMIM.

Se elaboró un artículo con los resultados obtenidos de las simulaciones del comportamiento hidrodinámico de vapor de etanol en tapas de burbujas con ranuras y sin ranuras.

El artículo se envió para ser revisado y publicado en el congreso SOMIM 2020 que se llevará a cabo del 21 al 23 de octubre en la universidad michoacana de San Nicolás de Hidalgo en Michoacán, México. El artículo fue enviado y confirmada la recepción del mismo el día 22 de mayo. Derivado de las revisiones del artículo se realizaron las modificaciones del mismo de acuerdo las indicaciones y finalmente el 2 de septiembre se emitió la carta de aceptación final para la publicación del artículo en las memorias del congreso antes mencionado. En la Figura A.1 se muestra la carta de confirmación enviada por el sistema del SOMIM, la caratula del articulo enviado para publicación en las memorias se muestra en la Figura A.2.

CONSEJO DIRECTIVO 2018-2020

DR. LEOPOLDO ADRIÁN GONZÁLEZ GONZÁLEZ
Presidente

DR. JOSÉ JAVIER CERVANTES CABELLO
Tesorero

M. EN C. EDGAR ISAAC RAMÍREZ DÍAZ
Secretario

DR. SIMÓN MARTÍNEZ MARTÍNEZ
Vicepresidente de Termodinámica

DR. ARTURO ABÚNDEZ PLIEGO
Vicepresidente de Mecánica Teórica

DR. ÁLVARO AYALA RUIZ
Vicepresidente de Diseño Mecánico

M. EN C. UBALDO EDUARDO MARQUEZ AMADOR
Vicepresidente de Manufactura y Materiales

DRA. LAURA CASTRO GÓMEZ
Vocal de educación

DR. CARLOS ARTURO REYES RUIZ
Vocal de Asuntos Estudiantiles

DR. CARLOS GABRIEL FIGUEROA ALCÁNTARA
Vocal Difusión

DR. ARTURO BARBA PINARRÓN
Vocal de Asuntos Internacionales

JOSE AGUSTIN MOYA MONTIEL

Presente.

A la vez de saludarlo sirva este medio para informar a usted que el Comité Evaluador del 26 Congreso Internacional Anual de la SOMIM ha decidido aceptar para su presentación y publicación el trabajo titulado:

SIMULACIÓN CFD DE LA HIDRODINÁMICA DEL VAPOR DE ETANOL EN UNA TAPA DE BURBUJA

Con clave de registro: A4_25

A nombre de la SOMIM lo felicito por haber enviado un trabajo digno de ser publicado en las memorias del 26 Congreso Internacional Anual de la SOMIM que se llevará a cabo los días 21 al 23 de octubre de 2020 en Formato Virtual.

Para poder registrar su artículo deberá seguir el procedimiento que se encuentra en el instructivo adjunto a la presente. Registrando el artículo y habiendo validado la información solicitada su trabajo será publicado en las memorias de este congreso.

En breve le enviaremos la información completa sobre la dinámica del congreso, y en semanas próximas al evento el Programa General con la fecha, hora y sitio de la presentación de su artículo.

Para cualquier duda que pudiera surgir nos ponemos a sus órdenes en la siguiente dirección de correo electrónico secretario@somim.org.mx

En espera de que en el futuro podamos seguir contando con su decidida participación, reciba un cordial saludo.

Atentamente,

México Cd. Mx., a 2 de septiembre del 2020


Dr. Leopoldo Adrián González González
PRESIDENTE DE LA SOMIM

Figura A.1 – Carta de aceptación final del artículo elaborado con los resultados de la evaluación del comportamiento hidrodinámico de vapor de etanol en tapas de burbujas.

Tema A4 Termofluidos: Análisis hidrodinámico de tapas de burbuja.

"Simulación CFD de la hidrodinámica del vapor de etanol en una tapa de burbuja"

Moya Montiel Jose Agustin, Ovando Chacon Guillermo, Gomez Rodriguez Javier, Rodriguez Leon Avelardo, Ovando Chacon Sandy.

Instituto Tecnológico de Veracruz, Av. Miguel Ángel de Quevedo #2779, Veracruz, CP. 91897, México.
José Agustin Moya Montiel. Dirección de correo electrónico: m19020017@veracruz.tecnm.mx

RESUMEN

Este trabajo estudia el comportamiento hidrodinámico del flujo de vapor de etanol a través de la tapa de burbuja dentro de una columna de destilación. El estudio se basa en simulaciones de dinámica de fluidos computacionales (CFD) con el método de elemento finito en geometrías tridimensionales. Se analizan dos tipos de geometría de tapa de burbuja, una con la geometría real la cual tiene ranuras y la otra es una geometría simplificada sin ranuras. Las simulaciones se realizan para diferentes velocidades de entrada en el rango de 5 m/s a 17.5 m/s. El estudio permitió hallar los campos de velocidad y presión a través de la tapa de burbujas. Por otra parte, se obtuvo la curva de caída de presión para diferentes velocidades con las dos diferentes configuraciones, observándose una mayor caída de presión con la configuración con ranuras. La caída de presión se incrementa al aumentar la velocidad.

Palabras Clave: simulación CFD, Hidrodinámica, Etanol, Columna de destilación, Plato de tapa de burbuja.

ABSTRACT

This work studies the hydrodynamic behavior of the ethanol vapor flow through the bubble cap inside a distillation column. The study is based on simulations of fluid dynamics computations (CFD) with the finite element method in three-dimensional geometries. Two types of bubble cap geometry are discussed, one with the actual geometry which has grooves and the other is a simplified geometry without grooves. The simulations are performed for different input velocities in the range of 5 m/s to 17.5 m/s. The study made it possible to find the velocity and pressure fields through the bubble cap. On the other hand, the pressure drop curve was obtained for different speeds with the two different configurations, observing a greater pressure drop with the slotted configuration. Pressure drop increases with increasing speed.

Keywords: CFD simulation, Hydrodynamics, ethanol, distillation column, Bubble cap tray.

1. Introducción

A nivel mundial existe la tendencia de emplear software especializado para ingeniería asistida por computadora (CAE por sus siglas en inglés) principalmente en el área de mecánica de materiales, sin embargo, se han desarrollado módulos especializados en fenómenos de transporte de fluidos y transferencia de calor.

La simulación de fenómenos por el método de elemento finito es utilizada frecuentemente para estudiar comportamientos hidrodinámicos en aquellos dispositivos donde resulta inconveniente realizar numerosos prototipos, ya sea por el largo tiempo de producción o el alto costo económico, sin embargo, la simulación de CFD (dinámica de fluidos computacionales por sus siglas en inglés) por el método del elemento finito es una herramienta de análisis numérico para el estudio del comportamiento dinámico de los fluidos y permite probar de manera virtual el efecto de

las configuraciones de diseño y operación sin incurrir en las restricciones de los modelos físicos[1].

En la industria de los biocombustibles de primera y segunda generación el etanol anhidro por su baja humedad característica, requiere un proceso de purificación común, donde se destila, rectifica y deshidrata. Estos procesos requieren grandes cantidades de energía térmica y una correcta configuración de las columnas de destilación inciden directamente en el consumo energético global y por ende en la viabilidad energética de un proyecto productivo.[2]

En el proceso de purificación de etanol se requiere el uso de columnas de destilación con principios de operación similares a las empleadas en la industria petrolera, sin embargo, al ser operadas con productos con propiedades físicas y químicas diferentes es necesario estudiar el comportamiento característico de los modelos existentes con el fluido de trabajo particular, para ello es conveniente

Figura A.2 – Caratula del artículo publicado en el congreso SOMIM

Referencias

- [1] A. María, U. Iván, I. D. Gil, J. Aguilar, G. Rodríguez, y M. Caicedo, “Producción de alcohol carburante por destilación extractiva : Simulación del proceso con glicerol Producing fuel alcohol by extractive distillation : Simulating the”, *Ing. e Investig.*, vol. 26, núm. 1, pp. 45–50, 2006.
- [2] A. M. Uyazán, I. D. Gil, J. L. Aguilar, G. Rodríguez, y L. A. Caicedo, “Deshidratación del etanol”, *Ing. e Investig.*, núm. 56, pp. 49–59, 2004.
- [3] A. A. Kiss y D. J. P. C. Suszwalak, “Enhanced bioethanol dehydration by extractive and azeotropic distillation in dividing-wall columns”, *Sep. Purif. Technol.*, vol. 86, pp. 70–78, 2012, doi: 10.1016/j.seppur.2011.10.022.
- [4] M. A. Zubir, A. N. Rahimi, M. F. Islam Zahran, M. Z. Shahrudin, K. A. Ibrahim, y M. K. Abd Hamid, “Systematic design of energy efficient extractive distillation column for azeotrope mixture”, *Energy Procedia*, vol. 142, pp. 2636–2641, 2017, doi: 10.1016/j.egypro.2017.12.204.
- [5] J. L. Bravo, “Distillation Technology : What ’ s Next ?”, pp. 1–14, 2019.
- [6] E. Quiroz-Pérez, C. Gutiérrez-Antonio, y R. Vázquez-Román, “Modelling of production processes for liquid biofuels through CFD: A review of conventional and intensified technologies”, *Chem. Eng. Process. - Process Intensif.*, vol. 143, núm. December 2018, p. 107629, 2019, doi: 10.1016/j.cep.2019.107629.
- [7] “¿que es un cluster?”, <http://www.revista.unam.mx/>, jul. 2003.
- [8] W. B. J. ZIMMERMAN, “Introduction To Comsol Multiphysics”, pp. 1–26, 2006, doi: 10.1142/9789812773302_0001.
- [9] M. B. Company y N. York, “An Introduction to the Finite Element Method , J . N . Reddy , This is a unique book on finite element methods (FEM) and applications . In this book , FEM is presented to the reader as a variational-based technique of solving differential equations . Us”, 1989.
- [10] S. Edition, *Introduction to computational fluid dynamics*, vol. 43, núm. 08. 2006.
- [11] C. J. Geankoplis, “Transport process and separation process principles”, *Prentic Hall*, vol. 4, 2003.
- [12] H. Zhao, L. Li, B. Wang, D. Yu, y Q. Li, “Hydrodynamics performance and tray efficiency analysis of the novel vertical spray packing tray”, *Chinese J. Chem. Eng.*, vol. 26, núm. 12, pp. 2448–2454, 2018, doi: 10.1016/j.cjche.2018.01.030.
- [13] A. Moreno Cárcamo, “Equilibrio de fases en sistemas multicomponentes”, pp. 18–20, 2010.
- [14] S. Navarrete-Contreras, M. Sánchez-Ibarra, F. O. Barroso-Muñoz, S. Hernández, y A. J. Castro-Montoya, “Use of glycerol as entrainer in the dehydration of bioethanol using extractive batch distillation: Simulation and experimental studies”, *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 77, pp. 38–41, 2014, doi: 10.1016/j.cep.2014.01.003.
- [15] S. Abbasnia, Z. Nasri, y M. Najafi, “Comparison of the mass transfer and efficiency of Nye tray and sieve tray by computational fluid dynamics”, *Sep. Purif. Technol.*, vol. 215, núm. September 2018, pp. 276–286, 2019, doi: 10.1016/j.seppur.2019.01.010.
- [16] M. M. Parizi y R. Rahimi, “Hydrodynamics of Sieve Tray Distillation Column Using CFD Simulation”, vol. 49, núm. 2, pp. 119–129, 2015.
- [17] N. Yang, R. Zhang, B. Jiang, Z. Li, L. Zhang, y Y. Sun, “Computational fluid dynamics and experimental validation of hydrodynamics of ripple tray”, *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, vol. 53, pp. 6–14, 2015, doi: 10.1016/j.jtice.2015.02.021.
- [18] M. Tang *et al.*, “CFD simulation of gas flow field distribution and design optimization of the

tridimensional rotational flow sieve tray with different structural parameters”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 201, pp. 34–49, 2019, doi: 10.1016/j.ces.2019.01.049.

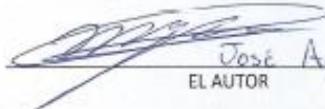
- [19] T. Zarei, J. Khorshidi, R. Rahimi, y A. Zarei, “Experimental Studies on the Conical Cap tray Performance”, *J. Chem.*, vol. 50, núm. 2, 2017.
- [20] F. K. Shenastaghi, S. Roshdi, N. Kasiri, y M. Hasan Khanof, “CFD simulation and experimental validation of bubble cap tray hydrodynamics”, *Sep. Purif. Technol.*, vol. 192, núm. September 2017, pp. 110–122, 2018, doi: 10.1016/j.seppur.2017.09.055.
- [21] R. Rahimi, M. Mazarei Sotoodeh, y E. Bahramifar, “The effect of tray geometry on the sieve tray efficiency”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 76, pp. 90–98, 2012, doi: 10.1016/j.ces.2012.01.006.
- [22] C. Multiphysics, “CFD Module User ’s Guide”, *COMSOL Multiphysics*, p. 598, 2016.
- [23] Comsol4.0a y Comsol, “Chemical Reaction Engineering Module”, *Interfaces (Providence)*, vol. 9, núm. 3, pp. 1–220, 2010.
- [24] G. F. Carey y T. J. Oden, *Finite Elements: Fluid Mechanics Vol., VI*. Prentice-Hall, Inc., 1986.
- [25] J. C. F. Pereira y B. Schönung, “Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow”, *J. Fluid Mech.*, vol. 127, núm. May 2014, pp. 473–496, 1983, doi: 10.1017/S0022112083002839.

CARTA DE CESIÓN DE DERECHOS Y NO PLAGIO

En la Ciudad de Veracruz, Veracruz a los 12 días del mes febrero de 2021. El que suscribe José Agustín Moya Montiel por mi propio derecho y en calidad de autor de la tesis titulada: "ESTUDIO DE LA TRASFERENCIA DE MASA Y ENERGÍA EN COLUMNAS DE PURIFICACIÓN DE UNA PLANTA PILOTO DE BIOCOMBUSTIBLE" (en lo sucesivo la "TESIS") manifiesto que cedo a título gratuito la totalidad de los derechos patrimoniales de autor que sobre ella me corresponden, a favor del Tecnológico Nacional de México (en lo sucesivo el "TecNM"). Lo anterior en términos de los antecedentes y consideraciones siguientes:

- I. Que la presente cesión de derechos de la "TESIS" se transfiere en virtud de lo estipulado en los establecido en los Lineamientos para la Operación de los Estudios de Posgrado en el Tecnológico Nacional de México, sin reservarme acción legal de ningún tipo.
- II. Manifiesto bajo protesta de decir verdad, que la "TESIS" es original, inédita y propia, no existiendo impedimento de ninguna naturaleza para la cesión de derechos que se está haciendo, respondiendo además por cualquier acción de reivindicación, plagio u otra clase de reclamación que al respecto pudiera sobrevenir.
- III. Que la titularidad de derechos de autor de la "TESIS" en términos del artículo 27 de la Ley Federal del Derecho de Autor (reproducción, en todas sus modalidades, transformación o adaptación, comunicación pública, distribución y en general cualquier tipo de explotación que de la "TESIS" se pueda realizar por cualquier medio conocido o por conocer, son propiedad única y exclusiva del "TecNM", adquiriendo el derecho de reproducción en todas sus modalidades, el derecho de transformación o adaptación, comunicación pública, distribución y en general cualquier tipo de uso que de la "TESIS" se pueda realizar por cualquier medio conocido o por conocer. La cesión de derechos se realiza con carácter permanente e irrevocable.
- IV. El TecNM podrá exhibir la "TESIS" a través de cualquier medio, en cualquier parte del mundo, incluso ser modificada, comprendida, traducida y de cualquier forma explotada en su totalidad o parcialidad.
- V. Que no he otorgado, ni otorgaré por ningún motivo, consentimiento alguno para la utilización de la "TESIS" por cualquier medio y su materialización en productos o servicios de cualquier naturaleza, a favor de ninguna persona física o moral, distinta a el "TecNM".
- VI. Estoy enterado del contenido y alcance legal de la presente cesión de derechos, firmando al final del presente documento para su certificación.

Señalo como correo electrónico para recibir futuras notificaciones: m19020017@veracruz.tecnm.mx.


José Agustín Moya Montiel
EL AUTOR