

Universidad de Valladolid



UNIVERSIDAD DE VALLADOLID ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES

Grado en Ingeniería Mecánica

Optimización del flujo interno en conductos de gases reales mediante minimización de la generación de entropía

Autor: Ferrero Seco, Gonzalo

Tutor:

Sierra Pallares, José Benito

Departamento de Ingeniería Fluidomecánica y Energética

Valladolid, Junio 2023

AGRADECIMIENTOS

Me gustaría agradecer este Trabajo de Fin de Grado a mis padres, por su apoyo y dedicación a lo largo de todos estos años de formación académica sin los cuales no habría llegado hasta aquí.

También quiero agradecérselo a mi tutor, el Doctor José Benito Sierra Pallares, por brindarme la oportunidad de realizar este trabajo, así como por su ayuda, su interés y su absoluta disponibilidad durante los meses de realización del proyecto.

RESUMEN

Uno de los aspectos más importantes en la fabricación de nanopartículas utilizando CO₂ supercrítico es controlar la cantidad de partículas que se desvían de un determinado tamaño. Esta desviación está relacionada con la varianza existente en los tiempos de residencia a la salida del conducto utilizado para su fabricación. Este factor es proporcional a la generación de entropía, la cual depende del flujo interno donde ocurre la reacción, el cual a su vez depende de la forma del conducto.

La dinámica de fluidos computacional (CFD) nos permite realizar modelos de estos procesos con un coste y un tiempo relativamente reducido. Utilizando el software comercial ANSYS Fluent, se realizará un estudio paramétrico de la forma de un conducto en función de sus ángulos de entrada y salida, y a partir de este se escogerá la forma óptima que minimice la generación entrópica, y por lo tanto, la varianza a la salida.

Palabras clave: fluido supercrítico, entropía, simulación, parametrización, optimización.

ABSTRACT

One of the most important aspects about manufacturing nanomaterials using supercritical CO_2 is to control the amount of particles which divert from a given size. This diversion is afected by the variance of residence times of the particles at the exit of the used duct. This factor is closely related to the generation of entropy, which depends on the internal flow where the reaction occurs, which depends on the internal flow where the reaction occurs, which depends on the duct.

Computational fluid dynamics (CFD) allows us to model these processes with relatively little cost and time. Using the commercial software ANSYS Fluent, a parametric study of the shape of a duct will be carried out as a function of its inlet and outlet angles, and the optimal shape will be chosen that minimizes the entropy generation, and therefore, the variance at the exit.

Keywords: supercritical fluid, entropy, simulation, parametric, optimization

Índice

1	INTI	INTRODUCCIÓN 3		
	1.1 Efectos y comportamientos propios de la nanoescala		ctos y comportamientos propios de la nanoescala	7 -
	1.1.	1	Efectos cuánticos en la nanoescala	7 -
	1.1.	2	Enlaces químicos y fuerzas intermoleculares	8 -
	1.1.	3	Efectos mecánicos en la nanoescala	8 -
	1.2	Clas	sificación de los nanomateriales	9 -
	1.3	Apli	caciones de los nanomateriales	11 -
	1.3.	1	La nanotecnología en nuestra salud	11 -
	1.3.	2	La nanotecnología en la sociedad de la información	12 -
	1.3.	3	Nuevos materiales aportados por la nanotecnología	13 -
	1.3.	4	Nuevas fuentes de energía	13 -
	1.4	Mét	todos de fabricación	14 -
	1.4.	1	Fluidos supercríticos	16 -
	1.5	Tien	npos de residencia y generación entrópica	19 -
	1.5.	1	Tiempos de residencia	19 -
	1.5.	2	Generación entrópica	21 -
	1.6	Just	ificación de Trabajo Fin de Grado	21 -
2	OBJ	ETIVO	OS	25 -
3	DES	ARRC	DLLO DEL TFG	29 -
	3.1	Mod	delo físico	29 -
	3.1.	1	Ecuaciones de conservación	29 -
	3.1.	2	Modelo de turbulencia	32 -
3.2 Modelo numérico		41 -		
	3.2.	1	Acoplamiento presión-velocidad	43 -
	3.2.	2	Mallado	46 -
	3.2.	3	Esquemas de discretización	48 -
	3.2.	4	Ley de la pared	51 -
	3.2.	5	Factores de subrelajación	53 -
	3.2.	6	Parámetros de operación	54 -
	3.2.	7	Resumen de las características del modelo	55 -

3.	3 Caso	o de estudio 55 -
	3.3.1	Geometría 55 -
	3.3.2	Parametrización 56 -
	3.3.3	Proceso de cálculo (simulación) 64 -
	3.3.4	Diseño de experimentos (Puntos de diseño) 68 -
	3.3.5	Superficie de respuesta 69 -
	3.3.6	Optimización 71 -
3.	4 Resu	ıltados 71 -
	3.4.1	Optimización basada en la minimización de la generación entrópica 72 -
	3.4.2	Optimización basada en la minimización de la varianza a la salida 75 -
	3.4.3	Optimización basada en la maximización del inverso del coeficiente de variación
	a la sallu	d // -
	3.4.4	Elección final de los ángulos de entrada y salida 79 -
4	CONCLUS	5IONES 83 -
BIBL	IOGRAFÍA	87 -

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Tamaño relativo de objetos naturales y artificiales (escala logarítmica)	4
Figura 2. Mariposa morfo azul	5
Figura 3. Copa de Liturgo	5
Figura 4. Fuerza atractiva de Van der Walls debida a la formación de dipolos	
instantáneos	8
Figura 5. Clasificación de nanomateriales según el número de dimensiones	
nanométricas1	0
Figura 6. Metodologías top-down y bottom-up1	4
Figura 7. Forma del conducto utilizado para la fabricación de nanomateriales1	5
Figura 8. Diagrama de fases del CO ₂ 1	6
Figura 9. Variación de densidad reducida (ρ/ρ_c) en función de la presión reducida (p/p_c)	<u>-</u>)
para distintas isotermas1	7
Figura 10. Capacidad de solvatación en función del medio disolvente (gas, líquido o	
fluido supercrítico)1	7
Figura 11. Curva RTD para una entrada del tipo impulso1	9
Figura 12. Simulación numérica directa (DNS)	4
Figura 13. Simulación de torbellinos grandes (LES)3	5
Figura 14. Medida puntual típica en un flujo turbulento	6
Figura 15. Comparación de los tres modelos turbulentos utilizados en CFD 3	7
Figura 16. Comparación del tiempo de cálculo y precisión obtenida para los	
Distintos modelos turbulentos 4	0
Figura 17. Algoritmos utilizados por los métodos basados en la presión 4	5
Figura 18. Ejemplo de malla híbrida 4	8
Figura 19. Tratamientos de pared5	2
Figura 20. Geometría del conducto (reactor)5	6
Figura 21. Geomtría plana de partida5	7
Figura 22. Volumen suprimido	9
Figura 23. Cálculo de V ₁ 6	0
Figura 24. Cálculo de V ₂ 6	1
Figura 25. Volumen añadido6	1
Figura 26. Cálculo de V ₃ 6	2
Figura 27. Cálculo de V ₄ 6	3
Figura 28. Residuales obtenidos para una simulación de 250 iteraciones6	7
Figura 29. Generación entrópica en cada punto del reactor para el Punto 07	2
Figura 30. Generación entrópica en cada punto del reactor para el Punto 17	3
Figura 31. Perfil de velocidades para el Punto 07	3
Figura 32. Perfil de velocidades para el Punto 174	4

Figura 33. Varianza en el reactor para el Punto 0	. 75
Figura 34. Varianza en el reactor para el Punto 4	. 76
Figura 35. Perfil de velocidades para el Punto 4	. 77
Figura 36. Inverso del coeficiente de varianza en el reactor para el Punto 0	. 78
Figura 37. Inverso del coeficiente de varianza en el reactor para el Punto 6	. 78
Figura 38. Perfil de velocidades para el Punto 6	. 79

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Cambio en las propiedades del Niquel al reducir el tamaño de grano de
10 μm a 10 nm
Tabla 2. Fundamentos de la vida en la escala nanométrica 12
Tabla 3. Características de las metodologías top-down y bottom-up 15
Tabla 4. Propiedades físicas de los gases, líquidos y fluidos supercríticos
Tabla 5. Técnicas utilizadas en la fabricación de nanomateriales
usando CO ₂ supercrítico18
Tabla 6. Características de los principales modelos RANS 38
Tabla 7. Algoritmos de acoplamiento presión-velocidad disponibles
en ANSYS 2022 R2 46
Tabla 8. Características de los distintos tipos de malla47
Tabla 9. Esquemas de discretización 50
Tabla 10. Factores de subrelajación 54
Tabla 11. Parámetros de operación 54
Tabla 12. Resumen de las características del modelo 55
Tabla 13. Variables que definen la forma del reactor 57
Tabla 14. Rango de valores posibles para los ángulos de entrada y salida
Tabla 15. Valores escogidos para los datos de partida64
Tabla 16. Puntos de diseño 69
Tabla 17. Coeficientes de regresión de las superficies de respuesta
Tabla 18. Puntos de diseño que minimicen la generación entrópica del reactor72
Tabla 19. Comparación de valores de la máxima generación entrópica para
el Punto 0 y el Punto 1
Tabla 20. Puntos que minimizan la varianza a la salida75
Tabla 21. Puntos que maximizan el inverso del coeficiente de variación
a la salida77
Tabla 22. Valores de las variables de salida para el conjunto de ángulo
que optimizan la forma del reactor 80

ÍNDICE DE ECUACIONES

Ecuación 1. Edad media del fluido	. 20
E cuación 2. Ecuación general de conservación	. 29
E cuación 3. Ecuación de continuidad	. 30
Ecuación 4. Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento	. 30
E cuación 5. Ecuación de conservación de la energía	. 31
E cuación 6. Ecuación de conservación del escalar m ₁ (edad del fluido)	. 31
E cuación 7. Ecuación de conservación del escalar m $_2$ (varianza)	. 32
E cuación 8. Descomposición de Reynolds	. 36
E cuación 9. Ecuación de promediado en el tiempo	. 36
Ecuación 10. Ley de la viscosidad de Newton	. 38
E cuación 11. Hipótesis de Boussinesq	. 39
Ecuación 12. Modelado de la viscosidad turbulenta	. 40
Ecuación 13. Forma integral de la ecuación general de conservación	. 48
Ecuación 14. Parámetro adimensional que caracteriza las subcapas de	
la zona interna	. 52
Ecuación 15. Expresión del valor de la variable utilizando factores de subrelajación	. 53
Ecuación 16. Teorema de Pappus-Guldin aplicado a nuestro problema particular	. 58
E cuación 17. Relación entre la longitud añadida al reactor y el valor de	
sus ángulos de entrada y salida	. 63
Ecuación 18. Generación entrópica turbulenta	. 65
Ecuación 19. Promediado ponderado en masa de la varianza a la salida	. 65

CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN

1 INTRODUCCIÓN

La tecnología ha acompañado desde siempre al ser humano y lo ha ayudado a controlar su entorno. Tras cada revolución tecnológica, la humanidad avanza un escalón en su evolución, alcanzando cotas de bienestar mayores. En este momento, y desde hace ya un par de décadas, la humanidad está subiendo otro escalón que nos permitirá controlar el mundo de lo invisible a través de la *nanotecnología*: la ingeniería del mundo atómico y molecular.

La palabra nanotecnología está formada por el prefijo griego *nano*, que significa "enano", y *tecnología*, cuyo significado es entendible para todos. El prefijo nano indica 10⁻⁹ en la escala del Sistema Internacional de Unidades. Así, nanotecnología se refiere formalmente a la "tecnología en la escala de *nanómetros* o *nanoescala*". Sin embargo, debido a que los efectos tan característicos que hacen únicos a los nanomateriales se aprecian notablemente por debajo de los 100 nm, cuando se habla de nanotecnología nos referimos a todas las tareas de estudio, diseño, síntesis, manipulación y aplicación de todo tipo de sistemas y artefactos funcionales que se encuentra en el rango comprendido entre 1 nm y 100 nm. La *Figura 1* muestra el tamaño relativo de objetos naturales y artificiales que nos permite vislumbrar lo pequeño que es un nanómetro y lo difícil que ha sido para el hombre llegar a poder controlar estas escalas. Para ayudarnos mejor a comprender el tamaño de un nanómetro, podemos utilizar la siguiente analogía: un nanómetro es a una manzana lo que la manzana es al planeta Tierra [26].

Aunque la nanotecnología es una disciplina moderna, la humanidad lleva empleándola desde hace miles de años, obviamente sin ser conscientes de ello, por no hablar de que el propio planeta presenta nanomateriales en su entorno de manera natural. Veamos algunos ejemplos:

• Flor de Loto

Una de las características más llamativas de esta flor a nivel científico es la capacidad hidrofóbica de sus hojas. El motivo por el que el agua no se adhiera su reside es unas protuberancias microscópicas recubiertas con *nanocristales hidrofóbicos* cerosos presentes en su superficie. Cuando el agua se sitúa sobre estas protuberancias, el aire atrapado entre estas sostiene la gota de agua, que se mantiene integra por la tensión superficial.



Figura 1. Tamaño relativo de objetos naturales y artificiales (escala logarítmica)

• Bacterias magnetotácticas

Son organismos que se orienta a lo largo de las líneas del campo magnético terrestre gracias a unas *nanopartículas metálicas* presentes en su organismo. Esta orientación les ayuda a desplazarse hacia regiones con concentraciones mayores de oxígeno.

• Alas de las mariposas

La mariposa morfo azul (*Morpho menelaus*), *Figura 2*, se caracteriza por tener unas alas llamativas aparentemente azules. El color real de las alas es marrón, pero la reflexión de la luz en sus *escamas nanométricas* del dorso genera un fenómeno de iridiscencia. Estas escamas se disponen en varias capas y reflejan varias veces (tantas como capas) hasta el 70% de la luz incidente. Por este motivo, el color depende del ángulo de incidencia y de la longitud de onda.



Figura 2. Mariposa morfo azul

• Esmaltado

El esmalte vidriado o porcelánico es el resultado de la fusión de un material cristalino en polvo con un sustrato a través de un proceso de calentamiento de entre 700 y 900°C. El polvo se funde y crece endureciéndose formando una cobertura suave y vítrea con *nanopartículas empotradas* Como ejemplo curioso, los romanos fabricaron en el siglo IV d.C la conocida como *Copa de Licurgo, Figura 3*, la cual tiene la peculiaridad de cambiar de color de acuerdo con la posición del observador o del líquido que contiene. Este efecto, que en su momento se desconocía el origen, se debe a la presencia de *nanopartículas de oro y plata* de unos 50 nm presentes en el material cristalino, que otorgan distintas tonalidades a la luz reflejada y refractada.



Figura 3. Copa de Liturgo

Los avances en física y química en la segunda mitad del siglo XIX y las primeras décadas del siglo XX demostraron que existía un mundo nanoscópico, aunque este no se pudiera ver. Sin embargo, no se pueden encontrar en esa época actuaciones que pudieran ser consideradas puramente nanotecnológicas. Fue en 1857, cuando Michael Faraday (1911-1977) realizó el primer estudio indirecto del nanomundo. Descubrió que el oro podía dar soluciones de diferentes colores, dependiendo de las condiciones de iluminación, consecuencia de su nanoestructura. En 1959, Richard Feynman (1918-1988) estableció la idea inspiradora del nanomundo en un discurso en la Sociedad Estadounidense de Física celebrado en el Instituto Tecnológico de California. En dicho discurso preguntó: "¿Por qué no manipulamos la materia átomo a átomo?", a la vez que presentaba los escenarios, problemas y oportunidades de la manipulación de la materia en la nanoescala. Esta fue la primera vez que se hizo alusión al nanomundo y sus posibilidades. No fue hasta 1974 cuando el científico japonés Norio Taniguchi (1912-1999), acuñó el término nanotecnología como el procesamiento, separación y manipulación de materiales átomo por átomo. En 1981, Gerd Binning (n. 1947) y Henrich Rohrer (1933-2013) presentaron al mundo la primera herramienta efectiva que permite trabajar directamente a nivel atómico: el Microscopio de Barrido basado en el Efecto Túnel (Scanning Tunneling Microscope, STM). Más tarde se desarrolló el Microscopio de Fuerza Atómica (Atomic Force Micrsocope, AFM), una versión mejorada del STM.

El hecho de que la nanotecnología se desarrolle en un rango de dimensiones muy pequeñas es lo que le imprime sus verdaderas características. Es sorprendente como una material va modificando sus propiedades a medida que se va fragmentado en porciones más pequeñas. En el entorno próximo a las dimensiones atómicas, la física clásica (leyes de Newton, termodinámica, electromagnetismo...) no puede interpretar los resultados y propiedades que se observan, porque hablamos de fenomenología asociada a un grupo reducido de átomos, donde se verifican las leyes de la física cuántica.

El campo de aplicación de los nanomateriales es muy amplia y variada: medicina, tecnologías de la comunicación, microelectrónica, ingeniería de materiales, computación cuántica, textiles inteligente, energía, reducción de la contaminación.... Esto hace de la nanotecnología una rama de la ciencia interdisciplinar.

1.1 Efectos y comportamientos propios de la nanoescala

Como ya hemos visto, el hecho de que la nanotecnología se desarrolle en un rango de dimensiones muy pequeñas es lo que le aporta sus características únicas. A medida que un material se va fragmentado en porciones más pequeñas van cambiando sus propiedades físicas y químicas (características ópticas, térmicas, eléctricas, mecánica, reactividad...).

En el nanomundo, es la física cuántica la que gobierna el comportamiento de los materiales. A continuación se presentan alguno de los efectos cuánticos, químicos y mecánicos que están presentes en el nanomundo y que aportan las características que hacen tan únicos a los nanomateriales.

1.1.1 Efectos cuánticos en la nanoescala

En la primera mitad del siglo xx se demostró que la materia poseía una naturaleza ondulatoria. Esta propiedad viene descrita por la *ecuación de Schröndiger*, la cual da explicación a los efectos cuánticos apreciables en la nanoescala. Algunos de estos efectos son los siguientes:

- a) Efecto túnel: fundamental en el funcionamiento del microscopio STM.
- **b) Principio de incertidumbre (Heinsenberg):** efecto por el cual las ecuaciones que hacen referencia a las nanoestructuras no se puedan resolver de manera determinsta.
- c) Principio de exclusión (Pauli): el comportamiento y reactividad (capacidad para reaccionar con otras sustancias) de los materiales en la nanoescala dependerá fuertemente de este fenómeno.
- d) Efecto Casimir: fuerza presente a tener en cuenta cuando se trabaja en escalas nanométricas.

Estos fenómenos cuánticos, ausentes en la macroescala, son los que dotan a los nanomateriales de sus asombrosas propiedades que los hacen únicos en sus aplicaciones.

1.1.2 Enlaces químicos y fuerzas intermoleculares

Las estructuras nanotecnológicas pueden estar formadas por unos pocos átomos que se presentan de forma individual o en grupos, o como aglomerados. Las fuerzas que cohesionan los nanomateriales son mayoritariamente fuerzas moleculares (*fuerzas de Van de Walls*).

Las fuerzas de Van de Walls son fuerzas atractivas o repulsivas de corto alcance entre moléculas. Aunque las moléculas son eléctricamente neutras, la dinámica cuántica puede generar una mayor densidad electrónica en una parte de la molécula, generando un dipolo magnético momentáneo, polarizando la molécula. Si distintas moléculas están lo suficientemente cerca pueden formarse uniones intermoleculares como en la *Figura 4*. Todas las fuerzas intermoleculares en la nanoescala dependen de la orientación de las moléculas.



Figura 4. Fuerza atractiva de Van de Walls debida a la formación de dipolos instantáneos.

Como consecuencia de estas fuerzas intermoleculares, la reactividad química de los materiales aumenta considerablemente al acercarnos a las dimensiones manométricas.

1.1.3 Efectos mecánicos en la nanoescala

El comportamiento mecánico de los materiales en la nanoescala es muy diferente al que se observa par el mismo material a nivel macroscópico. Aspectos como la *fragilidad, viscosidad, fricción, elasticidad, etc.,* cambian drásticamente a medida que disminuimos el tamaño de la muestra, ya que las características metálicas de un

material cristalino dependen del tamaño de grano. En un metal macroscópico, este tamaño de grano es del orden de micras, mientras que en metales nanocristalinos es inferior a 100 nm. Esta disminución de grano trae consigo una disminución de la ductilidad, siendo la rigidez obtenida en las nanoestructuras su característica fundamental.

En la *Tabla 1* se muestra a modo de ejemplo como varían las propiedades del Níquel cuando pasamos de un tamaño de grano de 10 µm a 10 nm [22].

Propiedad	Mejora observada
Dureza	• 5 veces mayor
Resistencia	• 3-10 veces mayor
Resistencia al desgaste	• 170 veces mayor
Coef. de fricción	• Se reduce a la mitad
Resistencia a la corrosión	 Se reduce, incluso se detiene en zonas localizadas
Propiedades magnéticas	 Reducción de la coercitividad Reducción de la saturación de magnetización de hasta un 5%
Propiedades eléctricas	 Aumento de hasta 3 veces de la resistividad
Propiedades electrocatalíticas	Mejora de la capacidad catalítica

Tabla 1. Cambio en las propiedades del Ni al reducir el tamaño de grano de 10 µm a 10 nm.

1.2 Clasificación de los nanomateriales

Existen varios aspectos que diferencian a unos nanomateriales de otros (tamaño, forma, composición, aplicaciones...), por lo que se pueden hacer varias clasificaciones de ellos. La *Agencia de Medioambiente de los EEUU* clasifica los nanomateriales en cuatro tipos atendiendo a su composición:

- a) Basados en el carbono
- b) Basados en metales u óxidos metálicos
- c) Dendrimétricos (polímeros de tamaño nanométrico)

d) Compuestos (combinación de nanopartículas con otras nanopartículas o con otros materiales de mayor tamaño)

La clasificación más utilizada y que mejor diferencia a unos nanomateriales de otros es la que está basada en el número de dimensiones que tienen por debajo de los 100 nm. Esta clasificación cuenta con cuatro grupos que se definen a continuación:

- a) Cero-dimensional (0D): Tres dimensiones por debajo de los 100 nm.
- b) Uni-dimensional (1D): Dos dimensiones por debajo de los 100 nm.
- c) Bi-dimensional (2D): Una dimensión por debajo de los 100 nm.
- d) Tri-dimensional (3D): Ninguna dimensión por debajo de los 100 nm.

Estructura	Nanomateriales
Cero dimensional	- Fullerenos
and	- Partículas coloidales
	- Puntos cuánticos (Qdots)
	- Nanoclusters
A start	- Nanopartículas de Au y Ag
Uni dimensional	- Nanocables y nanofibras
18 CON	- Nanotubos
	- Nanovarillas
Caller	- Fibras poliméricas
Bi-dimensional	- Monocapas
	- Nanorrecubrimiento
-FEFE	- Películas poliméricas (nano)
	- Superficies espesor <100mm
-25 FEE	- Películas multicapa
Tri-dimensional	- Materiales nanoestructurales
A	- Policristales
A 100	- Nanobolas
1312122	- Nanobobinas
CC	- Nanofiores



1.3 Aplicaciones de los nanomateriales

La nanotecnología nos está proporcionando todos los días nuevas aplicaciones y mejoras de las ya existentes, y dado su carácter transversal, lo hace en cualquier ámbito. Por lo tanto, son muchos los campos de aplicación de esta disciplina en la sociedad, asique por no ser exhaustivos y centrarnos en campos de indiscutible importancia a día de hoy, se citan a continuación algunas áreas de especial interés en las que se aplica la nanotecnología.

1.3.1 La nanotecnología en nuestra salud

Un objetivo fundamental de la biología y la medicina es entender los mecanismos de la ingeniería molecular, responsables últimos de la vida. Conocerlos y saber actuar sobre ellos se traducirá en una mejora de nuestra calidad de vida. Si se observa la *Tabla 2*, se observa que los fundamentos de la vida se desarrollan en la escala nanométrica. La integración de la nanotecnología con la biología trae consigo el nacimiento de la *nanobiología*, con ramas dentro de ella como la *nanomedicina*.

A continuación se citan brevemente algunas de las mejoras aportadas por la nanotecnología en el campo de la medicina:

- a) **<u>Diagnóstico de tumores</u>**: mejora de la eficacia y del tiempo de detección respecto a los métodos convencionales.
- b) <u>Eliminación de células cancerosas</u>: eliminación localizada en las células cancerosas, dejando intacto el tejido sano.
- c) <u>Liberación controlada de medicamentos</u>: dosificación y administración adecuada de fármacos, liberando la cantidad adecuada de él en el tejido o células enfermas.

Objeto	Magnitud	Medida (nm)
Átomos y moléculas	Diámetro átomo de hidrógeno Tamaño de la molécula de agua Distancia entre átomos de carbono en el grafeno	0,05 0,10 0,14
Aminoácidos	Glicina (aminoácido más pequeño) Triptófano (aminoácido más grande)	0,42 0,67
Nucleótidos ADN	Citosina (nucleótido más pequeño) Guanina(nucleótido más grande)	0,81 0,86
ADN	Diámetro (doble hélice)	2
Proteínas	Insulina (hormona) Hemoglobina (transporta oxígeno) Ribosoma (orgánulo celular para síntesis de proteínas) Gránulos de glucógeno del hígado	2,2 7,0 30 50
Virus	Poliomelitis Gripe Mosaico del tabaco Bacteriófago T2	25 60 120 140
Bacterias procariotas	Francisela turalensis Estreptococo pneumoniae Bacilo del antrax	200×700 800×800 1000×10000
Células	Eritrocito humano (glóbulo rojo) Linfocito humano (glóbulo blanco) Espermatozoide humano (cabeza /flagelo)	1000×5000 12000 7000×50000
Cabello humano	Diámetro cabello rubio fino Diámetro cabello moreno grueso	25000 100000

Tabla 2. Fundamentos de la vida en la escala nanométrica.

1.3.2 La nanotecnología en la sociedad de la información

La microelectrónica del silicio nos ha sumergido de lleno en la sociedad de la información y las comunicaciones. Un dispositivo electrónico tiene varios chips con

miles de millones de transistores integrados de tamaño nanométrico que nos permite realizar tareas de altísima velocidad de manera simultánea.

Todo esto ha sido posible gracias a la miniaturización del tamaño de los transistores. A de la década de 1960, la anchura mínima de un transistor era de 10 μ m. Actualmente existen anchuras experimentales de 7nm, lo cual mejora sustancialmente la capacidad de los dispositivos electrónicos

1.3.3 Nuevos materiales aportados por la nanotecnología

La nanotecnología ha traído consigue nuevos materiales y ha mejorado considerablemente las propiedades de los ya existentes. Veamos a continuación algunos de ellos:

- a) <u>Catalizadores en la industria química y medioambiental</u>: mejora de la capacidad catalítica respecto a los convecionales debido a la inclusión de nanopartículas de metales u óxidos de metales. Esto se debe al aprovechamineto de la altísima relación superficie-volumen que caracteriza a los nanomateriales.
- b) <u>Tejidos nanotextiles</u>: tejidos formados por nanofibras artificiales que dotan a la ropa de unas características sorprendentes como prendas autobronceadoras, prendas climatizadas, ropa autoperfumada, prendas reductoras del cansancio...
- c) <u>Materiales de construcción</u>: la inclusión de nanocompuestos en los materiales convencionales de construcción los ha dotado de características mejoradas, como la disminución del peso, el aumento de resistencia o la mejora del comportamiento a fatiga, entre otros.

1.3.4 Nuevas fuentes de energía

El comienzo del siglo XXI está marcado por la búsqueda incesante de nuevas fuentes de energías renovables. La nanotecnología está aportando a esta búsqueda soluciones en varios ámbitos, entre los que destacan las células solares de lata eficiencia y las pilas de combustible.

- a) <u>Energía solar fotovoltaica</u>: el uso de nanomateriales ha mejorado el rendimiento de las placas solares desde valores generalmente inferiores al 30% hasta valores superiores al 80%.
- b) <u>Pilas de combustible</u>: el principal aporte de la nanotecnología en este campo es el aumento de la rapidez, a través de un proceso catalítico, en el proceso de reacción que da energía a la pila, así como una mejorar de su rendimiento.

1.4 Métodos de fabricación

Hacer una descripción de los mecanismos de fabricación nos lleva necesariamente a distinguir dos grandes estrategias de aproximarse al diseño nanotecnológico:

- Metodología de arriba-abajo (top-down): con esta técnica nos acercamos a la construcción de nanoestructuras miniaturizando procesos existentes con anterioridad en la microescala. El material de partida se va reduciendo hasta tener un tamaño nanométrico.
- Metodología de abajo-arriba (bottom-up): este método de fabricación construye las nanoestructuras mediante la agregación de elementos menores, como átomos y moléculas. Se va aumentando el tamaño de la muestra hasta alcanzar las dimensiones propias de los nanomateriales.



Figura 6. Metodologías top-down y bottom-up.

La *Tabla 3* muestra las principales características de ambos métodos.

Metodología	Características
Top-down	 Barata Producción a gran escala Ampliamente conocida Rápida implementación Poco flexible
Bottom-up	 Versátil Productos de alta pureza Gran control del tamaño de las partículas Técnica más reciente, por lo que presenta algunos problemas que tienen que ser resueltos Costosa

Tabla 3. Características de las metodologías top-down y bottom-up.

Dentro de ambas metodologías existen varias técnicas de fabricación que difieren en algunos aspectos que las hacen más o menos convenientes dependiendo del nanomaterial que queramos obtener. Una diferencia importante en estas metodologías se basa en si existe una transformación química o física.

En este trabajo se utilizará un **conducto (reactor)** de alta presión con forma de *tubo de Venturi* invertido, es decir, una entrada divergente y una salida convergente, como el de la *Figura 7*, donde se producirá la reacción química que sintetice los nanomateriales. Por este conducto circulará un flujo de **CO**₂ en condiciones supercríticas que servirá como medio de reacción. Como veremos más adelante, la forma de este conducto será un aspecto clave para obtener el producto deseado.



Figura 7. Forma del conducto utilizado para la fabricación de nanomateriales.

1.4.1 Fluidos supercríticos

Se denomina *fluido supercrítico* (SCF) a una sustancia que se encuentra por encima de su *presión y temperatura crítica*, P_c y T_c . En estas condiciones las fases líquido y vapor son indistinguibles. La *Figura 8* muestra el diagrama de fases para el dióxido de carbono (CO₂) en la cual se representa la curva de equilibrio entre las fases líquido-vapor. Esta curva termina en el *punto crítico* (T_c , P_c), C, a partir del cual la sustancia pasa a condiciones supercríticas [20].



Figura 8. Diagrama de fases del CO₂.

La característica más importante de los fluidos supercríticos es que presentan propiedades intermedias entre los gases y los líquidos. Sus propiedades de transporte son similares a las de los gases (alta difusividad, baja viscosidad y tensión superficial muy baja), mientras que su poder de solvatación es próximo a la de los disolventes líquidos. Estas características les hace especialmente interesantes ya que variando sus condiciones de presión y temperatura podemos modificar fácilmente sus propiedades adaptándolos a una aplicación específica. La *Tabla 4* muestra una tabla comparativa de algunas propiedades físicas de los gases, líquidos y fluidos supercríticos.

Propiedad física	Gas	Fluido Supercrítico	Líquido
Densidad (g/cm ³)	(0,6-2,0)·10 ⁻³	0,2-0,9	0,6-1,6
Coef. Difusión (cm ² /s)	0,1-0,4	(0,2-0,7)· 10 ⁻³	(0,2-2,0)·10 ⁻⁵
Viscosidad (10 ⁻³ Pa·s)	(1-3)·10 ⁻²	(1-9)· 10 ⁻²	0,2-3,0

Tabla 4. Propiedades físicas de los gases, líquidos y fluidos supercríticos.

Debido a esta combinación de propiedades, los fluidos supercríticos pueden ser utilizados como disolventes en procesos de síntesis de materiales con mejores propiedades de transporte que los disolventes convencionales.

Una propiedad muy importante de los fluidos en condiciones supercríticas es la densidad, la cual puede ser similar a la de los gases o a la de los líquidos, según la aplicación para la que están siendo utilizados. Estas variaciones de densidad pueden lograrse fácilmente con ligeras variaciones de presión y temperatura, como se muestra en la *Figura 9*.



Figura 9. Variación de la densidad reducida (p/p_c) en función de la presión reducida (p/p_c) para distintas isotermas.

Como la solvatación de una sustancia está relacionada con su densidad, los fluidos supercríticos nos ofrecen un amplio abanico de posibilidades, permitiendo aumentar o disminuir esta propiedad permitiendo disoluciones o precipitaciones de solutos. La *Figura 10* compara la situación de una molécula solvatada en un disolvente gaseoso, liquido o utilizando un fluido en condiciones supercríticas.



Figura 10. Capacidad de solvatación en función del medio disolvente (gas, líquido o fluido supercrítico)

De entre todos los fluidos supercríticos empleados en la industria, el **CO**₂ **supercrítico** es el más utilizado. Fue el primero en implantarse sustituyendo a los disolventes orgánicos convencionales más tóxicos. Sus parámetros críticos son de fácil acceso (T_c =304,1 K, P_c =7,4 MPa), es inocuo, barato e incombustible, lo que le hace un disolvente no muy agresivo desde el punto de vista ambiental. Otra característica importante del CO₂ supercrítico es que su temperatura de operación es próxima a la temperatura ambiente, lo que le convierte en un medio de reacción ideal para *compuestos termolábiles* (materiales que se degradan o modifican sus propiedades por la acción del calor). Tras su uso, el CO₂ supercrítico puede ser liberado a la atmósfera o puede ser reciclado.

El CO₂ supercrítico es una sustancia apolar, por lo que no puede disolver moléculas apolares. Para mejorar la solubilidad de compuestos polares se suele hacer uso de *cosolventes* (sustancia que añadida al fluido supercrítico mejorar sus capacidades como disolvente).

Por todo esto, el CO₂ en condiciones supercríticas puede ser utilizado como disolvente o como medio de reacción en los procesos de fabricación de nanomateriales. En la *Tabla 5* se muestran algunos procesos de fabricación de nanomaterailes que utilizan CO₂ supercrítico, así como si tiene lugar una transformación química o física [16].

Transformación	Técnica	Función del CO2 SC	
	RESS	Disolvente	
	SAS	Antidisolvente	
Física	SAA	Medio atomizante	
	PGSS	 Soluto en formación de partículas a partir de disoluciones saturadas de gas 	
Química	SCFD	DisolventeFuente de carbonoFuente de oxígeno	

Tabla 5. Técnicas utilizadas en la fabricación de nanomateriales usando CO₂ supercrítico.

1.5 Tiempos de residencia y generación entrópica

1.5.1 Tiempos de residencia

Uno de los aspectos clave a la hora de fabricar nanomateriales es controlar el tamaño de las partículas que queremos obtener, ya que sus propiedades dependerán mucho de este factor. Una de las variables que tiene una fuerte influencia en este factor es el tiempo que permanecen estas partículas en el interior del conducto (reactor) en el cual tiene lugar el proceso de síntesis de nanomateriales, también llamado **tiempo de residencia**.

Para conocer este parámetro necesitamos saber cómo fluye el material dentro del reactor. Para hacer esto exactamente tendríamos que medir las fluctuaciones de velocidad del material en todos los puntos del reactor. Esto en la práctica es impracticable. Para poder estudiar el comportamiento en el interior del reactor se utiliza lo que se denomina *métodos de trazador (tracer method)*.

Con el método del trazador, introducimos en el flujo entrante un trazador (Kg/m³), como puede ser la tinta, que siga exactamente las líneas de corriente del fluido. Realizando medidas de la concentración del trazador a la salida del conducto podemos obtener una curva denominada **distribución de tiempos de residencia** (*RTD*, *Residence-Time Distribution*), como la de la *Figura 11*. Es una curva de densidad de probabilidad que nos aporta información acerca del porcentaje de partículas que permanecen un cierto tiempo dentro del conducto [31].



Figura 11. Curva RTD para una entrada del tipo impulso.

El análisis de estos resultados nos aporta información sobre lo que ocurre dentro del reactor, como por ejemplo la existencia de zonas muertas o zonas de recirculación en los cuales el tiempo de residencia de las partículas es superior a las de la media.

Para realizar un estudio con esta técnica existen varios métodos de introducir el trazador en el reactor, pero los más utilizados son: como un *pulso* o como una *entrada escalón*. De la curva RTD se pueden extraer los siguientes valores:

- La edad media, \bar{t} : nos aporta el valor medio de la distribución, es decir, el tiempo de residencia medio que pasan las partículas dentro del conducto.
- La varianza, σ^2 : mide la amplitud de la curva, es decir, nos da una idea de la cantidad de partículas que se desvían del valor medio.

Cada tipo de nanomaterial tendrá un valor de \overline{t} propio que dependerá de su utilidad y método de fabricación. Este valor puede calcularse con la *Ecuación* 1:

$$\bar{t} = \frac{V}{v}$$

Ecuación 1. Edad media del fluido.

donde,

V: volumen del reactor

v: caudal de entrada

Por lo tanto, variando el volumen del conducto y el caudal de entrada del CO₂ podremos obtener unos valores u otros de la edad media.

El aspecto clave en este trabajo es tratar que el mayor número de partículas estén lo más próximas al valor de \bar{t} . Como ya se ha dicho, esto se consigue haciendo que la varianza de la curva RTD se lo más estrecha posible, ya que si es demasiado ancha tendremos un mayor número de partículas fuera del rango de valores admisibles para su tamaño, lo cual sería un problema ya que las partículas no cumplirían la función para la que fueron diseñadas. Todo esto se consigue a través de la optimización de la forma del conducto.

1.5.2 Generación entrópica

Uno de los principales factores que hace que la varianza de la curva RTD aumente es la presencia de zonas de recirculación dentro del conducto, en las cuales las partículas se quedan "dando vueltas" dentro de esta zona antes de salir del conducto, aumentado considerablemente el tiempo de residencia. Un factor que tiene una alta influencia en la formación de estas zonas de recirculación es el cambio brusco en la sección por la que circula el fluido, por lo que habrá que tratar de suavizar estos cambios.

Una característica muy importante de las zonas de recirculación es que son zonas donde se pierde energía mecánica debido a la **generación de entropía**, por lo que hacer un estudio de esta generación entrópica puede resultar muy útil a la hora de encontrar la forma óptima del conducto para que cumpla con las especificaciones para las que fue diseñado. Una disminución de la generación de entropía implica una disminución de zonas de recirculación (o su total ausencia), y con ello una disminución de la varianza. Por lo tanto, realizar un estudio tanto de la varianza como de la generación entrópica será de mucha utilidad a la hora de optimizar la forma del conducto.

1.6 Justificación de Trabajo Fin de Grado

El tamaño de las nanopartículas es uno de los factores más importantes a la hora de fabricarlas. Gran parte de sus características depende de este factor. Dependiendo de la utilidad que se le vaya a dar a estas partículas, el tamaño de estas será de un valor u otro.

Garantizar que el mayor número de partículas cumplen con el tamaño deseado en cualquier proceso de fabricación es de vital importancia para asegurar una buena eficiencia del proceso, ya que si un porcentaje considerable de partículas no cumplen con el tamaño deseado, parte de la producción tendrá que ser desechada, trayendo consigo una pérdida económica y de tiempo.

Realizar un estudio de este proceso a través de los programa CFD (*Computational Fluids Dynamics*) permite obtener formas óptimas de reactores donde se fabriquen nanopartículas que aseguren una buena eficiencia del proceso y un alto porcentaje de producto útil, con un tiempo y coste relativamente bajos.
CAPÍTULO 2 OBJETIVOS

2 OBJETIVOS

El objetivo principal de este trabajo fin de grado es la optimización de forma de un conducto por el cual circula dióxido de carbono presurizado utilizando el segundo principio de la termodinámica. Para conseguir este objetivo global se plantean los siguientes subobjetivos:

- 1) Parametrización de los ángulos de entrada y salida del conducto de los cuales dependerá la dirección del flujo en su interior, así como la posible formación de zonas de recirculación. Estas características influyen directamente en la varianza de la curva RTD, y por lo tanto, en el tamaño de las partículas.
- 2) Implementación de un modelo CFD que reproduzca con fidelidad el proceso físico que ocurre en el interior del conducto. Escoger un modelo físico adecuado así como la elección de sus parámetros es un paso vital a la hora de realizar simulaciones en CFD, ya que todos los valores de las variables que deseamos obtener dependerá de ello.
- 3) Implementación de un algoritmo de optimización a partir de la variación de los valores de los ángulos de entrada y salida. Este paso es clave para obtener los valores de los ángulos más adecuados que minimicen la generación de entropía.
- **4)** Análisis de resultados que nos permitan obtener unas conclusiones acerca de que geometría es la más idónea para la fabricación de nanomateriales.

CAPÍTULO 3 DESARROLLO DEL TFG

3 DESARROLLO DEL TFG

3.1 Modelo físico

3.1.1 Ecuaciones de conservación

Las ecuaciones que describen un problema fluido son las *ecuaciones de transporte*. Todas ellas se obtienen a partir de una *ecuación general de conservación*, *Ecuación 2*, donde Ø es una variable cualquiera [3]:

$$\frac{\partial(\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{\emptyset})}{\partial t} + \nabla(\boldsymbol{\rho}\cdot\boldsymbol{\emptyset}\cdot\vec{\boldsymbol{\nu}}) - \nabla(\boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{\emptyset}}\cdot\nabla\boldsymbol{\emptyset}) - \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{\emptyset}} = \boldsymbol{0}$$

Ecuación 2. Ecuación general de conservación.

donde,

ρ: densidad del fluido de trabajo

 \vec{v} : campo de velocidades del flujo

A continuación se describen los términos de la *Ecuación 2*:

- El primer término de la ecuación representa el término transitorio. En el caso de régimen estacionario, su valor es cero.
- El segundo término representa la parte convectiva del problema, la cual depende de la dirección del flujo.
- El tercer término representa la parte difusiva, donde Γ_{ϕ} es el valor del coeficiente de difusión de la variable.
- El último término de la ecuación es el término fuente, que representa la generación o destrucción de Ø en el sistema material. Este término depende del fenómeno que se esté estudiando.

A partir de la *Ecuación 2* obtendremos el resto de ecuaciones de transporte que rigen el flujo de nuestro problema.

<u>Ecuación de conservación de la masa o ecuación de continuidad</u>: establece que la variación de masa dentro de un volumen de control fijo es igual al flujo neto de masa que atraviesa las caras del volumen de control. Utilizando la *Ecuación 2* y dando los siguientes valores (Ø=1; Γ_φ=0; S_φ=0), obtenemos la ecuación de conservación de masa o de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla (\rho \cdot \vec{v}) = 0$$

Ecuación 3. Ecuación de continuidad.

• <u>Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento</u>: esta ecuación, también conocida como *ecuación de Navier-Stokes*, determina el campo de velocidades del flujo. De forma análoga a la ecuación de continuidad y dando los siguientes valores ($\emptyset = \vec{v}$; $\Gamma_{\varphi} = \mu$; $S_{\varphi} = -\nabla P + \rho \cdot \vec{f}_m$), obtenemos la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento:

$$\frac{\partial(\boldsymbol{\rho}\cdot\vec{v})}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\rho}\cdot\vec{v}\cdot\vec{v}) = \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{\nabla}\vec{v}) - \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{P} + \boldsymbol{\rho}\cdot\vec{f}_m$$

Ecuación 4. Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento.

donde,

P: presión estática correspondiente a un fluido en reposo μ: coeficiente de difusividad de la cantidad de movimiento o viscosidad dinámica f_m: fuerzas másicas que actúan sobre el volumen fluido (la gravedad en nuestro caso)

 <u>Ecuación de la conservación de la energía</u>: esta ecuación es necesaria cuando trabajamos con fluidos reales en movimiento(µ≠0), incluso cuando no exista un flujo de calor externo, ya que el rozamiento entre capas que llevan distinta velocidad realizan trabajo sobre el propio fluido aportando calor. Además, puede haber transferencia o generación de calor en el volumen fluido. Dando los siguientes valores (Ø=h; $\Gamma_{\Phi}=\frac{k}{C_{p}}$; $S_{\Phi}=S_{h}$) obtenemos la ecuación de conservación de la energía:

$$\frac{\partial(\rho \cdot h)}{\partial t} + \nabla(\rho \cdot \vec{v} \cdot h) = \nabla\left(\frac{k}{c_p} \cdot \nabla h\right) + S_h$$

Ecuación 5. Ecuación de conservación de la energía.

donde,

 $\frac{k}{c_p}$: es la difusividad térmica, donde k es el coeficiente de conductividad y c_p es el calor específico a presión constante

S_h: representa el calor generado por una reacción química o por cualquier otra fuente de calor volumétrica definida

<u>Ecuación de conservación de los escalares</u>: una de las partes más importantes de este trabajo es calcular la varianza de la curva RTD a la salida del conducto. Para ello, necesitamos primero conocer los *edad media del fluido* (primer momento de la distribución, m₁) y su varianza (segundo momento de la distribución, m₂). Para calcular estos momentos aplicaremos la ecuación general de conservación, *Ecuación 2*, a los escalares *m1* y *m2* dando los siguientes valores [24]:

Valores para el escalar m1:

- Ø=m1
- $\Gamma_{m1}=\mu_t/0,7$ (donde μ_t es la viscosidad turbulenta)
- S_{m1}=ρ

$$\frac{\partial(\rho\cdot m_1)}{\partial t} + \nabla(\rho\cdot \vec{v}\cdot m_1) = \nabla\big(\Gamma_{m_1}\cdot \nabla m_1\big) + \rho$$

*Ecuación 6. Ecuación de conservación del escalar m*¹ (edad del fluido).

Valores para el escalar m2:

- Ø=m2
- Γ_{m1}=μ_t/0,7
- $S_{m1}=2 \cdot \rho \cdot m1$

$$\frac{\partial(\rho \cdot m_2)}{\partial t} + \nabla(\rho \cdot \vec{v} \cdot m_2) = \nabla \big(\Gamma_{m_2} \cdot \nabla m_2 \big) + 2 \cdot \rho \cdot m_1$$

Ecuación 7. Ecuación de conservación del escalar m₂ (varianza).

Las ecuaciones de conservación de masa, energía, m_1 y m_2 son ecuaciones escalares *(Ecuaciones 3, 5, 6 y 7)*, mientras que la ecuación de cantidad de movimiento *(Ecuación 4)* es vectorial. En este último caso, tendremos una ecuación por cada dimensión espacial en la que se va a desarrollar nuestro problema.

Para la resolución de estas ecuaciones se asumen las siguientes hipótesis:

- Densidad ρ del flujo de CO₂ constante (fluido incompresible).
- Viscosidad µ del flujo de CO₂ constante.

3.1.2 Modelo de turbulencia

Todos los flujos que encontramos en la práctica, incluso los más simples, se vuelven inestables a partir de cierto número de Reynolds ($Re = \frac{\rho \cdot v \cdot L}{\mu}$, donde L es una longitud característica del problema, en nuestro caso el diámetro de entrada al conducto), es decir, la uniformidad y continuidad de las variables (*flujo laminar*) se vuelven caóticas e impredecibles (*flujo turbulento*). La mayoría de los flujos de interés tecnológico resultan ser turbulentos (cámaras de combustión, intercambiadores, turbomáquinas, reactores químicos, flujo en tuberías...). Dado que la turbulencia modifica significativamente parámetros como la resistencia a fricción, transmisión de calor o la fluctuación de la velocidad y otros escalares, es importante tenerla en cuenta y saber cómo caracterizarla.

No existe una definición exacta de la turbulencia, sin embargo, existe una serie de propiedades destacadas que poseen los flujos turbulentos. Estas características son las siguientes:

- Los flujos turbulentos son irregulares, caóticos e impredecibles, tanto en el espacio como en el tiempo, por lo que el uso de la estadística es muy frecuente a la hora de estudiarlos.
- Tiene lugar a altos números de Reynolds. Para cada problema existe un valor crítico del Reynolds a partir del cual el flujo pasa de ser laminar a turbulento. Esta transición suele darse cuando aparecen irregularidades en los flujos laminares y la solución de las ecuaciones de transporte se vuelven inestables a partir del Reynolds crítico.
- Los movimientos turbulentos son siempre rotacionales y tridimensionales.
- Los flujos turbulentos son disipativos. El flujo turbulento tiende a mantenerse, aunque para ello necesita aporte de energía. Esta energía la extrae de la energía cinética del propio flujo y la invierte en aumentar la energía interna (aumento de temperatura) mediante procesos de deformación de las partículas fluidas. Esta energía térmica no es aprovechable, de ahí que sean procesos disipativos de energía.
- Los fenómenos de transporte (difusividad másica, viscosidad y difusividad térmica) se incrementan. Esto se debe a las fluctuaciones del movimiento turbulento.

Como ya se ha dicho, la turbulencia es un proceso en el que se produce una disipación de energía (transformación de energía mecánica en energía térmica no aprovechable). Este proceso se produce a través de las distintas escalas en las que los torbellinos se desarrollan en un flujo turbulento, es lo que se denomina *cascada de energía*. Los torbellinos más grandes son los que extraen la energía de la corriente, con un tamaño comparable a las dimensiones del flujo, es la denominada *macroescala*. Estos torbellinos tienden a dividirse en otros más pequeños a los cuales se les cede la energía, lo que llamamos *escala intermedia*. Hasta ahora, la disipación de energía es mínima. Por último, los torbellinos de la escala intermedia se dividen en otros más pequeños, correspondientes a *la microescala*, o *microescala de Kolmogorov*. Es en este último proceso es donde existe un sumidero de energía, es decir, donde se transforma en calor toda la energía transportada desde la macroescala. Es aquí donde se disipa la energía del flujo.

La turbulencia, por compleja que sea, sigue estando gobernada por las ecuaciones de Navier-Stokes, aunque a día de hoy no es posible su resolución debido a que es una ecuación en derivadas parciales altamente no-lineal, para la cual no existen métodos que obtengan una solución exacta En los últimos años y gracias al desarrollo de algoritmos específicos y ordenadores capaces de resolverlos, ha habido un gran avance en su resolución numérica, es lo que se conoce como **mecánica de fluidos computacional** (*CFD*, *Computational Fluids Dynamics*).

Dependiendo el grado de resolución que queramos alcanzar, usaremos una técnica u otra. Estas diferencias de precisión y el modo en el que resolvamos las ecuaciones de Navier-Stokes dan lugar a distintos modelos de turbulencia, cada uno de los cuales tendrá unas características propias que los harán más o menos adecuados para el problema que se quiere resolver. A continuación se describen los principales modelos utilizados para resolver la turbulencia.

• Simulación numérica directa (DNS, Direct Numerical Simulation)

Es la manera más precisa de predecir el flujo turbulento, sin promediados ni aproximaciones. No se realiza modelo de ninguna escala, sino que se resuelven todas ellas, tanto temporales como espaciales (*Figura 12*). Los únicos errores existentes en el cálculo son los debidos a los errores procedentes de las discretizaciones numéricas.

En contrapartida a su alto grado de precisión, tiene un elevado coste computacional, por lo que su uso está restringido a geometrías de flujo sencillas y con bajos números de Reynolds. Se utiliza principalmente en laboratorios y en campos de investigación.



Figura 12. Simulación numérica directa (DNS). a) Modelado DNS de los torbellinos.b) Valores de las velocidades instantáneas utilizando el método DNS.

• Simulación de torbellinos grandes (LES, Large Eddy Simulation)

Los remolinos pequeños tienen un comportamiento isotrópico, mientras que los remolinos más grandes presentan anisotropía y su comportamiento está directamente relacionado con la geometría del problema. Debido a esto, el modelo LES filtra las pequeñas escalas, las cuales son modeladas con una viscosidad de subescala, y resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes para los torbellinos de mayor escala con valores en función del tiempo (*Figura 13*).



Figura 13. Simulación de torbellinos grandes (LES). *a)* Modelado LES de los torbellinos. *b)* Valores de las velocidades instantáneas utilizando el método LES.

Aunque el filtro espacial elimina las escalas más pequeñas, lo cual disminuye el coste computacional, este sigue siendo bastante elevado en comparación con el modelo RANS (explicado a continuación) ya que el tiempo de simulación tiene que ser relativamente alto para obtener resultados estables. La precisión de este método es menor que la simulación DNS, pero el coste computacional es menor también.

 Promediado de Reynolds de las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS, Reynolds Average Navier-Stokes)

Se trata de la técnica a nivel industrial más utilizada, debido a sus buenos resultados con costes de computación relativamente bajos. Por estas razones ha sido el **modelo empleado en este trabajo**.

Este modelo trabaja con los valores promediados en el tiempo de las variables fluidas utilizando lo que se conoce como *descomposición de Reynolds*:

$$\emptyset(\boldsymbol{t}) = \overline{\emptyset} + \emptyset'(\boldsymbol{t})$$

Ecuación 8. Descomposición de Reynolds.

donde,

(*t*): valor de la variable fluida dependiente del tiempo $\overline{\phi}$: valor de la variable fluida promediada en el tiempo $\phi'(t)$: valor fluctuante en el tiempo de la variable fluida



Figura 14. Medida puntual típica en un flujo turbulento

El valor medio $\overline{\emptyset}$ se define de la siguiente manera:

$$\overline{\emptyset} = \frac{1}{t} \int_{0}^{\Delta t} \emptyset(t) \cdot dt$$

Ecuación 9. Ecuación de promediado en el tiempo.

Para caracterizar el valor de las fluctuaciones turbulentas $\phi'(t)$ en torno al valor medio $\overline{\phi}$ se utilizan términos estadísticos como la varianza o la media cuadrática. La *Figura 15* muestra una comparación entre los modelos DNS, LES y RANS.





Cuando se utilizan los valores promediados en el tiempo y se introducen en las ecuaciones de conservación, aparecen nuevos términos que tienen que ser calculados con ecuaciones adicionales. Los modelos RANS más comunes se clasifican en función de las ecuaciones adicionales introducidas. Estos se resumen en la *Tabla 6* [15]:

Modelo	Ecuaciones adicionales	Características y Aplicaciones
Mixing Length Model	0	Robusto. Buenas predicciones para capas delgadas: chorros, capa límite
Spalart-Allmaras Model	1	Desarrollado para flujos aerodinámicos. También utilizado en turbomáquinas.
k-ɛ Model	2	Modelo de aplicación general.
k-ω Model	2	Bajos números de Reynolds, flujos compresibles, contornos de pared.
Algebraic Stress Model (ASM)	2	Bajo coste computacional. Explota algunas de las ventajas del modelo k- ε y el RSM.
Reylnolds Stress Model (RSM)	7	Flujos complejos, con alta turbulencia y rotación. Modelo RANS más completo.

Tabla 6. Características de los principales modelos RANS.

Como ya se ha dicho, los modelos RANS trabajan con los valores promediados en el tiempo, los cuales sustituyen a los valores instantáneos de las variables en las ecuaciones de flujo. Al hacer esta sustitución, aparecen nuevos términos que involucran el producto de las fluctuaciones de las velocidades. Estos términos adicionales, los cuales reflejan los esfuerzos introducidos por la turbulencia en el flujo medio, son seis y se pueden representar en un tensor simétrico de orden 2 denominado *tensor de tensiones de Reynolds*, τ_{ij} .

Dependiendo del modelo escogido, el tensor de Reynolds se modelará de una forma u otra. Uno de los modelos RANS más utilizados es el k- ε (modelo utilizado en este trabajo), el cual asume que existe una analogía entre la acción de los esfuerzos viscosos y el tensor de Reynolds. Los esfuerzos viscosos vienen dados por la *ley de viscosidad de Newton*, *Ecuación 10*:

$$\tau_{ij} = \mu \cdot \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

Ecuación 10. Ley de la viscosidad de Newton.

donde,

μ: viscosidad dinámica (o molecular) propia del fluido

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}$$
: ratio de deformación de la partícula fluida

Para modelar el tensor de tensiones de Reynolds se suele utilizar la *hipótesis de Boussinesq, Ecuación 11,* según la cual el tensor de Reynolds es proporcional al índice de deformación de una partícula fluida:

$$\tau_{ij} = \mu_t \cdot \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\rho k \delta_{ij}$$

Ecuación 11. Hipótesis de Boussinesq.

donde,

 $μ_t$: viscosidad turbulenta (característica del flujo) U: velocidad promediada k: energía cinética turbulenta $δ_{ij}$: delta de Kronecker

Como se observa, aparecen dos nuevos términos, la *viscosidad turbulenta* y la *energía cinética turbulenta*. En el siguiente apartado se explicará cómo se obtienen estos términos utilizando el modelo k- ϵ .

3.1.2.1 Modelo k-ε

Este modelo utiliza dos ecuaciones en derivadas parciales adicionales para modelar la viscosidad turbulenta, una ecuación de transporte para la *energía cinética turbulenta k*, y otra para el *índice de disipación turbulenta ɛ*. Estas dos nuevas ecuaciones puede resolverse una vez resuelto el campo de velocidades (*Ecuación 4*). Una vez obtenidos estos términos se puede modelar la viscosidad turbulenta a partir de la *Ecuación 12*:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

Ecuación 12. Modelado de la viscosidad turbulenta.

donde C_{μ} es una contante adimensional obtenida a partir de la experimentación cuyo valor es 0,09.

Dentro del modelo k- ε podemos encontrar tres métodos distintos (RNG *k-\varepsilon model, Realizable k-\varepsilon model y Standard k-\varepsilon model), los cuales tienen características similares a la hora de calcular <i>k* y ε , pero que difieren en algunos aspectos. Las mayores diferencias son las siguientes:

- La forma de calcular la viscosidad turbulenta
- El número de Prandtl utilizado en la difusión turbulenta para k y ε
- El término de generación y destrucción en la ecuación de ε

En ingeniería, interesa que el modelo tenga un coste computacional bajo y que proporcione resultados satisfactorios. Por esto, el modelo que se implementara en nuestro problema particular será el **modelo turbulento** *k*-*ɛ Standard*.



Figura 16. Comparación del tiempo de cálculo y la precisión obtenida para los distintos modelos turbulentos.

3.2 Modelo numérico

Las ecuaciones de conservación presentadas en el apartado anterior tienen una solución exacta para problemas ideales o simplificados en los que algunos de los parámetros presentes en la ecuación de Navier-Stokes pueden eliminarse. Para casos reales (presencia de coeficientes de difusividad, turbulencia, geometrías de flujo complejas...) la resolución se hace imposible a día de hoy debida a la complejidad de las ecuaciones.

La *dinámica de fluidos computacional* o **CFD** (Computational Fluids Dynamics) está estructurada alrededor de unos algoritmos numéricos que abordan los problemas fluidos. Todos los códigos de CFD contienen tres elementos principales: *un pre-procesador, un procesador y un post-procesador.*

Pre-procesador

Este paso consiste en introducir en el programa CFD las variables y datos conocidos de nuestro problema a través de su interfaz, para que posteriormente las utilice el procesador. Los datos a introducir en este paso son generalmente los siguientes:

- Definición de la geometría en la región de interés, lo que se conoce como dominio computacional.
- Generación de una malla: este paso divide el dominio en un número determinado de volúmenes de control (celdas), donde se resolverán numéricamente las ecuaciones de conservación.
- Selección del fenómeno físico-químico que necesitamos modelar.
- Definición de las propiedades fluidas.
- Especificación de unas condiciones de contorno apropiadas.

Procesador

Existen tres métodos distintos para resolver numéricamente las ecuaciones que gobiernan el flujo: *diferencias finitas, elementos finitos y métodos espectrales*. Uno de los métodos más empleado es el **método de volúmenes finitos (MVF**, *Method Volume Method*), el cual es una formulación especial de las diferencias finitas.

El procesador utiliza algoritmos numéricos basados en iteraciones para resolver las ecuaciones en derivadas parciales (ecuaciones de transporte) a través de la conversión a ecuaciones algebraicas.

Los algoritmos numéricos constan de los siguientes pasos:

- Integración de las ecuaciones de conservación del flujo en todos los volúmenes de control del dominio (celdas). Tendremos una ecuación integrada por cada celda existente.
- Discretización de estas ecuaciones, es decir, conversión de una ecuación diferencial a una ecuación algebraica como resultado del proceso de integración. Obtenemos un sistema algebraico con tantas ecuaciones como celdas en nuestro dominio.
- Resolución del sistema algebraico mediante métodos iterativos (Jacobi y Gauss-Seidel, principalmente).

Post-procesador

En este último paso, se muestran los resultados obtenidos. Existe una gran variedad de opciones de visualización en función de los datos que queramos representar y el modo en el que queremos hacerlo, como por ejemplo:

- Visualización de nuestro dominio y el mallado utilizado.
- Trazas vectoriales.
- Contornos de líneas o contornos coloreados.
- Superficies 2D o 3D
- Seguimiento de partículas
- Manipulación visual (traslación, rotación, escalas...)

El **software de CFD escogido** para la resolución de este trabajo ha sido **ANSYS 2022 R2**, el cual emplea el **MVF** y es uno de los más utilizados a nivel industrial.

El software ANSYS 2022 R2 ofrece dos métodos numéricos para resolver el problema:

- Pressure-based solved (PBS)
- Density-based solved (DBS)

Ambos métodos emplean el método MVF para discretizar el dominio, pero difieren en la linialización y resolución de las ecuaciones discretizadas.

Históricamente, la técnica PBS fue desarrollada para flujos incompresibles a bajas velocidades, mientras que la técnica DBS fue usada para flujos compresibles a altas

velocidades. Hoy en día, ambos métodos se han reformulado para ser utilizados en un rango más amplio de flujos.

En ambos métodos el campo de velocidades es resuelto a partir de las ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento y de continuidad. Con la técnica DBS, la ecuación de continuidad es usada para obtener el campo de densidades, y una vez obtenido, usarlo junto con la ecuación de estado para calcular el campo de presiones.

Por otro lado, la técnica PBS estima un campo de presiones inicial y resuelve una ecuación de corrección para la presión, la cual es obtenida utilizando las ecuaciones de momento y continuidad.

En ambos métodos se resuelven las ecuaciones de momento y continuidad, y cuando sea necesario, otras ecuaciones, como la de energía, especies y cualquier otro escalar.

La técnica utilizada en este trabajo ha sido la PBS, la cual se explicara con más detalle en el siguiente apartado.

3.2.1 Acoplamiento presión-velocidad

En el caso de que el campo de velocidades sea desconocido (como en la mayoría de casos prácticos), las ecuaciones de cantidad de movimiento y la de continuidad están acopladas, es decir, que se tienen que resolver de manera conjunta. El principal problema reside en el papel que desempeña la presión, que aparecen en las ecuaciones de cantidad de movimiento, y para la cual no disponemos de una ecuación de transporte. El método basado en la presión (PBS) resuelve este problema formulando una ecuación para la presión. A continuación se explica más detalladamente este método.

Pressure-Based Solver (PBS)

Este método alcanza las condiciones de conservación de masa del campo fluido resolviendo una **ecuación para la presión** (**ecuación de corrección de la presión**). Esta ecuación se obtiene de las ecuaciones de continuidad y momento, de tal manera que el campo de velocidades obtenido, corregido por la presión, satisfaga la ecuación de continuidad. Debido a que las ecuaciones de transporte son no lineales y están acopladas unas a otras, la resolución se basa en procesos iterativos.

La ecuación para presión se obtiene a partir de la estimación de un campo de presiones inicial, a partir del cual se resuelven las ecuaciones de movimiento. Una vez obtenidos los valores de velocidad en función de ese campo de presiones iniciales, se

introducen estos valores de velocidad en la ecuación de continuidad y esta nos da una ecuación para la corrección de la presión. Repetimos el proceso con los valores de presión corregidos hasta alcanzar un criterio de convergencia adecuado. La obtención de esta ecuación de corrección para la presión es el camino para acoplar la velocidad y la presión de manera que ambas satisfagan la ecuación de cantidad de movimiento y de continuidad.

Dos algoritmos basados en la presión están disponibles en ANSYS 2022 R2, el algoritmo segregado y el acoplado. El **algoritmo segregado** resuelve el problema secuencialmente las ecuaciones de cada variable (u, v, w, P, T...). Cada ecuación, mientras se resuelve, es "desacoplada" o "segregada" de las otras ecuaciones. El algoritmo segregado requiere de poca memoria ya que las ecuaciones discretizadas se almacenan una sola vez. En contrapartida, la convergencia del método es lenta.

Por otro lado tenemos el **algoritmo acoplado**, el cual resuelve las ecuaciones de momento y la ecuación de continuidad basada en la presión de manera acoplada. El resto de ecuaciones se resuelven de manera desacoplada como si fuese un algoritmo segregado. Debido a que las ecuaciones de momento y continuidad son resueltas de manera acoplada, la convergencia del método mejora respecto al algoritmo segregado. Sin embargo, el coste de memoria es mayor, ya que tiene que almacenar tanto las ecuaciones de momento como la de continuidad, mientras que en el segregado solo almacenaba una, la ecuación que resuelve en cada momento.La *Figura 17* muestra el algoritmo utilizado por cada uno de los dos métodos.



Figura 17. Algoritmos utilizados por los métodos basados en la presión.

En la *Tabla 7* se muestran los algoritmos basados en la presión disponible en ANSYS 2022 R2.

Algoritmo	Características	Segregado/Acoplado
SIMPLE	 Algoritmo básico de acoplamiento presión-velocidad. Robusto. 	Segregado
SIMPLEC	 Algoritmo mejorado respecto al SIMPLE. Resuelve una ecuación discreta para la presión en lugar de la corrección para la presión. 	Segregado
PISO	 Calcula los campos de presión y velocidad mediante un paso predictivo y dos correctores. Mejorado respecto al SIMPLE. Adecuado para flujos transitorios. 	Segregado
Coupled	 Robusto y eficiente. Adecuado para flujos estacionarios. 	Acoplado

 Tabla 7. Algoritmos de acoplamiento presión-velocidad disponible en ANSYS 2022 R2.

El **algoritmo escogido** para este trabajo ha sido el **Coupled**, debido a su buena convergencia y los buenos resultados obtenidos para tiempos de cálculo relativamente bajos.

3.2.2 Mallado

Una malla es una cuadrícula computacional que discretiza el dominio físico en un número finito de celdas. En estas celdas, ya sea en las caras o en el centroide, se almacena el valor de las variables que queremos obtener.

La generación de la malla es una parte importante en la preparación de un modelo CFD. La elección de parámetros como la forma y tamaño de las celdas dependerá de ciertos factores como el tipo de flujo, la precisión requerida o la capacidad computacional disponible. Sea cual sea el tipo de malla hay una serie de requisitos básicos que deben cumplir todas para obtener unos buenos resultados. Estos requisitos son los siguientes:

- a) Se debe generar con cierta previsión del flujo a resolver.
- b) Se necesitará una mayor densidad de malla (mayor número de celdas) en aquellas zonas del dominio donde el gradiente de alguna variable vaya a ser grande.
- c) Hay que tratar de que sea lo más regular a lo largo del dominio.
- d) Deben evitarse celdas muy deformadas.
- e) Debe ajustarse a la capacidad computacional que se disponga.

El tipo de conectividad existente entre las celdas determina el tipo de mallado utilizado. Una clasificación básica del tipo de malla divide a estas en dos tipos: **mallas estructuradas** y **mallas no estructuradas**. A continuación se muestra una tabla con sus características:

Tipo de malla	Características	Ventajas	Inconvenientes
Estructurada	 Existen unas direcciones preferentes. 	 Buenos resultados para geometrías sencillas. Buenas precisión y tiempo de cálculo. 	• Aplicación limitada
No estructurada	 Carecen de una dirección preferente. Son las más utilizadas a nivel industrial. 	 Gran versatilidad Mayor capacidad de manipulación. 	• Peor precisión

 Tabla 8. Características de los distintos tipos de malla.

Para este trabajo **se ha empleado una malla híbrida,** la cual es estructurada en ciertas partes del dominio y no estructurada en otras. Se ha dispuesto de una malla estructurada con celdas cuadrilaterales en aquellas zonas que la geometría se puede adaptar a este tipo de malla y de una malla no estructurada con celdas triangulares en aquellas zonas cuya geometría está más distorsionada. La *Figura 18* muestra un ejemplo de este tipo de malla.



Figura 18. Ejemplo de malla híbrida.

Para realizar el mallado se ha empleado la herramienta **ANSYS Meshing** disponible en el ANSYS R2 2022. Utilizando una malla con las características descritas anteriormente se han generado **12.861 celdas** y **13.716 nodos**.

3.2.3 Esquemas de discretización

El software ANYS 2022 R2 utiliza el método de volúmenes finitos (MVF) para convertir las ecuaciones generales de conservación (ecuaciones en derivadas parciales, EDPs) en ecuaciones algebraicas que pueden ser resueltas numéricamente mediante algoritmos para obtener la solución. A este proceso se le denomina *discretización*.

El MVF consiste en integrar las ecuaciones de transporte en cada uno de los volúmenes de control (celdas) en los que se ha dividido el dominio computacional (malla). Por cada celda existente se obtiene una ecuación algebraica. Este proceso da lugar a un sistema de ecuaciones que expresa la ley de conservación en cada una de las celdas.

A continuación se muestra la ecuación general de conservación integrada en una celda arbitraria de volumen V para un tiempo de integración Δt .

$$\frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \int_{V} \left[\frac{\partial (\rho \cdot \emptyset)}{\partial t} + \nabla (\rho \cdot \vec{v} \cdot \emptyset) - \nabla (\Gamma_{\emptyset} \cdot \nabla \emptyset) \right] \cdot dV \cdot dt = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \int_{V} S_{\emptyset} \cdot dV \cdot dt$$

Ecuación 13. Forma integral de la ecuación general de conservación.

Las ecuaciones que se necesitan discretizar para este trabajo son la *Ecuaciones 3, 4 5, 6* y 7. Estas ecuaciones presentan términos espaciales y temporales que tienen que ser

discretizados, pero como nuestro caso de estudio se encuentra en régimen estacionario, el término temporal no será necesario resolverlo.

El término espacial presenta gradientes los cuales también serán necesarios discretizar para resolver el término convectivo y difusivo. Además, cuando se utiliza la técnica PBS disponemos de una ecuación adicional para la presión que también tiene que ser dicretizada espacialmente.

Por defecto, el software ANSYS 2022 R2 almacena los valores de la variables en los centroides de las celdas. Sin embargo, los valores en las caras son necesarios para resolver el término convectivo. Además, cuando el problema se resuelve utilizando la técnica PBS es necesario disponer del valor de ciertas variables en las caras. Este valor se interpola de los valores en los centroides de las celdas vecinas.

Dependiendo del tipo de interpolación utilizada dispondremos de diferentes tipos de esquemas de discretización, los cuales se resumen en la *Tabla 10*:

Aplicación	Fsquemas	Características	Disponibili	dad
			DBCS	PBS
	First-Order Upwind	• Valor en las caras igual al valor en el centroide de la celda aguas arriba.	Sí	Sí
	Second-Order Upwind	• Utiliza el valor del gradiente y el valor nominal de la celda aguas arriba.	Sí	Sí
Espacial	QUICK	 Requiere del valor de la variable en tres puntos aguas arriba. Sistema de orden tres. 	Cuando se resuelven ecuaciones adicionales	Sí
	Third-Order MUSCL	Sistema híbrido.Aplicable a cualquier tipo de mallado.	Sí	Sí
	Linear	 Utiliza la media aritmética de los centroides de las celdas adyacentes. 		
	Standard	Standard• Utiliza los coeficientes de las ecuaciones de momento discretizadas. • Funciona bien cuando la variación de presión en los centroides de las celdas es suave.Second Order• Similar al esquema Second-Order Upwind		
	Second Order			
Presión	Body Force Weighted	 Casos en los que se conocen las fuerzas másicas a priori. Asume que el gradiente normal entre la presión y las fuerzas másicas es constante. 	No	No
	PRESTO	 Disponible para todas las mallas. Utiliza el balance de la ecuación discretizada de continuidad en un volumen de control alrededor de la celda para obtener la presión. 		
	Green-Gauss Cell-Based	 Media aritmética de los valores en los centroides de las celdas vecinas 		
Gradientes	Green-Gauss Node-Based	 Media aritmética de los valores de los nodos en la cara. Adecuado para mallas no uniformes. Mayor coste computacional. 	Sí	
	Least Squares Cell-Based	 La solución varía linealmente. Precisión comparable al método Green-Gauss Cell-Basado en mallas irregulares, pero requiere de menor coste computacional. 		

Tabla 9. Esquemas de discretización.

A continuación se resumen los **esquemas escogidos para este trabajo** y el motivo de su elección:

Término espacial: Second Order Upwind

Los motivos por lo que se ha escogido este esquema es que aporta resultados precisos y además evita el problema de la *difusión numérica* numérica, el cual produce una falsa difusión en problemas puramente convectivos. Esquemas de orden superior aportan resultados parecidos pero con un tiempo de cálculo mayor, por lo que su utilización no aportaría ninguna ventaja significativa.

Término convectivo: Least Squares Cell Based

Este esquema es el que viene por defecto en ANSYS 2022 R2, proporcionando una buena precisión cuando utilizamos mallas estructuradas y no estructuradas como en nuestro caso.

Presión: Second Order

Este esquema proporciona mejor precisión respecto a los esquemas *Standard* y *Linear*, aunque la convergencia del método puede ser un poco peor, pero como nuestra geometría no excesivamente compleja esto no supone un problema.

3.2.4 Ley de la pared

Los flujos turbulentos están significativamente influenciados por la presencia de paredes. El campo de velocidades está afectado por la condición de no deslizamiento que tiene que cumplir en la pared. La turbulencia también está afectada por esta condición, ya que cuanto más cerca de la pared se encuentre el fluido, mayor será el amortiguamiento viscoso, el cual reduce las fluctuaciones tangenciales del fluido, mientras que el bloqueo cinemático reduce las fluctuaciones normales. A medida que nos alejamos de la pared, la turbulencia aumenta como consecuencia de la producción de energía turbulenta debido al gradiente de la velocidad media.

Se define como *capa límite* la zona cercana a la pared en la que los efectos viscosos son significativos. La forma en la que tratemos esta zona es importante ya que afectará en la fidelidad de los resultados numéricos, ya que las paredes son una de las principales fuentes de vorticidad y turbulencia, además de la existencia de elevados gradientes.

La capa límite puede dividirse en dos zonas: la *zona interior*, la cual a su vez se subdivide en tres subcapas, y la *zona exterior*.

División de la capa interna:

- <u>Subcapa laminar</u>: es la más cercana a la pared; el flujo es casi laminar; la viscosidad molecular juega un papel importante en las ecuaciones de transporte.
- <u>Subcapa logarítmica</u>: es la capa más externa dentro de la zona interior; el flujo es prácticamente turbulento.
- <u>Subcapa de enlace</u>: es una capa intermedia entre la viscosa y la logarítmica; tanto los efectos turbulentos como los viscosos son importantes.

Para caracterizar estas subcapas y limitar sus dimensiones, se utiliza el parámetro adimensional y^+ , que hace referencia a la distancia a la pared:

$$\mathbf{y}^{+} = \frac{\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{y}}{\boldsymbol{\mu}} \cdot \sqrt{\frac{\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{P}}}{\boldsymbol{\rho}}}$$

Ecuación 14. Parámetro adimensional que caracteriza las subcapas de la zona interna.

Existen dos formas de modelar la zona cercana a la pared:

- Wall Functions: la zona más cercana a la pared no se resuelve. En lugar de ello, fórmulas semi-empíricas son utilizadas para servir de enlace entre la zona laminar y turbulenta.
- Near Wall Model: los modelos turbulentos son modificados para resolver la zona laminar más cercana a la pared utilizando una malla más densa en la zona próxima a la pared.



Figura 19. Tratamientos de pared.

En el caso de que se escoja el modelo turbulento k- ε (como en nuestro caso), ANSYS 2022 R2 nos ofrece los siguientes tratamientos basados en los modelos *Wall Function* y *Near Wall Model* para modelar la región cercana de la pared:

- Standard Wall Functions
- Scalable Wall Functions
- Non-Equilibrium Wall Functions
- Enhanced Wall Treatment
- Menter-Lenchner
- Funciones de pared definidas por el usuario

En este trabajo se ha utilizado el tratamiento **Scalable Wall Functions** por ofrecer buenos resultados para cualquier tipo de malla. Además, la viscosidad del fluido de trabajo en nuestro problema es relativamente baja, por lo que los efectos de pared no serán muy significativos en el resultado final. Aun así, hay que tenerlos en cuenta si se quiere obtener una mejor precisión en los resultados.

3.2.5 Factores de subrelajación

En el método basado en la presión (PBS) es necesario utilizar factores de relajación en las ecuaciones de momento y presión que faciliten la convergencia de la solución.

Debido a la no-linealidad de las ecuaciones, es necesario controlar el cambio de la variable mediante esto factores de relajación, los cuales reducen la tasa de cambio de dicha variable durante las iteraciones.

De una manera simple, el nuevo valor de la variable \emptyset en una celda depende del valor obtenido en la iteración anterior, \emptyset_{old} , de la variación de la varaible, $\Delta\emptyset$, y del factor de subrelajación utilizado, α .

$$\emptyset = \emptyset_{old} + \alpha \cdot \Delta \emptyset$$

Ecuación 15. *Expresión del valor de la variable utilizando factores de subrelajación*.

En la siguiente tabla se muestran los valores de los **factores de sub-relajación escogidos en este trabajo**, los cuales son los valores por defecto que nos ofrece ANSYS 2022 R2:

Variable	Factor de sub-relajación
Presión	0,5
Momento	0,5
Densidad	1
Fuerzas másicas	1
Energía cinética turbulenta	0,75
Índice de disipación turbulenta	0,75
Viscosidad Turbulenta	1
Energía	0,75
Edad del fluido	1
Varianza de la edad	1

Tabla 10. Factores de sub-relajación.

3.2.6 Parámetros de operación

Los parámetros de operación que se van a emplear en este trabajo se muestran en la *Tabla 11:*

Fluido de trabajo	Dióxido de carbono (CO ₂)	
Densidad (kg/m³)	857,16	
Viscosidad (kg/m·s)	8·10 ⁻⁵	
Temperatura (k)	308	
Presión absoluta (bar)	100	
Intensidad turbulenta (%)	5	
Diámetro hidráulico (mm)	0,003	

Tabla 11. Parámetros de operación.

3.2.7 Resumen de las características del modelo

Software CFD	ANSYS 2022 R2	
Tipo de geometría	Bidimensional y Axilsimétrica	
Construcción de geometrías	ANSYS 2022 R2 Design Modeler	
Generación de malla	ANSYS 2022 R2 Meshing	
Simulación	ANSYS 2022 R2 Fluent	
Mallado	Híbrido	
Fluido de trabajo	CO ₂ Incompresible (P=100 bar, T=308 K)	
Modelo turbulento	<i>k</i> -ε Standard	
Modelo de pared	Scalable Wall Function	
Técnica de resolución numérica	PBS Acoplado	
Discretización	Espacio: Second Order Upwind Presión: Second Order Gradiente: Least Squares Cell- Based	
Acoplamiento presión-velocidad	COUPLED	

 Tabla 12.
 Resumen de las características del modelo.

3.3 Caso de estudio

3.3.1 Geometría

La definición de la geometría (dominio computacional de estudio) es el primer paso en cualquier problema CFD. Para implementarla en la simulación, se ha empleado la herramienta **Design Modeler** disponible en ANSYS 202 R2.

La geometría del conducto es la de un **reactor** con forma de *tubo de Venturi* invertido, es decir, con una entrada divergente y una salida convergente. La figura volumétrica del reactor, *Figura 20.a*, se obtiene al revolucionar un cuerpo plano a través del eje de simetría del propio reactor. El hecho de que sea un cuerpo de revolución simplifica los cálculos ya que basta con calcular la solución para un **cuerpo bidimensional** **axilsimétrico** como el de la *Figura 20.b*, el cual se obtiene al hacer un corte transversal al reactor. Todo esto se traduce en un ahorro de tiempo y el coste computacional.



Figura 20. Geometría del conducto (reactor). a) 3D. b) 2D.

3.3.2 Parametrización

Como ya se ha dicho en el apartado de los objetivos de este trabajo fin de grado, un paso muy importante es el de **parametrizar la geometría** del conducto **en función de sus ángulos de entrada y salida** sin que cambie el volumen, lo cual nos lleva a obtener una expresión matemática que satisfaga esta condición.

Hacer un estudio paramétrico nos ofrece un punto de vista global de como varían cierta variables de salida al variar una variables de entrada, que en nuestro caso son los ángulos de entrada y salida. El hecho de que el volumen se mantenga a lo largo de este estudio es una condición importante ya que si este varía también lo hará el tiempo medio de residencia, lo que trae consigo un cambio en el tamaño de las partículas. En este trabajo se trata de disminuir la varianza a la salida sin modificar el tiempo de residencia medio.

A continuación se muestra el cálculo matemático llevado a cabo para obtener esta expresión.

Proceso de parametrización

La *Figura 20.b* se obtiene al variar los ángulos de partida de una figura inicial plana como la de *Figura 21.* A partir de esta forma se variarán los ángulos de entrada y salida (α_1, α_2) cuyos valores iniciales son de 90°. Una característica importante de esta parametrización es que el radio del reactor (**R**₂) permanecerá constante a lo largo del proceso, siendo su longitud (**L**) la que podrá aumentar para mantener el volumen al modificar los ángulos.





En la *Tabla 13* se resumen las variables que definen la geometría así como la magnitud que representan y si su valor permanece contantes o no a lo largo del proceso.

Variable	Magnitud que representa	Valor constante/variable
α1	Ángulo de entrada	Variable
α2	Ángulo de salida	Variable
R ₁	Radio de entrada	Constante
R ₂	Radio del reactor	Constante
L	Longitud del reactor	Variable
V	Volumen del reactor	Constante

Tabla 13. Variables que definen la forma del reactor.

Como **datos de partida** se tienen: el volumen del reactor, V, el cociente entre L₀ y R₂, K, y el radio de entrada, **R**₁. A partir de estos datos el primer paso será calcular la longitud inicial y el radio del reactor, L₀ y R₂ respectivamente.

Al ser un cuerpo de revolución, todos los volúmenes calculados en este trabajo se han hecho utilizando el **teorema de Pappus-Guldin**, *Ecuación 16*.

$$V_{reactor} = 2\pi A \rho = 2\pi (L_0 R_2) \left(\frac{R_2}{2}\right) = \pi L_0 {R_2}^2$$

Ecuación 16. Teorema de Pappus-Guldin aplicado a nuestro problema particular.

donde,

A: área de revolución

p: distancia del centro de áreas del área A al eje de revolución

La *Ecuación 16* y el parámetro $K\left(k = \frac{L_0}{R_2}\right)$ forman un sistema con dos ecuaciones y dos incógnitas (L₀ y R₂). Resolviéndolo, obtenemos:

Longitud inicial del reactor
$$L_0 = \sqrt[3]{\frac{VK^2}{\pi}}$$

La variable que cambiará su valor para mantener el volumen constante cuando varíen los ángulos será L, siendo L₀ el valor mínimo de la longitud del reactor, manteniéndose R₂ constante. Para saber cuánto tiene que aumentar L para que el volumen permanezca constante, lo primero que tenemos que hacer es **calcular el volumen suprimido** al variar los ángulos.


Figura 22. Volumen suprimido

<u>Cálculo de V1 (Figura 23)</u>

$$A_{1} = \frac{hb_{1}}{2} = \frac{(R_{2} - R_{1})\left(\frac{R_{2} - R_{1}}{\tan \alpha_{1}}\right)}{2} = \frac{(R_{2} - R_{1})^{2}}{2\tan \alpha_{1}}$$
$$\rho_{1} = R_{1} + \frac{2}{3}h = \frac{2R_{2} + R_{1}}{3}$$
$$V_{1} = 2\pi A_{1}\rho_{1} = \frac{\pi (R_{2} - R_{1})^{2}(2R_{2} + R_{1})}{3\tan \alpha_{1}}$$



Figura 23. Cálculo de V₁.

<u>Cálculo de V2 (Figura 24)</u>

$$A_{2} = \frac{hb_{2}}{2} = \frac{(R_{2} - R_{1})\left(\frac{R_{2} - R_{1}}{\tan \alpha_{2}}\right)}{2} = \frac{(R_{2} - R_{1})^{2}}{2\tan \alpha_{2}}$$
$$\rho_{2} = R_{1} + \frac{2}{3}h = \frac{2R_{2} + R_{1}}{3}$$
$$\pi (R_{2} - R_{2})^{2}(2R_{2} + R_{2})$$

$$V_2 = 2\pi A_2 \rho_2 = \frac{\pi (R_2 - R_1)^2 (2R_2 + R_1)}{3 \tan \alpha_2}$$



Volumen total suprimido
$$(V_{sup}) = V_1 + V_2 = \frac{\pi (R_2 - R_1)^2 (2R_2 + R_1)}{3} \cdot \left(\frac{1}{\tan \alpha_1} + \frac{1}{\tan \alpha_2}\right)$$

Una vez modificados los ángulos y habiendo suprimido parte del volumen, ahora lo que tenemos que conseguir es aumentar la longitud del reactor (L) lo suficiente como para recuperar el volumen perdido sin variar los ángulos, *Figura 25*. Igualando el volumen recuperado en este paso al volumen suprimido podemos hallar el valor de la longitud, **x**, que tenemos que alargar el reactor para que esto ocurra.



Figura 25. Volumen añadido.

Cálculo de V3 (Figura 26)

$$\begin{aligned} A_3 &= x(R_2 - R_1) \\ \rho_3 &= R_1 + \frac{1}{2}(R_2 - R_1) = \frac{1}{2}(R_1 + R_2) \\ V_3 &= 2\pi A_3 \rho_3 = \pi (R_2^2 - R_1^2) x \end{aligned}$$





<u>Cálculo de V4 (Figura 27)</u>

$$A_4 = R_1 x$$

$$\rho_4 = \frac{R_1}{2}$$

$$V_4 = 2\pi A_4 \rho_4 = \pi R_1^2 x$$



Figura 27. Cálculo de V₄.

Volumen total añadido $(V_{ad}) = V_3 + V_4 = \pi R_2^2 x$

Para asegurarnos que el valor de x alarga la longitud del reactor justamente lo necesario para que se mantenga el volumen inicial, tenemos que igualar el volumen total suprimido al añadido, y despejar de esa ecuación el valor de x.

Cálculo del valor de X

$$V_{sup} = V_{ad}$$

$$\frac{\pi (R_2 - R_1)^2 (2R_2 + R_1)}{3} \cdot \left(\frac{1}{\tan \alpha_1} + \frac{1}{\tan \alpha_2}\right) = \pi R_2^2 x$$

Despejando el valor de X obtenemos la *Ecuación 17*, la cual relaciona el aumento de longitud del reactor en función del valor de los ángulos de entrada y salida:

$$x = \frac{(R_2 - R_1)^2 (2R_2 + R_1)}{3R_2^2} \cdot \left(\frac{1}{\tan \alpha_1} + \frac{1}{\tan \alpha_2}\right)$$

Ecuación 17. Relación entre la longitud añadida al reactor y el valor de sus ángulos de entrada y salida. Implementando esta expresión en la herramienta *Parameters* disponible en ANSYS 2022 R2 podemos modificar con total libertad el valor de los ángulos y realizar un estudio del comportamiento del flujo en el interior del reactor en función de estos ángulos sin modificar su volumen y ver como varían las variables de salida

En la *Tabla 14* se muestra el rango de valores entre los que pueden oscilar los ángulos.

Ángulo	Valor mínimo	Valor máximo
α_1	4°	90°
α2	4°	90°

 Tabla 14. Rango de valores posibles para los ángulos de entrada y salida.

Para este trabajo los valores de partida son los mostrados en la *Tabla 15*. Esta elección particular de valores se ha hecho con vista a la fabricación de un reactor de laboratorio. También se muestran los valores de la longitud inicial y el radio del reactor obtenido con los valores iniciales escogidos.

Volumen (m ³)	1×10 ⁻⁴
Radio de entrada, R1 (m)	1,5×10 ⁻³
К	10
Radio del reactor, R ₂ (m)	14,71×10 ⁻³
Longitud inicial del reactor, L ₀ (m)	147,1×10 ⁻³

Tabla 15. Valores escogidos para los datos de partida.

3.3.3 Proceso de cálculo (simulación)

Una vez implementada la geometría, la malla y la parametrización se procede a realizar la simulación del problema.

Para realizar el proceso de cálculo se ha utilizado la herramienta *Fluent* disponible en ANSYS 2022 R2.

En este punto hay que especificar el modelo físico escogido y las ecuaciones adicionales de escalares (*Apartado 3.1*), las expresiones de las variables de salida que queremos calcular y las condiciones de contorno del problema. A continuación se muestran cuales son cada una de ellas.

Expresiones de las variables de salida

• <u>Generación entrópica</u> $\left(\frac{W}{\kappa}\right)$

Para calcular este término se aplica una **integral de volumen** a la expresión de la **generación entrópica turbulenta** en cada punto del reactor, la cual viene expresada por la *Ecuación 21*:

Generación entrópica turbulenta
$$\left(\frac{kg}{ks^3}\right) = \frac{\rho\varepsilon}{T}$$

Ecuación 18. Generación entrópica turbulenta.

donde,

$$\rho$$
: densidad (Kg/m³)

ε: índice de disipación turbulenta (m²/s³)

T: temperatura (k)

• <u>Varianza a la salida</u> (s²)

Esta cantidad se calcula realizando un **promediado ponderado en masa** utilizando como variable de campo el valor de la varianza en las celdas de la salida del dominio computacional:

Varianza a la salida
$$(s^2) = \frac{\int \emptyset |\overline{v} \cdot d\overline{A}|}{\int \rho |\overline{v} \cdot d\overline{A}|}$$

Ecuación 19. Promediado ponderado en masa de la varianza a la salida.

donde \emptyset es el valor de la varianza en cada una de las celdas a la salida.

• Inverso de la varianza (adimensional)

Proceso análogo al anterior, solo que sustituyendo el valor de la varianza por el del inverso del coeficiente de variación.

Condiciones de contorno

A continuación se muestran las condiciones de contorno utilizadas, así como los valores escogidos:

- <u>Velocidad de entrada</u>: definida por el valor del número de Reynolds a la entrada. Se ha escogido un valor de 50000 para asegurarnos que el flujo turbulento está completamente desarrollado. Para este valor del Reynolds la velocidad de entrada es de 1,55 m/s.
- <u>Presión de salida</u>: se fija el valor de referencia de 101325 Pa (presión absoluta)
- <u>Interior</u>: el fluido de trabajo es CO₂, por lo que se introducen sus propiedades fluidas típicas en condiciones supercríticas:

Densidad: 467,6 Kg/m³

Viscosidad dinámica: 1,55×10⁻⁵ Kg/ms

• <u>Pared</u>: formada por todos los contornos de la geometría. Se especifica que el contorno carece de movimiento y se establece la condición de no deslizamiento.

Proceso de simulación

El último paso es correr la simulación, estableciendo un criterio de parada, el cual puede establecerse de dos maneras en función del tipo de criterio:

Error mínimo: se indica al programa que debe para la simulación cuando el error de los residuales de alguna de las variables alcance un valor mínimo deseado.

Número de iteraciones: se especifica al programa el número exacto de iteraciones que quieres que realice.

Para este trabajo se ha escogido la segunda opción, ya que al ser una geometría sencilla no requiere de muchas iteraciones para que el error obtenido converja a valores bajos que nos aporten una solución satisfactoria.

En la *Figura 28* se muestra como el error de los residuales de las variables de salida converge rápidamente hacia valores muy pequeños para una simulación de **250 iteraciones.**



Figura 28. Residuales obtenidos para una simulación de 250 iteraciones.

Una vez corrida la simulación ya podemos obtener resultados y obtener información de las variables de salida de interés.

Uno de los objetivos de este trabajo es encontrar los valores de los ángulos que minimicen la generación de entropía y la varianza a la salida. Para ello necesitamos observar los valores de las variables de salida para un gran conjuntos de combinaciones de ángulos dentro del rango posible de valores (*Tabla 14*).

Dentro de este rango cualquier combinación de valores es posible, siendo algunas de ellas las que cumplan el objetivo de disminuir la entropía y la varianza a la salida.

3.3.4 Diseño de experimentos (Puntos de diseño)

El proceso de simulación realizado hasta ahora se ha hecho para una geometría concreta con un valor determinado de los ángulos. Si quisiésemos realizar un estudio para otra combinación de ángulos, lo cual cambiaría la forma del reactor, tendríamos que realizar otra geometría distinta, realizar de nuevo el mallado y volver a correr la simulación. Este proceso sería muy tedioso cuando necesitamos estudiar el problema para un amplio rango de combinaciones de ángulos.

Para facilitar esta tarea se ha utilizado la herramienta **Design of Experiments** disponible en ANSYS 2022 R2, el cual te escoge un número a elegir de puntos de diseño (DP) para analizar el problema sin necesidad de modificar la geometría y realizar un nuvo mallado, lo cual ahorra mucho tiempo. Cada punto de diseño es una combinación particular de ángulos. Para escoger estos puntos ANSYS 2022 R2 nos ofrece varios métodos que utilizan distintas técnicas para escogerlos. En este trabajo se ha escogido el método **Latin Hypercubs** [13].

Por lo general, el número de puntos de diseño se escoge en función de las variables de entrada de las que depende el problema, en nuestro caso dos (ángulo de entrada y salida). Por cada una de estas variables se escogen 10 puntos de diseño, es decir, que para nuestro caso bastaría con 20 puntos. Con el fin de asegurar una mejor precisión se han indicado al programa que seleccione **50 puntos de diseño**. Estos puntos se muestran en la *Tabla 16*.

DP	Ángulo de entrada α_1	Ángulo de salida α ₂	DP	Ángulo de entrada α_1	Ángulo de salida α_2
1	11,00	4,00	26	5,08	54,53
2	10,00	19,00	27	82,48	56,68
3	15,82	5,08	28	56,68	58,83
4	33,02	7,23	29	60,98	60,98
5	26,57	9,38	30	50,23	63,13
6	43,78	11,53	31	13,68	65,28
7	20,13	13,68	32	9,38	67,43
8	73,88	15,83	33	65,28	69,58
9	76,03	17,97	34	88,93	71,73
10	67,43	20,13	35	41,63	73,88
11	58,83	22,28	36	35,18	76,03
12	24,43	24,43	37	48,08	78,18
13	52,38	26,57	38	39,48	80,33
14	11,53	28,72	39	17,97	82,48
15	69,58	30,88	40	54,53	84,63
16	78,18	33,03	41	28,72	86,78
17	45,93	35,18	42	7,23	88,93
18	86,78	37,33	43	59,99	4,22
19	37,33	39,48	44	89,95	4,42
20	22,28	41,63	45	4,01	15,02
21	84,63	43,78	46	89,71	22,60
22	71,73	45,93	47	75,44	89,90
23	63,13	48,08	48	5,35	29,13
24	30,88	50,23	49	20,00	25,00
25	80,33	52,38	50	4,00	44,65

Tabla	16 .	Puntos	de	diseño.
-------	-------------	--------	----	---------

3.3.5 Superficie de respuesta

Los puntos de diseño escogidos son algunos de las muchas combinaciones posibles de ángulos que se pueden dar. En nuestro caso se han elegido 50 puntos de diseño, los cuales son más que suficientes para obtener resultados satisfactorios y poder obtener el valor de los ángulos óptimos. Aunque sea un número considerable de puntos sigue siendo una cantidad discreta, y si realizamos la optimización para estos valores discretos el programa nos daría la mejor combinación de ángulos dentro de esos 50 puntos. Lo que queremos es saber cuál es la mejor combinación de ángulos dentro de todo el rango de posibles valores.

Para ello, necesitamos obtener una *superficie de respuesta* (*Response Surface*), es decir, una curva que se adapte lo mejor posible al valor de las variables de salida obtenidas para cada combinación de ángulos. De esta manera tenemos una curva continua con una aproximación de las variables de salida para todo el rango de valores posibles. Esta superficie de respuesta será la que utilice el programa para realizar la optimización y obtener el valor de los ángulos más adecuado.

ANSYS 2022 R2 nos ofrece varias opciones para elegir una superficie de respuesta:

- Genetic Aggregation
- Standard Response Surface Full 2nd Order Polynomials
- Non Parametric Regression
- Neural Network

A continuación se muestra la **Tabla 17** con los coeficientes de regresión obtenidos para cada una de las variables de salida, los cuales miden el nivel de aproximación de la superficie de respuesta a los valores obtenidos en la simulación. Cuanto más cerca de la unidad se encuentre este coeficiente mejor será la aproximación de la curva.

	Coeficiente de regresión			
Superficie de respuesta	Generación de entropía	Varianza a la salida	Inverso de la varianza a la salida	
Genetic Aggregation	0,98	0,99	0,99	
Satandar Response Surface-Full 2nd Order Polynomials	0,97	0,95	0,96	
Non Parametric Regression	0,98	0,97	0,96	
Neural Network	0,98	0,98	0,99	

Tabla 17. Coeficientes de regresión de las superficies de respuesta.

La que mejores coeficientes de regresión presenta es la curva *Genetic Aggregation*, por este motivo es la que se ha escogido para realizar la optimización.

3.3.6 Optimización

Una vez elegida la superficie de respuesta, el último paso que queda por hacer es realizar la optimización que nos proporcione la combinación de ángulos dentro del rango de valores posibles más adecuada para que minimice la generación de entropía y la varianza a la salida del reactor.

Para ello recurrimos a la herramienta *Optimization* disponible en ANSYS 2022 R2. Tomando como curva a optimizar la superficie de respuesta elegida y especificando la *función objetivo* (maximizar o minimizar un valor), el programa calcula el valor la combinación de ángulos para los que se cumple dicha función objetivo.

En nuestro caso tenemos tres funciones objetivo, que son las siguientes:

- Minimizar la generación de entropía
- Minimizar el valor de la varianza a la salida
- Maximizar el valor del inverso del coeficiente de varianza a la salida

Para cada una de las funciones existirá una combinación de ángulos que cumplan dicha función, no teniendo porque ser la misma para todas. Por lo tanto, habrá que elegir unos ángulos que minimice/maximice esas tres variables de interés.

3.4 Resultados

En este apartado se va a llevar a cabo un estudio de los resultados obtenidos para las tres funciones objetivo citados en el apartado anterior. La combinación de ángulos idónea para una función objetivo puede no ser la misma que para otra, si bien estos resultados pueden parecerse. El objetivo final del trabajo será escoger una única combinación que nos permita alcanzar las tres funciones objetico en la medida de lo posible.

El programa ANSYS 2022 R2, una vez indicada la función objetivo y completada la optimización, nos ofrece varios puntos candidatos donde la variable alcanza la función, siendo uno de ellos el más idóneo. Esto nos ayudará a la hora de elegir el punto de diseño más óptimo para las tres funciones objetivo, ya que una determinada combinación de ángulos que cumpla una función objetivo puede estar muy lejos de cumplir otra, por lo que teniendo tres candidatos por función ayudará a escoger un valor intermedio.

3.4.1 Optimización basada en la minimización de la generación entrópica

La *Tabla 18* muestra los puntos ofrecidos por la optimización del programa para minimizar la generación de entropía, así como los valores obtenidos tanto para estos puntos como para el punto de diseño inicial con el fin de observar la mejora producida al realizar la optimización.

	Punto de partida (Punto 0)	Punto 1	Punto 2	Punto 3
Ángulo entrada, α_1 (°)	90	4	4	4
Ángulo salida, α₂ (°)	90	15,46	9 <i>,</i> 88	31,71
Generación de entropía x10 ⁻⁵ (W/K)	8,98	4,71	4,75	4,87

Tabla 18. Puntos de diseño que minimizan la generación entrópica en el reactor.

A continuación se muestran la *Figura 29* y la *Figura 30* las cuales representan la generación entrópica turbulenta en cada uno de los puntos del reactor tanto para el Punto 0 como para el Punto 1 (punto más óptimo), respectivamente.



Figura 29. Generación entrópica en cada punto del reactor para el Punto 0.



Figura 30. Generación entrópica en el reactor para el Punto 1.

Si se observa la *Figura 29* se puede apreciar una considerable generación de entropía dentro del reactor, sobre todo en la primera mitad. Esto se debe principalmente a la formación de zonas de recirculación debido a que el fluido se desprende al encontrarse con un cambio de sección tan brusco como es el caso del Punto 0, donde el ángulo de entrada es de 90°. Este efecto se aprecia muy bien si representamos el perfil de velocidades de a través de las líneas de corriente, como en la *Figura 31*. En esta figura se aprecia claramente estas zonas de recirculación a la entrada del reactor.



Figura 31. Perfil de velocidades para el Punto 0.

Esta generación de entropía dentro del reactor debido a zonas de recirculación no se observa en la *Figura 30*, donde gran parte del perfil muestra valores muy bajos de generación entrópica (zona azul). Esto es debido a que se ha optimizado su forma suavizando los perfiles de entrada y salida, pero especialmente el de entrada, ya que es aquí donde se generaban las zonas de recirculación. Esta ausencia de zonas de recirculación se observa fácilmente si realizamos, al igual que para el Punto de Partida, un estudio del perfil de velocidades, como el de la *Figura 32*.



Figura 32. Perfil de velocidades para el Punto 1.

Se observa claramente que las líneas de corriente siguen perfectamente la forma del conducto, evitando así zonas de grande generación entrópica. Para el Punto 1, las zonas donde se produce mayor generación de entropía son en los conductos de entrada y salida debido al gradiente de velocidad existente, ya que la velocidad del fluido es mucho mayor en estas zonas que dentro del propio reactor, donde la generación entrópica es muy baja.

La *Tabla 19* muestra una comparación de los máximos valores de generación entrópica tanto para el Punto 0 como para el Punto 1.

Punto de diseño	Punto 0	Punto 1
Máxima generación entrópica turbulenta (W/K·m³)	2,6×10 ²	8,1×10 ⁻²

Tabla 19. Comparación de los valores de máxima generación entrópica para Punto 0 y elPunto 1.

3.4.2 Optimización basada en la minimización de la varianza a la salida

La presentación de resultados de este apartado será similar al del apartado anterior, mostrando los puntos óptimos ofrecidos por el programa para minimizar la varianza a la salida, *Tabla 20*. Seguido a esto se mostrarán los perfiles de varianza en todos los puntos del reactor para el punto de partida y para el punto óptimo, además de mostrar el perfil de velocidades para este último, ya que para el del punto de partida es el mismo que el mostrado para la minimización de la generación entrópica (*Figura 31*).

	Punto de partida (Punto 0)	Punto 4	Punto 5
Ángulo entrada, α_1 (°)	90	6,37	4
Ángulo salida, α ₂ (°)	90	32,6	32,13
Varianza a la salida (s²)	7,26	0,28	0,62

 Tabla 20. Puntos que minimizan la varianza a la salida.
 Inimizan la varianza a la salida.
 Initia varianza la salida.
 Initia varianza a la salida.

La *Figura 33* y la *Figura 34* muestran el perfil de los valores de la varianza para cada punto del reactor en el Punto 0 y el Punto 4 (punto óptimo).



Figura 33. Varianza en el reactor para el Punto 0.



Figura 34. Varianza en el reactor para el Punto 4.

En la *Figura 33* se observan grandes valores de la varianza en gran parte del reactor, siendo mayor a la entrada (color rojo) debido a las zonas de recirculación, comentadas en el apartado anterior, las cuales aumentan considerablemente el tiempo de residencia de las partículas respecto al valor medio deseado. Todo esto hace que la varianza a la salida sea demasiado alta, dando lugar a diámetro muy variado de partículas al final del proceso, lo cual queremos evitar.

Por otro lado, la *Figura 34* muestra el perfil de la varianza para el Punto 4, el cual minimiza la varianza a la salida. Se puede observar un aumento progresivo de la varianza desde la entrada hasta la salida (progresión del color azul al rojo) lo cual es lo esperado ya que cuanto más tiempo pasen las partículas dentro del reactor mayor es la probabilidad de que se desvíen del valor medio esperado. Aun así, los valores de varianza obtenidos a la salida para el Punto 4 son relativamente bajos, apreciándose una gran diferencia con los valores obtenidos para el Punto 0. Esta disminución considerable de la varianza se debe principalmente a la eliminación de las zonas de recirculación, como se observa en el perfil de velocidades para el Punto 4, *Figura 35*, en el cual las líneas de corriente siguen perfectamente la forma del reactor. Esta figura es muy similar a la *Figura 32* ya que los ángulos para el Punto 1 y el Punto 4 son similares.



Figura 35. Perfil de velocidades para el Punto 4.

3.4.3 Optimización basada en la maximización del inverso del coeficiente de variación a la salida.

Por último, se presentan los resultados obtenidos al optimizar la forma del reactor que maximiza el inverso del coeficiente de variación. La *Tabla 21* muestra los puntos ofrecidos por el programa para cumplir dicha función objetivo, así como su valor, tanto para ellos como para el punto de partida (Punto 0) con el fin de apreciar la mejora obtenida.

	Punto de partida (Punto 0)	Punto 6	Punto 7	Punto 8
Ángulo entrada, α_1 (°)	90	5,92	6,586	11,515
Ángulo salida, α ₂ (°)	90	42,18	63,906	47,44
Inverso del coef. de variación a la salida (adimensional)	2,89	9,8	9,378	7,214

Tabla 21. Puntos que maximizan el inverso del coeficiente de variación a la salida.

La *Figura 36* y la *Figura 37* muestran los perfiles del inverso del coeficiente de variación para todos los puntos del reactor tanto para el Punto 0 como para el Punto 6 (punto óptimo), respectivamente.







Figura 37. Inverso del coeficiente de variación en el reactor para el Punto 6.

Como era de esperar, los máximos valores se obtienen a la entrada y los mínimos a la salida, al contrario que para los valores calculados para la varianza ya que estamos calculando el inverso del coeficiente variación. Comparando ambas figuras, la *Figura 36*

muestra unos valores más bajos a la salida del reactor que para la *Figura 37*, la cual es el perfil de la forma optimizada (Punto 6).

La *Figura 38* muestra el perfil de velocidades para el Punto 6, el cual es muy parecido a los perfiles obtenidos para el Punto 1 y el Punto 4, lo cual era de esperar.





3.4.4 Elección final de los ángulos de entrada y salida

En vista de los resultados obtenidos en las optimizaciones realizadas para cada una de las tres funciones objetivo, se aprecia una similitud entre los ángulos de entrada y salida del reactor, si bien existe una pequeña diferencia entre ellos debido a que los ángulos que logran una función objetivo determinada no son exactamente iguales a los ángulos que satisfacen otra función objetivo.

Como la varianza es una variable más fácil de calcular que la generación entrópica, la cual está localizada en zonas muy concretas, los ángulos finales escogidos para lograr los objetivos de este trabajo han sido aquellos que minimizan la varianza a la salida (**Punto 4**), ya que existe un menor riesgo de la existencia de errores en el resultado obtenido por el algoritmo utilizado por el programa.

La *Tabla 22* muestra los valores de las tres variables de salida de interés para la forma final del reactor.

Generación entrópica (W/K)	Varianza a la salida (s²)	Inverso del coef. de varianza a la salida (-)
5,2×10 ⁻⁵	0,28	9,7

Tabla 22. Valores de las variables de salida para el conjunto de ángulos que optimizan la
forma del reactor.

Como se puede observar, los valores obtenidos para la generación entrópica y el inverso del coeficiente varianza son muy similares a los obtenidos para los puntos que satisfacen sus respectivas funciones objetivo (*Tabla 18* y *Tabla 21*). Para el caso de la generación entrópica, esta similitud se debe a que los ángulos para la minimización de la varianza son lo suficientemente bajos como para eliminar las zonas de recirculación existentes cuando los ángulos son de 90°, las cuales son el principal foco de generación entrópica. Una vez eliminadas estas zonas de recirculación, las zonas donde se produce el resto de entropía es en los conductos de entrada y salida del reactor, los cuales se mantienen iguales para cualquier conjunto de ángulos, lo que hace que los valores sean parecidos. Una explicación similar puede aplicarse a los valores obtenidos para el inverso del coeficiente de variación.

CAPÍTULO 4 CONCLUSIONES

4 CONCLUSIONES

Las conclusiones de este Trabajo Fin de Grado son las siguientes:

- La expresión que se ha obtenido para relacionar la variación de longitud del conducto en función del valor de sus ángulos de entrada y salida sin variar el volumen funciona correctamente a la hora de realizar un estudio paramétrico del conducto con el fin de encontrar su forma óptima, todo esto sin modificar el tamaño de las partículas de salida.
- 2) La implementación del modelo k-epsilon Standard para representar un flujo turbulento como en nuestro caso aporta unos resultados coherentes y que representan fielmente el proceso físico esperado para este tipo de flujos. Además, la precisión obtenida utilizado este modelo es buena para tiempos de cálculo bajos, lo cual lo hace ideal para ser utilizado en este tipo de problemas.
- 3) El algoritmo de optimización disponible en el propio programa ANSYS 2022 R2 ha permitido la obtención de los conjuntos de ángulos que minimizan la generación entrópica dentro del reactor y la varianza a la salida, ofreciéndonos varios puntos candidatos, siendo uno de ellos el más adecuado.
- 4) La representación de los resultados ofrecidos por el programa CFD tanto numéricos como gráficos ha permitido una fácil interpretación de ellos, lo cual facilita el proceso de elección de la forma óptima del conducto así como la obtención de las conclusiones finales.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA

- [1] GONZÁLEZ CASTILLO, M. (2019). Captura, transporte y almacenamiento del CO₂ antropogénico (CCS) para la reducción de gases de efecto invernadero: efecto de las impurezas SO₂ y H₂. Trabajo Fin de Grado. Zaragoza: Universidad de Zaragoza.
- [3] VERSTEEG, H.K., MALALASEKARA, W., (1995). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics.* Harlow, England: Pearson.
- [5] MOUKALLED, F., MANGANI, L., DARWISH, M., (2016). *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics.* Switzerland: Springer.
- [6] CRESPO MARTÍNEZ, A., (2016). *Mecánica de Fluidos*. Madrid, España: Paraninfo
- [7] SAMAT. La inmensa utilidad de un cálculo con ANSYS correctamente idealizado.
 <<u>https://ingenieriasamat.es/blog/utilidad-calculos-ansys-ii/</u>>
- [8] VEHI SARRAZIN, J.M. (2016). Mallado de geometrías complejas mediante CFD. Trabajo Fin de Grado. Barcelona: Escuela Técnica Superior de Ingenierías Industriales de Barcelona.
- [9] GUBALA, V., JOHNSTON, L.J., LIU, Z., KRUG, H., MOORE, C.J., OBER, C.K., SCHWENK, M., VERT, M. (2018). "Engineered nanomaterials and human health. Part 1: Preparation, functionalization and characterization" en De Gruyter, p. 1283-1324.
- [10] CSIC. (2001). Tecnología para obtener micro y nanopartículas. < <u>https://rdcsic.dicat.csic.es/tecnologia-de-materiales-2/115-proyectos/290-</u> <u>tecnologia-para-obtener-micro-y-nanoparticulas</u>>
- [11] ANSYS Courses. Optimization. Lesson 7. < <u>https://courses.ansys.com/index.php/courses/plate-with-a-hole-</u> <u>optimization/lessons/optimization-lesson-7/></u>
- [12] ASANA. (2021). Top-down Vs. Bottom-up: cuál es la diferencia y el mejor enfoque para tu equipo. < <u>https://asana.com/es/resources/top-down-approach</u>>
- [13] ANSYS. (2013). Design Exploration User's Guide. Canonsburg, PA < <u>https://www.scribd.com/document/355011614/Design-Exploration-Users-Guide#</u>>

- [14] ANSYS. (2010). Meshing User's Guide. Canonsburg, PA. < https://www.researchgate.net/profile/Mohamed-Mourad-Lafifi/post/How to remove warpage angle and violation of heuristic criteri on warning in LS-Dyna/attachment/5d0c0713cfe4a7968dacddf1/AS%3A771994878496770%401 561069330997/download/Meshing Tutorial Ans.sys.pdf
- [15] ANSYS. (2021). Fluent Theory Guide. Canonsburg, PA. < <u>https://dl.cfdexperts.net/cfd_resources/Ansys_Documentation/Fluent/Ansys_F</u> <u>luent_Theory_Guide.pdf</u>>
- [16] REVERCHON, E., ADAMI, R. (2005). *Nanomaterials and Supercritical Fluids.* Turku, Finland: Elsevier.
- [17] GOMEZ GARZÓN, M. (2018). Nanomateriales, nanopartículas y síntesis verde. *Revista Repertorio de Medicina y Cirugía*. Vol 27, N°2, pg. 75-80.
- [18] SIERRA-PALLARES, J., HUDDLE, T., ALONSO, E., MATO, F., GARCIA-SERNA, J., COCERO, M.J., LESTER, E. (2016). "Prediction of residence time distributions in supercritical hydrothermal reactors working at low Reynolds numbers" en *Chemical Engineering Journal, Elsevier*, Vol. 299, pg. 373-385.
- [19] GARCÍA-SERNA, J., GARCÍA-VERFUGO, E., HYDE, J.R., FRAGA-DUBREUIL, J., YAN, C., POLIAKOFF, M., COCERO, M.J. (2006). "Modelling residence time distribution in chemical reactors: A novel generalised n-laminar model. Application to supercritical CO₂ and subcritical water tubular reactor" en *The Journal of Supercritical Fluids*, Vol. 41, pg. 82-91.
- [20] MORÈRE RODRIGUEZ, J. (2017). Síntesis de nanoestructuras de RU, Ni y Pt sobre soportes porosos utilizando CO₂ supercrítico. Tesis Doctoral. Madrid: Universidad Complutense de Madrid.
- [21] SIERRA-PALLARES, J., ALONSO, E., MONTEQUI, I., COCERO, M.J. (2009). "Particle diameter in supercritical nanoparticle synthesis using three-dimensional CFD simulations. Validation for anatase titanium dioxide production" en *Chemical Engineering Science, Elsevier,* Vol. 64, pg. 3051-3059.
- [22] KRISHNAN, A., RAVINDRAN, B., BALASUBRAMANIAN, B., SWART, H.C., JEEVA PANCHU, S. (2022). Emerging Nanomaterials for Advances Technologies. Switzerland: Springer.
- [23] RODRIGUEZ CHAPARRO, T., PINZÓN, L.H., ARÁMBULA, C.A. (2004). "Estudio de distribución de tiempos de residencia en un reactor biológico de lecho empacado cerámico". Ciencia e Ingeniería Neogranadina, Vol. 14, pg. 30-37.

- [24] SIERRA-PALLARES, J., MÉNDEZ, C., GARCÍA-CARRASCAL, P., CASTRO, F. (2017). "Spatial distribution of mean age and higher moments of unsteady and reactive tracers: Reconstruction of residence time distributions" en *Applied Mathematical Modelling, Elsevier,* Vol. 46, pg. 312-327.
- [25] JOHN, V., ANGELOV, I., ÖNCÜL, A.A., THÉVENIN, D. (2007). "Techniques for the reconstruction of a distribution from a finite number of its moments" en *Chemical Engineering Science, Elsevier,* Vol. 62, pg. 2890-2904.
- [26] ACOSTA, A.J. (2015). *La nanotecnología. Exlorando un cosmos en miniatura.* Madrid: RBA Coleccionables.
- [27] CAO, G. (2004). *Nanostructures and Nanomaterials. Synthesis, Properties and Applications.* London, England: Imperial College Press.
- [28] BYRAPPA. K, OHARA. S, ADSCHIRI, T. (2007). "Nanoparticles synthesis using supercritical fluid technology-towards biomedical applications" en Advanced Drug Delivery Reviews, Elsevier, Vol. 60, pg. 299-327.
- [29] MURTY, B.S., SHANKAR, P., RAJ, B., RATH, B.B., MURDAY, J. (2013). *Textbook of Nanoscience and Nanotechnology*. Springer.
- [30] MALISKA, C.R. (2023). Fundamentals of Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method. Switzerland: Springer.
- [31] LEVENSPIEL, O. (2012). *Tracer Technology. Modeling the Flow of Fluids.* London, England: Springer.