



MODELACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO DE CONTAMINANTES EN UN REACTOR ABSORBEDOR DE LECHO FIJO

TESIS PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN
INGENIERÍA MECÁNICA
PRESENTA

ING. JUAN GERARDO ISLAS LÓPEZ

DIRECTOR:

DR. JUAN SERRANO ARELLANO

SINODALES:

DRA. MARTHA PATRICIA FALCÓN LEÓN

DR. LUIS MANUEL PALACIOS PINEDA

Pachuca de Soto, Hgo. Febrero 2024



Carretera México – Pachuca Km. 87.5, Col. Venta Prieta C.P. 42083 Pachuca de Soto,
Hidalgo. Tels. 771 7113073, 771 7113596, 771 7113140, 771 7115119 y 771 7113399
e-mail: depi@pachuca.tecnm.mx | tecnm.mx



Pachuca de Soto, Hidalgo, **14/febrero/2024**
Circular No. 035/2024

**C. ING. JUAN GERARDO ISLAS LÓPEZ
PRESENTE**

La que suscribe, jefa de la División de Estudios de Posgrado e Investigación, le comunica que los miembros de la Comisión Revisora, designada por el Consejo de Posgrado de la Maestría en Ingeniería Mecánica para examinar su Tesis:

Modelación numérica del flujo de contaminantes en
un reactor absorbedor de lecho fijo

se han reunido, y después de intercambiar opiniones manifiestan su aprobación de la Tesis, en virtud que satisface los requisitos señalados por las disposiciones reglamentarias vigentes y, en consecuencia, se autoriza su impresión.

ATENTAMENTE

Excelencia en Educación Tecnológica®
"El Hombre Alimenta el Ingenio en Contacto con la Ciencia"


M.A. C. ELODIA CLAUDIA GUERRERO ORTIZ
JEFA DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN



ccp. Archivo

ECGO/lm pp



Carretera México –Pachuca Km. 87.5, Col. Venta Prieta C.P. 42083 Pachuca de Soto,
Hidalgo. Tels. 771 7113073, 771 7113596, 771 7113140, 771 7115119 y 771 7113399
e-mail: depi@pachuca.tecnm.mx |tecnm.mx





**Consejo de Posgrado de la Maestría en Ingeniería Mecánica
ACTA**

Siendo las 13:00 horas del 7 de febrero de 2023, el Consejo de Posgrado de la Maestría en Ingeniería Mecánica manifiesta la APROBACIÓN del tema de Tesis: *Modelación numérica del flujo de contaminantes en un reactor absorbedor de lecho fijo*, con el siguiente contenido:

Resumen/ Abstract

Contenido

Índice de cuadros, gráficas y figuras

1.- Introducción

2.- Estado del arte

3.- Marco teórico

4.- Materiales y métodos

5.- Resultados experimentales

Conclusiones

Bibliografía

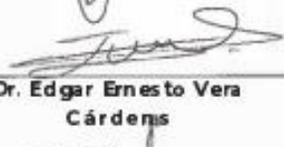
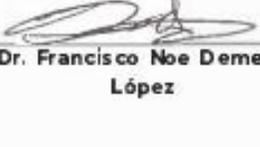
Apéndices

Para cubrir el requisito correspondiente a la Tesis para que el Ing. Juan Gerardo Islas López obtenga el grado de Maestría en Ingeniería Mecánica, bajo la dirección del Dr. Juan Serrano Arellano.

ATENTAMENTE

Excelencia en Educación Tecnológica

"El Hombre Alimenta el Ingenio en Contacto con la Ciencia"

 Dr. Ignacio Ramírez Vargas	 Dr. Juan Serrano Arellano	 Dr. Luis Manuel Palacios Pineda
 Dra. Erika Osiris Avila Dávila	 Dr. Edgar Ernesto Vera Cárdenas	 Dra. Marisa Moreno Ríos
 Dr. Armando Irvin Martínez Pérez	 Dr. Francisco Noé Demesa López	 Dr. Hugo Francisco Abundis Fong



Dedicatoria

Agradecimientos

Mi más profundo agradecimiento al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por otorgada para mis estudios de posgrado, con la cual pude obtener los recursos necesarios para concluir en tiempo y forma mi tesis. A mi director de tesis Dr. Juan Serrano Arellano por su acompañamiento y dirección para realizar mi investigación, gracias por los conocimientos y mentorías dadas durante todo el desarrollo de la investigación, su comprensión y consejo durante estos 2 años de continuo aprendizaje. Al personal docente de la División de Estudios de Posgrado e Investigación del Instituto Tecnológico de Pachuca por los conocimientos transmitidos en las aulas, gracias a todos por su tiempo y dedicación a la enseñanza, ustedes forman a la nueva generación de excelentes profesionistas que el estado de Hidalgo y nuestro país necesita.

Resumen

En el presente trabajo, se muestra el análisis del flujo de contaminantes de un fluido que atraviesa un medio poroso dentro de un reactor, con el fin de proponer una alternativa para retener contaminantes generados en la quema de combustibles fósiles. Los cuales son utilizados en la generación de energía eléctrica en nuestro país. Se obtuvo así las características de porosidad con las que se propicia una mayor retención y en su defecto mejoraran una reacción química que reducirá el porcentaje de contaminantes dentro del fluido. El método aplicado para la realización de esta investigación está fundamentado en su mayoría por los estudios realizados por Asencio D. Anabel Doctora en Ingeniería especializada en el estudio de fluidodinámica asistida por computadora quien realizó una tesis doctoral donde presenta las bases para realizar un estudio de este tipo titulado, “Modelado de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto asistido por Fluidodinámica Computacional”, detallando la metodología aplicada en sus diferentes partes, como la frontera seleccionada, modelo de turbulencia, análisis de independencia de malla utilizados. Estos importantes datos obtenidos se relacionan estrechamente con el cambio que sufrirá el fluido con las características de porosidad que beneficien una reacción química. Finalmente, se proporcionan recomendaciones que permitirán en trabajos futuros obtener simulaciones más precisas y se sugieren nuevas líneas de investigación en diferentes etapas de funcionamiento de un reactor absorbedor de lecho fijo.

Palabras clave: Reactor de lecho fijo; Fluidodinámica; Contaminantes; Porosidad; ANSYS Fluent.

ÍNDICE

1	Capítulo Introducción	12
1.1	Problemática ambiental de la contaminación del aire	14
1.2	Contaminación ambiental	16
1.2.1	Dióxido de Carbono	18
1.2.2	Efecto Invernadero	18
1.3	Tecnologías de Captura de CO₂	18
1.3.1	Absorción Química	18
1.3.2	Absorción Física	19
1.4	Captura de CO₂	19
1.4.1	Captura de CO₂ Postcombustión	20
1.4.2	Captura de CO₂ en Precombustión	20
1.5	Elementos Absorbedores de Contaminantes	20
1.5.1	Aminas (MEA)	21
1.5.2	Aminas (DEA)	22
1.5.3	Aminas (MDEA)	23
1.6	Reactor de lecho	23
1.6.1	Características de los reactores de lecho fijo	26
2	Capítulo Metodología	27
2.1	Técnicas de modelación numérica	29
2.2	Modelación de Flujo de Fluidos	37
2.2.1	Softwares de CFD	41
2.2.2	Estructura de Software CFD	44
2.3	Uso de Fluent ANSYS	50
3	Capítulo Modelo Físico	64
3.1	Reactor a utilizar	64
3.2	Propuesta de reactor	65
3.3	Inicio de la Geometría del reactor	66
4	Capítulo Modelo Matemático	69
4.1	Modelo Matemático	70
4.1.1	Ecuación de masa	71

4.1.2	Ecuación de Movimiento	72
4.1.3	Transporte de Especies	75
5	Capítulo Resultados	77
5.1	Propuesta de malla computacional.....	77
5.2	Condiciones de Frontera.....	80
5.3	Visualización de resultados	86
5.4	Cambio de parámetro zona porosa.....	90
5.5	Cambio de parámetro porosidad	93
5.6	Modificación de parámetros a partir de la primera simulación	95
5.6.1	Análisis de independencia de malla para caso final	95
5.6.2	Análisis de velocidades dentro del reactor	98
5.7	Simulación en estado Transitorio	108
6	Conclusiones	110
7	Trabajos futuros.....	113
8	Fuentes Bibliográficas.....	114

Índice de Figuras

Figura 1.1 Participación de las industrias en la propagación de gases efecto invernadero (fuente: INEGEI (Inventario Nacional de Emisiones de Gases de Efecto Invernadero 2010.modificada)	17
Figura 1.2 (fuente: Simulación del proceso de captura de CO ₂ mediante ciclos de carbonatación calcinación de CaO integrado en plantas de producción de energía [Martínez, 2014])	19
Figura 1.3 Esquema químico general del mono etanolamina modificado [Chávez, 2014])	22
Figura 1.4 Esquema químico general de la Dietanolamina modificado [Chávez, 2014].....	22
Figura 1.5 Esquema químico general de la Metildietanolamina modificado [Chávez, 2014]	23
Figura 1.6 Esquema de la conformación de un reactor de lecho fijo adiabático [Asencio, 2017]	25
Figura 1.7 Esquema de la conformación de un reactor de lecho fijo multitubular monofásico [Asencio, 2017]	25
Figura 2.1 Simplificación de ecuaciones de conservación de masa y energía (fuente: Termodinámica Yunes Cengel 7ma edición.....	39
Figura 2.2 Áreas de aplicación de la dinámica de fluidos computacionales elaboración propia	40
Figura 2.3 Secuencia a seguir de un sistema CFD.....	44
Figura 2.4 Resumen de preprocesamiento de los programas CFD	45
Figura 2.5 Resumen de resolución de los sistemas CFD	47
Figura 2.6 Resumen del postprocesamiento de los sistemas CFD.....	49
Figura 2.7 Esquema General de ANSYS WORKBECH	51
Figura 2.8 Secciones generales de ANSYS FLUENT.....	52
Figura 2.9 Visualización de Geometría en ANSYS FLUENT	52
Figura 2.10 Visualización de Malla en ANSYS FLUENT	53
Figura 2.11 Nombramiento de la secuencia de proceso del fluido en ANSYS FLUENT	53
Figura 2.12 Indicación de cantidad de núcleos en los que el computador utilizado trabaja para ANSYS FLUENT	54
Figura 2.13 Esquema general de la opción de condiciones de frontera en ANSYS FLUENT	55
Figura 2.14 Establecimiento de la viscosidad del fluido en ANSYS FLUENT	56
Figura 2.15 Determinación de fluidos a utilizar en ANSYS FLUENT	57
Figura 2.16 Menú de fluidos en ANSYS FLUENT para el desarrollo del modelo	57
Figura 2.17 Especificación de material de fluido a estudiar en ANSYS FLUENT	58
Figura 2.18 Pantalla general del establecimiento de las condiciones de Frontera en ANSYS FLUENT	59
Figura 2.19 Ejemplo de menú para establecer la velocidad inicial en ANSYS FLUENT.....	59
Figura 2.20 Selección de método de resolución del problema a tratar en ANSYS FLUENT	60
Figura 2.21 Inicialización de la simulación en ANSYS FLUENT	61

Figura 2.22 Panorama de la opción de Corrida de cálculo en ANSYS FLUENT	61
Figura 2.23 Finalización del cálculo de la simulación en ANSYS FLUENT	62
Figura 2.24 Sección de resultados en ANSYS FLUENT	62
Figura 2.25 Ejemplo de grafico visualizado en ANSYS FLUENT	63
Figura 3.1 Estructura general de reactor a utilizar en la investigación.	65
Figura 3.2 dimensionamiento de reactor propuesto.	66
Figura 3.3 Pantalla de inicio de ANSYS WORKBENCH.....	66
Figura 3.4 Menú inicial de ANSYS FLUENT	67
Figura 3.5 Diagrama de la estructura del reactor dimensional con ANSYS FLUENT	67
Figura 3.6 División de zonas del reactor dimensional con ANSYS FLUENT	68
Figura 5.1 Mallado de geometría con ANSYS FLUENT	77
Figura 5.2 Parámetros de sizing en ANSYS FLUENT	78
Figura 5.3 Parámetros de inflation en ANSYS FLUENT	78
Figura 5.4 Resumen de nodos y elementos a resolver ANSYS FLUENT.....	78
Figura 5.5 Mallado de geometría con ANSYS FLUENT.....	79
Figura 5.6 Modelo de viscosidad del sistema.....	80
Figura 5.7 Sección de transporte de especies en el programa.....	81
Figura 5.8 Cambio de fluidos	81
Figura 5.9 Condición de frontera velocidad inicial	82
Figura 5.10 Condición de frontera temperatura inicial.....	82
Figura 5.11 Condición de frontera mezcla de fluidos.....	83
Figura 5.12 Condición de frontera porosidad del lecho fijo	83
Figura 5.13 Inicialización de corrida de cálculos	84
Figura 5.14 Establecimiento de numero de iteraciones a calcular del sistema	84
Figura 5.15 Corrida de simulación con los parámetros establecidos.....	85
Figura 5.16 Finalización de los cálculos por parte del programa	85
Figura 5.17 Grafico por zonas de velocidad del reactor	86
Figura 5.18 Grafico vectorial de velocidad del fluido dentro del reactor	87
Figura 5.19 Grafico vectorial de velocidad del fluido dentro del reactor	89
Figura 5.20 Cambio de espesor de zona porosa a 0.500.....	90
Figura 5.21 Gráfica de velocidad con cambio de espesor zona porosa 0.500	91
Figura 5.22 Cambio de espesor de zona porosa 1.500.....	92
Figura 5.23 Gráfica de velocidad con cambio de espesor zona porosa 1.500	93
Figura 5.24 Porosidad inicial.....	93
Figura 5.25 Cambio de porosidad 0.4.....	94
Figura 5.26 Cambio de porosidad 0.8.....	94
Figura 5.27 Cambio de Numero de Reynolds con cambio de velocidades de entrada	97
Figura 5.28 Velocidad promedio del flujo a velocidad de entrada de 1m/s.....	99

Figura 5.29 Velocidad promedio del flujo a velocidad de entrada de 1.5m/s.....	99
Figura 5.30 Velocidad promedio del flujo a velocidad de entrada de 2 m/s.....	100
Figura 5.31 Velocidad promedio de 0.3 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 1 m/s porosidad 0.4	101
Figura 5.32 Velocidad promedio de 0.25 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 1 m/s porosidad 0.8	102
Figura 5.33 Velocidad promedio 0.47 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 1.5 m/s porosidad 0.4	103
Figura 5.34 Velocidad promedio 0.37 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 1.5 m/s porosidad 0.8	104
Figura 5.35 Velocidad 0.35 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 2 m/s porosidad 0.4.....	105
Figura 5.36 Velocidad promedio de 0.32 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 2 m/s porosidad 0.8	106
Figura 5.37 Convergencia de simulación transitoria	108
Figura 5.38 Grafico de simulación en estado transitorio con parámetros establecidos	109

Índice de Tablas

Tabla 1.1 Principales características de las aminas como métodos de separación de CO ₂ Fuente: [Martínez, 2014].....	21
Tabla 1.2 Aplicaciones típicas de los reactores de lecho fijo modificada Fuente: [Ascencio, 2017] 24	
Tabla 2.1 Ventajas y Desventajas de los sistemas CFD a considerar para realizar un análisis correcto.	41
Tabla 2.2 Requerimientos generales para instalación de un programa CFD.....	43
Tabla 5.1 Tabla distancia vs Velocidad.....	88
Tabla 5.2 Tabla distancia vs Velocidad zona porosa de 0.500.....	91
Tabla 5.3 Tabla distancia vs Velocidad zona porosa de 1.500.....	92
Tabla 5.4 Tabla velocidad interna dentro del medio poroso porosidad 0.4.....	94
Tabla 5.5 Tabla velocidad interna dentro del medio poroso porosidad 0.8.....	94
Tabla 5.6 Tabla de tamaño de elemento para análisis de independencia de malla.....	95
Tabla 5.7 Tabla comparativa de calidad, nodos y elementos de malla gruesa, media y fina	96
Tabla 5.8 Tabla comparativa de velocidad promedio de la zona porosa.....	96
Tabla 5.9 Tabla comparativa de cambio de Número de Reynolds y tamaño de malla	98
Tabla 5.10 Resumen de modificación de velocidad.....	100
Tabla 5.11 Resumen de cambio de porosidad en conjunto con velocidad.....	107
Tabla 5.12 Características de simulación en estado transitorio.....	108
Tabla 6.1 Características de simulación en estado transitorio.....	110

1 Capítulo Introducción

En este capítulo se aborda la problemática ambiental derivada del consumo desmedido de recursos y energía, generando una contaminación atmosférica que afecta la salud y el entorno. Destaca la necesidad de equilibrar el desarrollo económico con la preservación ambiental, según autores como Naredo y Ríos. Cuando se llevó a cabo la Cumbre de Johannesburgo en 2002 se resaltó la relación entre alto desarrollo económico y mayor contaminación, impulsando cambios hacia prácticas más sostenibles, especialmente en sectores energéticos e industriales, según la ONU.

La contaminación atmosférica, es provocada principalmente por procesos industriales y combustión, emite sustancias como CO_2 , NO_x , SO_x y partículas, dañando el ambiente y la salud. Por las características de las sustancias, estas se clasifican en contaminantes primarios y secundarios, con distintas fuentes y efectos. La urgencia de adoptar medidas sostenibles en la producción y consumo de energía resalta la importancia de mitigar la contaminación y proteger el medio ambiente y la salud humana. Uno de los contaminantes con más impacto es el CO_2 , por ser el de mayor presencia y del cual se tiene mayor investigación sobre su tratamiento como la absorción o captura de CO_2 .

La absorción de CO_2 se divide en 2 formas distintas, la química y la física. Absorción Química (Reactiva): Utiliza compuestos alcalinos para reaccionar selectivamente con vapores ácidos de CO_2 . El proceso implica la transferencia del CO_2 al solvente, su separación y restauración mediante intercambios de presión y temperatura. Absorción Física: No involucra reacción catalítica y su capacidad de absorción es menor que la química. Su comportamiento es lineal y suele requerir altas presiones. Requiere menos energía para regenerar el solvente, aunque a menudo necesita unidades de refrigeración.

Mientras que la captura de CO_2 se genera a partir de 2 procesos distintos Postcombustión y Precombustión. Postcombustión: Se absorbe el CO_2 del gas generado por la combustión de carbón o productos del petróleo. La ventaja radica en que no interfiere con la generación de energía, siendo aplicable directamente en plantas generadoras de gas contaminado. Precombustión: Se retira el CO_2 antes de la combustión, transformando el combustible en gas de síntesis (CO e H_2). Sin embargo, estos procedimientos antes de la combustión requieren modificaciones complejas en los sistemas productivos generadoras de energía.

Para que esto se lleve a cabo se utilizan elementos Absorbedores de CO₂ donde destacan las aminas, como MEA, DEA y MDEA, muestran alta solubilidad de CO₂. Poseen propiedades que facilitan la absorción del gas ácido. Estas presentan características como la MEA (Monoetanolamina): Presenta alta capacidad de captura de CO₂, pero genera material corrosivo tras la reacción química con el gas. DEA (Dietanolamina): Requiere menos energía para la retención de solvente, pero su capacidad de absorción es menor que las aminas primarias. MDEA (Metildietanolamina): Reacciona con menos energía y requiere menos para la limpieza, pero tiene una velocidad de reacción más lenta.

Finalmente, para utilizar este tipo de alternativas, se plantea el uso de tecnología de lecho fijo, que implica el empleo de materiales filtrantes en un proceso llamado adsorción.

La adsorción es un método que utiliza un lecho de material adsorbente para capturar contaminantes atmosféricos al hacer que un gas entre en contacto con este material, reteniendo los contaminantes debido a interacciones superficiales. Este proceso puede realizarse en una columna fija, conocida como columna de lecho fijo, y requiere considerar varias características del adsorbente, el contaminante y las condiciones óptimas del proceso.

Los reactores de lecho fijo son dispositivos esenciales en esta técnica. Pueden operar en dos modos: adiabático y no adiabático, con aplicaciones diversas según la reacción química deseada. Por ejemplo, los lechos adiabáticos pueden usarse en reacciones con efectos térmicos moderados, mientras que los lechos no adiabáticos se emplean en reacciones que requieren un control estricto de la temperatura debido a sus efectos térmicos considerables.

En estos reactores, el lecho sólido dentro del recipiente funciona como catalizador y suelen ser construcciones relativamente simples al no depender de muchos componentes móviles. Las aplicaciones típicas varían según el tipo de operación del lecho, ya sea adiabática o no adiabática, y abarcan desde hidrogenaciones hasta oxidaciones parciales, dependiendo de las características de la reacción química y las temperaturas requeridas. Por estas características se plantea utilizarlo como alternativa para reducir emisiones de contaminante CO₂.

1.1 Problemática ambiental de la contaminación del aire

Una consecuencia debida al deterioro ambiental en nuestro planeta, y en su mayoría de manera irreversible se da a consecuencia, de la rápida fluidez con la que la humanidad consume materiales y energías, produciendo así residuos de distinta naturaleza. Es por esto, que varios autores, señalan que esta situación obliga a buscar un balance entre el avance en la economía y el correcto uso de los recursos naturales que tenemos disponibles [Naredo, 1996]. Esta idea de desarrollo sostenible se ha planteado como una ideología económica, en donde se argumenta que el desarrollo económico y el uso adecuado de los recursos del medio ambiente deben conjuntarse como una misma ideología y herramienta para su correcto desarrollo [Ríos, 2005].

Cuando se dio a conocer a nivel mundial sobre la problemática de esta índole, se llevó a cabo la famosa Cumbre de Johannesburgo en el año de 2002, donde se mostró que los países con un alto potencial de desarrollo económico tienden a generar una mayor contaminación del aire y agua, provocando con ello el deterioro y estabilidad de la salud física de los seres humanos. Con esto se obligó a los gobiernos, organizaciones y sobre todo al sector energético y productivo a buscar nuevas tácticas enfocadas a cambiar la manera en la que se consume y produce la energía, ya que; prácticamente eran insostenibles. Para la ONU (Organización de las Naciones Unidas), mostro que un uso sustentable de los recursos y procesos eficientes de producción permitirán mitigar la contaminación y producción de residuos tóxicos para la salud de la humanidad [Congreso Anual de la ONU, 2002].

Se conoce como contaminación atmosférica cuando encontramos sustancias que generan un peligro para la vida y la salud de las personas o seres vivos que se encuentran en la naturaleza [Martínez, 2004], también así que produzcan un olor desagradable u reducción de la visibilidad de quien se encuentre cerca. También se llama contaminación atmosférica a las alteraciones en las que se tiene un efecto nocivo a los seres vivos.

Las principales causas de contaminación atmosférica son en su mayoría procesos industriales en los cuales utilizan el proceso de combustión, en el cual generan ciertas emisiones como CO₂ (Dióxido de carbono), NO_x (Óxidos de nitrógeno) SO_x (Óxidos de azufre), los cuales provocan un gran daño ambiental.

Estos contaminantes generados tienen diferentes características, las cuales deben ser analizadas por su fuente para entender mejor su comportamiento en la atmósfera. Estos contaminantes se clasifican según la SEMARNAT [Contreras, 2013] (Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales) en 2 grupos principales como:

- **Contaminantes Primarios:** Son llamados de esta manera por que se vierten de manera directa al medio ambiente como emisores encontramos a chimeneas industriales o automóviles. Y como contaminantes que componen este grupo encontramos a:
 - ✓ **Óxidos de Azufre (SO_x):** Es conformado mediante la reacción del azufre que se encuentra en el carbón y petróleo al entrar en contacto con el aumento de temperatura. Estos se crean a partir de la humedad del ambiente incrementando el deterioro de la atmósfera, reduciendo la claridad del ambiente y generando en su mayoría efectos dañinos tales como la lluvia acidan.
 - ✓ **Monóxido de carbono (CO):** Se conoce por ser de los contaminantes con mayor presencia ubicado regularmente en la zona inferior de la atmósfera. Su generación es inducida por la combustión incompleta del carbono. Su principal característica, es la de ser un fluido inestable que se oxida propagando la creación del dióxido de carbono (CO₂).
 - ✓ **Óxidos de nitrógeno (NO_x):** Es producido mediante la combustión de productos derivados del petróleo, en su mayoría la quema de madera. Otra de las industrias que genera este tipo de contaminante se encuentra la producción de fertilizante, tabaco. Este tipo de óxido requieren también de atención por ser causante del smog.
 - ✓ **Partículas:** Corresponde a los materiales o productos respirables que se encuentran en la atmósfera en sus diferentes estados ya sean líquido o sólido como lo es el polvo, hollín, ceniza, cemento, etc. Y se clasifican de acuerdo a su tamaño.
 - ✓ **Hidrocarburos (HC):** Estas emisiones son provocadas por la quema de productos procedentes del petróleo. Los principales emisores de estos

componentes se encuentran en las pinturas, disolventes y la producción de energía.

- **Contaminantes secundarios:** Estos se generan a partir de los cambios químicos que tienen los contaminantes primarios en la atmosfera, derivado a esto algunos ejemplos son:
 - ✓ **Ozono (O₃):** Aunque este elemento conforma parte de la estructura de la atmosfera, con una baja altura es nocivo por sus características de oxidante por lo que su reacción genera compuestos secundarios.
 - ✓ **Lluvia ácida:** Se conoce así al proceso en el cual ciertos ácidos se concentran en la atmosfera y estos precipitan a la tierra. Ya que los contaminantes secundarios en presencia de humedad, Ozono y otras mezclas químicas pueden llegar a formar ácido sulfúrico (H₂SO₄) que al precipitar cambian el pH del agua.
 - ✓ **Contaminación fotoquímica:** Este tipo de contaminante es resultado de la reacción de la luz solar con los contaminantes primarios los cuales por el hecho de que son susceptibles a oxidarse generan este tipo de reacciones.

1.2 Contaminación ambiental

En países de Latinoamérica como Brasil, Venezuela, Argentina y México son considerados como responsables de las emisiones contaminantes con el 78% del total generadas en esta región del mundo [Valdovinos, 2020]. En el caso de México, 91% de los recursos energéticos primarios para la producción de energía eléctrica proviene de combustibles fósiles, produciendo niveles altos de gases residuales que perjudican la calidad del aire del mundo [Martínez, 2020]. En su mayoría los principales contaminantes surgen de la generación de energía eléctrica provocada por las centrales de generación eléctrica. En la siguiente gráfica se muestra la participación de las industrias en las emisiones de Fluidos de Efecto Invernadero.

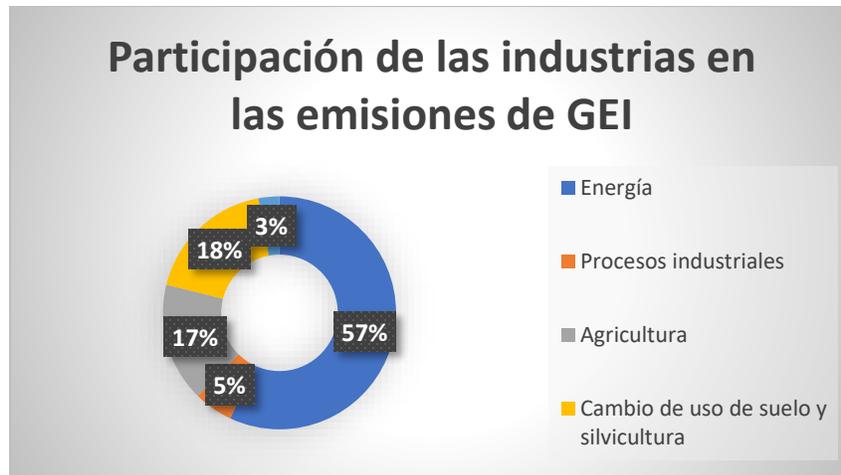


Figura 1.1 Participación de las industrias en la propagación de gases efecto invernadero (fuente: INEGI (Inventario Nacional de Emisiones de Gases de Efecto Invernadero 2010.modificada)

Se conoce que los combustibles fósiles producen alrededor del 60 por ciento de la energía eléctrica en el mundo; el más utilizado por las industrias generadoras de electricidad son los de origen petrolero contribuyendo con un 38% de la electricidad global [Biroi, 1999].

Estas centrales eléctricas son instalaciones con tecnología que transforma los recursos naturales para transformarlos en electricidad. Principalmente, son las centrales llamadas Termoeléctricas las que generan esta situación debido a que el funcionamiento requiere en la combustión de productos de carbón o petrolíferos para generar vapor, el cual se transfiere a una turbina generando la energía eléctrica [Secretaría de Energía, 2012].

La reacción química, necesaria para este tipo de obtención de energía por medio de combustibles fósiles la podemos observar de la siguiente manera [Coitxinca, 2015]:



Se conoce como combustible al elemento que acciona con el oxígeno, con lo cual se genera la combustión. Con ello se libera energía que se transfiere debido a la diferencia de temperatura. En su mayoría se utiliza el combustible líquido como el petróleo, el cual tiene entre sus componentes al nitrógeno (N), azufre (S) y oxígeno (O), los cuales al transformarse por medio de la combustión ocasionan compuestos gaseosos dañinos para el medio ambiente y la salud humana como el CO₂ o NO_x [Coitxinca, 2015].

1.2.1 Dióxido de Carbono

Es conocido por ser un gas compuesto por un átomo de carbono y dos de oxígeno. Dentro de sus propiedades principales está el ser inerte, incoloro, inodoro, denso, ácido e insípido [Davison, 2004]. Este gas se encuentra naturalmente en el ambiente, pero el aumento de su presencia en la atmósfera se ha derivado por la quema de combustibles fósiles.

Varios estudios de las emisiones de CO₂ demuestran que se generan alrededor de 23 Gton/año, representando un 26% de las emisiones contaminantes generadas anualmente [Davison, 2004].

1.2.2 Efecto Invernadero

Es el efecto más conocido producto del incremento de CO₂ en el medio ambiente atmosférico es conocido como efecto invernadero. Se le llama así debido al calentamiento de la superficie de la tierra por el aumento de temperatura retenido en la atmósfera. El principal gas invernadero ocasionado debido a las actividades humanas es el dióxido de carbono, su incremento de este se debe a que la atmósfera retiene la radiación generada por la tierra evitando que este escape de la atmósfera y por ende resulta en una elevación de la temperatura dentro de la superficie terrestre [Coixtinica, 2012].

Cuando incrementa la temperatura debido a los gases invernadero, al existir este aumento de temperatura, suceden cambios significativos en el planeta como el derretimiento de polos, generando un problema para la vida general de nuestro planeta [Coixtinica, 2012].

1.3 Tecnologías de Captura de CO₂

Algunos de los principales métodos de retención de dióxido de carbono es el de la absorción, en el cual, el CO₂ se captura a manera de absorción conocida como a contracorriente en fase líquida que fluye por una o varias columnas empaquetadas. Estos procesos se clasifican de 2 maneras como absorción reactiva o química y física.

1.3.1 Absorción Química

También llamada reactiva utiliza compuestos alcalinos los cuales reaccionan con vapores ácidos de manera selectiva, los solventes utilizados contienen también activadores para que la transmisión de la masa sea eficiente [Figueroa, 2008]. El proceso consiste básicamente en las etapas siguientes [Wong, 2002]:

1. La mezcla de gases que contiene CO₂ se coloca en contacto con el solvente líquido.

2. Después el solvente contenido de CO₂ se traslada a un nuevo contenedor de separación donde se restaura con intercambios de presión y temperatura para después liberarlo.
3. El absorbente que ha sido transformado se mezcla con una corriente nueva de solvente para compensar las pérdidas generadas y regresa a la primera torre.

1.3.2 Absorción Física

Para este tipo de procesos no presentan una reacción catalítica entre los gases y el solvente. Y su capacidad de absorber de los elementos físicos es muy inferior a la de forma química. La relación que manejan los medios físicos tiene un comportamiento prácticamente lineal; y para llevarse a cabo suele necesitar procesos a alta presión [Figuroa, 2008]. Una ventaja de utilizar esta metodología, es que requiere un menor consumo energético para regenerar el solvente. La solubilidad del CO₂ está relacionada a partir de la presión del gas. La mayoría de este tipo de operaciones requieren unidades de refrigeración [Al-Massabi, 2010].

1.4 Captura de CO₂

La captura o también llamada separación de CO₂ es lo más importante a considerar en un estudio de este tipo, debido a que la separación en su mayoría representa alrededor el 80% del costo total [Intergovernmental Panel on Climate Change, 2007]. Los procesos de separación de CO₂ se pueden observar en 2 tipos fundamentales, cada uno se diferencia de acuerdo al momento en el que se lleva a cabo la reacción.

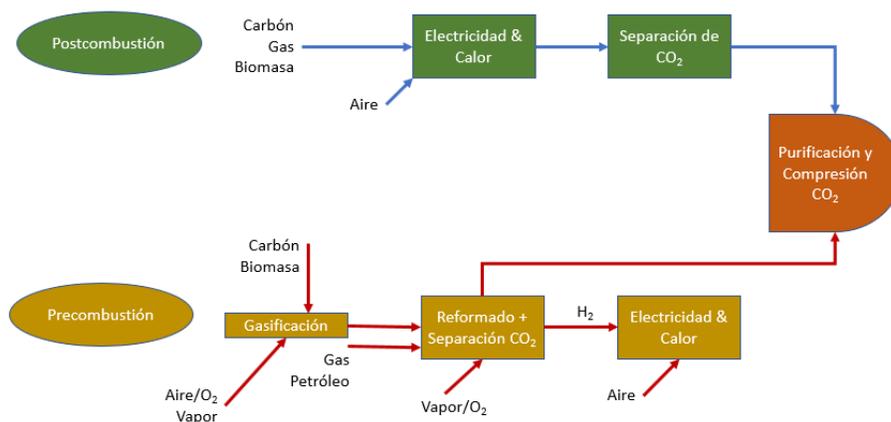


Figura 1.2 (fuente: Simulación del proceso de captura de CO₂ mediante ciclos de carbonatación calcinación de CaO integrado en plantas de producción de energía [Martínez, 2014])

1.4.1 Captura de CO₂ Postcombustión

Para este proceso el gas generado debido a la combustión de carbón o productos procedentes del petróleo con aire, se hace pasar por un equipo en donde se absorbe el CO₂ presente en el elemento y el resto es desechado a la atmosfera. Lo ventajoso es que no interfieren con el proceso propio de la generación de energía y su colocación puede ser directa en la planta donde se genera el gas contaminado [Martínez, 2014].

1.4.2 Captura de CO₂ en Precombustión

Para que se lleve a cabo este tipo de reacción, se debe retirar el CO₂ antes del proceso de combustión. Para que esto suceda el combustible debe transformarse en un gas de síntesis (CO e H₂). El gas obtenido de esta transformación se hace pasar por otra etapa de desplazamiento en agua conocido como WGS por sus siglas en inglés (Water Gas Shift), así facilitar la separación y generación de H₂. Una vez realizada esta separación se obtiene un gas rico en H₂ y con ese gas producir, por ejemplo, producir la electricidad necesaria en una planta eléctrica. Este método de separación de CO₂ es más compleja que la anterior ya que, se deben realizar modificaciones al sistema productivo donde se utilizara [Martínez 2014].

1.5 Elementos Absorbedores de Contaminantes

Gran parte de los investigadores comentan que la captura de CO₂ debe convertirse en una de las primordiales áreas de interés para disminuir la cantidad de este contaminante en el medio ambiente; debido a esta razón el desarrollo de procesos que busquen la captura, absorción o adsorción de CO₂ recobra una investigación importante en busca de la reducción del cambio climático [Figueroa, 2008].

Una alternativa para erradicar la proporción de CO₂ en el ambiente podría consistir en capturar el CO₂ de fuentes gaseosas industriales. Entre los principales generadores que generan un alto volumen de CO₂ se presentan las generadoras eléctricas, donde en su mayoría de ellas utilizan la quema de un derivado petrolífero, para transformar la energía térmica generada en eléctrica, lo cual deriva a que el combustible constituido por una parte de carbono durante el proceso de combustión se genera el CO₂ [Chávez, 2012].

Dentro de la literatura abierta se han reportado una amplia presentación de trabajos prácticos sobre la solubilidad del CO₂ en diversos elementos de temperatura y presión. Un estudio a profundidad de estos escritos demuestra que las más altas solubilidades de CO₂ se pueden

presentar en los productos conocidos como Aminas donde destacan la mono etanolamina (MEA), di etanolamina (DEA) y metildietanolamina (MDEA) [Chávez, 2012].

Cuando mencionamos a las aminas debemos aclarar que estas tienen un grupo hidroxilo, el cual se caracteriza por su cualidad de reducir la presión de vapor e incrementar la solubilidad en líquidos. También cuentan con la característica de un grupo amínico, el cual proporciona una alcalinidad que provoca la absorción del gas ácido [Chávez, 2012]. En la tabla 1.1 se muestran las principales características de las aminas para a la absorción de CO₂.

Tabla 1.1 Principales características de las aminas como métodos de separación de CO₂ Fuente: [Martínez, 2014]

Descripción	Ventajas	Desventajas
Absorción Química -solventes orgánicos: MEA, DEA, MDEA	<ul style="list-style-type: none"> • Eficiencia de captura alta entre 80-95%. • Adecuado para presiones bajas alrededor de los 10 kPa. 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Corrosión de materiales. ▪ Se requiere eliminar impurezas en el gas para evitar degradación en el solvente. ▪ Recuperación de calor.
1. El gas frío entre 40°-60° entra en contacto con el solvente orgánico en una torre de absorción.		
2. La regeneración del solvente tiene lugar en una torre de desorción		

1.5.1 Aminas (MEA)

Este tipo está formado por 2 átomos de hidrógeno enlazados con un átomo de hidrogeno, su principal característica es que son las más alcalinas. Son llamadas aminas primarias y cuentan con una gran capacidad de captura de CO₂; es esencialmente útil cuando el gas tratado con ella se encuentra a una presión baja. Su única desventaja es que, el material resultante de la reacción química con el gas genera un material altamente corrosivo en especial si el

contenedor es de acero [Chávez, 2012]. En la figura siguiente se muestra la estructura química de la mono etanolaminas.

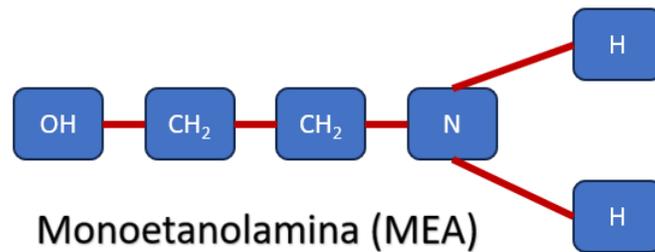


Figura 1.3 Esquema químico general del mono etanolamina modificado [Chávez, 2014]

1.5.2 Aminas (DEA)

También llamadas aminas secundarias, al reaccionar poseen una cualidad de calor mayor a las primarias, como consecuencia requieren de menor cantidad energética donde se lleva a cabo la retención de solvente. A consecuencia de esto, la capacidad de absorción es mucho menor en comparación con las aminas primarias [Chávez, 2012]. En la figura mostrada a continuación se muestra la estructura general química de las dietanolaminas.

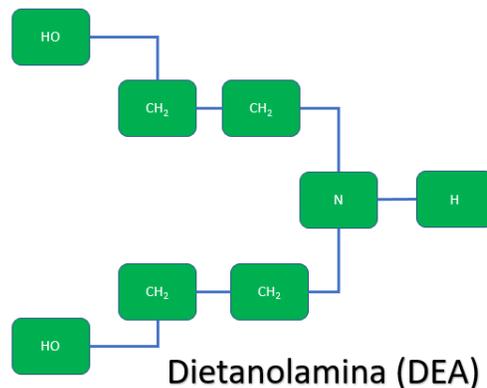


Figura 1.4 Esquema químico general de la Dietanolamina modificado [Chávez, 2014]

1.5.3 Aminas (MDEA)

Por la característica de que no requiere ningún átomo de hidrógeno enlazado son llamadas aminas terciarias. La principal característica que las diferencia con las primarias y secundarias es la capacidad para reaccionar con el calor, es decir requieren de una menor energía para limpiar la amina. La desventaja principal que esta representa es la baja velocidad de reacción, con lo cual requiere gran recirculación [Chávez, 2012].

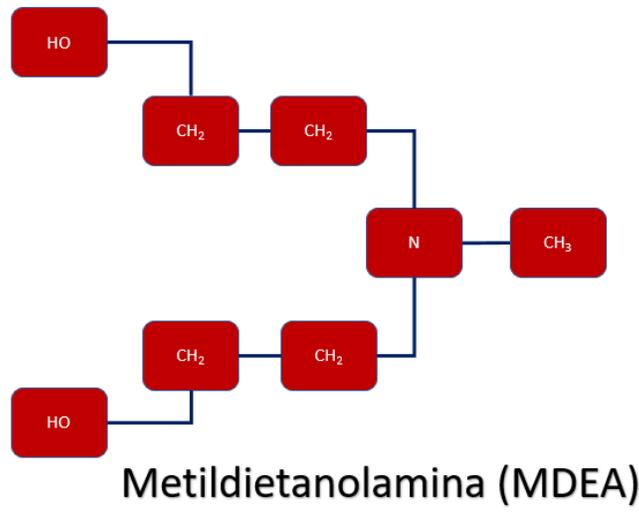


Figura 1.5 Esquema químico general de la Metildietanolamina modificado [Chávez, 2014]

1.6 Reactor de lecho

En el mundo cada día se hace más relevante el interés por desarrollar proyectos que se comprometan a reducir la contaminación ambiental, una de las industrias que tiene más influencia en emisiones de gases nocivos es la industria de la creación de energía por medio de combustibles fósiles. Una estrategia que permitiría atender este problema es el uso de la tecnología de lecho fijo, donde el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC) lo define como un lecho empacado que comprende un material filtrante de alta porosidad, el cual puede ser orgánico o sintético que sirve como soporte para absorber ciertos componentes que se desean separar de un fluido, algunos de los productos filtrantes más recurrentes son tierra, perlita, pedazos de maderas, composta, por mencionar algunos. El principio de estos filtros de lecho reside en atravesarlos a través de una corriente gaseosa impregnada de humedad que contiene el contaminante a través del lecho en donde estos materiales son degradados por el material filtrante.

Se conoce de una alternativa considerada actualmente se encuentra en los procesos de adsorción los cuales son utilizados para la eliminación, tratamiento y purificación de contaminantes atmosféricos [Rafati, 2017]. La adsorción es un proceso que involucra el contacto gas-sólido, donde el gas se transfiere a través de un lecho de material adsorbente reteniendo así los contaminantes por las interacciones superficiales. El proceso puede realizarse en un sistema de modo fijo, llamado también como columna de lecho fijo. Donde deben considerarse las características del adsorbato, adsorbente, reactividad de la superficie, el área superficial del adsorbente, la configuración óptima del proceso y la selección de materiales que no impliquen grandes costos.

Un lecho fijo está conformado por un material compacto y sólido dentro del recipiente. El lecho funciona como catalizador, son relativamente sencillos por su construcción, al no depender de tantos elementos móviles, Los reactores de lecho fijo (RLF), operan de dos formas distintas, dependiendo de las operaciones por transferencia de calor, en las que se encuentren como lo son adiabática y no adiabática [Ascencio, 2017]. En la tabla 1.2 siguiente observamos las características de los lechos por su operación.

Tabla 1.2 Aplicaciones típicas de los reactores de lecho fijo modificada Fuente: [Ascencio, 2017]

Identificación	Como se utiliza	Aplicaciones típicas
Lecho Fijo adiabático único	Reacciones químicas con efecto térmico asociado (exo o endotérmico) sin limitaciones por el equilibrio químico.	<ul style="list-style-type: none"> • Hidrogenaciones moderadas
Lechos adiabáticos en serie con enfriamiento o calentamiento intermedio	Reacciones químicas limitadas por el posicionamiento del equilibrio químico con conversiones elevadas.	<ul style="list-style-type: none"> • Oxidación de SO₂ • Reformado de naftas
Reactor multitubular no adiabático	Reacciones químicas de elevado efecto térmico. Requiere un control de temperatura.	<ul style="list-style-type: none"> • Hidrogenaciones • Oxidaciones parciales
Reactor no adiabático con calentamiento directo en zona horno	Reacciones de considerable endotermicidad, elevada temperatura de reacción requerida.	<ul style="list-style-type: none"> • Reformado de gas natural

En la siguiente figura 1.6 se muestra el ejemplo de un reactor de lecho fijo monofásico donde se describen sus partes y componentes que lo conforman.

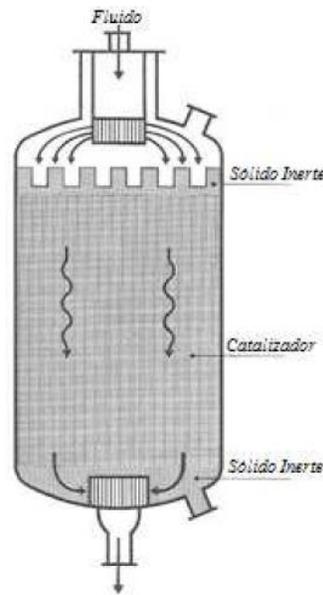


Figura 1.6 Esquema de la conformación de un reactor de lecho fijo adiabático [Asencio, 2017]

Para la siguiente figura 1.7 se muestra el ejemplo de un reactor de lecho fijo multitubular monofásico donde se describen sus partes y componentes que lo conforman. Para comprender mejor como las diferentes configuraciones de reactores interactúan con el elemento a modificar químicamente.

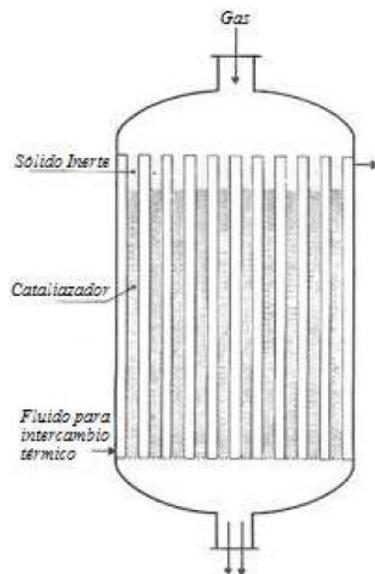


Figura 1.7 Esquema de la conformación de un reactor de lecho fijo multitubular monofásico [Asencio, 2017]

1.6.1 Características de los reactores de lecho fijo

Para comenzar a identificar la estructura que conforma un reactor de lecho fijo debemos comprender la formación y utilidad de un dispositivo de este tipo. Reactor como lo menciona la real academia de la lengua se precisa como: un contenedor materializado para que en su interior se generen reacciones químicas [Asencio, 2017]. Mientras que Lecho: Es una capa de los terrenos sedimentarios. Con esta información podemos concluir que un reactor de lecho fijo es un dispositivo en el cual se producirá una reacción química donde una cama sedimentaria genera cierta reacción química [Núñez, 1991].

El uso de estos dispositivos varía según las operaciones industriales en las que se desea utilizar, el lecho cambia de fase por partículas compactas y son por:

- ✓ Trasmisión de masa de columnas empacadas
- ✓ Reacciones químicas utilizando catalizadores
- ✓ Filtración
- ✓ Intercambiadores regenerativos de calor
- ✓ Absorción en torres empacadas

Para este tipo de procesos se encuentran varias configuraciones de la fase sólida como lo son:

- Fluida, reactores catalíticos de lecho fluidizado
- Estacionaria, torres empacadas

Depende también de la velocidad del fluido las partículas pueden:

- Quedar suspendidas
- Caer por efecto de gravedad
- Ser arrastradas con el fluido

En un lecho fijo, el flujo que atraviesa mediante las zona porosa entre las partículas y dado que en su mayoría estos no son uniformes, la fase fluida se ve acelerada y frenada cuando realiza su paso por el lecho.

2 Capítulo Metodología

La mecánica de fluidos aborda el estudio de los fenómenos fluidodinámicos utilizando ecuaciones que rigen el comportamiento de los fluidos. Sin embargo, resolver estas ecuaciones no es sencillo ni general. La Dinámica de Fluidos por Computadora ofrece una aproximación mediante modelos que simulan la realidad, pero estos deben ser validados con datos experimentales para obtener resultados precisos.

Los métodos numéricos son herramientas fundamentales para resolver problemas complejos en ingeniería. Se clasifican según su dimensionalidad y métodos de cálculo, dividiéndose en:

Métodos de Diferencias Finitas: Discretizan ecuaciones en una malla espacial y aproximan derivadas. Son efectivos para resolver ecuaciones diferenciales en dominios irregulares.

Métodos de Elementos Finitos: Similar a las diferencias finitas, pero subdividen el dominio en elementos más pequeños. Son útiles para problemas con geometrías no estándar.

Métodos de Volumen Finito: Discretizan el dominio en volúmenes y se centran en los flujos a través de sus fronteras. Conservan propiedades como la masa o la energía.

Modelos de Lattice Boltzmann: Simulan el flujo de fluidos mediante partículas ficticias en una red espacial, útiles para flujos complejos y multifásicos.

Modelos de Elementos de Contorno: Se concentran en la frontera del dominio, resolviendo problemas de flujo alrededor de objetos sólidos o de interacción fluido-estructura.

Modelos de Partículas Suavizadas (SPH): Representan el fluido como partículas distribuidas, calculando propiedades basadas en interacciones locales.

Desde la década de 1930, las limitaciones tecnológicas impulsaron el interés en el desarrollo de metodologías computacionales para el análisis de fluidos. Se realizó el primer análisis de simulación numérica de flujo alrededor de un cilindro en Inglaterra en 1933, sin una computadora, empleando cálculos manuales durante aproximadamente un año y medio. Este enfoque fue validado posteriormente en Japón al resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para el mismo cilindro.

El estudio de fluidos, especialmente de aquellos que contaminan el ambiente, es crucial para mejorar la calidad de vida. Se han desarrollado métodos para comprender el comportamiento de gases contaminantes y crear dispositivos de filtración. El modelado numérico implica la resolución de algoritmos matemáticos complejos, utilizando software especializado como Fluent, ANSYS o OpenFoam.

La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) se aplica en varios campos de la ingeniería, empleando principios matemáticos para analizar el movimiento tridimensional de fluidos. Esta herramienta es fundamental para investigar el comportamiento de los fluidos bajo diversas condiciones físicas y geométricas, ofreciendo soluciones a fenómenos en los flujos.

El CFD optimiza tiempo y recursos económicos en comparación con modelos físicos, siempre que esté bien calibrado y sus resultados sean validados. Además, complementa los modelos físicos al proporcionar datos que no son visibles en estos, como fuerza de arrastre o caída de presión.

La fluidodinámica computacional utiliza técnicas numéricas para resolver problemas de ingeniería relacionados con fluidos, transferencia de calor, masa, reacciones químicas o cambios de fase. El método del volumen finito es crucial en este proceso, permitiendo la simulación del comportamiento de los fluidos mediante ecuaciones complejas resueltas iterativamente por computadora.

Dentro de los softwares utilizados para resolver problemas de fluidodinámica se encuentra ANSYS Fluent, COMSOL Multiphysics, OpenFOAM, CFD++, FloEFD y STAR-CCM+ son fundamentales en la simulación de dinámica de fluidos computacional (CFD), cada uno con sus propias características y capacidades para resolver problemas complejos relacionados con el flujo de fluidos y la transferencia de calor.

Los requisitos generales del sistema para instalar y utilizar software CFD se detallan en la tabla 2.2, especificando los sistemas operativos y las configuraciones de hardware recomendadas para un rendimiento óptimo.

Además, se describe el proceso de modelado CFD en tres etapas principales: preprocesamiento, resolución y postprocesamiento. El preprocesamiento incluye la preparación de la geometría, la creación de mallas y la definición de las condiciones del

fluido y de frontera. La resolución implica la discretización de las ecuaciones y el ajuste de la malla para obtener resultados precisos. El postprocesamiento se centra en la visualización, análisis y validación de los resultados obtenidos.

2.1 Técnicas de modelación numérica

Para los problemas de ingeniería el comportamiento que tienen los fluidos resulta ser difícil y complicado de describir. Sin embargo, la Mecánica de fluidos ha resultado ser el área científica que realiza el análisis de fenómenos fluidodinámicos utilizando las ecuaciones que rigen el funcionamiento de los fluidos, aunque estas ecuaciones no tienen una solución simple ni general. La llamada Dinámica de Fluidos por Computadora permite realizar una aproximación a las ecuaciones complejas y así obtener modelos semejantes a la realidad, sin embargo, estos deben ser probados con datos experimentales para llegar a un resultado más preciso.

Gran cantidad de los fenómenos que se llevan a cabo en la naturaleza son tan complejos que resulta difícil tratarlos únicamente con métodos numéricos. Por esta razón es conveniente acudir al empleo de métodos experimentales como herramienta en la obtención de soluciones prácticas, aplicadas a problemas de ingeniería. [Escuela de Ingeniería de Antioquía, 2017].

El diseño de los trabajos fundadores de los modelos numéricos se desarrolló para resolver un problema en específico, donde prácticamente muestra un flujo de gas o líquido, actualmente los modelos se hacen genéricamente para aumentar la capacidad para resolver una mayor cantidad de flujos similares, con algún módulo adicional para entender algunos problemas actuales como transporte de sedimentos, esparcimiento de contaminantes y calidad de aire o agua.

Algunas maneras de clasificar la modelación numérica, según su dimensionalidad se tiene:

1. Por el tipo de flujo
2. Por métodos de cálculo
3. Variación de tiempo [Vázquez, 2003]

También se clasifican en métodos de cálculo complejos divididos en [Vázquez, 2003]:

Métodos de Diferencias Finitas: Estos métodos discretizan las ecuaciones de la dinámica de fluidos en una malla o rejilla espacial. Luego, las derivadas espaciales se aproximan mediante diferencias finitas. Son eficaces para resolver ecuaciones diferenciales parciales en dominios irregulares.

La idea fundamental detrás de este método es reemplazar las derivadas de una función con diferencias finitas, lo que convierte la ecuación diferencial en un conjunto de ecuaciones algebraicas que pueden resolverse computacionalmente.

Por ejemplo, considera la ecuación de difusión unidimensional:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

Ecuación 2.1 Ecuación de difusión unidimensional

Aplicando diferencias finitas en el espacio y el tiempo, se puede discretizar esta ecuación. Por ejemplo, utilizando una malla uniforme en el espacio y un paso discreto en el tiempo, se pueden aproximar las derivadas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &\approx \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &\approx \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \end{aligned} \quad (2)$$

Ecuación 2.2 Discretización de ecuación de difusión unidimensional

Donde

- u es la variable de interés (como la temperatura o la concentración)
- D es el coeficiente de difusión
- i representa los puntos en la rejilla espacial
- n indica los pasos en el tiempo.

Al sustituir estas aproximaciones en la ecuación diferencial, se obtiene una fórmula numérica que relaciona los valores de la función en diferentes puntos de la malla en pasos de tiempo sucesivos. Resolviendo este conjunto de ecuaciones algebraicas, se puede obtener una aproximación numérica de la evolución de la variable u en el dominio y el tiempo.

Este método es ampliamente utilizado en la resolución de ecuaciones diferenciales en diversos campos científicos y de ingeniería, incluida la mecánica de fluidos, la transferencia de calor, la dinámica de sólidos y muchos otros.

Métodos de Elementos Finitos: Similar a los métodos de diferencias finitas, pero en lugar de trabajar con nodos en una malla, los elementos finitos subdividen el dominio en elementos más pequeños. Se utilizan para problemas complejos y geometrías no estándar.

Los Métodos de Elementos Finitos (MEF) en la dinámica de fluidos son técnicas numéricas que discretizan el dominio del fluido en elementos finitos para resolver ecuaciones que describen su comportamiento.

En la dinámica de fluidos, los MEF se utilizan para resolver ecuaciones como las ecuaciones de Navier-Stokes (que describen el movimiento del fluido) y otras ecuaciones diferenciales parciales que modelan fenómenos fluidodinámicos.

La implementación típica de los MEF para la dinámica de fluidos implica varios pasos:

- **Discretización del dominio:** Se divide el dominio en una malla o rejilla de elementos finitos. Estos elementos pueden ser triángulos, cuadriláteros, tetraedros o hexaedros, dependiendo de la dimensionalidad del problema.
- **Formulación de las ecuaciones:** Se derivan las ecuaciones de Navier-Stokes u otras ecuaciones pertinentes para el flujo en cada elemento finito. Se pueden utilizar métodos de interpolación para aproximar las cantidades desconocidas dentro de cada elemento.
- **Aplicación de condiciones de contorno:** Se aplican las condiciones de contorno al sistema de ecuaciones obtenido. Estos pueden incluir restricciones en velocidades, presiones, temperaturas, entre otros.
- **Resolución del sistema de ecuaciones:** Se resuelve el sistema de ecuaciones resultante, generalmente mediante métodos numéricos como el método de los

mínimos cuadrados, métodos iterativos (como el método de Newton-Raphson), o métodos de solución directa (como la factorización LU).

- **Postprocesamiento:** Se analizan los resultados obtenidos, como la velocidad, la presión, los patrones de flujo, y se generan visualizaciones que ayudan a comprender el comportamiento del fluido.

Los MEF tienen la ventaja de ser versátiles y aplicables a problemas con geometrías complicadas y condiciones variables. Sin embargo, su implementación precisa y eficiente puede requerir un cuidadoso ajuste de parámetros y una comprensión profunda de la física del flujo en cuestión. Además, suelen necesitar poder computacional para resolver problemas de alta complejidad y dimensiones.

Métodos de Volumen Finito: Estos métodos discretizan el dominio en volúmenes finitos y se centran en el flujo a través de las fronteras de estos volúmenes. Son especialmente útiles para conservar propiedades como la masa o la energía en las simulaciones.

Los Métodos de Volumen Finito (MVF) son técnicas numéricas ampliamente utilizadas en la dinámica de fluidos para resolver ecuaciones de conservación en forma integral. Estos métodos discretizan el dominio en volúmenes finitos y se centran en el flujo a través de las fronteras de estos volúmenes.

En la dinámica de fluidos, los MVF se aplican comúnmente para resolver ecuaciones fundamentales como las ecuaciones de conservación de la masa, la cantidad de movimiento (momentum) y la energía en forma integral.

El proceso típico de los MVF en dinámica de fluidos incluye:

- **Discretización del dominio:** Se divide el dominio en volúmenes finitos (celdas o elementos de control) que cubren todo el espacio del fluido.
- **Formulación de ecuaciones de conservación:** Se aplican las ecuaciones de conservación (masa, momento y energía) a nivel integral en cada uno de estos volúmenes finitos.
- **Aproximación de flujos a través de las fronteras:** Se evalúan e interpolan los flujos de masa, cantidad de movimiento y energía a través de las fronteras de los volúmenes finitos. Aquí es donde se consideran los términos de flujo y transporte.

- Resolución del sistema de ecuaciones: Se discretizan las ecuaciones integrales y se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas que se resuelven numéricamente. Esto implica la implementación de métodos numéricos para la solución de sistemas de ecuaciones lineales o no lineales.
- **Aplicación de condiciones de contorno:** Se incorporan las condiciones de contorno en el modelo, lo que puede incluir restricciones en las fronteras del dominio.
- **Postprocesamiento de resultados:** Se analizan y visualizan los resultados obtenidos, como la distribución de velocidades, presiones, temperaturas, y se interpretan para comprender el comportamiento del flujo.

Los MVF son populares porque conservan propiedades físicas fundamentales (como la masa, el momentum y la energía) en cada celda, lo que los hace adecuados para resolver una amplia gama de problemas en la dinámica de fluidos. Sin embargo, su implementación puede ser compleja y computacionalmente intensiva, especialmente en dominios tridimensionales o con fenómenos complejos.

Modelos de Lattice Boltzmann: Basados en la mecánica estadística, estos modelos simulan el comportamiento de partículas ficticias en una red espacial, representando así el flujo de fluidos. Son útiles para flujos complejos y multifásicos.

Los modelos de Lattice Boltzmann (LB) son una técnica de simulación numérica utilizada en la dinámica de fluidos para estudiar el comportamiento de los fluidos a nivel microscópico. A diferencia de otros métodos que resuelven ecuaciones de conservación macroscópicas (como las ecuaciones de Navier-Stokes), los modelos de Lattice Boltzmann se basan en principios microscópicos y simulan el flujo del fluido mediante el movimiento de partículas ficticias en una malla discreta.

El enfoque LB se basa en el concepto de distribuciones de velocidad discretas en una red espacial regular. Estas distribuciones representan las probabilidades de encontrar partículas con ciertas velocidades en cada punto de la red. Las reglas de evolución de estas distribuciones a lo largo del tiempo permiten simular el comportamiento colectivo de las partículas, generando patrones de flujo macroscópicos.

El proceso típico en un modelo de Lattice Boltzmann incluye:

- **Discretización del espacio:** Se establece una malla tridimensional regular (como una red cúbica) donde se colocan puntos discretos que representan la posición de las partículas y se definen direcciones de velocidad discretas para cada punto de la red.
- **Colisión de partículas:** Las partículas en cada punto de la malla interactúan entre sí en intervalos de tiempo discretos (pasos de tiempo). Durante estas colisiones, las partículas ajustan sus distribuciones de velocidad de acuerdo con reglas específicas que conservan la masa, el momentum y la energía.
- **Advección o propagación:** Las partículas se mueven a lo largo de líneas de flujo determinadas por las distribuciones de velocidad. Esto simula el transporte del fluido a través de la malla.
- **Condiciones de frontera:** Se definen las condiciones de contorno en la malla, que pueden incluir límites de velocidad, obstáculos físicos o cualquier otra restricción específica del problema.
- **Postprocesamiento de datos:** Se analizan los resultados para obtener información macroscópica, como perfiles de velocidad, patrones de flujo o características del fluido en estudio.

Los modelos de Lattice Boltzmann son especialmente útiles para simular flujos complejos, como fluidos no newtonianos, fenómenos de interfaz y problemas de múltiples fases. Además, son paralelos, lo que los hace eficientes en sistemas informáticos de alto rendimiento para resolver problemas de gran escala en dinámica de fluidos.

Modelos de Elementos de Contorno (BEM): Se centran en la frontera de un dominio, representando las condiciones de contorno. Son útiles para problemas de flujo alrededor de objetos sólidos o para problemas de interacción fluido-estructura.

Los Modelos de Elementos de Contorno (BEM, por sus siglas en inglés Boundary Element Method) son técnicas numéricas utilizadas en la dinámica de fluidos para resolver problemas en los que se enfocan en la superficie de un dominio en lugar de discretizar todo el volumen. En lugar de dividir el dominio en elementos finitos como se hace en los métodos de elementos finitos, en BEM, se enfocan en la frontera o límite del dominio para resolver problemas de flujo alrededor de objetos sólidos o para problemas de interacción fluido-estructura.

El proceso básico de los modelos de elementos de contorno en dinámica de fluidos incluye:

- ❖ **Discretización de la frontera:** Se discretiza la superficie del objeto en elementos de contorno o paneles. Estos elementos representan la geometría del cuerpo sólido o la interfaz entre el fluido y el sólido.
- ❖ **Formulación de las ecuaciones integrales:** Se desarrollan ecuaciones integrales que relacionan las condiciones en la frontera (como la presión, velocidad u otras cantidades físicas) con la distribución de esas cantidades en la superficie del objeto.
- ❖ **Solución de las ecuaciones integrales:** Se resuelven numéricamente estas ecuaciones integrales utilizando métodos de solución específicos para BEM, como la discretización de la integral mediante métodos de cuadratura, entre otros.
- ❖ **Cálculo de las cantidades físicas:** Se calculan las cantidades de interés, como la presión, la fuerza sobre la superficie del objeto o el flujo alrededor de él, utilizando los resultados obtenidos de las ecuaciones integrales.

Los modelos de elementos de contorno son útiles en situaciones donde la frontera del dominio es fundamental para el fenómeno de interés, como en el flujo alrededor de objetos sumergidos en fluidos, como barcos, aviones, estructuras marinas, etc. También son eficaces para resolver problemas de interacción fluido-estructura donde se necesita analizar cómo un fluido afecta la superficie de una estructura sólida y viceversa. Además, pueden ser computacionalmente eficientes ya que la discretización se realiza solo en la frontera y no en todo el dominio.

Modelos de Partículas Suavizadas (SPH): Utilizan partículas con distribuciones de peso para aproximar las propiedades del fluido. Son efectivos para flujos complejos, interacciones fluido-fluido y fluido-sólido.

Los Modelos de Partículas Suavizadas (SPH, Smoothed Particle Hydrodynamics) son métodos numéricos utilizados en dinámica de fluidos para simular el comportamiento de fluidos y otros materiales deformables. A diferencia de los métodos tradicionales que discretizan el dominio en una malla o elementos finitos, SPH trata al fluido como una colección de partículas distribuidas en el espacio.

El proceso básico de SPH en dinámica de fluidos incluye:

- ✓ **Discretización mediante partículas:** El dominio del fluido se representa mediante un conjunto de partículas distribuidas en el espacio. Cada partícula lleva consigo propiedades como masa, densidad, velocidad, presión, entre otras.
- ✓ **Funciones de suavizado:** Se utilizan funciones de suavizado (kernels) para calcular las propiedades del fluido en un punto basándose en las propiedades de las partículas vecinas. Estas funciones asignan pesos a las partículas cercanas según su distancia.
- ✓ **Interacción entre partículas:** Las propiedades de las partículas se actualizan en cada paso de tiempo, teniendo en cuenta la interacción entre las partículas vecinas a través de las funciones de suavizado. Se calculan las fuerzas, la presión y otras cantidades físicas basadas en las interacciones locales entre las partículas.
- ✓ **Resolución de ecuaciones de conservación:** Se aplican ecuaciones de conservación (como las de conservación de masa y momento) para cada partícula, utilizando las interacciones calculadas entre las partículas vecinas.
- ✓ **Integración temporal:** Se avanza en el tiempo para simular la evolución del fluido a medida que las partículas cambian de posición y velocidad.

Los SPH son versátiles y adecuados para simular fluidos con superficies libres, flujos complejos y fenómenos de impacto o interacción entre múltiples materiales. Además, son útiles en simulaciones de fenómenos multifásicos, como la interacción entre líquidos y gases, colisiones, y problemas de flujo con fuertes gradientes o discontinuidades.

Estos métodos han ganado popularidad en aplicaciones donde la geometría del problema es compleja o cambia con el tiempo, como en la modelización de cuerpos astronómicos, el estudio de tsunamis, la dinámica de fluidos en ingeniería y el comportamiento de materiales deformables.

Estas técnicas se aplican según la complejidad del problema, la geometría del dominio y la precisión requerida en la simulación. A menudo, se combinan o adaptan para abordar diferentes aspectos de la dinámica de fluidos, desde flujos simples hasta fenómenos altamente complejos.

2.2 Modelación de Flujo de Fluidos

Desde los años 30s, se encontraban diversas limitantes tecnológicas para realizar un avance en los estudios analíticos, esto fue el principal detonante para el aumento en el interés del desarrollo de metodologías computacionales. Debido a esto, el primer análisis de simulación de forma numérica (sin utilizar una computadora) de un flujo fue alrededor de un cilindro hecha en el país de Inglaterra por A. Thm y mostrada por Taylos en el año de 1933. La mayoría de sus resultados fueron validados por Kwaguti en Japón cuando logro resolver las ecuaciones de Navier-Stokes para un flujo del conocido cilindro de Reynolds. Para lograr esto y resolver toda la información numérica se tardó aproximadamente un año y medio; trabajando alrededor de unas 20 horas semanales con ayuda solo de una calculadora. [Cimbala,2014].

El estudio de los fluidos y sobre todo de aquellos que generan una contaminación ambiental, resultan una herramienta útil para facilitar una ventaja en cuanto a la calidad de vida de la población y basado en esto es que se ha buscado el desarrollo de métodos que nos ayuden a comprender el comportamiento de gases contaminantes y así desarrollar dispositivos que permitan una filtración de fluidos dañinos para que mitiguen el deterioro al medio ambiente, de ahí parte la importancia de desarrollar una modelación para entender el fluido en diversas circunstancias y bajo ciertos cálculos.

Para un modelado numérico se comprende la solución de algoritmos matemáticos complicados sobre la asignatura de mecánica de fluidos, para resolver este tipo de sistemas complejos se utilizan softwares dedicados a este fin por medio del cual la toma de tiempo de resolución se comprime en gran medida;[Oreskes, 2004].

Para la Dinámica de fluidos Computacional se tienen 2 tipos de softwares para realizar estos estudios, el primero es de tipo privado como lo son Fluent o ANSYS en los cuales es requerido adquirir una licencia para poder utilizarlo y el otro tipo que es de manera libre (sin necesidad de una licencia) como lo es OpenFoam para lograr la resolución de estos sistemas y ecuaciones mencionados.

ANSYS es un programa de simulación y análisis de propósito general, es decir tiene gran variedad de opciones de modelado más allá de solo fluidos. Para nuestro caso del desarrollo de fluidos tiene herramientas de modelado, malla y simulación en una interfaz fácil de

manejar y comprender que da una orientación a la resolución de una amplia variedad de problemas.

ANSYS integra una plataforma llamada Workbench que permite compartir información de modelado y malla. Un ejemplo de esto es un escenario de flujo puede utilizarse como frontera en un problema de diseño estructural. [National Academy, 2001].

La Dinámica de Fluidos por Computadora (CFD) está orientada a la aplicación en gran cantidad de campos de ingeniería como la Mecánica, Medicina, Química, Aeroespacial, etc. Las cuales utilizan el estudio matemático de movimiento de los fluidos de manera tridimensional basadas en el principio de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía. [Berrones, 2017].

Para la mecánica de fluidos, el CFD se ha convertido en una herramienta muy importante para el estudio y la investigación del comportamiento de un fluido que trabaja bajo ciertas características físicas y geométricas; además de proporcionar ayuda para obtener la solución a fenómenos existentes en flujos a partir de ecuaciones, esto es representativo en dinámica de fluidos por tomar en cuenta términos como disipación de energía. [Berrones, 2017].

Además, el uso del CFD permite optimizar tiempo y recursos económicos respecto a un modelo físico siempre y cuando el modelo numérico este bien calibrado y sus resultados sean validos en comparación a un modelo físico, o respecto a otro modelo numérico con resultados validos previamente calibrado. [Berrones, 2017].

El CFD, representa una herramienta que ayuda a los investigadores a completar sus estudios con indicadores que no se pueden visualizar en los modelos físicos, aunque estos modelos pueden complementarse ya que da solución a las ecuaciones del flujo de fluidos con ayuda de las computadoras. Por ejemplo, se pueden obtener propiedades globales como: fuerza de arrastre, caída de presión o potencia, una gran cantidad de datos que permiten concluir sobre el funcionamiento de un proceso u aparato [Cimbala, 2014].

La definición concreta mayormente usada para la modelación de flujo de fluidos o también llamada fluidodinámica computacional, como la disciplina que tiene la finalidad en mostrar el comportamiento mediante el uso de técnicas numéricas, para problemas relacionados con problemas de ingeniería relacionados con flujo de fluidos, transferencia de calor, masa,

reacciones químicas o cambios de fase. Para la obtención de resultados utiliza la solución numérica de las ecuaciones matemáticas que influyen en estos fenómenos, basándose al método del volumen finito. Este método se sustenta con el uso de una zona de control, donde las ecuaciones son resueltas de forma iterativa. Gracias a esto se consiguen resultados para la zona de control. Al ser ecuaciones complejas en gran cantidad se lleva a cabo por computadora, para así lograr simular el comportamiento de un fluido con las diferentes utilidades que tiene en la ingeniería. En la siguiente figura 2.1 se muestran de manera simple ecuaciones más importantes que son utilizadas en este tipo de procesos.

The diagram consists of two vertically stacked sections. The top section has a white background with a dark purple border. It contains the mass balance equation:
$$\left(\text{Masa total que entra al VC durante } \Delta t \right) - \left(\text{Masa total que sale del VC durante } \Delta t \right) = \left(\text{Cambio neto de masa dentro del VC durante } \Delta t \right)$$
 Below the equation is a dark purple bar with the text "Conservación de la masa" in white. The bottom section also has a white background with a dark purple border. It contains the energy balance equation:
$$\left(\text{Energía total que entra al sistema} \right) - \left(\text{Energía total que sale del sistema} \right) = \left(\text{Cambio en la energía total del sistema} \right)$$
 Below the equation is a dark purple bar with the text "Balance de energía" in white.

Figura 2.1 Simplificación de ecuaciones de conservación de masa y energía (fuente: Termodinámica Yunes Cengel 7ma edición)

Las aplicaciones del CFD en general pueden aplicarse como se muestra en la figura 2.2 donde se muestra las áreas de oportunidad que ofrece el desarrollo de este estudio.



Figura 2.2 Áreas de aplicación de la dinámica de fluidos computacionales elaboración propia

Entre las principales características del CFD destaca la del diagnóstico, diseño y optimización de maquinarias como:

- Reactores multifase de lechos en sus diferentes configuraciones como fijo, móvil y fluidizado: gas-líquido, gas-sólido, líquido-sólido.
- Mezcladores
- Maquinas encargadas de realizar transferencia de calor o masa: calderas y hornos por mencionar algunos.
- Equipos filtrantes, membranas o decantadores.
- Calefacciones, ventiladores o refrigerantes.
- Sistemas rotativos como turbinas o compresores

La contribución más importante en la parte de estudios químicos hace referencia particularmente al diseño de mecanismos que brindan la oportunidad de crear o adaptar nuevos modelos que favorezcan a la predicción de su funcionamiento a partir del conocimiento de la geometría y sus especificaciones de operación. Con esto la realización de estudios para analizar equipos diseñados mediante CFD, ha tenido un mayor auge, debido a que en su mayoría las pruebas experimentales resultan ser costosas. Ofreciendo una opción para entender el comportamiento previo a la experimentación.

Los sistemas de CFD son utilizados para resolver gran cantidad de problemáticas con las áreas de presión, fluidos, distribuciones y reacciones químicas. Las ventajas y desventajas que presentan este tipo de soluciones se muestran en la tabla 2.1 de manera siguiente:

Tabla 2.1 Ventajas y Desventajas de los sistemas CFD a considerar para realizar un análisis correcto.

Ventajas	Desventajas
<ul style="list-style-type: none"> • Permiten realizar ensayos de diseño sin utilizar un laboratorio o costo mayor. 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ La mayoría de equipos son de un costo alto para el correcto funcionamiento del programa.
<ul style="list-style-type: none"> • Realizar esta simulación requiere menor cantidad de tiempo que una experimentación real. 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ La experiencia de quien realice el análisis debe ser alta para alcanzar el análisis deseado.
<ul style="list-style-type: none"> • Simulación de fronteras más sencillas y adaptables considerando diferentes alternativas. 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ En algunos casos los modelos no pueden establecerse adecuadamente.
<ul style="list-style-type: none"> • Análisis de condiciones inestables con riesgo potencial para evadir accidentes en la realidad. 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ En el uso de softwares libres, suele resultar complicada la instalación y alcance de la investigación.
<ul style="list-style-type: none"> • Brinda informes detallados de zonas de medición difícil de obtener. 	

2.2.1 Softwares de CFD

Existen varios paquetes de softwares los cuales se conforman con varios algoritmos numéricos donde en su mayoría se tratan fenómenos relacionados al transporte, transferencia de calor entre los cuales resaltan.

1. ANSYS Fluent: Un software líder en simulación de dinámica de fluidos computacional (CFD) utilizado para resolver una amplia gama de problemas de flujo de fluidos y transferencia de calor. Ofrece una amplia variedad de modelos y capacidades para simular fenómenos fluidodinámicos complejos.

2. COMSOL Multiphysics: Un software de simulación multiphysics que también incluye módulos específicos para análisis de dinámica de fluidos. Permite el acoplamiento de diferentes fenómenos físicos, como flujo de fluidos, transferencia de calor y estructuras mecánicas, en un entorno de simulación unificado.
3. OpenFOAM: Es un paquete de software de código abierto para simulación numérica de flujo de fluidos. Proporciona herramientas y solucionadores para resolver problemas de flujo incompresible, compresible, turbulento, transferencia de calor, entre otros.
4. CFD++: Ofrece soluciones de simulación de CFD para una variedad de aplicaciones industriales, desde aerodinámica hasta análisis de sistemas de refrigeración. Proporciona una interfaz fácil de usar y capacidades para modelar diversos fenómenos fluidodinámicos.
5. FloEFD: Es un software de CFD integrado con entornos de diseño CAD, lo que permite a los ingenieros realizar análisis fluidodinámicos directamente dentro del software de diseño, facilitando la optimización del diseño durante el proceso de desarrollo.
6. STAR-CCM+: Herramienta avanzada de simulación de CFD utilizada en una amplia gama de industrias, desde automotriz hasta aeroespacial. Ofrece capacidades avanzadas de modelado y simulación para problemas complejos de flujo de fluidos y transferencia de calor.

Dentro de sus requerimientos más comunes los podemos observar en la tabla siguiente donde se resumen las características esenciales que debe tener el sistema es representado en la siguiente tabla:

Tabla 2.2 Requerimientos generales para instalación de un programa CFD

Requisitos de un sistema de manera general para el uso de un software CFD	
Sistema operativo	<ul style="list-style-type: none"> • Microsoft® Windows® 10 • <u>Microsoft Windows 8 y 8.1</u> (Standard, Pro o Enterprise) • Microsoft Windows 7 Home Premium, Professional, Ultimate o Enterprise edition • HPC: Windows Server 2008 R2, Windows Server 2012 o Windows Server 2012 R2 • Idiomas: inglés, chino simplificado, chino tradicional, japonés, alemán, francés e italiano
Hardware recomendado	<p>Equipo de escritorio recomendado</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modelo: Con Intel Xeon E3-1241 v3 a 3,5 GHz (8 núcleos) ¹ • RAM: 32 GB • Vídeo: Nvidia Quadro 4000 • Disco duro: HDD de 1 TB <p>¹ Si se necesita más velocidad, añade un segundo E3-1241 para llegar a un total de 16 núcleos.</p> <p>Portátil recomendado</p> <ul style="list-style-type: none"> • Modelo: Con Intel i7-4710MQ a 2,5 GHz (4 núcleos) • RAM: 16 GB • Vídeo: NVIDIA Quadro K2000M • Disco duro: SSD de 256 GB
Pantalla	<ul style="list-style-type: none"> • Configuración de color de 24 bits para una resolución de pantalla de 1280 x 1024 o superior • Tarjeta gráfica compatible con OpenGL/VRAM con de 512 MB de DRAM o más (recomendada) • Memoria integrada de 256 MB (mínimo)

Requisitos de un sistema de manera general para el uso de un software CFD	
Lector multimedia	Unidad de DVD-ROM ³
Dispositivo señalador	Dispositivo señalador compatible con ratón de Microsoft®
Explorador	Windows Internet Explorer® 8 o posterior
Conexión a Internet	Para descargas web y acceso a Interacción con Subscription

2.2.2 Estructura de Software CFD

Los softwares de CFD son compuestos mediante algoritmos numéricos donde se resuelve en general problemas relacionados al transporte. Los programas comerciales siguen secuencialmente varias etapas mostradas en la siguiente imagen:

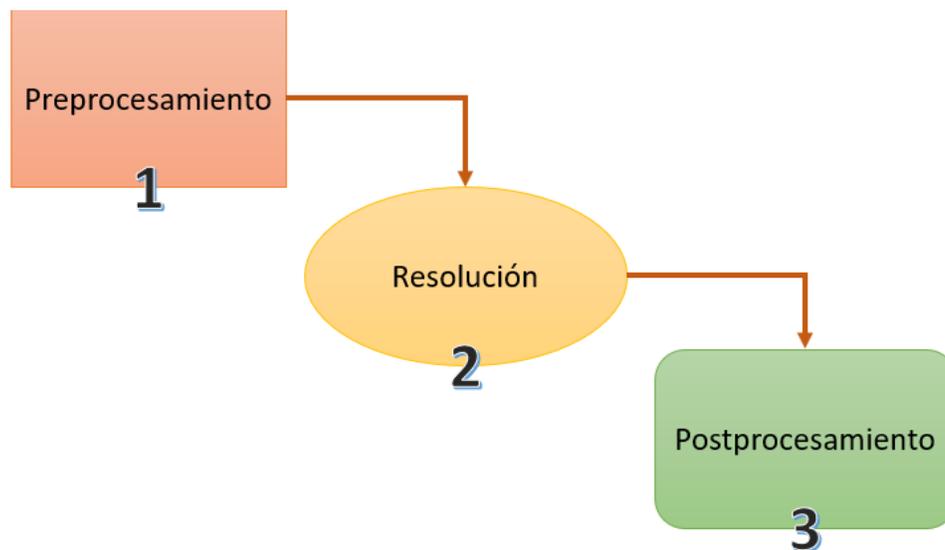


Figura 2.3 Secuencia a seguir de un sistema CFD

Cada una de estas etapas contempla diversas composiciones donde se establecen las características iniciales para comenzar un estudio de este tipo.

Preprocesamiento

Se llama así debido a que es la etapa previa a comenzar a realizar el análisis de la estructura del CFD, y es dividida en 4 pasos para delimitar las características esenciales del sistema comenzando por:

- 1.-Geometría: La cual se refiere a la forma estructural en dimensión y forma geométrica para el traslado del fluido.
- 2.- Realización de la malla: En este paso se desarrolla la división en pequeñas partes debido a la utilización del método de volúmenes finitos.
- 3.- Delimitación de las propiedades del fluido como sus características representativas de densidad, composición química, etc.
- 4.-Condiciones de frontera en las cuales se define el volumen de control, temperaturas y bordes donde trabajara el dominio determinado.

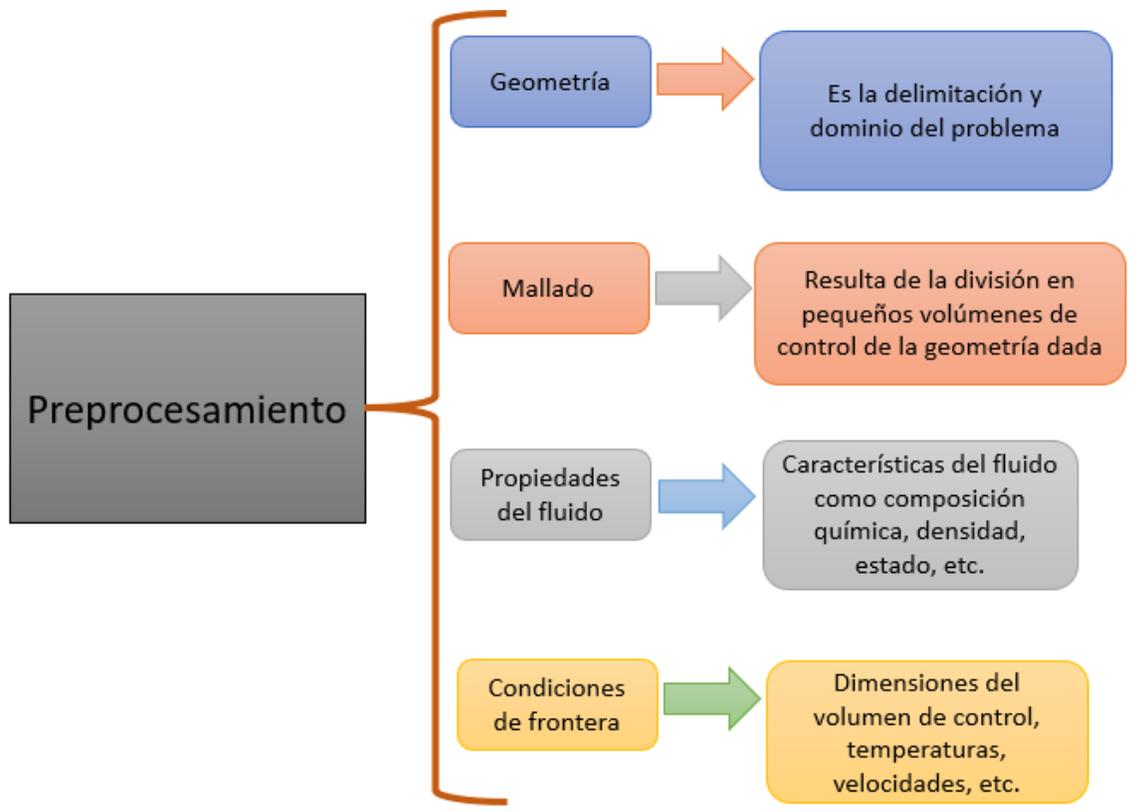


Figura 2.4 Resumen de preprocesamiento de los programas CFD

Para obtener una solución precisa se deben de resolver las ecuaciones que interactúan en el volumen de control, el resultado esta inmersamente relacionado con el tamaño y cantidad de volúmenes de control. Para aclarar este punto, si desarrollamos una malla con una baja cantidad de nodos que cubran la geometría, la cantidad total de ecuaciones a solucionar será

disminuida y por lo tanto el tiempo de respuesta computacional será corto, sin embargo, esta reducción limitara la precisión de los resultados por la poca cantidad de datos a resolver. Podemos concluir que, a mayor cantidad de datos para las ecuaciones a resolver, el resultado será más preciso sin embargo los recursos computacionales aumentaran considerablemente en tiempo de trabajo. Se debe de considerar esto para establecer un equilibrio de esto para obtener un resultado deseado de manera que no requiera de tantos recursos, pero se obtengan resultados aceptables para su validación.

Cuando hablamos de la malla es importante realizar una validación en la cual se debe de simular con parámetros iguales, solo utilizando mallas de distintos tamaños. Con esto se analizan las características del sistema como la presión, velocidad o temperatura. Para hacer la selección adecuada se elige aquella que sus resultados sean similares a la similitud más cercana de un alto volumen de control con uno más bajo.

Resolución

Después de realizar el proceso de Preprocesamiento, comienza la fase de resolución en la cual una vez determinadas todas las condiciones propias del modelo para las cuales están presentes las condiciones iniciales, contorno, propiedades del fluido, turbulencias y la solución del problema.

Considerando el flujo, los programas de CFD buscan resolver ecuaciones propias de este tipo de fenómenos como lo es la ecuación de movimiento, de conservación de la masa y de energía.

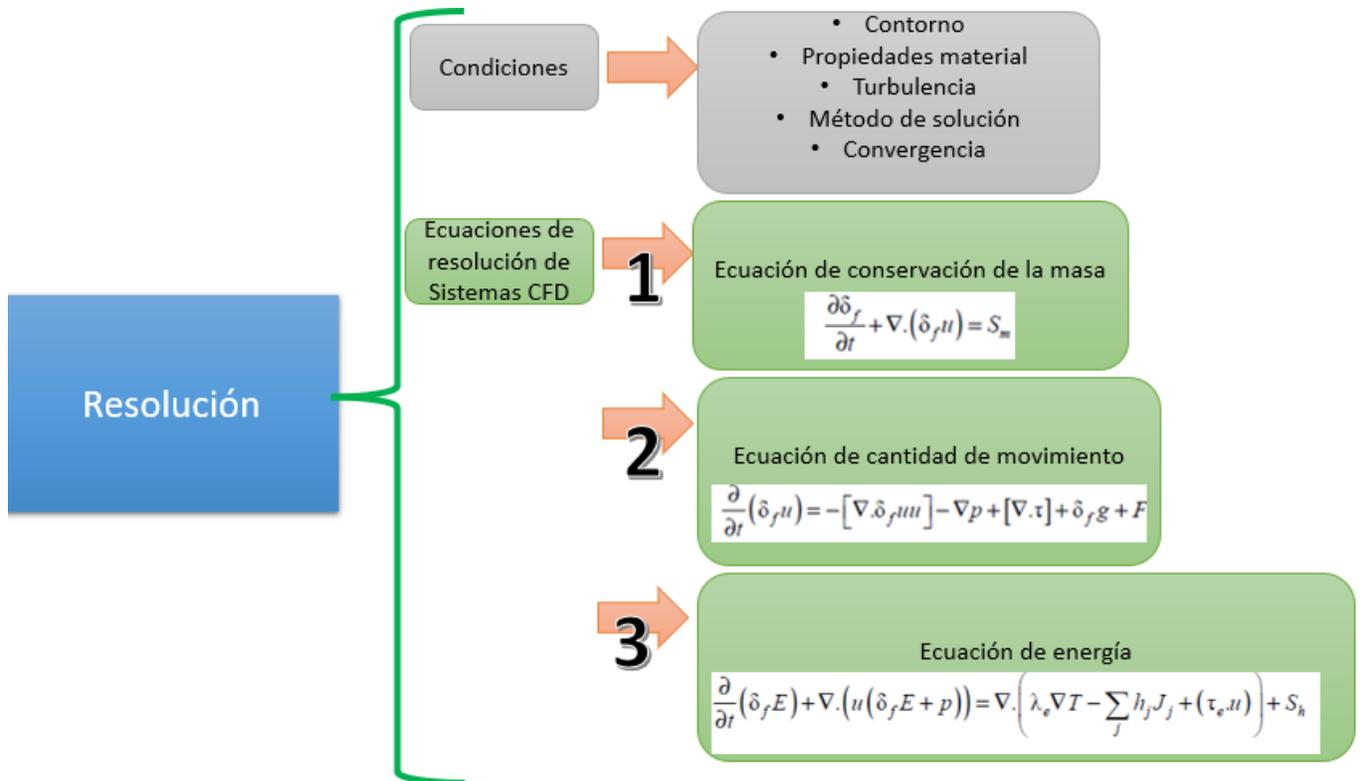


Figura 2.5 Resumen de resolución de los sistemas CFD

La resolución en la simulación de dinámica de fluidos computacional (CFD) se refiere a la discretización y definición de la malla (o grid) sobre el dominio del flujo para resolver las ecuaciones fundamentales que describen el comportamiento del fluido. A continuación, se explican los aspectos principales relacionados con la resolución en un CFD:

- **Malla o Grid:** Es la estructura tridimensional que divide el dominio del fluido en elementos pequeños (celdas o nodos). Existen diferentes tipos de mallas (estructuradas, no estructuradas, híbridas) que afectan la precisión y la eficiencia computacional.
- **Discretización de Ecuaciones:** Las ecuaciones que gobiernan el flujo (como las ecuaciones de Navier-Stokes) se discretizan en la malla. Esto implica representar las derivadas espaciales y temporales mediante diferencias finitas, volúmenes finitos o elementos finitos.
- **Tamaño de la Malla:** La resolución se ve afectada por la cantidad de elementos en la malla. Mallas más finas (con celdas más pequeñas) pueden capturar mejor los detalles del flujo, pero requieren más recursos computacionales.

- **Precisión Numérica:** La precisión del resultado depende de la resolución de la malla y de la precisión de los métodos numéricos utilizados para resolver las ecuaciones discretizadas.
- **Convergencia:** Durante la simulación, se busca alcanzar la convergencia, es decir, que los resultados de la simulación se estabilicen y no cambien significativamente con iteraciones adicionales. Esto se logra ajustando la malla y los parámetros numéricos.
- **Validación:** Es importante validar la resolución mediante comparaciones con datos experimentales o con soluciones analíticas para garantizar que los resultados sean precisos y confiables.
- **Requisitos Computacionales:** La resolución más fina conlleva un costo computacional más alto en términos de tiempo y recursos de hardware, por lo que se busca un equilibrio entre precisión y eficiencia.

La resolución en un CFD implica la definición adecuada de la malla, la precisión numérica, la convergencia y la validación para obtener resultados precisos y confiables que describan con precisión el comportamiento del flujo de fluidos en el sistema estudiado.

Postprocesamiento

Es la última fase del modelado en CFD donde se detallan los resultados obtenidos. Un CFD brinda datos que corresponden a la presión, densidad, velocidad, temperatura son algunas de las características con las que se comporta el flujo

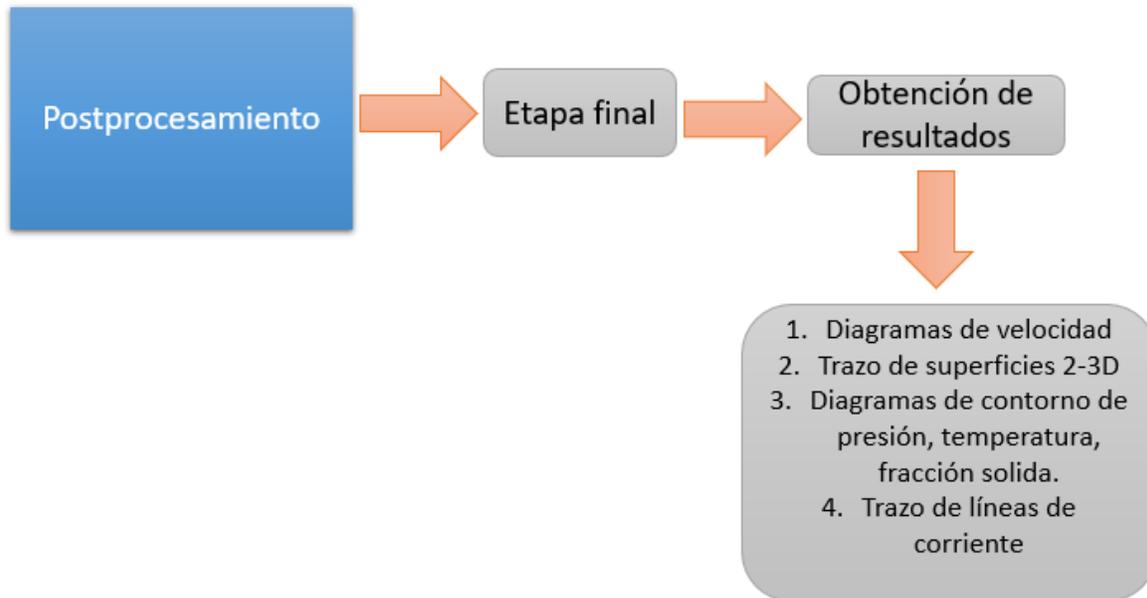


Figura 2.6 Resumen del postprocesamiento de los sistemas CFD

El postprocesamiento en la simulación de dinámica de fluidos computacional (CFD) implica analizar, visualizar y extraer información relevante de los resultados obtenidos después de ejecutar una simulación. Algunas de las etapas comunes en el postprocesamiento de un CFD:

- **Visualización de Resultados:** Utilización de software especializado para visualizar datos. Se generan gráficos, imágenes, animaciones y representaciones tridimensionales para comprender mejor el comportamiento del flujo.
- **Análisis de Campos de Variables:** Revisión y análisis de campos de velocidad, presión, temperatura, concentración, entre otros. Esto implica examinar la distribución espacial y temporal de estas variables para identificar patrones y zonas críticas.
- **Perfil de Velocidad y Gradientes:** Creación de perfiles de velocidad y gradientes a lo largo de líneas o secciones específicas en el dominio del fluido. Esto permite comprender mejor la variación de la velocidad y las fuerzas presentes en diferentes áreas del sistema.
- **Postprocesamiento de Partículas o Tracer Particles:** En simulaciones de dispersión de partículas, seguimiento de partículas virtuales para analizar su trayectoria, distribución y comportamiento en el flujo.

- Visualización de Patrones de Flujo: Identificación de patrones de flujo como vórtices, separaciones, recirculaciones y zonas de alta o baja velocidad para comprender la dinámica del fluido en el sistema.
- Generación de Reportes y Gráficos: Creación de informes detallados con gráficos, tablas y conclusiones sobre los resultados obtenidos. Estos informes son útiles para comunicar hallazgos a colegas o superiores.
- Validación y Comparación con Datos Experimentales: En algunos casos, se compara la simulación con datos experimentales para validar la precisión del modelo y ajustar parámetros si es necesario.

El postprocesamiento es fundamental para interpretar los resultados de la simulación CFD, tomar decisiones informadas y obtener información valiosa sobre el comportamiento del flujo de fluidos en el sistema estudiado. Esto ayuda a mejorar diseños, optimizar rendimiento y comprender fenómenos complejos.

2.3 Uso de Fluent ANSYS

Una de las herramientas con mayor impacto en el estudio del CFD es el software ANSYS con su modulo Fluent, el cual maneja de manera sencilla el modelado físico, mallado, condiciones de frontera y propiedades de diferentes fluidos. De manera general el programa genera la capacidad de modelar problemas de fluidos tanto compresibles como incompresibles. A su vez se puede manejar análisis en estado transitorio como estacionario y la cualidad de utilizar los modelos de transporte tanto en transferencia de calor como de reacciones químicas. Dentro de los ejemplos donde se utiliza el programa ANSYS Fluent como aplicación se encuentra la transferencia de calor en maquinarias, componentes de motores automotrices; operación de calderas, máquinas de compresión o bombas, ventiladores o como en el presente trabajo reactores de lechos.

Para el desarrollo de este trabajo, el proceso a seguir de los sistemas CFD se realizó utilizando el programa ANSYS FLUENT, utilizando desde el ambiente de trabajo Workbench y utilizando el apartado de FLUENT. Simplificando el desarrollo paso a paso desde la geometría hasta la solución final.

A continuación, se muestra un ejemplo para describir el procedimiento de modelación en ANSYS FLUENT, para identificar de manera específica como se desarrolla una simulación en este programa CFD y comprender claramente su uso y funcionamiento. Se presenta el ejemplo de una tubería de agua de largo 10 metros y ancho de 0.5 metros donde entra el transporte de flujo de agua a una velocidad constante de 1m/s, este ejemplo funcionara para conocer de manera general la estructura del programa ANSYS FLUENT. En la figura 2.7 se muestra el esquema general conocido como Workbench donde aparecen todas las secciones de análisis que puede realizar el software.

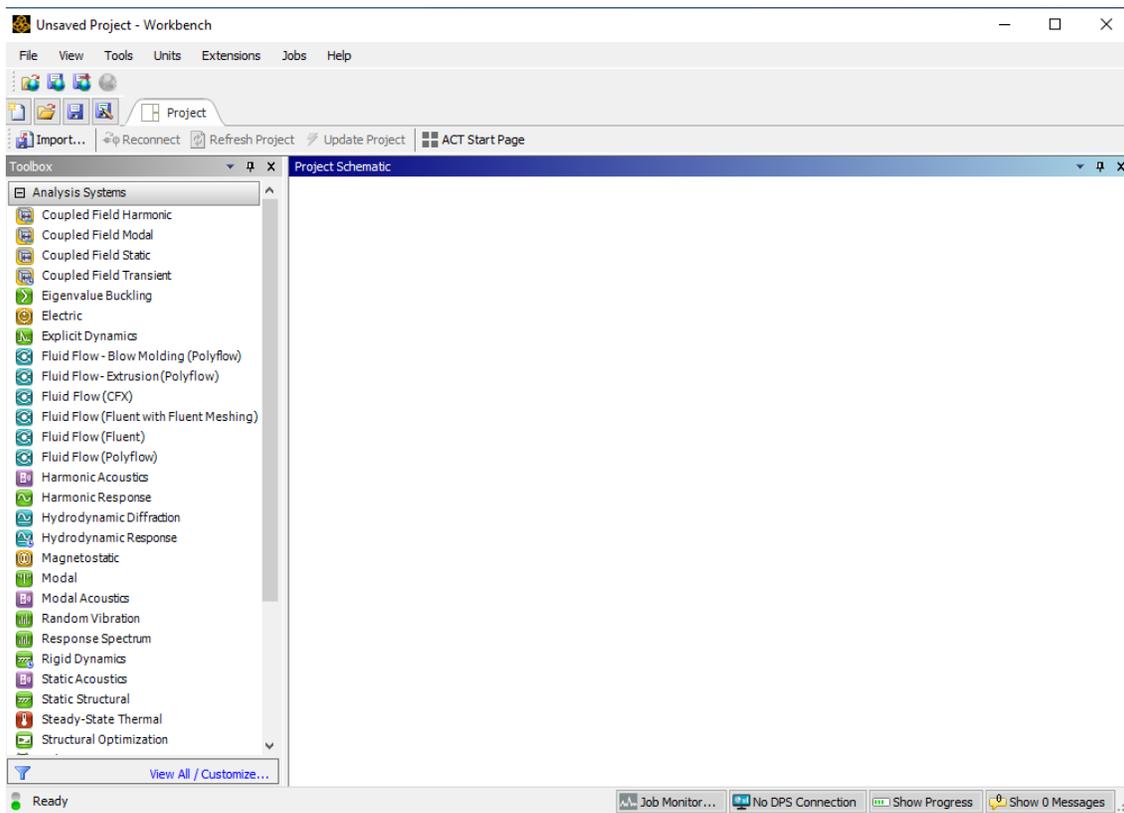


Figura 2.7 Esquema General de ANSYS WORKBECH

Como se mencionó en las etapas de procesamiento de un sistema CFD, ANSYS FLUENT también utiliza los pasos a seguir de estos sistemas desde la geometría, malla, condiciones de frontera, solución y resultados. Como se muestra en la figura 2.8 donde se muestran las etapas de trabajo de ANSYS FLUENT.

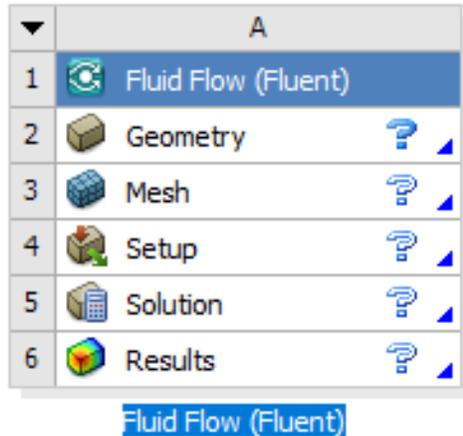


Figura 2.8 Secciones generales de ANSYS FLUENT

La primera etapa de ANSYS FLUENT se encuentra la geometría donde se dimensiona de manera geométrica donde opera el fluido estudiado. Puede representarse de manera 2D o 3D en la siguiente figura 2.9 se ejemplifica una tubería trazada en 2 dimensiones en la geometría. En este caso la medida de 0.5 m de ancho y 10 m de largo.

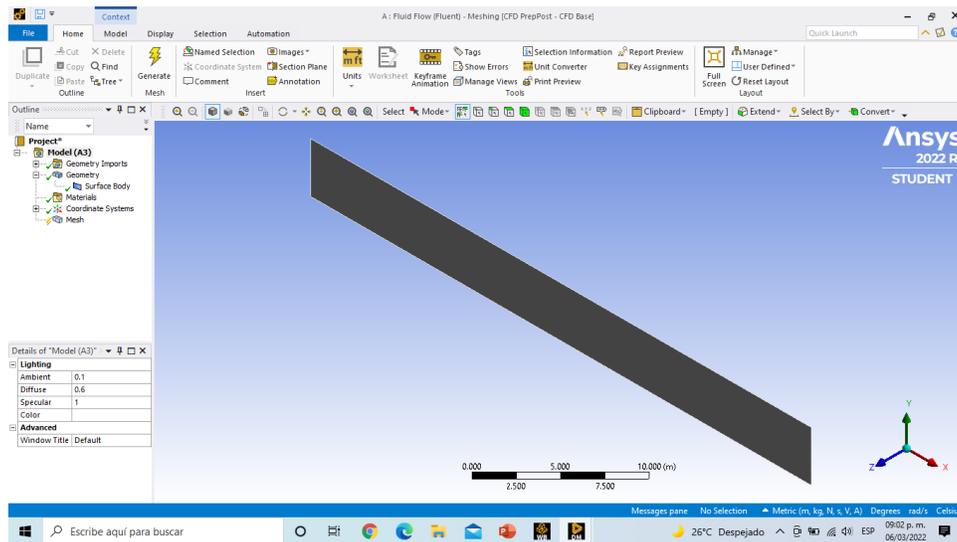


Figura 2.9 Visualización de Geometría en ANSYS FLUENT

Una vez realizada la geometría se pasa a la siguiente operación en el mallado para establecer el número de nodos, según la literatura para una mayor exactitud en los cálculos se requiere una cantidad amplia, para este caso de ejemplo se utilizan 10,000 nodos de manera ilustrativa.

En la figura 2.10 se muestra la visualización de la malla de ANSYS FLUENT ejemplificando el mismo rectángulo del ejemplo anterior.

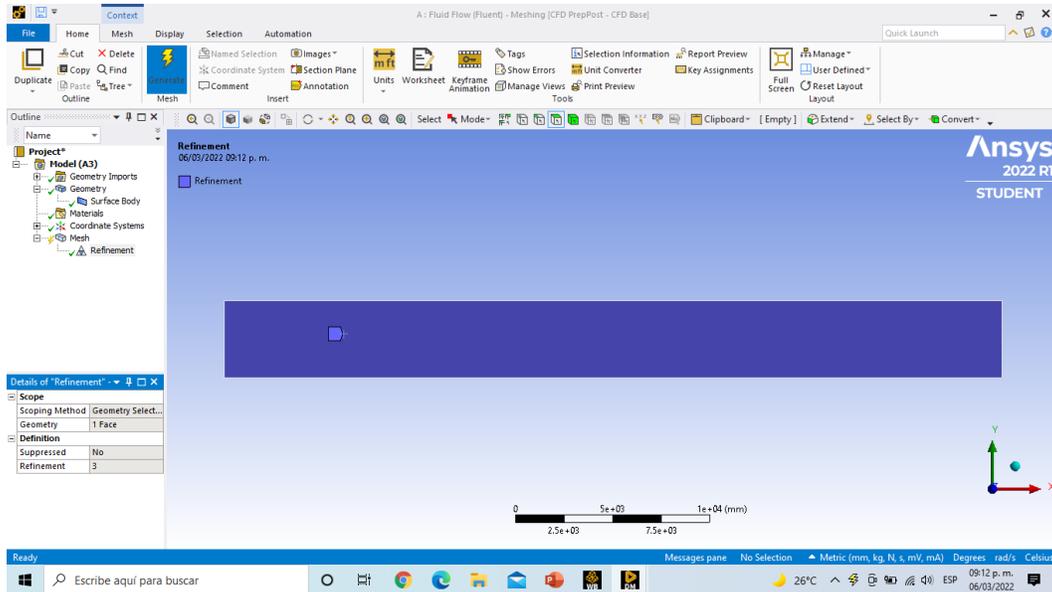


Figura 2.10 Visualización de Malla en ANSYS FLUENT

Dentro de la sección de mallado es necesario indicar al programa la secuencia de operación nombrando la entrada, salida y paredes de la geometría realizada. Como se muestra en la figura 2.11 donde se nombra la entrada del fluido.

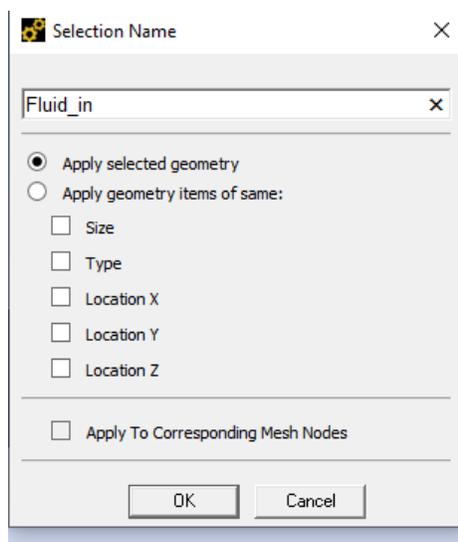


Figura 2.11 Nomenclatura de la secuencia de proceso del fluido en ANSYS FLUENT

Para el siguiente paso en el cual se establecen las condiciones de frontera, es importante primero aquí establecer el solver processes el cual es la cantidad de núcleos que tiene la computadora en la que se esté realizando el estudio en el caso en el que se realizó este estudio fue en una máquina de 2 núcleos y se muestra en la figura 2.12 como se debe indicar al programa.

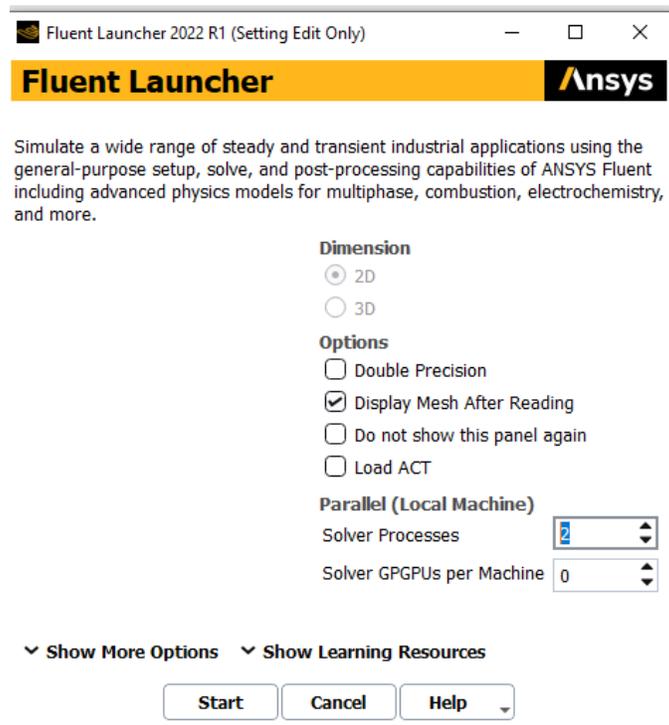


Figura 2.12 Indicación de cantidad de núcleos en los que el computador utilizado trabaja para ANSYS FLUENT

Para la determinación de las condiciones de frontera, en el módulo setup indicamos las características generales del sistema en el que trabaja el fluido en este caso una tubería y se muestra en la figura 2.13 el esquema general de las condiciones de frontera del programa.

MODELACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO DE CONTAMINANTES EN UN REACTOR ABSORBEDOR DE LECHO FIJO

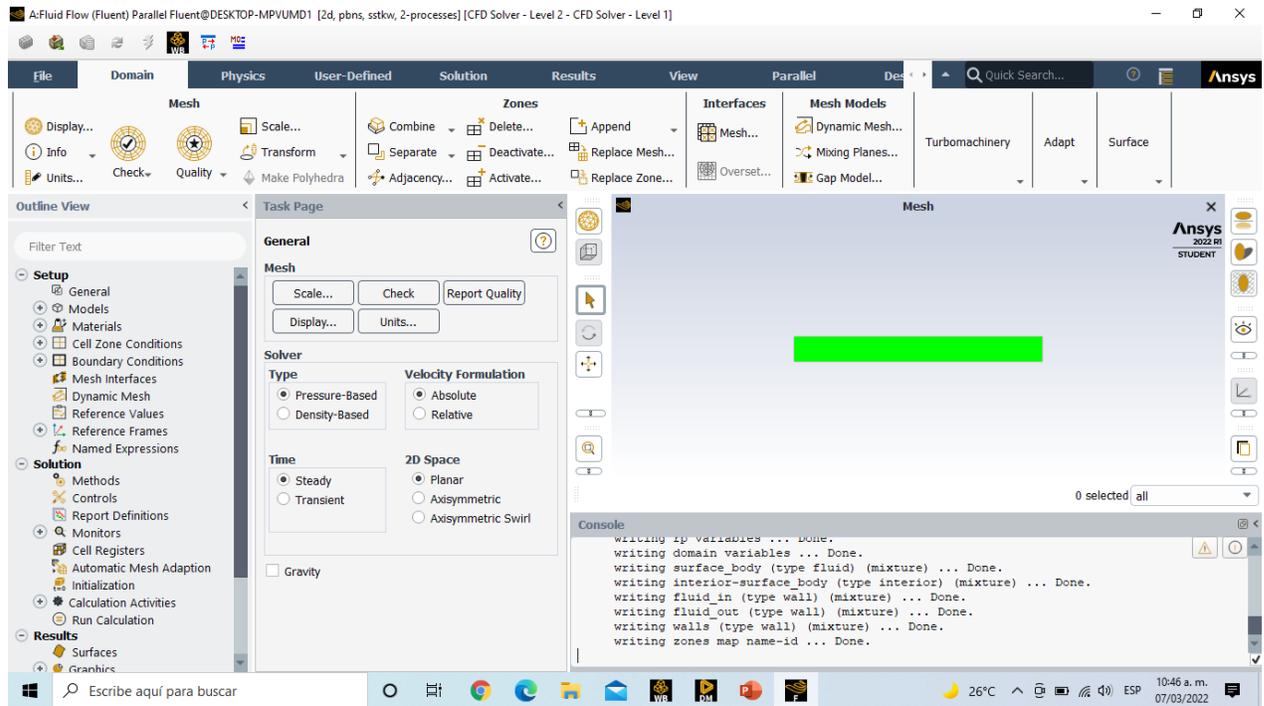


Figura 2.13 Esquema general de la opción de condiciones de frontera en ANSYS FLUENT

En esta sección se establecen las características asociadas al fluido por ejemplo la viscosidad que tiene el fluido determinado de la siguiente manera en la imagen 2.14 observamos como podemos cambiar la viscosidad del elemento, sin embargo, como el fluido estudiado se trata de agua se maneja con un modelo de viscosidad laminar por el movimiento que mantiene el agua de forma horizontal.

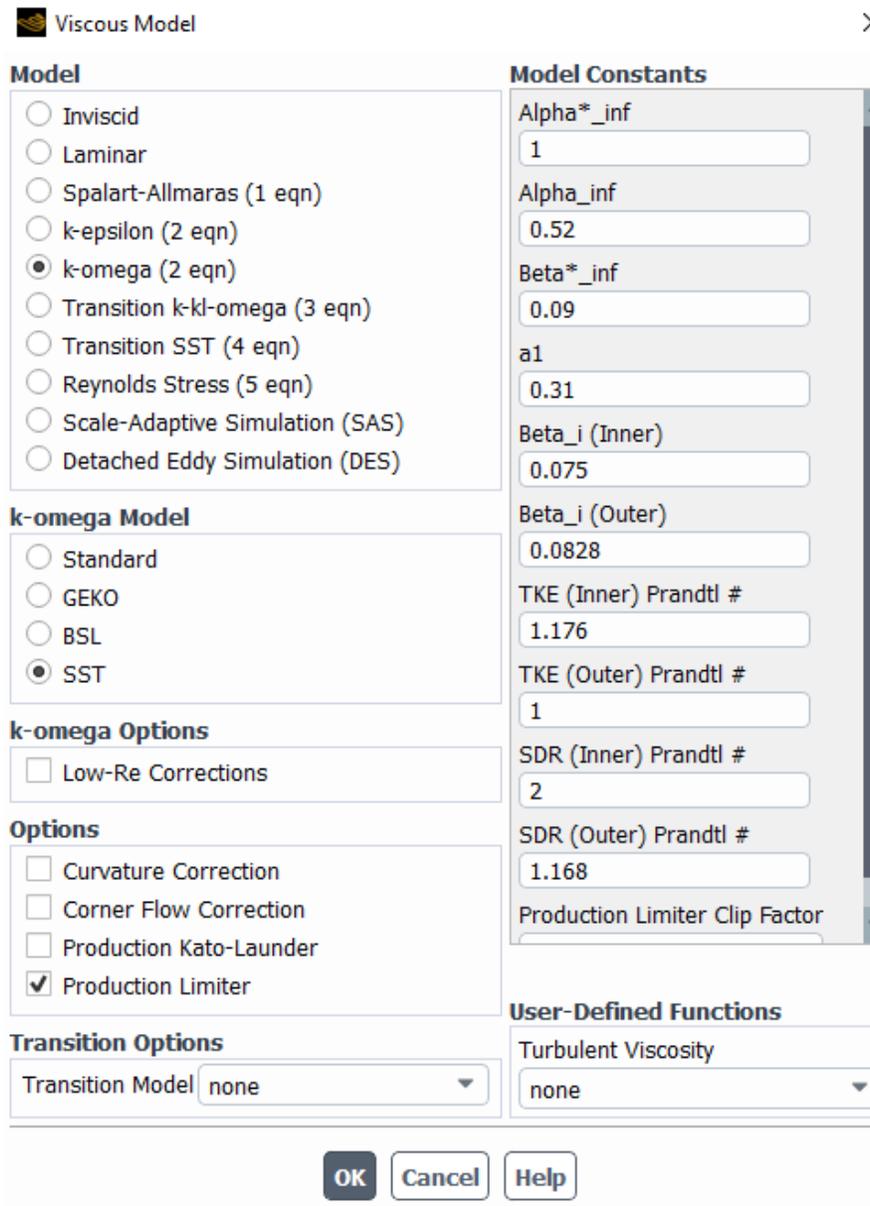


Figura 2.14 Establecimiento de la viscosidad del fluido en ANSYS FLUENT

Una vez indicado esto, se presenta el material a utilizar como fluido, dentro de esta opción, como se puede ver en la figura 2.15, se observa la detección del fluido y el sólido que interactuarán.

MODELACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO DE CONTAMINANTES EN UN REACTOR ABSORBEDOR DE LECHO FIJO

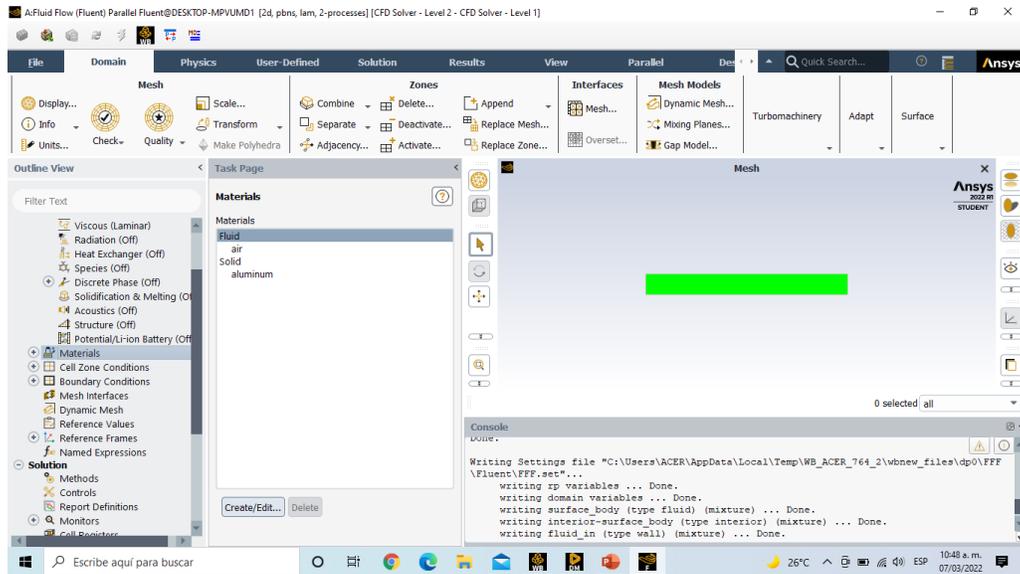


Figura 2.15 Determinación de fluidos a utilizar en ANSYS FLUENT

La cantidad de materiales a elegir es amplia dentro de la biblioteca y se muestra a continuación en la figura 2.16 donde se seleccionará el fluido o en su caso su fórmula química en algunas de las opciones que podemos analizar.

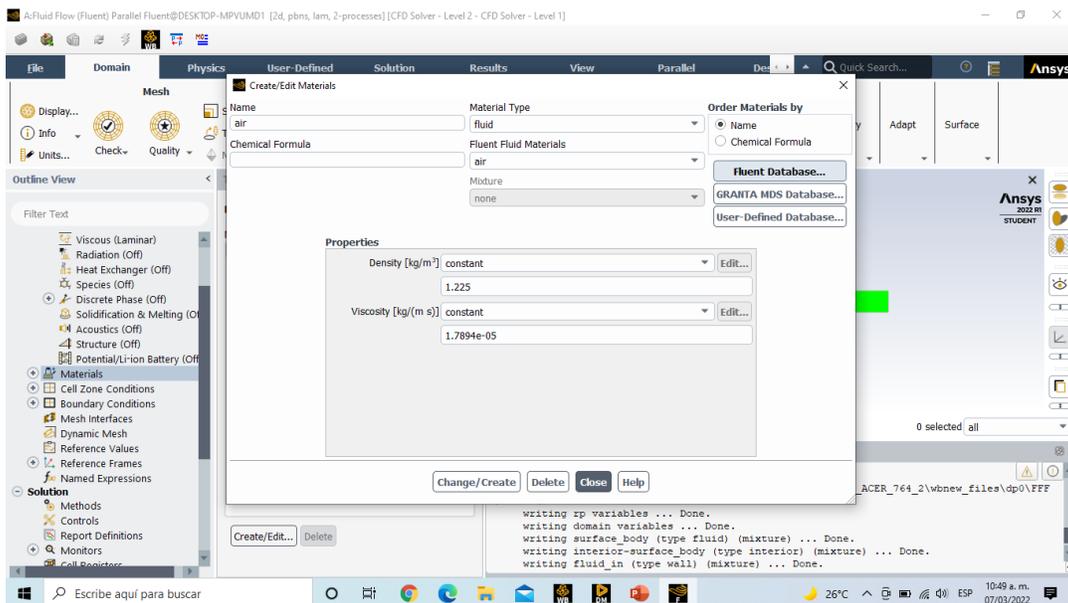


Figura 2.16 Menú de fluidos en ANSYS FLUENT para el desarrollo del modelo

Una vez establecido esto, es necesario indicar en la opción de cell zone conditions el fluido que utilizara nuestro estudio debido a que siempre por default detecta la utilización de aire entonces, al agregar un nuevo fluido a utilizar debemos mencionarlo como se observa en la figura 2.17.

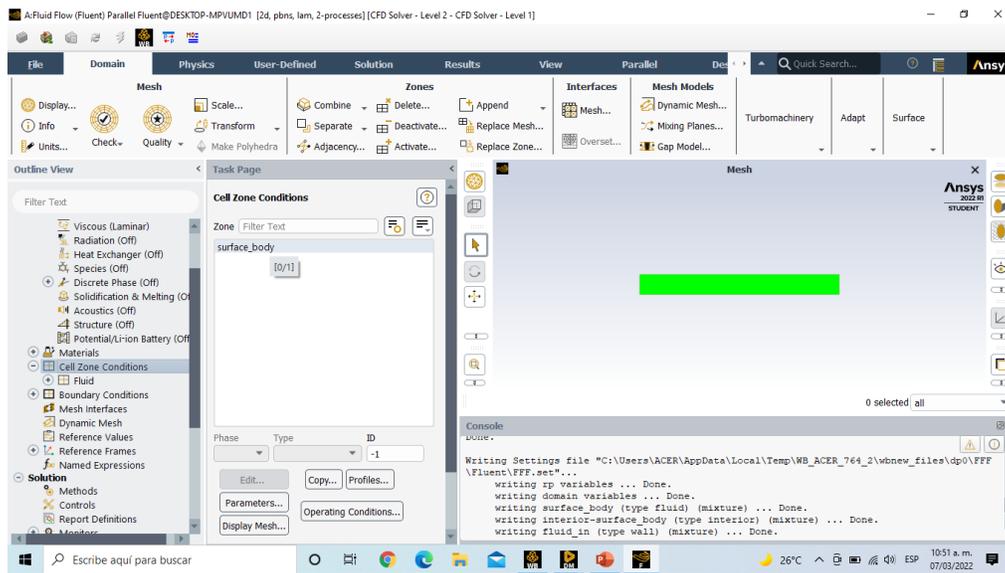


Figura 2.17 Especificación de material de fluido a estudiar en ANSYS FLUENT

Posteriormente se realiza la especificación de las condiciones de frontera donde, se muestran los parámetros en los que interactuara cada parte del modelo, como su velocidad de entrada, salida, presiones o temperaturas. En las siguientes figuras 2.18 y 2.19 se ejemplifica lo mencionado dentro del programa.

MODELACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO DE CONTAMINANTES EN UN REACTOR ABSORBEDOR DE LECHO FIJO

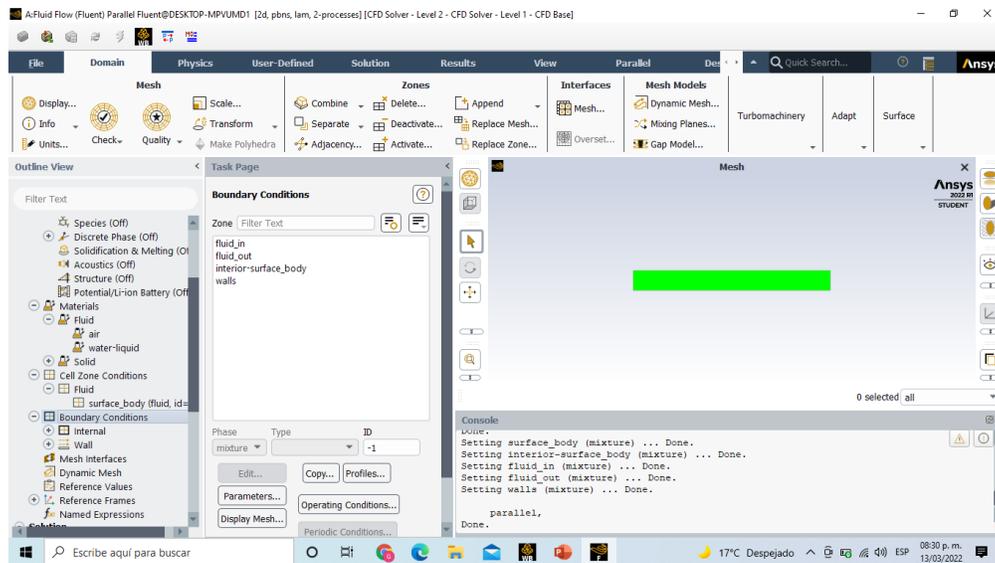


Figura 2.18 Pantalla general del establecimiento de las condiciones de Frontera en ANSYS FLUENT

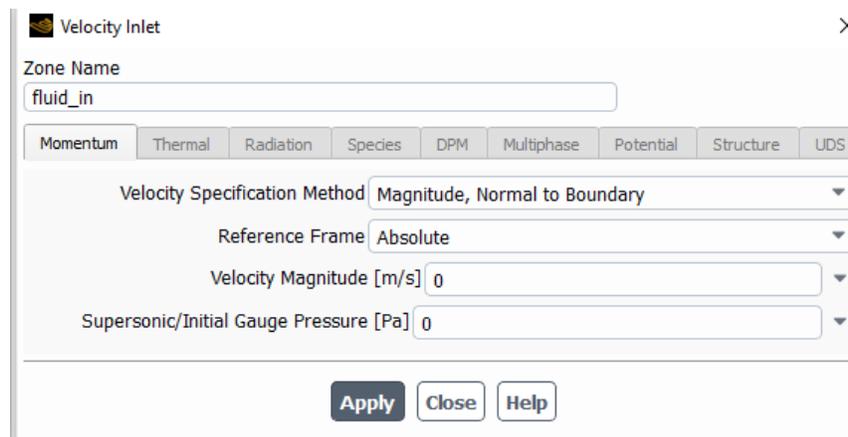


Figura 2.19 Ejemplo de menú para establecer la velocidad inicial en ANSYS FLUENT

Para continuar el estudio se dirige a la sección de métodos donde se elegirá la opción del método de solución dependiendo de las características en las que se maneje el estudio, pero para la mayoría de casos la opción viable es SIMPLE ya que, es la opción más general para obtener resultados precisos. Como se observa en la figura 2.20

MODELACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO DE CONTAMINANTES EN UN REACTOR ABSORBEDOR DE LECHO FIJO

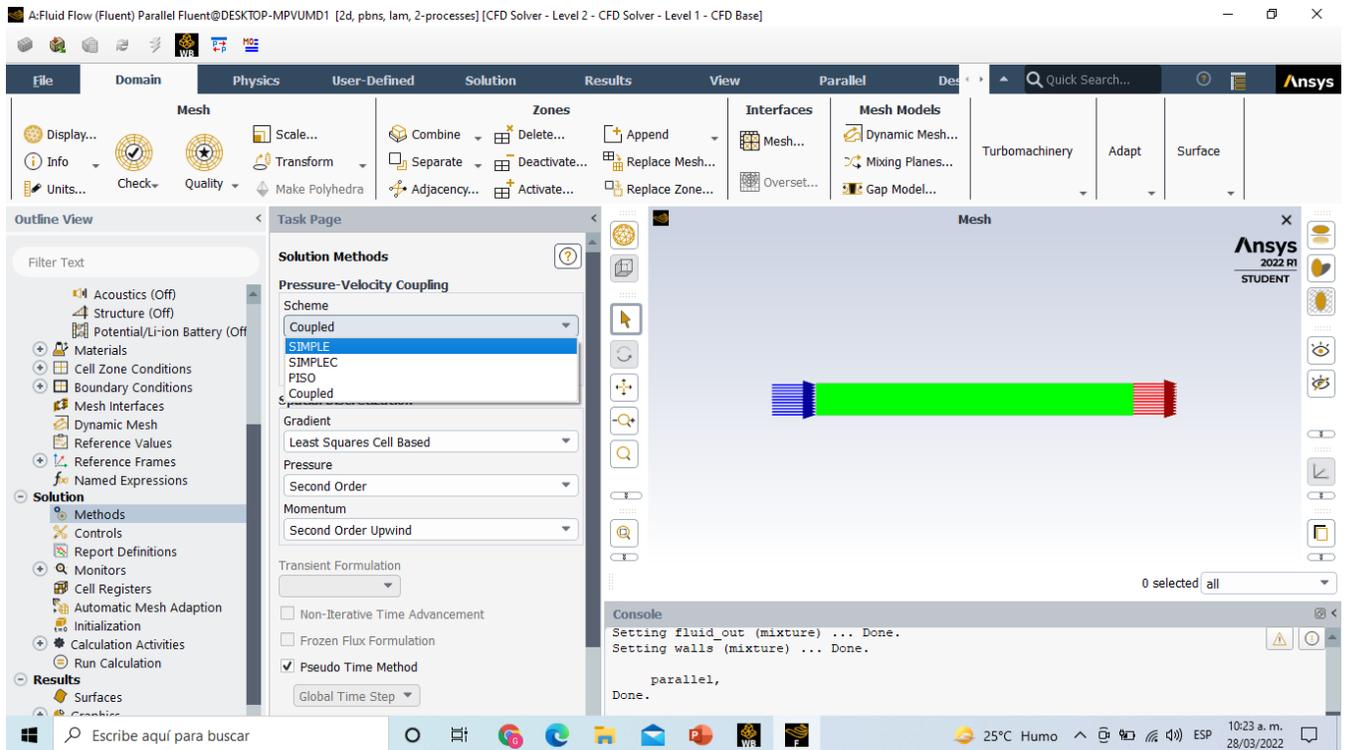


Figura 2.20 Selección de método de resolución del problema a tratar en ANSYS FLUENT

El penúltimo paso es seleccionar la opción de inicialización en donde el programa realizara un pequeño análisis para establecer la validación de los datos que hemos colocado y no contenga errores antes de correr la simulación deseada.

MODELACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO DE CONTAMINANTES EN UN REACTOR ABSORBEDOR DE LECHO FIJO

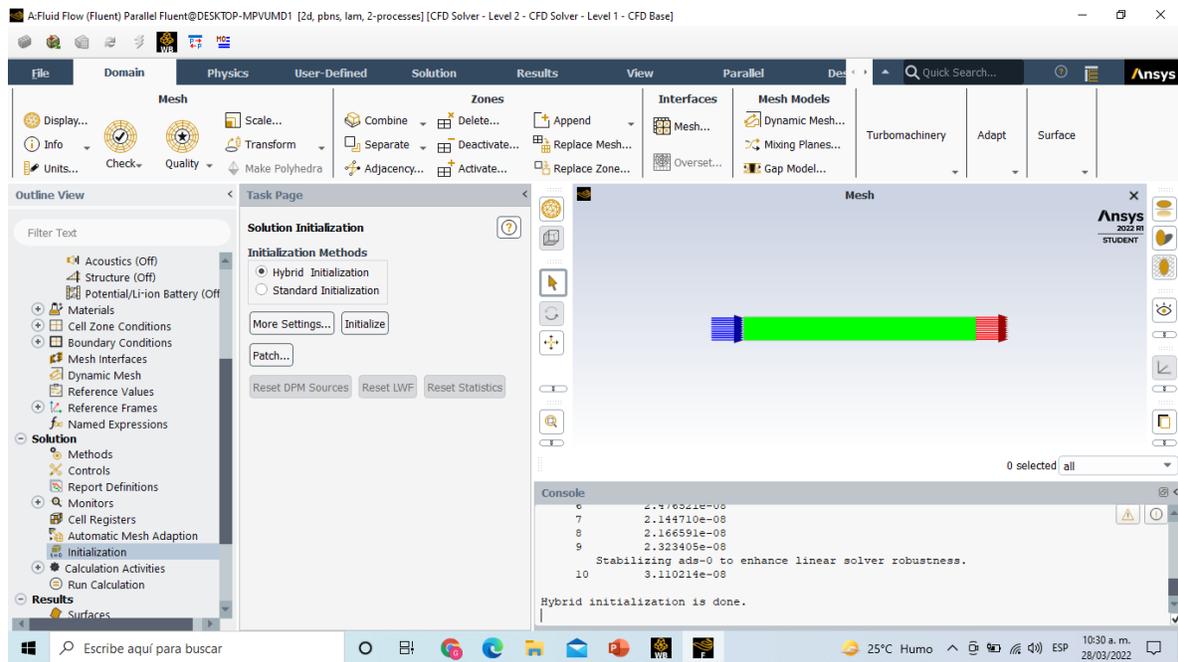


Figura 2.21 Inicialización de la simulación en ANSYS FLUENT

Finalmente, se pasa a correr los cálculos de simulación de problema que deseamos analizar, donde añadiremos la cantidad de iteraciones que deseamos utilizar para obtener un resultado más cercano a la realidad, a mayor aumento de esto conoceremos mejor el fenómeno a estudiar. En la figura 2.22 se muestra este proceso.

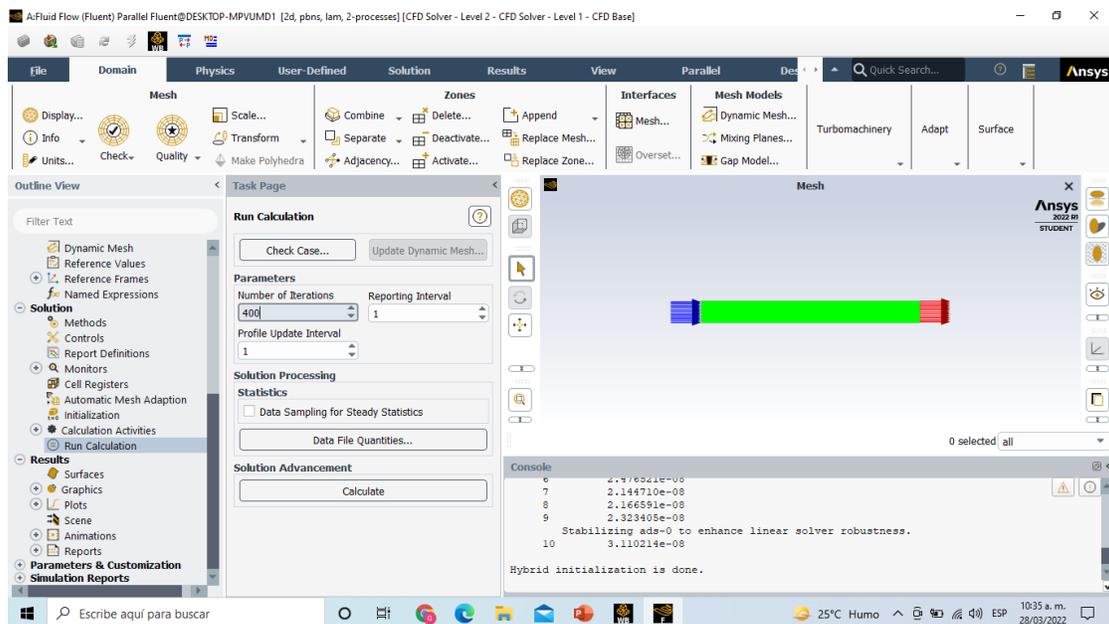


Figura 2.22 Panorama de la opción de Corrida de cálculo en ANSYS FLUENT

Ya que ha finalizado esta opción aparecerá un mensaje el cual nos indicara que ha terminado de realizar los cálculos pertinentes el programa, y se muestra a continuación en la figura 2.23

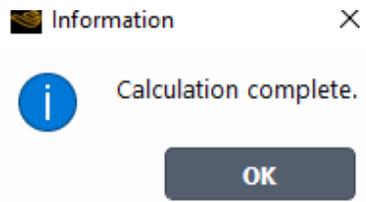


Figura 2.23 Finalización del cálculo de la simulación en ANSYS FLUENT

Ya con esto terminado podemos visualizar en la sección de resultados, diferentes gráficas en donde analizaremos los resultados que deseamos como la velocidad en diferentes componentes, temperaturas o aquellos parámetros que sean de nuestro interés en las figuras 2.24 y 2.25 se muestran estas características.

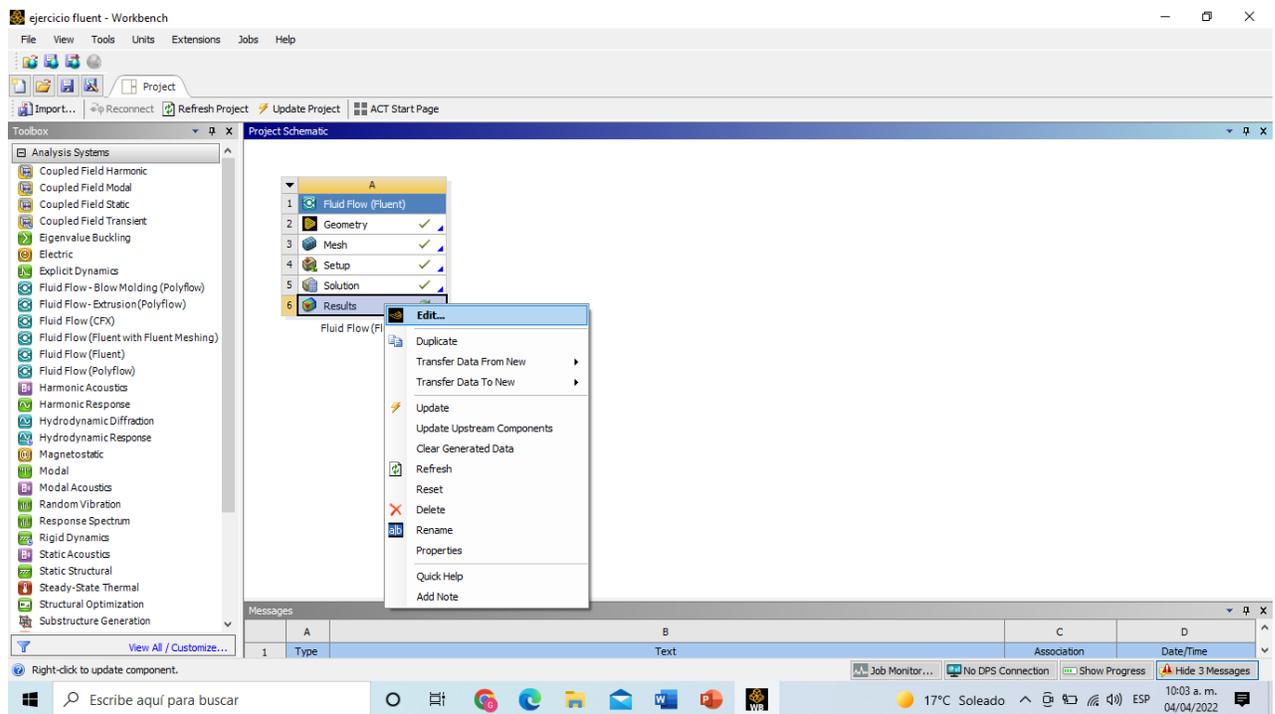


Figura 2.24 Sección de resultados en ANSYS FLUENT

Como se puede observar en la gráfica siguiente se ve la velocidad en la que se distribuye el agua por la tubería, alcanzando su velocidad máxima en la parte central y disminuyendo en las orillas. Este ejemplo ilustrativo nos ayuda a conocer la estructura que tiene el programa ANSYS FLUENT para el desarrollo de estudios de simulación.

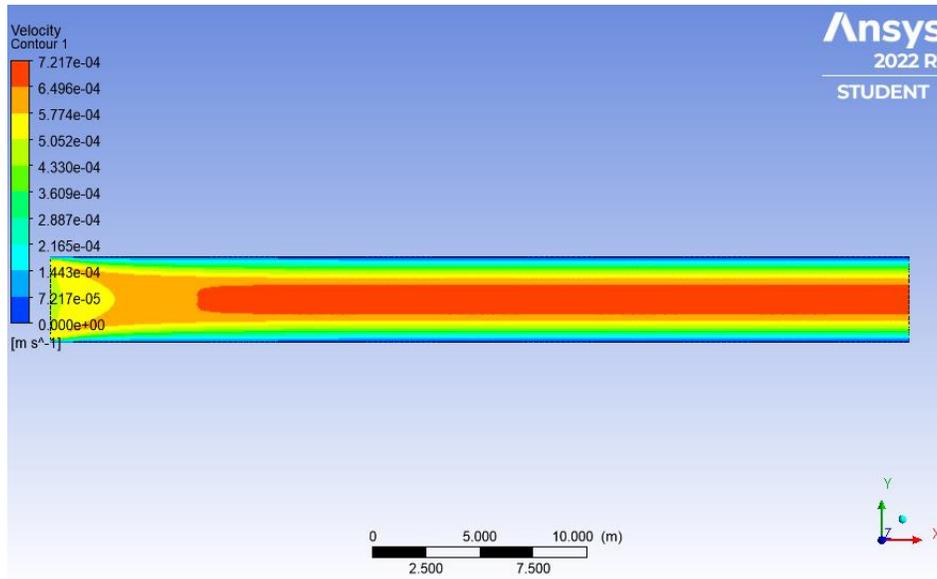


Figura 2.25 Ejemplo de grafico visualizado en ANSYS FLUENT

3 Capítulo Modelo Físico

En el capítulo, se explica que el estudio se centra en el uso de un reactor por filtración para retener contaminantes mediante un lecho de partículas sólidas, el cual puede tener aplicaciones en la producción de amoníaco, la industria petroquímica y la eliminación de óxidos de nitrógeno, azufres y volátiles del aire como el dióxido de carbono, el cual se plantea con lo siguiente. Se propone un reactor con dimensiones similares a una chimenea industrial, considerando una altura de 100m, un diámetro entre 2m y 0.5m, y una velocidad de salida de 1-10m/s a temperaturas superiores a 100°C.

Para plantear el problema que deseamos solucionar, se inicia con el diseño del reactor mediante ANSYS FLUENT, comenzando con la geometría y dividiendo el reactor en tres zonas: entrada, lecho y salida. Se busca analizar la separación de dos mezclas: aire y CO₂. La simulación implica trazar la estructura dimensional del reactor, establecer las zonas de flujo y determinar la disminución de la velocidad en el lecho fijo para separar el contaminante CO₂.

El objetivo final es comprender cómo el reactor separa eficazmente el CO₂ del aire mediante el uso de la filtración y cómo varía la velocidad del fluido en diferentes secciones del reactor.

3.1 Reactor a utilizar

En este caso, nos centraremos en utilizar el reactor por filtración, el cual comprende de un lecho con el cual funcionara como retención del contaminante mediante un medio poroso y con ello evitar el libre paso del fluido, ya que, el lecho al encontrarse en forma de partículas sólidas. Se pretende utilizar este reactor gracias a sus grandes aplicaciones industriales, como lo son en la producción de amoniaco o la industria petroquímica. Además de diversos estudios que existen con este tipo de reactores para la eliminación de óxidos de nitrógeno, azufres y volátiles del aire [Ascencio, 2017]. En la figura 1.8 se muestra la estructura general del reactor para la realización del estudio en sus divisiones para el presente estudio.

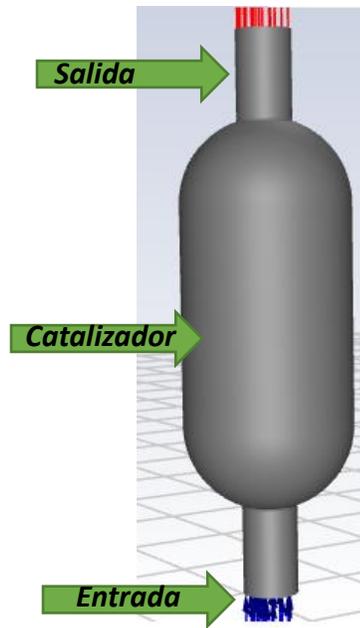


Figura 3.1 Estructura general de reactor a utilizar en la investigación.

3.2 Propuesta de reactor

Para iniciar con la geometría del reactor se proponen las dimensiones, tomando en cuenta las medidas con las que trabaja una chimenea común utilizada en la generación de energía eléctrica mencionada en la “Manifestación de impacto ambiental de la planta generadora de energía Gedesa 1” [SEMARNAT, 2008] donde la altura es de 100m, el diámetro de entre 2m. y 0.5. con una velocidad de salida que ronda entre 1-10m/s, aproximadamente a 100°C en adelante.

Con esta información se propone un reactor que tenga las características similares para una salida de una chimenea industrial utilizada en la industria energética, con la cual, se utilizan las siguientes dimensiones. Además de cómo se mencionó en la captura de CO₂, se desea analizar la separación de 2 mezclas las cuales son el aire y el contaminante CO₂.

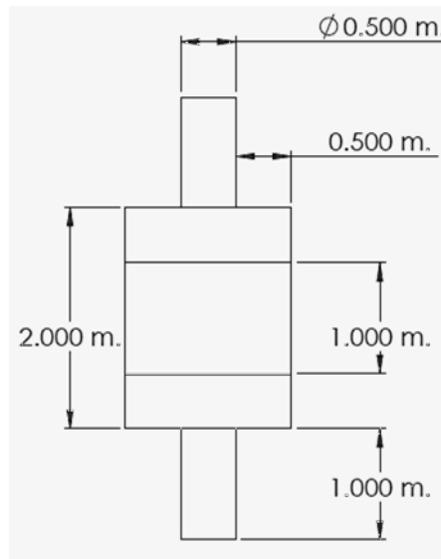


Figura 3.2 dimensionamiento de reactor propuesto.

3.3 Inicio de la Geometría del reactor

El esquema general dentro de la plataforma de ANSYS mediante el workbench se observa de la siguiente manera:

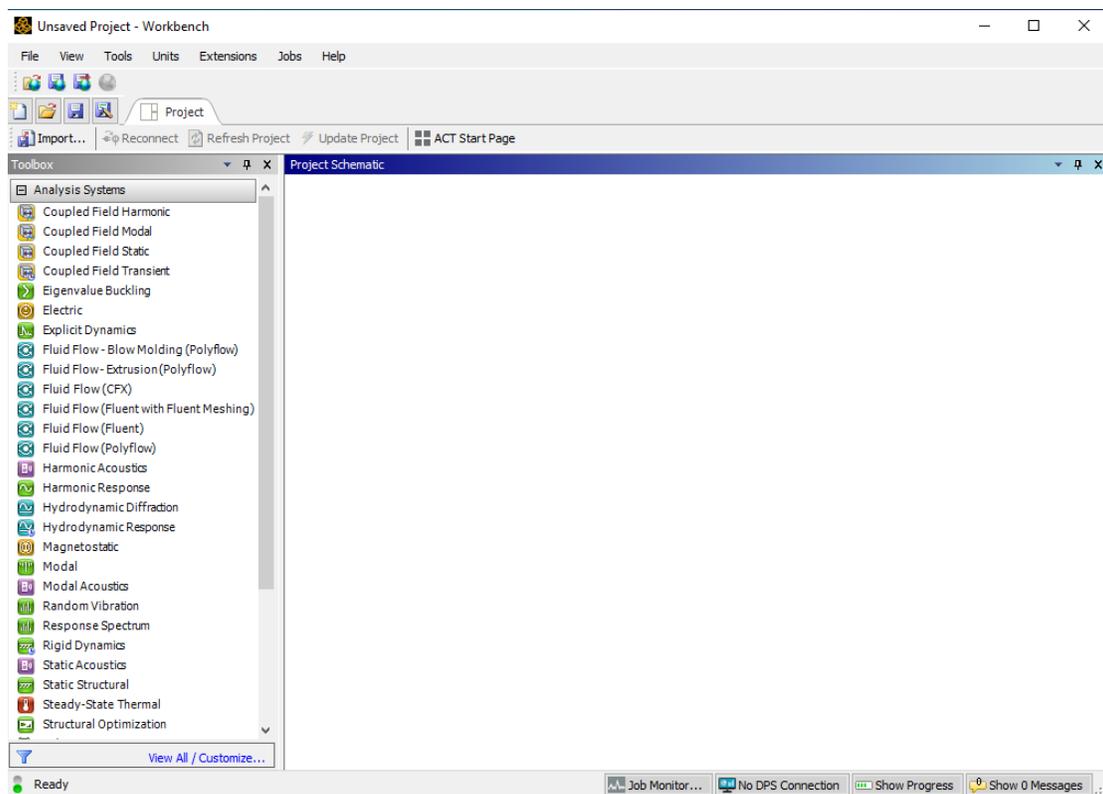


Figura 3.3 Pantalla de inicio de ANSYS WORKBENCH

Al seleccionar la opción de ANSYS FLUENT se añade un menú en el cual nos permite realizar las operaciones correspondientes como se observa a continuación.

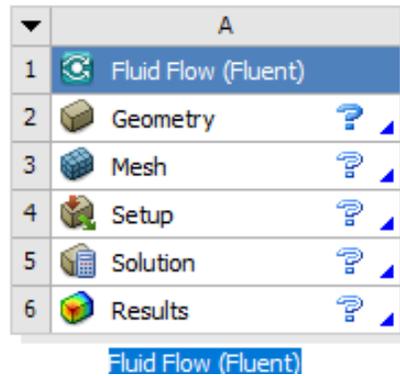


Figura 3.4 Menú inicial de ANSYS FLUENT

Para comenzar se establece la geometría designada en este caso utilizamos las medidas siguientes mostradas en la imagen para realizar el trazo dimensional en el programa ANSYS FLUENT.

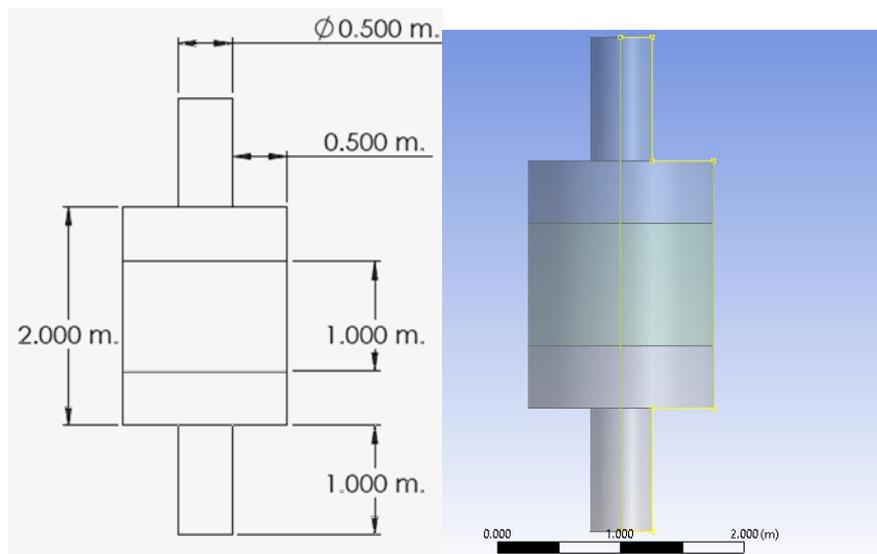


Figura 3.5 Diagrama de la estructura del reactor dimensional con ANSYS FLUENT

Para comenzar se establece la geometría designada en este caso comenzamos con las dimensiones siguientes donde en la siguiente imagen se muestran para comenzar el trazo en el programa ANSYS.

El siguiente paso para analizar el proceso que lleva a cabo el reactor consiste en dividir a través de sus zonas el paso del fluido, y así saber la disminución de la velocidad que ocurre en la zona deseada. Con lo cual se vuelve importante para este estudio realizar una partición de la estructura para determinar las 3 zonas por las que se distribuirá el fluido comenzando con la entrada, el lecho y finalmente la salida, ahí en el lecho fijo el cual realizará la separación del contaminante CO_2 .

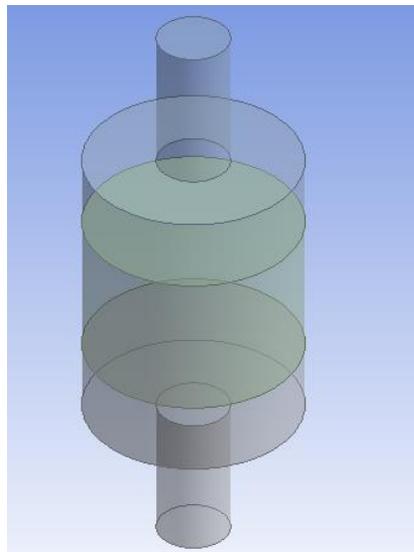


Figura 3.6 División de zonas del reactor dimensional con ANSYS FLUENT

4 Capítulo Modelo Matemático

La simulación de los fenómenos en el campo de la fluidodinámica en complejos sistemas de ingeniería es hoy en día uno de los métodos de mayor importancia para la búsqueda de nueva tecnología que permita generar conocimiento importante. Gracias a que no implica de una gran inversión como si lo requieren las pruebas en laboratorio o en la industria u otros métodos de obtención de datos reales, a su vez, el tiempo empleado para obtener datos es mucho menor que otras opciones. Sin embargo, la confiabilidad de datos reales siempre tendrá mayor peso, aunque los datos simulados sean cercanos a la realidad. Los resultados obtenidos por métodos de análisis numérico dependen de la consideración del mayor número de efectos físicos que se apliquen a los sistemas analizados, por lo que el análisis asistido por computadora se vuelve un problema de decidir cuales consideración pueden tomarse en cada caso.

El objetivo de este trabajo principalmente fue simular la retención de una zona porosa dentro de un reactor absorbedor de lecho fijo. Este trabajo fue desarrollado numéricamente en el programa ANSYS FLUENT, donde se propusieron características a buscar una configuración que nos acerque a una configuración que permita beneficiar y facilitar datos para realizar un estudio experimental posterior.

Aunque no se cuenten con datos experimentales aún, el objetivo es visualizar el comportamiento que se puede obtener con las características en las que puede trabajar con una velocidad constante dentro del reactor.

Los parámetros principales con las que se rige esta simulación, fue la velocidad de entrada en conjunto con varias porosidades que beneficien el comportamiento deseado del reactor. Dentro del análisis de las simulaciones, la variación de la velocidad de entrada, así como la porosidad del material permitió concluir bajo qué condiciones se verá beneficiado el accionar del reactor en su medio poroso. También se logró visualizar una mayor retención el aumento de porosidad y el aumento de la velocidad benefician a mantener una mayor estabilidad dentro del medio poroso con lo cual, al realizar un análisis químico con estas características permitirá tener claro en qué tiempo podría llevarse o tardar en llevarse a cabo la reacción química pertinente.

4.1 Modelo Matemático

ANSYS Fluent es un popular software de simulación de dinámica de fluidos computacional (CFD) utilizado para resolver una variedad de problemas de flujo de fluidos y transferencia de calor. Utiliza una serie de modelos matemáticos y métodos numéricos para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes y otros fenómenos físicos asociados con el comportamiento de los fluidos. A continuación, se presentan algunos de los modelos matemáticos y métodos utilizados por ANSYS Fluent:

Modelo de Turbulencia: ANSYS Fluent ofrece varios modelos de turbulencia, incluyendo el modelo de mezcla de longitud de escala, el modelo k-epsilon, el modelo k-omega, el modelo de estrés de Reynolds, entre otros. Estos modelos se utilizan para simular la turbulencia en el flujo de fluido y calcular las propiedades turbulentas, como la viscosidad turbulenta y la energía cinética turbulenta.

Modelo de Transferencia de Calor: ANSYS Fluent permite resolver problemas de transferencia de calor, utilizando modelos como el modelo de conducción de calor, el modelo de convección natural y forzada, y el modelo de radiación. Estos modelos se utilizan para analizar la distribución de temperatura en sistemas y dispositivos.

Modelo de Reacciones Químicas: Para simular reacciones químicas en flujos de fluidos, ANSYS Fluent ofrece la capacidad de incorporar modelos cinéticos y reacciones químicas complejas. Esto es útil en aplicaciones como la combustión y la química de procesos.

Modelo de Partículas: ANSYS Fluent permite la simulación de partículas sólidas en el flujo de fluido, lo que es útil para problemas de transporte de partículas y dispersión de contaminantes.

Modelos Multiphase: Para problemas que involucran múltiples fases de fluido, como flujos de aire y agua, ANSYS Fluent proporciona modelos matemáticos para simular interacciones entre fases, como el modelo de VOF (Volume of Fluid) y el modelo Euleriano-Lagrangiano.

Modelos de Interfaz de Superficie Libre: Para problemas que implican superficies libres, como flujos de agua en canales abiertos, ANSYS Fluent ofrece modelos de interfaz de superficie libre para simular el comportamiento de las superficies libres del fluido.

Modelo de Transferencia de Radiación: Para problemas que involucran radiación térmica, ANSYS Fluent incluye modelos para calcular la transferencia de calor radiante, como el modelo de radiación de dispersión discreta (DTRM) y otros modelos de radiación.

Modelos de Transporte de Especies: Para problemas que implican la difusión y advección de especies químicas, ANSYS Fluent ofrece modelos de transporte de especies y reacciones químicas.

Modelos de Conjugación de Calor: ANSYS Fluent permite realizar análisis de conjugación de calor, que involucra la transferencia de calor a través de sólidos y fluidos acoplados.

4.1.1 Ecuación de masa

Esta ecuación llamada de conservación de la masa o también como ecuación de continuidad, se plantea de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = S_m \quad (3)$$

Ecuación 4.1 Ecuación de conservación de la masa

Esta ecuación muestra cómo mantener la cantidad de movimiento en un flujo de fluido. La tasa de cambio de la cantidad de movimiento es igual a la suma de la divergencia del producto de la densidad, la velocidad y cualquier otra fuente.

Donde:

- $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ es la tasa de cambio de la presión con respecto al tiempo.
- $\nabla \cdot (\rho \vec{V})$ es el cambio del producto de la densidad ρ y el campo de velocidad \vec{V} .
- S_m representa la fuerza externa que actúa sobre el fluido.

También se pueden desarrollar geometrías asimétricas, con la ecuación dada por:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial r} (\rho v_r) + \frac{\rho v_r}{r} = S_m \quad (4)$$

Ecuación 4.2 Ecuación de Navier-Stokes

Esta ecuación describe la conservación de la cantidad de movimiento en un flujo de fluido en coordenadas cilíndricas y se utiliza en la dinámica de fluidos para modelar el comportamiento de los fluidos en sistemas cilíndricos o axiales, como tuberías o conductos con simetría cilíndrica.

Donde:

- $\frac{\partial p}{\partial t}$ es la tasa de cambio de la presión con respecto al tiempo.
- $\frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x)$ es la componente x del cambio de la cantidad de movimiento con respecto a la coordenada x.
- $\frac{\partial}{\partial r} (\rho v_r)$ es la componente r del cambio de la cantidad de movimiento con respecto a la coordenada r.
- $\frac{\rho v_r}{r}$ es el termino en coordenadas cilíndricas, donde involucra la velocidad radial v_r y la coordenada radial r.
- S_m es referente a una fuerza externa que interactúa con el fluido.

4.1.2 Ecuación de Movimiento

La ecuación de cantidad de movimiento en un sistema sin aceleración se tiene la ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla \rho + \nabla \cdot (\vec{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (5)$$

Ecuación 4.3 Ecuación de Movimiento

Donde:

- $\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v})$ representa el cambio de movimiento por unidad de volumen con respecto al tiempo.

- $\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v})$ es el cambio de la densidad y el tensor de velocidad.
- $-\nabla\rho$ muestra la variación espacial de la densidad.
- $\nabla \cdot (\bar{\tau})$ presenta la divergencia del tensor de esfuerzo de corte.
- $\rho\vec{g}$ representa la fuerza gravitatoria, donde ρ es la densidad y \vec{g} es la aceleración debida a la gravedad.
- \vec{F} representa las fuerzas externas que actúan sobre el fluido.

Esta ecuación es fundamental en la mecánica de fluidos y se utiliza para modelar el comportamiento de fluidos en diversas situaciones, desde el flujo en tuberías hasta la dinámica atmosférica.

El tensor de estrés se muestra por

$$\bar{\tau} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I) \right] \quad (6)$$

Ecuación 4.4 Ecuación de tensor de esfuerzo de corte en un fluido.

Donde:

- $\bar{\tau}$ es el tensor de esfuerzo de corte
- μ es la viscosidad dinámica del fluido
- $\nabla \vec{v}$ es el gradiente del campo de velocidad
- $\nabla \cdot \vec{v}$ es la divergencia del campo de velocidad
- I es el tensor identidad

Donde μ es la viscosidad molecular, I es el tensor unitario y el segundo término derecho es el efecto de dilatación del volumen.

Esta ecuación describe cómo el tensor de esfuerzo de corte en un fluido newtoniano está relacionado con la viscosidad y las derivadas espaciales del campo de velocidad del fluido. Es una parte importante de las ecuaciones de Navier-Stokes y se utiliza para modelar el comportamiento de los fluidos viscosos en una variedad de aplicaciones.

Cuando se presentan geometrías asimétricas, las ecuaciones de movimiento tanto axial como radial están dados por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (r \rho v_x v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v_r v_x) & \quad (7) \\ &= \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] \\ &+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial x} \right) \right] + F_x \end{aligned}$$

Ecuación 4.5 Ecuación de movimiento axial

Donde:

- $\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_x)$ representa la tasa de cambio de la cantidad de movimiento en la dirección x con respecto al tiempo.
- $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (r \rho v_x v_x)$ representa la variación en la dirección x por el término de convección en coordenadas cilíndricas.
- $\frac{\partial \rho}{\partial x}$ representa la variación de la densidad en la dirección x.
- $r \mu \left(2 \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right)$ termino de viscosidad en la dirección x.
- $r \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial x} \right)$ es el termino de viscosidad por las derivadas radiales.
- F_x Fuerza externa en dirección x que pueda presentarse.

Y por:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (r \rho v_x v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v_r v_r) \\ &= -\frac{\partial \rho}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(\frac{\partial v_r}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] \right] \\ & - 2\mu \frac{v_r}{r^2} + \frac{2\mu}{3r} (\nabla \cdot \vec{v}) + \frac{v_z^2}{r} + F_r \end{aligned}$$

Donde:

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} \quad (8)$$

Ecuación 4.6 Ecuación de divergencia del campo de la velocidad

Donde:

- $\frac{\partial v_x}{\partial x}$ se refiere a la derivada parcial de la componente v_x con respecto a la coordenada x.
- $\frac{\partial v_r}{\partial r}$ es la derivada de la componente v_r con respecto a la coordenada r.
- $\frac{v_r}{r}$ es el término adicional que surge debido a la variación en r.

Esta expresión representa cómo el campo de velocidad v cambia en todas las direcciones en coordenadas cilíndricas y es útil en la formulación de ecuaciones de la dinámica de fluidos en sistemas con simetría cilíndrica.

4.1.3 Transporte de Especies

ANSYS FLUENT puede modelar la mezcla y el transporte de especies químicas resolviendo ecuaciones de conservación describiendo las fuentes de convección, difusión y reacción para cada especie componente.

Cuando se procede a resolver ecuaciones de conservación para especies químicas, ANSYS FLUENT predice la fracción de masa local de cada especie, Y_i , a través de la solución de una ecuación de convección-difusión para la especie. Esta ecuación de conservación toma la siguiente forma general:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (9)$$

Ecuación 4.7 Ecuación de Transporte de Especies

Donde:

- $\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i)$ representa la tasa de cambio en el tiempo de la fracción de masa en la especie ρY_i con respecto al tiempo t en una mezcla de fluidos, y ρ es la densidad de la mezcla.
- $\nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i)$ significa el transporte de la especie debido al movimiento general del fluido.
- $-\nabla \cdot \vec{J}_i$ Esto toma en cuenta el transporte de la especie con su gradiente de concentración, con el termino negativo significa que tiende a reducir los gradientes de concentración.
- R_i presenta la producción o consumo de la especie debido a las reacciones químicas.
- S_i este término representa la inyección o eliminación de una especie en el sistema.

Esta ecuación describe cómo cambia en el tiempo la cantidad de una especie i en una mezcla de fluidos o reactivos, considerando factores como la advección (transporte debido al movimiento del fluido), la difusión (debido a gradientes de concentración), las reacciones químicas (producción o consumo de la especie) y las fuentes o sumideros externos. Es fundamental para entender cómo se comportan las especies químicas en un sistema en movimiento o en reacción.

5 Capítulo Resultados

5.1 Propuesta de malla computacional

El siguiente paso es la realización de la malla para la cual se comienza con la determinación de la malla donde se establece en la opción de sizing que significa tamaño, es decir determinaremos el tamaño de nodo e inflation para mejorar la precisión de los resultados mediante la creación de una capa de elementos refinados cerca de las superficies sólidas donde las propiedades del flujo cambian rápidamente, con ello se determina el tamaño de los nodos y capas en las que trabajara la malla para el modelo del fluido.

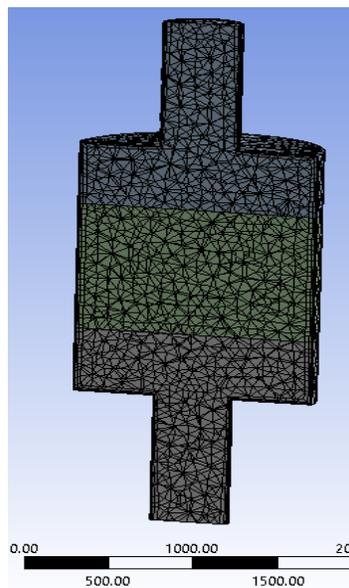


Figura 5.1 Mallado de geometría con ANSYS FLUENT

Los parámetros utilizados para este estudio se muestran a continuación, donde se especifican los parámetros del sizing, inflation y numero de nodos con los cuales se realiza esta preparación.

The image shows a screenshot of the 'Details of "Body Sizing" - Sizing' dialog box in ANSYS FLUENT. The dialog is organized into two main sections: 'Scope' and 'Definition'. Under 'Scope', the 'Scoping Method' is set to 'Geometry Selection' and the 'Geometry' is '3 Bodies'. Under 'Definition', the 'Suppressed' checkbox is unchecked, the 'Type' is 'Element Size', and the 'Element Size' is set to '100.0 mm'.

Details of "Body Sizing" - Sizing	
Scope	
Scoping Method	Geometry Selection
Geometry	3 Bodies
Definition	
Suppressed	No
Type	Element Size
<input type="checkbox"/> Element Size	100.0 mm

Figura 5.2 Parámetros de sizing en ANSYS FLUENT

The image shows a screenshot of the 'Details of "Inflation" - Inflation' dialog box in ANSYS FLUENT. The dialog is organized into two main sections: 'Scope' and 'Definition'. Under 'Scope', the 'Scoping Method' is 'Geometry Selection' and the 'Geometry' is '3 Bodies'. Under 'Definition', the 'Suppressed' checkbox is unchecked, the 'Boundary Scoping Method' is 'Geometry Selection', the 'Boundary' is '7 Faces', the 'Inflation Option' is 'Smooth Transition', the 'Transition Ratio' is 'Default (0.272)', the 'Maximum Layers' is '15', the 'Growth Rate' is '2', and the 'Inflation Algorithm' is 'Pre'.

Details of "Inflation" - Inflation	
Scope	
Scoping Method	Geometry Selection
Geometry	3 Bodies
Definition	
Suppressed	No
Boundary Scoping Method	Geometry Selection
Boundary	7 Faces
Inflation Option	Smooth Transition
<input type="checkbox"/> Transition Ratio	Default (0.272)
<input type="checkbox"/> Maximum Layers	15
<input type="checkbox"/> Growth Rate	2
Inflation Algorithm	Pre

Figura 5.3 Parámetros de inflation en ANSYS FLUENT

The image shows a screenshot of the 'Statistics' dialog box in ANSYS FLUENT. It displays the total number of nodes and elements in the mesh. The 'Nodes' count is 35988 and the 'Elements' count is 85823.

Statistics	
<input type="checkbox"/> Nodes	35988
<input type="checkbox"/> Elements	85823

Figura 5.4 Resumen de nodos y elementos a resolver ANSYS FLUENT

Es importante nombrar para los elementos cada zona a tratar junto con la entrada y salida que realizara el elemento para que el programa comprenda los pasos a seguir de cada sección y pueda procesar correctamente los datos.

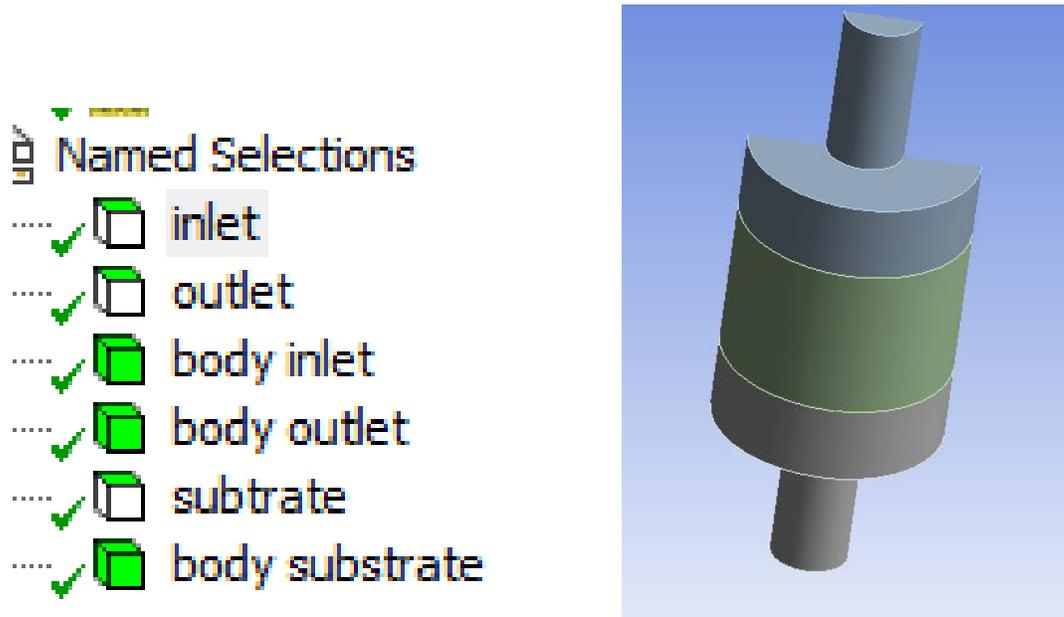


Figura 5.5 Mallado de geometría con ANSYS FLUENT

5.2 Condiciones de Frontera

Para las condiciones de frontera se establecen los parámetros necesarios para la función correcta del programa a continuación se muestra paso a paso la colocación de los datos para el problema a tratar mostrando en el programa ANSYS.

Y ahora si pasamos a las condiciones de frontera, donde primero utilizamos el modelo de viscosidad de k-épsilon (2eqn)

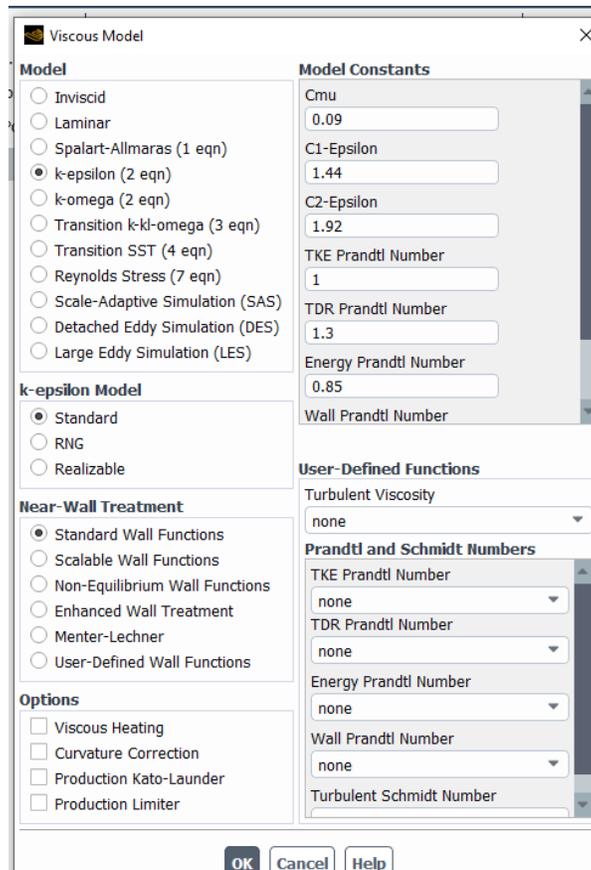


Figura 5.6 Modelo de viscosidad del sistema

Después seleccionamos Species Transport para indicar la mezcla de fluidos

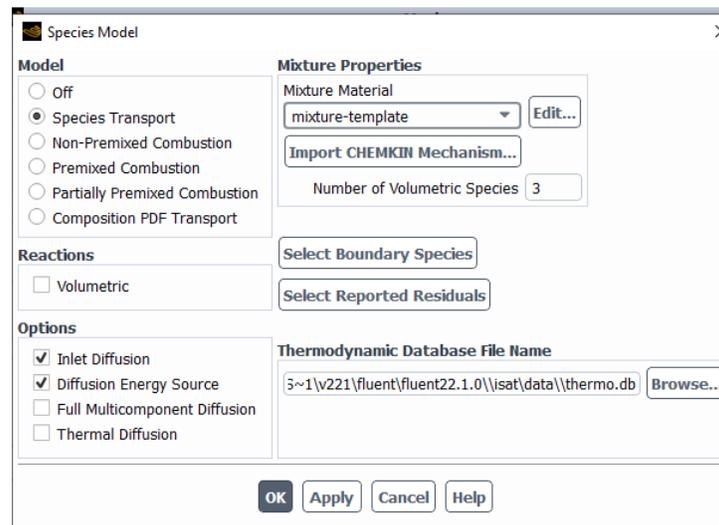


Figura 5.7 Sección de transporte de especies en el programa

Una vez activada esta opción que se observa en la imagen podemos actualizar las propiedades del sistema, y agregar los fluidos que deseemos estudiar en este caso el CO₂ y el aire.

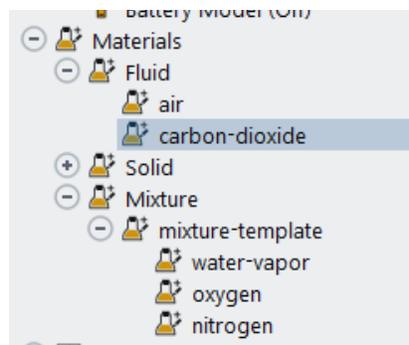


Figura 5.8 Cambio de fluidos

El siguiente paso es colocar las condiciones de frontera comenzando con velocidad inicial para este primer análisis utilizaremos 1 m/s ya que en la manifestación de impacto ambiental

de la planta GEDESA 1, se especifica que desde esa velocidad parte la salida de las chimeneas en las centrales eléctricas.

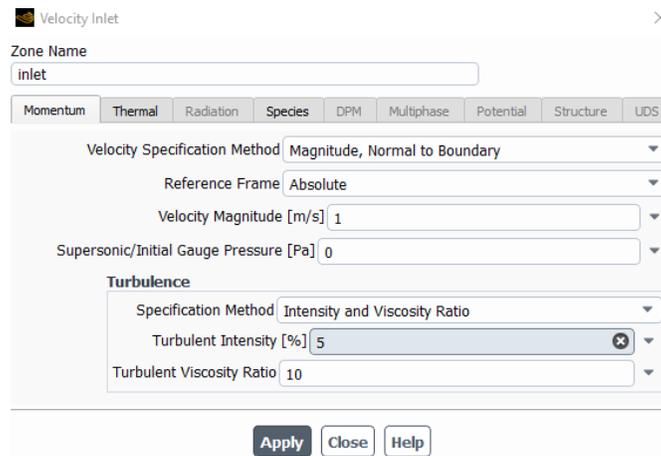


Figura 5.9 Condición de frontera velocidad inicial

Después con la temperatura de 100° centígrados que son 373.15°K definida también como inicial por ser de esta manera donde parte la temperatura en las salidas de las chimeneas termoeléctricas.

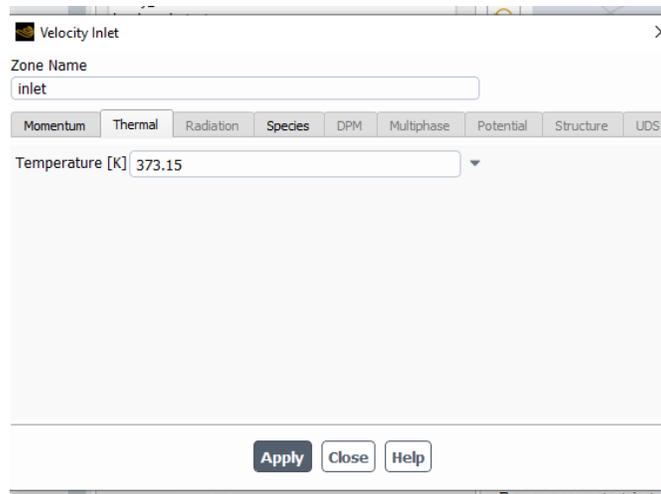


Figura 5.10 Condición de frontera temperatura inicial

Después comenzamos con la especificación de los gases que componen la entrada como se planteó con el CO₂ y aire, con una proporción igual para observar de mejor manera su distribución.

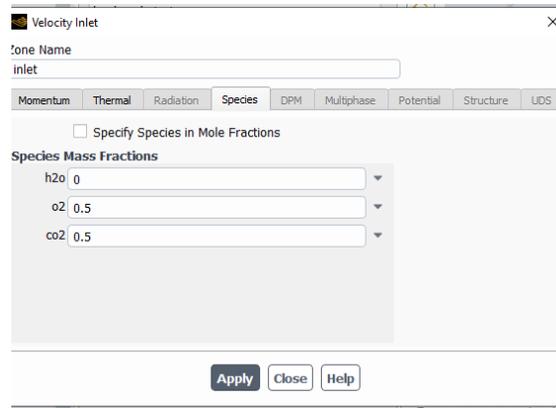


Figura 5.11 Condición de frontera mezcla de fluidos

Colocamos la porosidad del sustrato de 0.6, determinando en este caso la retención del sustrato de CO₂, debido a los estudios realizados por Chávez en el 2012 del comportamiento de las aminas, donde en su estructura de porosidad se maneja en el rango de 0.4-0.8 de porosidad para la retención de CO₂.

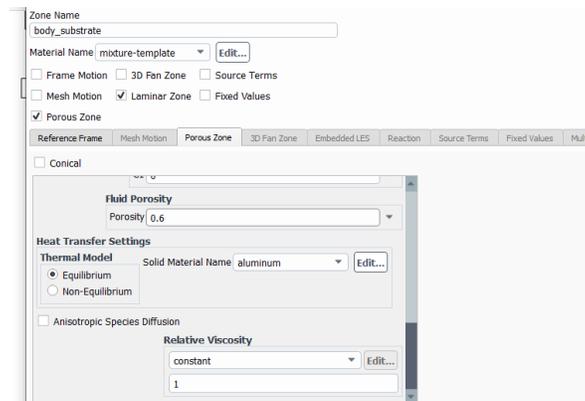


Figura 5.12 Condición de frontera porosidad del lecho fijo

Con esos datos inicializamos el cálculo con los parámetros seleccionados para visualizar correctamente el estudio propuesto.

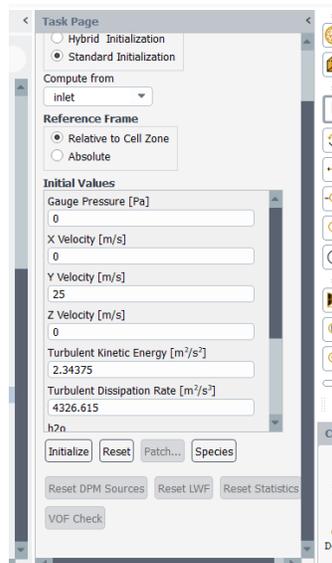


Figura 5.13 Inicialización de corrida de cálculos

Después colocamos el número de iteraciones para que el programa calcule las condiciones del sistema

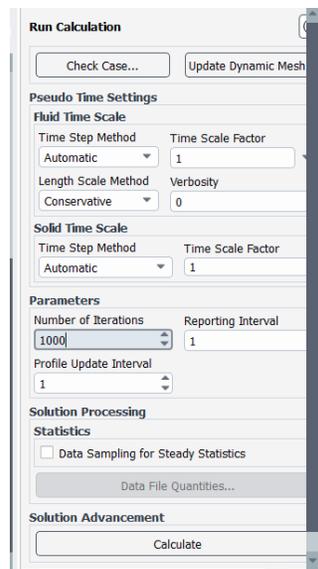


Figura 5.14 Establecimiento de numero de iteraciones a calcular del sistema

MODELACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO DE CONTAMINANTES EN UN REACTOR ABSORBEDOR DE LECHO FIJO

Corremos la simulación con 1000 iteraciones, ya que, en la investigación doctoral de Ascencio en 2017, menciona que a partir de este número de iteraciones se obtienen datos confiables para un estudio de simulación de fluidos por computadora.

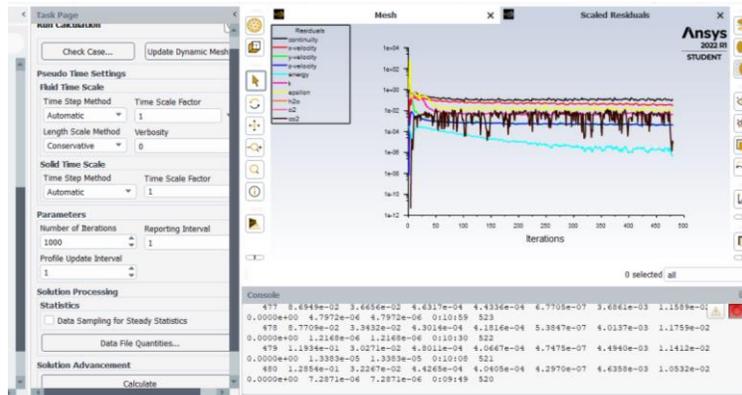


Figura 5.15 Corrida de simulación con los parámetros establecidos

Y obtenemos la finalización de la simulación para analizar los datos

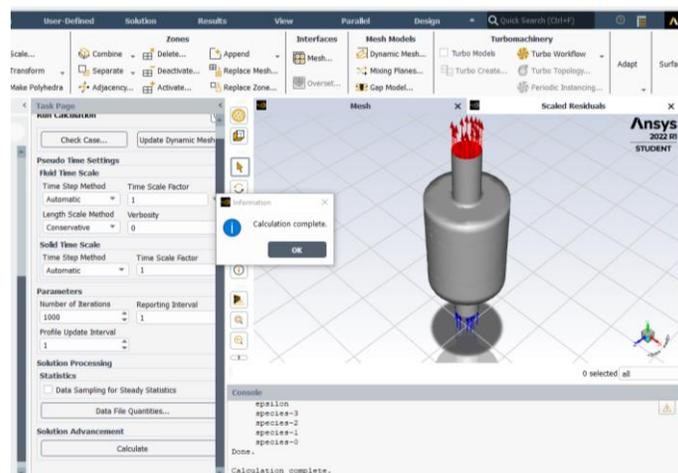


Figura 5.16 Finalización de los cálculos por parte del programa

5.3 Visualización de resultados

Una vez terminada la simulación se procede a realizar el análisis con los gráficos que nos puede mostrar el programa. Como se observa en la figura 5.17 referente a las zonas en las que se encuentra dividido el reactor, al entrar en contacto con la zona porosa se reduce considerablemente la velocidad casi a ser nula y aumentando al momento de salir por la reducción de área de la geometría.

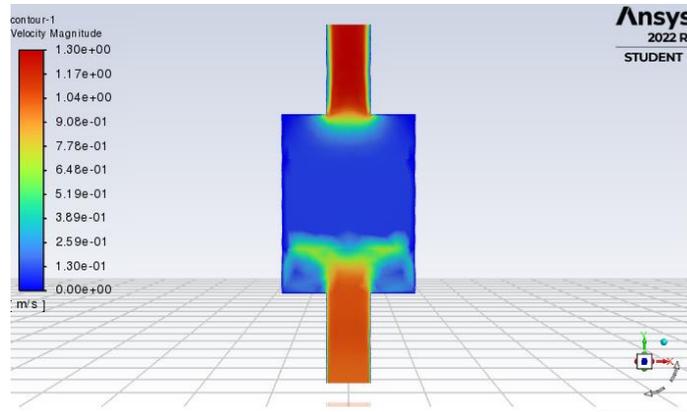


Figura 5.17 Grafico por zonas de velocidad del reactor

Otro gráfico que se puede obtener es donde se los vectores de la velocidad donde podemos analizar la dirección en la que se mueve el fluido con la gran disminución de velocidad al atravesar el medio poroso.

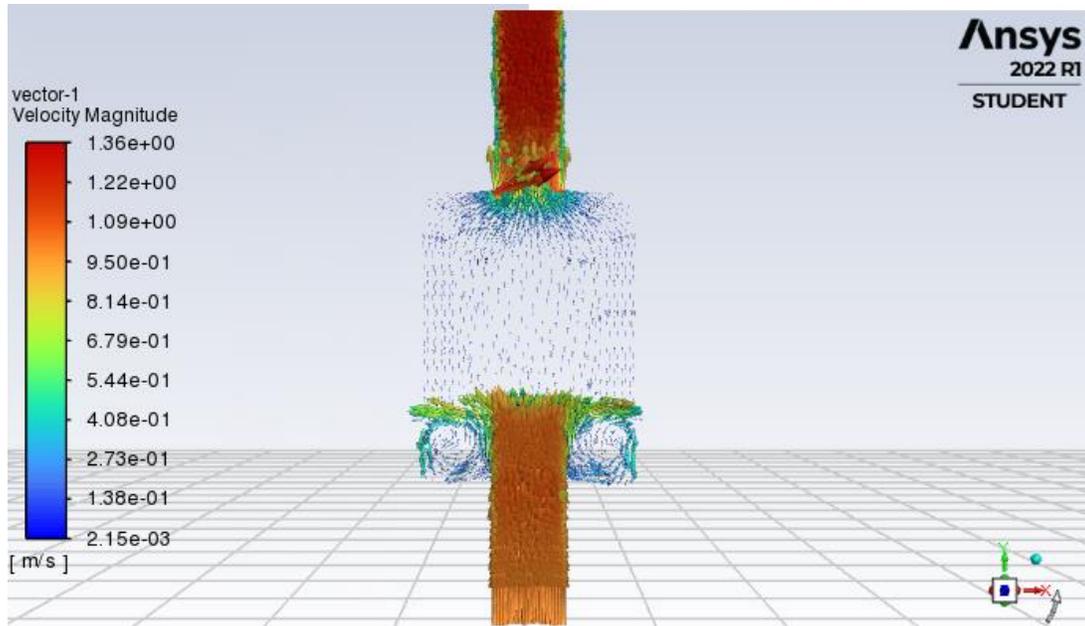


Figura 5.18 Grafico vectorial de velocidad del fluido dentro del reactor

Con los datos obtenidos fue posible realizar la siguiente tabla donde se muestra la velocidad contra la distancia recorrida por el fluido, en la cual realiza su recorrido de forma vertical dentro del reactor y la subdivisión según la zona donde se encuentra.

Tabla 5.1 Tabla distancia vs Velocidad

Posición Vertical (metros)	Velocidad Entrada (m/s)	Zonas
0	1	Entrada
0.25	1	
0.5	1	
0.75	1	
1	1	
1.25	1	
1.5	1	
1.75	0.2	Medio Poroso
2	0.2	
2.25	0.1	
2.5	0.15	
2.75	0.45	Salida
3	0.6	
3.25	0.75	
4	0.8	

Como se observa la disminución de velocidad comienza al ingresar en la zona porosa reteniendo el fluido y su avance, este dato es importante ya que después de realizar la gráfica

siguiente. Entendemos como el comportamiento del fluido cambia con el movimiento dentro de la zona porosa.

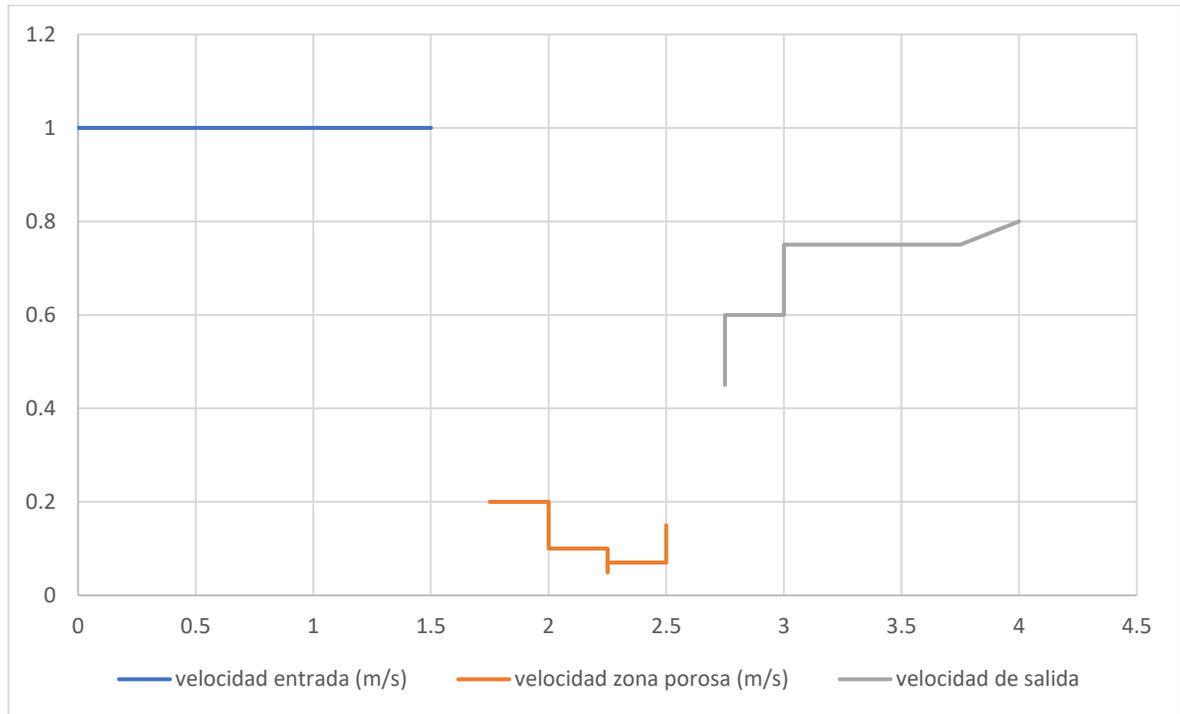


Figura 5.19 Gráfico vectorial de velocidad del fluido dentro del reactor

Como observamos podemos determinar el comportamiento que mantiene la velocidad en cada etapa donde en la zona de entrada mantiene la velocidad de 1m/s y con la zona porosa reduce considerablemente hasta por debajo de los 0.2 m/s y de ahí al salir vuelve a aumentar la velocidad previo a salir del reactor.

En este ensayo podemos concluir que la variabilidad de la velocidad en el medio poroso será determinante para encontrar en diferentes ensayos cual es la porosidad que ayudara a realizar correctamente la retención según lo requiera el proceso químico a analizar.

5.4 Cambio de parámetro zona porosa

El siguiente paso es variar los parámetros de interés para observar que cambios sufre el sistema y como se afecta el funcionamiento del reactor. El primer paso consiste en modificar el tamaño de la zona porosa con la cual veremos cómo cambia la retención del fluido para seleccionar el nivel de espesor del medio poroso más benéfico para que se lleve a cabo la reacción.

Como se observa en la figura 5.20 se realiza el cambio de espesor de zona porosa de 1 metro a 0.5 metros, para así observar los cambios que sufre la velocidad dentro del reactor.

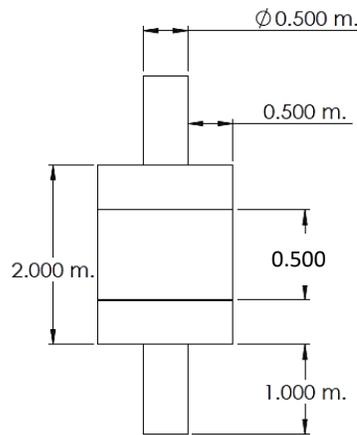


Figura 5.20 Cambio de espesor de zona porosa a 0.500

Realizando este cambio en el espesor de la zona porosa únicamente, obtenemos la siguiente tabla y gráficos de cómo cambia el movimiento dentro del reactor, manteniendo los demás parámetros iguales únicamente con el ajuste en el espesor de la zona porosa. Como existe un medio que retiene el fluido provoca una disminución de velocidad lo cual es un indicador de que existe una retención dentro de la zona porosa.

Tabla 5.2 Tabla distancia vs Velocidad zona porosa de 0.500

Posicion Vertical	Velocidad Entrada (m/s)	Zonas
0	1	Entrada
0.25	1	
0.5	1	
0.75	1	
1	1	
1.25	1	
1.5	1	
1.75	1	
2	0.3	Medio Poroso
2.25	0.2	Salida
2.5	0.3	
2.75	0.45	
3	0.5	
3.25	0.75	
4	0.8	

Como se puede observar el comportamiento en comparación con la primera simulación es muy similar se obtiene una disminución de velocidad en la zona porosa, pero retiene un menor tiempo por ende la velocidad aumenta rápidamente al salir de la zona porosa. En la figura 3.26 se puede observar como la retención se lleva a cabo en un tiempo reducido a comparación con el estudio anterior de espesor de zona porosa de 1m.

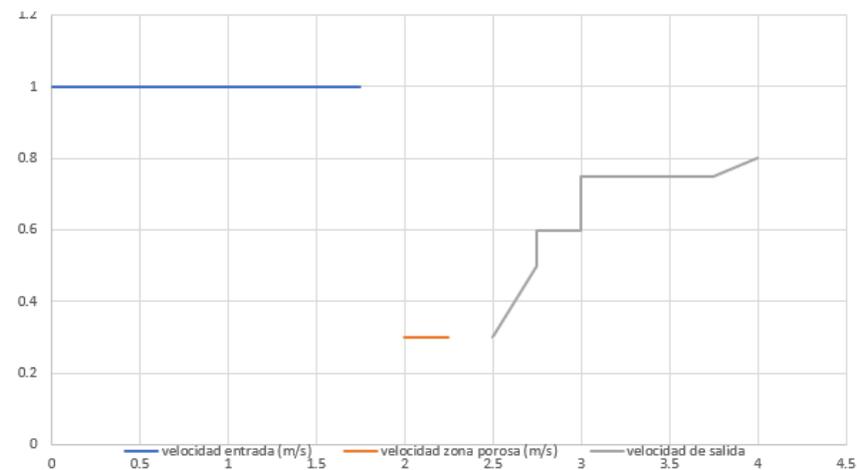


Figura 5.21 Gráfica de velocidad con cambio de espesor zona porosa 0.500

El siguiente cambio es aumentar el espesor de la zona porosa ahora a un espesor de 1.5m como se observa a continuación en la figura 3.27. Para observar si el comportamiento se mantiene similar.

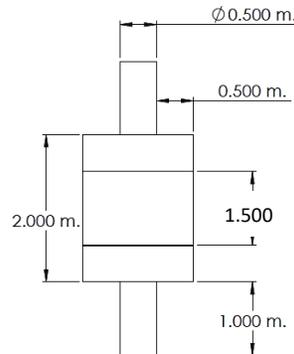


Figura 5.22 Cambio de espesor de zona porosa 1.500

Una vez realizado el cambio de espesor y al realizar la simulación correspondiente obtenemos la tabla siguiente donde podemos ver el comparativo de la distancia recorrida vs la zona porosa y así analizar los resultados correspondientes.

Tabla 5.3 Tabla distancia vs Velocidad zona porosa de 1.500

Posicion Vertical	Velocidad Entrada (m/s)	Zonas
0	1	Entrada
0.25	1	
0.5	1	
0.75	1	
1	1	
1.25	1	
1.5	0.3	Medio Poroso
1.75	0.2	
2	0.15	
2.25	0.1	
2.5	0.1	
2.75	0.2	Salida
3	0.3	
3.25	0.4	
4	0.45	

Como podemos observar la retención con una zona porosa con un espesor menor reduce la retención del medio poroso y la velocidad interna es mayor en la salida en comparación con

la primera simulación como lo podemos verificar en la figura 5.23 donde se muestra nuevamente la retención del fluido dentro de la zona porosa. Al aumentar el espesor de la zona porosa produce una retención mayor y en la salida es menor la velocidad al momento de abandonar el reactor. Con lo cual, aunque parece lógico que al realizar estos cambios como ciertamente muy predictivos, nos ayuda a esclarecer que el comportamiento simulado si es preciso con los planteamientos establecidos.

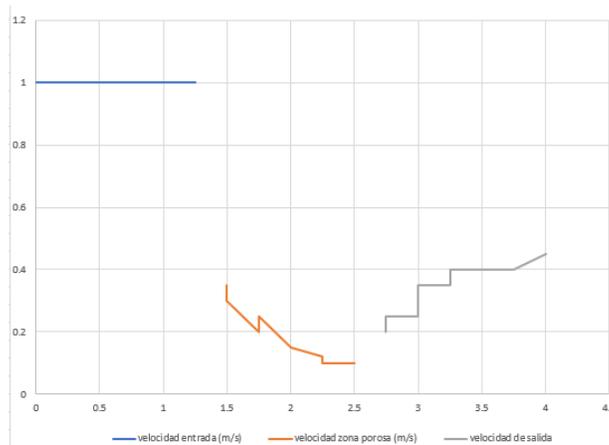


Figura 5.23 Gráfica de velocidad con cambio de espesor zona porosa 1.500

5.5 Cambio de parámetro porosidad

El siguiente cambio realizado será en relación a la porosidad del elemento. Para esta simulación el aspecto a cambiar será utilizando el espesor inicial del medio poroso, se realizará una simulación con una porosidad mayor (0.8) y menor (0.6), buscando comprobar que con una porosidad alta el fluido tendrá una retención por un mayor tiempo y a su inversa con una porosidad baja. Recordemos que la porosidad inicial es la que se muestra en la figura 5.24.



Figura 5.24 Porosidad inicial

El análisis para la porosidad partirá de una porosidad de 0.4 para observar en la fig. 5.25 cómo se comporta el fluido dentro del medio poroso. Y en la tabla

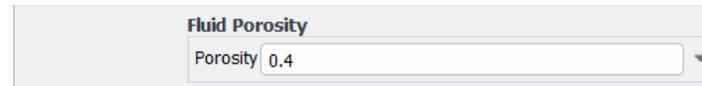


Figura 5.25 Cambio de porosidad 0.4

Tabla 5.4 Tabla velocidad interna dentro del medio poroso porosidad 0.4

Distancia	Velocidad maxima medio poroso	Medio Poroso
1.75	0.1	
2	0.05	
2.25	0.1	
2.5	0.1	

Para la siguiente simulación se utiliza una porosidad de 0.8 y así obtener una conclusión de cómo trabaja el programa con los parámetros establecidos.



Figura 5.26 Cambio de porosidad 0.8

Tabla 5.5 Tabla velocidad interna dentro del medio poroso porosidad 0.8

Distancia	Velocidad maxima medio poroso	Medio Poroso
1.75	0.3	
2	0.35	
2.25	0.3	
2.5	0.35	

Con el cambio de porosidad se observa que tiene un cambio significativo en comparación de la primera simulación, donde al trabajar con una porosidad alta (0.8), se observa que el avance que tiene el fluido es mayor, en comparación con una porosidad alta (0.4) donde el movimiento del fluido reduce considerablemente en comparación con la primera simulación. Con este análisis podemos concluir que el nivel de porosidad es un factor determinante para que el fluido se mueva con una mayor facilidad o en su caso se retenga por un mayor tiempo.

5.6 Modificación de parámetros a partir de la primera simulación

Como podemos observar con los cambios en el parámetro de la porosidad podemos concluir y entender que con una porosidad baja se tiene una retención mayor del fluido, mientras con una porosidad alta el movimiento del fluido es mayor. Con estos elementos variables podemos realizar una simulación adecuada utilizando la porosidad que se acerque a la realidad con los datos que maneja las aminas, que esta tesis ha planteado.

5.6.1 Análisis de independencia de malla para caso final

Para llevar correctamente un análisis de independencia de malla es necesario realizar un estudio variando diferentes tamaños de elementos para así encontrar un esquema que nos permita obtener datos que sean confiables para determinar la precisión de los resultados. Para este caso en particular se utilizaron 3 diferentes tamaños de elementos los cuales son:

Tabla 5.6 Tabla de tamaño de elemento para análisis de independencia de malla

Nombre	Tamaño
Gruesa	0.5 mm
Mediana	0.4 mm
Fina	0.3 mm

Al realizar estos cambios la simulación cambiara de forma considerablemente empezando por la malla la cual cambiara en su calidad ortogonal, número de nodos y de elementos, con esto podremos tener una idea de cómo cambiara la precisión a continuación se muestra una tabla comparativa donde se muestra el cambio que sufre el mallado con el cambio de tamaño de elemento.

Tabla 5.7 Tabla comparativa de calidad, nodos y elementos de malla gruesa, media y fina

Tamaño			Calidad O	Nodos	Elementos
Grueso	0.5	mm	0.8053	35,988	85,823
Medio	0.4	mm	0.81021	71,976	171,646
Fino	0.3	mm	0.81038	143,952	343,292

Este cambio al correr las simulaciones podemos observar que los resultados cambian considerablemente por lo tanto se establece un comparativo de la velocidad promedio que se tiene dentro de la zona porosa para comparar que tanta diferencia existe entre uno y otro, para elegir el tamaño con una buena precisión y consuma menor tiempo de simulación.

Tabla 5.8 Tabla comparativa de velocidad promedio de la zona porosa

Número de Reynolds	Mallado	Velocidad Media en el medio poroso	% Velocidad
21,700	Grueso	0.2 m/s	-96%
	Medio	0.105 m/s	-3%
	Fino	0.102 m/s	0%

Como se observa la velocidad promedio cambia considerablemente con los parámetros actuales, y podemos observar que la diferencia entre las mallas fina y media no existe una diferencia considerable ya que se tiene un error del 3% y la literatura presentada por Berrones, 2017 una simulación con 5% de error es permisible. Con lo cual podemos ir considerando utilizar la malla media por significar menos tiempo de cómputo y mantiene un error permisible.

Ahora, con esto comenzaremos a cambiar parámetros que nos permitan asegurarnos que malla es la más adecuada, como la velocidad es la que nos interesa saber debió a que su disminución dentro el fluido nos permite saber que existe la retención del fluido dentro del medio poroso, así que será la que utilizamos, aunque al cambiar la velocidad de entrada nos llevara a que el número de Reynolds cambie y por ende exista una turbulencia mayor o menor según sea el caso, previo a esto será necesario recalcular Reynolds para entender y comparar el comportamiento que tendrá el sistema. En la figura 5.27 se muestra el cambio de número de Reynolds con una velocidad de 1m/s, 1.5m/s y 2 m/s.

$$NRe = \frac{0.5m * 1 \frac{m}{s} * 0.946 kg/m^3}{2.17 * 10^{-5} kg/ms} = 21,797 \quad \Rightarrow \quad \text{Velocidad 1m/s}$$

$$NRe = \frac{0.5m * 1.5 \frac{m}{s} * 0.946 kg/m^3}{2.57 * 10^{-5} kg/ms} = 32,695 \quad \Rightarrow \quad \text{Velocidad= 1.5 m/s}$$

$$NRe = \frac{0.5m * 2 \frac{m}{s} * 0.946 kg/m^3}{2.93 * 10^{-5} kg/ms} = 43,594 \quad \Rightarrow \quad \text{Velocidad=2 m/s}$$

Figura 5.27 Cambio de Numero de Reynolds con cambio de velocidades de entrada

Ahora con esto comenzaremos a cambiar parámetros como lo son la velocidad de entrada y la porosidad de la amina, que nos permitan asegurarnos que malla es la más adecuada, como la velocidad es la que nos interesa saber debió a que su disminución dentro el fluido nos permite saber que existe la retención del fluido dentro del medio poroso, así que será la que utilizamos, aunque, al cambiar la velocidad de entrada nos llevara a que el número de Reynolds cambie y por ende exista una turbulencia mayor o menor según sea el caso previo a esto será necesario recalcular Reynolds para entender y comparar el comportamiento que tendrá el sistema. En la figura 5.27 se muestra el cambio de numero de Reynolds con una velocidad de 1m/s, 1.5m/s y 2 m/s.

Una vez determinado esto se procede a correr la simulación una vez más con los diferentes números de Reynolds y comparar las velocidades promedio resultantes para ahora si determinar que malla resulta más precisa y con un tiempo computacional reducido que sea más fácil y rápido a utilizar para que sea más eficiente la obtención de resultados sin tanto tiempo de consumo y pueda replicarse. En la tabla 5.9 se muestra el comparativo de velocidad promedio donde se obtienen los comparativo de error que existe entre los diferentes espesores de elemento y los aumentos de velocidad de entrada.

Tabla 5.9 Tabla comparativa de cambio de Número de Reynolds y tamaño de malla

Número de Reynolds	Mallado	Velocidad Media en el medio poroso		% Velocidad
21,700	Grueso	0.167	m/s	-63.73%
	Medio	0.105	m/s	-2.94%
	Fino	0.102	m/s	0.00%
32,695	Grueso	0.275	m/s	-125.41%
	Medio	0.127	m/s	-4.10%
	Fino	0.122	m/s	0.00%
43,594	Grueso	0.295	m/s	-130.47%
	Medio	0.132	m/s	-3.13%
	Fino	0.128	m/s	0.00%

Con esta información obtenida y analizando los porcentajes de error que existen entre los 3 mallados y número de Reynolds podemos concluir que el uso de una malla media de 0.4mm es la más adecuada para obtener resultados confiables, por tener un rango de error debajo de 5% que representa un ejemplo aceptable y con un tiempo computacional reducido en comparación con la malla fina, con lo cual es la mejor opción a utilizar.

5.6.2 Análisis de velocidades dentro del reactor

Una vez analizada la independencia de malla el siguiente paso es realizar las simulaciones con la malla ajustada con mejores características de precisión y tiempo computacional. Con esta información se procede a realizar la modificación de valores que permitan analizar el comportamiento con el cambio de velocidades de 1m/s, 1.5 m/s y 2 m/s. en las siguientes graficas se muestran los cambios que se generan.

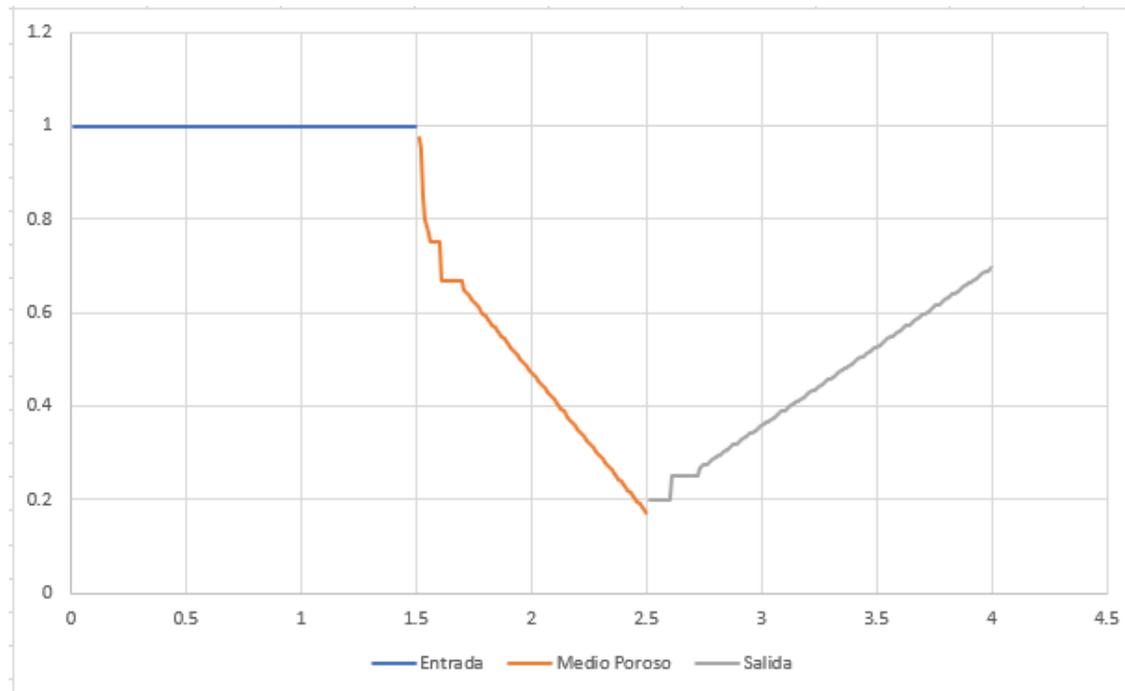


Figura 5.28 Velocidad promedio del flujo a velocidad de entrada de 1m/s

En la figura 5.29 se muestra la velocidad promedio que maneja el fluido y cómo se comporta el fluido en sus 3 fases de entrada dentro del medio poroso y la salida, se repitió este proceso para las diferentes velocidades y así comparar su comportamiento y que diferencia tiene.

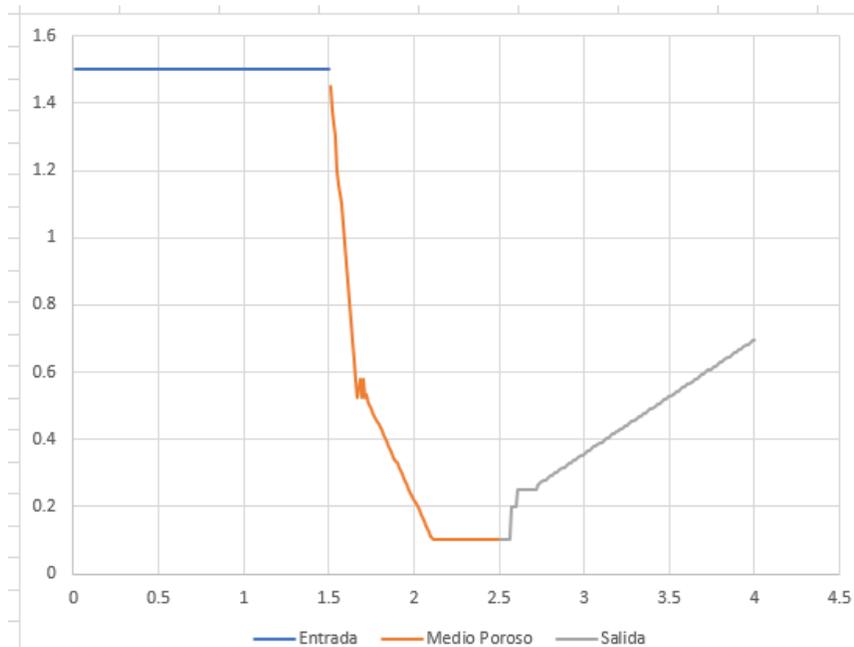


Figura 5.29 Velocidad promedio del flujo a velocidad de entrada de 1.5m/s

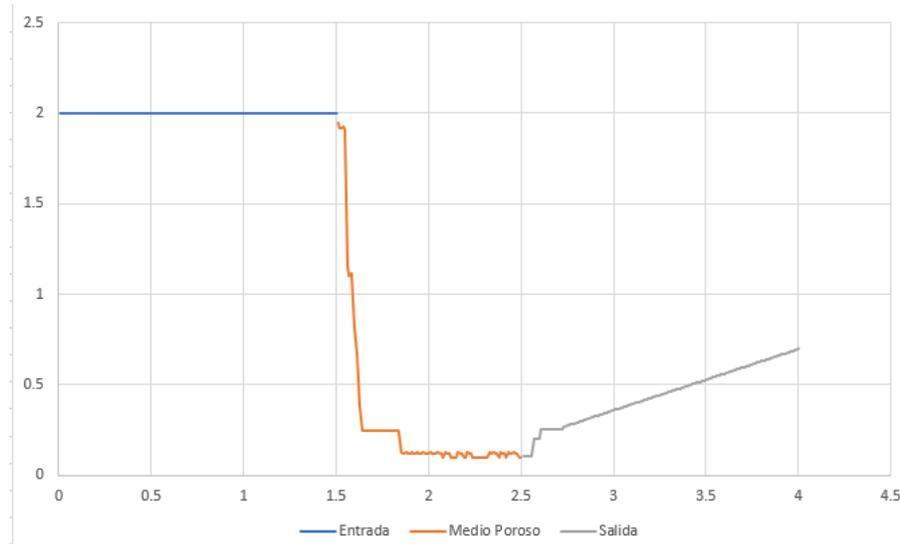


Figura 5.30 Velocidad promedio del flujo a velocidad de entrada de 2 m/s

A manera de resumen de este estudio se muestra la tabla siguiente con los promedios de velocidad obtenidos.

Tabla 5.10 Resumen de modificación de velocidad

Velocidad de entrada	Velocidad media en Medio poroso	Distancia recorrida del medio Poroso
1 m/s	0.196	0.1 m
1.5 m/s	0.108	0.5 m
2 m/s	0.126	0.85 m

Al realizar las simulaciones solo con la modificación de velocidades de entrada, se puede observar que, con un aumento en la velocidad de entrada del fluido, dentro del medio poroso se mantiene por mayor tiempo una velocidad constante, por lo tanto, podemos concluir con esto que para que la reacción química tenga mayor tiempo para reaccionar una velocidad de entrada alta mantendrá por mayor tiempo el fluido.

A continuación, se realiza el cambio en la simulación de porosidad en conjunto con la velocidad para observar el comportamiento que este tiene, y así elegir que combinación resulta más benéfica para nuestro estudio. Para esto se alterna el cambio de porosidad de 0.4 y 0.8, ya que con 0.6 se tienen los valores completos en la primera simulación, se realiza la simulación de estos valores en conjunto con las velocidades como se observa en los gráficos siguientes.

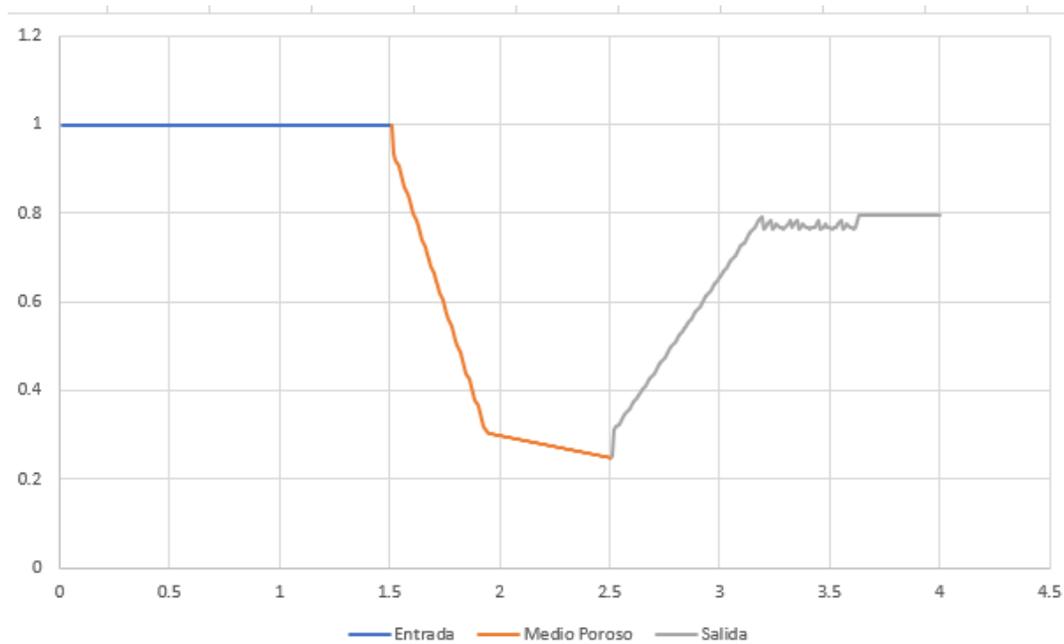


Figura 5.31 Velocidad promedio de 0.3 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 1 m/s porosidad 0.4

Como observamos en esta primera figura 5.31 con una velocidad de entrada de 1 m/s y una porosidad de 0.4, se obtiene una velocidad promedio en la zona porosa de 0.3 m/s y recorre a esta velocidad un total de 0.65 metros del total de 1 metro que abarca el medio poroso.

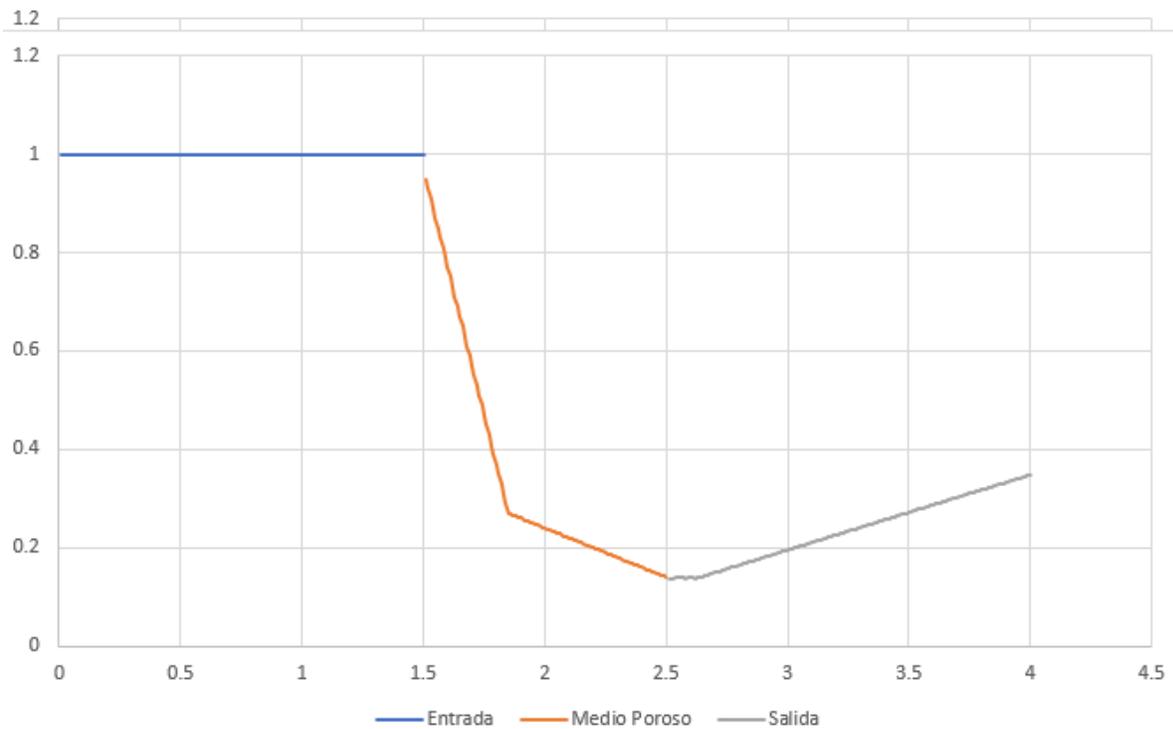


Figura 5.32 Velocidad promedio de 0.25 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 1 m/s porosidad 0.8

En la figura 5.32 obtenemos que con una velocidad de entrada de 1 m/s y una porosidad de 0.8, se obtiene una velocidad promedio en la zona porosa de 0.25 m/s y recorre a esta velocidad un total de 0.85 metros del total de 1 metro que abarca el medio poroso. Con esta información podemos entender que, una porosidad elevada reducirá considerablemente la velocidad pero que, también con una porosidad alta se mantiene por mayor tiempo estable la velocidad dentro del medio poroso, ya que con la porosidad de 0.4 se mantiene durante 0.65 metros, mientras que con la de 0.8 permanece por 0.85 metros.

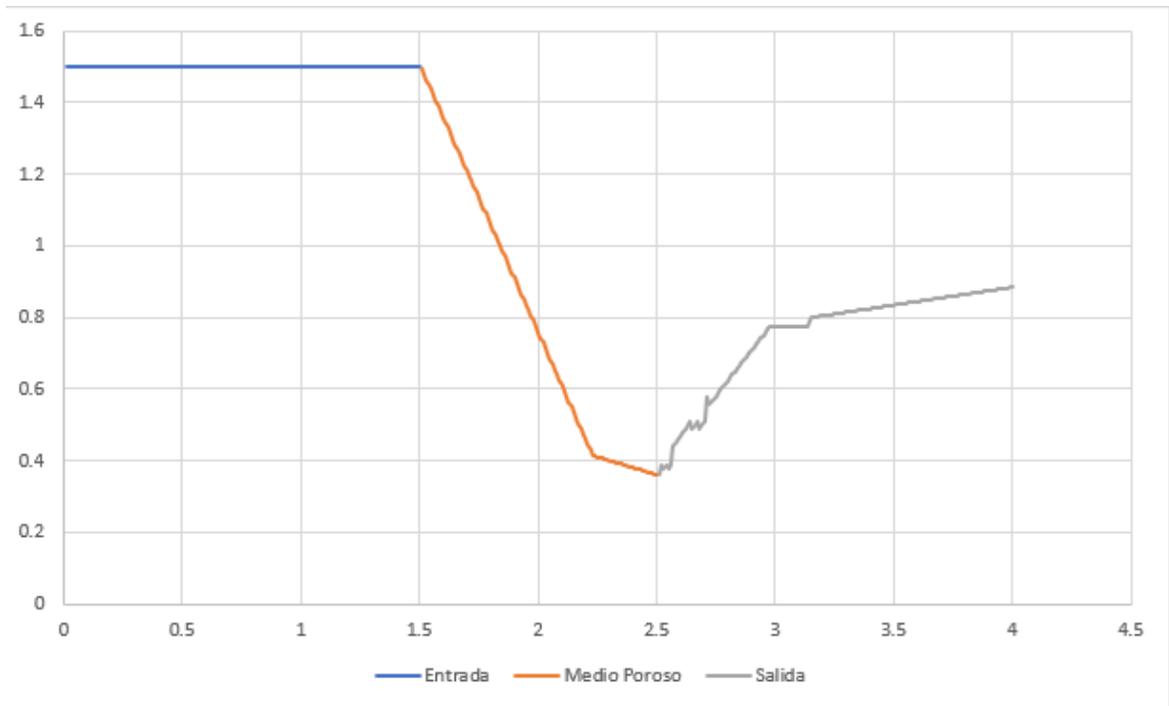


Figura 5.33 Velocidad promedio 0.47 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 1.5 m/s porosidad 0.4

En esta simulación presentada en la figura 5.34 obtenemos que con una velocidad de entrada de 1.5 m/s y una porosidad de 0.4, se obtiene una velocidad promedio en la zona porosa de 0.47 m/s y recorre a esta velocidad un total de 0.3 metros del total de 1 metro que abarca el medio poroso.

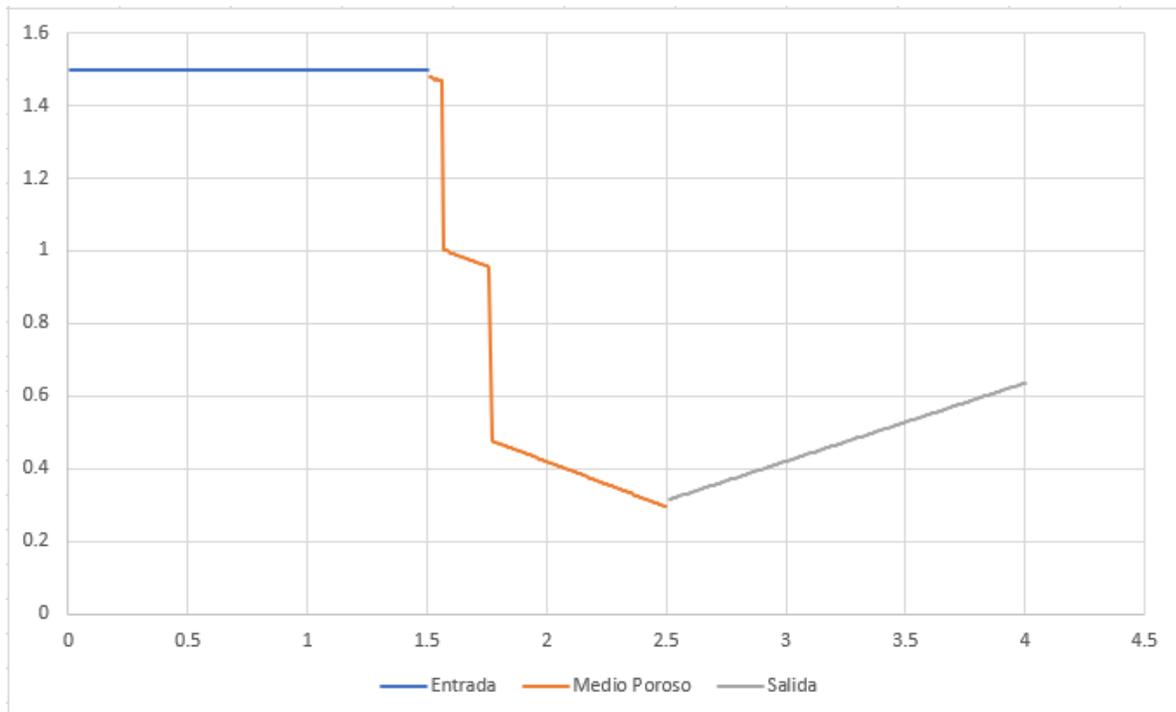


Figura 5.34 Velocidad promedio 0.37 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 1.5 m/s porosidad 0.8

En la siguiente simulación mostrada en la figura 5.40, obtenemos que con una velocidad de entrada de 1.5 m/s y una porosidad de 0.8, se obtiene una velocidad promedio en la zona porosa de 0.37 m/s y recorre a esta velocidad un total de 0.75 metros del total de 1 metro que abarca el medio poroso.

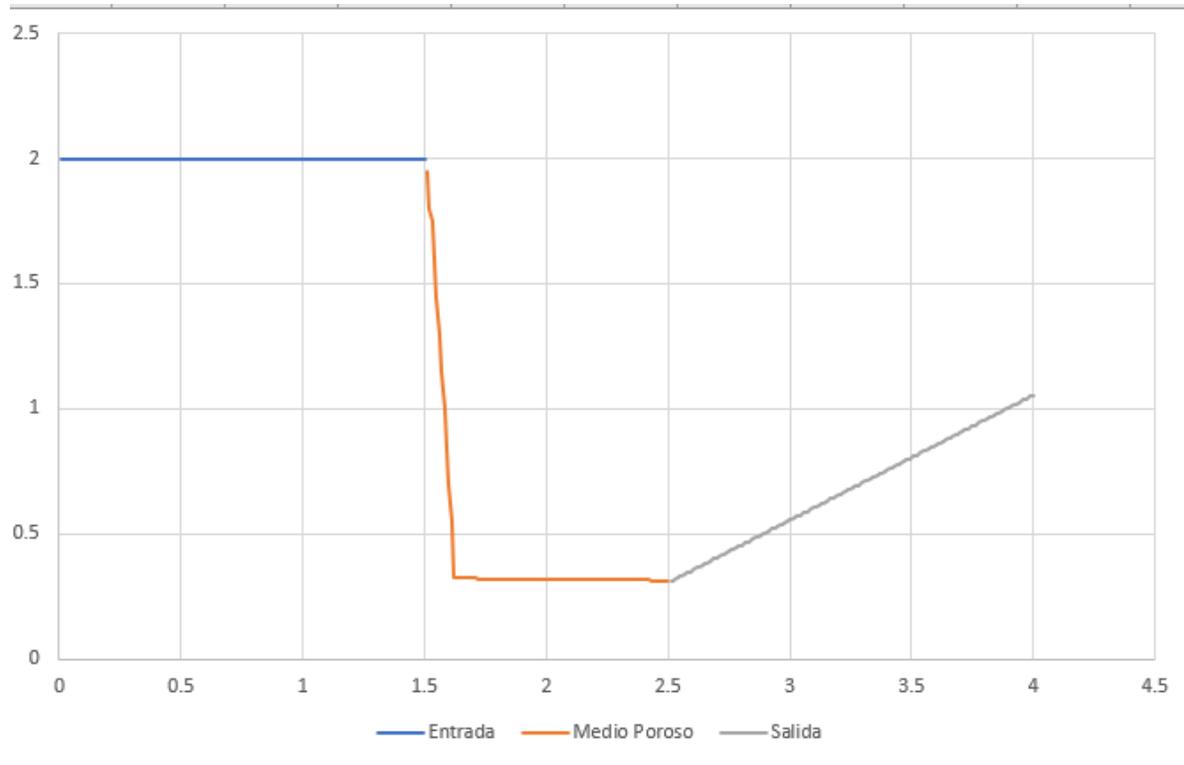


Figura 5.35 Velocidad 0.35 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 2 m/s porosidad 0.4

Cuando pasamos a simular a una velocidad de entrada de 2 m/s y una porosidad de 0.4, como se muestra en la figura 5.36, se obtiene una velocidad promedio de 0.35m/s y se recorre una distancia en la zona porosa de 0.75m. para pasar finalmente a una última simulación.

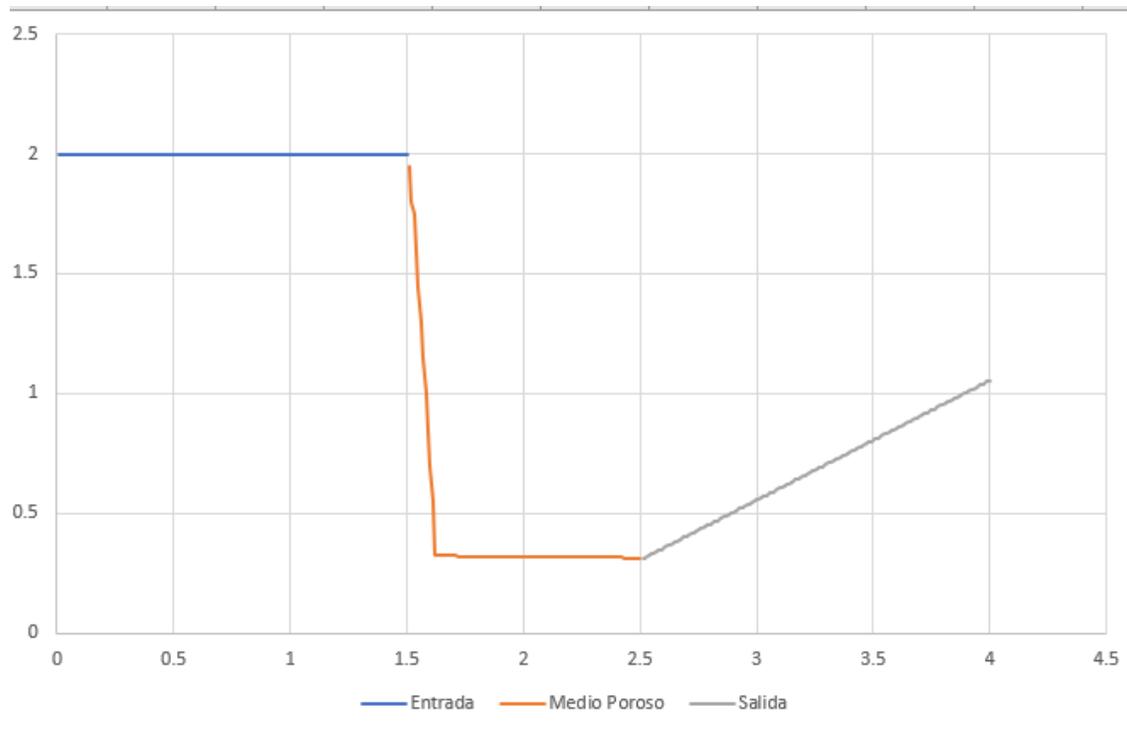


Figura 5.36 Velocidad promedio de 0.32 m/s dentro del flujo del medio poroso a velocidad de entrada de 2 m/s porosidad 0.8

Con esta última simulación utilizando una velocidad de entrada de 2 m/s y una porosidad de 0.8, como se muestra en el gráfico de la figura 5.36, se obtiene una velocidad promedio de 0.32m/s y se recorre una distancia en la zona porosa de 0.85m., la cual resulta muy similar con la simulación de 0.4 de porosidad en comparación con las simulaciones con una velocidad más baja. Esta relación nos permite entender que, entre mas alta sea la velocidad, esta se mantendrá constante por un mayor tiempo, con esta característica concluimos que para que la velocidad sea constante dentro del mayor tiempo posible debe ser lo mas alta posible.

A manera de resumen se presenta la siguiente tabla con los resultados obtenidos del estudio de la porosidad en conjunto con el cambio de velocidad.

Tabla 5.11 Resumen de cambio de porosidad en conjunto con velocidad

Velocidad de entrada	Porosidad	Velocidad media en Medio poroso	Distancia recorrida del medio Poroso
1 m/s	0.4	0.3	0.65 m
	0.8	0.25	0.85 m
1.5 m/s	0.4	0.47	0.3 m
	0.8	0.37	0.75 m
2 m/s	0.4	0.35	0.75 m
	0.8	0.32	0.85 m

Como se puede observar, el cambio combinado de porosidad con velocidad funciona de manera similar en los 3 casos, a mayor aumento de porosidad la velocidad disminuye constantemente reteniendo el fluido y permitiendo que exista una velocidad constante por un tiempo más extendido además que entre mayor sea la velocidad de entrada, su velocidad se mantiene constante dentro del material poroso.

Obteniendo estas conclusiones se procede a realizar una simulación con parámetros propuestos de flujo transitorio con las características siguientes.

5.7 Simulación en estado Transitorio

Con los datos obtenidos con las simulaciones anteriores se procede a realizar una simulación ahora en estado transitorio, con el objetivo de analizar el comportamiento del flujo con las características que permiten una retención por un tiempo más extendido, ya que, una retención por un periodo de tiempo más largo contribuirá a que la reacción química de la amina con el CO₂ se realice con mejores características.

Tabla 5.12 Características de simulación en estado transitorio

Parámetro	Unidades
Tiempo	1500 seg.
Porosidad	0.8
Velocidad	2 m/s
Espesor	1 m

Al realizar la simulación con las características mostradas en la tabla 5.12 observamos que el recorrido total del flujo dentro del reactor con el cual realiza el recorrido completo en un tiempo de 1015 segundos como se muestra en la figura 5.37, donde observamos el movimiento total de la partícula dentro del reactor.

```
! 1015 solution is converged
Writing "| gzip -2cf > SolutionMonitor.gz"...
Writing temporary file C:\Users\ACER\AppData\Local\Temp\flntgz-57563 ...
Done.
```

Figura 5.37 Convergencia de simulación transitoria

Con esto es posible visualizar el movimiento central que realiza una partícula desde que entra hasta que sale del reactor, en la gráfica siguiente se puede observar cómo su velocidad cambia dentro de la zona porosa y se mantiene una retención de casi 40 segundos, lo cual nos indica que con las características de porosidad se beneficiara a mantener el flujo un mayor tiempo.

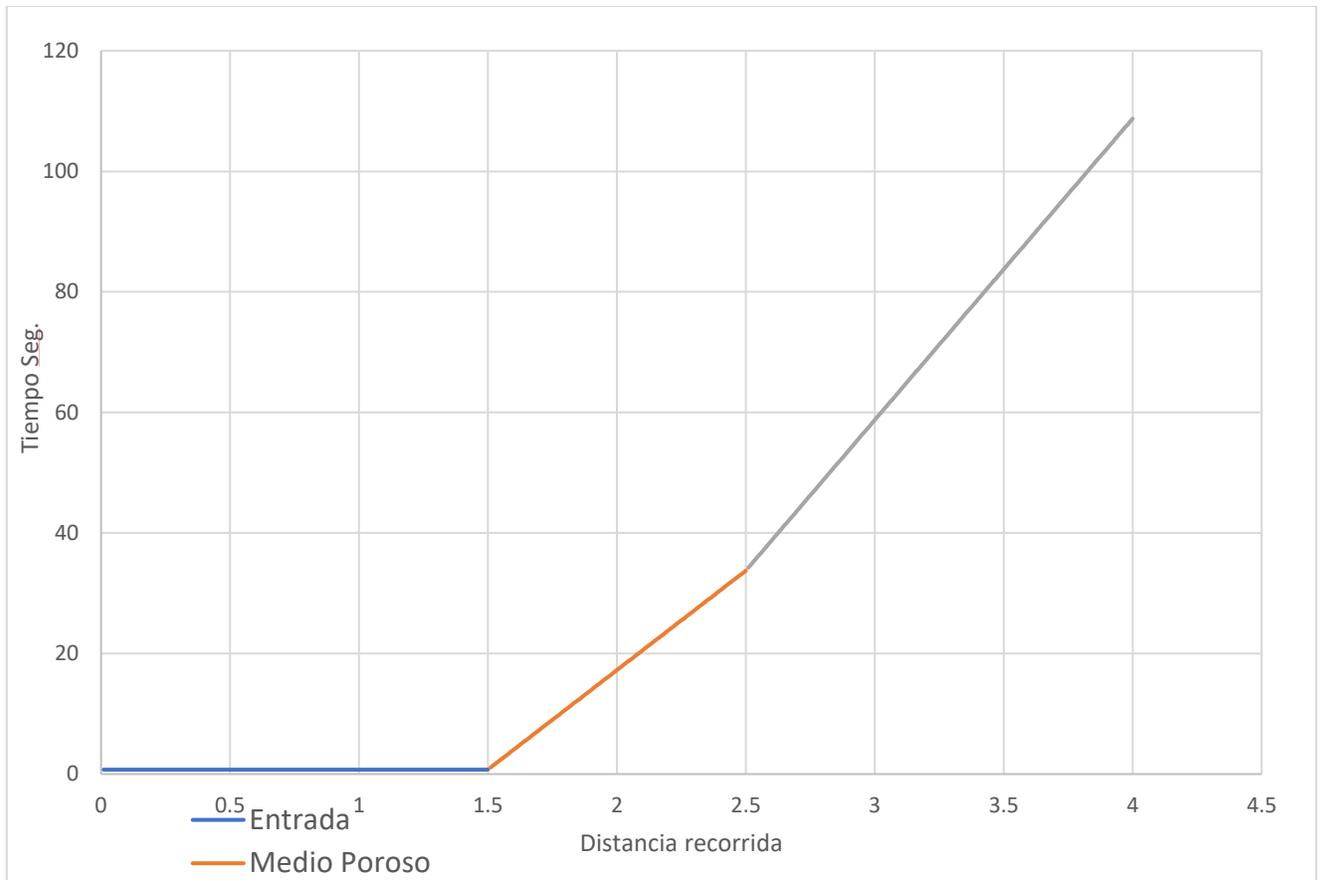


Figura 5.38 Gráfico de simulación en estado transitorio con parámetros establecidos

Con esta simulación en estado transitorio con las características de mejor retención encontradas en las simulaciones previas podemos concluir que dependiendo del tiempo que requiera la reacción química es la que dará la pauta para encontrar la mejor configuración de porosidad que requerimos, si por ejemplo deseamos que la retención se lleve a cabo por 120 segundos, por ejemplo, habría que aumentar la porosidad de al menos .85 o 0.9 y una velocidad de 2.5 m/s.

6 Conclusiones

El realizar un análisis mediante ANSYS FLUEN para el estudio sobre el flujo de contaminantes en un reactor absorbedor de lecho fijo nos muestra datos valiosos para tomar decisiones para estudios posteriores. La simulación computacional se centra en analizar diversos efectos físicos que afectan el comportamiento de movimiento del fluido mediante el medio poroso analizado. El análisis se llevó a cabo de diferente forma, comenzando con un parámetro inicial y terminando con una simulación en estado transitorio. En la tabla siguiente se muestran los resultados obtenidos después de cada simulación.

Tabla 6.1 Características de simulación en estado transitorio

	Tipo Simulación	Parámetros utilizados de retención	Resultados Obtenidos	Conclusión
Número de Simulación			Conclusión	
1	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> Espesor zona porosa 1m. Velocidad entrada 1 m/s Porosidad 0.6 	Primera simulación con parámetros iniciales según información investigada.	La simulación inicial fue planteada adecuadamente ya que no hubo problemas en la resolución por ANSYS FLUENT
2	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> Espesor zona porosa 0.5m. Velocidad entrada 1 m/s Porosidad 0.6 	Segunda simulación con cambio en el parámetro de espesor de espesor de zona porosa	Nos permite tener el primer comparativo con respecto a la primera simulación
3	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> Espesor zona porosa 1.5m. Velocidad entrada 1 m/s Porosidad 0.6 	Tercera simulación con espesor de 1.5m para hacer el comparativo entre las 3 simulaciones	Se puede observar que si cambia la retención según la zona porosa disminuyendo la velocidad considerablemente con aumento de la porosidad
4	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> Espesor zona porosa 1m. Velocidad entrada 1 m/s Porosidad 0.4 	Para la cuarta simulación se cambia la porosidad y ver cómo afecta esto	Se ve una ligera disminución de retención es decir la velocidad es mayor a una porosidad de 0.6 como al inicio.
5	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> Espesor zona porosa 1m. Velocidad entrada 1 m/s Porosidad 0.8 	Durante la quinta simulación se observa que la retención es mayor es decir la velocidad disminuye ampliamente	Se tiene una retención mayor en comparativa con la porosidad de 0.4 y 0.6 podemos concluir que con una porosidad alta se tiene una retención mayor.

MODELACIÓN NUMÉRICA DEL FLUJO DE CONTAMINANTES EN UN REACTOR ABSORBEDOR DE LECHO FIJO

6	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> • Espesor zona porosa 1.m. • Velocidad entrada 1.5 m/s <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.6 	Ahora cambiamos el parámetro de velocidad. Para ver cómo reacciona podemos observar una velocidad promedio 0.196 m/s recorriendo 0.1m	Además de ver un incremento en la velocidad del fluido dentro de la zona porosa también se observa que esta velocidad se mantiene constante por mayor tiempo
7	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> • Espesor zona porosa 1m. • Velocidad entrada 2 m/s <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.6 	El cambio de velocidad nos arroja un promedio de 0.126 m/s recorriendo 0.85m	Podemos concluir que al incrementar la velocidad se mantiene constante por mayor tiempo
8	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> • Espesor zona porosa 1m. • Velocidad entrada 1 m/s <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.4 	Velocidad media de 0.3m/s distancia recorrida 0.65m	Podemos observar cómo trabajan en conjunto el cambio de velocidad y porosidad
9	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> • Espesor zona porosa 1m. • Velocidad entrada 1 m/s <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.8 	Velocidad media 0.25 m/s y 0.85 m de distancia recorrida	Se observa como con un aumento de porosidad y velocidad se mantiene constante por mayor tiempo
10	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> • Espesor zona porosa 1m. • Velocidad entrada 1.5 m/s <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.4 	Velocidad media 0.47 m/s y 0.3m de distancia recorrida	Se observa el cambio de velocidad con una porosidad baja
11	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> • Espesor zona porosa 1m. • Velocidad entrada 1.5 m/s <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.8 	Velocidad media 0.37 m/s y 0.75m de distancia recorrida	Se empieza a observar que entre mayor sea la velocidad la distancia que recorre a una velocidad promedio es mayor
12	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> • Espesor zona porosa 1.5m. • Velocidad entrada 2 m/s <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.4 	Velocidad media 0.35 m/s y 0.75m de distancia recorrida	La velocidad de entrada es un punto determinante para que dentro del reactor se mantenga constante por un mayor tiempo.
13	Estacionaria	<ul style="list-style-type: none"> • Espesor zona porosa 1.5m. • Velocidad entrada 1 m/s <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.8 	Velocidad media 0.32 m/s y 0.85m de distancia recorrida	Se mantiene constante una velocidad por una distancia de tiempo más amplia
14	Transitoria	<ul style="list-style-type: none"> • Tiempo 1500seg <ul style="list-style-type: none"> • Porosidad 0.8 • Velocidad de entrada 2 m/s • Espesor zona porosa 1m 	Podemos observar el realizar el recorrido de una partícula en 110 segundos	Observamos el flujo de una partícula dentro del reactor con las características de retención óptimas encontradas.

- Simulación y métodos utilizados: Se menciona el uso de simulaciones numéricas para modelar el flujo dentro del reactor en sus diferentes zonas.
- Efectos identificados a partir del cambio de parámetros: Se muestran los cambios del flujo del fluido dentro del reactor cambiando parámetros para encontrar una configuración más eficiente. Como lo fue la porosidad de 0.8 con una velocidad de entrada de 2 m/s y un espesor de 0.5m, la cual con las simulaciones previas se concluyó que eran las mejores características para modelar el reactor en estado transitorio.

Con las primeras simulaciones se buscó obtener las mejores características de retención de velocidad dentro del medio poroso para así, realizar una simulación en estado transitorio que nos permita ver el desarrollo y flujo de una partícula dentro del reactor.

La simulación en estado transitorio permitió que se observara el movimiento de una partícula de inicio a fin dentro del reactor tardando en realizar el recorrido en 110 segundos, dependiendo del tiempo que requiera la reacción química es la que dará la pauta para encontrar la mejor configuración de porosidad que requerimos y que beneficie mejor a la reacción química.

Estos resultados dan apertura a realizar futuras investigaciones para desarrollar un modelo químico que sea benéfico para la reducción de emisiones asociando este modelo de retención con el tiempo requerido para que se lleve a cabo y así se retenga de una manera más eficaz el fluido contaminante dentro del reactor.

7 Trabajos futuros

Esta investigación aún puede abundar más, ya que se obtuvo solo un resultado físico de la retención propia que tiene el material poroso de las aminas. Pero se debe de continuar con las características químicas para observar volúmenes de masa del fluido que serán más importantes los puntos importantes son:

- % de retención de masa del fluido
- Fluido resultante después de la reacción química con la amina
- Propiedades y características del fluido resultante cómo % de CO₂ de la mezcla o la generación de una mezcla distinta.
- Realización de una simulación de la reacción química con las características de porosidad obtenidas.
- Realización experimental del reactor para validar datos simulados.

8 Fuentes Bibliográficas

Al-Masabi, F. H. (2010). Recovery of Carbon Dioxide from Flue Gases. Thesis of M. Sc in Petroleum Science & Engineering, United Arab Emirates University.

Asencio D. Anabel. (2017). Modelado de reactores de lecho fijo de baja relación de aspecto asistido por Fluidodinámica Computacional (CFD). Tesis Doctoral, Universidad Nacional de La Plata.

Birol, F., & Argiri, M. (1999). World Energy prospects to 2020. Energy, 905-918.

Berrones, J. A., & Quilligana, O. R. (2017). Simulación numérica de una rápida con fondo rugoso en el paquete computacional OpenFOAM. Tesis Quito: Escuela Politécnica Nacional.

Bruce R. Munson, et al. (2018). Fundamentos de Mecánica de fluidos. Ed. Limusa Wyley.

Chávez Velasco, J. A. (2012). Captura de CO₂ mediante absorción física usando líquidos iónicos. Tesis de maestría, Instituto Politécnico Nacional.

Chen, X. (2015). Finite Element Modeling and Simulation with Ansys Workbench. Taylor & Francis Group.

Cimbala, C. Y. (2014). Mecánica de Fluidos Fundamentos y Aplicaciones. usa: MC GRAWILL.

Coixtinica Mulato, A. (2015). LA GENERACIÓN DE ENERGÍA ELÉCTRICA POR FUENTES RENOVABLES Y SU USO EN MÉXICO. Tesis, Universidad Nacional Autónoma de México.

Contreras Vigil, A., García Santiago, G., & Icaza Hernández, B. (2013). Calidad del aire: una práctica de vida SEMARNAT.

Davison, J., & Thambimuthu, K. (2004). Technologies for capture of carbon dioxide. Proceedings of the 7th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, 1, 3-14.

Figuroa, J. D. (2008). Advances in CO₂ capture technology-The U.S: Department of Energy's Carbon Sequestration Program. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2, 9-20.

IPCC. (2007). Climate change 2007: Mitigation Contribution of Working Group III to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change.

Martínez Ataz, E., & Díaz de Mera Morales, Y. (2004). Contaminación atmosférica. Universidad de Castilla-La Mancha. ISBN: 8484273245, 9788484273240.

Martínez Berges, I. (2014). Simulación del proceso de captura de CO₂ mediante ciclos de carbonatación-calcinación de CaO integrado en plantas de producción de energía. Tesis Doctoral, Universidad de Zaragoza.

Martínez Quintana, M. A., Martín-del-Campo, C., & Cruz-Mendoza, G. (2020). A Power Optimization Model for the Long-term Planning Scenarios: Case Study of MEXICO'S Power System Decarbonization. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 99(4), 884-897.

Munson, B. R., et al. (2018). Fundamentos de Mecánica de Fluidos. Ed. Limusa Wyley.

Naredo, J. M. (1996). Sobre el origen, uso y el contenido del término sostenible. Cuadernos de Investigación Urbanística, (41), 7-18.

National Academy of Sciences Committee (2001). "The Science of Climate change, Climate Change Science: An Analysis of Some Key Questions". National Academy Press: Washington, DC.

Núñez Lopez, C. (1991). Estudio de la transferencia de Calor en Lecho fijo (Primera aproximación, caso Unidimensional). Tesis de Maestría, Universidad Autónoma de Nuevo León.

SEMARNAT, (2008), Manifestación de Impacto Ambiental "Planta generadora de energía Central Ciclo Combinado GEDESA 1". <http://sinat.semarnat.gob.mx/dgiraDocs/documentos/son/estudios/2008/26SO2008HD012.pdf>

ONU. (2002). Informe de la Cumbre Mundial sobre el Desarrollo Sostenible. A/CONF.199/20*. Nueva York. 184 pp.

Oreskes, N. (2004). "The Scientific Consensus on Climate Change," Science, 306, 1686.

Rafati, L., Ehrampoush, M., Rafati, A., Mokhtari, M., & Mahvi, A. (2017). Removal of ibuprofen from aqueous solution by functionalized strong nanoclay composite adsorbent: kinetic and equilibrium isotherm studies. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 15(3), 513-524.

Ríos, O. L. A., Ortiz, L. M., & Álvarez Del Castillo, X. (2005). Debates on sustainable development: towards a holistic view of reality. *Environment, Development and Sustainability*, 7(4), 501-508.

Secretaria de Energía. (2012). Balance Nacional de Energía 2012. [En línea] [Citado el: 2022 de septiembre de 26] <http://www.sener.gob.mx>

Valdovinos-García, E. M., et al. (2020). Techno-Economic Study of CO₂ Capture of a Thermoelectric Plant Using Microalgae (*Chlorella vulgaris*) for Production of Feedstock for Bioenergy. *Energies*, 13(2), 413.

Vasquez, J. (2003). MODELACIÓN NUMÉRICA EN HIDRÁULICA. Obtenido de GEOCITIES.COM: <http://www.oocities.org/hidropiura/ModelNum.pdf>

Wong, S., & Bioletti, R. (2002). Carbon Dioxide Separation Technologies. Alberta Research Council.