

Estudio fluidodinámico de un crudo pesado colombiano en función de la temperatura de entrada en un reactor vortex de cavitación hidrodinámica mediante dinámica de fluidos computacional

Rafael Ricardo Quiroga Higuera y Mauricio Andrés Rojas Nova

Trabajo de Grado para Optar el título de Ingeniero Mecánico

Director

Octavio Andrés González Estrada

Ingeniero Mecánico PhD

Codirector

Germán González Silva

Ingeniero Químico PhD

Codirector

Sergio Diaz Cardona

Ingeniero Mecánico

Universidad Industrial de Santander
Facultad de Ingeniería Fisicomecánicas
Escuela de Ingeniería mecánica
Bucaramanga

2020

Dedicatoria

A Dios por la vida, por darme la oportunidad de crecer como persona, por las bendiciones dadas y por poner en mi vida una maravillosa familia.

A mis padres Rafael Humberto Quiroga Castro y Martha Higuera Motta, por enseñarme los valores de la vida, su apoyo incondicional y formarme para ser lo que soy ahora.

A mi hermana por estar siempre a mi lado, por todo su apoyo y ser mi ejemplo a seguir.

A esa persona especial por impulsarme a seguir mis sueños y nunca rendirme.

A mis amigos que me acompañaron en este camino.

Rafael Ricardo Quiroga Higuera

Dedicatoria

*El presente trabajo va dedicado a mi familia, que me apoyó de manera inconmensurable
durante todo mi trayecto académico.*

Mauricio Andrés Rojas Nova

Agradecimientos

A la empresa Energy Rap Vortex Services S.A.S. y al ingeniero Sergio Diaz por su disposición hacia el ámbito investigativo y suministrar la información necesaria para la realización del presente proyecto.

A los profesores Octavio Andrés González Estrada y Germán González Silva, los cuales hicieron de guía y apoyo para culminar con todo satisfactoriamente.

Tabla de Contenido

Introducción	13
1. Objetivos	16
1.1 Objetivo General	16
1.2 Objetivos Específicos.....	16
2. Marco Teórico.....	17
2.1 Cavitación	17
2.2 Cavitación en el mejoramiento de crudos	17
3. Metodología	18
3.1 Evaluación experimental de la temperatura en la cavitación hidrodinámica.....	18
3.2 Caracterización del crudo de trabajo.....	21
3.3 Modelamiento del fenómeno	23
3.3.1 Independencia de la malla.....	27
3.3.2 Calidad de la malla.....	28
4. Resultados	29
4.1 Evaluación experimental de la temperatura en la cavitación hidrodinámica.....	29
4.2 Caracterización del crudo de trabajo.....	32
4.3 Modelamiento del fenómeno	36
4.3.1 Comportamiento de la fracción de vapor.....	41
5. Conclusiones	42
Referencias Bibliográficas	44
Apéndices.....	47

Lista de Tablas

Tabla 1 Configuración de las pruebas realizadas en el reactor HCR-Nano	21
Tabla 2 Condiciones para obtener las propiedades del crudo	23
Tabla 3 Condiciones de contorno de presión para cada simulación	26
Tabla 4 Parámetros de calidad de la malla.....	29
Tabla 5 Datos experimentales tomados del reactor HCR-Nano	30
Tabla 6 Valores de viscosidad prueba ASTM D445.....	32
Tabla 7 Datos del crudo en fase líquida tomados de Aspen HYSYS	34
Tabla 8 Datos del crudo en fase gaseosa tomados de Aspen HYSYS	34
Tabla 9 Comparación entre la viscosidad teórica y experimental.....	35

Lista de Figuras

Figura 1 Procedimiento para ver el efecto de la temperatura en el mejoramiento crudo.....	18
Figura 2 Diagrama del reactor vortex de cavitación hidrodinámica	19
Figura 3 Configuración en Aspen HYSYS para obtener las propiedades del crudo.	22
Figura 4 Volumen interno del reactor	24
Figura 5 Línea para obtener valores de velocidad	27
Figura 6 Independencia de malla	28
Figura 7 Diagrama de Pareto de efectos estandarizados	31
Figura 8 Gráfica de efectos principales para la viscosidad final.....	32
Figura 9 Destilación fraccionada del crudo	33
Figura 10 Curva de viscosidad teórica y experimental	35
Figura 11 Isosuperficies de fracción de vapor de 0,2 para diferentes temperaturas a) 140 [F] b) 180 [F] c) 250 [F] y d) 350 [F]	37
Figura 12 Cavitación en una tobera rectangular	38
Figura 13 Cavitación en el vórtice del tubo de aspiración de una turbina francis	39
Figura 14 Vectores velocidad en distintos planos a lo largo del reactor.....	40
Figura 15 Vectores de velocidad y contorno de presión en plano de unión de corrientes	41
Figura 16 Gráfica de volumen de vapor en función de la temperatura	42
Figura 17 <i>Component Lists</i> y <i>Fluid Packages</i>	47
Figura 18 Creación de la pestaña <i>Oil Manager</i>	48
Figura 19 Añadir un Assay en <i>Oil Manager</i>	48
Figura 20 Añadir las propiedades en <i>Bulk Properties</i>	49

Figura 21 Añadir los datos de la curva de destilación fraccionada.....	49
Figura 22 Añadir <i>Output Blend</i>	50
Figura 23 Montaje en la sección <i>Simulation</i>	51
Figura 24 Configuración Fluent Launcher	52
Figura 25 Configuración general de la simulación	52
Figura 26 Añadir propiedades del fluido	53
Figura 27 Selección modelo multifásico.....	53
Figura 28 Establecer fases.....	54
Figura 29 Configuración modelo de cavitación	55
Figura 30 Configuración modelo de turbulencia	55
Figura 31 Condición de frontera de entrada.....	56
Figura 32 Condición de frontera de salida	57
Figura 33 Condición de frontera pared	57
Figura 34 Condición de operación	58
Figura 35 Métodos de solución	59
Figura 36 Controles de la solución.....	60
Figura 37 Inicialización híbrida	60
Figura 38 Calculo de la solución.....	61
Figura 39 Mallado del reactor	62
Figura 40 Mallado en detalle en canales de ingreso al reactor	63
Figura 41 Mallado en detalle volumen tetraédrico y zona de contacto con malla estructurada	64
Figura 42 Mallado tetraédrico en detalle con refinamiento en las paredes	64

Figura 43 Plano de corte	65
Figura 44 Contorno de velocidad a 92 [F]	66
Figura 45 Contorno de presión a 92 [F]	67
Figura 46 Contorno de fracción de vapor a 92 [F]	68
Figura 47 Contorno de velocidad a 140 [F]	69
Figura 48 Contorno de presión a 140 [F]	70
Figura 49 Contorno de presión de zona de recirculación a 140 [F]	71
Figura 50 Contorno de fracción de vapor a 140 [F]	72
Figura 51 Contorno de velocidad a 180 [F]	73
Figura 52 Contorno de presión a 180 [F]	74
Figura 53 Contorno de fracción de vapor a 180 [F]	75
Figura 54 Contorno de velocidad a 250 [F]	76
Figura 55 Contorno de presión a 250 [F]	77
Figura 56 Contorno de fracción de vapor a 250 [F]	78
Figura 57 Contorno de velocidad a 350 [F]	79
Figura 58 Contorno de presión a 350 [F]	80
Figura 59 Contorno de fracción de vapor a 350 [F]	81
Figura 60 Isosuperficie de fracción de vapor de 0.5 a 350 [F]	82

Lista de Apéndices

Apéndice A. Configuración Aspen HYSYS	47
Apéndice B. Configuración ANSYS Fluent	52
Apéndice C. Detalles del mallado	62
Apéndice D. Gráficas de contorno para cada temperatura.....	65

Resumen

Título: Estudio fluidodinámico de un crudo pesado colombiano en función de la temperatura de entrada en un reactor vortex de cavitación hidrodinámica mediante dinámica de fluidos computacional*

Autor: Mauricio Andrés Rojas Nova, Rafael Ricardo Quiroga Higuera**

Palabras Clave: Dinámica de fluidos computacional, cavitación hidrodinámica, crudo pesado.

Descripción: El sector de los hidrocarburos ha mostrado interés en la cavitación hidrodinámica debido a su potencial para mejorar las características de crudos pesados, lo cual implica reducción de costos en el trasiego y refinamiento. En este trabajo se realizó el análisis fluidodinámico de un crudo pesado que pasaba por un reactor vortex de cavitación hidrodinámica, con el fin de ver el efecto de la temperatura en la reducción de la viscosidad y la fracción de vapor. Para llevar esto a cabo, primeramente, se desarrolló la parte experimental mediante un diseño de experimento, teniendo como factores la temperatura y la cantidad de donante de hidrógeno, y como variable de respuesta la viscosidad final del crudo. Luego de la experimentación, se continuó con la parte de simulación usando el programa ANSYS Fluent, donde se requirieron ciertas propiedades del crudo que se obtuvieron por ensayos de laboratorio y el software Aspen HYSYS. Los resultados del diseño de experimento se analizaron usando Minitab, donde se observó que la temperatura tenía un bajo efecto, respecto al donante de hidrógeno, en la viscosidad final. La simulación permitió establecer una relación entre la cantidad de vapor que se producía en el reactor a medida que se variaba la temperatura, además de que se obtuvieron los contornos de velocidad y presión del fluido, logrando un mayor entendimiento del fenómeno estudiado. Al comparar los datos experimentales con las simulaciones, se llegó a la conclusión de que las temperaturas manejadas en el diseño de experimento no eran lo suficientemente elevadas para producir una cantidad de vapor considerable, debido a esto, no se consiguió una alta reducción en la viscosidad. Con este proyecto se da inicio a una posible serie de investigaciones que involucren más ramas de la ingeniería para lograr un mayor espectro de estudio del proceso de cavitación hidrodinámica.

* Trabajo de Grado

** Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas. Escuela de Ingeniería Mecánica. Director: Octavio Andrés González Estrada, Ingeniero Mecánico PhD. Codirector: Germán González Silva, Ingeniero Químico PhD.

Abstract

Title: Fluid-dynamic study of a Colombian heavy crude oil based on the variation of the input temperature in a vortex reactor for hydrodynamic cavitation using computational fluid dynamics*

Author: Mauricio Andrés Rojas Nova, Rafael Ricardo Quiroga Higuera**

Key Words: Computational fluid dynamics, hydrodynamic cavitation, heavy crude oil.

Description: Oil and Gas sector has recently shown an interest in using hydrodynamic cavitation for oil enhancement, since this will reduce transportation and refinement costs. This project is a fluid-dynamic study of a Colombian heavy crude oil passing through a vortex reactor, in order to determine the effect of temperature on viscosity reduction and vapor generation. With the purpose of developing it, a design of experiment was carried out, establishing the temperature and the quantity of hydrogen donor as the factors, and the final viscosity of the crude oil as the response. Furthermore, some simulations were run using ANSYS fluent, and to achieve this, the required properties of the fluid were obtained by laboratory tests and software Aspen HYSYS. The results of experimentation were analyzed with Minitab, where it was observed that the final viscosity was less affected by the temperature than hydrogen donor. Moreover, it was developed a relation between the vapor generation and the temperature by the simulations. In addition, a deeper comprehension of the phenomenon was possible due to the contour plots of velocity and pressure. The experimental and simulated data were compared, and it was found that the temperatures configured in the design of experiments were not high enough to generate a significantly quantity of vapor, and consequently, the reduction of viscosity was minor. Finally, this project is expected to open a series of researches in different fields, with the aim of fully understand the process involved in hydrodynamic cavitation.

* Bachelor Thesis

** Facultad de Ingenierías Fisicomecánicas. Escuela de Ingeniería Mecánica. Director: Octavio Andrés González Estrada, Ingeniero Mecánico PhD. Codirector: Germán González Silva, Ingeniero Químico PhD.

Introducción

La cavitación es el fenómeno físico que ocurre en un fluido cuando se forman cavidades de vapor debido a una caída de presión, que puede ser representada por una disminución súbita del área transversal de flujo. Para saber el potencial que tiene un fluido para comenzar a cavitarse, existe el número adimensional de cavitación. Sin embargo, al momento de diseñar un experimento que involucre cavitación, se deben identificar diferentes parámetros a parte del número de cavitación, los cuales son, velocidad de flujo, temperatura del medio y geometría por donde pasa (Šarc, Stepišnik-Perdih, Petkovšek, & Dular, 2017).

Para simular la cavitación se usan modelos matemáticos que describen el cambio de fase y el comportamiento de la burbuja. Uno de los modelos más empleados es el método de Singhal, también conocido como *full cavitation model*, ya que describe la formación y transporte de la burbujas, las fluctuaciones turbulentas y la magnitud de gases no condensables (Singhal, Athavale, Li, & Jiang, 2003). Otro de los modelos más usados es el método de Schnerr-Sauer, el cual es una combinación entre la técnica VOF (*Volume of Fluid*) y un modelo que predice el crecimiento y colapso de la burbuja (Sauer & Schnerr, 2000).

Un trabajo realizado para evaluar la erosión en un objeto debido a la implosión de burbujas utilizando agua como fluido de prueba a diferentes temperaturas, encontró que es a 60 grados Celsius donde más erosión se generaba (Dular, 2015). Otro trabajo relacionado con la cavitación y la temperatura, observó el comportamiento de burbujas de agua a 95 grados Celsius con distintos parámetros de operación, encontrando una relación entre la dinámica de la temperatura y la dinámica de la burbuja (Petkovšek & Dular, 2013).

Por medio del uso de tubos venturi, debido a su simple geometría y fácil montaje experimental, se han realizado estudios experimentales y numéricos de la cavitación. Dentro de estos estudios se encuentra el efecto en el fluido de la variación del ángulo de convergencia del tubo venturi (Shi, Li, Nikrityuk, & Liu, 2019), la comparación de distintos modelos de turbulencia, como lo son los *Large-Eddy Simulation* (LES) y *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS) (Nouri, Mirsaedi, & Moghimi, 2010) y la comparación entre perfiles de velocidad y fluctuaciones de presión medidos experimentalmente con valores obtenidos de dinámica de fluidos computaciones (Cappa et al., 2014).

La industria de los hidrocarburos ha encontrado distintas aplicaciones para el uso de la cavitación dentro de los procesos de refinación de crudo, entre los cuales se destaca el recobro mejorado, la desemulsión del agua en crudos, reducción de la viscosidad del crudo, desulfurización y mejoramiento del crudo (Avvaru, Venkateswaran, Uppara, Iyengar, & Katti, 2018).

En cuanto al mejoramiento de crudos pesados y extra-pesados, la cavitación hidrodinámica y la acústica se ha vuelto últimamente un atractivo desde el punto de vista industrial, donde se han tocado varios aspectos como, reducción de viscosidad, aumento del grado API; reducción de asfaltenos, azufre, nitrógeno, metales; entre otros. A pesar de las investigaciones realizadas, aún falta trabajo para rentabilizar este método a nivel industrial (Sawarkar, 2019).

Por esta razón se han comenzado proyectos de diseño de reactores que permitan rentabilizar este proceso, sin embargo son varios los factores que se han de tener en cuenta, por lo que aún se encuentra este proceso en etapa de investigación (Gogate & Pandit, 2000).

Otro factor a tener en cuenta durante el proceso de cavitación hidrodinámica para el mejoramiento de crudos es la presencia de un donante de hidrógeno, el cual permite que los radicales liberados durante el proceso de implosión de las burbujas no se reorganicen en moléculas

más pesadas, evitando que el crudo se vuelva aún más viscoso (Askarian, Vatani, & Edalat, 2017). Generalmente los donantes de hidrógeno son crudos livianos, como la gasolina, por lo tanto una simple mezcla podría disminuir la viscosidad, sin embargo, lo que se busca en conjunto con la cavitación es que haya un proceso sinérgico que disminuya aún más la viscosidad (Yang, Zhang, Gu, Han, & Lu, 2013).

Energy Rap Vortex Services es una empresa líder en el sector Oil & Gas, que dentro de sus diversos campos de acción está el upgrading del crudo por medio de la cavitación hidrodinámica, esto hace que uno de sus objetivos sea el mejoramiento continuo de este proceso; y para lograrlo, ha realizado una alianza con la Universidad Industrial de Santander, donde se ha planteado un proyecto a macroescala con diversas escuelas para establecer las condiciones de operación óptimas del proceso, dentro del cual se encuentra el estudio del efecto de la temperatura en el proceso de cavitación hidrodinámica que es de lo que se basó el presente proyecto.

1. Objetivos

1.1 Objetivo General

Evaluar el comportamiento fluidodinámico de un crudo pesado colombiano en función de la temperatura de entrada en un reactor vortex de cavitación hidrodinámica mediante dinámica de fluidos computacional.

1.2 Objetivos Específicos

- Evaluar experimentalmente el efecto de la temperatura en la reducción de viscosidad del crudo, producto de la cavitación hidrodinámica en el reactor HCR-Nano, mediante el protocolo de pruebas de la empresa ERVS.
- Caracterizar las principales propiedades fisicoquímicas del crudo antes y después de ser sometido al proceso de cavitación hidrodinámica mediante los siguientes ensayos:
 - o Viscosidad mediante ASTM D445
 - o Gravedad API mediante ASTM D1298
 - o Análisis PVT para obtener composición
 - o Curva de destilación - estándar ASTM D86
- Modelar el fenómeno físico y fuerzas presentes que intervienen dentro del reactor basado en un modelo de turbulencia, reológico y cavitación mediante herramientas computacionales.
- Determinar a través de un análisis estadístico el comportamiento de la fracción de vapor en función de la temperatura de entrada del crudo.

2. Marco Teórico

2.1 Cavitación

La cavitación es un fenómeno que ocurre en flujos cuando en determinada zona la presión estática local cae por debajo de la presión de vapor, cuando esto sucede se forman cavidades de vapor llamadas burbujas. Estas burbujas viajan por el fluido hasta que lleguen a una zona de mayor presión que las haga implosionar, esto generalmente ocasiona efectos adversos en las estructuras ya que propicia la erosión.

Por ejemplo, si se tiene agua a 10 grados centígrados se formarán burbujas en aquellas zonas cuya presión caiga debajo de 1.23 [kPa], tal como puede suceder en las puntas de hélices (Çengel & Cimbala, 2006).

Muchas veces la frecuencia en la que ocurre la cavitación es grande tanto en el espacio como en el tiempo, por lo que la interacción individual de burbujas puede dar cabida a nuevas formas de observar y tratar el fenómeno presenciado, un claro ejemplo de esto es lo que se conoce como *cavitation cloud*, que se ve principalmente en *hydrofoils*. Por esta razón los flujos cavitantes pueden exhibir distintas formas (Brennen, 2013).

2.2 Cavitación en el mejoramiento de crudos

Es sabido que durante la implosión de las burbujas se libera energía que puede ocasionar efectos adversos, sin embargo, en varias investigaciones se ha usado esta liberación para efectos prácticos, uno de ellos es el mejoramiento de crudos pesados para reducción de viscosidad. Este proceso tiene como base el rompimiento de grandes cadenas de carbono que caracterizan este tipo de crudos.

Dentro de los tipos de cavitación para mejoramiento de crudo se destacan dos, la cavitación hidrodinámica y la cavitación por ultrasonido. El primer tipo se da cuando el fluido llega a una zona de baja presión que puede ser generada por un cambio en la geometría del reactor. El segundo tipo consiste en generar ondas de sonido de alta intensidad (entre 20 y 50 kHz), lo cual genera que las burbujas dentro del líquido oscilen debido a las fluctuaciones de presión hasta que implosionen debido a un aumento de su tamaño.

3. Metodología

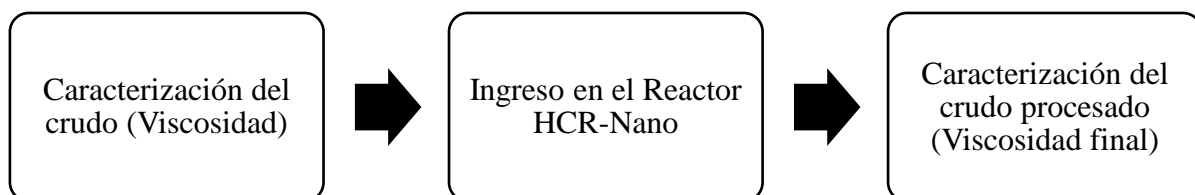
La metodología se dividió en dos partes principales, la primera que consta del proceso de experimentación en el reactor HCR-Nano, y la segunda que es el análisis mediante dinámica de fluidos computacional.

3.1 Evaluación experimental de la temperatura en la cavitación hidrodinámica

Para evaluar experimentalmente el efecto de la temperatura en la reducción de viscosidad del crudo de trabajo, producto de la cavitación hidrodinámica en el reactor HCR-Nano, se siguió el proceso representado en la Figura 1. La prueba utilizada para la medición de la viscosidad fue la ASTM D445.

Figura 1

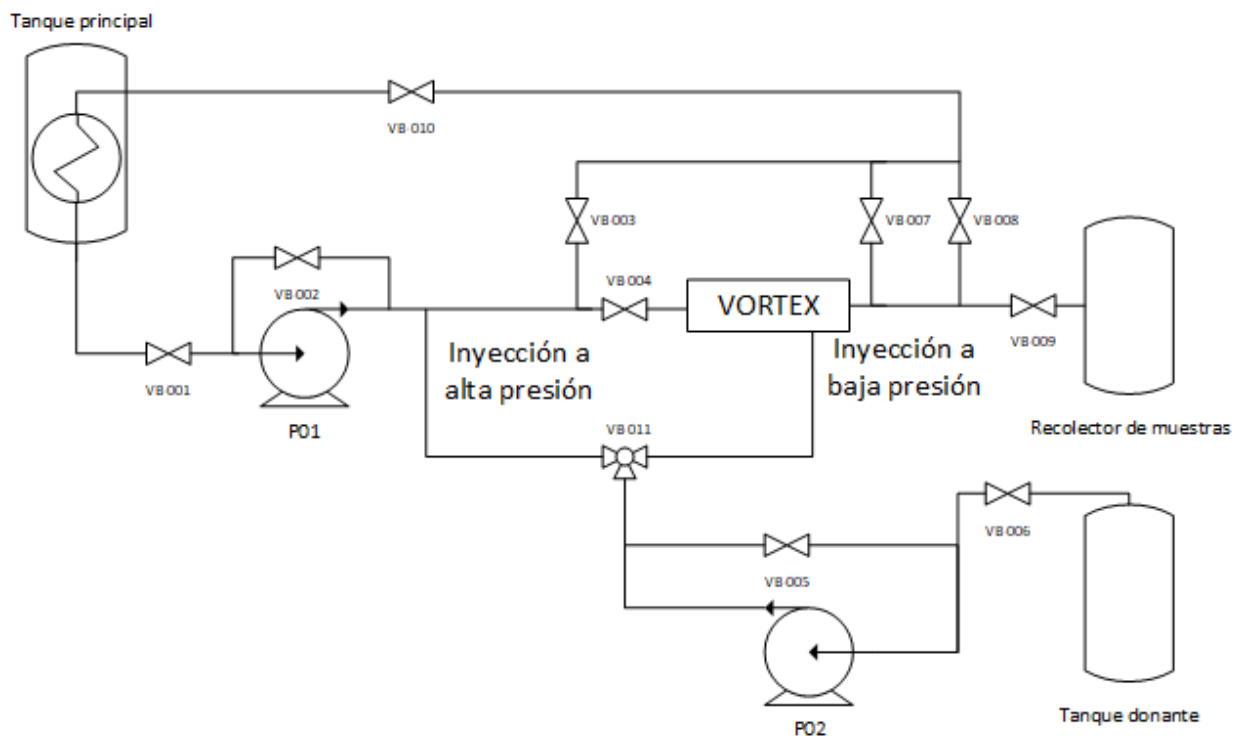
Procedimiento para ver el efecto de la temperatura en el mejoramiento crudo



Este reactor es propiedad de la empresa ERVS, por lo tanto, gracias al convenio de investigación y desarrollo con la Universidad Industrial de Santander se pudo hacer uso de sus datos. El montaje de todo el sistema se puede ver en la Figura 2.

Figura 2

Diagrama del reactor vortex de cavitación hidrodinámica



Del montaje mostrado en la Figura 2 se pueden destacar 5 subsistemas, el subsistema de bombeo, el subsistema de transporte, el subsistema de almacenamientos, el subsistema de control y automatización y por último el reactor HCR-Nano.

El subsistema de bombeo cuenta con dos bombas (P-01 y P-02), una de engranajes para el transporte del crudo y una de pistones para el transporte del donante de hidrógeno. La bomba de engranajes tiene un caudal permisible de 20 GPM y una presión de operación máxima de 600 psi.

La bomba de pistones tiene un caudal máximo de 5 GPM y una presión de operación máxima de 600 psi.

El subsistema de transporte se compone de 11 válvulas tipo bola (VB-001 hasta VB-010). Con estas válvulas se permite controlar la dirección del flujo, y dependiendo de su configuración se puede tener un sistema cerrado que haga recircular el crudo.

El subsistema de almacenamiento se divide en dos tanques de 10 galones cada uno, uno para el almacenamiento del crudo y otro para el almacenamiento del donante de hidrógeno y el tanque recolector de muestras. El tanque del almacenamiento del crudo cuenta con una resistencia que permite llevar la temperatura del crudo hasta 180 °F.

El subsistema de control y automatización permite medir el flujo, la presión y la temperatura por medio de un PLC.

La configuración de las pruebas realizadas se puede visualizar en la Tabla 1. Se optó por hacer un diseño de experimento de 2 factores y 3 niveles. Los factores evaluados fueron la temperatura y el porcentaje de donante de hidrógeno. Cabe resaltar que en todos los casos las pruebas se realizaron con un caudal de crudo de 12 GPM, y el caudal del diluyente era un porcentaje de este. La viscosidad de referencia del crudo antes de la prueba fue de 740 cP.

Tabla 1*Configuración de las pruebas realizadas en el reactor HCR-Nano*

Muestra	Porcentaje donante	Temperatura [°F]	Presión entrada [psi]	Presión salida [psi]
1	2	92	360	14
2	2	140	335	14
3	2	180	325	14
4	3	94	350	14
5	3	141	320	14
6	3	180	295	14
7	4	93	330	14
8	4	141	310	14
9	4	180	290	14

3.2 Caracterización del crudo de trabajo

La caracterización consistió en conocer la presión de vapor, la densidad y viscosidad del crudo de trabajo en fase líquida y gaseosa a las temperaturas que se evaluarán en la simulación de CFD. Estas propiedades se necesitaron para correr la simulación en ANSYS Fluent. Para reducir los costos del proyecto se optó por utilizar el software Aspen HYSYS para hallarlas, ya que ha demostrado ser una herramienta muy útil en el sector Oil & Gas.

Para simular la corriente del crudo en Aspen HYSYS se necesitaron con anterioridad los siguientes ensayos.

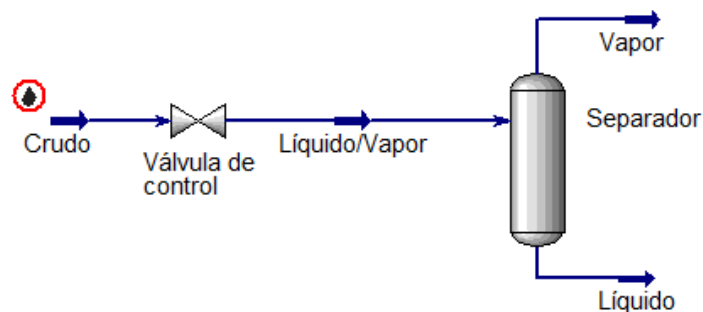
- Viscosidad mediante ASTM D445
- Gravedad API mediante ASTM D1298
- Curva de destilación mediante ASTM D86
- Análisis PVT

Una vez se obtuvieron los datos de los ensayos, se ingresaron a la sección *Oil Manager* de Aspen HYSYS como si fuesen un Assay. Luego, para determinar las propiedades a las temperaturas y presiones deseadas, se debe crear una corriente en la sección *Simulation*. Para observar más detalladamente el proceso realizado en Aspen HYSYS ir al Apéndice A.

Además, como en la simulación se tienen dos fases, se debieron calcular las propiedades tanto del líquido como del vapor, por ende, se realizó la configuración mostrada en la Figura 3. La cual consistió, primero, en el uso de una válvula que estrangula el fluido generando una caída de presión isotérmicamente, y segundo, en la implementación de un *flash drum* o separador, para obtener las propiedades del líquido y del vapor.

Figura 3

Configuración en Aspen HYSYS para obtener las propiedades del crudo.



Se trabajaron cinco condiciones diferentes para la corriente del crudo en la sección *Simulation*, las cuales se muestran en la Tabla 2. Las tres primeras condiciones corresponden a los valores utilizados en la parte experimental cuando se trabajó con 2% de donante de hidrógeno. Se añadieron dos valores de temperatura mayores para ver cómo sería el comportamiento de la fracción de vapor en la simulación. Como la presión disminuía al aumentar la temperatura del fluido debido a que el fluido que se bombeaba se volvía menos denso, se hizo una correlación de carácter potencial para encontrar las presiones en las otras 2 temperaturas.

Tabla 2

Condiciones para obtener las propiedades del crudo

Condición	Temperatura [°F]	Presión [psi]
1	92	360
2	140	335
3	180	325
4	250	308.6
5	350	293

3.3 Modelamiento del fenómeno

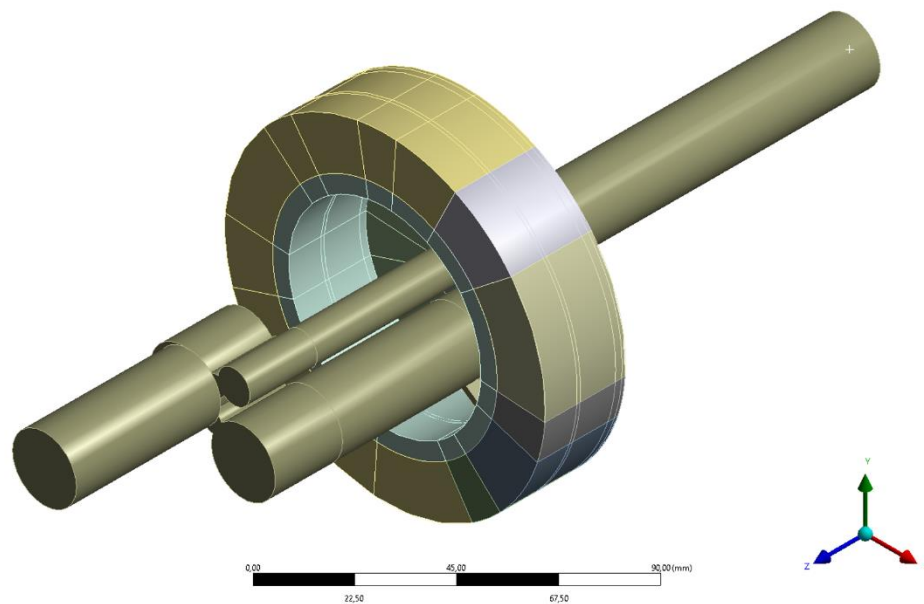
En el modelamiento del fenómeno se muestran los procedimientos necesarios para correr adecuadamente la simulación en el software ANSYS Fluent, dentro de estos parámetros se encuentra el modelo de flujo multifásico, de cavitación y turbulencia entre otros. El proceso de selección de estos modelos se llevó a cabo mediante una revisión bibliográfica, la cual tiene de base un estudio experimental sobre cavitación en inyectores (Nurick, 1976). Gracias a este estudio varios autores pudieron comparar sus simulaciones sobre flujo cavitante (Moll, Manuele,

Coussirat, Guardo, & Fontanals, 2011)(Moll et al., 2012)(Salvador & Frankel, 2004)(Darbandi & Sadeghi, 2009).

La geometría utilizada se obtuvo mediante SpaceClaim, el cual permite extraer el volumen de control de un sólido, en este caso se extrajo el volumen del reactor HCR-Nano cuyo CAD fue suministrado por la empresa ERVS. El volumen de control se puede ver representada en la Figura 4.

Figura 4

Volumen interno del reactor



En la Figura 4 se puede observar que el volumen se dividió en varias partes, esto se hizo con el fin de lograr la mejor calidad de malla posible, además de permitir en ciertas zonas mallas estructuradas y otras no estructuradas.

La simulación se realizó en 3D, ya que se tienen en cuenta efectos de vorticidad. Además, el flujo es a través de una geometría no simétrica, por lo que no se pudo utilizar ninguna condición de este tipo para reducir el costo computacional.

El modelo de turbulencia seleccionado fue el *Realizable k-epsilon*, ya que es el de mejor rendimiento numérico si se compara al *k-epsilon* estándar, además, su costo computacional no es igual de elevado a un modelo LES.

Debido a que los efectos viscosos cerca a la pared no son muy relevantes, se emplearon *Stándar Wall Functions* para disminuir el costo computacional.

Debido al alto gradiente de presión impuesto en las condiciones de frontera y por el flujo dentro de la geometría, se tiene un flujo donde ocurre cavitación. por lo tanto, se debió escoger un modelo de flujo multifásico. Se escogió el modelo Mixture, ya que es el recomendado para el tipo de flujo donde hay una interacción líquido-gas donde el gas está en forma de burbujas. Asimismo, presenta un menor costo computacional que el modelo Euleriano, que también funciona para este tipo de flujos.

El modelo de cavitación que se utilizó es el Schnerr-Sauer, ya que es numéricamente más robusto y rápido en converger que los demás. Además, con este modelo no se tuvieron en cuenta el efecto de gases no-condensables disueltos en el líquido en la entrada.

Se impusieron dos condiciones de frontera de presión, una a la entrada del flujo y otra a la salida de este. Además, las paredes se trataron como *Wall*, es decir, tienen la condición de no deslizamiento y de flujo nulo a través de estas. Para obtener más detalles del proceso realizado para la configuración del modelo en ANSYS FLUENT ir al Apéndice B. Los valores de presión tomados para cada simulación se muestran en la Tabla 3. Cada simulación corresponde a una temperatura, esto se puede revisar en la Tabla 2.

Tabla 3*Condiciones de contorno de presión para cada simulación*

Simulación	Presión entrada [psi]	Presión Salida [psi]
1	360	14
2	335	14
3	325	14
4	308.6	14
5	293	14

Se usó una simulación estacionaria ya que la importancia de este trabajo no está en el estudio de la dinámica de la burbuja sino en el comportamiento general del fluido al momento de cavitarse. Además, al ser una simulación de flujo multifásico y en régimen subsónico, se emplea un *pressure-based solver*.

El algoritmo empleado en el método de solución empleado es el *Coupled*, ya que en cuestión de exactitud es superior a los métodos *Segregated*.

Para flujos multifásico donde ocurre el fenómeno de cavitación el esquema de discretización de presión recomendado es el PRESTO, por lo que este fue el empleado.

El esquema de discretización espacial empleado fue el QUICK, ya que presenta un mejor rendimiento en flujos rotacionales en comparación al esquema de segundo orden.

Para evaluar los resultados de la simulación se tuvieron en cuenta varios lineamientos relacionados con la validación y verificación de simulaciones de dinámica de fluidos computacional (Freitas, 2002).

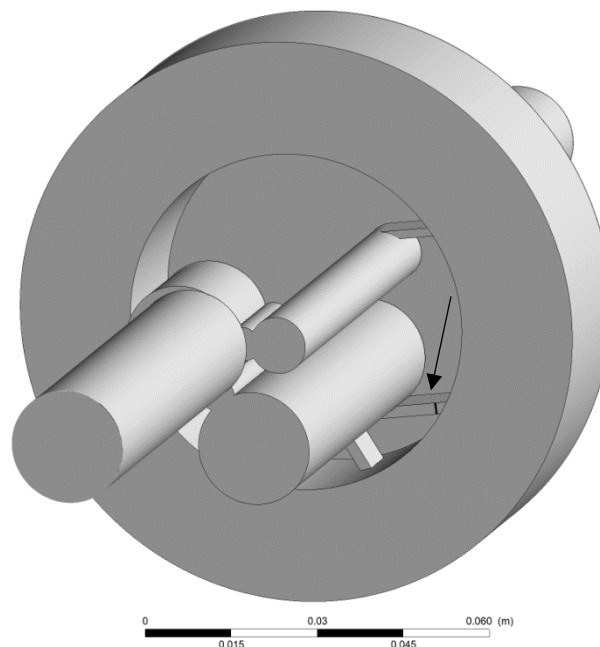
- Los métodos deben ser de al menos de segundo orden en el espacio.
- La independencia de malla debe ser realizada.
- Se deben establecer parámetros de convergencia apropiadamente.
- Las condiciones de frontera deben ser totalmente explicadas.
- Un código existente debe ser completamente citado.
- Resultados experimentales deben ser usados para validar la solución.

3.3.1 Independencia de la malla

Para tener certeza de que la malla no influía en el resultado y así disminuir el error de discretización, se realizó un estudio de independencia de malla. Para lograrlo se obtuvieron los valores de velocidad en la línea S, interpolando la solución en 100 puntos, como se muestra en la Figura 5.

Figura 5

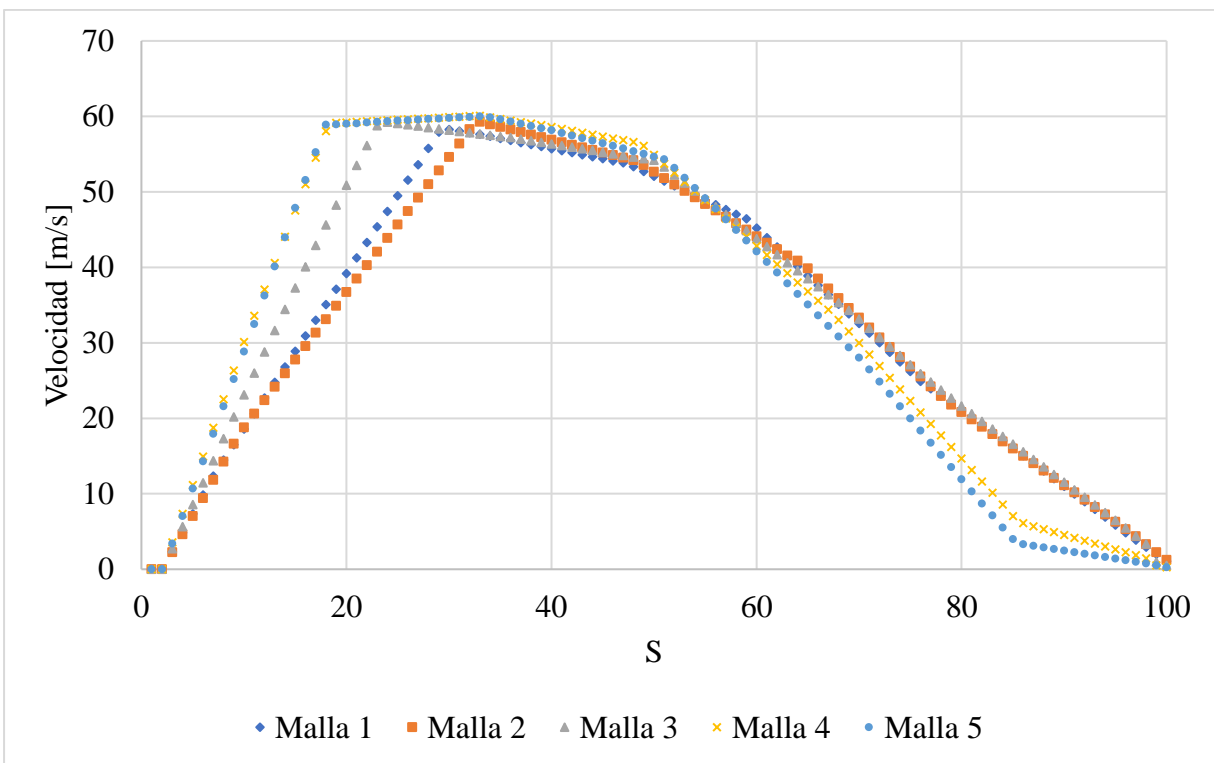
Línea para obtener valores de velocidad



Se evaluaron 5 mallas entre 1179758 y 8474211 elementos. Como se observa en la Figura 6, a medida que se refina la malla se van obteniendo valores diferentes de velocidad en la línea S y el comportamiento de la curva también cambia. Sin embargo, entre la malla 4 y 5 ya no se observa una diferencia considerable, por lo tanto, la malla escogida fue la 4, la cual cuenta con 6'764.078 elementos

Figura 6

Independencia de malla



3.3.2 Calidad de la malla

Una vez se definió la malla para realizar las simulaciones se evaluaron tres parámetros de calidad, *Aspect Ratio*, *Skewness* y *Orthogonal quality*. Los valores mínimos, máximos y promedios de estos se encuentran en la Tabla 4. Como se puede observar, la malla cuenta con una buena calidad en los tres parámetros. En el Apéndice C se muestra con más detalle la malla final.

Tabla 4*Parámetros de calidad de la malla*

Métrica	Valor Mínimo	Valor Máximo	Valor promedio
<i>Aspect Ratio</i>	1.002	29.267	2.661
<i>Skewness</i>	8.832E-9	0.799	0.166
<i>Orthogonal quality</i>	0.2	1	0.857

4. Resultados

4.1 Evaluación experimental de la temperatura en la cavitación hidrodinámica

Los datos registrados en la evaluación experimental se muestran en la Tabla 5. Los cuales corresponden al diseño de experimento planteado cuya variable de respuesta es la viscosidad del crudo una vez pasa por el proceso de cavitación hidrodinámica. Se puede observar si existe una disminución en la viscosidad del crudo al aumentar la temperatura, sin embargo, esta reducción no es tan grande en comparación a un aumento en el porcentaje de donante inyectado.

Tabla 5*Datos experimentales tomados del reactor HCR-Nano*

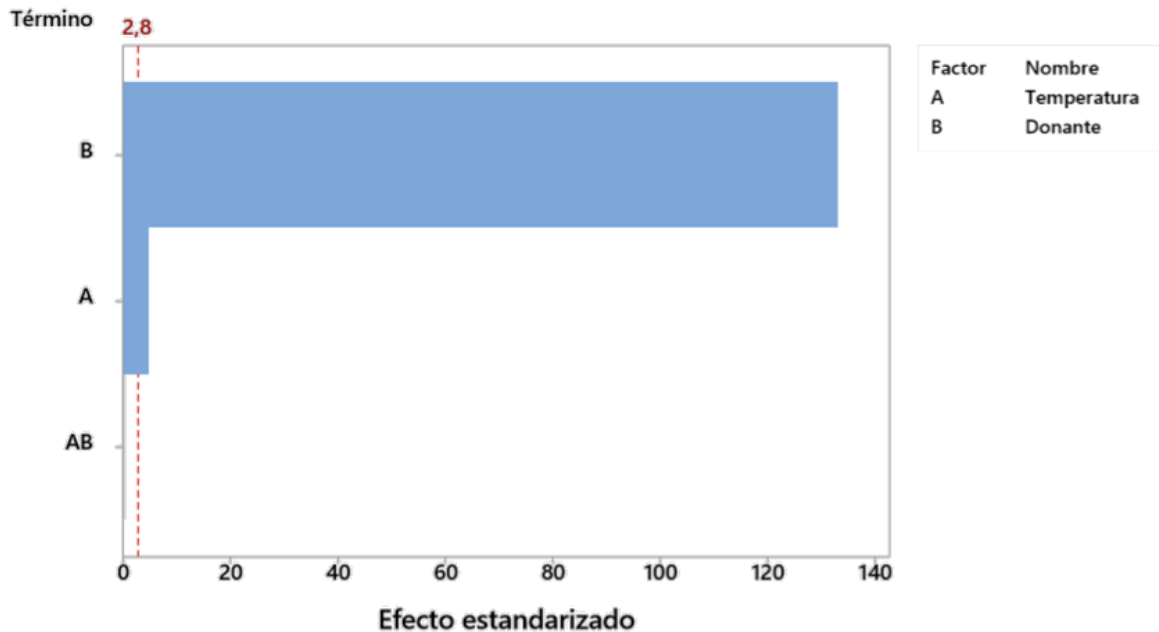
Muestr a	Porcentaje donante	Temperatura [°F]	Viscosidad inicial [cP]	Viscosidad final [cP]	Reducción de viscosidad
1	2	92	740	710	4.054
2	2	140	740	702	5.135
3	2	180	740	692	6.486
4	3	94	740	464	37.297
5	3	141	740	463	37.432
6	3	180	740	452	38.919
7	4	93	740	342	53.784
8	4	141	740	335	54.730
9	4	180	740	331	55.270

Para ver más claramente los efectos individuales de cada variable en la viscosidad final, se ingresaron los datos en MINITAB y se hizo un DOE (*Design of experiment*). La primera gráfica generada fue un Diagrama de Pareto de efectos estandarizados, como se puede ver en la Figura 7. Este gráfico permitió determinar la magnitud y la importancia de los efectos, en este caso la temperatura y el porcentaje de donante de hidrógeno.

Las barras que crucen la línea punteada con valor de 2,8 se pueden considerar estadísticamente significativas. En este caso tanto la temperatura como el donante la cruzaron, sin embargo, el donante lo hizo a una mayor magnitud. Esto significa que el donante tiene una mayor significancia estadística que la temperatura en el nivel de 0.05.

Figura 7

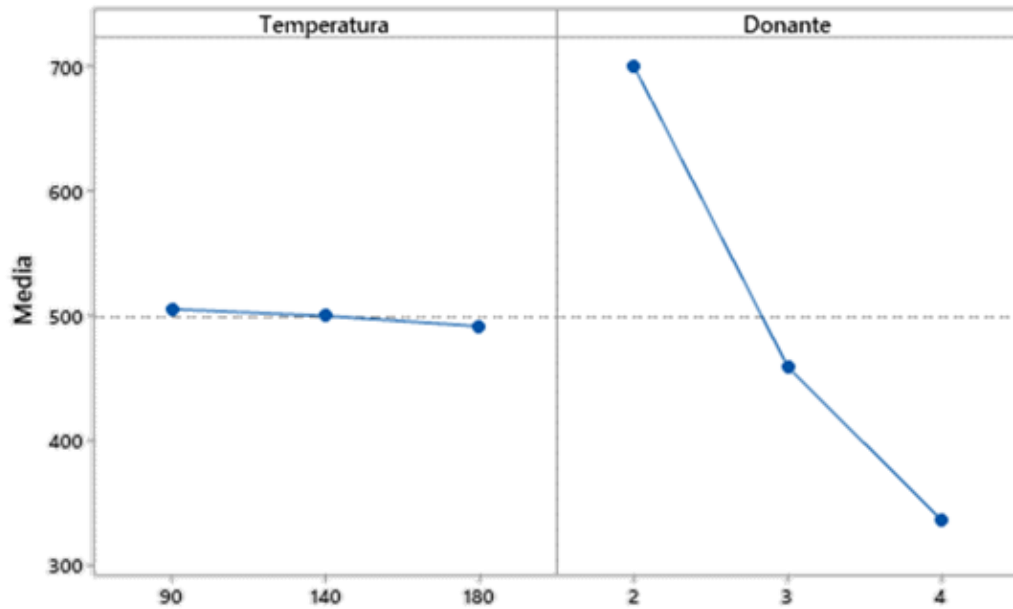
Diagrama de Pareto de efectos estandarizados



La segunda gráfica que se generó fue la de efectos principales, como se puede ver en la Figura 8. Esta permitió inferir que el efecto del donante es muy relevante en la viscosidad final. Contrariamente, la temperatura presenta un efecto muy bajo, llegando a ser en la gráfica casi una línea horizontal (efecto nulo). Sin embargo, es importante remarcar el hecho de que la temperatura sí influye, a pesar de que no lo haga en mayor medida. Por medio de las simulaciones se pretende explicar este comportamiento, ya que existe la posibilidad que las temperaturas empleadas en las pruebas no sean lo suficientemente altas para lograr un efecto significativo.

Figura 8

Gráfica de efectos principales para la viscosidad final



4.2 Caracterización del crudo de trabajo

Para evaluar la viscosidad del crudo se realizó la prueba ASTM D445, de la cual se obtuvieron tres valores de viscosidad para tres temperaturas diferentes. En la Tabla 6 se pueden observar estos resultados.

Tabla 6

Valores de viscosidad prueba ASTM D445

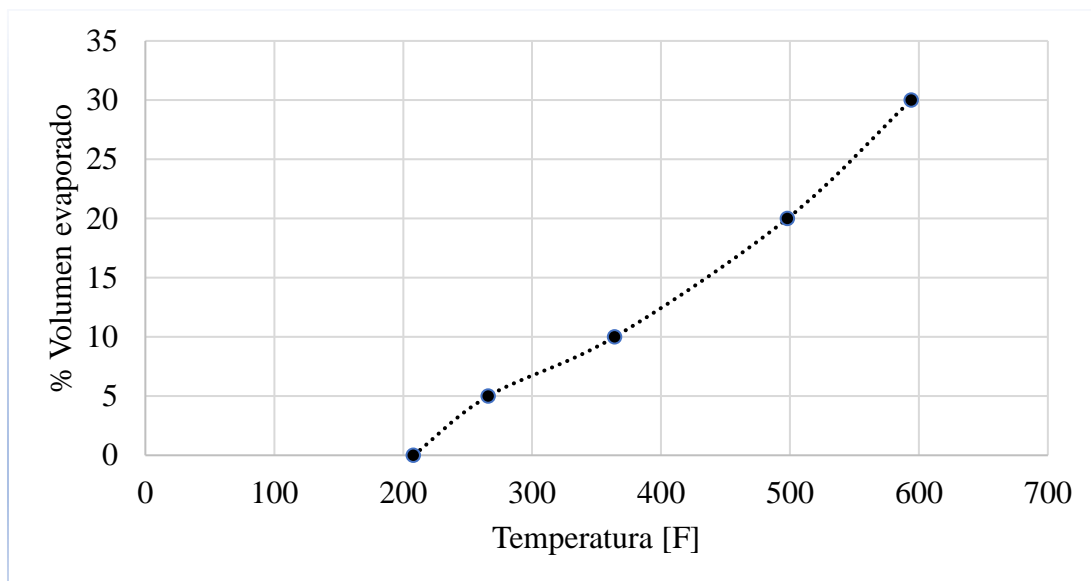
Temperatura [°F]	Viscosidad [cP]
100	284.7
122	127.5
210	15.6

En la prueba ASTM D1298 se midió la gravedad API a 60 °F, obteniendo un valor de 20.6. Este valor nos indica que se trata de un crudo pesado.

Del ensayo ASTM D86 se sacó la curva de destilación, la cual se obtiene al calentar el crudo mientras se va midiendo el volumen del líquido evaporado y su respectiva temperatura. Los datos se pueden ver reflejados en la Figura 9, los cuales muestran un comportamiento directamente proporcional entre la temperatura y la cantidad de líquido evaporado. El punto inicial de ebullición comienza en 208 °F, y el punto final registrado es a 594 °F con un 30% de líquido evaporado.

Figura 9

Destilación fraccionada del crudo



Los datos obtenidos de la simulación de la corriente del crudo en Aspen HYSYS se presentan en la Tabla 7 y Tabla 8. En la Tabla 7 se presentan los datos de temperatura, viscosidad, densidad y presión de vapor del líquido. Como se observa, el comportamiento de la viscosidad y densidad concuerda con el comportamiento teórico de un líquido a medida que aumenta la temperatura, lo que sugiere que la simulación es correcta.

Tabla 7*Datos del crudo en fase líquida tomados de Aspen HYSYS*

Líquido			
Temperatura [F]	Viscosidad [cP]	Densidad [API]	Pesión de Vapor [psia]
92	383.8	22.72	0.2988
140	73.26	25.52	0.8325
180	27.48	28.19	1.713
250	9.272	33.01	4.88
350	2.359	41.05	15.38

Los datos de temperatura, viscosidad, densidad del vapor del crudo se presentan en la Tabla 8. El comportamiento de la viscosidad y densidad concuerda con el comportamiento teórico de un gas a medida que aumenta la temperatura, lo que sugiere que la simulación es correcta.

Tabla 8*Datos del crudo en fase gaseosa tomados de Aspen HYSYS*

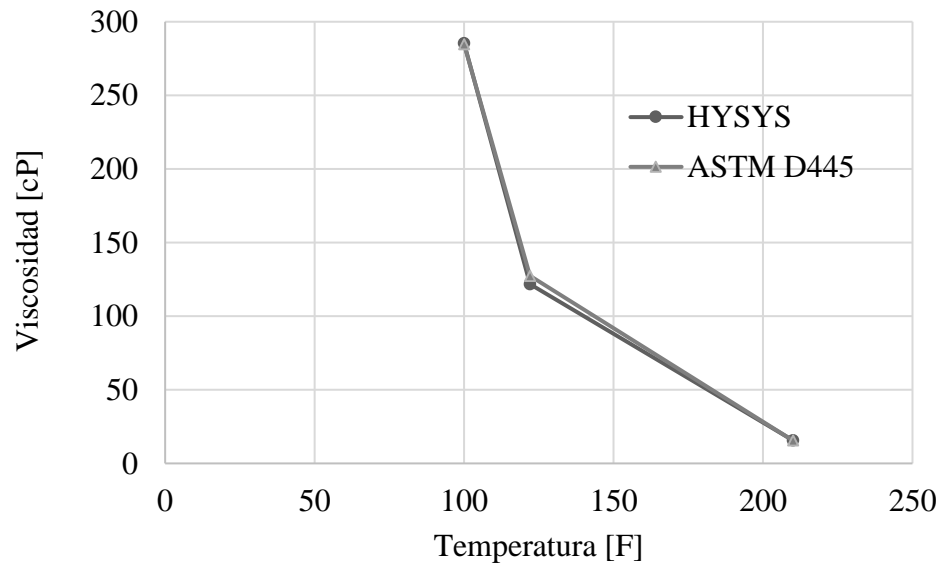
Vapor		
Temperatura [F]	Viscosidad [cP]	Densidad [API]
92	6.855E-03	1.535E+06
140	7.430E-03	6.985E+05
180	7.959E-03	3.438E+05
250	8.839E-03	1.353E+05
350	1.015E-02	4.300E+04

Para corroborar la validez de los datos obtenidos de Aspen HYSYS se realizó la gráfica de la Figura 10, donde se observa el comportamiento de la viscosidad en función de la temperatura. En esta gráfica se añade la curva obtenida experimentalmente mediante los datos del ensayo ASTM

D445. Como se puede ver, las curvas presentan el mismo comportamiento y toman valores similares.

Figura 10

Curva de viscosidad teórica y experimental



Para tener una mayor seguridad en los datos obtenidos mediante Aspen HYSYS se realizó la Tabla 9, donde se muestra el error entre la viscosidad teórica y experimental. El error máximo calculado fue de 4,47%, lo cual indica que la caracterización fue exitosa.

Tabla 9

Comparación entre la viscosidad teórica y experimental

Temperatura [F]	Viscosidad teórica [cP]	Viscosidad experimental [cP]	%Error
100	285.5	284.7	0.28099
122	121.8	127.5	4.47058
210	15.7	15.6	0.38461

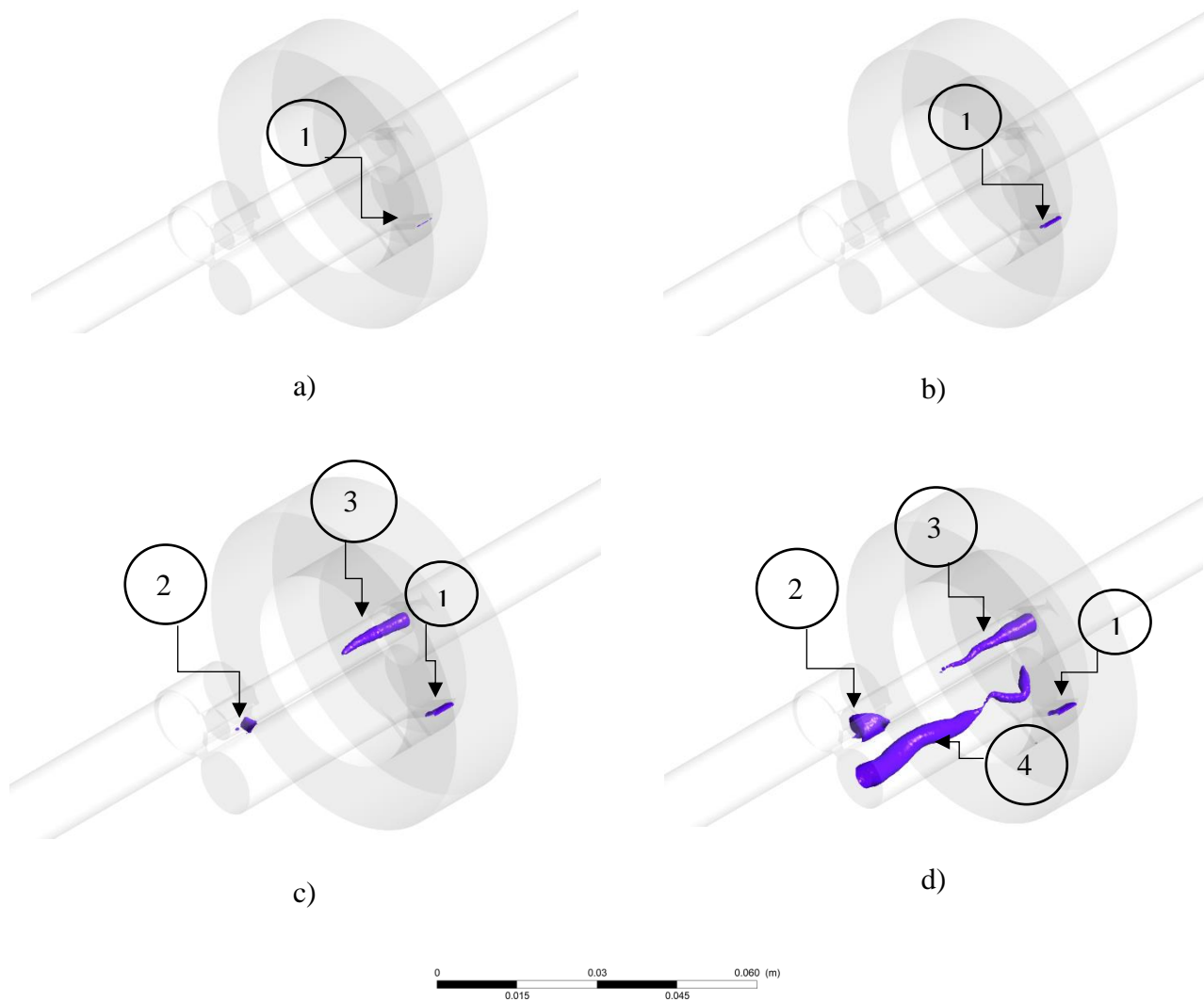
4.3 Modelamiento del fenómeno

La principal variable de interés de la simulación era la fracción de vapor, ya que dependiendo de esta se puede analizar el efecto de la cavitación en la reducción de viscosidad del crudo. En la Figura 11 se observan las isosuperficies de fracción de vapor para un valor de 0.2 en las distintas temperaturas de análisis, a excepción de 92 [F], ya que ahí no se generó nada de vapor. Como se puede evidenciar, existe un aumento de la fracción de vapor cuando se aumenta la temperatura, esto se debe a que la viscosidad del líquido va disminuyendo, y por ende se presentan aumentos en su velocidad dentro del reactor, lo cual genera mayores caídas de presión. Dependiendo de la temperatura el vapor se puede generar en cuatro zonas distintas, cada una de estas zonas se ha señalado con un número.

La zona 1 corresponde a un tipo de cavitación que ocurre cuando hay una reducción súbita del área transversal y un cambio en la dirección de flujo, lo cual puede generar una separación de la capa límite de las paredes de la reducción y crear lo que se conoce como vena contracta. La cavidad que se crea entre las paredes y la vena contracta es llamada zona de recirculación. Además, como existe una aceleración del fluido, hay una caída de presión, y como la presión estática en esa zona es menor a la presión de vapor, se genera cavitación (Payri, García, Salvador, & Gimeno, 2005).

Figura 11

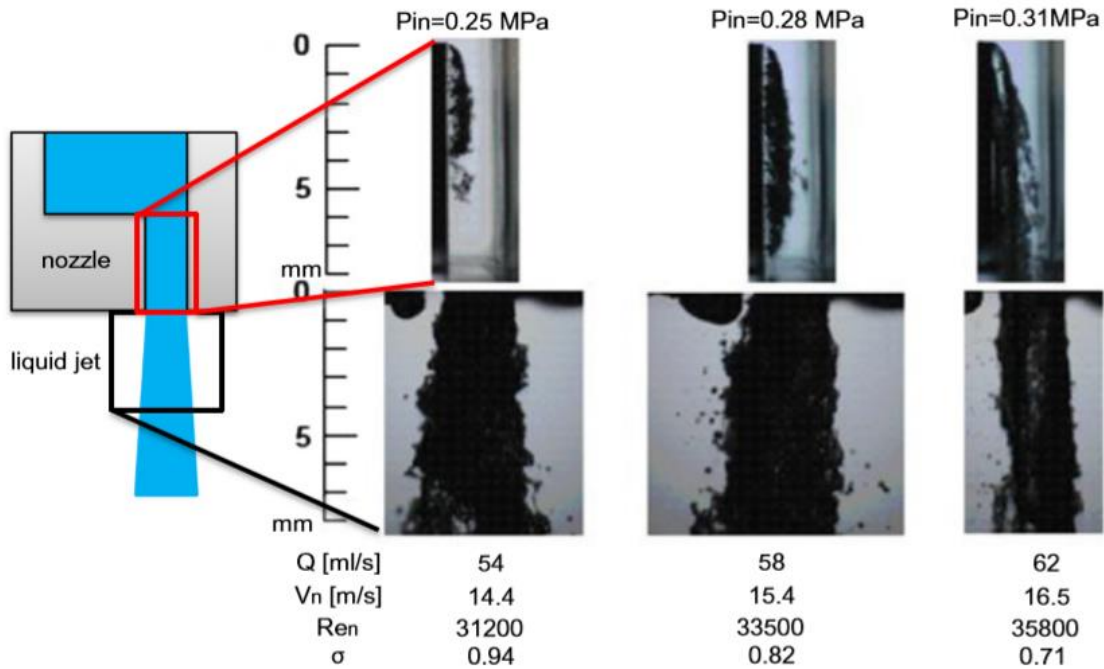
Isosuperficies de fracción de vapor de 0,2 para diferentes temperaturas a) 140 [F] b) 180 [F] c) 250 [F] y d) 350 [F]



Este fenómeno se puede apreciar en la Figura 12 en un experimento realizado en la tobera de un inyector, el color negro representa la zona donde hay burbujas. En la zona 2 se genera un tipo de cavitación similar, ya que el flujo es desviado bruscamente.

Figura 12

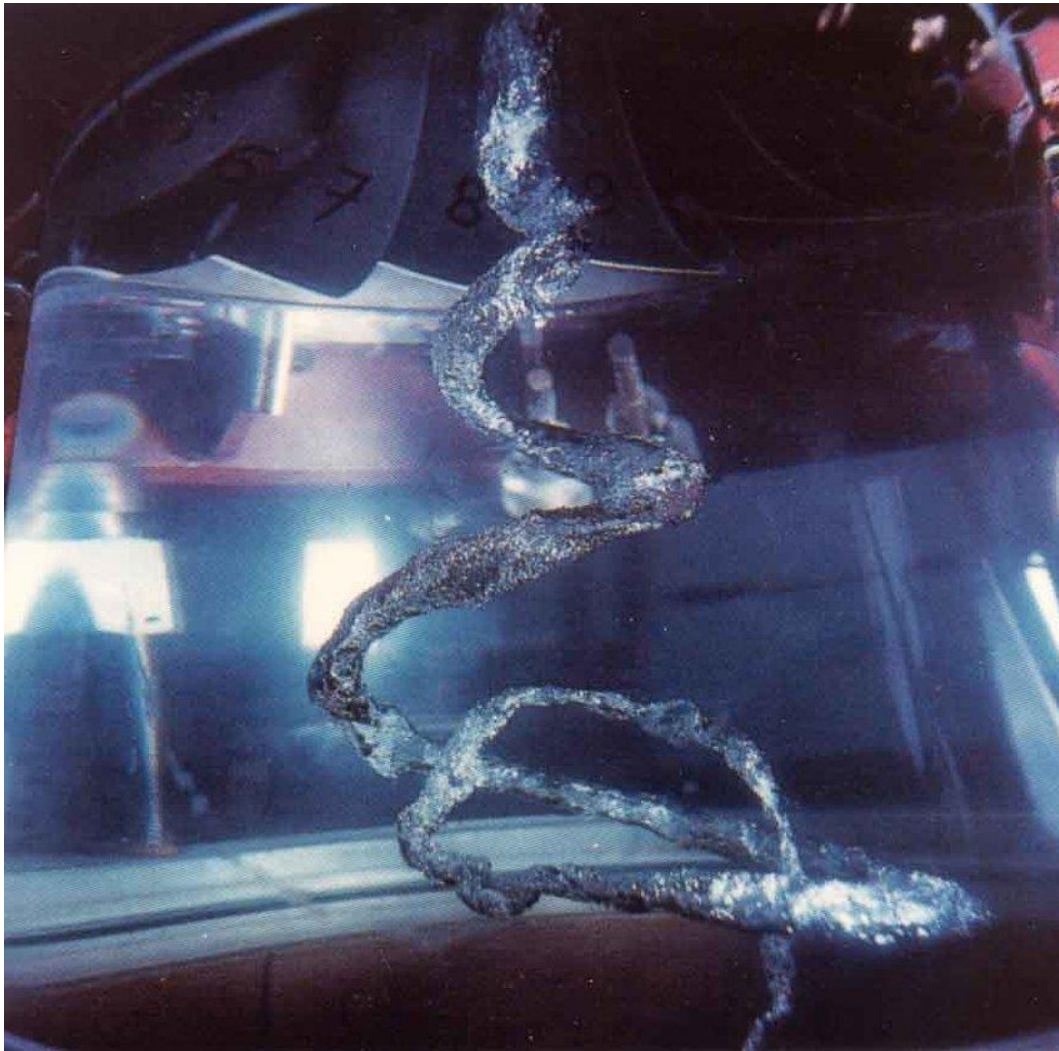
Cavitación en una tobera rectangular. Adaptado de (Sou, Biçer, & Tomiyama, 2014)



La zona 3 y 4 corresponde a cavitación generada por un vórtice. El vapor se genera en el centro del vórtice, ya que es ahí donde se encuentra la zona de presión mínima. Esta zona es creada debido a los efectos de la fuerza centrífuga creada por la rotación del fluido. Este fenómeno ocurre principalmente en los tubos de aspiración de las turbinas Francis, como se observa en la Figura 13.

Figura 13

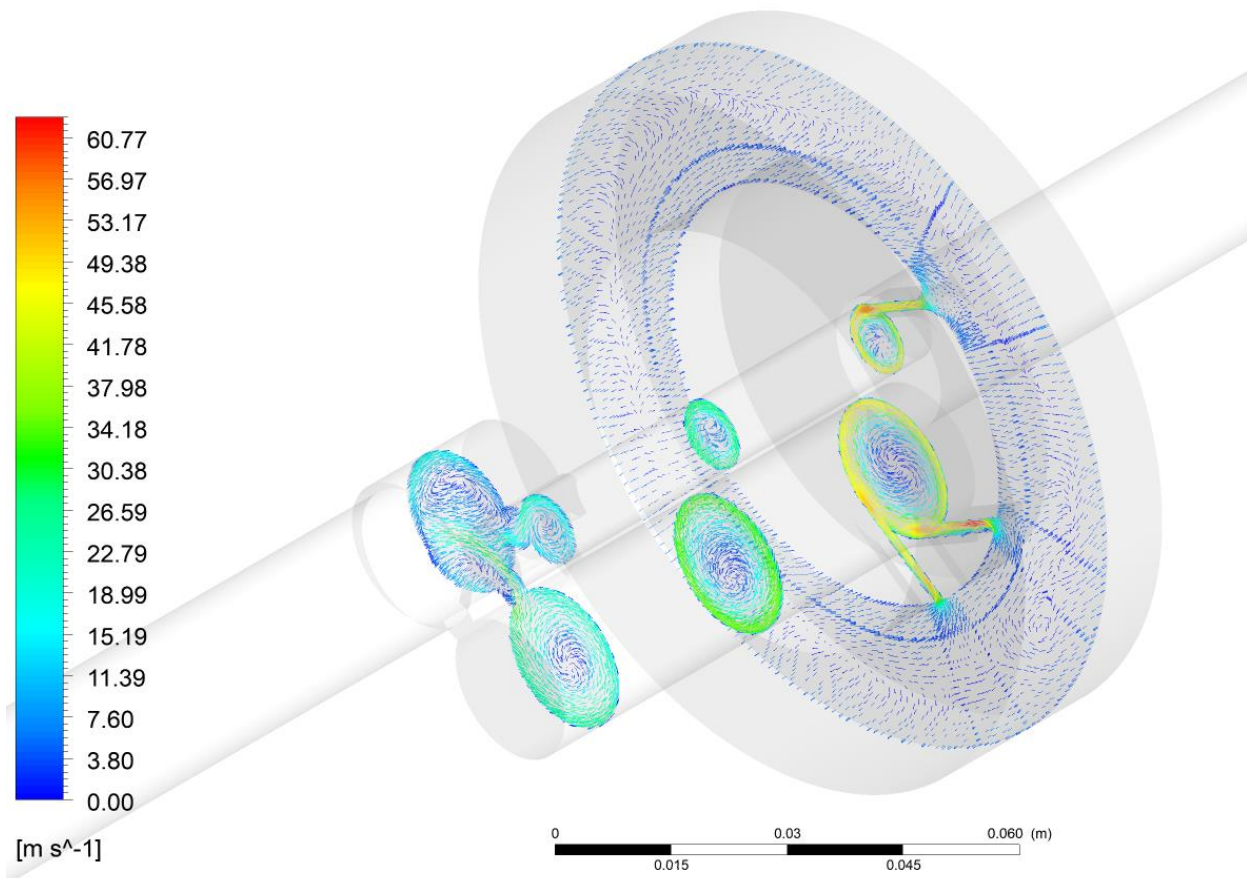
Cavitación en el vórtice del tubo de aspiración de una turbina francis. Adaptado de (Brennen, 2013)



El comportamiento de la velocidad del crudo con temperatura de 350 [F] en el reactor se puede observar en la Figura 14, en la cual se aprecian los vectores de velocidad en cuatro planos a lo largo del reactor. En el primero de ellos, la velocidad aumenta en la entrada del canal debido al cambio de sección transversal, y por la ubicación tangencial de los mismo se genera el vortex, una caída de presión en el centro del cilindro y la correspondiente generación de vapor.

Figura 14

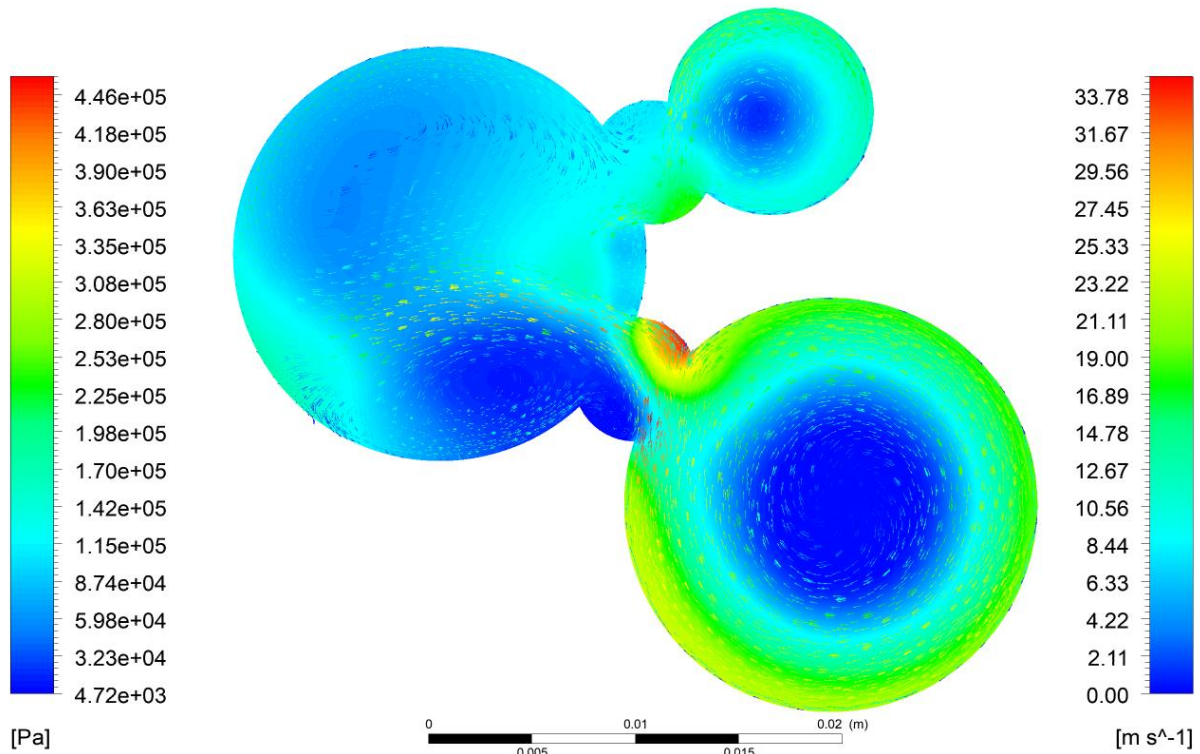
Vectores velocidad en distintos planos a lo largo del reactor



A medida que el crudo avanza por el cilindro, la velocidad del vortex disminuye hasta el punto de unión de los dos cilindros con el cilindro de salida del crudo, en el cual se redirecciona el flujo y se destruye el vortex como se aprecia en la Figura 15, generando zonas de recirculación y baja presión. Estas zonas de recirculación y vórtices generados por la unión de las dos corrientes van disminuyendo y unificándose a medida que el crudo avanza por el cilindro de salida.

Figura 15

Vectores de velocidad y contorno de presión en plano de unión de corrientes



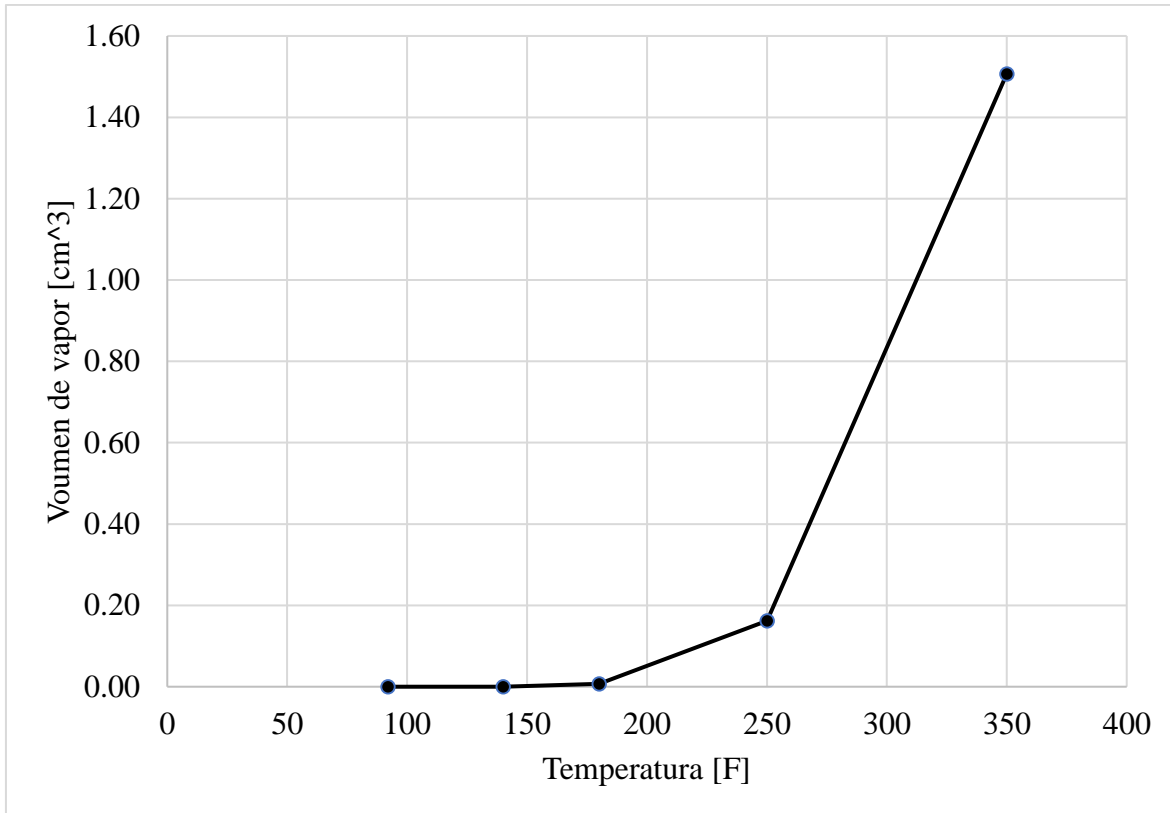
En el Apéndice D se discuten más ampliamente los resultados de la simulación, donde se muestran los contornos de presión, velocidad y fracción de vapor para cada temperatura.

4.3.1 Comportamiento de la fracción de vapor

Para tener un mejor entendimiento del problema se hizo una gráfica del volumen total de vapor en función de la temperatura, como lo muestra la Figura 16. El valor mínimo se obtuvo en 92 [F], ya que ahí no se generó vapor, y el valor máximo fue de 1.507 [cm³] en 350 [F]. Estos valores pueden contrastarse con las isosuperficies mostradas en la Figura 11. Las 3 primeras temperaturas no tienen cantidades significativas de vapor, y esto se puede ver reflejado en las pruebas realizadas experimentalmente en el cavitador mostradas en la sección 3.1.

Figura 16

Gráfica de volumen de vapor en función de la temperatura



5. Conclusiones

Los datos obtenidos experimentalmente mostraron que el aumento de la temperatura en el crudo antes de pasar por el reactor permitía obtener una viscosidad final menor, sin embargo, en comparación al efecto generado por el donante de hidrógeno, este aumento no era muy significativo. Esto se puede ver reflejado en el diagrama de Pareto donde la barra de temperatura apenas pasa la línea de referencia en 2.8 en comparación con la barra de donante que sobrepasa la línea de referencia por mucho.

Se logró caracterizar el crudo mediante las pruebas ASTM D445, ASTM D1298 y ASTM D86, en donde se observó el comportamiento de un crudo pesado, ya que se obtuvo una viscosidad de 284.7 [cP] a 100 [°F] y una densidad API de 20.6. De igual manera se calcularon las demás propiedades del crudo a diferentes temperaturas haciendo uso del software Aspen HYSYS, el cual demostró ser una herramienta útil para la simulación de corrientes de crudo, ya que los resultados que arrojó se asemejan bastante a los reales obtenidos experimentalmente.

Mediante dinámica de fluidos computacional se simuló el comportamiento del crudo a través del reactor HCR-Nano a diferentes temperaturas con el fin de evaluar el comportamiento de la fracción de vapor debido a la cavitación. Donde se encontró que en los rangos de temperatura de 92 a 180 [°F] el volumen de vapor no sobrepasaba los 0.00685 [cm³], sin embargo, a 350 [°F] el volumen de vapor sube significativamente hasta 1.507 [cm³].

De los datos obtenidos experimentalmente y de las simulaciones se concluye que las temperaturas a las cuales se realizaron las pruebas en el reactor HCR-Nano son muy bajas para poder evaluar su efecto en la reducción de la viscosidad del crudo. Se recomienda aumentar la potencia de la resistencia que está en el tanque de almacenamiento del crudo con el fin de evaluar experimentalmente temperaturas más elevadas. Además, se debe hacer un análisis de viabilidad ya que aumentar la temperatura de operación representa un costo energético el cual no podría verse compensado en la reducción de viscosidad del crudo.

Referencias Bibliográficas

- Askarian, M., Vatani, A., & Edalat, M. (2017). Heavy oil upgrading via hydrodynamic cavitation in the presence of an appropriate hydrogen donor. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 151, 55-61. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2017.01.037>
- Avvaru, B., Venkateswaran, N., Uppara, P., Iyengar, S. B., & Katti, S. S. (2018). Current knowledge and potential applications of cavitation technologies for the petroleum industry. *Ultrasonics Sonochemistry*, 42, 493-507. <https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2017.12.010>
- Brennen, C. E. (2013). Cavitation and bubble dynamics. En *Cavitation and Bubble Dynamics*. <https://doi.org/10.1017/CBO9781107338760>
- Cappa, E. F., Moll, F., Coussirat, M., Gandolfo, E., Fontanals, A., & Guardo, A. (2014). Estudio De Sensibilidad De Parámetros De Modelos En Flujos Cavitantes En Régimen No Estacionario. *Mecánica Computacional*, 33, 93-107.
- Çengel, Y. A., & Cimbala, J. M. (2006). *Fluid mechanics: Fundamentals and applications* (6a ed.; M.-H. Education, ed.). Boston.
- Darbandi, M., & Sadeghi, H. (2009). A study on flow through an orifice with prediction of cavitation and hydraulic flip. *Proceedings of the ASME Fluids Engineering Division Summer Conference 2009, FEDSM2009*, 2, 381-386. <https://doi.org/10.1115/FEDSM2009-78448>
- Dular, M. (2015). Hydrodynamic cavitation damage in water at elevated temperatures. *Wear*, 346-347, 78-86. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2015.11.007>
- Freitas, C. J. (2002). The issue of numerical uncertainty. *Applied Mathematical Modelling*, 26(2), 237-248. [https://doi.org/10.1016/S0307-904X\(01\)00058-0](https://doi.org/10.1016/S0307-904X(01)00058-0)
- Gogate, P. R., & Pandit, A. B. (2000). Engineering design methods for cavitation reactors II:

- Hydrodynamic cavitation. *AICHE Journal*, 46, 1641-1649.
<https://doi.org/10.1002/aic.690460815>
- Moll, F., Manuele, D., Coussirat Núñez, M., Cappa, E., Gandolfo, E., Guardo Zabaleta, A., & Fontanals García, A. (2012). Optimización de un banco de ensayos de cavitación mediante fluidodinámica computacional. *Mecánica Computacional*, 3661-3676.
- Moll, F., Manuele, D. E., Coussirat, M. G., Guardo, A., & Fontanals, A. (2011). Caracterización del tipo de cavitación mediante CFD... *Asociación Argentina de Mecánica Computacional*, XXX, 435-450. Recuperado de [http://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2117/14738/Mecanica Computacional XXX \(2011\) 435 - 450.pdf?sequence=1](http://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2117/14738/Mecanica%20Computacional%20XXX%20(2011)%20435%20-%20450.pdf?sequence=1)
- Nouri, N. M., Mirsaedi, S. M. H., & Moghimi, M. (2010). Large eddy simulation of natural cavitating flows in Venturi-type sections. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, 225, 369-381.
<https://doi.org/10.1243/09544062JMES2036>
- Nurick, W. H. (1976). Orifice Cavitation and Its Effect on Spray Mixing. *Journal of Fluids Engineering*, 98(2), 681-687. <https://doi.org/10.1115/1.3448785>
- Payri, R., García, J. M., Salvador, F. J., & Gimeno, J. (2005). Using spray momentum flux measurements to understand the influence of diesel nozzle geometry on spray characteristics. *Fuel*, 84(5), 551-561. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2004.10.009>
- Petkovšek, M., & Dular, M. (2013). IR measurements of the thermodynamic effects in cavitating flow. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 44, 756-763.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2013.10.005>
- Salvador, G. P., & Frankel, S. H. (2004). Numerical modeling of cavitation using fluent:

- Validation and parametric studies. *34th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit*.
<https://doi.org/10.2514/6.2004-2642>
- Šarc, A., Stepišnik-Perdih, T., Petkovšek, M., & Dular, M. (2017). The issue of cavitation number value in studies of water treatment by hydrodynamic cavitation. *Ultrasonics Sonochemistry*, *34*, 51-59. <https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2016.05.020>
- Sauer, J., & Schnerr, G. H. (2000). Unsteady cavitating flow - A new cavitation model based on a modified front capturing method and bubble dynamics. *American Society of Mechanical Engineers, Fluids Engineering Division (Publication) FED*, *251*(January 2000), 1073-1079.
- Sawarkar, A. N. (2019). Cavitation induced upgrading of heavy oil and bottom-of-the-barrel: A review. *Ultrasonics Sonochemistry*, *58*, 104690. <https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2019.104690>
- Shi, H., Li, M., Nikrityuk, P., & Liu, Q. (2019). Experimental and numerical study of cavitation flows in venturi tubes: From CFD to an empirical model. *Chemical Engineering Science*, *207*, 672-687. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.07.004>
- Singhal, A. K., Athavale, M. M., Li, H., & Jiang, Y. (2003). Mathematical basis and validation of the full cavitation model. *Proceedings of the ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, 1*, 379-406. <https://doi.org/10.1115/1.1486223>
- Sou, A., Biçer, B., & Tomiyama, A. (2014). Numerical simulation of incipient cavitation flow in a nozzle of fuel injector. *Computers and Fluids*, *103*, 42-48. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2014.07.011>
- Yang, Z., Zhang, C., Gu, S., Han, P., & Lu, X. (2013). Upgrading vacuum residuum by combined sonication and treatment with a hydrogen donor. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*, *48*(6), 426-435. <https://doi.org/10.1007/s10553-013-0391-2>

Apéndices

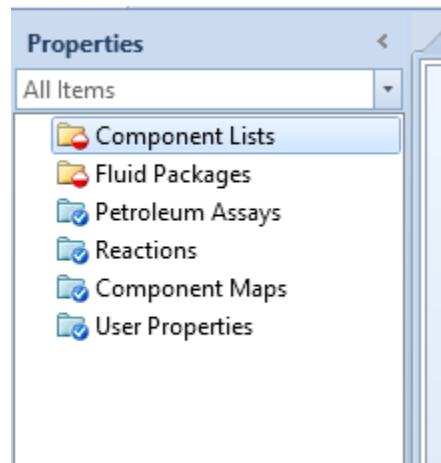
Apéndice A. Configuración Aspen HYSYS

El primer apéndice contiene la información correspondiente al paso a paso realizado en el programa Aspen HYSYS, con el fin de obtener las propiedades del líquido y del vapor necesarias para realizar la simulación en CFD.

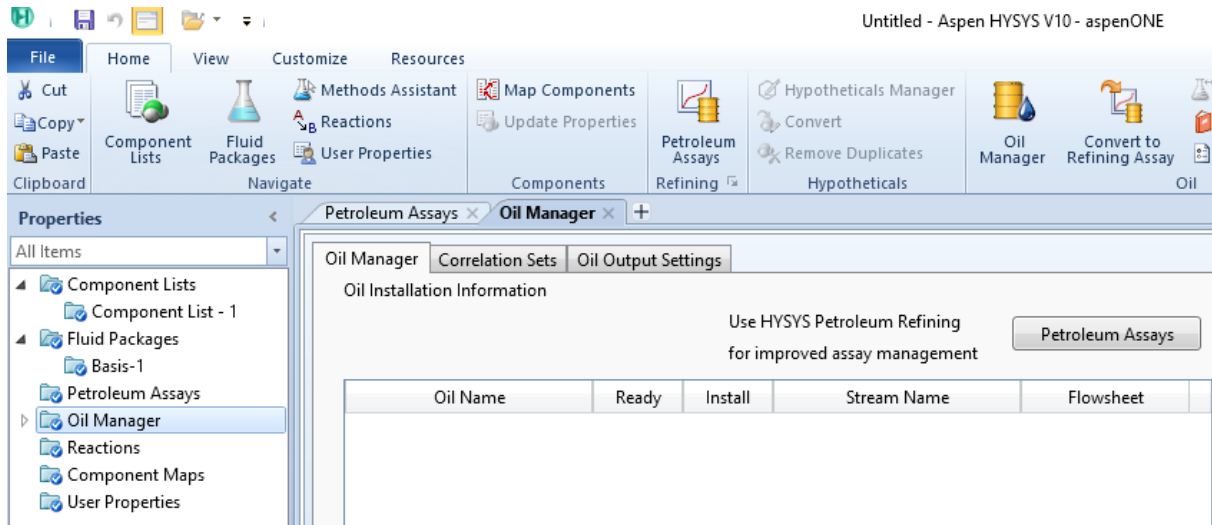
En el primer paso se insertan el *Component lists* y el *Fluid Packages*. Para el primero se escogen todos los componentes químicos del crudo y en el segundo se escoge el modelo Peng-Robinson.

Figura 17

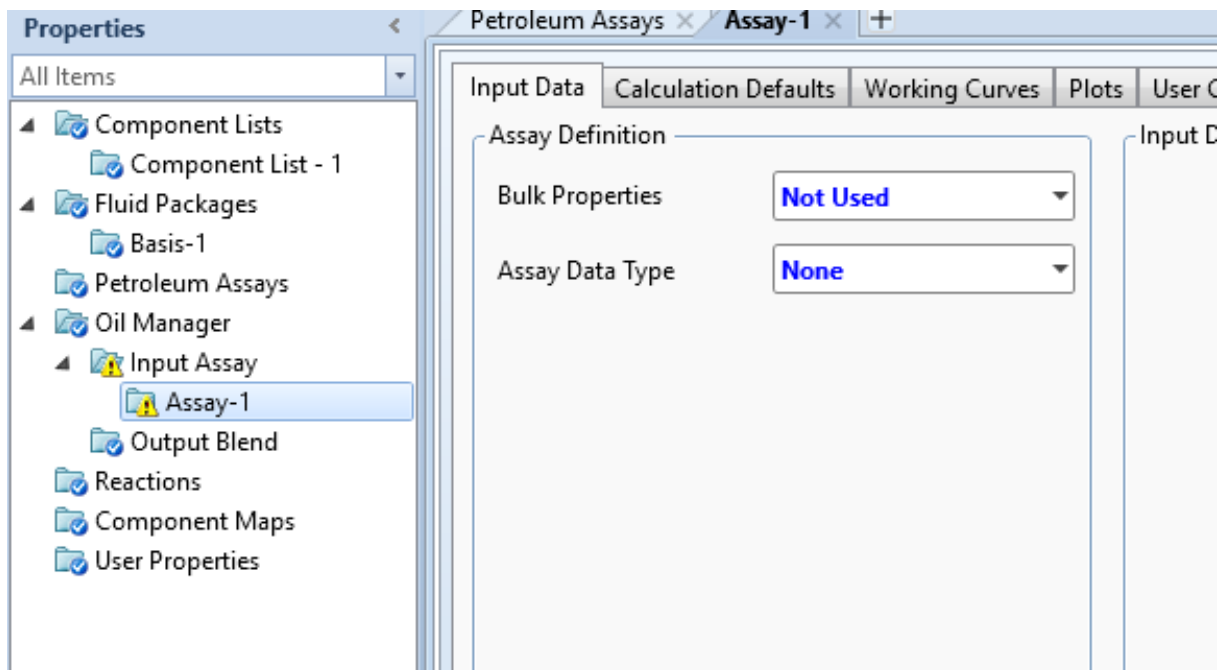
Component Lists y Fluid Packages



En el segundo paso se crea la pestaña de *Oil Manager*, la cual permite ingresar el Assay del crudo y realizar la caracterización.

Figura 18*Creación de la pestaña Oil Manager*

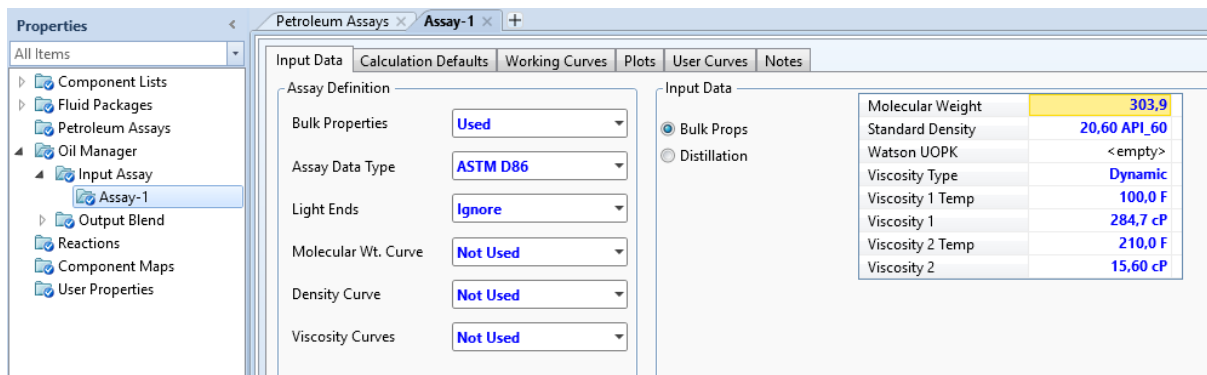
En el tercer paso se añade un Assay en la sección de *Oil Manager* creada previamente, tal como se muestra en la Figura 19.

Figura 19*Añadir un Assay en Oil Manager*

En el cuarto paso, dentro de la sección del Assay, se pone *Bulk Properties* como *Used*. Luego se ingresan los datos que se tienen de las pruebas realizadas de peso molecular, viscosidad y gravedad API.

Figura 20

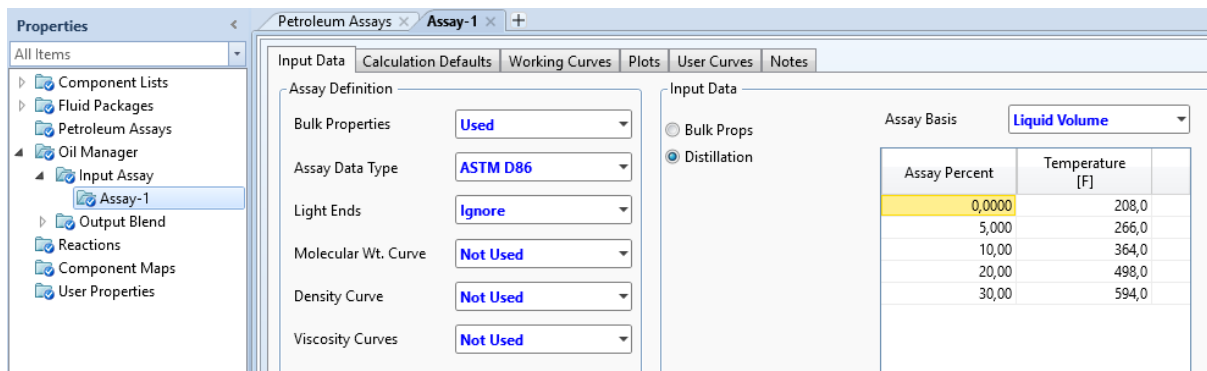
Añadir las propiedades en Bulk Properties



En el quinto paso, se pone en *Assa Data Type* el ensayo realizado para la destilación fraccionada, en este caso fue un ASTM D86. Luego en *Distillation* se añaden los valores de volumen de líquido evaporado con su respectiva temperatura. Por último, se da click en *Calculate* con el fin de calcular las propiedades del crudo.

Figura 21

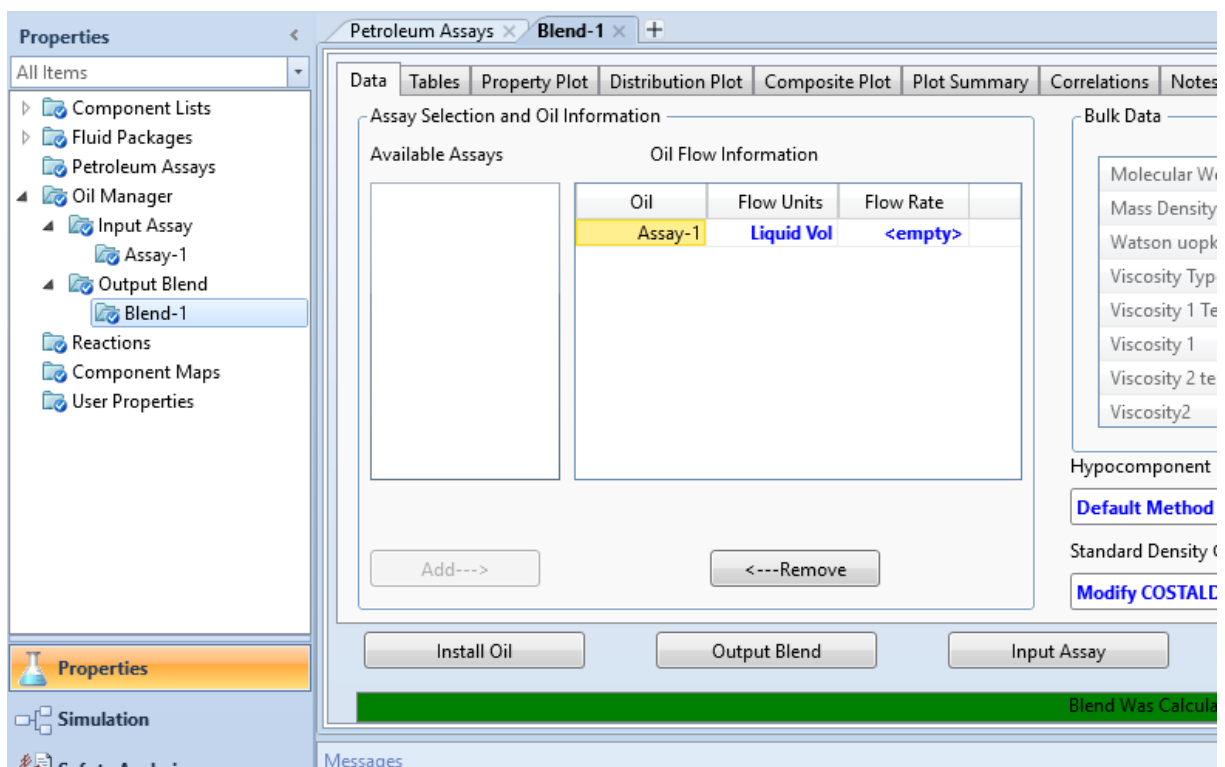
Añadir los datos de la curva de destilación fraccionada



En el sexto paso se añade la opción de *Output Blend*, haciendo click en su respectivo botón. En esta sección se deja todo por defecto a excepción del *Flow Rate*, donde se ingresa el flujo utilizado en las pruebas del reactor vortex. Finalmente se añade la corriente de crudo en la parte de *Simulation* haciendo click en *Install Oil*.

Figura 22

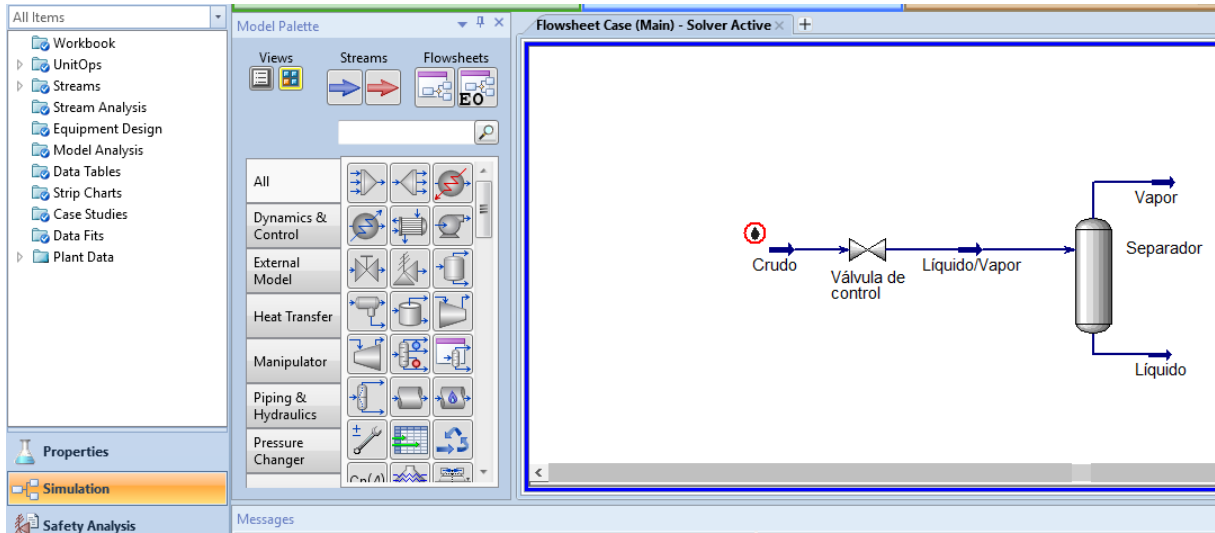
Añadir Output Blend



En el séptimo y último paso, luego de haber instalado la corriente, pasamos a la sección *Simulation*, donde se añaden los demás componentes necesarios para obtener los datos del crudo, tanto en fase líquida como gaseosa. Para eso se inserta una válvula de control y un separador, tal como se muestra en la Figura 23.

Figura 23

Montaje en l/a sección Simulation



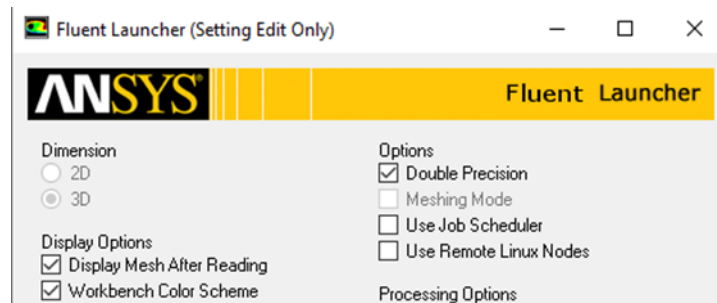
Apéndice B. Configuración ANSYS Fluent

El siguiente apéndice presenta el paso a paso para la simulación CFD del crudo en el reactor mediante el software ANSYS Fluent, los archivos de geometría y mallado ya han sido descritos, por lo que solo se explicará el proceso dentro del módulo Fluent.

En el primer paso, al ejecutar el *setup* se selecciona la opción *Double Precision* en el menú de opciones.

Figura 24

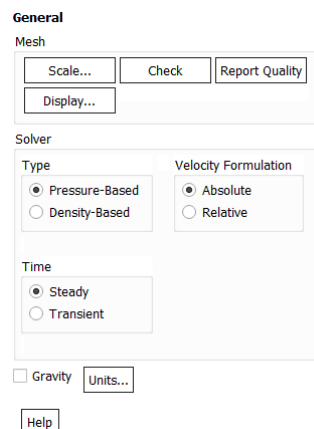
Configuración Fluent Launcher



En el segundo paso, se configuran los datos generales del solver, seleccionando en *Pressure-Based* en *Type*, *Absolute* en *Velocity Formulation* y finalmente *Steady* en *Time*.

Figura 25

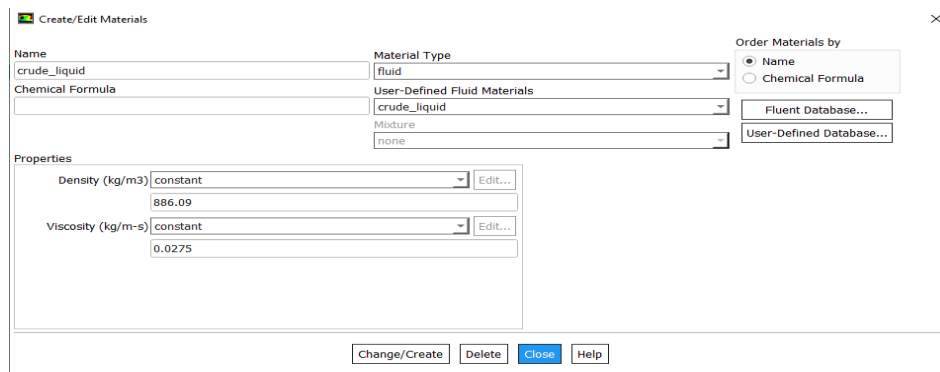
Configuración general de la simulación



En el tercer paso se agregan las propiedades del crudo líquido y vapor, obtenidas previamente mediante Aspen HYSYS, detalladas en el Apéndice A. Dichas propiedades se asumen como las propiedades del fluido como sustancia pura.

Figura 26

Añadir propiedades del fluido

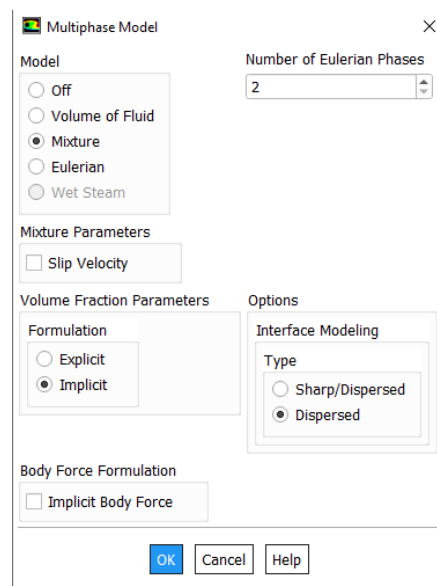


The screenshot shows the 'Create/Edit Materials' dialog box. The 'Name' field contains 'crude_liquid'. The 'Material Type' dropdown is set to 'fluid'. The 'Chemical Formula' field is empty. The 'Mixture' dropdown is set to 'none'. The 'Properties' section has two rows: 'Density (kg/m3)' with a dropdown set to 'constant' and a text box containing '886.09'; and 'Viscosity (kg/m-s)' with a dropdown set to 'constant' and a text box containing '0.0275'. The 'Order Materials by' section has 'Name' selected. There are buttons for 'Fluent Database...', 'User-Defined Database...', 'Change/Create', 'Delete', 'Close', and 'Help'.

En el cuarto paso se especifica el modelo a usar para simular el flujo multifásico, en el menú *Multiphase*, se selecciona el modelo *Mixture*, formulación *Implicit* y tipo de interface *Dispersed*.

Figura 27

Selección modelo multifásico

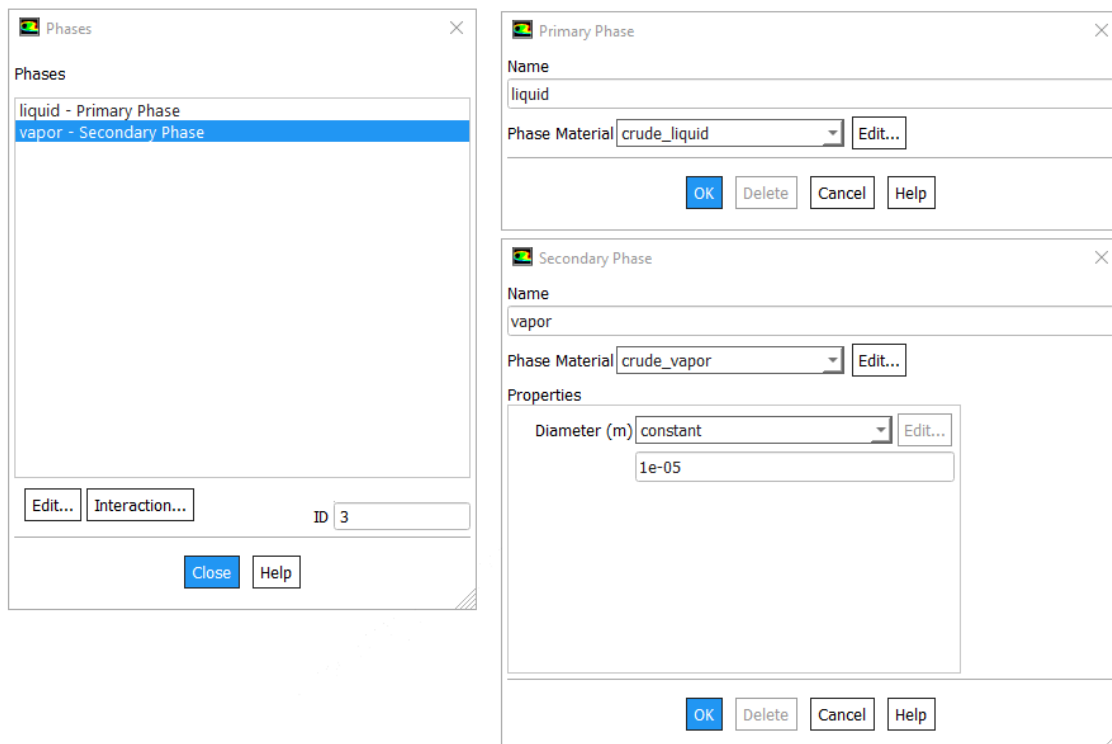


The screenshot shows the 'Multiphase Model' dialog box. The 'Model' section has radio buttons for 'Off', 'Volume of Fluid', 'Mixture' (selected), 'Eulerian', and 'Wet Steam'. The 'Number of Eulerian Phases' is set to 2. The 'Mixture Parameters' section has a checkbox for 'Slip Velocity' which is unchecked. The 'Volume Fraction Parameters' section has a 'Formulation' section with radio buttons for 'Explicit' and 'Implicit' (selected). The 'Options' section has an 'Interface Modeling' section with radio buttons for 'Sharp/Dispersed' and 'Dispersed' (selected). The 'Body Force Formulation' section has a checkbox for 'Implicit Body Force' which is unchecked. There are buttons for 'OK', 'Cancel', and 'Help'.

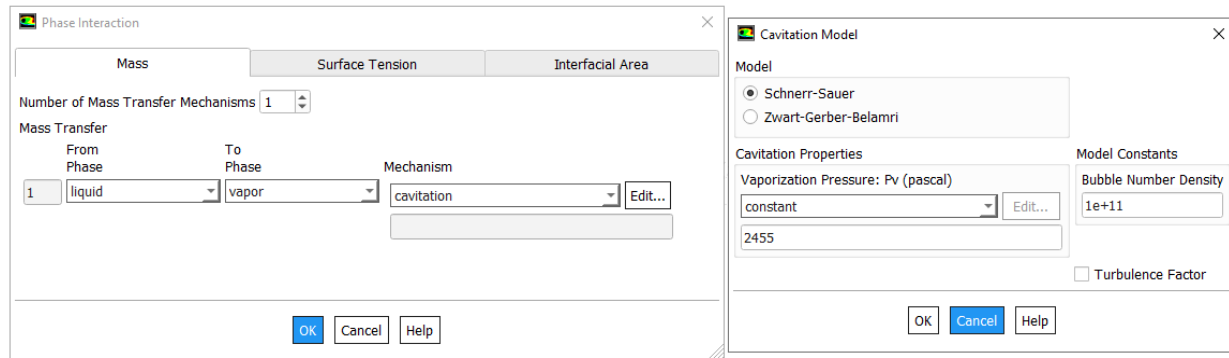
A continuación, se habilitan dos configuraciones extras para la configuración multifásica seleccionada, en la cual se deben indicar las fases *Primary Phase* (liquido) y *Secondary Phase* (vapor), y especificar que fluido corresponde a cada fase.

Figura 28

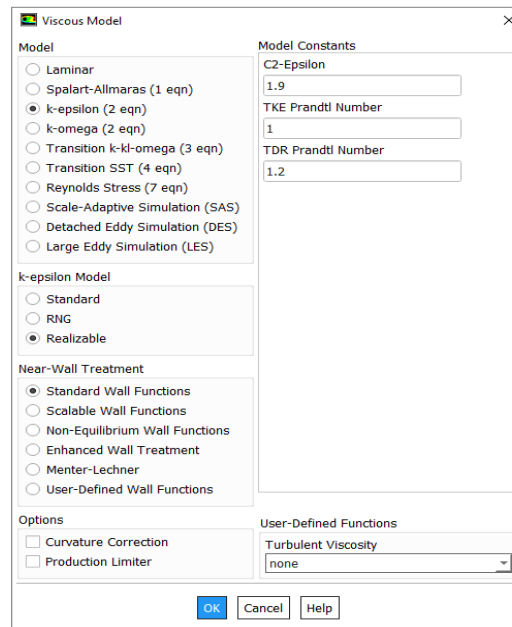
Establecer fases



Para concluir con la configuración del modelo, para simular la cavitación, se agrega la interacción entre las fases anteriormente definidas, seleccionando *Cavitation* en el menú desplegable de *Mechanism* y paso seguido se edita la configuración, en la cual se selecciona el modelo de cavitación *Schnerr-Sauer* y se ingresa el valor de la presión de vapor. El valor *Bubble Number Density*, se deja por defecto en $1e+11$.

Figura 29*Configuración modelo de cavitación*

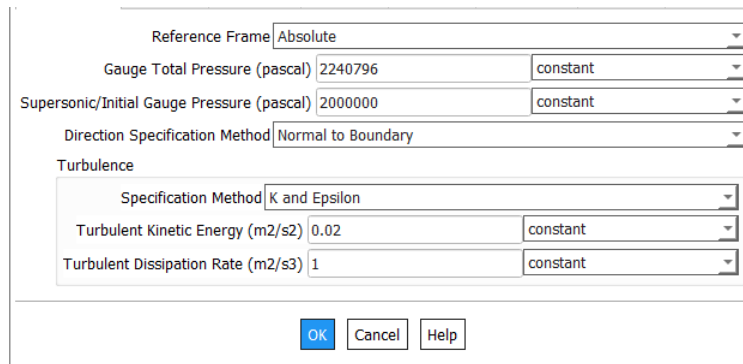
En el quinto paso, se hace la configuración del modelo de turbulencia, para este caso se selecciona *K-epsilon Realizable*, ya que es el que mejores resultados entrega en simulaciones altamente turbulentas sin tener un coste computacional elevado. Para el análisis de la capa limite, se selecciona *Standard Wall Functions* de la configuración *Near-Wall Treatment*.

Figura 30*Configuración modelo de turbulencia*

En el sexto paso se establecen las condiciones de frontera. Iniciando por la condición de ingreso del fluido, la cual es la presión de entrada, *Gauge Total Pressure*, correspondiente a 2240796 [Pa] y para la inicialización del caso se establece el valor, *Initial Gauge Pressure* de 2000000 [Pa]. Para Los valores de turbulencia en la entrada, *K* y *Epsilon*, se toma *Turbulent Kinetic Energy* = 0.02 (m^2/s^2) y *Turbulent Dissipation Rate* = 1 (m^2/s^2), los cuales son valores recomendados para flujos turbulentos en equipos industriales.

Figura 31

Condición de frontera de entrada



Reference Frame	Absolute	
Gauge Total Pressure (pascal)	2240796	constant
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	2000000	constant
Direction Specification Method	Normal to Boundary	
Turbulence		
Specification Method	K and Epsilon	
Turbulent Kinetic Energy (m^2/s^2)	0.02	constant
Turbulent Dissipation Rate (m^2/s^3)	1	constant

OK Cancel Help

A continuación, se establece la condición de presión de salida del fluido, *Gauge Pressure*, correspondiente a 96526 [Pa]. Para los valores de turbulencia en la entrada, *K* and *Epsilon*, se toma *Backflow Turbulent Kinetic Energy* = 0.02 (m^2/s^2) y *Backflow Turbulent Dissipation Rate* = 1 (m^2/s^2).

Figura 32

Condición de frontera de salida

Pressure Outlet

Zone Name: outletr_malla_4.5_ Phase: mixture

Momentum Thermal Radiation Species DPM Multiphase Potential UDS

Gauge Pressure (pascal): 96526 constant

Pressure Profile Multiplier: 1

Backflow Direction Specification Method: Normal to Boundary

Backflow Pressure Specification: Total Pressure

Radial Equilibrium Pressure Distribution

Turbulence

Specification Method: K and Epsilon

Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2): 0.02 constant

Backflow Turbulent Dissipation Rate (m2/s3): 1 constant

OK Cancel Help

Posteriormente se establece la condición de frontera de pared, la cual es estacionaria (*Wall motion/Stationary Wall*) con condición de no deslizamiento (*Shear Condition/No Slip*) y rugosidad estándar (*Roughness Models/Standard*).

Figura 33

Condición de frontera pared

Wall

Zone Name: wallr_malla_4.5_ Phase: mixture

Adjacent Cell Zone: flowdomainr_malla_4.5_

Momentum Thermal Radiation Species DPM Multiphase UDS Wall Film Potential

Wall Motion

Motion

Stationary Wall Relative to Adjacent Cell Zone

Moving Wall

Shear Condition

No Slip

Specified Shear

Specularity Coefficient

Marangoni Stress

Wall Roughness

Roughness Models

Standard

High Roughness (Icing)

Sand-Grain Roughness

Roughness Height (m): 0 constant

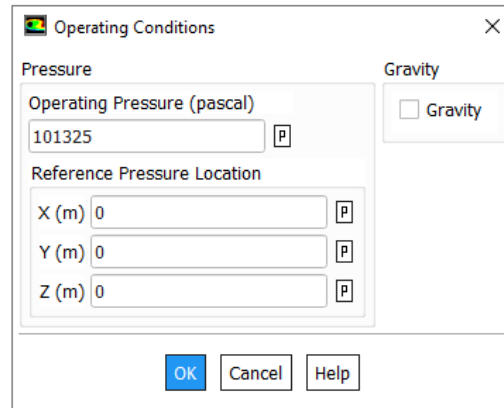
Roughness Constant: 0.5 constant

OK Cancel Help

Finalmente, se especifican la condición de operación a una presión atmosférica de 101325 [Pa].

Figura 34

Condición de operación



En el séptimo paso, se seleccionan los métodos de solución, para el tipo de problema planteado las selecciones son: *Scheme-Couple*, *Gradient-Least Squares Cell Based*, *Pressure-PRESTO!*, *Momentum-QUICK*, *Volumen Fraction-QUICK*, *Turbulent Kinetic Energy-First Order Upwind*, *Turbulent Dissipation Rate- First Order Upwind*.

La selección de *Turbulent Kinetic Energy-First Order Upwind* y *Turbulent Dissipation Rate-First Order Upwind*, se realiza para las primeras iteraciones, de esta forma se evita la divergencia en los primeros instantes de la simulación.

Adicionalmente, se seleccionan las opciones *Pseudo Transient* y *High Order Term Relaxation*, lo que habilita relaciones que permiten términos de relajación más elevados para amortiguar las oscilaciones entre iteraciones.

Figura 35*Métodos de solución*

Solution Methods

Pressure-Velocity Coupling

Scheme
Coupled

Coupled with Volume Fractions

Solve N-Phase Volume Fraction Equations

Spatial Discretization

Pressure
PRESTO!

Momentum
QUICK

Volume Fraction
QUICK

Turbulent Kinetic Energy
First Order Upwind

Turbulent Dissipation Rate
First Order Upwind

Transient Formulation

Non-Iterative Time Advancement

Frozen Flux Formulation

Pseudo Transient

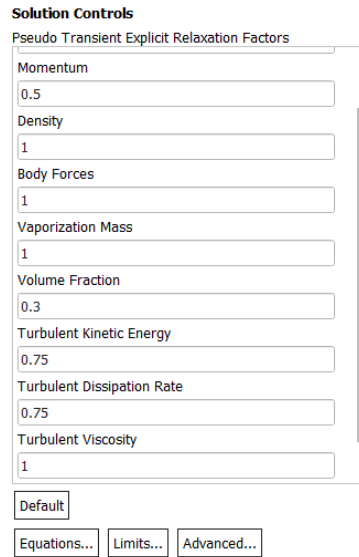
Warped-Face Gradient Correction

High Order Term Relaxation

En el octavo paso se especifican los términos de relajación mencionados anteriormente y que permiten amortiguar las oscilaciones y cambios drásticos entre iteraciones, debido a que la variable más cambiante es la fracción de vapor, se establece un factor *Volume Fraction* de 0.3, los demás valores se dejan predeterminados.

Figura 36

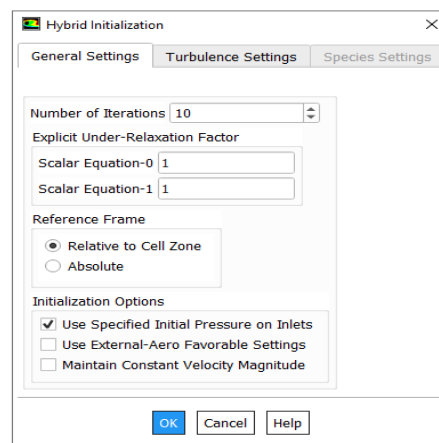
Controles de la solución



En el noveno paso se realiza la inicialización híbrida, como las condiciones de frontera en la entrada y salida del reactor son de presión, se selecciona *Use Specified Initial Pressure on Inlets* y a continuación se realiza la inicialización.

Figura 37

Inicialización híbrida



En el décimo paso se realiza el cálculo de la simulación, inicialmente se calculan únicamente 200 iteraciones, con la finalidad de que el sistema encuentre una primera posición estable. Después de esto, se cambian los términos *Turbulent Kinetic Energy*, y *Turbulent Dissipation Rate- First Order Upwind* a un método de solución *QUICK* y se calculan las siguientes iteraciones, hasta la convergencia del sistema.

Figura 38

Cálculo de la solución

Run Calculation

Check Case... Update Dynamic Mesh...

Pseudo Transient Options

Fluid Time Scale

Time Step Method Timescale Factor

User Specified 1

Automatic

Length Scale Method Verbosity

Conservative 0

Options

Data Sampling for Steady Statistics

Sampling Interval

1 Sampling Options...

Iterations Sampled 0

Number of Iterations Reporting Interval

200 1

Profile Update Interval

1

Data File Quantities... Acoustic Signals...

Acoustic Sources FFT...

Calculate

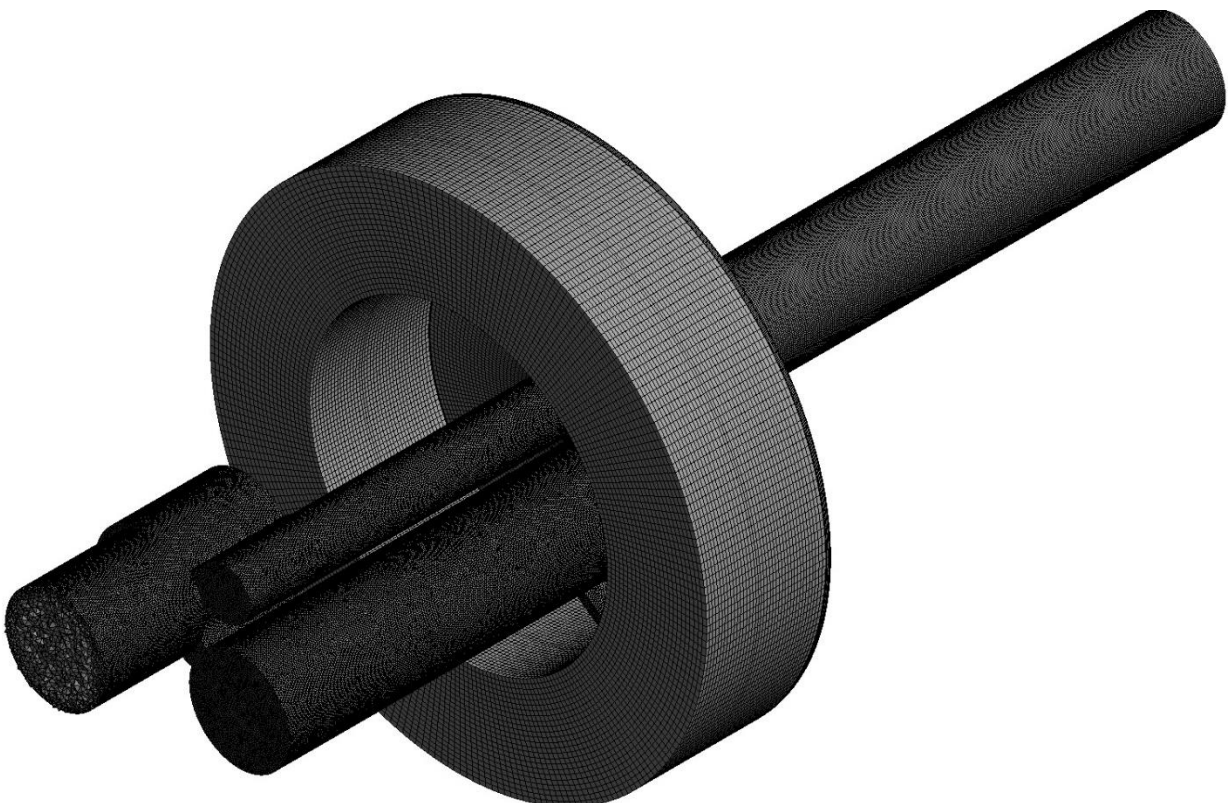
Help

Apéndice C. Detalles del mallado

En este apéndice se muestra la malla general y las zonas de mayor importancia. En la Figura 39 se muestra la vista general del mallado del reactor. Se pueden observar dos zonas de mallado distinto, la primera que abarca el cilindro de entrada del crudo y la zona central de redistribución, que se hicieron con un mallado estructurado principalmente por la unidireccionalidad del fluido y por la simplicidad de la geometría. La segunda zona va desde la entrada del crudo por los canales que generan los vórtices hasta el cilindro final del reactor, que se hicieron un mallado tetraédrico no estructurado debido a dos razones, la primera es la complejidad de la geometría, y la segunda es que, al ser una zona con vórtices, una estructura tetraédrica capta con menor error este fenómeno.

Figura 39

Mallado del reactor



En la Figura 40 se puede observar la transición existente entre el mallado hexaédrico y tetraédrico, logrado a partir de la configuración Shared Topology, la cual permite la unificación de caras y nodos en las superficies de contacto, con esto se logra disminuir en gran medida la pérdida de información por el cambio de mallado, de igual forma se puede apreciar en la Figura 41.

Figura 40

Mallado en detalle en canales de ingreso al reactor

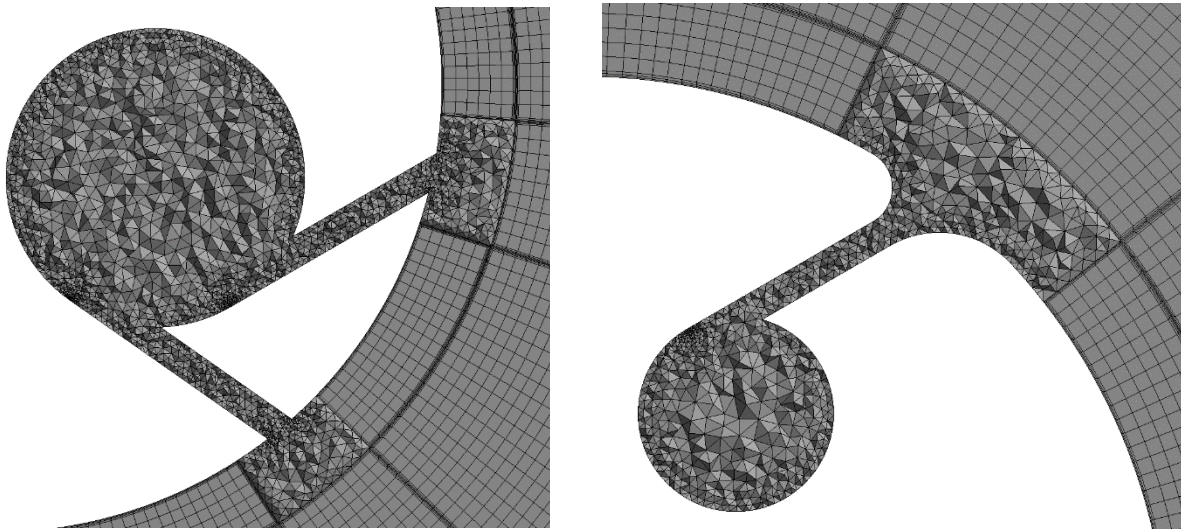
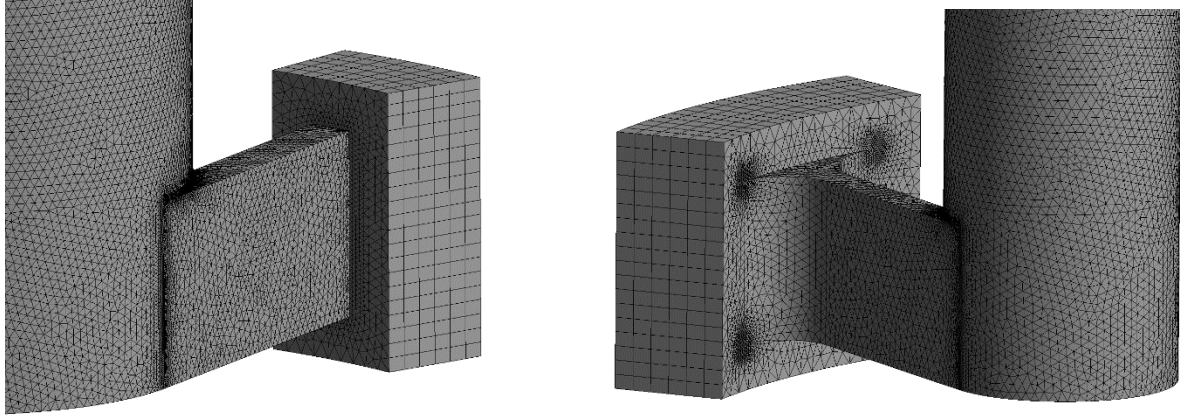


Figura 41

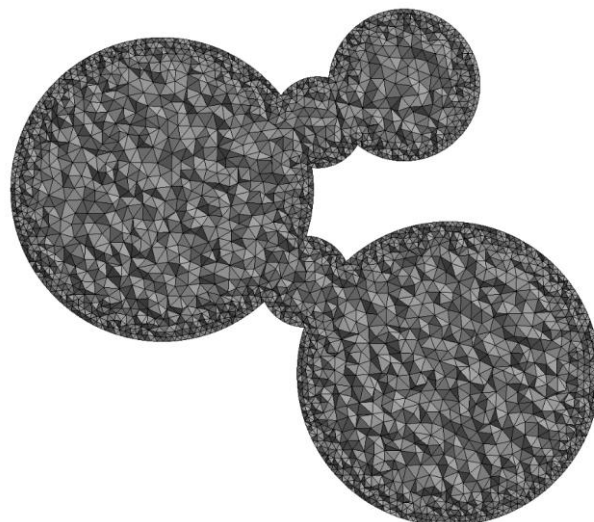
Mallado en detalle volumen tetraédrico y zona de contacto con malla estructurada



Para la zona de mallado hexaédrico se realizó una inflación en las paredes para captar mejor el comportamiento en la capa límite, en el caso del mallado tetraédrico se realizó un refinamiento en el área externa con el mismo propósito, sin disminuir la calidad de la malla en las zonas de geometría compleja, lo que pasaría si se usara una inflación en esta zona. El refinamiento de la malla tetraédrica es observable en la Figura 40 y Figura 42.

Figura 42

Mallado tetraédrico en detalle con refinamiento en las paredes

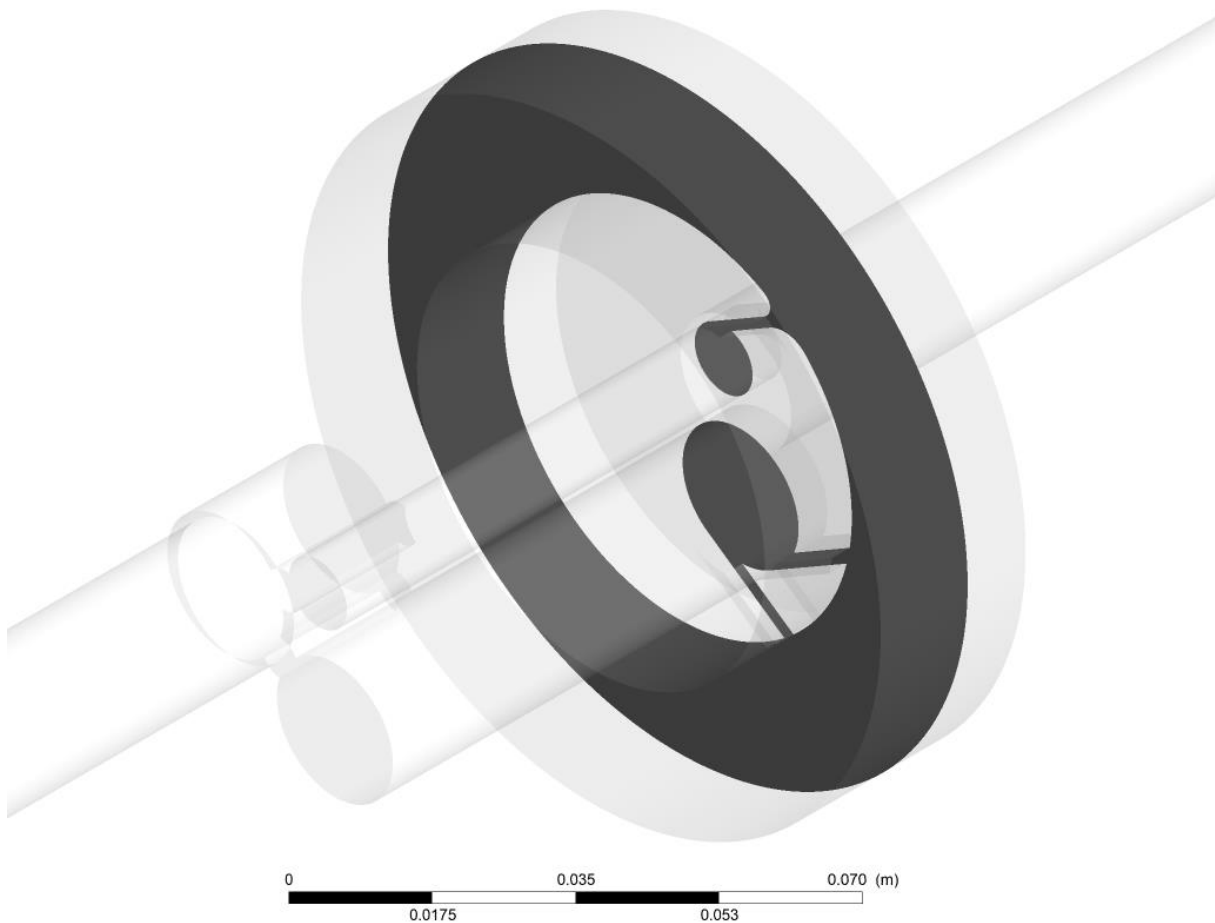


Apéndice D. Gráficas de contorno para cada temperatura

En este apéndice se disponen más detalladamente imágenes de la simulación. Se evaluaron los contornos de presión, velocidad y fracción de vapor en el plano de corte mostrado en la Figura 43, este se ubica donde el fenómeno de cavitación ocurría en la mayoría de las temperaturas y también donde existían grandes gradientes de las variables.

Figura 43

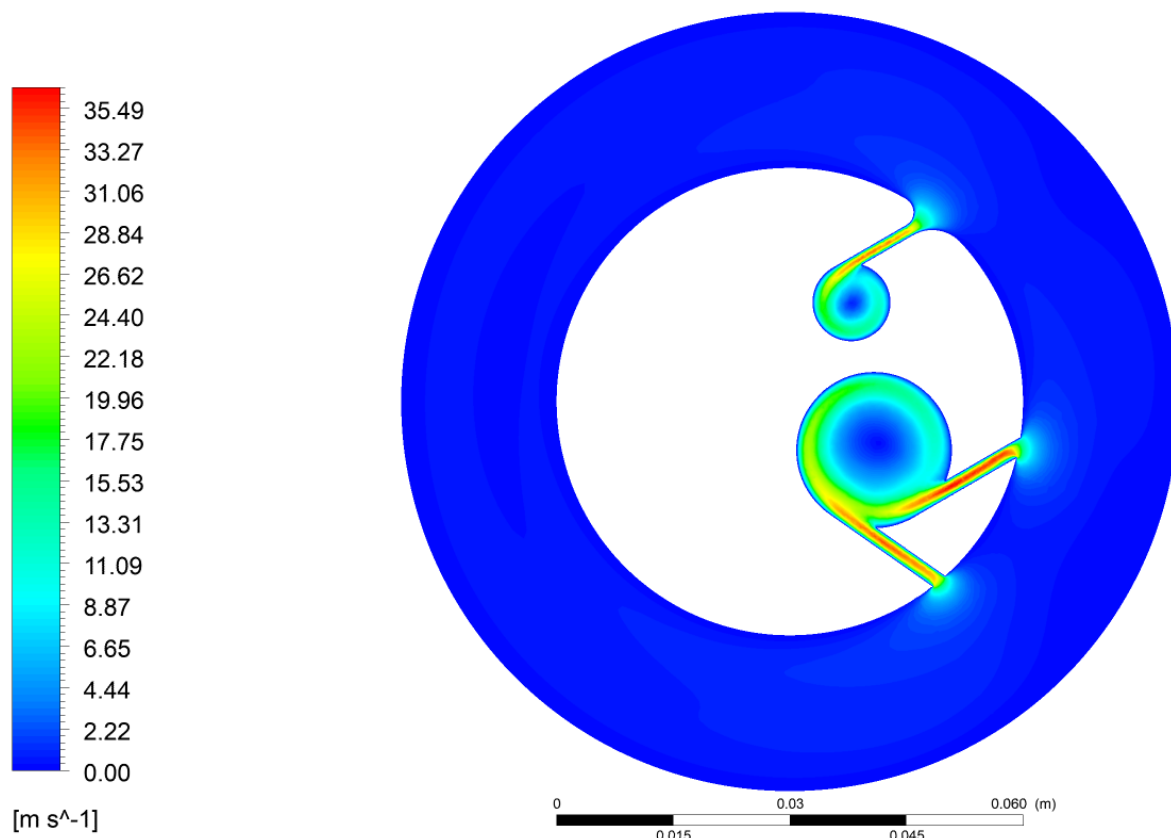
Plano de corte



En la Figura 44 se puede observar el contorno de velocidad para la temperatura de 92 [F]. El valor máximo de la velocidad es de 35.49 [m/s], el cual se encuentra en los canales donde se obstruye y acelera el flujo. También se observa que las velocidades son bajas en los centros de los dos cilindros, esto se debe a que ahí se genera un vórtice, por lo que el fluido sólo presenta altas velocidades en la periferia.

Figura 44

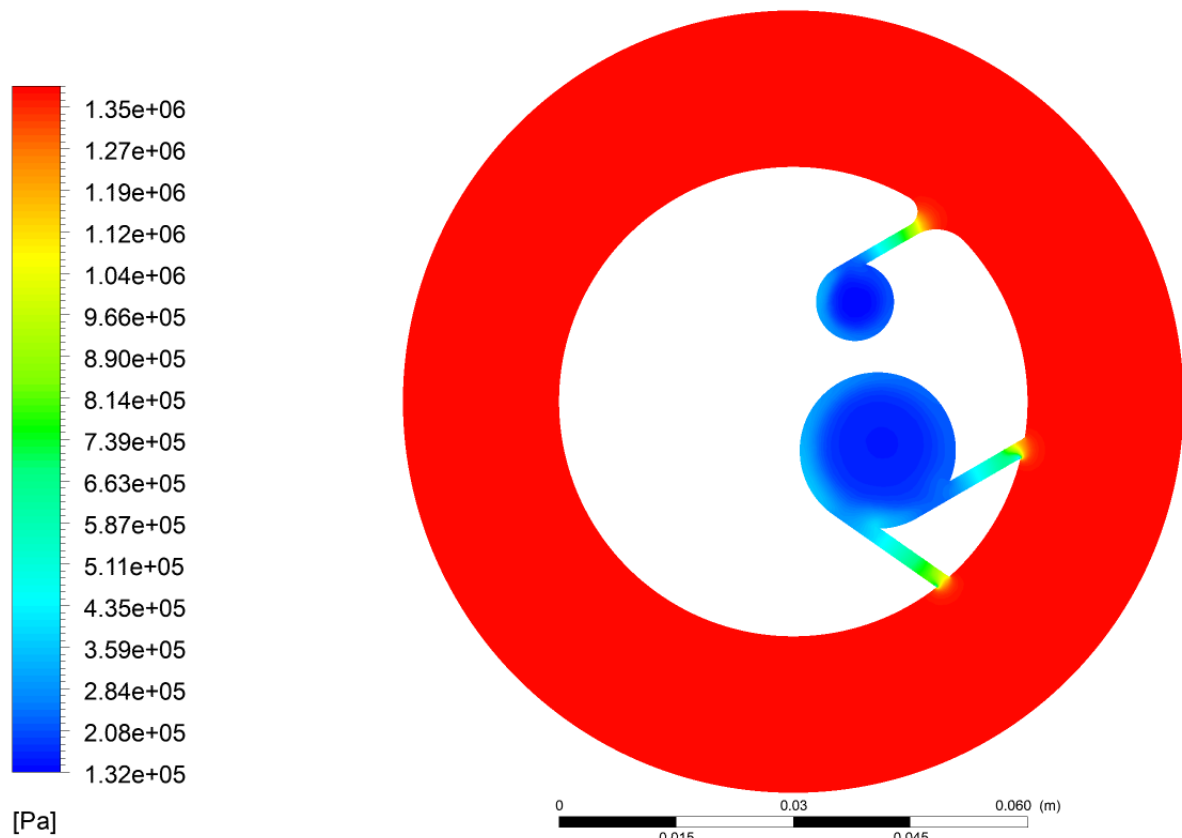
Contorno de velocidad a 92 [F]



En la Figura 45 se puede observar el contorno de presión para la temperatura de 92 [F]. El valor máximo de la presión es de 1.35 [MPa]. La presión mínima se genera en la parte central del vortex, con un valor de 132000 [Pa]. A medida que el fluido avanza por la geometría, este es acelerado bruscamente por las constricciones y el efecto del vortex, por eso se genera una caída de aproximadamente 1.2 MPa en esta parte.

Figura 45

Contorno de presión a 92 [F]

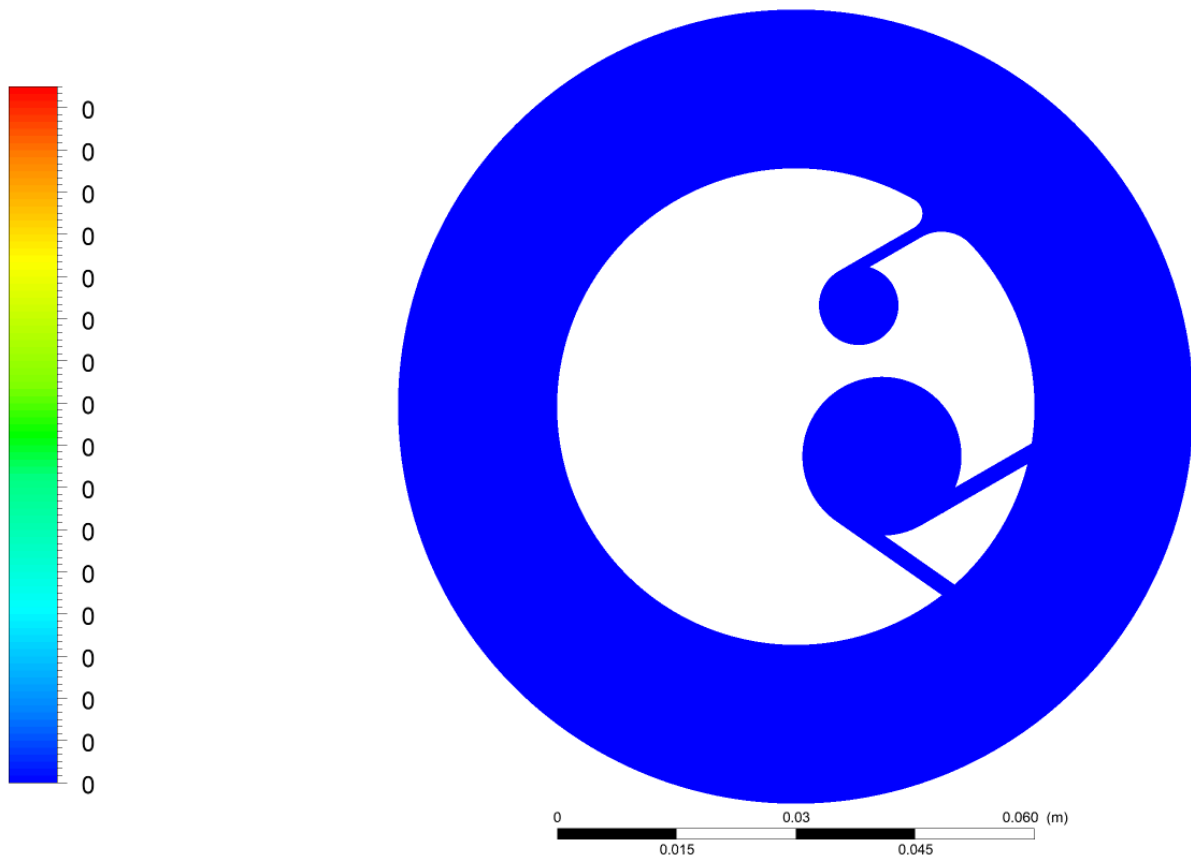


En la

Figura 46 se puede observar el contorno de fracción de vapor para la temperatura de 92 [F], para la cual la fracción de vapor en todo el volumen es 0, debido a que la presión mínima global es superior a la presión de vapor del crudo.

Figura 46

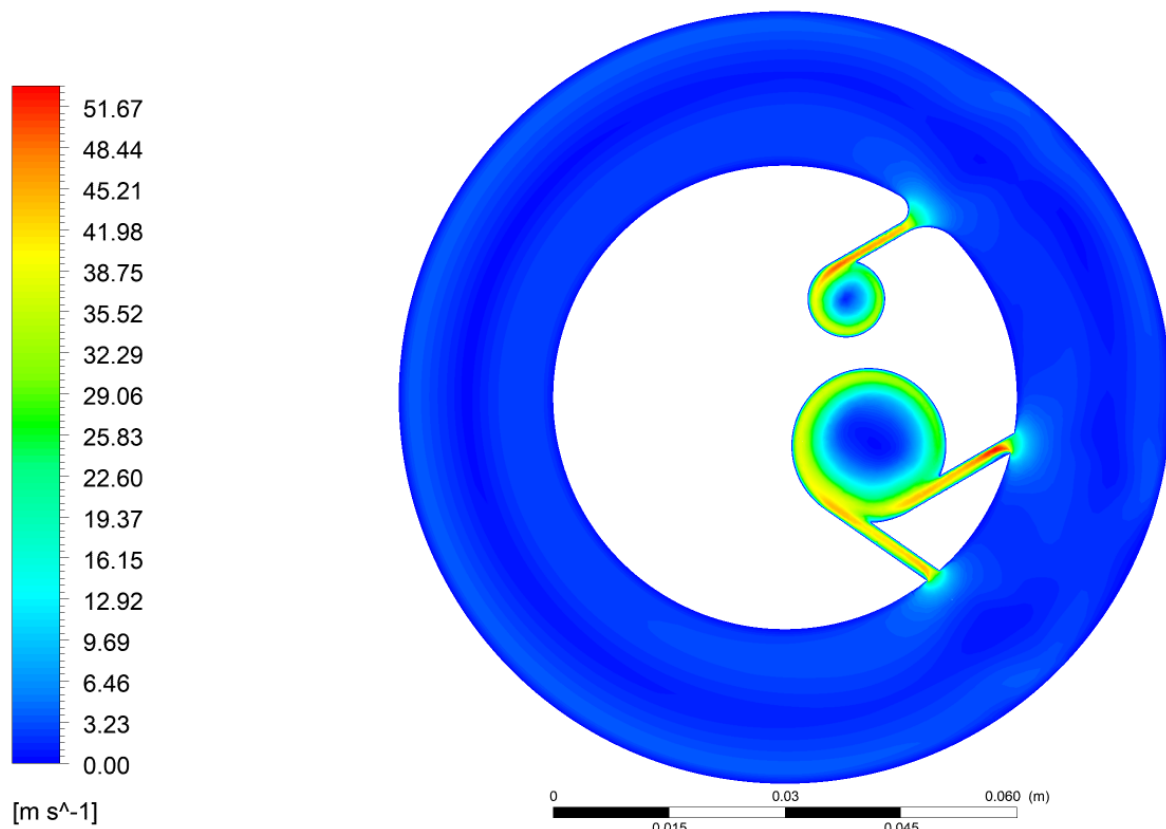
Contorno de fracción de vapor a 92 [F]



En la Figura 47 se puede observar el contorno de velocidad para la temperatura de 140 [F]. El valor máximo de la velocidad es de 51.67 [m/s], el cual se encuentra en los canales donde se obstruye el flujo. A diferencia de 92 [F], a esta temperatura las velocidades son mayores, esto se debe principalmente a la disminución de la viscosidad del crudo.

Figura 47

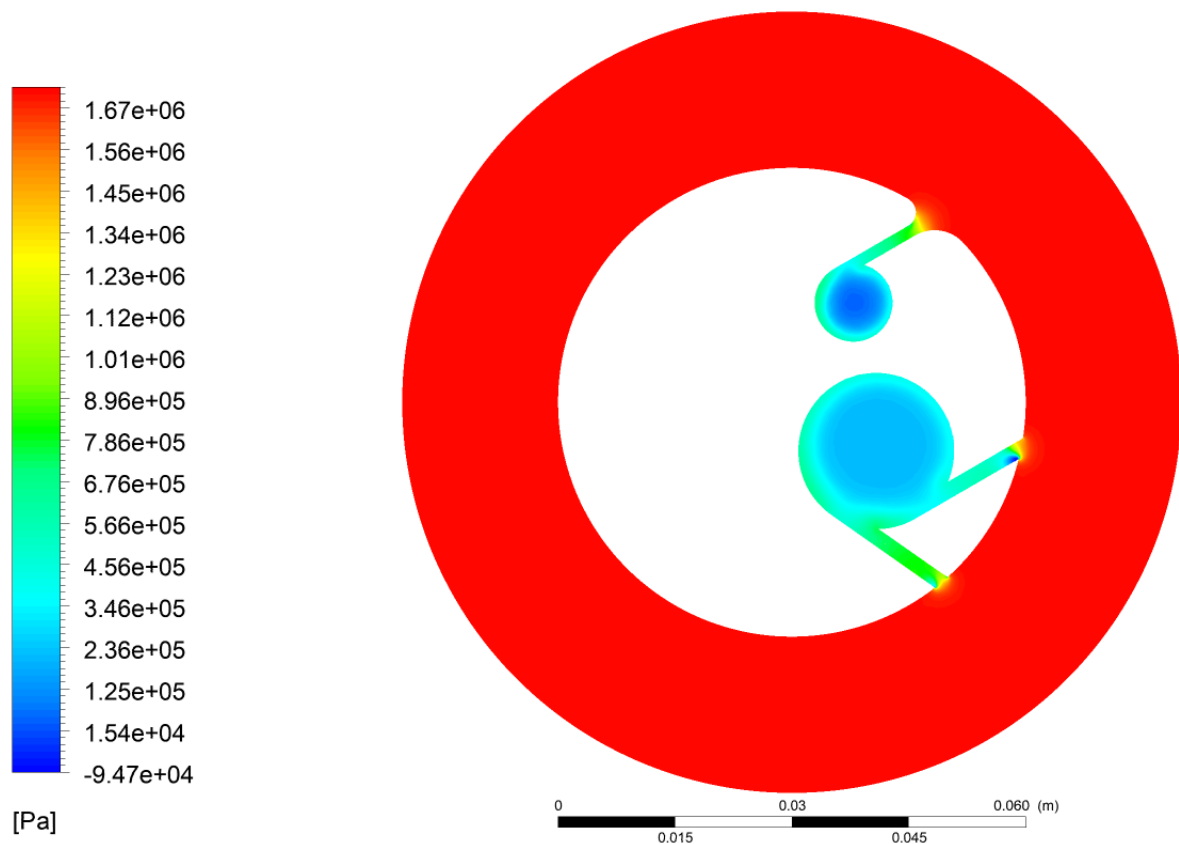
Contorno de velocidad a 140 [F]



En la Figura 48 se puede observar el contorno de presión para la temperatura de 140 [F]. El valor máximo de la presión es de 1.67 [MPa]. La presión mínima se genera en la entrada de uno de los canales que dirige el flujo al cilindro grande, con un valor de -94700 [Pa]. La presión mínima es negativa ya que en esa parte de la geometría se presenta un fenómeno de recirculación, además de que es ahí donde se genera el vapor por la misma razón.

Figura 48

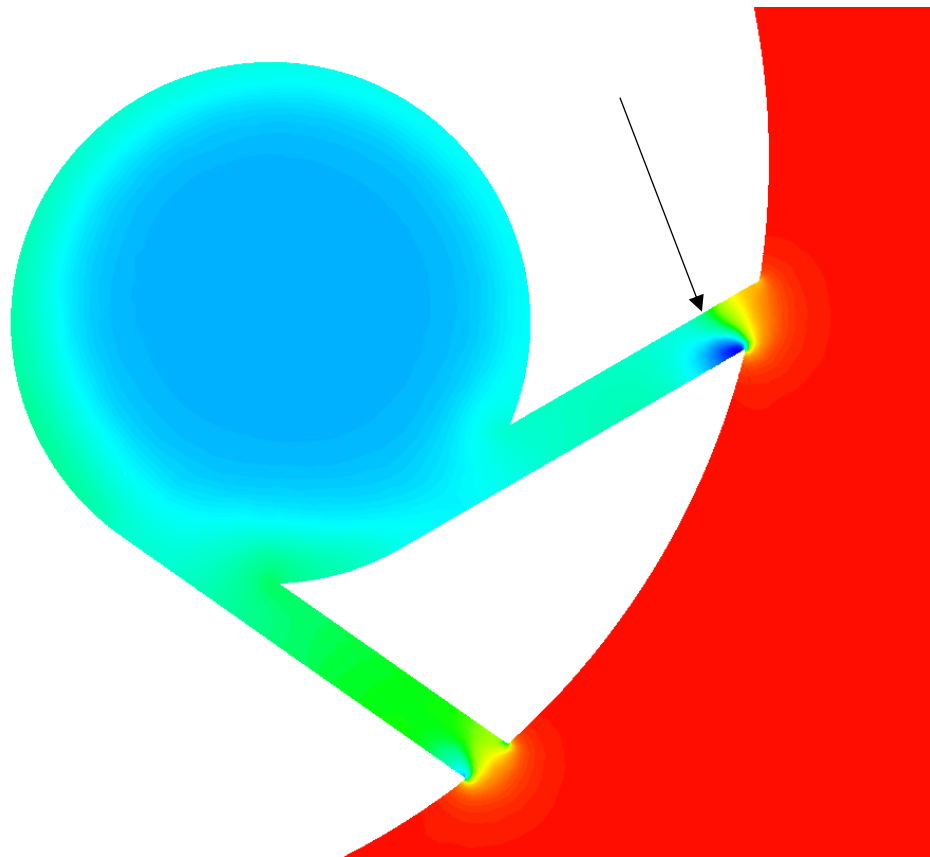
Contorno de presión a 140 [F]



Para entender mejor lo sucedido en la Figura 48 respecto a la presión negativa, se puede observar la Figura 49, el cual es un acercamiento a la parte donde se presenta la recirculación. Este fenómeno es estudiado principalmente en los inyectores de los motores a combustión interna. Se origina porque el fluido es obligado a fluir por una súbita reducción de área transversal cuyas aristas son agudas.

Figura 49

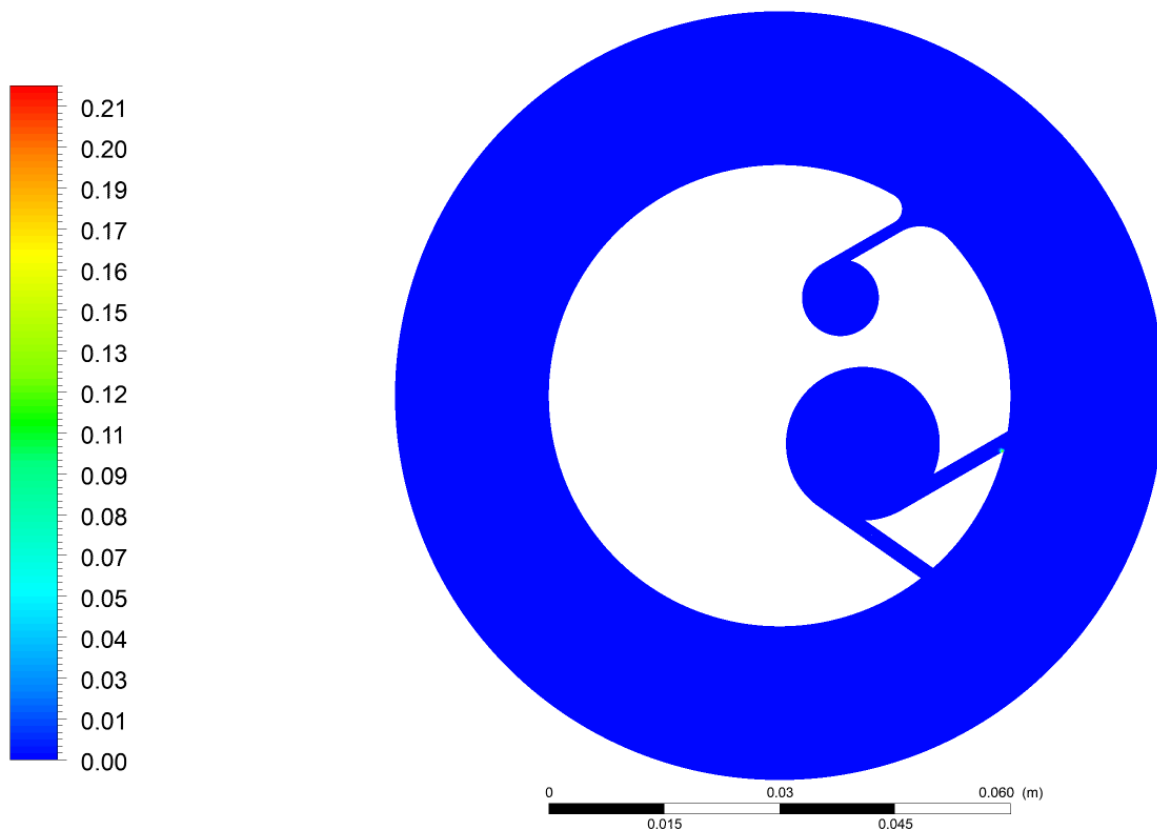
Contorno de presión de zona de recirculación a 140 [F]



En la Figura 50 se puede observar el contorno de fracción de vapor para la temperatura de 140 [F]. Existe un pequeño volumen de vapor con un valor máximo de fracción de vapor de 0.21, ubicado en la zona de recirculación. El volumen total de vapor que se genera para esta temperatura es de 0.2 mm^3 .

Figura 50

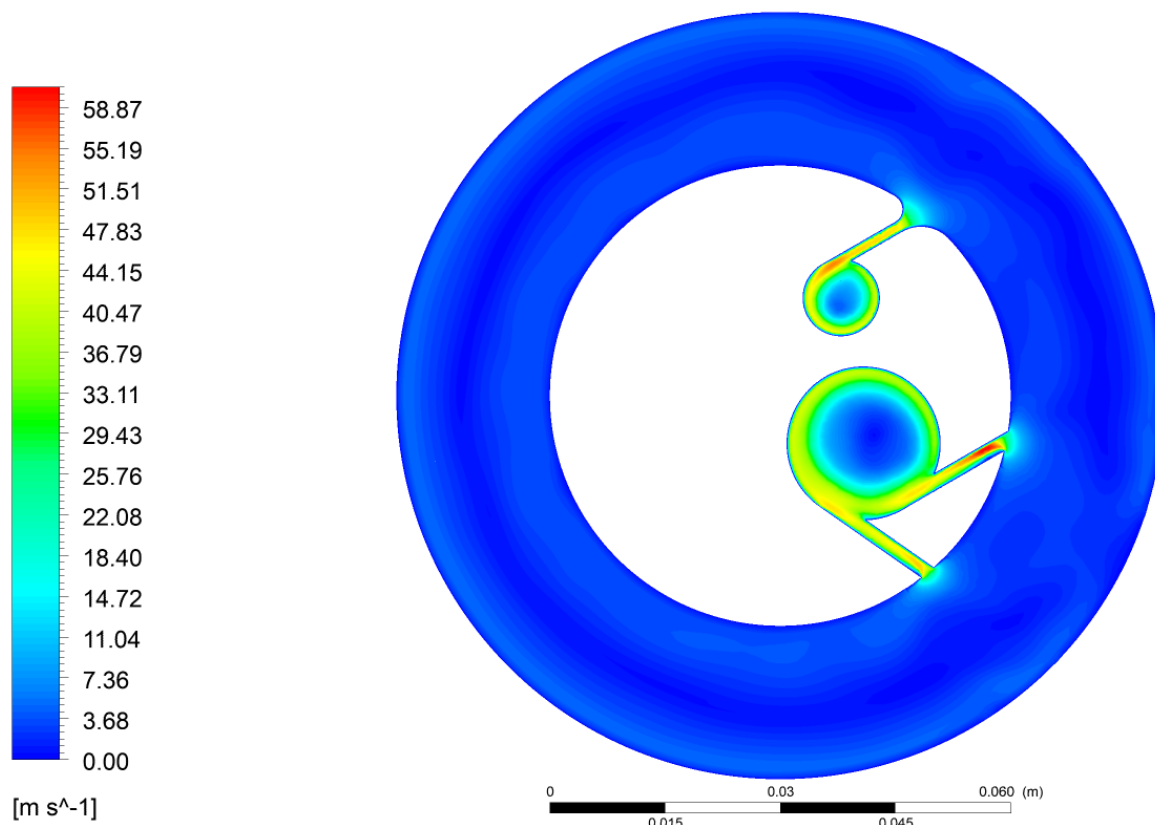
Contorno de fracción de vapor a 140 [F]



En la Figura 51 se puede observar el contorno de velocidad para la temperatura de 180 [F]. El valor máximo de la velocidad es de 58.87 [m/s], el cual se encuentra en los canales donde se obstruye el flujo. A diferencia de 140 y 92 [F], a esta temperatura las velocidades son mayores, esto se debe principalmente a la disminución de la viscosidad del crudo.

Figura 51

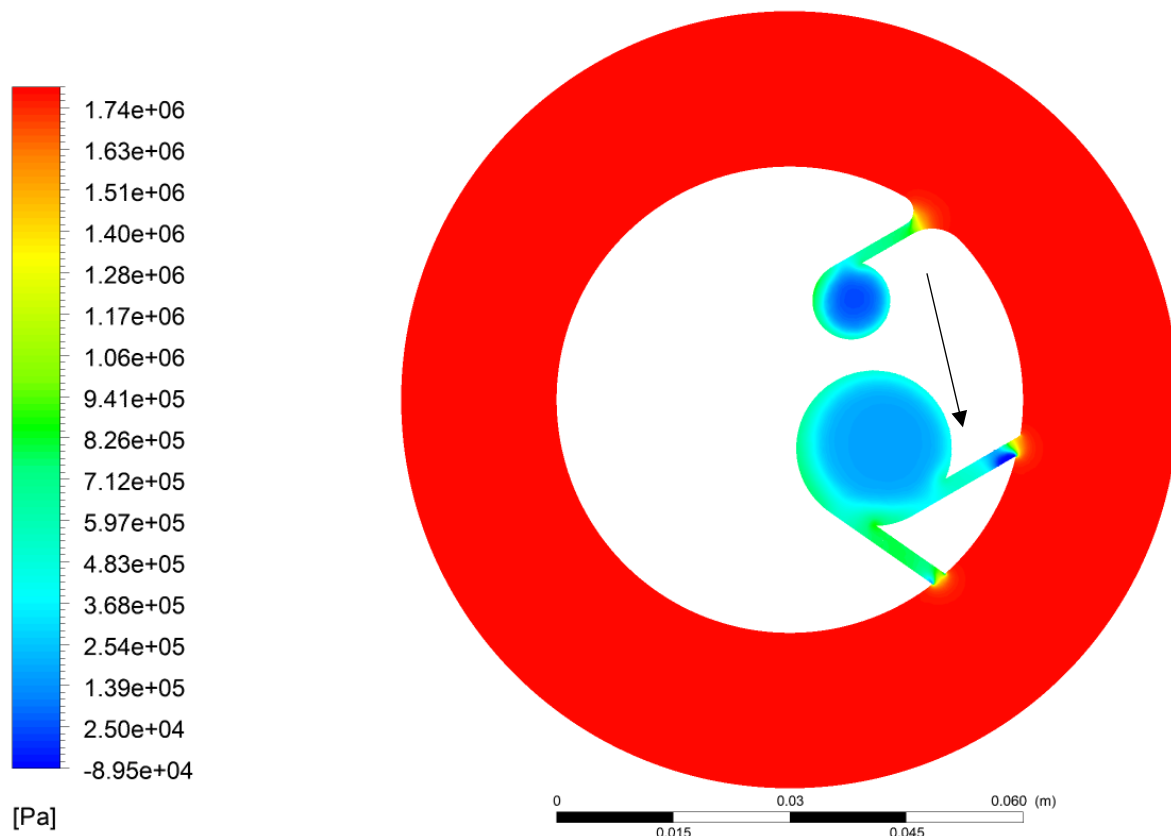
Contorno de velocidad a 180 [F]



En la Figura 52 se puede observar el contorno de presión para la temperatura de 180 [F]. El valor máximo de la presión es de 1.74 [MPa]. La presión mínima se genera en la entrada de uno de los canales que dirige el flujo al cilindro grande, con un valor de -89500 [Pa]. La presión mínima medida a esta temperatura es menor a la de 140 [F], razón por la cual la zona de recirculación es más grande, y en consecuencia se genera una mayor cantidad de vapor.

Figura 52

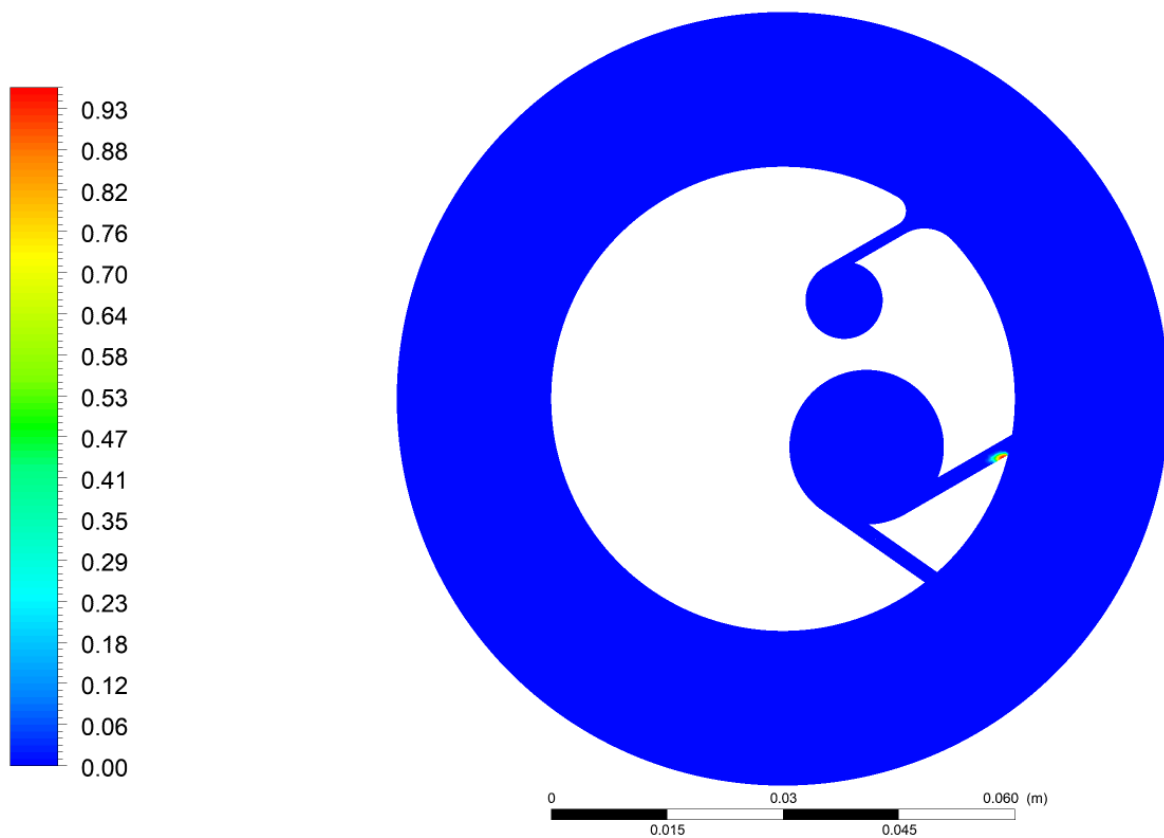
Contorno de presión a 180 [F]



En la Figura 53 se puede observar el contorno de fracción de vapor para la temperatura de 180 [F]. De manera similar a la temperatura de 140 [F] se observa la generación de vapor en la entrada del canal, tan solo que en este caso al generarse una caída de presión más elevada, existe una nube de vapor más grande, que a su vez presenta un valor máximo de fracción de vapor de 0.93 y un total de volumen de vapor en todo el reactor de 6.85 mm^3 .

Figura 53

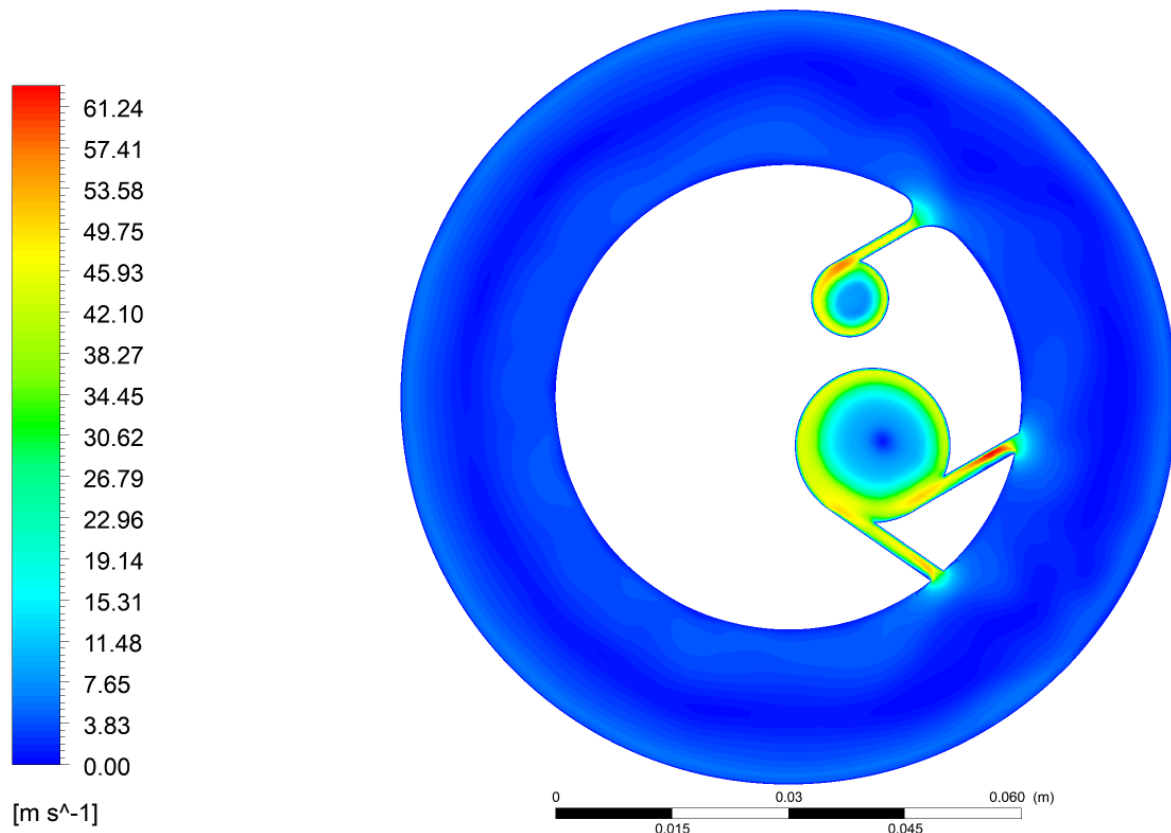
Contorno de fracción de vapor a 180 [F]



En la Figura 54 se puede observar el contorno de velocidad para la temperatura de 250 [F]. El valor máximo de la velocidad es de 61.24 [m/s], el cual se encuentra en los canales donde se obstruye el flujo. Como la temperatura es mayor a las anteriores era de esperarse que los valores de velocidad fuesen mayores debido a la disminución de viscosidad. A diferencia de los contornos de velocidad evaluados anteriormente, en este se observa que en la zona del vórtice hay velocidades mayores.

Figura 54

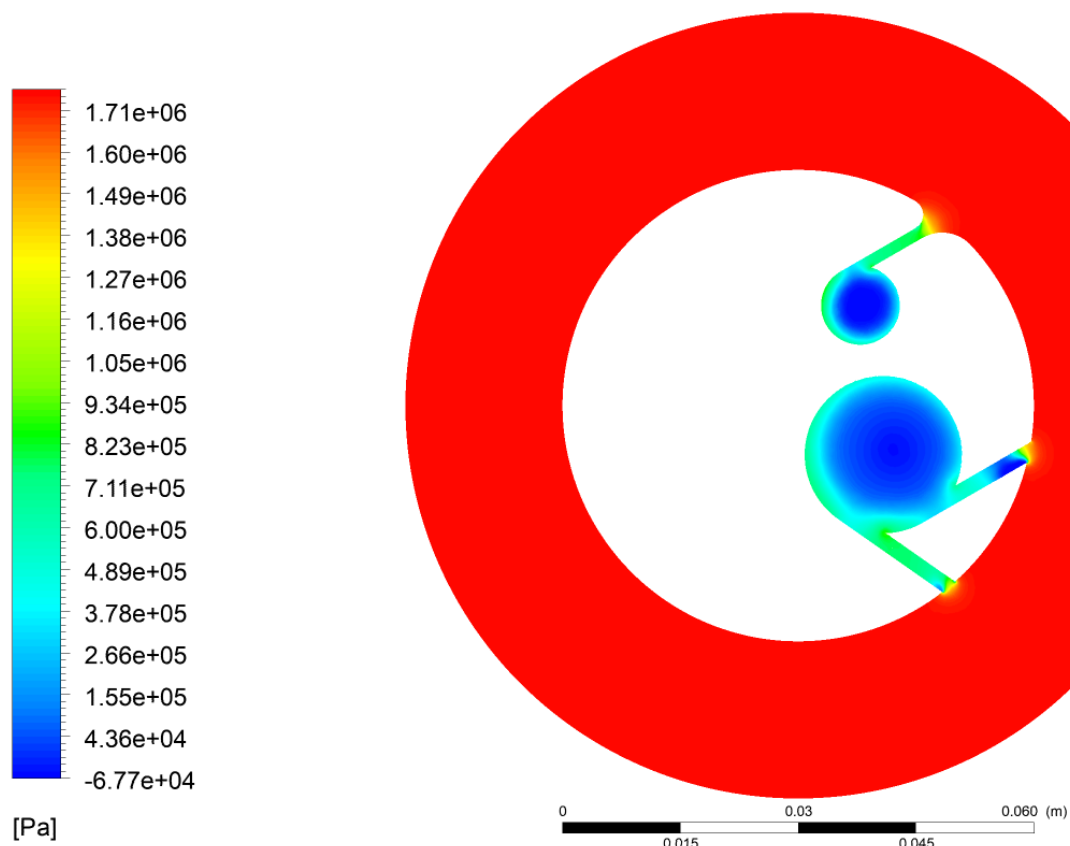
Contorno de velocidad a 250 [F]



En la Figura 55 se puede observar el contorno de presión para la temperatura de 250 [F]. El valor máximo de la presión es de 1.71 [MPa]. Debido a que la velocidad en la zona del vórtice aumentó, se puede ver ahí mismo una disminución de la presión debido a la acción de las fuerzas centrífugas.

Figura 55

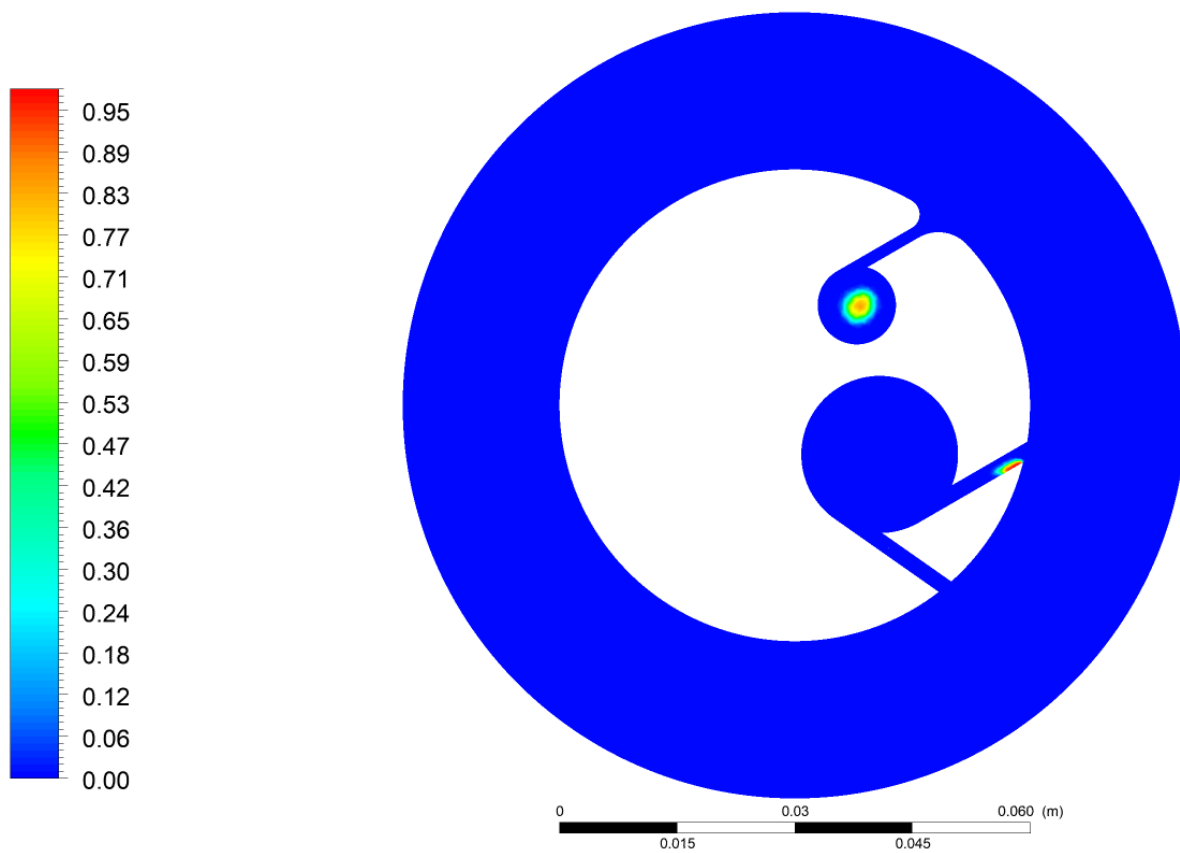
Contorno de presión a 250 [F]



En la Figura 56 se puede observar el contorno de fracción de vapor para la temperatura de 250 [F]. La nube de vapor al ingreso del canal aumenta en volumen con respecto a temperaturas anteriores, producto de un aumento en la caída de presión debido a la reducción de la viscosidad. El valor máximo de fracción de vapor es de 0.95, igual a la temperatura de 180 [F]. El valor total de volumen de vapor en el reactor de 162.6 mm^3 .

Figura 56

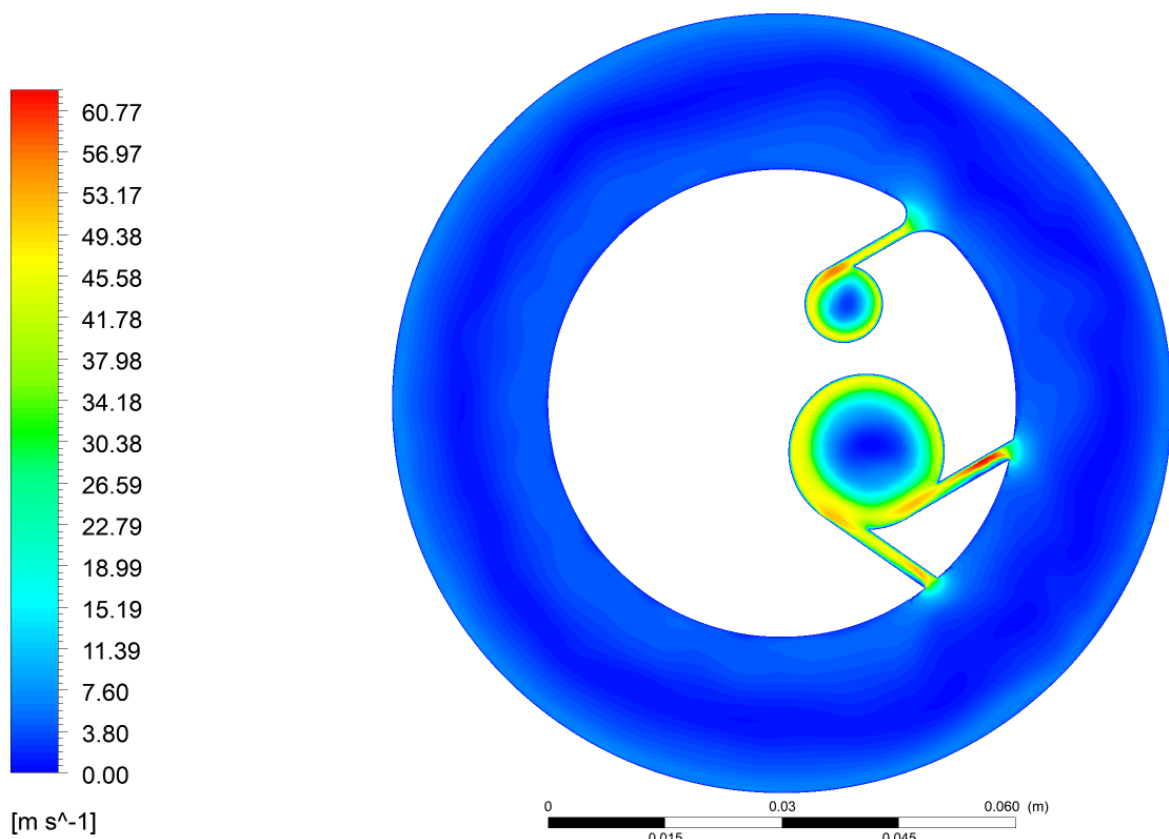
Contorno de fracción de vapor a 250 [F]



En la Figura 57 se puede observar el contorno de velocidad para la temperatura de 350 [F]. El valor máximo de la velocidad es de 60.77 [m/s], el cual se encuentra en los canales donde se obstruye el flujo. En esta gráfica de contorno se puede determinar que la distribución de velocidades en las zonas de los vórtices es diferente. En comparación a los demás contornos de velocidades en las zonas de los vórtices es diferente. En comparación a los demás contornos de velocidad se puede apreciar un aumento de la velocidad en las periferias y una disminución en el centro, lo que se ve reflejado en generación de vapor en el centro de este.

Figura 57

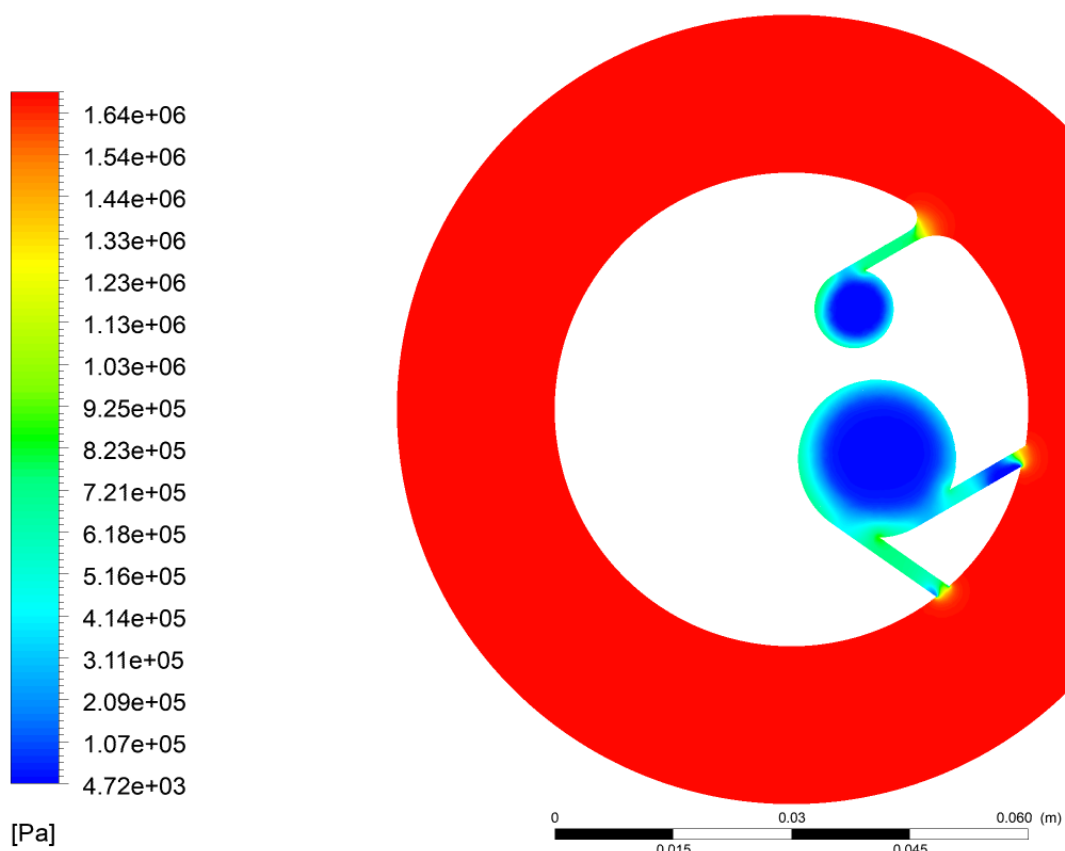
Contorno de velocidad a 350 [F]



En la Figura 58 se puede observar el contorno de presión para la temperatura de 350 [F]. El valor máximo de la presión es de 1.64 [MPa]. A diferencia del contorno de presión a 250 [F], en este se observan menores presiones en la zona central del vórtice, llegando a ser menores que la presión de vapor, ocasionando que se forme vapor en el núcleo del vórtice.

Figura 58

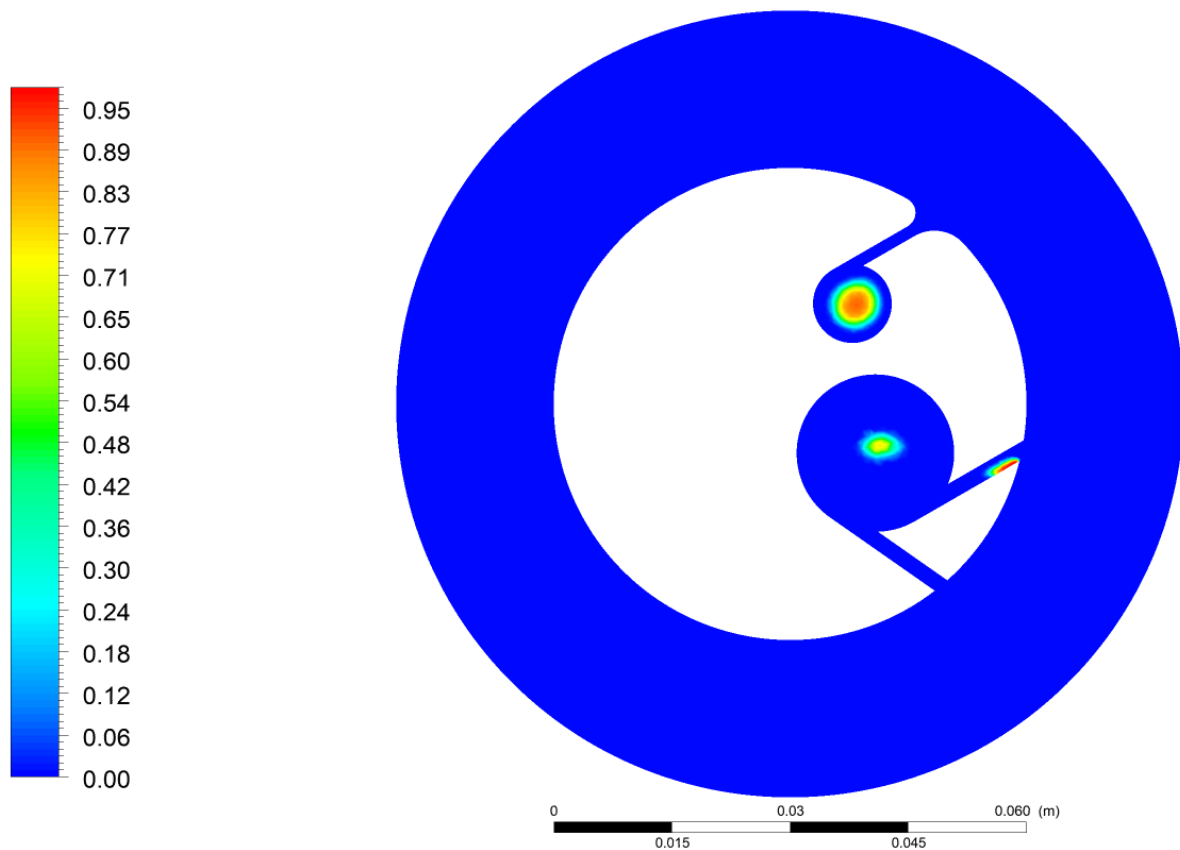
Contorno de presión a 350 [F]



En la Figura 59 se puede observar el contorno de fracción de vapor para la temperatura de 350 [F]. Se percibe una disminución del tamaño de la nube de vapor al ingreso del canal y una baja del valor máximo de fracción de vapor a 0.95, manteniéndose igual que en 250 [F]. Sin embargo, a diferencia de las temperaturas anteriores, existe vapor en la zona central del vortex, debido a la caída de presión por la variación de la velocidad entre la periferia de los cilindros y el centro del mismo. Debido a que en esta nueva zona se genera el vapor, el volumen total de vapor en el reactor es 1507.5 mm³.

Figura 59

Contorno de fracción de vapor a 350 [F]



En la Figura 60 se puede observar la isosuperficie de fracción de vapor para un valor de 0.5 a 350 [F]. El incremento en el volumen de vapor generado se debe principalmente a la caída de presión producida a lo largo del vórtice del cilindro de mayor diámetro.

Figura 60

Isosuperficie de fracción de vapor de 0.5 a 350 [F]

