

Estudio de la Separación de Fases del Gas Natural a Alta Presión Usando Dinámica de Fluidos
Computacional (CFD)

Natalia Prieto Jiménez, MSc.

Tesis presentada para optar al título de Doctora en Ingeniería Química

Director

Arlex Chaves Guerrero

Doctorado en Ingeniería Química

Co-Director

Carlos Eduardo García Sanchez

Doctorado en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2019

Para Sara!

Agradecimientos

Para una ingeniera química recién ascendida al estatus de *mamá* y varios años trabajando en industria, volver a las aulas y a los libros parecería una tarea imposible, pero aquí estamos al final de este camino, que no es otra cosa que el comienzo de una entramada red de futuros planes y metas por alcanzar. El sueño no acabó, solo evolucionó en otro mucho más ambicioso. Por eso, esta tesis la dedico a todos los que creyeron en mi éxito; y a los que no creyeron también, ellos me impulsaron a desafiar mis límites.

Agradezco a Dios, único motor divino en mi vida, quien me lleva de la mano. Es Él quien no me permite fracasar.

A mi esposo, Germán González Silva quien sufrió y soportó con paciencia todas las espinas, la distancia, las divergencias y el tiempo de calidad que dejé de pasar con él y Sarita para hacer la investigación que ahora está dando frutos... El merito de esta tesis también es tuyo.

A mis papás y mis hermanos, cuyo amor y apoyo es totalmente incondicional.

A mi director Arlex Chaves, por estar siempre de mi lado durante todo este tiempo.

A mis evaluadores, especialmente a Ricardo Rezende, quien abrió mis ojos hacia nuevos paradigmas del flujo multifásico.

Al Profesor Emilio Paladino y todos los integrantes del SINMEC por recibirme y acogerme en su seno como una colega más.

A los integrantes del GIEMA y a la escuela de Ingeniería mecánica por prestarme sus instalaciones en un momento crucial de la tesis.

Al MSc. Oscar Fabio Salazar por todas las discusiones acerca de separadores gravitacionales, me dieron interesantes puntos de vista acerca de mi investigación.

A COLCIENCIAS y su convocatoria 647 de 2014 por proporcionarme los recursos financieros necesarios para el desarrollo de esta investigación.

A la escuela de Ingeniería Química, la Universidad Industrial de Santander y todas las personas que de una u otra forma cruzaron su camino con el mio.

GRACIAS... TOTALES!!

Tabla de Contenido

Introducción	44
1. Caracterización del gas natural	53
1.1. Ecuaciones cúbicas de estado	53
1.1.1. Reglas de mezcla para las ecuaciones cúbicas de estado	54
1.2. Aproximaciones basadas en multi-fluidos	59
1.2.1. Reglas de mezcla	62
1.3. Mezclas de gas natural y curvas de equilibrio	63
1.3.1. Selección de la mezcla a utilizar	66
2. Comportamiento molecular del gas natural	72
2.1. Formación de una gota de líquido	72
2.1.1. Supersaturación	73
2.1.2. Nucleación homogénea	75
2.1.2.1. Modelo matemático	78
2.2. Crecimiento de gota	86
2.2.1. Modelo de crecimiento de Young	88
2.3. Nucleación homogénea y crecimiento de una gota de gas natural	92
2.3.1. Equilibrio del sistema	95

2.3.2. Detección de núcleo y energía libre de Gibbs	96
2.3.3. Crecimiento de gota	97
3. Estado del Arte	99
3.1. Separación de fases	99
3.2. Separadores gravitacionales	99
3.2.1. Teoría de asentamiento de gota	101
3.2.2. Tiempo de residencia de líquido	105
3.2.3. Dimensionamiento de separadores gravitacionales	106
3.3. Accesorios internos	108
3.3.1. Desviadores de entrada	108
3.3.2. Eliminadores de niebla (<i>demister</i>)	109
3.3.3. Ciclones de flujo axial	110
3.4. Separadores centrífugos	111
3.5. Dificultades operativas	114
3.6. Simulación numérica	115
3.6.1. CFD aplicado a la separación de fases	115
4. Modelamiento Matemático y Numérico	123
4.1. Abordaje Euleriano y Lagrangiano	123
4.1.1. Metodología de los volúmenes de control	125
4.1.2. Promediación	128

4.1.3. Ecuaciones locales de balance	130
4.1.4. Ecuaciones promediadas	132
4.1.5. Variables ponderadas	135
4.1.6. Modelo heterogéneo: <i>Two-Fluid</i>	144
4.1.7. Modelado de la densidad de fuerza interfacial	144
4.1.7.1. Fuerza de arrastre	146
4.1.7.2. Fuerza de dispersión turbulenta	149
4.2. Modelo de turbulencia	154
4.2.1. <i>Shear Stress Transport – SST Model</i>	155
4.3. Fase dispersa	159
4.4. Modelo de película lagrangiana en la pared	162
4.4.1. Colisión y coalescencia de las gotas	170
4.5. Modelo de medio poroso (PMM)	171
4.5.1. Cantidad de movimiento	172
4.5.2. Energía	173
4.6. Detección de vórtices dentro del GLCC	174
4.7. Modelo numérico	177
4.7.1. Acoplamiento Presión–Velocidad	177
4.7.2. Método de Volúmenes Finitos	179
4.7.3. Linealización del término fuente	181
4.7.4. Discretización espacial	182

SEPARACIÓN DE FASES A ALTA PRESIÓN USANDO CFD	10
4.7.4.1. <i>Upwind</i> de primer orden	182
4.7.4.2. <i>Upwind</i> de segundo orden	183
4.7.5. Discretización temporal	184
4.7.5.1. Integración implícita en el tiempo	185
4.7.5.2. Integración explícita en el tiempo	185
5. Evaluación de eliminadores de niebla para separación a alta presión	186
5.1. Eliminadores de niebla tipo <i>vane pack</i>	187
5.1.1. Modelo computacional	190
5.1.1.1. Geometría	190
5.1.1.2. Condiciones termodinámicas y propiedades de los fluidos	190
5.1.1.3. Condiciones de frontera	191
5.1.1.4. Implementación del modelo	192
5.1.2. Resultados	195
5.1.2.1. Independencia numérica de la malla	196
5.1.2.2. Validación del modelo	199
5.1.2.3. Efecto de la condición de frontera de película en la pared	202
5.1.2.4. Separación gas-líquido a alta presión	204
5.2. Eliminadores de niebla tipo <i>wire mesh</i>	212
5.2.1. Modelo computacional	217
5.2.1.1. Fluidos y condiciones de frontera	218

5.2.1.2. Modelo matemático y numérico	220
5.2.2. Resultados	220
6. Separación gravitacional	225
6.1. Modelo computacional	227
6.2. Resultados	228
6.2.1. Independencia numérica de la malla	228
6.2.2. Validación de modelos	231
6.2.3. Separación de fases a alta presión	236
6.2.3.1. Caída de presión	238
6.2.3.2. Velocidad	239
6.2.3.3. Fracción volumétrica	244
7. Separación centrífuga	251
7.1. Modelo computacional	253
7.2. Resultados	256
7.2.1. Independencia numérica de la malla	256
7.2.2. Validación de modelos	257
7.2.3. Selección del ángulo de entrada	258
7.2.4. Aplicación a campos menores	264
7.2.4.1. Fuerza de remolino (<i>Swirling strength</i>)	265
7.2.4.2. Caída de presión	276

SEPARACIÓN DE FASES A ALTA PRESIÓN USANDO CFD	12
7.2.4.3. Fracción volumétrica de líquido	277
8. Conclusiones y Trabajos Futuros	282
8.1. Conclusiones	282
8.2. Trabajos futuros	289
Referencias Bibliográficas	291
Apéndices	319

Lista de Figuras

Figura 1.	Matriz de consumo energético primario a nivel mundial, cierre del cuarto trimestre de 2018 (British, 2018).	45
Figura 2.	Problemas generados en una planta de tratamiento de gas natural por causa del arrastre de líquido	47
Figura 3.	Escalas de la separación de fases del gas natural estudiadas en la presente investigación	50
Figura 4.	Reglas de mezcla para cada una de las posibles mezclas binarias: 1. Funciones generadoras binarias específicas; 2. Función generadora generalizada para alcanos importantes; 3. Funciones reductoras ajustadas, sin función generadora; 4. Reglas de mezcla lineales, sin ajuste y 5. Reglas de mezcla de Lorentz–Berthelot, sin ajuste (Kunz and Wagner, 2012)	63
Figura 5.	Puntos experimentales Valiollahi et al. (2016) y valores calculados del punto a) cricondentérmico y b) criconderbárico para cada mezcla de la Tabla 5	65
Figura 6.	Comparación de las curvas de equilibrio calculadas con los datos experimentales de (Jarne et al., 2004; Mørch et al., 2006; Avila et al., 2002)	70
Figura 7.	Curva de equilibrio seleccionada para el estudio de la separación de fases del gas natural incluyendo los puntos de operación	71

- Figura 8. Etapas para la formación de una gota de condensado de gas natural: **I**) Supersaturación Fuentes-Osorio et al. (2018), **II**) Nucleación homogénea y **III**) Crecimiento de gota 73
- Figura 9. *Diagrama esquemático de los movimientos moleculares incluidos en el método de Monte Carlo (Fuentes-Osorio et al., 2018)* 84
- Figura 10. Mecanismos de transferencia de masa y energía para el crecimiento de gota basados en el número de *Knudsen* (Torres, 2016; Luitjen, 1998) 87
- Figura 11. Mecanismos de transferencia de masa y energía para el crecimiento de gota basados en el número de *Knudsen* (Torres, 2016; Luitjen, 1998) 88
- Figura 12. Diagrama esquemático del modelo matemático utilizado para el cálculo de la energía total del sistema 94
- Figura 13. Organización de las moléculas de gas natural antes y después del equilibrio 95
- Figura 14. Barrera de energía libre de Gibbs adimensional en función del tamaño de núcleo formado 96
- Figura 15. Resultado del crecimiento de gota en función del tiempo para $P = 7\text{MPa}$ y $T = 260\text{K}$ 97
- Figura 16. Diagrama esquemático de la configuración típica de los equipos de separación gravitacional: (*Izq.*) horizontal y (*Der.*) vertical (ExxonMobil, 1999) 101
- Figura 17. Balance de fuerzas de una gota fluyendo a través de un gas (?) 102
- Figura 18. Suposición de flujo pistón utilizado por Grødal et al. (1999) 107

- Figura 19. Tipos de desviador de entrada para separadores gravitacionales multifase: a) Sin desviador b) Plato divisor c) Tubo invertido d) Tubo perforado e) Cabeza cóncava f) placas paralelas (vane) g) Ciclón (Bothamley et al., 2013) 109
- Figura 20. Eliminadores de niebla adaptables a separadores gravitacionales multifase. (I), (II) Wire mesh. (III), (IV) Vane pack (Sulzer, 2017) 110
- Figura 21. Esquema de los ciclones de flujo axial usados como accesorios en separadores gravitacionales industriales Austrheim et al. (2007) 111
- Figura 22. Diagrama esquemático del separador ciclónico gas-líquido, GLCC Wang et al. (2003) 112
- Figura 23. Algoritmo de obtención del modelo matemático sugerido por Enwald et al. (1996) (Paladino, 2005) 125
- Figura 24. Volumen de control de dimensiones $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ que contiene dos fases inmiscibles y separadas por una interfase Rezende et al. (2015) 126
- Figura 25. Mecanismos de salpicadura, cantidad de movimiento, transferencia de calor y masa para la formación de película en la pared (Stanton and Rutland, 1996) 163
- Figura 26. Diagrama esquemático de los regímenes de interacción gota-pared (Stanton and Rutland, 1996) 164
- Figura 27. Incidencia y salpicadura de las gotas de líquido de acuerdo con el modelo de Stanton-Rutland (Stanton and Rutland, 1996) 166

- Figura 28. Diagrama esquemático de los algoritmos de acoplamiento presión–velocidad utilizados en la discretización del modelo matemático 179
- Figura 29. Representación gráfica y notación del método de volúmenes finitos (Prieto, 2011) 181
- Figura 30. Representación geométrica del dominio de solución usado en las simulaciones numéricas 191
- Figura 31. Test de independencia de malla: Distribución de la velocidad axial perpendicular al canal (L1) para todas las mallas evaluadas 198
- Figura 32. Test de independencia de malla: Velocidad en los puntos específicos P1 y P2 en función del número de elementos 198
- Figura 33. Malla computacional (C) generada para las simulaciones numéricas 199
- Figura 34. Comparación entre los datos experimentales obtenidos por Ghetti (2003) y la eficiencia de remoción de gotas calculada usando los modelos de turbulencia RSTM (Estakhrsar and Rafee, 2016) y $k - \omega$ SST con $C_L = 0,05$ a diferentes velocidades de gas: **(a)** $u_g = 2m/s$ **(b)** $u_g = 3m/s$ **(c)** $u_g = 4m/s$ **(d)** $u_g = 5m/s$ 201
- Figura 35. Efecto de la inclusión del modelo de formación de película Lagrangiana en función de la velocidad del gas y presión de operación: (a) $u_g = 2m/s$ sin formación de película (b) $u_g = 5m/s$ sin formación de película (c) $u_g = 2m/s$ con modelo de película (d) $u_g = 5m/s$ con modelo de película 203
- Figura 36. Altura final que alcanzan las gotas de líquido antes de entrar en contacto con las paredes del vane pack sin la condición de frontera de formación de película 204

- Figura 37. Eficiencia de separación de gotas en función de la presión de operación (a) sin y (b) con la condición de frontera de formación de película 205
- Figura 38. Caída de presión calculada en función de la velocidad de gas a la entrada (a) sin y (b) con la condición de frontera de formación de película 207
- Figura 39. Altura promedio de la película de líquido h_0 en la (a) pared izquierda y la (b) pared derecha; para diferentes velocidades de gas y presiones de operación 208
- Figura 40. Altura de la película de líquido h_0 en la pared izquierda para condiciones de alta presión (7 MPa) a (a) $u_g = 2\text{m/s}$ (b) $u_g = 5\text{m/s}$; y en la pared derecha a (c) $u_g = 2\text{m/s}$ (d) $u_g = 5\text{m/s}$ 209
- Figura 41. Vectores del campo de velocidad del gas para $u_g = 2\text{m/s}$ y $P_{op} = 4\text{MPa}$ incluyendo la formación de película líquida en la pared 210
- Figura 42. Fracción volumétrica de la fase discreta, incluyendo la formación de película en la pared a velocidad del gas (a) $u_g = 2\text{ m/s}$ y (b) $u_g = 5\text{ m/s}$; para (i) 2 MPa (ii) 4 MPa y (iii) 7 MPa 211
- Figura 43. Estructura geométrica real de los eliminadores de niebla tipo malla tejida: a) aleatoria b) estratificada y c) enrollada (Helsør and Svendsen, 2007) 214
- Figura 44. Representación numéricamente equivalente del eliminador de niebla tipo wire mesh como un medio poroso 216
- Figura 45. Modelo en CAD del eliminador de niebla tipo *wire mesh* y simplificación a medio poroso de FLUENTTM 218
- Figura 46. Malla computacional del eliminador de niebla tipo wire mesh 219

- Figura 47. Perfil de presión en las regiones continua y porosa del dispositivo a diferentes velocidades de entrada del gas 222
- Figura 48. Perfiles longitudinal y radial de la fracción volumétrica de líquido: $u_g = 2$ m/s, $P_{op} = 7$ MPa, $T = 260$ K y $d_{gota} = 4,18$ micrómetros 223
- Figura 49. *Fracción volumétrica de líquido a diferentes velocidades de entrada del gas* 224
- Figura 50. Geometría propuesta del separador gravitacional bifásico, adaptada de Austrheim et al. (2008). **A** Divisor de entrada **B** Eliminador de niebla tipo vane pack **C** AFC 226
- Figura 51. (Izq.) Perfil de la energía cinética turbulenta del gas monofásico en función del número de elementos de malla y (Der.) detalle de los AFC de la malla E 230
- Figura 52. Malla C de la Tabla 27 transformada a poliedros. Detalles del eliminador de niebla y boquilla de entrada de la mezcla 231
- Figura 53. Curvas de equilibrio de la mezcla de gas natural utilizada en la validación de los modelos matemáticos 234
- Figura 54. Comparación de los experimentos (línea punteada) realizados por Austrheim et al. (2008) para la eficiencia total de separación con las simulaciones realizadas en ANSYS-FLUENT (línea continua) 237
- Figura 55. Caída de Presión dentro del separador gravitacional 240
- Figura 56. (Izq.) Contorno de velocidad del gas. (Der.) Vectores de velocidad mostrando el recorrido del gas 242
- Figura 57. Isosuperficies de velocidad medidos a 0,2; 0,5; 0,7; 1; 1,5 y 2 m/s 243

Figura 58.	Evolución con el tiempo de residencia de la fracción volumétrica de líquido	245
Figura 59.	Detalle de los registros temporales de fracción volumétrica de líquido en los accesorios del separador gravitacional	246
Figura 60.	Detalle de las regiones del separador donde se concentra el líquido medidas a 2 min de tiempo real	249
Figura 61.	Evolución temporal de los perfiles de fracción volumétrica en a) el fondo del separador y b) el fondo de los afc	250
Figura 62.	a) Dimensiones del GLCC tomadas de Hreiz et al. (2014) y b) Geometrías propuestas por Cornejo Caceres et al. (2019)	254
Figura 63.	Test de independencia de malla del GLCC	257
Figura 64.	Velocidad tangencial y radial. Comparación entre las simulaciones numéricas y los datos experimentales proporcionados por Erdal (2001)	258
Figura 65.	Líneas de corriente coloreadas con la velocidad de la fase continua para cada una de las geometrías propuestas (Cornejo Caceres et al., 2019)	259
Figura 66.	swirling strength en función de la posición radial para cada una de las geometrías propuestas (Cornejo Caceres et al., 2019)	260
Figura 67.	Caída de presión dentro del GLCC de la mezcla aire-agua para las tres geometrías propuestas (Cornejo Caceres et al., 2019)	261
Figura 68.	Campos de fracción volumétrica y flujo másico de la fase líquida	262

Figura 69.	Campos de fracción volumétrica y flujo másico (izq.) y perfil de fracción volumétrica de agua en función de la posición radial (der.)	263
Figura 70.	Dimensiones y puntos en los que se midieron las variables de respuesta	265
Figura 71.	Campos de fuerza de remolino [s^{-1}] a 2 MPa para flujos de 1, 0,5 y 0,2 MPCD	269
Figura 72.	Perfiles de fuerza de remolino a 2 MPa, medidos a las alturas de a) 0,65 m b) 1 m c) 1,2 m y d) 1,3 m	270
Figura 73.	Campos de fuerza de remolino [s^{-1}] a 4 MPa para flujos de 1, 0,5 y 0,2 MPCD	271
Figura 74.	Perfiles de fuerza de remolino a 4 MPa, medidos a las alturas de a) 0,65 m b) 1 m c) 1,2 m y d) 1,3 m	272
Figura 75.	Campos de fuerza de remolino [s^{-1}] a 7 MPa para flujos de 1, 0,5 y 0,2 MPCD	273
Figura 76.	Perfiles de fuerza de remolino a 7 MPa, medidos a las alturas de a) 0,65 m b) 1 m c) 1,2 m y d) 1,3 m	274
Figura 77.	Lineas de corriente mostrando la velocidad del gas a 2, 4 y 7 MPa	275
Figura 78.	Caída de presión en función del flujo molar de la mezcla para cada una de las presiones de operación del separador	276
Figura 79.	Campos y perfiles de presión para las nueve simulaciones numéricas realizadas en la separación centrífuga de las fases del gas natural	279
Figura 80.	Campos axiales y radiales de fracción volumétrica de líquido a 2 MPa así como perfiles de fracción volumétrica medidos a 0,65; 1; 1,2 y 1,3 m de altura. a) 1 MPCD b) 0,5 MPCD c) 0,2 MPCD	280

- Figura 81. Campos axiales y radiales de fracción volumétrica de líquido a 7 MPa así como perfiles de fracción volumétrica medidos a 0,65; 1; 1,2 y 1,3 m de altura. **a)** 1 MPCD
b) 0,5 MPCD **c)** 0,2 MPCD 281
- Figura 82. Algoritmo general para desarrollar tests de independencia numérica de las mallas 320
- Figura 83. Diagrama esquemático e intervalo del parámetro de oblicuidad 323
- Figura 84. Diagrama esquemático e intervalo del parámetro de ortogonalidad 324
- Figura 85. Plano del separador gravitacional usado en el Capítulo 6, escala 1:10 y dimensiones en mm 326
- Figura 86. Plano del separador vertical basado en el diseño propuesto para alta presión, escala 1:9 y dimensiones en mm 327
- Figura 87. Plano del separador horizontal basado en el diseño propuesto para alta presión, escala 1:12 y dimensiones en mm 328
- Figura 88. Algoritmo general para el cálculo de la formación de una gota de gas natural utilizando simulación molecular y el modelo de Young (1993); Fuentes-Osorio et al. (2018) 329

Lista de Tablas

Tabla 2.	Especificaciones de calidad del gas natural en EEUU y Colombia (FERC, 2017; CREG, 2007)	48
Tabla 3.	Parámetros de las ecuaciones de estado cúbicas (Poiling et al., 2004)	55
Tabla 4.	Componentes gas natural con sus respectivas EOS del componente puro (Kunz and Wagner, 2012)	68
Tabla 5.	Porcentaje molar de las mezclas de gas natural seleccionadas para la validación de las ecuaciones de estado SRK, PR y GERG2008 (Valiollahi et al., 2016)	69
Tabla 6.	Error absoluto de los puntos cricondentérmicos y criconderbáricos usando las ecuaciones de estado PR, SRK y GERG2008; comparado con Valiollahi et al. (2016)	69
Tabla 7.	Propiedades de la mezcla utilizada en las simulaciones numéricas	71
Tabla 8.	Parámetros de potencial torsional de la ecuación (40) aplicable a moléculas $C - CH_2 - CH_2 - C$, alcanos lineales del butano en adelante (Ungerer et al., 2005)	81
Tabla 9.	Caracterización de la mezcla de gas natural y condiciones de operación del sistema para la nucleación y crecimiento de gota (Mørch et al., 2006)	93
Tabla 10.	Características de software y hardware, así como el tiempo real de simulación	94
Tabla 11.	Constante de Souders and Brown (1934) y su dependencia con la presión de operación sugerida por Svrcek and Monnery (1993)	107

Tabla 12.	Relación L/D en función de la presión de operación sugerida por Walas (1990) para separadores multifase	107
Tabla 13.	Límites de diseño para desviadores de entrada	109
Tabla 14.	<i>Variables de las ecuaciones de conservación (Drew, 1992)</i>	132
Tabla 15.	Dimensiones del eliminador de niebla tipo vane pack (Estakhrsar and Rafee, 2013)	190
Tabla 16.	Propiedades de los fluidos y condiciones de operación para la validación de los modelos del eliminador de niebla tipo vane pack	193
Tabla 17.	Condiciones de operación para las simulaciones a alta presión en el eliminador de niebla tipo vane pack	194
Tabla 18.	Condiciones numéricas, software y hardware utilizado en las simulaciones compu- tacionales	195
Tabla 19.	<i>Factores de relajación para las simulaciones numéricas del eliminador de nie- bla tipo vane pack</i>	196
Tabla 20.	Número de elementos de las mallas utilizadas	197
Tabla 21.	Condiciones de simulación para el test de independencia de malla	197
Tabla 22.	Parámetros de calidad de la malla seleccionada para las simulaciones numéricas del eliminador de niebla	200
Tabla 23.	Propiedades físicas y geométricas de varios eliminadores de niebla tipo malla tejida (Helsør and Svendsen, 2007)	212

Tabla 24.	Parámetros de calidad de la malla realizada para simular el modelo de medio poroso	219
Tabla 25.	Condiciones de simulación para el eliminador de niebla tipo wire mesh	221
Tabla 26.	Factores de relajación para las simulaciones numéricas del eliminador de niebla tipo wire mesh	222
Tabla 27.	Características de las mallas construidas para el separador gravitacional	229
Tabla 28.	Condiciones de simulación para el test de independencia de malla	229
Tabla 29.	Condiciones de simulación para la validación de los modelos matemáticos del separador gravitacional	233
Tabla 30.	Propiedades de la mezcla propuesta por Austrheim et al. (2008) y utilizada en las simulaciones de validación	235
Tabla 31.	Matriz de simulaciones para la validación de modelos	236
Tabla 32.	Condiciones de simulación para la separación gravitacional de gas natural a alta presión	238
Tabla 33.	Factores de relajación para las simulaciones numéricas del separador gravitacional a alta presión	239
Tabla 34.	Condiciones de frontera para las simulaciones de la mezcla aire-agua	255
Tabla 35.	Número de elementos utilizados en en el test de independencia de malla	256
Tabla 36.	Condiciones de frontera a la entrada para las simulaciones del separador GLCC aplicado a campos menores	265

Tabla 37. Condiciones de simulación para la separación centrífuga de gas natural a diferentes presiones

266

Tabla 38. Factores de relajación para las simulaciones numéricas del GLCC

267

Lista de Apéndices

	pág.
Apéndice A. Test de independencia numérica de las mallas	319
Apéndice B. Especificación de los separadores gravitacionales	325
Apéndice C. Algoritmo utilizado para el cálculo de la formación de gota	329
Apéndice D. Producción intelectual	330

Glosario

Mayúsculas

A	—	Energía libre de Helmholtz
A^o	—	Energía libre de Helmholtz como gas ideal
A_p	—	Área proyectada de la gota medida en dirección perpendicular al flujo
A^r	—	Energía libre de Helmholtz residual
Bo	—	Número adimensional de Bond
C_D	—	Coefficiente de arrastre
C_L	—	Coefficiente <i>lift</i> /Constante del modelo <i>eddy lifetime</i>
C_{MV}	—	Coefficiente de masa virtual
C_p	—	Capacidad calorífica
C_{pg}	—	Capacidad calorífica del gas
C_{pv}	—	Capacidad calorífica del vapor
D	—	Coefficiente de difusión

D_m	—	Coeficiente de difusión de la mezcla gas/vapor
\vec{D}	—	Tensor de tasa de deformación
$DC_{k\omega}$	—	Término de difusión cruzada del modelo de turbulencia SST
E	—	Energía/Energía de impacto
\dot{E}	—	Flujo total de calor por conducción y convección
Eo	—	Número adimensional de Eötvös
F_1	—	Función de mezcla–modelo de turbulencia
F_E	—	Media conjunta o de realizaciones
F_T	—	Media temporal o de Reynolds
F_V	—	Media volumétrica
\vec{F}_b	—	Fuerza de flotación
\vec{F}_d	—	Fuerza de arrastre
\vec{F}_g	—	Fuerza de gravedad
H	—	Entalpía específica
\vec{I}	—	Tensor identidad
\vec{J}	—	Flux difusivo de la propiedad conservada ϕ
K	—	Conductividad térmica/Factor empírico de Souders-Brown

Kn	—	Número de Knudsen
L_e	—	Escala de longitud de los remolinos (<i>eddies</i>)
M	—	Número adimensional de Morton
\dot{M}	—	Flujo másico de los componentes condensables
M_α	—	Masa de la fase α en el interior del volumen V
N	—	Número máximo de componentes en la mezcla (EOS)/Número de moléculas
N_i	—	Número de ciclos usados para cada ventana de simulación
N_f	—	Número de fases
P	—	Probabilidad de formación de un núcleo/Presión (EOS)
P_c	—	Presión crítica
P_{cm}	—	Presión pseudo-crítica de la mezcla
Q	—	Intensidad de intercambio calórico
\dot{Q}_{ci}	—	Intensidad de intercambio calórico en la interfase
\dot{Q}_{cgi}	—	Intensidad de intercambio calórico del gas en la interfase
\dot{Q}_{cvi}	—	Intensidad de intercambio calórico del vapor en la interfase
Q_{NPT}	—	Función de partición del colectivo NPT

R	—	Constante Universal de los Gases
R_g	—	Constante específica del gas
R_v	—	Constante específica del vapor
R_α	—	relación entre el volumen de la fase α y V
Re	—	Número de Reynolds
S	—	Entropía específica/Supersaturación
S_{mesh}	—	Superficie específica del <i>wire mesh</i>
S_i^ϕ	—	Fuente o sumidero de ϕ sobre la interfase
T	—	Temperatura/Intervalo de promediación
T_c	—	Temperatura crítica
T_{cm}	—	Temperatura pseudo-crítica de la mezcla
T_d	—	Temperatura de la gota
T_i	—	Temperatura en la interfase
T_r	—	Temperatura reducida
T_∞	—	Temperatura en la región continua
\vec{T}	—	Tensor tensión
\vec{T}_α^{Re}	—	Tensor de Reynolds de la fase α

U	—	Energía interna
U_{α}^{Re}	—	Fluctuación de la Energía interna de la fase α
U^{gi}	—	Energía interna de la mezcla considerando condiciones de gas ideal
V	—	Volumen
V_{cm}	—	Volumen pseudo-crítico de la mezcla
V_{α}	—	Volumen de la fase α en el interior del volumen V
We_c	—	Número de Weber colisional
We_{cr}	—	Número de Weber crítico
Z	—	Factor de compresibilidad

Minúsculas

a	—	Parámetro de atracción de las EOS cúbicas
a_i	—	parámetros de potencial torsional
b	—	Volumen molar efectivo (Parámetro EOS cúbicas)
d_m	—	Probabilidad de observar un evento dentro del conjunto de todos los posibles eventos

d_{wire}	—	Diámetro del alambre
e_n	—	Coefficiente de restitución normal
\vec{e}_i	—	Vector unitario en la dirección i
\vec{e}_i^σ	—	Fuente de energía interfacial
f	—	Fuente o sumidero de la propiedad conservada ϕ /Función de distribución de probabilidad
f_e	—	Factor de ensanchamiento
\vec{g}	—	Fuerza de gravedad
h_0	—	Altura de la película de líquido
k_B	—	Constante de Boltzmann
k_{ij}	—	Parámetro de combinación binaria (reglas de mezcla)
$k_{l,\theta}$	—	Constantes de fuerza
k_m	—	Coefficiente de transferencia de calor por conducción
l	—	Distancia entre átomos
m	—	Masa
m_{mesh}	—	Masa de la malla
\vec{m}_i^σ	—	Fuerza ejercida sobre la interfase debido a la tensión superficial

n	—	Número de moléculas
\vec{n}	—	Vector unitario normal a la interfase
p^l	—	Presión interna de la gota
p^v	—	Presión de vapor
$p_{sat}(T)$	—	Presión de saturación a determinada temperatura
\vec{q}	—	Flux de calor
\vec{q}_α^W	—	Fluctuación de la Energía debida al trabajo de la fase α
\dot{q}	—	Fuente de calor
$r_{d/p}$	—	Radio de la gota/partícula/fracción volumétrica de la fase dispersa
r_i	—	Distancia entre el centro de la gota y la región continua
r_{ij}	—	Separación entre átomos
r_α^*	—	Fracción volumétrica de la fase α
s	—	Entropía
t	—	Tiempo
t_{cross}	—	Tiempo de cruce de los remolinos de la gota
u	—	Parámetro EOS cúbicas/velocidad relativa de una gota con relación al gas

$u_{dis}(ij)$	—	Potencial de fuerzas dispersas
u_{dn}	—	Velocidad de la gota normal a la pared
$u_{LJ}(ij)$	—	Potencial de Lennard-Jones
u_t	—	Velocidad terminal
\vec{v}	—	Vector velocidad
\vec{v}_i	—	Velocidad de la interfase
\vec{x}	—	Sistema de coordenadas externas/Vector de composición molar
y_v	—	Fracción molar en la fase vapor
\tilde{y}_{vi}	—	Fracción molar en la fase vapor en la interfase
$\tilde{y}_{v\infty}$	—	Fracción molar en la fase vapor en la región continua
α_{con}	—	Probabilidad de que una molécula se condense
α_{ev}	—	Probabilidad de que una molécula se evapore
w	—	Parámetro EOS cúbicas

Letras Griegas

Γ_α	—	Flux de la fase α en la interfase
-----------------	---	--

ΔG	—	Energía libre de formación del núcleo
$\Delta\mu$	—	Diferencia de potencial químico
Δx	—	Longitud del volumen de control en la coordenada espacial x
Δy	—	Longitud del volumen de control en la coordenada espacial y
Δz	—	Longitud del volumen de control en la coordenada espacial z
Ψ	—	Ángulo azimutal
Θ_I	—	Ángulo de incidencia de las gotas
Θ_S	—	Ángulo de salpicadura de las gotas
α	—	Forma adimensional de la energía libre de Helmholtz/Fase α
β	—	Coeficiente experimental del modelo de Young Young (1993)/Fase β
δ	—	Densidad reducida de la mezcla
δ_b	—	Espesor de la capa límite
δ_{ij}	—	Delta de <i>Krönecker</i>
ε	—	Porosidad
ε	—	Longitud característica de interacción/Disipación turbulenta
ε_{ij}	—	Parámetro energético

θ	—	Ángulo formado por tres átomos
κ	—	Energía cinética turbulenta
λ	—	Distancia libre molecular promedio
μ	—	Viscosidad
μ_T	—	Viscosidad turbulenta
μ^l	—	Potencial químico en la fase líquida
μ^{sat}	—	Potencial químico de saturación
μ^v	—	Potencial químico en la fase vapor
ν	—	Energía cinética/Viscosidad cinemática
ν_α^{Re}	—	Fluctuación de la Energía cinética de la fase α
ν_T	—	Viscosidad cinemática turbulenta
ρ	—	Masa específica
ρ_α	—	Masa específica de la fase α en el interior del volumen V
$\rho_{eq}(n)$	—	Función de distribución de los núcleos en el equilibrio
ρ^v	—	Densidad del vapor
ρ^m	—	Densidad de la mezcla gas/vapor
ρ_{mat}	—	Densidad del material del alambre

σ	—	Tensión superficial/Número de Prandtl turbulento
σ_{ij}	—	Parámetro de enlace
τ	—	Inverso de la temperatura reducida de la mezcla/Tiempo de relajación de la partícula
τ_e	—	<i>Eddy lifetime</i>
v	—	Volumen de la partícula
ϕ	—	Propiedad extensiva de las fases
φ	—	Ángulo torsional
ϑ_s	—	Velocidad de sedimentación de una partícula
χ_α	—	Función indicadora de la fase α
ω	—	Factor acéntrico de Pitzer
ω_m	—	Factor acéntrico de Pitzer de la mezcla

Abreviaturas

AFC	—	<i>Axial Flow Cyclone</i>
AFE	—	<i>Annular Film Extractor</i>

BBO	—	Basset-Boussinesq-Oseen
BTU	—	<i>British Thermal Unit</i>
CAD	—	<i>Computer Aided Design</i>
CBMC	—	<i>Configurational–Bias Monte Carlo</i>
CDT	—	Centro de Desarrollo Tecnológico del gas
CFD	—	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CREG	—	Comisión de Regulación de Energía y Gas
CricT	—	Punto cricondentérmico
CricP	—	Punto criconderbárico
DM	—	Dinámica Molecular
DRW	—	<i>Discrete Random Walk Model</i>
DPM	—	<i>Discrete Phase Model</i>
EDO	—	Ecuaciones Diferenciales Ordinarias
EDP	—	Ecuaciones Diferenciales Parciales
ECOPETROL	—	Empresa Colombiana de Petróleos
EIA	—	<i>U.S. Energy Information Administration</i>
EOS	—	<i>Equation of State</i>

FERC	—	<i>Federal Energy Regulatory Commission</i>
FLOSS	—	<i>Flow Simulator for Separators</i>
GBTUD	—	Giga BTU por Día/10 ⁹ BTU por Día
GERG	—	<i>Groupe Européen de Recherches Gazières</i>
GLCC	—	<i>Gas-Liquid Cylindrical Cyclone</i>
HHV	—	Máximo poder calorífico bruto
HPE	—	<i>High Pressure Entrainment</i>
HPNE	—	<i>High Pressure No Entrainment</i>
LDA	—	<i>Laser Doppler Anemometry</i>
LDV	—	<i>Laser Doppler Velocimeter</i>
LES	—	<i>Large Eddy Simulation</i>
LHV	—	Mínimo poder calorífico bruto
LP	—	<i>Low Pressure</i>
LWF	—	<i>Lagrangian Wall Film model</i>
MATLAB	—	MATrix LABoratory
MC	—	Método de MonteCarlo
MDF	—	Método de Diferencias Finitas

MEF	—	Método de Elementos Finitos
MPCD	—	Millón de Pies Cúbicos por Día
MVF	—	Método de Volúmenes Finitos
MW	—	<i>Molecular Weight</i>
NASA	—	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
NPT	—	Número de moléculas, Presión y Temperatura
OCDE	—	Organización de Cooperación y Desarrollo Económico
OGP	—	<i>Oil, Gas & Petrochemical</i>
PDA	—	<i>Phase Doppler Analysis</i>
PIV	—	<i>Particle Image Velocimeter</i>
PMM	—	<i>Porous Media Model</i> (Modelo de Medio Poroso)
PR	—	Peng-Robinson
PRESTO	—	<i>PREssure STaggering Option</i>
QUICK	—	<i>Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics</i>
RANS	—	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
RBF	—	<i>Radial Basis Function</i>
RMS	—	<i>root-mean-square</i>

RSTM	—	<i>Reynolds Stress TRansport Model</i>
SD	—	<i>Standard Deviation</i>
SIMPLE	—	<i>Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations</i>
SM	—	Simulación Molecular
SRK	—	Soave-Redlich-Kwong
SST	—	Shear Stress Transport
SQP	—	<i>Sequential Quadratic Programming</i>
TDF	—	Teoría de Densidad Funcional
TNC	—	Teoría de Nucleación Clásica
TraPPE-UA	—	<i>Transferable Potentials for Phase Equilibria ? United Atom</i>
TSF	—	Teoría Semi-Fenomenológica
URANS	—	<i>Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>
USLF	—	<i>Upper Swirling Liquid Film</i>
VDM	—	<i>Visual Dynamic Modeling</i>
VOF	—	<i>Volume of Fluid</i>
VRU	—	<i>Vapor Recovery Unit</i>

Resumen

Título: Estudio de la Separación de Fases del Gas Natural a Alta Presión Usando Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) *

Autor: Natalia Prieto Jiménez **

Palabras Clave: Gas natural, Separación gas-líquido, Dinámica de Fluidos Computacional, Modelos multifase, Nucleación homogénea, Eliminador de niebla, Vane pack, Wire mesh, separador gravitacional vertical, Separador tipo ciclón cilíndrico.

Descripción: Separar las fases del gas natural a alta presión es un proceso complejo, debido que, a medida que la presión de operación aumenta la diferencia de densidades entre las fases disminuye, igual que la tensión superficial, haciendo que las gotas que se formen sean de menor tamaño y fácilmente arrastrables por la fase gaseosa, lo cual dificulta o imposibilita la separación. En esta tesis se realizó el análisis de la teoría de asentamiento de gota, teoría del tiempo de retención y fuerza centrífuga, aplicado a equipos industriales de separación gravitacional y ciclónica. Todas las simulaciones numéricas con CFD fueron validadas con datos experimentales provenientes de la literatura especializada. Fue realizada inicialmente una caracterización termodinámica y molecular del gas natural: en la primera se obtuvo que, a bajas presiones las ecuaciones cúbicas de estado son adecuadas para representar el comportamiento de los fluidos, sin embargo, a medida que la presión de operación aumenta, la ecuación cúbica de Peng-Robinson se aleja del comportamiento real, siendo necesario migrar a una ecuación específica denominada GERG2008. Y en la segunda, fue realizado el cálculo de supersaturación, nucleación homogénea y crecimiento de gota (7 MPa y 260 K), obteniendo un diámetro final en el equilibrio de 4,18 micrómetros. El enfoque Lagrangiano utilizado en las simulaciones numéricas del eliminador de niebla tipo vane pack mostraron, que es necesario adicionar un modelo de formación de película líquida en las paredes del dispositivo a fin de acercarse al comportamiento real del proceso. Los resultados de los equipos de separación utilizando modelos multifase y técnicas de CFD mostraron que, con los equipos actualmente instalados en los campos menores colombianos, no es posible realizar la separación de las fases del gas natural a alta presión (7 MPa). Se recomienda separar a presiones moderadas (3–5 MPa).

* Tesis para optar al título de Doctora en Ingeniería Química

** Facultad de Ingenierías Físico-Químicas, Escuela de Ingeniería Química. Director: Prof. Arlex Chaves Guerrero, Doctorado en Ingeniería Química. Co-Director: Carlos García Sánchez, Doctorado en Ingeniería Química.

Abstract

Title: Study of the Natural Gas Phases Separation at High Pressure Using Computational Fluid Dynamics (CFD) *

Author: Natalia Prieto Jiménez **

Keywords: Natural gas, Gas-liquid separation, Computational Fluid Dynamics, Multiphase models, Homogeneous Nucleation, Demister, Vane pack, Wire mesh, Vertical gravitational separator, Cylindrical cyclone separator.

Description: Separating the phases of the natural gas at high pressure is a complex process, because, as the operating pressure increases the difference in densities between the phases decreases, as does the surface tension, causing the droplets that form to be smaller size and easily entrainment by the gas phase, which makes separation difficult or impossible. In this thesis the analysis of the settling theory, holdup theory and centrifugal force, applied to industrial equipment of gravitational and cyclonic separation was performed. All the numerical simulations with CFD were validated with experimental data from specialized literature. Initially, a thermodynamic and molecular characterization of natural gas was performed. In the first one it was obtained that, at low pressures, the cubic state equations are adequate to represent the behavior of the fluids, however, as the operating pressure increases, the Peng-Robinson cubic equation moves away from the real behavior, being necessary to migrate to a specific equation called GERG2008. In the second, the calculation of supersaturation, homogeneous nucleation and droplet growth (7 MPa and 260 K) was performed, obtaining a final diameter in the equilibrium of 4.18 micrometers. The Lagrangian approach used in the numerical simulations of the vane pack mist eliminator showed that it is necessary to add a liquid film formation model on the device walls in order to get closer to the actual behavior of the process. The results of the separation equipment using multiphase models and CFD techniques showed that, with the equipment currently installed in the Colombian minor fields, it is not possible to separate the phases of the natural gas at high pressure (7 MPa). It is recommended to separate at moderate pressures (3–5 MPa).

* Doctoral Thesis

** Facultad de Ingenierías Físico-Químicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Arlex Chaves Guerrero, Doctorado en Ingeniería Química. Co-Director: Carlos García Sánchez, Doctorado en Ingeniería Química.

Introducción

El gas natural es una mezcla compleja de hidrocarburos, principalmente metano (CH_4) junto con cantidades significativas de etano (C_2H_6), propano (C_3H_8), butano (C_4H_{10}), pentano (C_5H_{12}), algunas trazas de hexano (C_6H_{12}) e hidrocarburos pesados. Dependiendo de su lugar de origen, el gas natural puede contener también compuestos inorgánicos tales como nitrógeno (N_2), dióxido de carbono (CO_2), sulfuro de hidrógeno (H_2S), di-sulfuro de carbono (CS_2), agua (H_2O) trazas de argón (Ar), hidrógeno (H_2) y helio (He). De acuerdo con su composición, el gas se clasifica como *seco* (en su mayoría metano), *húmedo* (además del metano contiene otros hidrocarburos y compuestos inorgánicos) y *condensado* (la cantidad de hidrocarburos pesados es considerable y el gas es fácilmente condensable). El gas se clasifica también como rico o pobre en función de la cantidad de líquido que posea, y dulce o amargo según el contenido de H_2S y CO_2 (Mokhatab and Poe, 2015). Este combustible fósil ocupa el tercer lugar en la matriz de consumo energético primario a nivel mundial (Figura 1) (British, 2018); en el sector eléctrico continúa siendo una alternativa atractiva para las plantas de generación debido a su eficiencia y al hecho de que se quema más limpio que el carbón o el petróleo.

El consumo mundial de gas natural de uso industrial aumenta en promedio 1,7%/año, y el consumo de gas natural en el sector de la energía eléctrica aumenta un 2,2%/año, de 2012 a 2040, de acuerdo con cifras calculadas por el EIA (*U.S. Energy Information Administration*). Los sectores industrial y eléctrico representan en conjunto el 73% del aumento total del consumo mundial

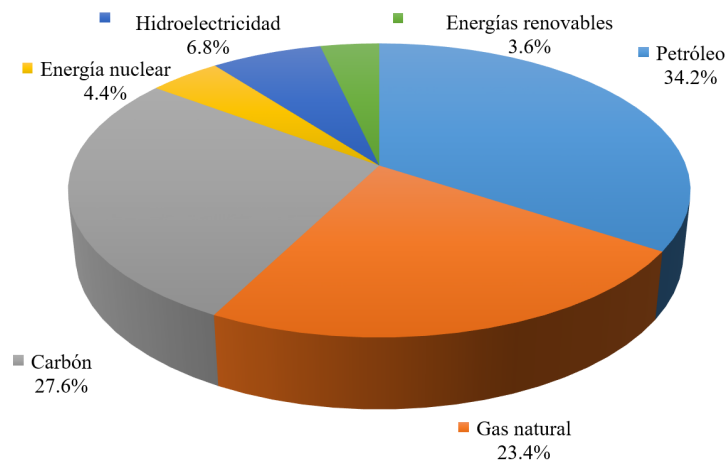


Figura 1. Matriz de consumo energético primario a nivel mundial, cierre del cuarto trimestre de 2018 (British, 2018).

de gas natural. La demanda en países fuera de la Organización de Cooperación y Desarrollo Económico (OCDE) aumenta más del doble que en los países pertenecientes a la OCDE. El crecimiento más fuerte del consumo de gas natural se proyecta para los países de Asia donde el crecimiento económico conduce a un aumento de la demanda (EIA, 2016). La producción mundial promedio de gas natural alcanzó un total de 3,68 trillones de metros cúbicos en 2017 (British, 2018). En Colombia, la producción de gas natural en el 2017 fue de 10,1 billones de metros cúbicos provenientes de la cuenca de los Llanos Orientales, la Guajira y algunos campos pequeños ubicados en el interior del país. Por otro lado, se estima que la demanda de gas natural alcanzará un crecimiento promedio año de 2,2% entre 2015 y 2035, pasando de 1060 a 1707 GBTUD (Giga BTU por Día); por lo que se hace necesaria la búsqueda de estrategias que cubran la creciente demanda nacional (UPME, 2016).

El Ministerio de Minas y Energía de Colombia (MME, 2017) argumentó: “Las oportuni-

dades de dinamizar los campos menores es grande, el 80% de la producción de gas natural de ECOPETROL S.A. se basa en 20 campos y tiene 300; se debería analizar la viabilidad de estos 280 campos para aumentar las reservas del país”. Se denomina campo menor aquel con menos de 1 MPCD y generalmente, no se consideran en la oferta de gas natural. La razón por la cual no es considerado se relaciona principalmente con el hecho que no es financieramente rentable instalar una planta de tratamiento de gas natural para una cantidad tan pequeña de gas de producción, lo que obliga al productor a enviarlo a tea para ser quemado o ingresarlo a red de transporte incurriendo en cuantiosas sanciones debido que la planta de tratamiento de destino debe acarrear con los problemas que genera el arrastre de líquido por la corriente de gas, los cuales se muestran en la Figura 2.

Para que el gas proveniente de campos menores pueda ser incluido a la red de transporte con destino al consumidor final en hogares, vehículos o industrias; éste último debe cumplir con ciertas especificaciones de calidad, que varían de acuerdo con la reglamentación de cada país o región. En Estados Unidos las establece la *Federal Energy Regulatory Commission* – FERC y en Colombia es la Comisión de Regulación de Energía y Gas - CREG, mediante la resolución 071 del 03 de diciembre de 1999 y su actualización (resolución 054 del 21 de junio de 2007). La Tabla 2 presenta el resumen de las especificaciones de calidad que debe tener el gas natural en Estados Unidos y Colombia para poder ser transportado y comercializado.

A fin de cumplir con los estándares de calidad de la Tabla 2, debe realizarse un pre-

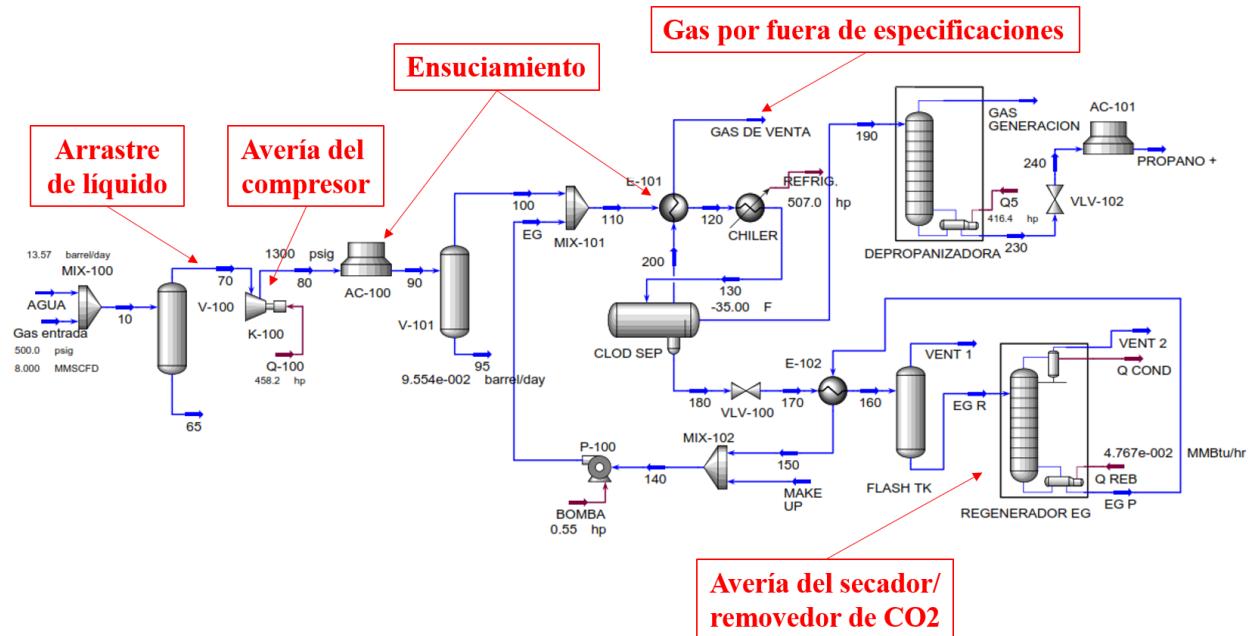


Figura 2. Problemas generados en una planta de tratamiento de gas natural por causa del arrastre de líquido

tratamiento al gas natural, donde se retiran los hidrocarburos de cadena larga, para evitar la condensación del gas durante el transporte; adicionalmente se retiran o reducen compuestos inorgánicos tales como dióxido de carbono (CO_2), sulfuro de hidrógeno (H_2S), nitrógeno (N_2), agua (H_2O) y otras impurezas; dichos compuestos son responsables de problemas operativos entre los que se destacan la corrosión en tuberías, acidificación del gas, formación de hidratos y deposición de partículas (Meet, 2016). El proceso convencional de separación primaria de fases del gas natural se realiza a presiones de operación cercanas a la atmosférica y posteriormente, el gas es recomprimido para su ingreso al sistema de transporte. Esta recompresión genera un alto costo debido a la cantidad considerable de energía requerida para su funcionamiento; del presupuesto total asignado a los pozos de producción, alrededor del 12% se dirige exclusivamente al sistema de compresión

Tabla 2

Especificaciones de calidad del gas natural en EEUU y Colombia (FERC, 2017; CREG, 2007)

Especificaciones	Estados Unidos	Colombia
Máximo poder calorífico bruto (HHV)	1150 BTU/ft ³	1150 BTU/ft ³
Mínimo poder calorífico bruto (LHV)	967 BTU/ft ³	950 BTU/ft ³
Contenido líquido	Libre de líquidos	Libre de líquidos
Contenido máximo de H ₂ S	0,25 – 1,0 grano/100ft ³	0,25 grano/100ft ³
Contenido máximo de azufre	5 – 20 grano/100ft ³	10 grano/100ft ³
Contenido máximo de CO ₂ , %vol	3 %	2 %
Contenido máximo de N ₂ , %vol	3 – 4 %	3 %
Contenido máximo de inertes, %vol	3 – 4 %	5 %
Contenido máximo de oxígeno, %vol	0,2 %	0,1 %
Contenido máximo de vapor de agua	7 libra/10 ⁶ ft ³	6 libra/10 ⁶ ft ³
Temperatura máxima de entrega	120 °F	120 °F
Temperatura mínima de entrega	40 °F	45 °F

(CREG, 2016). Una alternativa sería realizar la separación de líquidos del gas natural a alta presión; teniendo en cuenta que, dentro del pozo el gas se encuentra a una presión entre 5 – 12 MPa y los gasoductos operan entre 7 – 10 MPa. Sin embargo, la separación a alta presión es un proceso complejo que requiere un análisis tanto de la termodinámica como de los principios fenomenológicos. Estudios experimentales (Bymaster et al., 2011; Austrheim et al., 2008) demuestran que la eficiencia de separación gas-líquido es altamente dependiente de la presión de operación dentro del separador debido que, a medida que esta variable aumenta, la diferencia de densidades entre la fase líquida y gaseosa disminuye igual que la tensión superficial, ocasionando la formación de gotas de menor tamaño que son arrastradas por la fase gaseosa lo cual dificulta, o en algunos casos, imposibilita la separación.

Desde hace ya varias décadas, ha sido utilizada la simulación numérica para estudiar fenómenos presentes en procesos de ingeniería, esta técnica permite confirmar, refutar o actualizar los diseños convencionales, sustentados en experiencia de campo o suposiciones que generan sobre-especificaciones en los equipos o fallas en los procesos. La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), combina modelos matemáticos, condiciones de frontera y métodos de discretización para realizar investigaciones académicas e industriales (Ghaffarkhah et al., 2016; Xu et al., 2016; Kharoua et al., 2013; Laleh et al., 2011). En el caso de la separación de fases del gas natural, la simulación numérica ha sido una herramienta útil a la hora de estudiar condiciones de alta presión, costa afuera o a nivel submarino; para las cuales, hacer experimentación resultaría altamente complejo, costoso y/o peligroso. Por tal motivo, la presente tesis doctoral pretende acercarse cada vez más al entendimiento del comportamiento real de los sistemas de separación que operan a alta presión, teniendo siempre como meta futura la posible implementación de estos equipos y condiciones de operación en la industria de OGP (*Oil, gas & Petrochemical*).

Organización de la tesis

Estudiar el gas natural puede ser un proceso tan exhaustivo y profundo como la disponibilidad de tiempo para investigar lo permita, por lo tanto, cobra importancia la delimitación del alcance de la tesis. La Figura 3 muestra las diferentes escalas sobre las cuales fue realizado el estudio numérico de la separación de fases del gas natural. Para efectos de comprensión de la investigación estas escalas fueron divididas en tres: Micro, Meso y Macro escala.

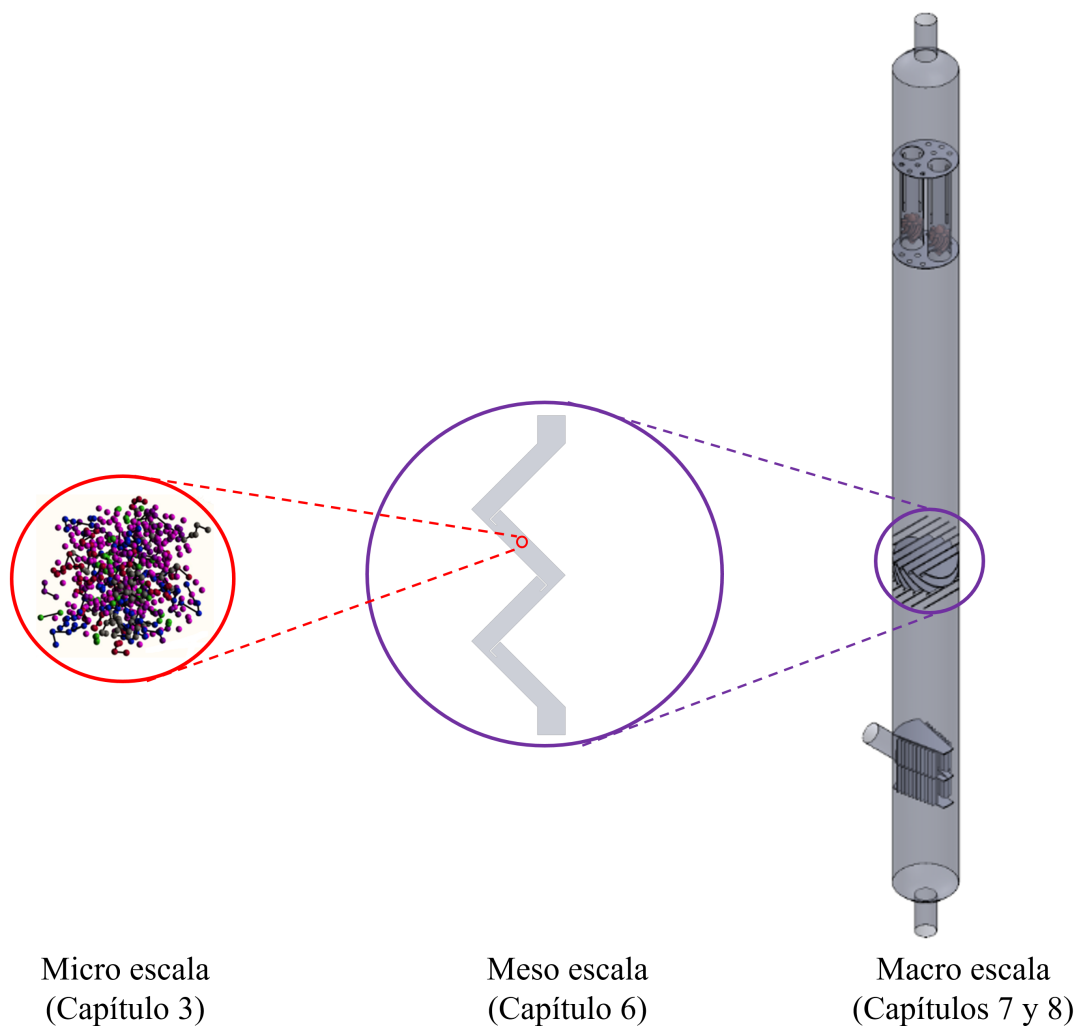


Figura 3. Escalas de la separación de fases del gas natural estudiadas en la presente investigación

De manera preliminar, la Introducción y el Capítulo 1 presentan una caracterización del proceso y los fluidos utilizados respectivamente. La Introducción resume los antecedentes y el problema al que se le va a hacer frente a través de la presente investigación. En el Capítulo 1 se realiza la validación del cálculo de las propiedades, así como la selección de la mezcla de gas natural que será utilizada en ulteriores simulaciones; este Capítulo muestra la diferencia existen-

te entre varias ecuaciones de estado, utilizando el simulador de procesos ASPEN-HYSYS[®] V8.8.

Posteriormente, en el Capítulo 2 comienza el análisis de *micro escala* (Figura 3) o análisis molecular del gas natural. Como se mencionó anteriormente, a medida que la presión de operación dentro del separador aumenta las gotas que se forman son más pequeñas, sin embargo la literatura revela pocos estudios en los que se analice realmente cuál es ese tamaño de gota. Aquí se utiliza la técnica de simulación molecular en el *software* MATLAB[®] V2014 para encontrar el diámetro de la primera gota de gas natural que se forma durante la transición de gas a líquido y el tamaño final que esta misma gota alcanza al llegar al equilibrio a las condiciones termodinámicas dadas.

Los Capítulos 3 y 4 son los precedentes teóricos para las simulaciones numéricas utilizando Dinámica de Fluidos Computacional (CFD): en el Capítulo 3 se realizó el estado del arte de los sistemas de separación gas-líquido, los accesorios utilizados para mejorar la eficiencia de separación, así como los avances y vacíos que permitieron justificar la presente investigación; el Capítulo 4 presenta todos los modelos matemáticos y numéricos utilizados en las simulaciones multifásicas tanto en estado estable como transitorio.

En el Capítulo 5 se hizo un salto a la *meso escala* (Figura 3), específicamente el análisis de los accesorios promotores de coalescencia, es decir, con el resultado del tamaño de gota obtenido en el Capítulo 2 fue simulado un eliminador de niebla tridimensional tipo *wire mesh* utilizando el modelo de medio poroso de ANSYS-FLUENT[®] V16. Adicionalmente se realizó el estudio de la

eficiencia de remoción de gotas de líquido a alta presión en un eliminador de niebla bidimensional tipo *vane pack*.

Los Capítulos 6 y 7 proporcionan el cierre de la tesis mediante el estudio numérico de un separador gravitacional y uno tipo ciclón cilíndrico respectivamente utilizando ANSYS-FLUENT[®] V19. Después de la validación con datos experimentales de cada uno de los equipos de separación, se analizaron ciertas variables de respuesta a diferentes condiciones de presión de operación y flujo molar de la mezcla gas-líquido.

Finalmente, el Capítulo 8 es la recopilación de las conclusiones y recomendaciones discriminadas por capítulo debido que, en su mayoría, cada uno tiene su propia sección de resultados.

1. Caracterización del gas natural

En el contexto de la separación de fases gas-líquido a nivel industrial, el diseño de equipos y plantas de procesamiento a alta presión depende en gran medida del cálculo correcto de las propiedades de los fluidos involucrados. Dicho cálculo se realiza mediante ecuaciones de estado (EOS) o con la ayuda de correlaciones empíricas (Guo and Ghalambor, 2012; Shoaib et al., 2018). Las curvas de equilibrio termodinámico revelan importantes propiedades de la mezcla: además de los puntos de burbuja y rocío, la zona donde el líquido y el gas coexisten en el equilibrio y, en consecuencia, el intervalo de presión y temperatura de operación sobre el cual es posible realizar la separación de fases (Jia et al., 2017). Las ecuaciones de estado cúbicas de Soave-Redlich-Kwong 1972 (SRK) y Peng and Robinson (1976) (PR) son ampliamente aceptadas y utilizadas en aplicaciones académicas e industriales para el cálculo de propiedades termodinámicas del gas natural (Austrheim et al., 2007; Laleh et al., 2011). Adicionalmente, Kunz and Wagner (2012) desarrollaron una ecuación de estado específica para el gas natural, denominada **GERG2008**, por el acrónimo de *Groupe Européen de Recherches Gazières* y el año en el que fue desarrollada; esta ecuación se basa en el concepto de multi-fluido y es explícita en la energía libre de Helmholtz.

1.1. Ecuaciones cúbicas de estado

Las ecuaciones cúbicas de estado son explícitas en la presión o en el factor de compresibilidad, lo que les otorga una estructura matemática simple y, en consecuencia, su uso perenne en ingeniería (Galatro and Marín-Cordero, 2014). Normalmente, estas ecuaciones tienen la misma

forma general (Poiling et al., 2004), tal como se muestra en las ecuaciones (1) y (2).

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2 + ubV + wb^2} \quad (1)$$

$$Z^3 - (1 + B^* + uB^*)Z^2 + (A^* + wB^{*2} - uB^* - uB^{*2})Z - A^*B^* - wB^{*2} - wB^{*3} = 0 \quad (2)$$

donde

$$A^* = \frac{aP}{R^2T^2} \quad (3)$$

$$B^* = \frac{bP}{RT} \quad (4)$$

Siendo P la presión, T la temperatura, V el volumen molar de la mezcla y R la constante universal de los gases en unidades correspondientes. El valor de los parámetros u , w , a y b se definen de acuerdo con las propiedades pseudo-críticas y reducidas de la mezcla (P_c, T_c, T_r) así como del factor acéntrico de Pitzer and Curl Jr (1957), ω ; tal como se observa en la Tabla 3.

1.1.1. Reglas de mezcla para las ecuaciones cúbicas de estado. Los parámetros a y b de las ecuaciones cúbicas de estado requieren reglas de mezcla. El parámetro b representa el volumen molar efectivo; para el caso de mezclas que contienen moléculas de tamaño similar, es

Tabla 3

Parámetros de las ecuaciones de estado cúbicas (Poiling et al., 2004)

Ecuación	u	w	b	a
SRK	1	0	$\frac{0,08664RT_c}{P_c}$	$\frac{0,42748R^2T_c^2}{P_c} \left[1 + f\omega \left(1 - T_r^{1/2} \right) \right]^2$ donde $f\omega = 0,48 + 1,574\omega - 0,176\omega^2$
PR	2	-1	$\frac{0,0778RT_c}{P_c}$	$\frac{0,45724R^2T_c^2}{P_c} \left[1 + f\omega \left(1 - T_r^{1/2} \right) \right]^2$ donde $f\omega = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2$

posible expresar la regla de mezcla según la ecuación (5).

$$b = \sum_i x_i b_i \quad (5)$$

Donde x se utiliza como una variable de composición genérica aplicada a las raíces matemáticas de líquido y vapor. El parámetro a representa las interacciones moleculares de la mezcla, por lo tanto, se debe prestar especial atención a su interacción con la energía interna de la mezcla (U). La función generadora para la energía interna indica la siguiente relación (Elliott and Lira, 1999):

$$\frac{U - U^{gi}}{RT} = -\frac{a\rho}{RT} \quad (6)$$

En una mezcla binaria existen tres tipos de interacciones para las moléculas 1 y 2: la molécula interactuando consigo misma (1-1; 2-2) o una molécula interactuando con la otra (1-2). Para un fluido aleatorio, la probabilidad de encontrar una molécula (1) es la fracción de átomos (1), x_1 . La probabilidad de una interacción 1-1 se denomina *probabilidad condicional*, esta probabilidad se calcula como el producto de las probabilidades individuales, por lo tanto, la probabilidad de una

interacción 1–1 es x_1^2 ; la probabilidad de una interacción 2–2 es x_2^2 ; la probabilidad de una interacción 1–2 es x_1x_2 y la probabilidad de una interacción 2–1 es también x_1x_2 . Si las interacciones de atracción se caracterizan por a_{11} , a_{22} y a_{12} ; la regla de mezcla para a viene dada por la ecuación (7).

$$U - U^{gi} = -a\rho = -\rho (x_1^2 a_{11} + 2x_1x_2 a_{12} + x_2^2 a_{22}) \quad (7)$$

La forma simplificada de la ecuación (7) es representada mediante las ecuaciones (8) y (9):

$$a = \sum_i \sum_j x_i x_j a_{ij} \quad (8)$$

$$a_{ij} = (a_i a_j)^{1/2} (1 - k_{ij}) \quad (9)$$

Donde k_{ij} representa el parámetro de combinación binaria, el cual puede encontrarse tabulado en la literatura Knapp (1982).

Otra forma de representar las reglas de mezcla de las ecuaciones cúbicas de estado es a través de las desarrolladas por Wong and Sandler (1992), las cuales se describen a continuación. El segundo coeficiente del virial de cualquier ecuación cúbica de estado está relacionado con los parámetros de término atractivo (a) y volumen molar efectivo (b), a través de la siguiente relación:

$$B(T) = b - \frac{a}{RT} \quad (10)$$

Debido que la mecánica estadística revela que la dependencia de la composición del segundo coeficiente virial de la mezcla es cuadrática, es posible escribir

$$b - \frac{a}{RT} = \sum \sum x_i x_j \left(b - \frac{a}{RT} \right)_{ij} \quad (11)$$

Donde x representa la composición y $\left(b - \frac{a}{RT} \right)_{ij}$ la composición independiente del segundo coeficiente virial cruzado de la ecuación de estado cúbica, dado por

$$\left(b - \frac{a}{RT} \right)_{ij} = \frac{\left(b - \frac{a}{RT} \right)_{ii} + \left(b - \frac{a}{RT} \right)_{jj}}{2} (1 - k_{ij}) \quad (12)$$

Donde k_{ij} es el parámetro de interacción binaria del segundo coeficiente virial. En la ecuación (12) se cumple que $k_{ii} = k_{jj} = 0$. La segunda relación entre los parámetros a y b de las ecuaciones cúbicas de estado se genera al considerar la función en exceso de la energía libre de Helmholtz A^E para el límite de alta densidad (fase líquida), es decir, calculando la energía libre de Helmholtz en exceso a presión infinita desde una ecuación de estado hasta un modelo de solución líquida $A^E(x)$:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \left[\frac{A^E}{RT} \right] \equiv \sigma \left(\alpha - \sum x_i \alpha_i \right) = \frac{A_\infty^E(x)}{RT} \quad (13)$$

Donde σ es una constante dependiente de la ecuación cúbica de estado (SRK: $\sigma = -\ln 2$, PR: $\sigma = -0,623$) y α es el parámetro reducido de a : $\alpha = \frac{a}{bRT}$ el subíndice i corresponde a los valores del componente i como componente puro.

El límite de presión infinita en una ecuación de estado corresponde a la suposición de que en la solución líquida, las moléculas están tan juntas que no hay volumen libre $\lim_{p \rightarrow \infty} V = b$. Por otro lado, las expresiones para $A^E(x)$ las soluciones líquidas, son derivadas normalmente de los modelos de lattice, con la suposición de que no hay sitios disponibles. Estas suposiciones parecen ser aproximadamente equivalentes Wong and Sandler (1992); Coutikos et al. (1995) y, en consecuencia, la información de un modelo de solución líquida puede incorporarse a una ecuación de estado tomando el límite de presión infinita en la función de energía libre de Helmholtz en exceso.

Wong and Sandler (1992), suponiendo que A^E es relativamente insensible a la presión, aceptaron que las expresiones de energía libre de Helmholtz existentes para soluciones líquidas (expresiones $G^E(x)$ a bajas presiones), podrían usarse en sus reglas de mezcla; así

$$\frac{A_{\infty}^E(x)}{RT} = \frac{G^E(x)}{RT} \quad (14)$$

Por lo tanto, para la fase líquida, el valor de A^E (o G^E) obtenido de la ecuación de estado (con las reglas de mezcla de Wong and Sandler (1992) debe ser la del modelo de solución líquida seleccionado y descrito por $G^E(x)$. La ecuación (14) permite resolver las ecuaciones (10) a (13) para los parámetros de mezcla a y b de las ecuaciones cúbicas de estado con un valor dado de k_{ij} , en términos de x_i , a_i y b_i .

1.2. Aproximaciones basadas en multi-fluidos

Las aproximaciones basadas en multi-fluidos utilizan ecuaciones de estado en su forma fundamental para cada componente de la mezcla junto con funciones desarrolladas para las mezclas binarias de los componentes, a fin de tener en cuenta el comportamiento residual de la mezcla (Kunz and Wagner, 2012). La ecuación de estado denominada GERG2008 se basa en estas aproximaciones y permite calcular las propiedades termodinámicas de 21 componentes del gas natural. La Tabla 4 presenta el listado de los 21 componentes utilizados para desarrollar la ecuación GERG2008, con sus respectivas ecuaciones de estado cuando se encuentran puros y los intervalos de presión y temperatura que aplican a cada uno de ellos.

La aproximación multi-fluidos explícita en la energía libre de Helmholtz A , que es función de la densidad ρ , temperatura T y el vector de composición molar \vec{x} , tiene la forma general mostrada en la ecuación (15).

$$A(\rho, T, \vec{x}) = A^o(\rho, T, \vec{x}) + A^r(\rho, T, \vec{x}) \quad (15)$$

Esta ecuación se divide en dos términos: A^o , componente de la mezcla como gas ideal a determinados valores de ρ , T , \vec{x} ; y A^r , componente residual de la mezcla. Con el fin de facilitar el modelado se utiliza la forma adimensional de la energía libre de Helmholtz:

$$\alpha(\delta, \tau, \vec{x}) = \alpha^o(\rho, T, \vec{x}) + \alpha^r(\delta, \tau, \vec{x}) \quad (16)$$

Donde α^o corresponde al componente la energía libre de Helmholtz adimensional considerando gas ideal, en función de ρ , T , \vec{x} , así:

$$\alpha^o(\rho, T, \vec{x}) = \sum_{i=1}^N x_i [\alpha_{oi}^o(\rho, T) + \ln x_i] \quad (17)$$

La energía residual adimensional es representada por la ecuación (18).

$$\alpha^r(\delta, \tau, \vec{x}) = \sum_{i=1}^N x_i \alpha_{oi}^r(\delta, \tau) + \Delta \alpha^r(\delta, \tau, \vec{x}) \quad (18)$$

$$\alpha \equiv \frac{A}{RT} \quad (19)$$

$$\delta \equiv \frac{\rho}{\rho_r(\vec{x})} \quad (20)$$

$$\tau \equiv \frac{T_r(\vec{x})}{T} \quad (21)$$

Donde δ es la densidad reducida de la mezcla, τ es el inverso de la temperatura reducida de la mezcla y N el número máximo de componentes presentes en la mezcla. α_{oi}^r es la parte residual de la energía libre de Helmholtz reducida para el componente i y $\Delta \alpha^r$ es la función generadora. La ecuación (18) tiene en cuenta el comportamiento residual de la mezcla evaluado a las propiedades reducidas δ y τ . Otra forma de representar la energía libre de Helmholtz residual es mediante la

ecuación (22); donde el primer término corresponde a la contribución lineal de la energía libre de Helmholtz residual reducida de las ecuaciones de estado de cada sustancia pura, multiplicada por las fracciones molares x_i y la doble suma del siguiente término equivale a la función generadora.

$$\alpha^r(\delta, \tau, \vec{x}) = \sum_{i=1}^N x_i \alpha_{oi}^r(\delta, \tau) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N x_i x_j F_{ij} \alpha_{ij}^r(\delta, \tau) \quad (22)$$

La forma adimensional de la energía libre de Helmholtz como gas ideal del componente i en la ecuación (17), se define como:

$$\alpha_{oi}^o(\rho, T) = \ln\left(\frac{\rho}{\rho_{c,i}}\right) + \frac{R^*}{R} \left[n_{oi,1}^o + n_{oi,2}^o \frac{T_{c,i}}{T} + n_{oi,3}^o \ln\left(\frac{T_{c,i}}{T}\right) \right] + \sum_{k=4,6} n_{oi,k}^o \ln\left(\left| \sinh\left(v_{oi,3}^o \frac{T_{c,i}}{T}\right) \right|\right) - \sum_{k=5,7} n_{oi,k}^o \ln\left(\left| \cosh\left(v_{oi,3}^o \frac{T_{c,i}}{T}\right) \right|\right) \quad (23)$$

Donde $\rho_{c,i}$ y $T_{c,i}$ son los parámetros críticos de los componentes puros; $n_{oi,1}^o$, $n_{oi,2}^o$, $n_{oi,3}^o$, $n_{oi,k}^o$ y $v_{oi,3}^o$ son constantes del modelo, encontradas en Kunz and Wagner (2012). Para una función generadora binaria específica, el factor ajustable $F_{i,j}$ normalmente se representa como uno si la mezcla binaria existe y cero si no existe. La parte residual de la energía libre de Helmholtz para el compuesto como gas ideal se representa por medio de la ecuación (24):

$$\alpha_{oi}^r(\delta, \tau) = \sum_{k=1}^{K_{Pol,i}} n_{oi,k} \delta^{d_{oi,k}} \tau^{t_{oi,k}} + \sum_{k=K_{Pol,i}+1}^{K_{Pol,i}+K_{Exp,i}} n_{oi,k} \delta^{d_{oi,k}} \tau^{t_{oi,k}} e^{-\delta^{C_{oi,k}}} \quad (24)$$

La función $\alpha_{ij}^r(\delta, \tau)$ de la ecuación (22) la cual depende unicamente de las variables de

mezcla reducidas δ y τ es representada de la siguiente manera:

$$\alpha_{ij}^f(\delta, \tau) = \sum_{k=1}^{K_{Pol,ij}} n_{ij,k} \delta^{d_{ij,k}} \tau^{t_{ij,k}} + \sum_{k=K_{Pol,i}+1}^{K_{Pol,i}+K_{Exp,i}} n_{oi,k} \delta^{d_{oi,k}} \tau^{t_{oi,k}} \exp \left[-\eta_{ij,k} (\delta - \varepsilon_{ij,k})^2 - \beta_{ij,k} (\delta - \gamma_{ij,k}) \right] \quad (25)$$

Las variables reducidas de la mezcla δ y τ se calculan como funciones reductoras con base en la composición dependiente de la densidad (26) y temperatura de la mezcla (27).

$$\frac{1}{\rho_r(\vec{x})} = \sum_{i=1}^N x_i^2 \frac{1}{\rho_{c,i}} + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N 2x_i x_j \beta_{v,ij} \gamma_{v,ij} \frac{x_i + x_j}{\beta_{v,ij}^2 x_i + x_j} \frac{1}{8} \left(\frac{1}{\rho_{c,i}^{\frac{1}{3}}} + \frac{1}{\rho_{c,j}^{\frac{1}{3}}} \right)^3 \quad (26)$$

$$T_r(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N x_i^2 T_{c,i} + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N 2x_i x_j \beta_{T,ij} \gamma_{T,ij} \frac{x_i + x_j}{\beta_{T,ij}^2 x_i + x_j} (T_{c,i} T_{c,j})^{\frac{1}{2}} \quad (27)$$

Los parámetros binarios $\beta_{v,ij}$ y $\gamma_{v,ij}$ de la ecuación (26) y $\beta_{T,ij}$ y $\gamma_{T,ij}$ de la ecuación (27); así como los parámetros críticos $\rho_{c,i}$ y $T_{c,i}$ se encuentran tabulados en Kunz and Wagner (2012).

1.2.1. Reglas de mezcla. Para las mezclas binarias de los componentes presentes en GERG2008, se utilizan cinco reglas de mezcla (Kunz and Wagner, 2012), las cuales se resumen en la Figura 4.

	He	H ₂ S	H ₂ O	CO	H ₂	O ₂	Ar	nC ₁₀ H	nC ₉ H ₂	nC ₈ H ₄	nC ₇ H ₁	nC ₆ H ₁	iC ₃ H ₁₂	nC ₃ H ₁	iC ₄ H ₁₀	nC ₄ H ₁	C ₃ H ₈	C ₂ H ₆	CO ₂	N ₂
CH ₄	3	3	3	3	1	3	3	3	3	3	3	3	3	3	2	2	1	1	1	1
N ₂	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	1	1	
CO ₂	3	3	3	5	3	5	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3		
C ₂ H ₆	5	3	5	3	3	5	5	3	4	3	3	3	4	3	2	2	2			
C ₃ H ₈	5	3	3	3	3	5	3	3	3	3	3	3	3	3	2	2				
nC ₄ H ₁₀	5	3	3	4	3	5	5	3	4	3	3	3	4	3	2					
iC ₄ H ₁₀	5	3	5	4	4	5	5	3	4	4	4	4	4	4						
nC ₅ H ₁₂	5	3	3	4	4	5	5	3	3	3	3	3	3	3						
iC ₃ H ₁₂	5	3	5	4	4	5	5	4	4	4	4	4								
nC ₆ H ₁₄	5	3	3	4	3	5	5	3	3	4	3									
nC ₇ H ₁₆	5	3	5	4	3	5	5	3	3	3										
nC ₈ H ₁₈	5	5	3	4	4	5	5	3	4											
nC ₉ H ₂₀	5	3	5	4	4	5	5	4												
nC ₁₀ H ₂₂	5	3	3	3	3	5	5													
Ar	5	5	3	3	5	3														
O ₂	5	5	3	5	5															
H ₂	5	5	5	3																
CO	5	3	5																	
H ₂ O	5	3																		
H ₂ S	5																			

Figura 4. Reglas de mezcla para cada una de las posibles mezclas binarias: 1. Funciones generadoras binarias específicas; 2. Función generadora generalizada para alcanos importantes; 3. Funciones reductoras ajustadas, sin función generadora; 4. Reglas de mezcla lineales, sin ajuste y 5. Reglas de mezcla de Lorentz–Berthelot, sin ajuste (Kunz and Wagner, 2012)

1.3. Mezclas de gas natural y curvas de equilibrio

Cuando se piensa acerca de la procedencia de las propiedades termodinámicas de los fluidos que serán utilizados en la separación de fases del gas natural a alta presión, surgen preguntas como: ¿Qué EOS utilizar para el cálculo? o ¿La ecuación de GERG2008 es lo suficientemente robusta para superar las clásicas ecuaciones de SRK y PR? y, de ser así ¿Tanta robustez es necesaria? La única forma de resolver estas y otras inquietudes es comprobar la efectividad de cada una de las ecuaciones de estado, con énfasis en el problema que se desea resolver, es decir, mezclas de gas natural procedentes de campos menores con potencial para separación a alta presión.

Por esta razón, las tres ecuaciones de estado fueron validadas para varias mezclas de gas

natural en el intervalo de presión de operación entre 4 y 10 MPa; con datos experimentales provenientes de la recopilación de 36 mezclas reales y sintéticas realizada por Valiollahi et al. (2016), de las cuales, 23 poseen los componentes disponibles en la ecuación de estado de GERG2008 y 5 de ellas cuentan con alto potencial de separación a alta presión según el análisis experimental de las curvas de equilibrio. La Tabla 5 muestra el porcentaje molar de las mezclas de gas natural seleccionadas de acuerdo con los criterios nombrados anteriormente.

El trabajo realizado por Valiollahi et al. (2016) recopila datos experimentales de puntos cricondentérmicos y criconderbáricos, así como curvas de burbuja y rocío. Para la construcción de las curvas de equilibrio de las cinco mezclas de la Tabla 5 se utilizó el *software* de procesos ASPEN-HYSYS[®] V8.8. La Figura 5 presenta los valores experimentales y el resultado de los cálculos utilizando las ecuaciones de estado de SRK, PR y GERG2008 para cada una de las mezclas de gas natural de la Tabla 5. Cada Gráfica viene acompañada del porcentaje de error absoluto de cada punto, lo cuales son mostrados en la Tabla 6.

En el caso del punto cricondentérmico, se observa que para tres de las cinco mezclas experimentales, se presenta el menor error absoluto utilizando la ecuación de estado de GERG2008. El máximo porcentaje de error alcanzado se obtuvo utilizando la ecuación de PR en el gas 4 (0,91 %). Sin embargo, debido a los valores tan bajos de error absoluto, se considera que no es parámetro de comparación suficiente para la selección de una ecuación de estado y por lo tanto es necesario analizar otras propiedades termodinámicas. Un comportamiento similar se observa en los puntos

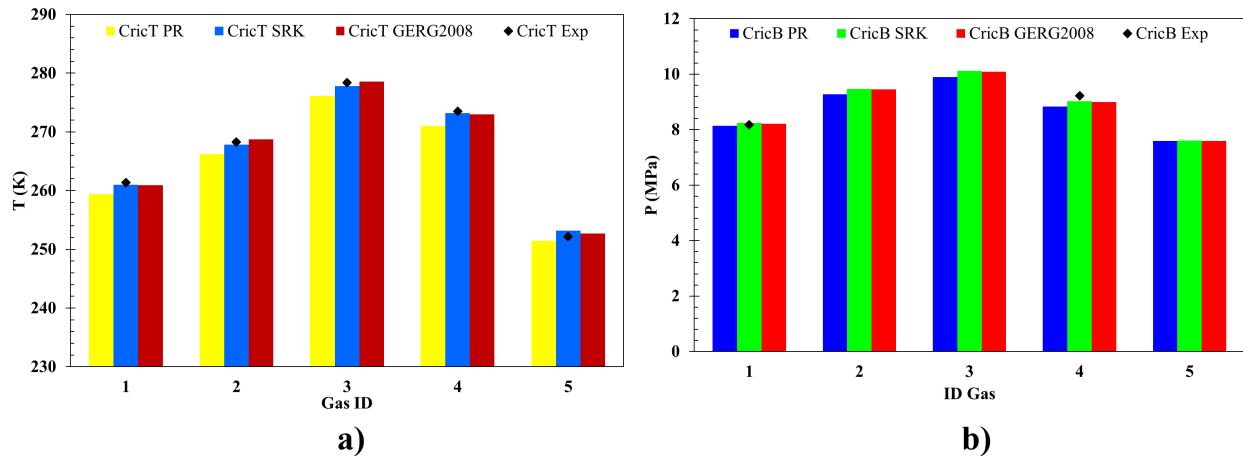


Figura 5. Puntos experimentales Valiollahi et al. (2016) y valores calculados del punto **a)** cricondentérmico y **b)** criconderbárico para cada mezcla de la Tabla 5

criconderbáricos; a pesar de tener menor cantidad de información experimental, el máximo porcentaje de error es de 4,36% utilizando la ecuación de estado de PR.

De nuevo, a la luz de esta información, cualquiera de las tres ecuaciones de estado sería adecuada para calcular los puntos criconderbárico y cricondentérmico, por lo que no es suficiente para tomar una decisión; es necesario estudiar el comportamiento de la presión en función de la temperatura para cada una de las mezclas de la Tabla 5, comparado con las curvas experimentales; tal como se muestra en la Figura 6.

Las curvas de equilibrio de la Figura 6 muestran que a bajas presiones todas las ecuaciones de estado analizadas poseen una buena correlación con los datos experimentales, por lo tanto se considera indiferente la ecuación con la cual se calculen las propiedades termodinámicas de las mezclas, es decir, las tres funcionan con porcentajes de error relativamente bajos. Sin embargo,

si el objetivo es operar sistemas de separación a alta presión (4 MPa en adelante), no todas las ecuaciones de estado son adecuadas, como es el caso de la ecuación de Peng–Robinson, donde en ninguna de las curvas de rocío calculadas se representó el comportamiento real de la mezcla; especialmente cerca de los puntos cricondentérmicos y criconderbáricos; es en esta última variable que la ecuación de Peng–Robinson alcanzó el máximo porcentaje de error de 4,36 % para el gas 4, de acuerdo con lo reportado en la Tabla 6.

Descartando la ecuación de estado de Peng–Robinson para el cálculo de las curvas de rocío de mezclas de gas natural a alta presión, la Figura 6 muestra que a pesar de no existir una diferencia significativa entre las dos ecuaciones de estado restantes, la curva de rocío calculada con la ecuación de GERG2008 es la que mejor correlaciona los datos experimentales de la literatura; dicha tendencia es más evidente para los gases 2, 3, y 4. Como un caso especial, el gas 5 comienza con una tendencia favorable para la ecuación de GERG2008, y a medida que la presión aumenta, la ecuación de Soave-Redlich-Kwong se acerca más al comportamiento real en una pequeña sección de la curva de rocío. Desafortunadamente, no hay datos experimentales en la región del punto criconderbárico.

1.3.1. Selección de la mezcla a utilizar. De acuerdo con el análisis realizado en el presente capítulo, se decidió adoptar la mezcla sintética de gas natural número 3 (Figura 7) de la Tabla 5 para el análisis de la separación de las fases gas–líquido a alta presión Jiménez et al. (2019).

La razón para ser escogida fue debido que su composición es parecida con la de los campos menores colombianos, es decir, un gas seco. Adicionalmente, esta mezcla posee un amplio intervalo de presión de operación, lo que permite analizar varias condiciones dentro de los procesos de separación. Las condiciones de operación propuestas para las simulaciones numéricas subsiguientes se muestran en la curva de equilibrio del gas seleccionado (Figura 7): proceso isotérmico a 260K operando a 2, 4 y 7 MPa; estas condiciones fueron seleccionadas debido a la necesidad de analizar sistemas a baja, media y alta presión con fines de comparación de los resultados obtenidos. La Tabla 7 presenta las propiedades termodinámicas promedio de las fases presentes en el gas 3, calculadas con el simulador ASPEN-HYSYSTM V8.8 y utilizando la ecuación de estado de GERG2008. Estas propiedades promedio de las fases líquida y gaseosa son introducidas en el simulador de Dinámica de Fluidos Computacional, como requisito del modelo matemático multifase.

Tabla 4

Componentes gas natural con sus respectivas EOS del componente puro (Kunz and Wagner, 2012)

Sustancia Pura	EOS de referencia	Intervalo de validez	
		T(K)	P_{max} (MPa)
Componentes principales			
Metano	Klimeck (2000)	90 - 623	300
Nitrógeno	Klimeck (2000)	63 - 700	300
Dióxido de carbono	Klimeck (2000)	216 - 900	300
Etano	Klimeck (2000)	90 - 623	300
Alcanos secundarios			
Propano	Span and Wagner (2003)	85 - 623	100
n-Butano	Span and Wagner (2003)	134 - 693	70
i-Butano	Span and Wagner (2003)	113 - 573	35
n-Pentano	Span and Wagner (2003)	143 - 573	70
i-Pentano	Lemmon and Span (2006)	112 - 500	35
n-Hexano	Span and Wagner (2003)	177 - 548	100
n-Heptano	Span and Wagner (2003)	182 - 523	100
n-Octano	Span and Wagner (2003)	216 - 548	100
n-Nonano	Lemmon and Span (2006)	219 - 600	800
n-Decano	Lemmon and Span (2006)	243 - 675	800
Otros componentes secundarios			
Hidrógeno	Kunz and Wagner (2012)	14 - 700	300
Oxígeno	Span and Wagner (2003)	54 - 303	100
Monóxido de carbono	Lemmon and Span (2006)	68 - 400	100
Agua	Kunz and Wagner (2012)	273 - 1273	100
Sulfuro de Hidrógeno	Lemmon and Span (2006)	187 - 760	170
Helio	Kunz and Wagner (2012)	2,2 - 573	100
Argón	Span and Wagner (2003)	83 - 520	100

Tabla 5

Porcentaje molar de las mezclas de gas natural seleccionadas para la validación de las ecuaciones de estado SRK, PR y GERG2008 (Valiollahi et al., 2016)

Gas ID	Gas 1	Gas 2	Gas 3	Gas 4	Gas 5
Ref.	Jarne et al.	Mørch et al.	Mørch et al.	Avila et al.	Jarne et al.
CH_4	84,446	96,611	93,6	83,3482	69,114
N_2	0,772	0	0	5,651	1,559
CO_2	1,7	0	0	0,284	25,908
C_2H_6	8,683	0	2,630	7,526	2,62
C_3H_8	3,297	0	1,49	2,009	0,423
nC_4H_{10}	0,589	1,475	1,49	0,52	0,104
iC_4H_{10}	0,293	1,527	0,795	0,305	0,105
nC_5H_{12}	0,086	0,385	0	0,144	0,023
iC_5H_{12}	0,084	0	0	0,12	0,034
nC_6H_{14}	0,05	0	0	0,068	0,11
nC_7H_{16}	0	0	0	0,0138	0
nC_8H_{18}	0	0	0	0,011	0

Tabla 6

Error absoluto de los puntos cricondentérmicos y criconderbáricos usando las ecuaciones de estado PR, SRK y GERG2008; comparado con Valiollahi et al. (2016)

CricT(K)	Gas1	%e	Gas2	%e	Gas3	%e	Gas4	%e	Gas5	%e
Exp. Valiollahi et al. (2016)	261,4	—	268,3	—	278,4	—	273,5	—	252,2	—
PR	259,4	0,77	266,2	0,78	276,1	0,83	271	0,91	251,4	0,32
SRK	261	0,15	267,8	0,19	277,8	0,22	273,2	0,11	253,2	0,40
GERG2008	260,9	0,19	268,7	0,15	278,6	0,07	273	0,18	252,7	0,20
CricB(MPa)	Gas1	%e	Gas2	%e	Gas3	%e	Gas4	%e	Gas5	%e
Exp. Valiollahi et al. (2016)	8,18	—	—	—	—	—	9,23	—	—	—
PR	8,134	0,56	9,269	—	9,902	—	8,828	4,36	7,595	—
SRK	8,247	0,82	9,466	—	10,11	—	9,02	2,28	7,606	—
GERG2008	8,218	0,46	9,459	—	10,09	—	8,999	2,50	7,596	—

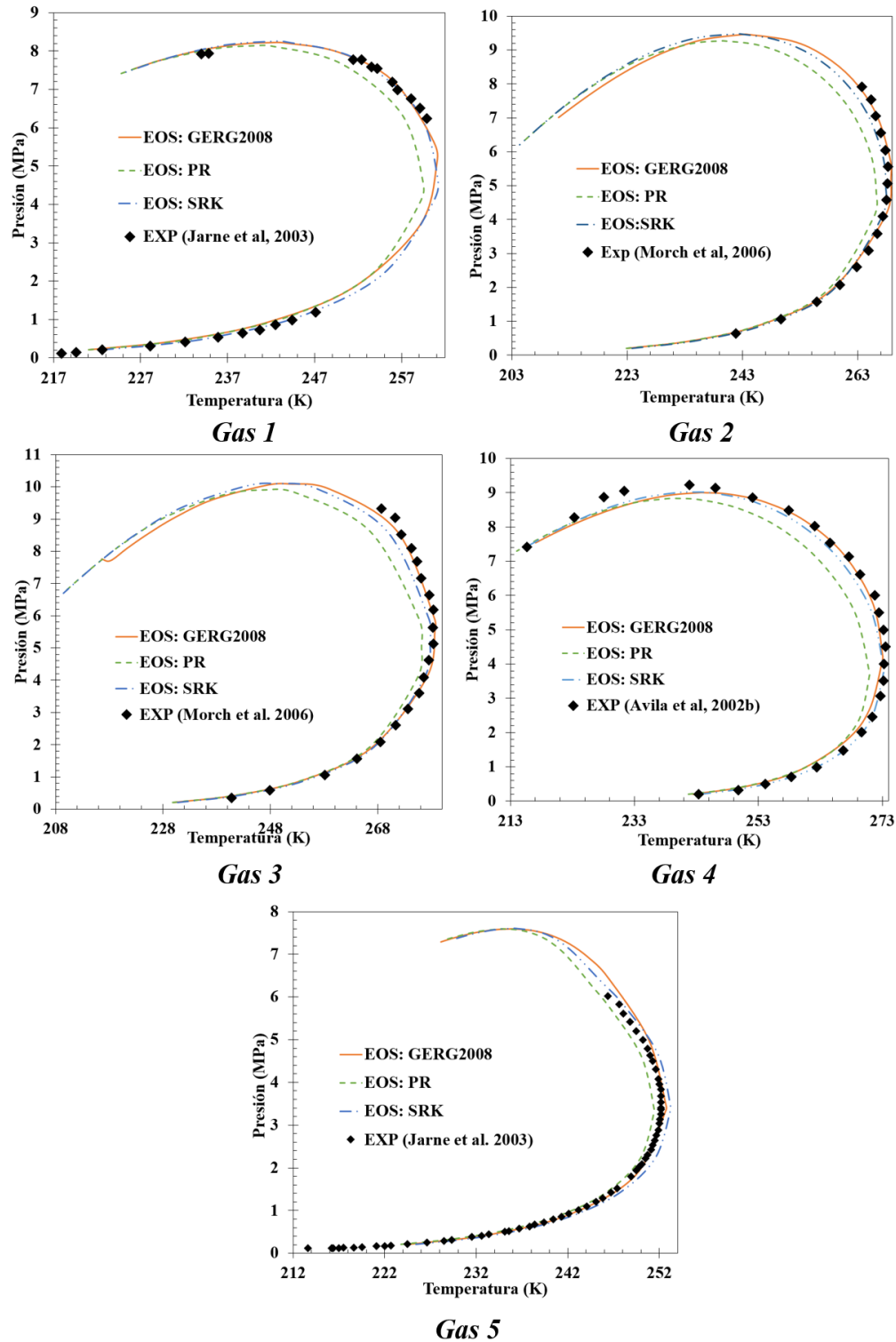


Figura 6. Comparación de las curvas de equilibrio calculadas con los datos experimentales de (Jarne et al., 2004; Mørch et al., 2006; Avila et al., 2002)

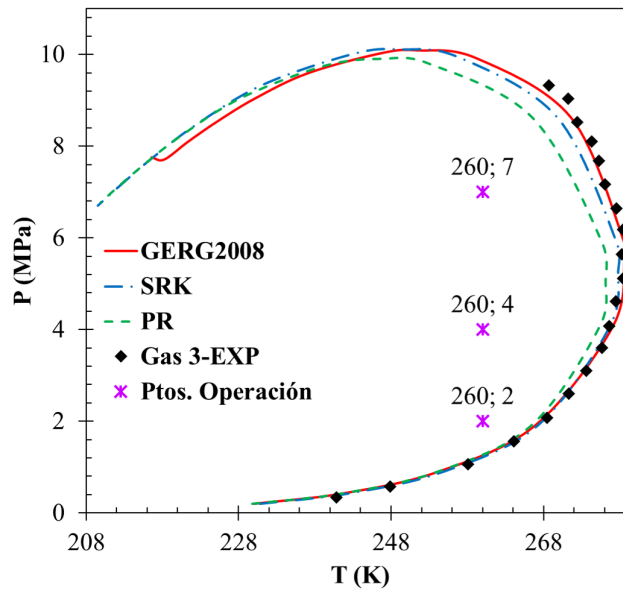


Figura 7. Curva de equilibrio seleccionada para el estudio de la separación de fases del gas natural incluyendo los puntos de operación

Tabla 7

Propiedades de la mezcla utilizada en las simulaciones numéricas

Prop.	Unidad	Fase gas			Fase líquida		
		2 MPa	4 MPa	7 MPa	2 MPa	4 MPa	7 MPa
MW	kg/kmol	17,78	17,5	17,59	57,23	49,44	40,69
C_p	J/kg-K	2274	2576	3257	2233	2351	2567
ρ	kg/m ³	17,7	37,51	74,82	607,1	568,2	504,6
K	W/m-K	0,02905	0,03166	0,03657	0,1031	0,09665	0,08972
μ	kg/m-s	$1,04 \times 10^{-5}$	$1,1 \times 10^{-5}$	$1,25 \times 10^{-5}$	$2,25 \times 10^{-4}$	$1,75 \times 10^{-4}$	$1,27 \times 10^{-4}$
H	J/kmol	$-7,89 \times 10^7$	$-7,91 \times 10^7$	$-8,01 \times 10^7$	$-1,54 \times 10^8$	$-1,24 \times 10^8$	$-1,4 \times 10^8$
S	J/kmol-K	153743,66	146545	139207,26			
ω_m	–	0,2057					
P_{cm}	MPa	4,7388					
V_{cm}	m ³ /kg	$5,95 \times 10^{-3}$	$6,05 \times 10^{-3}$	$6,02 \times 10^{-3}$			
T_{cm}	K	208,4					

2. Comportamiento molecular del gas natural

En el contexto de las escalas del proceso de separación de fases del gas natural a alta presión de la Figura 3, la primera es la *Micro escala*. En este capítulo se describen los principios teóricos que rigen el proceso de formación de gotas de condensado en una corriente de gas a determinadas condiciones termodinámicas. Este análisis se ha dividido en dos etapas, a saber: nucleación, y posterior crecimiento de la gota hasta un valor de equilibrio. La nucleación ha sido evaluada desde una aproximación molecular, mientras el crecimiento se basa en una aproximación de medios continuos.

2.1. Formación de una gota de líquido

La formación de una gota de condensado de gas natural es el resultado de tres etapas fundamentales (Figura 8):

I. Supersaturación: Se define como un estado de no-equilibrio o estado metaestable en una mezcla gas-líquido, es decir, el gas tendrá en ese instante más moléculas por unidad de volumen que las que debería tener en el equilibrio a esas condiciones de presión y temperatura. Este estado metaestable genera, por lo tanto, una formación espontánea (debido a fluctuaciones térmicas) de “embriones” de fase líquida (Kalikmanov et al., 2007).

II. Nucleación: Estos embriones, resultado de la aglomeración de moléculas, forman lo que se llama *clusters* o núcleos de diferentes formas, y tamaños del orden de nanómetros (Kalik-

manov, 2013).

III. Crecimiento de gota: Una vez formado el núcleo, el número de moléculas aumenta y la gota crece hasta alcanzar el equilibrio termodinámico; pasando de un tamaño del orden de nanómetros al orden de micrómetros (Pathak, 2013).

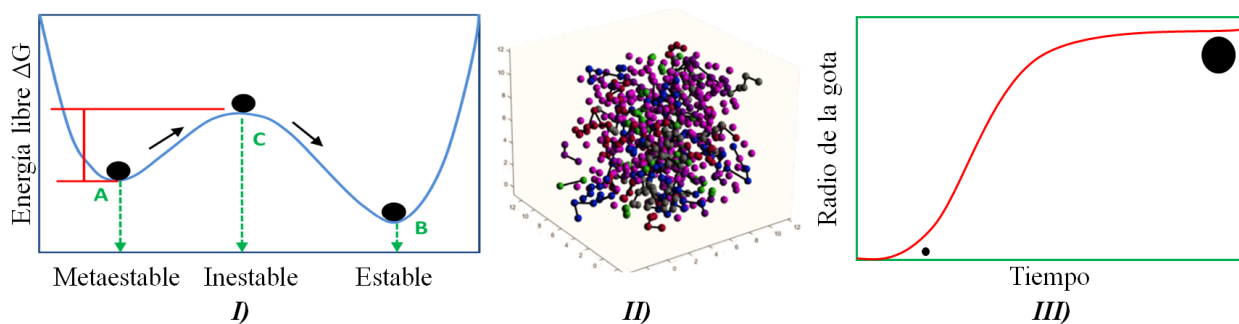


Figura 8. Etapas para la formación de una gota de condensado de gas natural: **I)** Supersaturación Fuentes-Osorio et al. (2018), **II)** Nucleación homogénea y **III)** Crecimiento de gota

2.1.1. Supersaturación. La formación de gotas de condensado en mezclas de gas natural se relaciona con condiciones termodinámicas en las cuales un sistema se encuentra en un estado de equilibrio *metaestable*, es decir, con niveles bajos de energía libre de Gibbs pero con la posibilidad de obtener niveles todavía menores. En la Figura 8-I) los puntos **A** y **B** representan estados con niveles bajos de energía libre de Gibbs. Adicionalmente, el estado **A** se denomina metaestable y corresponde a una estabilidad condicionada a posibles perturbaciones que generen estados de mayor estabilidad. En el punto **B** el sistema se encuentra en un mínimo global o estado *estable*. Para que el sistema pase del estado **A** al estado **B**, es necesario superar una barrera energética hasta el punto **C** considerado máximo local o estado *inestable* (Fuentes-Osorio et al., 2018).

Una forma sencilla de entender el concepto de metaestabilidad es mediante la compresión de un vapor hasta la presión p^v que excede la presión de saturación a determinada temperatura $p_{sat}(T)$. Bajo esta condición, las moléculas potencialmente condensables tienen un potencial químico en la fase líquida μ^l más bajo que en la fase vapor μ^v . La condición para que la fase gaseosa se condense es:

$$\Delta\mu = \mu^v(p^v, T) - \mu^l(p^v, T) > 0 \quad (28)$$

A partir de la ecuación (28), Kalikmanov (2013) definió la supersaturación (S) como:

$$S = \exp\left[\frac{\mu^v(p^v, T) - \mu^{sat}(T)}{k_B T}\right] \quad (29)$$

Donde μ^{sat} y k_B son el potencial químico de saturación y la constante de Boltzmann respectivamente. Desafortunadamente, μ^v y μ^{sat} no son directamente medibles. En este caso, nos valemos de la ley de gas ideal y de la ecuación de Gibbs–Duhem, así:

$$\rho^v = \frac{1}{v} = \frac{p^v}{K_B T} \quad (30)$$

$$d\mu = -sdT + vdp \quad (31)$$

Donde s y v son la entropía y el volumen de la gota respectivamente. Combinando las ecuaciones (30) y (31), es posible aproximar la supersaturación a la ecuación (32):

$$S = \frac{p^v}{p_{sat}(T)} \quad (32)$$

La ecuación (32) es válida únicamente para sistemas de gas ideal. Para gases reales debe adicionarse un “coeficiente de ensanchamiento” f_e que corrige la no-idealidad del sistema Brennen and Brennen (2005). Entonces, para un sistema gaseoso real y multicomponente, es posible describir la supersaturación de la siguiente manera:

$$S = \frac{y_v p}{f_e(p, T) p_{sat}(T)} \quad (33)$$

Donde y_v corresponde a la fracción molar de un componente de la mezcla en la fase vapor. En resumen, la supersaturación es la relación entre la energía libre de Gibbs de un sistema en el estado actual y un estado de equilibrio. Por lo tanto, si $S < 1$ no se presenta formación de gotas y si $S > 1$ existe inestabilidad del sistema y posible aglomeración de moléculas.

2.1.2. Nucleación homogénea. Los modelos matemáticos que representan la nucleación homogénea se basan en cuatro teorías fundamentales: La primera, Teoría de Nucleación Clásica (TNC); desarrollada inicialmente por Lord Kelvin y Gibbs, supone que los núcleos formados son completamente esféricos y que las propiedades asociadas a los mismos tales como densi-

dad, tensión superficial entre otras son evaluadas a partir de métodos macroscópicos. Con relación a los avances en el desarrollo de esta teoría se destacan los trabajos de Katz and Wiedersich (1977), Girshick and Chiu (1990) y Wilemski (1995). Sus resultados muestran que la TNC funciona bien para sustancias puras y bajo número de moléculas; sin embargo, se presentan desviaciones considerables cuando se tienen cadenas alifáticas o mezclas de multicomponentes (Merikanto et al., 2007). A pesar de lo anterior, fue la TNC la que cimentó las bases de los análisis de nucleación modernos. La segunda es la Teoría Semi-Fenomenológica (TSF); desarrollada inicialmente por Fisher (1967). Esta teoría sustenta que la principal desventaja de la TNC es considerar las propiedades como macroscópicas, debido que éstas se basan en 1×10^{23} moléculas mientras que, un núcleo contiene entre 10 – 100 moléculas aproximadamente. Por lo tanto la TSF propone calcular algunas propiedades utilizando termodinámica estadística (Ford et al., 1993; Kalikmanov et al., 2007). Kalikmanov (2013) utilizó esta teoría para mezclas de gas natural a alta presión con resultados poco satisfactorios.

La tercera, Teoría de Densidad Funcional (TDF), considera la gota como un fluido no homogéneo con perfil de densidad que varía desde el centro de la gota hasta un punto lejano en la fase gaseosa. La teoría fue propuesta por Oxtoby and Evans (1988), trabajos sucesivos demostraron que el perfil de densidad genera una variación de la energía libre de Gibbs en términos de interacciones moleculares y dependiente de la distancia al centro del núcleo (Oxtoby and Kashchiev, 1994; Talanquer and Oxtoby, 1995; Napari, 2000). Recientemente se han desarrollado trabajos enfocados a mezclas gas-líquido con compuestos hidrogenados y nitrogenados de tipo isotrópico (Mairhofer

and Gross, 2017; Tankov et al., 2017; Lutsko, 2018). Esto último nos sugiere que no es recomendable para su aplicación a sistemas de gas natural. La teoría más reciente se basa en Simulación Molecular (SM), donde las interacciones entre átomos o moléculas se analizan mediante modelos potenciales que determinan las interacciones moleculares, utilizando técnicas como el Método de Montecarlo (MC) o la Dinámica Molecular (DM) (Frenkel and Smit, 2001; Chen et al., 2002; Romero, 2012). La simulación molecular involucra un alto costo computacional en comparación con las demás teorías de nucleación.

De acuerdo con lo reportado por Fuentes-Osorio et al. (2018), los trabajos de nucleación relacionados con hidrocarburos se han realizado con mezclas de metano/nonano o metano/butano/nonano; evidenciando el uso de las teorías citadas anteriormente, a excepción de TDF. Por ejemplo, Kalikmanov (2013) hizo la comparación de TNC y TSF con datos experimentales reportados en la literatura (Luitjen, 1998; Peeters et al., 2001); mostrando que el aumento de la presión del sistema genera desviaciones considerables en la velocidad de nucleación. Estudios de condensación de hidrocarburos pesados también han sido conducidos utilizando simulación molecular con una desviación de los resultados de hasta dos ordenes de magnitud aproximadamente (Chen et al., 2001). La subestimación de los resultados en todos los trabajos citados sugiere que existe una variación relevante en el valor de la tensión superficial microscópica real y estimada por métodos macroscópicos, especialmente cuando la presión de operación es alta Braun et al. (2014).

2.1.2.1. Modelo matemático. Durante el proceso de nucleación homogénea, el tamaño final de una gota de líquido depende tanto del número como el tamaño de los núcleos formados, que a su vez dependen de las condiciones termodinámicas y de las características químicas de las especies que se condensan. Estudios sugieren que los núcleos formados tienen tamaños del orden de nanómetros. La barrera de energía que debe superarse para que el sistema pase de un estado metaestable a un estado estable, esta compuesta por la energía necesaria para el cambio de fase ($E_{liquido}$) y la necesaria para la formación de la interfase gas-líquido ($E_{tension\ superficial}$) (Santra et al., 2008), así:

$$\Delta G = E_{liquido} + E_{tension\ superficial} \quad (34)$$

Donde ΔG es la energía libre de formación del núcleo en función del número de moléculas (n), representada por la función de Gibbs. En este proceso, no todas las aglomeraciones pueden considerarse como núcleos, por esta razón debe estimarse la probabilidad (P) de que ocurra la formación de un núcleo dentro del sistema. Esta probabilidad se evalúa mediante la *teoría termodinámica de fluctuaciones* (Landau and Binder, 2014), de la siguiente manera:

$$P \propto \exp \left[-\frac{\Delta G(n)}{k_B T} \right] \quad (35)$$

Kalikmanov (2013) sugiere que en lugar de evaluar la probabilidad de formación de núcleos, se evalúe la función de distribución de los núcleos al alcanzar el equilibrio, $\rho_{eq}(n)$:

$$\rho_{eq}(n) = \rho_1 \exp\left[-\frac{\Delta G(n)}{k_B T}\right] = \rho_1 \exp[-\beta \Delta G(n)] \quad (36)$$

Donde ρ_1 es una constante dependiente de T y $\beta = \frac{1}{k_B T}$ es el factor de Boltzmann (Hakala, 1961).

La simulación molecular es una técnica que puede ser usada en aplicaciones que involucran escalas menores a 1 nm hasta escalas del orden de micrómetros. El método de MC posee ventajas sobre la DM en cuanto a la velocidad de cálculo cuando el tiempo de relajación del sistema es amplio (por ejemplo, equilibrio de fases). Tanto DM como MC a nivel molecular, involucran alto esfuerzo computacional y generalmente están restringidos a unas miles de moléculas contenidas en unas cuantas decenas de nanómetros (Sadus, 2002). El método utilizado aquí es el de MC. Por otro lado, existe una diferencia considerable en el valor de una propiedad en las escalas macro y microscópica, debido que las ecuaciones de estado reflejan el promedio de la propiedad en un amplio período de tiempo. Por tal motivo, lo correcto es almacenar la información instantánea de un sistema microscópico y calcular los promedios de las propiedades de interés. La termodinámica estadística brinda las herramientas para realizar dichos promedios gracias a los *Colectivos Estadísticos*. Estos colectivos almacenan varios estados en los que difieren las posiciones (MC) o velocidades (DM) de las diferentes gotas, con el fin de obtener una distribución de probabilidad adecuada. Existen diferentes colectivos que son aplicables dependiendo del tipo de sistema y de

las condiciones a las cuales se encuentra (Panagiotopoulos, 2002). Para mezclas de gas natural a alta presión, los colectivos de nuestro interés son el de NPT (Número de moléculas, Presión y Temperatura) y el colectivo de Gibbs (ten Wolde and Frenkel, 1998; Debenedetti, 1996). En el colectivo NPT, la presión, temperatura y número de moléculas permanecen constantes, mientras que el volumen y la energía total varían para cada estado. En este sentido, la probabilidad de que se genere un estado depende de la energía total E_j y volumen del sistema V_j , así:

$$P_j = \frac{\exp[-\beta(E_j + pV_j)]}{Q_{NPT}} \quad (37)$$

Donde Q_{NPT} es la función de partición del colectivo. El colectivo de Gibbs es un esquema computacional que utiliza una caja de simulación para cada fase sin interfase entre ellas. Para este ensamble, la temperatura y el número total de moléculas es constante, y se puede elegir entre fijar la presión o el volumen total (Panagiotopoulos, 2002).

El método MC requiere estimar la energía configuracional, para el cálculo de las propiedades termodinámicas en un determinado colectivo. La estimación se realiza mediante el potencial molecular, que provee una predicción cercana a la realidad de la energía interna del sistema en función de las coordenadas de las moléculas. La energía interna U se divide en un componente *intramolecular* (*I*) y uno *intermolecular* (*IV*).

$$U = \underbrace{U_{intra}}_I + \underbrace{U_{inter}}_{IV} \quad (38)$$

A su vez, *(I)* contiene contribuciones *locales (II)* y *no locales (III)*:

$$I: \quad U_{intra} = \underbrace{U_{local}}_{II} + \underbrace{U_{nolocal}}_{III} \quad (39)$$

(II) define la estructura molecular y depende de la posición relativa entre átomos. Estas interacciones determinan la distancia de enlace entre átomos, el ángulo de enlace entre tres átomos en un mismo plano y la torsión de un átomo con respecto al eje formado entre dos átomos adyacentes, como se muestra en la ecuación (40).

$$II: \quad U_{local} = \underbrace{\sum^l \frac{1}{2} k_l (l - l_0)^2}_{\text{Distancia de enlace}} + \underbrace{\sum^k \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2}_{\text{Angulo de enlace}} + \underbrace{\sum^c \sum_{i=0}^5 a_i \cos(\varphi)^i}_{\text{Torsion atomica}} \quad (40)$$

Donde k_l representa la constante de fuerza, l la distancia momentánea entre átomos y l_0 la distancia de equilibrio; θ es el ángulo formado por los tres átomos y θ_0 el valor de equilibrio; φ es el ángulo torsional y a_i son constantes de torsión, mostradas en la Tabla 8 Ungerer et al. (2005).

Tabla 8

Parámetros de potencial torsional de la ecuación (40) aplicable a moléculas C – CH₂ – CH₂ – C, alcanos lineales del butano en adelante (Ungerer et al., 2005)

Cte.	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
Valor	1000,35	2129,52	-303,06	-3612,27	2226,71	1965,93	-4489,34	-1736,22	2817,37

(III) corresponde a las interacciones intramoleculares entre átomos o monómeros separados

entre sí, por otros enlaces, tal como se muestra en la ecuación (41) (Allen and Tildesley, 2012).

$$III: \quad U_{nolocal} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j \in \tau(i)} u_{dis}(ij) \quad (41)$$

Donde $u_{dis}(ij)$ es el potencial de fuerzas dispersas que depende de las distancias entre los centros de interacción de los átomos $i - j$; el factor $\frac{1}{2}$ se aplica para evitar interacciones duplicadas. En la presente investigación se consideran únicamente fuerzas de atracción y repulsión, por lo que fue utilizado el potencial de Lennard–Jones u_{LJ} para caracterizar el potencial de fuerzas dispersas, así (Ungerer et al., 2005; ten Wolde and Frenkel, 1998):

$$u_{dis} = u_{LJ} = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (42)$$

Donde σ_{ij} es un parámetro de enlace, ε_{ij} un parámetro energético y r_{ij} la separación entre átomos. Los parámetros de interacción entre partículas distintas se calculan usando la regla de mezclas de Lorentz–Berthelot (Allen and Tildesley, 2012).

(IV) se estima mediante la aproximación molecular de pares (Contreras Camacho et al., 2002):

$$IV: \quad U_{inter}(r_{ij}) = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n u_{dis}(kl) \quad (43)$$

Además del cálculo de la energía de un sistema moléculas, es necesario evaluar la interacción entre cada uno de los átomos que los componen; lo que implica un alto consumo de recursos de simulación. Para disminuir el costo computacional, han surgido diferentes modelos para definir

un pseudoátomo. En este trabajo fue utilizado el modelo TraPPE–UA (*Transferable Potentials for Phase Equilibria–United Atom*) (Chen et al., 2001).

El método de MC está relacionado con la ocurrencia de diferentes estados que varían principalmente en función de la posición de las gotas en el sistema evaluado sin tener en cuenta la velocidad. Para construir el colectivo, MC usa un método estadístico que transforma el sistema de una configuración a otra, de acuerdo a una probabilidad de transición, seleccionada acorde al colectivo requerido (cadena de Markov) (Ungerer et al., 2005). Después de ser aceptada una cantidad de cambios aleatorios en el sistema es posible garantizar que se ha obtenido un sistema representativo del colectivo, y por lo tanto, es posible realizar otros cambios aleatorios donde se puedan calcular las propiedades promedio. Dichos cambios de configuración se denominan movimientos de Monte Carlo, los cuales pueden ser estándar o basados en sesgos estadísticos (Figura 9). Adicionalmente, con el fin de disminuir el esfuerzo computacional fue desarrollada una metodología para realizar movimientos no aleatorios denominada sesgo configuracional (Ungerer et al., 2005; Smit, 1995).

Sin embargo, el método de MC por si solo no describe el tamaño del núcleo, por eso fue utilizada la técnica de *muestreo sombrilla*, que consiste en adicionar un término ficticio a la energía del sistema (i.e. un sesgo) en varias simulaciones llamadas ventanas; este potencial ficticio w_i depende del tamaño del núcleo (Kästner, 2011), así.

$$E(r)^b = E(r)^u + w_i(n) \quad (44)$$

Donde $E(r)^b$ y $E(r)^u$ son la energía del sistema con y sin potencial para sesgo respectivamente.

Utilizando el muestro sombrilla, la distribución de probabilidad de formación de núcleos puede expresarse de acuerdo con la ecuación (45):

$$P(n)_i^u = \frac{P(n)_i^b \exp[-\beta w_i(n)]}{\langle \exp[-\beta w_i(n)] \rangle} \quad (45)$$

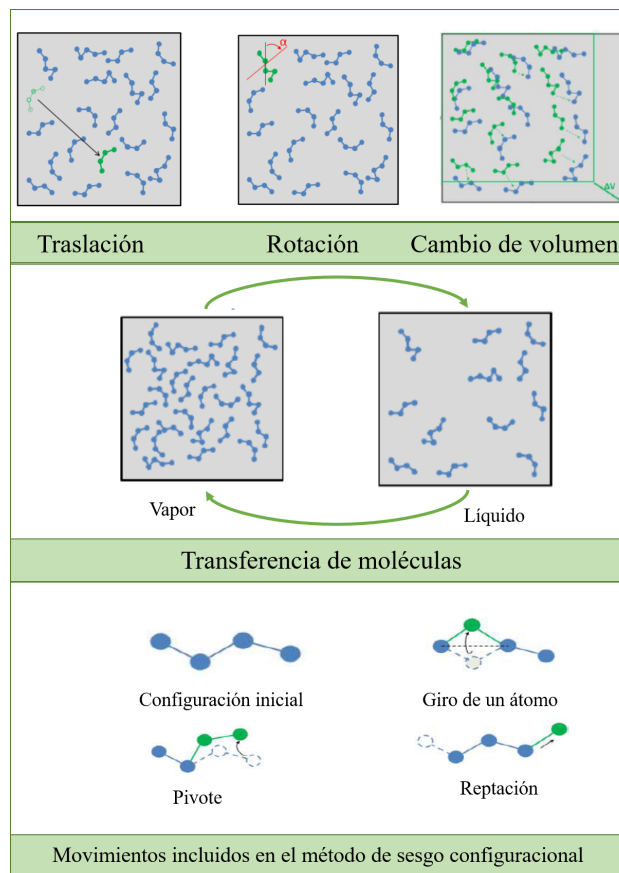


Figura 9. Diagrama esquemático de los movimientos moleculares incluidos en el método de Monte Carlo (Fuentes-Osorio et al., 2018)

Donde $P(n)_i^u$ es la distribución de probabilidad del núcleo de tamaño n sin potencial de sesgo y $P(n)_i^b$ es la distribución de probabilidad obtenida mediante la adición de potencial de sesgo.

Este potencial puede variar en cada ventana, por lo tanto, es posible evaluar diferentes tamaños de núcleo dentro de un determinado intervalo. Finalmente, fue utilizada una función armónica de w_i como se muestra en la ecuación (46).

$$w_i(n) = \frac{k}{2} (n - n_{ref})^2 \quad (46)$$

Donde n_{ref} es el número de moléculas en el núcleo de referencia (Kästner, 2011). El método de integración sombrilla estima los posibles tamaños de gota y la probabilidad de formación de una gota, obtenidos como el promedio ponderado de las probabilidades individuales de cada ventana, así:

$$P(n)^u = \sum_i^{window} p(n)_i P(n)_i^u \quad (47)$$

$$p(n)_i = \frac{a(n)_i}{\sum_j a(n)_j} \quad (48)$$

$$a(n)_i = N_i P(n)_i^b \quad (49)$$

Donde N_i es el número de ciclos usados para cada ventana. A partir de $P(n)_i^u$ es posible calcular la barrera de energía libre de Gibbs mediante la ecuación (50) (Kalikmanov, 2013).

$$\langle P(n) \rangle = \exp(-\beta \Delta G_n) \quad (50)$$

Finalmente, el núcleo de tamaño n que genere el máximo valor de energía libre de Gibbs, es utilizado para calcular el radio de la gota de la siguiente manera: n está expresado en número de moléculas unidas para formar un núcleo; el producto entre el número de moléculas y la fracción volumétrica proporciona el volumen de cada componente de la mezcla de gas natural dentro del núcleo; a partir de ahí, la geometría provee el radio de la gota recién formada (ecuaciones 51 a 53).

$$n_i = x_i n \quad (51)$$

$$V_d = \sum n_i \frac{3}{4} \pi r_i^3 \quad (52)$$

$$r_d = \left(\frac{3V_d}{4\pi} \right)^{1/3} \quad (53)$$

Donde n_i es el número de moléculas de componente i , x_i la fracción volumétrica de cada componente en la mezcla analizada, V_d y r_d son el volumen y radio de la gota respectivamente. El Apéndice 3 presenta el algoritmo para el cálculo de la formación de una gota de líquido utilizando la técnica de simulación molecular y posterior crecimiento de gota.

2.2. Crecimiento de gota

El proceso de crecimiento involucra la transferencia simultánea de masa (moléculas de gas) hacia una gota y de energía en forma de calor latente fuera de la gota. Los mecanismos de dichos

procesos de transferencia dependen en gran medida del número de *Knudsen* (Kn), definido como la relación entre la trayectoria libre que tiene una molécula de vapor (radio de movimiento) y el diámetro de la gota:

$$Kn = \frac{\lambda}{2r_d} \quad (54)$$

Donde λ es la distancia libre molecular promedio y r_d el radio de la gota. Para Kn muy pequeños, existe poca libertad de movimiento; en este caso, la transferencia de las moléculas hacia la gota es gobernada por la difusión (Figura 10). Este proceso fue descrito inicialmente por Maxwell (1877) en el siglo XIX. Para Kn muy grandes, el crecimiento es determinado por la cinética del choque de las moléculas de gas sobre la gota (Lebon et al., 2008). Este régimen fue analizado inicialmente por Hertz (1882) y Knudsen (1915).

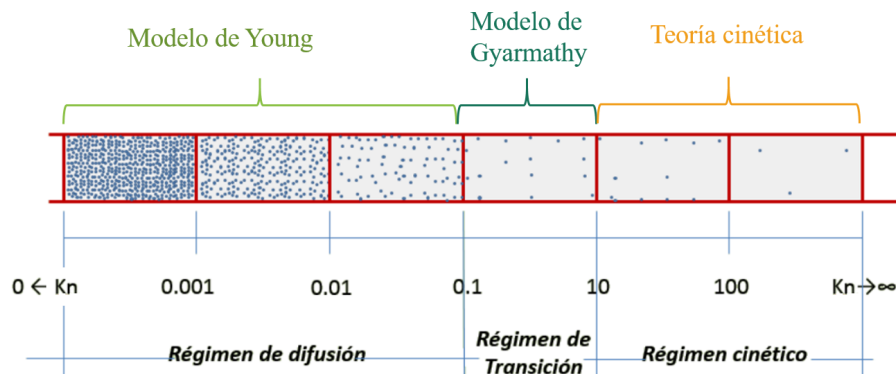


Figura 10. Mecanismos de transferencia de masa y energía para el crecimiento de gota basados en el número de *Knudsen* (Torres, 2016; Luitjen, 1998)

Los modelos de crecimiento más utilizados son el modelo de Young (1993) y el modelo de Gyarmathy (1982); la diferencia radica en la descripción que realizan sobre la transición entre

el continuo y los límites cinéticos. El modelo de Young (1993) incorpora la transición dentro de la descripción del modelo de crecimiento de gota; mientras que el modelo de Gyarmathy (1982) utiliza un ajuste de interpolación entre los dos regímenes (descritos independientemente). Ambos modelos se basan en la suposición de estado de cuasi-equilibrio y una presión uniforme entre la gota y su entorno; adicionalmente, la gota se asume completamente esférica y en equilibrio termodinámico con su superficie (Torres, 2016).

2.2.1. Modelo de crecimiento de Young. El modelo de Young (1993) se basa en ecuaciones fenomenológicas de balance de masa y energía en tres regiones diferentes (Figura 11): región de líquido, capa límite de Knudsen y región continua. La Figura 11 representa el diagrama esquemático de la formulación de Young (1993) para una gota creciendo y el ambiente que la rodea, es decir, una mezcla vapor–gas supersaturada. También se muestran las direcciones del flujo total de masa \dot{M} y calor \dot{E} ; ambos son positivos cuando se dirigen fuera de la gota.

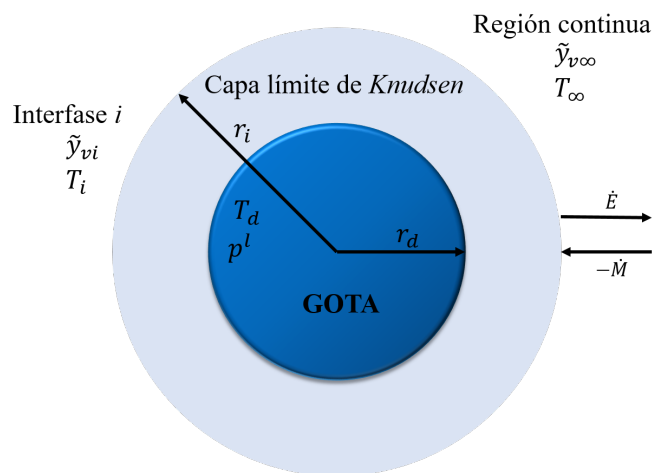


Figura 11. Mecanismos de transferencia de masa y energía para el crecimiento de gota basados en el número de Knudsen (Torres, 2016; Luitjen, 1998)

Como se mencionó anteriormente, se asume la gota completamente esférica con radio r_d y en equilibrio interno a la temperatura de la gota T_d y la presión interna de la misma p^l . La gota es rodeada por la capa límite de Knudsen, la cual tiene un ancho del orden del camino libre promedio de las moléculas; dentro de esta capa, las colisiones moleculares son escasas y, por lo tanto, se aplica la teoría cinética para calcular los flujos de calor y masa. Fuera de la capa de Knudsen, aplican las leyes fluidodinámicas macroscópicas (Luitjen, 1998). De esta manera, se obtiene un sistema de 6 ecuaciones y 6 incógnitas. El flujo másico (\dot{M}) de los componentes condensables se obtiene a partir de la ecuación (55):

$$\frac{\dot{M}}{4\pi r_i^2 \rho D} = \ln \left(\frac{1 - \tilde{y}_{v\infty}}{1 - \tilde{y}_{vi}} \right) \quad (55)$$

Donde r_i es la distancia entre el centro de la gota y la región continua, separada por capa límite de Knudsen; \tilde{y}_{vi} e $\tilde{y}_{v\infty}$ son las fracciones másicas de la gota en la interfase i y en la región continua respectivamente. D es el coeficiente de difusión. En el caso del gas natural, la ecuación (55) puede ser linealizada de la siguiente manera:

$$\dot{M} = 4\pi r_i^2 \rho_m D_m (\tilde{y}_{vi} - \tilde{y}_{v\infty}) \quad (56)$$

Donde ρ_m y D_m corresponden a la densidad y el coeficiente de difusión de la mezcla gas-vapor respectivamente, evaluados a la temperatura media propuesta por Hubbard et al. (1975). El flujo de energía (molecular y convectivo) se obtiene a partir de un balance de conservación de energía

para una esfera en estado estacionario:

$$\frac{d}{dr} \left[r^2 \rho u \left(h + \frac{u^2}{2} + r^2 \dot{q} \right) \right] = 0 \quad (57)$$

Definiendo \dot{E} como:

$$\dot{E} = 4\pi r^2 \rho u \left(h + \frac{u^2}{2} \right) + 4\pi r^2 \dot{q} = cte \quad (58)$$

Desarrollando la ecuación (58) se obtiene:

$$\ln \left(\frac{\dot{E} - \dot{M}C_{pv}T_i}{\dot{E} - \dot{M}C_{pv}T_\infty} \right) = -\frac{\dot{M}C_{pv}}{4\pi r_i k} \quad (59)$$

Donde C_{pv} , es la capacidad calorífica del vapor; T_i , la temperatura de la interfase (límite extremo de la capa de Knudsen); T_∞ , la temperatura del gas de arrastre; el término $C_{pv}T_i$ representa el flujo de energía por convección; mientras que \dot{E} define el flujo total de calor por conducción y convección. En la región de difusión, el flujo total de calor por conducción es dominante en el flux total de energía ($\dot{M}C_{pv}T \ll \dot{E}$); por lo tanto, la ecuación (59) puede expandirse como una serie de Taylor y truncarla en el segundo término:

$$\dot{E} = \frac{1}{2}(T_i - T_\infty)\dot{M}C_{pv} + 4\pi r_i k_m (T_i - T_\infty) \quad (60)$$

Donde el primer término del lado derecho representa el flujo de energía proveniente del transporte de masa y el segundo es la contribución de calor por conducción. k_m es el coeficiente de trans-

ferencia de calor por conducción evaluado a T_m . En la capa límite de Knudsen, se asume que las moléculas no colisionan entre sí y además tienen una distribución de velocidad de Boltzmann–Grad a la temperatura T_i , así: $N\varepsilon^{d-1} \equiv 1$; donde N es el número de moléculas, ε la longitud característica de interacción y d una potencia determinada por el modelo (Matthies and Theil, 2012; Gallagher et al., 2014; Pulvirenti and Simonella, 2017). Entonces, el flujo másico en la capa de Knudsen estaría representado por la ecuación (61).

$$\left(1 - \alpha_{con} \frac{r_d^2}{2r_i^2}\right) \dot{M} = 4\pi r_d^2 \left(\frac{\alpha_{ev} \rho_{vs} R_v T_d}{\sqrt{2\pi R_v T_d}} - \frac{\alpha_{con} \rho_{vi} R_v T_i}{\sqrt{2\pi R_v T_i}} \right) \quad (61)$$

Cuando el número de Knudsen, ecuación (54), es muy grande; la interfase r_i tiende a infinito. Si el coeficiente de evaporación (α_{ev}) y de condensación (α_{con}) son iguales a uno, la relación se convierte en la ecuación de Hertz–Knudsen (Luitjen, 1998):

$$\dot{M} = 4\pi r_d^2 \left(\frac{\rho_{vs} R_v T_d}{\sqrt{2\pi R_v T_d}} - \frac{\rho_{vi} R_v T_i}{\sqrt{2\pi R_v T_i}} \right) \quad (62)$$

El flujo de energía se calcula a partir de la ecuación (63):

$$\begin{aligned} \dot{E} = 4\pi r_d^2 \left[\frac{\rho_{vi} R_v T_i \left(C_{pv} - \frac{R_v}{2} \right)}{\sqrt{2\pi R_v T_i}} + \frac{\rho_{gi} R_g T_i \left(C_{pg} - \frac{R_g}{2} \right)}{\sqrt{2\pi R_g T_i}} \right] (T_d - T_i) + \frac{r_d^2}{2r_i^2} \dot{Q}_{ci} \\ + \dot{M} C_{pv} T_d - \dot{M} \frac{R_v}{2} T_d \left(1 - \frac{r_d^2}{2r_i^2} \right) - \frac{r_d^2}{2r_i^2} \dot{M} C_{pv} (T_d - T_i) \end{aligned} \quad (63)$$

Donde $\dot{Q}_{ci} = \dot{Q}_{cvi} + \dot{Q}_{cgi} = 4\pi r_i k_m (T_i - T_\infty)$; R_v y R_g corresponden a las constantes específicas del

vapor y el gas respectivamente; C_{pv} y C_{pg} las capacidades caloríficas de cada una de las fases y α_{con} , α_{ev} la probabilidad de que una molécula se condense o se evapore con éxito. $r_i = r_d(1 + 2\beta Kn)$, donde β es un coeficiente experimental (0,75) y λ la distancia libre molecular promedio. La relación entre las densidades del gas y del vapor se calcula de acuerdo a la ecuación (64):

$$\rho_{gi} + \rho_{vi} = \frac{P}{ZRT_i} \quad (64)$$

El factor de compresibilidad Z se aproxima $Z \cong Z_g$ y se calcula a las condiciones P y T_∞ utilizando una ecuación de estado. Finalmente, la tasa de crecimiento de gota se calcula por medio de la relación entre el flujo másico y el radio de la gota a través del tiempo:

$$\frac{dr_d}{dt} = -\frac{\dot{M}}{4\pi\rho_l r_d^2} \quad (65)$$

2.3. Nucleación homogénea y crecimiento de una gota de gas natural

Por medio del método de Monte Carlo, perteneciente a la metodología de simulación molecular; fue codificada en MATLAB[®] la nucleación homogénea del gas natural de la Tabla 9 (Gas 3 de la Tabla 5).

Los colectivos utilizados fueron NPT (proceso isobárico e isotérmico) y Gibbs (cálculo específico de la densidad de las fases) (ten Wolde and Frenkel, 1998; Chen et al., 2002; Fransen, 2015). La energía total fue estimada utilizando el potencial de Lennard–Jones y las interacciones

Tabla 9

Caracterización de la mezcla de gas natural y condiciones de operación del sistema para la nucleación y crecimiento de gota (Mørch et al., 2006)

Componente	Fracción molar
CH_4	0,936
C_2H_6	0,0263
nC_4H_{10}	0,0149
iC_4H_{10}	0,0149
nC_5H_{12}	0,0079
Presión de operación 7 MPa	
Temperatura de operación 260 K	
Flujo molar 1 MMSCFD	

intramoleculares; por tratarse de moléculas flexibles, como es el caso de alcanos con cadenas relativamente largas (butano y pentano); fueron incluidas interacciones por tensión, flexión y torsión entre átomos. Adicionalmente, el método TraPPE–UA fue adoptado para simplificar los cálculos numéricos (este método considera un monómero dentro de una cadena del alcano, como un pseudo–átomo). La Figura 12 esquematiza el modelo utilizado para el cálculo de la energía total.

Los movimientos de Monte Carlo seleccionados fueron los movimientos estándar y aquellos asociados con la metodología de sesgo configuracional, CBMC (de sus siglas en inglés *Configurational–Bias Monte Carlo*): traslación, recrecimiento, cambio de volumen y transferencia de moléculas. Finalmente, para la obtención tanto del núcleo como de la energía libre de Gibbs fue utilizado el método de integración sombrilla, representado mediante las ecuaciones (47) a (49). El crecimiento

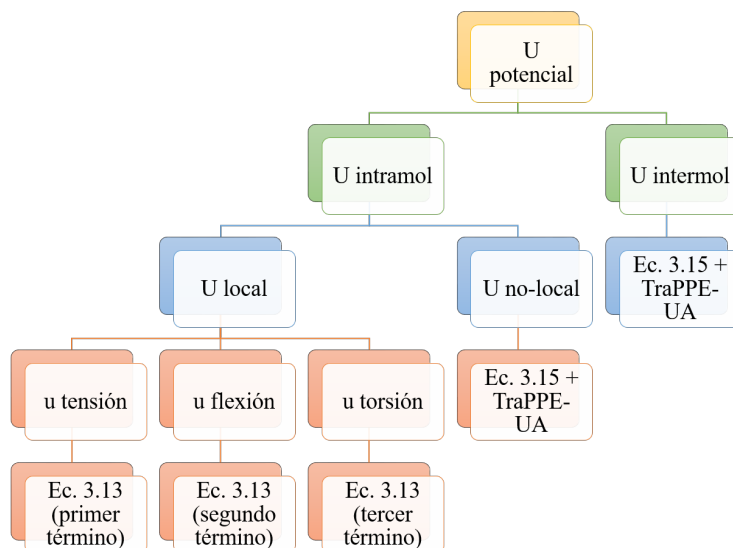


Figura 12. Diagrama esquemático del modelo matemático utilizado para el cálculo de la energía total del sistema

de la gota fue simulado mediante el modelo de Young (1993), utilizando como datos de entrada la composición del gas, presión y temperatura previamente establecidas y el tamaño de núcleo. Todas las simulaciones fueron realizadas en MATLAB[®]; la información acerca de los recursos computacionales disponibles se resumen en la Tabla 10.

Tabla 10

Características de software y hardware, así como el tiempo real de simulación

Software/versión	MATLAB (MathWorks) V2014a
Hardware	Intel Core i5-6200U 2.40 GHz
	8.00 GB de RAM
	Windows 10 64 bits
Tiempo de simulación	
Equilibrio del sistema	2 – 3 semanas
Detección de núcleos y energía libre de Gibbs	6 – 8 semanas
Crecimiento de gota	15 – 18 horas

2.3.1. Equilibrio del sistema. Inicialmente se determinó el número de moléculas a simular. Fuentes-Osorio et al. (2018) sugieren un mínimo de 1000 moléculas con el fin de obtener baja dispersión de resultados en un tiempo de computación razonable. Las moléculas seleccionadas fueron organizadas dentro de una caja de simulación, tal como se observa en la Figura 13–izq.

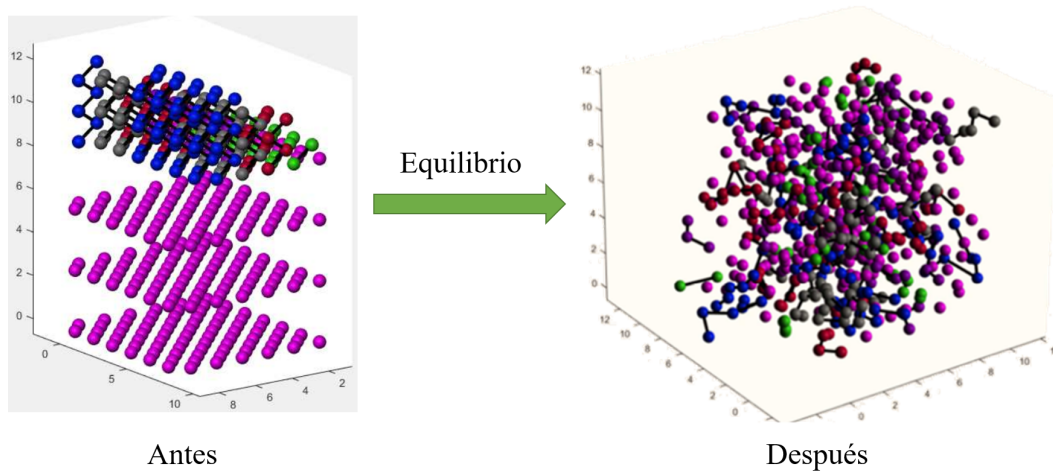


Figura 13. Organización de las moléculas de gas natural antes y después del equilibrio

Después de aproximadamente 5000 ciclos (cada ciclo para el colectivo NPT incluye 25 movimientos: 10 recrecimientos, 8 traslaciones y 7 cambios de volumen), el sistema alcanzó el equilibrio, es decir, el valor de propiedades como la densidad reducida (definida como $\rho^* = \rho \sigma^3$ en función de los parámetros del potencial de Lennard–Jones) no cambia con el aumento de los ciclos de cálculo. Visualmente, el equilibrio es la representación gráfica de como estarían organizadas las moléculas de la mezcla de gas natural (Figura 13–der).

2.3.2. Detección de núcleo y energía libre de Gibbs. Para la detección y caracterización de los núcleos (se consideró núcleo cuando se obtenía una aglomeración de más de cinco moléculas) y el cálculo de la energía libre de Gibbs fueron realizadas simulaciones en MATLAB[®] aplicando muestreo sombrilla con una constante de fuerza $k = 0,01$ (ecuación 46). Fueron utilizadas 5 ventanas, cada una con 5000 ciclos, variando el núcleo de referencia n_{ref} desde 5 hasta 100 moléculas. El mayor tamaño de núcleo encontrado a las condiciones de presión y temperatura de la Tabla 9 fue de 36 moléculas, tal como se observa en la Figura 14. Utilizando las ecuaciones 47 a 50 fue calculada la barrera de energía libre de Gibbs adimensional, la cual alcanzó un valor de 31. Lo que finalmente se traduce en un radio inicial de gota de **8,045** nanómetros. Detalles acerca de los algoritmos de cálculo y validación de los modelos se encuentran en (Fuentes-Osorio et al., 2018).

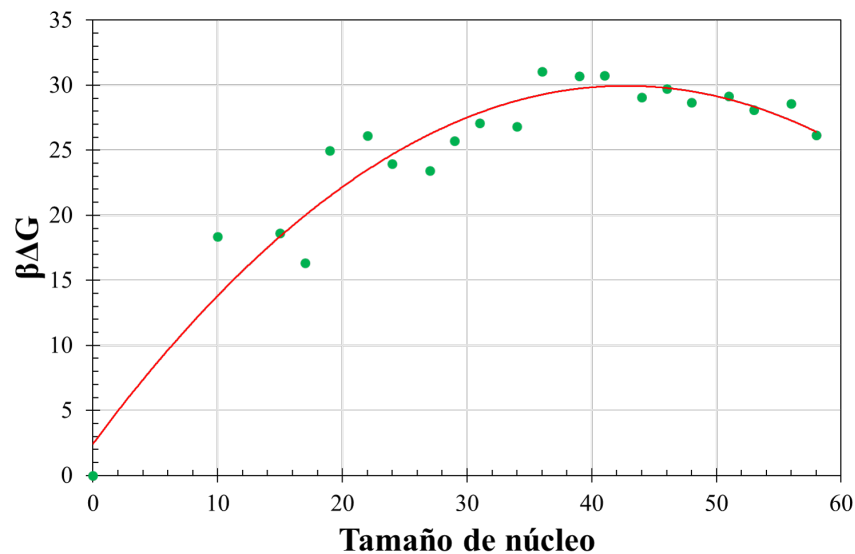


Figura 14. Barrera de energía libre de Gibbs adimensional en función del tamaño de núcleo formado

2.3.3. Crecimiento de gota. Los datos de entrada al modelo de Young (1993) son la densidad de número de gotas y el tamaño de núcleos obtenidos anteriormente. Como resultado se obtiene el tamaño de gota, medida en micrómetros, en función del tiempo que la misma tarda en alcanzar un tamaño en el equilibrio. La Figura 15 muestra que en un tiempo aproximado de 50 microsegundos, la gota de gas natural a alta presión alcanzó un radio en equilibrio de 2,09 micrómetros o **4,18** micrómetros de diámetro. Detalles acerca de la metodología para la construcción del perfil de la Figura 15 se pueden consultar en (Torres, 2016).

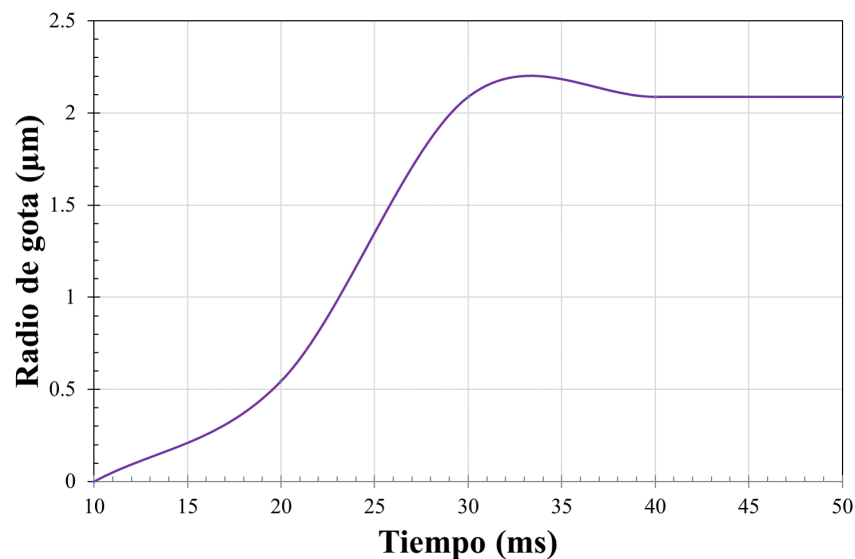


Figura 15. Resultado del crecimiento de gota en función del tiempo para $P = 7\text{MPa}$ y $T = 260\text{K}$

Si bien es cierto que todos los cálculos de nucleación homogénea y crecimiento de gota fueron rigurosamente realizados, en la validación de los modelos matemáticos propuestos por Fuentes-Osorio et al. (2018) se obtuvo una diferencia de entre 2 y 3 ordenes de magnitud con respecto a los datos experimentales, a causa principalmente de la falencia ya expresada en la sec-

ción 2.1.2 y es la metodología macroscópica mediante la cual se calcula una importante propiedad como es la tensión superficial (la cual es calculada con ecuaciones de estado). En otras palabras, se realizó un análisis microscópico con una propiedad calculada macroscópicamente, lo cual daría como resultado la subestimación de tamaño de gota de gas natural. A pesar de lo anterior, fue la forma como se pudo calcular dicha propiedad con los recursos teóricos y computacionales que se tenían a disposición y se logró un acercamiento al comportamiento microscópico de una gota de condensado de gas natural a condiciones de alta presión.

3. Estado del Arte

Una vez conocidos los mecanismos de formación y crecimiento de una gota de gas natural a alta presión (Capítulo 2) y la caracterización de las mezclas vía ecuaciones de estado (Capítulo 1); en el presente Capítulo se hace la revisión de los trabajos realizados en el tema de separación de fases del gas natural (Prieto-Jiménez et al., 2019), con especial énfasis en los estudios numéricos utilizando CFD de las variables macroscópicas referentes al proceso.

3.1. Separación de fases

La fase líquida es separada del gas natural debido a un variado número de razones, entre las que se destacan: prevenir daños en equipos rotativos (compresores o turbinas), mantener las especificaciones de calidad, prevenir la formación de hidratos y otras formas de ensuciamiento aguas abajo del separador (Austrheim et al., 2008). Los procesos de separación multifase frecuentemente utilizados en las industrias de OGP (*Oil, Gas and Petrochemical*) se basan en la combinación de uno o varios principios de sedimentación por gravedad, impacto y fuerza centrífuga. En las secciones siguientes se presentan los principios, procesos y equipos utilizados en la separación multifase.

3.2. Separadores gravitacionales

Existen tres principios físicos fundamentales para la separación de fases en equipos gravitacionales: cantidad de movimiento, sedimentación por gravedad y coalescencia. Los separadores gravitacionales pueden utilizar uno o más de estos principios. El momento o impulso de las go-

tas de condensado de mayor tamaño se aprovecha mediante el cambio de dirección de flujo de la corriente a la entrada del separador –por medio de desviadores de flujo o elementos de choque– y por lo general realiza la separación gruesa de las fases. La fuerza gravitacional se utiliza mediante la reducción de velocidad, permitiendo que las gotas de líquido se depositen en el fondo y el gas suba al tope del separador. Adicionalmente, la segregación gravitacional permite que la fase líquida pesada descienda y la fase líquida liviana ascienda a la superficie. Finalmente, debido a la coalescencia, las gotas más pequeñas –tipo niebla– que no son separadas por gravedad, pueden unirse para formar gotas más grandes y fácilmente sedimentables. Los separadores gravitacionales se clasifican de acuerdo a su orientación como horizontales y verticales; a su función como separadores bifásicos y trifásicos, este último se utiliza cuando el gas natural además de ser rico en hidrocarburos líquidos, contiene agua (Figura 16). Adicionalmente, los equipos gravitacionales pueden clasificarse de acuerdo a su presión de operación como separadores de baja (0,07-5 MPa), media (2-5 MPa) y alta (6-12 MPa) presión (Mokhatab and Poe, 2015).

La literatura especializada revela pocas publicaciones en el tema de separación multifase que involucre componentes del gas natural a alta presión; los diseños convencionales se realizaban basados en sugerencias de campo y suposiciones basadas en mezclas aire-agua a presión atmosférica; dando como resultado una sobre-especificación de las variables de proceso y equipos de gran tamaño (Abernathy, 1993). Con el objetivo de eliminar estas fallas, surgieron procedimientos más sistemáticos donde, por medio de algoritmos, aplican la teoría de asentamiento de gota para evaluar los requisitos de separación gas-líquido; esta teoría asume gotas perfectamente esféricas

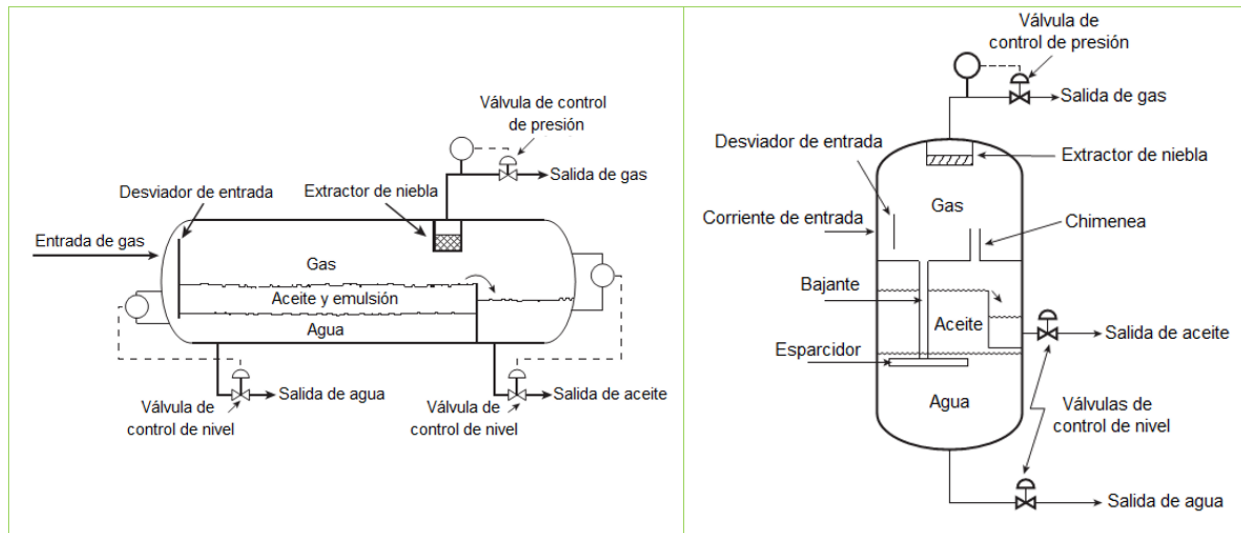


Figura 16. Diagrama esquemático de la configuración típica de los equipos de separación gravitacional: (*Izq.*) horizontal y (*Der.*) vertical (ExxonMobil, 1999)

asentándose en un fluido continuo estancado por acción de la fuerza de gravedad. Para la separación líquido-líquido, adoptan la teoría de tiempo de retención, la cual utiliza datos de coalescencia y asentamiento experimental para aproximar el tiempo que las diferentes fases deben permanecer dentro del separador para que el proceso se lleve a cabo (Monnery and Srcek, 1994).

3.2.1. Teoría de asentamiento de gota. El movimiento de una gota a través de un gas requiere una fuerza externa que actúe sobre ella. Generalmente, esta fuerza puede provenir de la diferencia de densidades entre las fases. Sobre una gota que se mueve a través de un gas actúan tres fuerzas (Figura 17): la fuerza externa, gravitacional o centrífuga (F_e); la fuerza de flotación, en sentido contrario a la fuerza externa (F_b) y la fuerza de arrastre (F_d), la cual aparece siempre que hay movimiento relativo entre la gota y el gas.

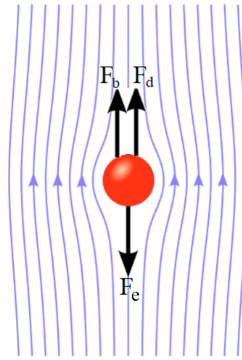


Figura 17. Balance de fuerzas de una gota fluyendo a través de un gas (?)

Si se considera una gota de masa m que se mueve a través de un gas con velocidad relativa u , la segunda ley de Newton dice lo siguiente:

$$\frac{m}{g_c} \frac{du}{dt} = F_e - F_b - F_d \quad (66)$$

La fuerza externa puede expresarse como el producto de la masa por la aceleración a_e de la gota debido a esta fuerza, así:

$$F_e = \frac{ma_e}{g_c} \quad (67)$$

Según el principio de Arquímedes, la fuerza de flotación es el producto de la masa del fluido desplazada y la aceleración debida a la fuerza externa. El volumen de la gota es m/ρ_l ; las gotas desplazan este mismo volumen de gas. La masa de gas desplazado es $\left(\frac{m}{\rho_l}\right) \rho_g$, por lo tanto, la fuerza de flotación es (McCabe et al., 1993):

$$F_b = \frac{m\rho_g a_e}{\rho_l g_c} \quad (68)$$

La fuerza de arrastre se define según la ecuación (69)

$$F_d = \frac{C_D u^2 \rho_g A_p}{2g_c} \quad (69)$$

Donde C_D es el coeficiente de arrastre y A_p es el área proyectada de la gota, medida en un plano perpendicular a la dirección del movimiento de la gota. Reemplazando cada fuerza en el balance (ecuación 66):

$$\frac{du}{dt} = a_e - \frac{\rho_g a_e}{\rho_l} - \frac{C_D u^2 \rho_g A_p}{2m} \quad (70)$$

Si la fuerza externa de la de la gravedad $a_e = g$ y la ecuación (70) se transforma en

$$\frac{du}{dt} = g \frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_l} - \frac{C_D u^2 \rho_g A_p}{2m} \quad (71)$$

La ecuación (71) sugiere que la aceleración disminuye con el tiempo y tiende a cero. En ese punto, la gota alcanza su *velocidad terminal* u_t ; la cual, para procesos de asentamiento por gravedad, se define de acuerdo con la ecuación (72):

$$u_t = \sqrt{\frac{2gm(\rho_l - \rho_g)}{A_p \rho_l C_D \rho_g}} \quad (72)$$

Es posible interpretar la definición de velocidad terminal en función de la orientación del separador gravitacional: en el caso de un separador vertical, la velocidad terminal se define como la velocidad máxima que debe tener el gas para que gotas de cierto diámetro o superior se separen; en el caso de

un separador horizontal, es aquella a la cual las gotas suspendidas viajan a través de una corriente de gas, esta velocidad determina el tiempo de retención necesario para que una gota de cierto diámetro se deposite desde la parte superior hasta el fondo del separador. Si se consideran gotas esféricas con diámetro D_p , es posible reemplazar $m = \frac{1}{6}\pi D_p^3 \rho_l$ y $A_p = \frac{1}{4}\pi D_p^2$ en la ecuación (72) para obtener la ecuación de asentamiento de esferas por gravedad:

$$u_t = \sqrt{\frac{4g(\rho_l - \rho_g) D_p}{3C_D \rho_g}} \quad (73)$$

La ecuación (73) puede representarse también como la ecuación de Souders–Brown, así:

$$u_t = K \sqrt{\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_g}} \quad (74)$$

Donde K se denomina: Factor empírico de Souders–Brown o coeficiente de velocidad de asentamiento (Austrheim et al., 2007; Laleh et al., 2011).

$$K = \sqrt{\frac{4gD_p}{3C_D}} \quad (75)$$

Para determinar el régimen de flujo en el que se encuentra la gota, basta con calcular el número de Reynolds de la gota (Re_p) de la siguiente manera:

$$Re_p = \frac{D_p u_t \rho_g}{\mu} = \frac{D_p^3 g \rho_g (\rho_l - \rho_g)}{18\mu^2} \quad (76)$$

Para utilizar la ley de Stokes, Re_p debe ser menor que 1, a fin de obtener un criterio conveniente de K :

$$K = D_p \left[\frac{g\rho_g(\rho_l - \rho_g)}{\mu^2} \right]^{1/3} \quad (77)$$

A partir de las ecuaciones (76) y (77), $Re_p = \frac{1}{18}K^3$. Si $Re_p = 1$ entonces $K = 2,6$. Para valores de K menores a 2,6 aplica la ley de Stokes.

De manera similar, se sustituye la ley de Newton en Re_p dando como resultado $Re_p = 1,75K^{1,5}$.

Si se considera $Re_p = 1000$ entonces $K = 68,9$. En resumen:

- Si $K < 2,6$ se encuentra en el régimen de Stokes
- Si $2,6 < K < 68,9$ se encuentra en el régimen de de transición
- Si $68,9 < K < 2360$ se encuentra en el régimen de Newton

Cuando K es mayor a 2360, el coeficiente de arrastre puede cambiar bruscamente para pequeñas variaciones de la velocidad de flujo. Para estos casos y para el régimen de transición, la velocidad límite se calcula partir de la ecuación (73) utilizando un valor de C_D obtenido por prueba y error (McCabe et al., 1993).

3.2.2. Tiempo de residencia de líquido. Para equipos de separación bifásica, Evans (1971) recomienda un tiempo de residencia de líquido de 2–5 min para procesar la mezcla con variaciones razonables en las tasas de flujo. Svrcek and Monnery (1993) sugieren el uso de un enfoque sistemático para la estimación del tiempo de residencia requerido, en el que el nivel de

líquido inferior se selecciona a partir de la presión de operación y del diámetro del separador.

3.2.3. Dimensionamiento de separadores gravitacionales. Monnery and Svrcek (1994) muestran una serie de pasos para el dimensionamiento de separadores gravitacionales horizontales y verticales, los cuales han venido siendo actualizados con el fin de utilizar cada vez menos simplificaciones y suposiciones que se alejen de la realidad (GPSA, 1998; ExxonMobil, 1999; Requena and Rodríguez, 2006; Laleh, 2010). En el Apéndice 2 se muestran los planos de un separador bifásico vertical y horizontal apto para operar a alta presión utilizando las técnicas de el dimensionamiento mencionadas.

Grødal et al. (1999) desarrollaron un paquete de software para el diseño de separadores horizontales bi y tri-fásicos aplicando técnicas de SQP (*Sequential Quadratic Programming*) y utilizando la teoría de asentamiento de gota. Para la solución del problema realizaron la suposición de un patrón de flujo tipo pistón, tal como se observa en la figura 18. Esta suposición no es 100 % acertada debido que quebranta la condición de “no deslizamiento” en la pared y en las interfaces; sin embargo, es un buen comienzo para sentar las bases del proceso de separación gravitacional.

Como consecuencia de la anterior suposición, las gotas de líquido (o burbujas de gas) realizan movimientos lineales; esta segunda suposición puede acercarse a la realidad si se instalan platos perforados dentro del separador horizontal. Con base en estos estudios preliminares y con gran contribución empírica, se desarrollaron las variables de diseño convencional, fundamentadas

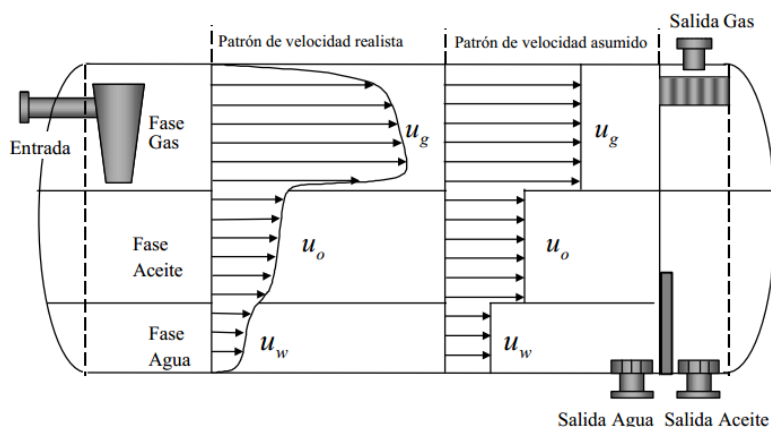


Figura 18. Suposición de flujo pistón utilizado por Grødal et al. (1999)

en la teoría de asentamiento de gota e incluyendo como criterio principal de diseño el factor empírico (K) de Souders and Brown (1934); para el que, varios autores concuerdan en que tanto K como la relación longitud/diámetro (L/D) del separador, son altamente dependientes de la presión de operación tal como se observa en la Tablas 11 y 12 respectivamente. (Laleh et al., 2011; Austrheim et al., 2007; GPSA, 1998; Svrcek and Monnery, 1993).

Tabla 11

Constante de Souders and Brown (1934) y su dependencia con la presión de operación sugerida por Svrcek and Monnery (1993)

Intervalo de Pabs (kPa)	K (m/s)
6,7 – 101,3	$0,02843 + 1,28 \times 10^{-4}P + 0,01402 \ln(P)$
101,3 – 276	0,1067
276 – 37911	$0,1445 - 0,007 \ln(P)$

Tabla 12

Relación L/D en función de la presión de operación sugerida por Walas (1990) para separadores multifase

P (kPa)	0 – 1700	1700 – 3400	>3400
L/D	3	4	5

3.3. Accesorios internos

Accesorios tales como desviadores de entrada, controladores de presión y nivel, distribuidores de flujo (deflectores), eliminadores de niebla, dispositivos de alivio de presión, entre otros, son instalados tanto en separadores horizontales como verticales con el fin de aumentar la eficiencia de separación o tener mayor control del proceso.

3.3.1. Desviadores de entrada. El objetivo de un desviador de entrada es mejorar el desempeño del proceso, haciendo la separación gruesa de las fases, minimizando el cizallamiento de las gotas y mejorando la distribución de velocidad de cada una de las fases aguas abajo del desviador. La Figura 19 muestra los diferentes tipos de desviadores de entrada. Para sistemas de alta capacidad y exigencia en eficiencia de separación, se recomienda el uso de desviadores tipo placas paralelas (f) o ciclón (g); mientras que los dispositivos más simples se utilizan cuando la eficiencia de separación no es una variable crítica (Chin et al., 2002; Arnold and Stewart, 2008; Bothamley et al., 2013).

Los desviadores de entrada normalmente se seleccionan o clasifican según el flux de momento convectivo de entrada, el objetivo es reducir la energía/velocidad de la mezcla, proporcionando las condiciones favorables para la separación de fases. El flux de momento convectivo se define según la ecuación (78).

$$\rho_m v_m^2 \quad (78)$$

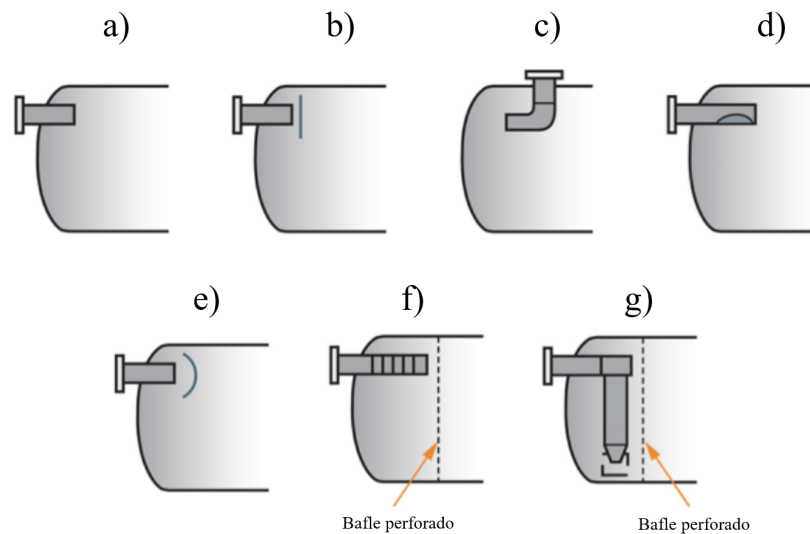


Figura 19. Tipos de desviador de entrada para separadores gravitacionales multifase: a) Sin desviador b) Plato divisor c) Tubo invertido d) Tubo perforado e) Cabeza cóncava f) placas paralelas (vane) g) Ciclón (Bothamley et al., 2013)

La Tabla 13 presenta los límites típicos de diseño para diferentes tipos de desviadores Bothamley et al. (2013).

Tabla 13

Límites de diseño para desviadores de entrada

Tipo de desviador	$\rho_m v_m^2$, [lb/fts ²]
Sin desviador de entrada (a, c)	700
Plato divisor (b, e)	950
Tubo perforado (d)	1400
Placas paralelas (f)	5400
Ciclón (g)	10000

3.3.2. Eliminadores de niebla (demister). Su estructura consiste en una malla de alambre tejido (*wire mesh*, Figuras 20-I y 20-II) o una serie de placas (*vane pack*, Figuras 20-III y 20-IV); las cuales por medio de mecanismos de impacto, cambio en la dirección de flujo,

cambios de velocidad y coalescencia, remueven las gotas más finas de la fase gaseosa. Las mallas se utilizan principalmente para retirar gotas en el intervalo de $10\ \mu\text{m}$ a $100\ \mu\text{m}$ con la desventaja de tener tendencia al ensuciamiento por lo que su uso se limita a *scrubbers*, o mezclas con contenido de líquido menor al 4%vol. Las placas paralelas utilizan la inercia de las gotas de líquido en la corriente gaseosa para formar una película en su superficie (Laleh et al., 2011).

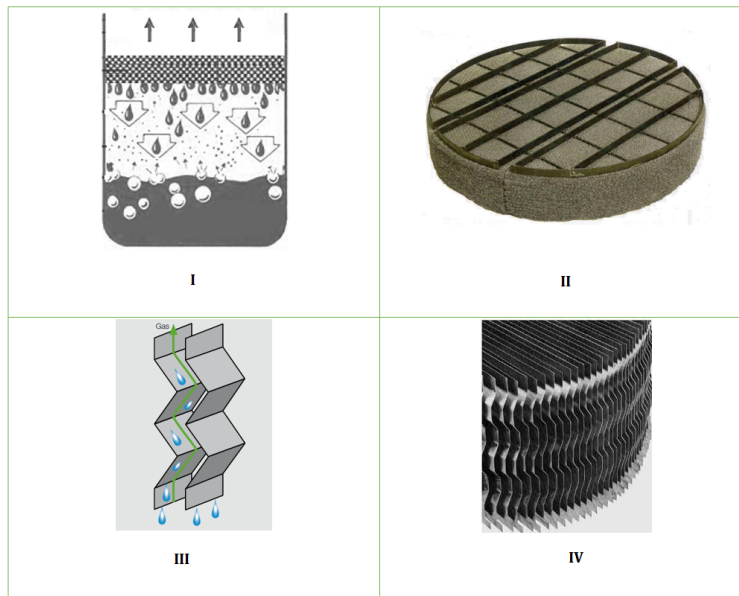


Figura 20. Eliminadores de niebla adaptables a separadores gravitacionales multifase. (I), (II) Wire mesh. (III), (IV) Vane pack (Sulzer, 2017)

En el Capítulo 5 se estudia el comportamiento de los dos tipos principales de eliminadores de niebla: tipo *vane pack* y tipo *wire mesh*, mediante simulación con CFD.

3.3.3. Ciclones de flujo axial. En un separador gravitacional, los dispositivos AFC (*Axial Flow Cyclone*) se instalan entre el eliminador de niebla y la salida de gas con el fin de lograr que la fuerza centrífuga remueva las gotas de líquido que escaparon al eliminador de niebla. La

configuración de estos accesorios se muestra en la Figura 21. El flujo a través de esta tubería es puesto en rotación gracias a un “generador de remolino” (*swirl generator*) el cual consiste en una geometría cilíndrica con una serie de paletas instaladas que otorgan un componente tangencial al flujo axial. Aguas abajo del generador de remolinos, en la sección de asentamiento o separación, la rotación del flujo obliga a las gotas a moverse a la pared exterior, donde se eliminan a través de rendijas o anillos anulares (Swanborn, 1988). Desde la época de los 90’s se han venido publicando en la literatura diferentes esquemas para los AFC (Swanborn, 1988; Burkholz, 1989; Verlaan, 1991; Nieuwstadt and Dirkzwager, 1995; Hoffman et al., 2002). El más reciente se denomina diseño *Sheffield*; las dimensiones y características principales se muestran en la Figura 21.

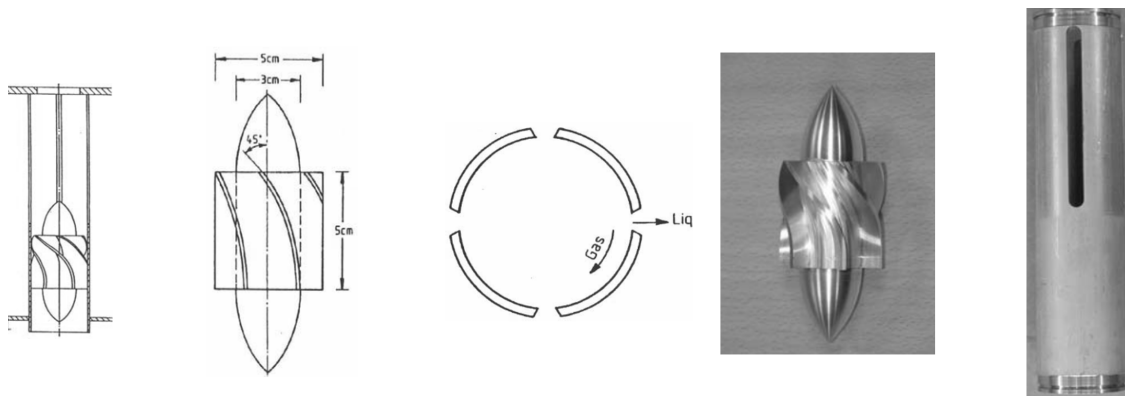


Figura 21. Esquema de los ciclones de flujo axial usados como accesorios en separadores gravitacionales industriales Austrheim et al. (2007)

3.4. Separadores centrífugos

Los separadores tipo ciclón utilizan la fuerza centrífuga para separar componentes de distintas fases y densidades. La fuerza que actúa sobre las gotas de líquido es 5 veces mayor que la gravedad en equipos grandes a bajas velocidades y hasta 2000 veces en equipos pequeños a alta

presión. El separador ciclónico es reconocido y aceptado en variedad de aplicaciones, desde condensado de vapor hasta polvos de hornos (Wasilewski and Brar, 2019; Wang et al., 2019). En este equipo, el gas portador y las gotas en suspensión entran tangencialmente en una sección cilíndrica o cónica del separador, tal como se observa en la Figura 22. Posteriormente, la mezcla forma un espiral hacia abajo, forzando la materia en suspensión más pesada contra las paredes. Las gotas de condensado humedecen la pared, formando una película descendente, la cual se retira por la parte inferior (Bahadori, 2014).

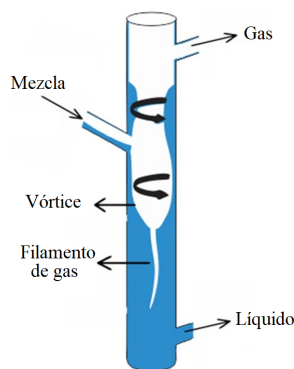


Figura 22. Diagrama esquemático del separador ciclónico gas-líquido, GLCC Wang et al. (2003)

En las últimas dos décadas se han venido desarrollando investigaciones acerca de la separación gas-líquido utilizando fuerza centrífuga. Movafaghian et al. (2000) estudiaron experimentalmente el comportamiento hidrodinámico de los separadores GLCC (*Gas-Liquid Cylindrical Cyclone*) utilizando mezclas aire-agua para 3 geometrías, 4 viscosidades de líquido, 3 presiones de operación (101,3; 273,6 y 487,2 kPa) y el uso de un surfactante. A pesar de que los estudios no superan los 5 MPa, se comprobó que a medida que aumenta la presión de operación dentro del

sistema, la densidad del gas aumenta, incrementando el arrastre de líquido por la corriente gaseosa.

Wang et al. (2003) realizaron estudios experimentales junto con la implementación del modelo mecánico desarrollado por Gomez et al. (2000), el cual es dependiente del patrón de flujo (anular y de niebla), donde el arrastre de líquido se calcula por la correlación de Wallis (1969) para el análisis de la separación utilizando GLCC de gases húmedos a bajas presiones; con base en los resultados encontrados para mezclas aire-agua; se encontró una forma alternativa de abordar el problema de separación de mezclas de gas natural ricas en hidrocarburos líquidos. Wang et al. (2003) recomiendan hacer algunas modificaciones al equipo original: adicionar un AFE (*Annular Film Extractor*) y una tubería de regreso de líquido para drenar el efluente de la AFE con el fin de aumentar la eficiencia de separación.

Elsayed and Lacor (2012) con la ayuda de redes neuronales de tipo RBF (*Radial Basis Function*) realizaron el modelado y optimización pareto de ciclones cónicos, obteniendo resultados satisfactorios si se quisiera optar por una alternativa al ya recomendado GLCC para gas natural. En el caso de la separación gas-condensado-agua, en 2013, fue patentado un modelo de separador equipado con una cámara cilíndrica encajada en un ciclón de doble cono, con una entrada tangencial rectangular y una salida coaxial (Yu et al., 2013). Zhang et al. (2014) realizaron una actualización a la patente de Yu et al. (2013) en donde se separan las dos fases líquidas (condensado y agua) y salen por boquillas diferentes del ciclón.

3.5. Dificultades operativas

Los factores más comunes que pueden reducir el desempeño de un separador gas-líquido son: falla en el control de nivel del líquido, diseño deficiente, daño en los accesorios internos, fluidos espumosos, formación de vórtices en las corrientes de salida de líquido, obstrucción de líquido a la salida y exceso en la capacidad diseñada del equipo (Arnold and Stewart, 2008). Existen diferentes estrategias para ayudar a solucionar dichos inconvenientes, las cuales fueron propuestas inicialmente por Blezard et al. (2000): incrementar el tamaño de gota de la fase dispersa (promoviendo la coalescencia); inducir aceleración sobre las gotas (usando fuerza centrífuga); aumentar la diferencia de las densidades entre los fluidos (adicionando diluyentes) o disminuir la viscosidad de la fase líquida (calentando). Las dos últimas aplican únicamente para mezclas donde el contenido de líquido en la corriente de entrada del gas natural es considerablemente alto. Por otro lado, la presión de operación es una variable importante en el proceso de separación de fases debido que al aumentarla, la diferencia de densidades entre las fases líquida y gaseosa disminuye así como la tensión superficial, esto hace que las gotas de líquido que se forman sean más pequeñas y por ende la cantidad de líquido arrastrado en la corriente gaseosa aumenta (Luitjen, 1998). Todos estos factores disminuyen la eficiencia del proceso, haciendo que diferentes autores recomienden la profundización del estudio de esta variable en sistemas de separación gas-líquido mediante el uso de herramientas computacionales, a fin de mejorar el diseño de nuevos separadores y solucionar los problemas operacionales de los ya existentes (Mokhatab and Poe, 2015; Laleh, 2010; Austrheim et al., 2008; Brigadeau, 2007).

3.6. Simulación numérica

Existen diferentes procedimientos para dar solución a los modelos matemáticos presentes en problemas de ingeniería: la solución analítica y la solución numérica. Ambos procedimientos tienen como objetivo resolver el sistema de ecuaciones que define el fenómeno físico del proceso. Las soluciones analíticas arrojan resultados exactos, sin embargo, su aplicación se limita a geometrías sencillas y condiciones de frontera simples. La simulación numérica, prácticamente no presenta restricciones, siendo capaz de resolver problemas con geometrías y condiciones de frontera complejas, generando resultados que se aproximan muy bien a la realidad con relativa rapidez (Maliska, 2004).

3.6.1. CFD aplicado a la separación de fases. Las primeras investigaciones relacionadas con la solución de problemas de separación gas-líquido utilizando CFD (*Computational Fluid Dynamics*) fueron desarrolladas por Hansen et al. (1991), los cuales introdujeron el código FLOSS (*Flow Simulator for Separators*) que simula el comportamiento alternado de mezclas agua-aire-nafta dentro de separadores multifásicos utilizando dos modelos: el modelo “*Two-Fluid*” para la separación gas-líquido en la zona de entrada al separador y el modelo “*Drift-Flux*” para la separación de gotas de agua o aceite dispersas en las fases líquidas; todas las simulaciones realizadas fueron bifásicas. Para validar los modelos, realizaron experimentos con un separador cúbico transparente ($0,46\text{m} \times 0,46\text{m} \times 1,83\text{m}$) provisto de un desviador de flujo a la entrada tipo esférico y un plato perforado para la distribución de flujo en la zona gravitacional; los experimentos mostraron

que los fluidos en la zona de separación gravitacional seguían un patrón de flujo tipo pistón. Desafortunadamente, los detalles del modelamiento no son presentados en el artículo.

Posteriormente, con el código FLOSS realizaron la simulación de un separador trifásico de escala industrial, las simulaciones dieron como resultado la instalación de un separador de 3,3m de diámetro y 16,3m de altura en la plataforma costa afuera Gullfaks-A de Noruega (Hansen et al., 1993); este equipo estaba dispuesto con un desviador de entrada cóncavo y accesorios internos como deflectores y eliminadores de niebla para mejorar la separación de gotas pequeñas. Durante los primeros cuatro años de operación, este separador presentó problemas relacionados con la formación de emulsiones y control del nivel de agua, por lo que fue pertinente proponer modificaciones diseño original a fin de intentar resolverlos (Hansen et al., 1995; Hansen, 2001). Lo cual demuestra que aunque se realizó un acercamiento significativo al entendimiento del proceso, el código todavía tenía fallas debido probablemente a las simplificaciones y suposiciones realizadas durante su desarrollo; de nuevo, en la publicación no presentan detalles de los modelos utilizados.

Wilkinson et al. (1994) usaron dos separadores horizontales transparentes de escala piloto, uno bifásico y el otro trifásico, para realizar ensayos experimentales y simulaciones numéricas con el fin de estudiar el patrón de flujo durante la separación de la mezcla petróleo-agua. Utilizaron LDA (*Laser Doppler Anemometry*) y PDA (*Phase Doppler Analysis*) para medir la velocidad del fluido y la distribución de tamaño de gota. Las simulaciones fueron realizadas usando el modelo DPM (*Discrete Phase Model*) de ANSYS-FLUENT[®] V2.9 y la condición de simetría axial, por

lo que solo simularon la mitad del dominio de solución; esto pudo haber generado discrepancias significativas en el número de gotas presentes en el sistema, con respecto a los datos experimentales, los autores también atribuyen las discrepancias a la falta de capacidad de cómputo de la época. Seis años después, con los mismos separadores desarrollaron nuevas simulaciones en el *software* PHOENICS V1.5 y *hardware* sofisticado (de la época); encontrando que era posible maximizar la uniformidad del flujo si se mejora el área disponible del deflector, debido que las mejores condiciones de separación de la mezcla petróleo-agua se alcanzan cuando el flujo se acerca al tipo “pistón” (Wilkinson et al., 2000).

Hallanger et al. (1996) desarrollaron la simulación con CFD de un separador horizontal trifásico utilizando el modelo *Two-Fluid*, las fases fueron gas libre, petróleo con trazas de agua y agua libre. Las gotas de agua dispersas en el petróleo se asumieron como partículas esféricas que obedecen la ley de arrastre para partículas sólidas. Para la fase aceitosa aplicaron el modelo de mezcla y fueron despreciadas las interacciones entre fases dispersas (coalescencia y ruptura). El equipo fue provisto de un deflector, dos platos perforados, un eliminador de niebla y un vertedero de gotas. Los resultados evidenciaron que el tiempo de residencia de las fases presentes dentro del separador debe ser suficiente (por lo menos 130 s) para que la segregación gravitacional surta efecto.

Frankiewicz et al. (2001) analizaron los efectos de algunos aspectos de diseño sobre el proceso de separación. Las simulaciones fueron desarrolladas para un separador petróleo-agua con y

sin distribuidores de flujo, mostrando la sensibilidad que tiene la instalación de accesorios sobre la separación bifásica. Posteriormente realizaron estudios con CFD acerca del patrón de flujo de separadores bi y trifásicos en plataformas fijas y flotantes de campos petroleros; analizaron la configuración de diferentes tipos de internos en estado estable y transitorio (Frankiewicz et al., 2002). Se encontró que la introducción de platos perforados a los separadores ayuda a estabilizar considerablemente el flujo, reduciendo el “chapoteo” de líquido en plataformas costa afuera; sin embargo, ninguna de las simulaciones realizadas tuvieron en cuenta los fenómenos de ruptura y coalescencia debido que utilizan el modelo VOF de ANSYS-FLUENT[®], considerado modelo homogéneo, es decir, que tanto los campos de presión como los de velocidad son compartidos por todas las fases (?). Otros trabajos también analizaron diferentes configuraciones de internos con el fin de reducir al máximo los problemas asociados al chapoteo de líquido (Lee et al., 2004; Lu et al., 2007; Lee et al., 2009).

Swartzendruber et al. (2005) modelaron un separador bifásico vertical usando ANSYS-FLUENT[®], el separador estaba equipado con un deflector y un eliminador de niebla (*demister*). Con el fin de mitigar la distribución de flujo no uniforme en el *demister*, propusieron los siguientes cambios: (a) el deflector debe ser movido de la entrada e instalado paralelo al *demister* y (b) debe instalarse un codo de 90° con paletas giratorias entre la entrada y el deflector. Newton et al. (2007) presentaron la descripción, ventajas y limitaciones de dos herramientas para el análisis de separación multifase: CFD y VDM (*Visual Dynamic Modeling*). En ambos casos, utilizaron la ecuación de *Rosin-Rammler* (Rosin, 1933) para definir la distribución del tamaño de gota y esti-

mar el valor máximo estable. Para desarrollar las simulaciones recomiendan el uso de un abordaje Euleriano para resolver el sistema de ecuaciones; siendo conscientes de la complejidad del presente abordaje y de las limitaciones computacionales, decidieron dividir el volumen del separador en secciones independientes, cada una de las cuales incluye una sola fase continua y una dispersa, las interfaces gas-líquido y líquido-líquido las asumen como paredes sin fricción que atrapan las gotas que entren en contacto con ellas, por lo tanto suponen que las gotas se eliminan del espacio computacional después de alcanzar dichas interfaces. Estas suposiciones son válidas cuando solo se tienen en cuenta fenómenos físicos simples de separación, como es el caso de la diferencia de densidades; para casos más complejos como intercambio de energía (condensación/evaporación) estas condiciones de contorno deben tratarse con precaución.

Shirazi (2004) realizó mediciones experimentales del patrón de flujo en separadores ciclónicos utilizando la técnica LDV (*Laser Doppler Velocimeter*), junto con simulaciones numéricas aplicando los modelos de turbulencia de $k - \varepsilon$ y RSM (*Reynolds Stress Model*); para ambos modelos de turbulencia utilizaron inicialmente un esquema híbrido de inicialización y esquemas de discretización *Upwind* de segundo orden y QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*); en la publicación no argumentan las razones de selección tanto del modelo de turbulencia como de los esquemas de discretización, solo concluyen que al aplicar esquemas de alto orden al modelo RSM se generó inestabilidad en la convergencia; además terminan concluyendo que en términos generales, el modelo $k - \varepsilon$ representó de manera más adecuada las características del proceso. Posteriormente fueron medidos el flujo de remolino y los núcleos que se forman den-

tro del ciclón (Hreiz et al., 2011, 2014), utilizando la combinación experimental–simulación, solo que esta vez con técnicas de PIV (*Particle Image Velocimeter*). Como resultado de su investigación con separadores ciclónicos, fue propuesto el uso de múltiples entradas tangenciales para generar el movimiento de remolino en el ciclón, lo que se supone favorece el régimen de inversión de flujo doble, y por lo tanto, mejora la eficiencia de separación; sin embargo, hace falta realizar más estudios.

Han et al. (2013) propusieron una modificación a la configuración convencional del ciclón, con el fin de analizar el efecto de la geometría y las condiciones de operación sobre la velocidad y eficiencia de separación, utilizaron el enfoque Euleriano y el modelo de turbulencia RSM para las simulaciones numéricas con CFD. los resultados demostraron que el modelo RSM es el que mejor predice el patrón de flujo tipo remolino, velocidad axial, velocidad tangencial y caída de presión en simulaciones con ciclones. A partir de los análisis utilizando CFD, Han et al. (2013) concluyen que el diámetro de la boquilla de entrada y el diámetro del separador son los parámetros que más influyen en la calidad del gas de y la caída de presión.

Austrheim et al. (2008) desarrollaron un análisis experimental acerca del desempeño de la separación gas–líquido operando a bajas y altas presiones. Fueron utilizados tres separadores gravitacionales verticales de escala piloto operando a diferentes presiones:

- i) Un separador de 0,39 m de diámetro operando a temperatura ambiente y presiones bajas (entre 200 y 650 kPa). El sistema multifase estaba compuesto por la mezcla Exxsol[®] D60 con viscosidad alrededor de 1,4 mPa.s; agua y aire.

- ii) Un separador pequeño de 0,15 m de diámetro operando a temperatura ambiente y presiones altas (entre 2000 y 9200 kPa). El sistema involucró una mezcla bifásica compuesta de Exxsol[®] D60 con viscosidad alrededor de 1,4mPa.s y nitrógeno. En algunos casos, el Exxsol[®] D60 fue cambiado por gas natural sintético que contenía metano, etano y pentano.
- iii) Un separador grande de 0,84 m de diámetro operando a temperatura ambiente y presiones altas (entre 2800 y 11300 kPa). El sistema estaba formado por una mezcla bifásica proveniente de plantas de procesamiento de gas natural en Noruega.

Los resultados experimentales mostraron un buen desempeño de los separadores en la región no inundada del *demister*. Además, fue determinada la distribución del tamaño de gota en un separador a alta presión, llegando a la conclusión que el máximo tamaño de gota se encuentra alrededor de 400 μm y el mínimo entre 1–10 μm . En el tercer separador se presentaron inconvenientes principalmente por arrastre de líquido debido al pequeñísimo tamaño de las gotas. Con base en el trabajo experimental de Austrheim et al. (2008); Bymaster et al. (2011) desarrollaron nuevos estudios experimentales junto con la empresa FMC *Technologies* acerca del desempeño de separadores gravitacionales y centrífugos de gas natural a presiones que van desde 1500 psig (10,3 MPa) hasta 2600 psig (18 MPa), encontrando perfiles de eficiencia de separación en función de la cantidad del líquido a la entrada para diferentes configuraciones y condiciones de operación. De acuerdo con los resultados experimentales, los autores manifestaron claramente su preocupación por los riesgos asociados a la separación de fases a alta presión, tanto en equipos gravitacionales como centrífugos; entre los riesgos se destacan las pequeñas distribuciones de tamaño de gota, el

aumento del porcentaje de arrastre y/o inestabilidad de la película de líquido y el hecho de que una disminución en la diferencia de densidades de las fases hace que la separación se dificulte. cite-laleh2010 realizó la simulación en ANSYS-FLUENT[®] V6.1 de tres separadores gravitacionales bifásicos de escala piloto y un separador trifásico de escala industrial (Gullfaks-A), utilizando la combinación de modelos VOF para el comportamiento y patrones de flujo en la fase continua, el modelo DPM para analizar el movimiento de las gotas dentro de cada separador y la ecuación cúbica de estado de *Peng Robinson* para calcular las propiedades de los fluidos, extraídas del *software* comercial ASPEN-HYSYS[®] V3.2. El sistema contiene gas natural saturado proveniente de la literatura a tres condiciones de presión: 70 kPa, 700 kPa y 2760 kPa. Para la distribución del tamaño de gota fue utilizada la ecuación desarrollada por Rosin (1933). La principal conclusión fue que los parámetros que más afectan el tamaño de la gota son la densidad del gas y la viscosidad del condensado; y que, contrario a las estrategias clásicas de diseño, los resultados con CFD muestran que se necesitan tiempos de residencia adicionales para que las gotas de la fase discreta atraviesen las interfaces.

4. Modelamiento Matemático y Numérico

El flujo multifase puede presentarse simultáneamente como un sistema de varios componentes en diferentes fases, o componentes con diferentes propiedades químicas en una misma fase (ejemplo: dos fases líquidas). Entiéndase como “fase” un determinado tipo de material o sistema multicomponente (formado por diferentes especies químicas, por ejemplo aire atmosférico o gas natural) que *se comporta como un único fluido* en una escala específica y no debe confundirse con el significado termodinámico utilizado para definir el estado de la materia (sólido, líquido, gaseoso, plasma, Bose–Einstein). Cada una de las fases interactúa por medio de la interfase que las separa, la cual se define como la región en la cual se presenta la transferencia de masa, energía y cantidad de movimiento entre las fases. Una interfase puede ser conectada (flujo de gotas o burbujas), desconectada (flujo estratificado) o una combinación de ambas (Rezende et al., 2015). De acuerdo con Paladino (2005) en flujos de líquido y gas surge una complicación en el sentido que las interfases son deformables y la forma de las gotas o burbujas puede ser variable, lo que requiere atención especial en el modelado de los fenómenos de transferencia interfacial. Dependiendo de la fracción volumétrica y la velocidad de cada fase, los patrones dejan de ser dispersos para formar morfologías que dan lugar a diferentes patrones de flujo.

4.1. Abordaje Euleriano y Lagrangiano

Tanto el abordaje Euleriano como el Lagrangiano se fundamentan en la hipótesis del continuo. En el abordaje Lagrangiano, se realiza el seguimiento de una determinada masa del fluido

(o número de partículas) a medida que fluye. La trayectoria de las partículas se calcula individualmente a intervalos específicos durante el cálculo de la fase fluida; en otras palabras, las propiedades de una determinada masa de fluido se especifican estableciendo su posición inicial (x_0, y_0, z_0) en el tiempo inicial t_0 y a continuación se realiza el seguimiento de la historia de la masa de fluido: $\phi_i(x_0, y_0, z_0, t - t_0)$. Este abordaje es utilizado preferiblemente para sistemas diluidos, debido que a medida que el número de partículas analizadas aumenta, el costo computacional también aumenta (Athulya and Cherian, 2016).

En el abordaje Euleriano las variables independientes son las coordenadas espaciales x, y, z y el tiempo t así, las propiedades del flujo de una determinada masa de fluido (velocidad, presión, temperatura, entre otras) en un punto son descritas como una función de la posición en el espacio y el tiempo (Michaelides and Feng, 2016).

De acuerdo con la hipótesis del continuo, queda claro que la deducción del modelo matemático está enfocada a campos de flujo macroscópicos; en este sentido, es posible describir dos metodologías para llevar a cabo esta tarea: la metodología de *volúmenes de control* y la de *promediación*. (Enwald et al., 1996) presentan una descripción acerca del procedimiento estándar de obtención de las ecuaciones de transporte para el modelo multifase (Figura 23) utilizando la metodología de promediación, en las secciones siguientes se tratará de mostrar pragmáticamente la obtención del modelo de flujo multifase.

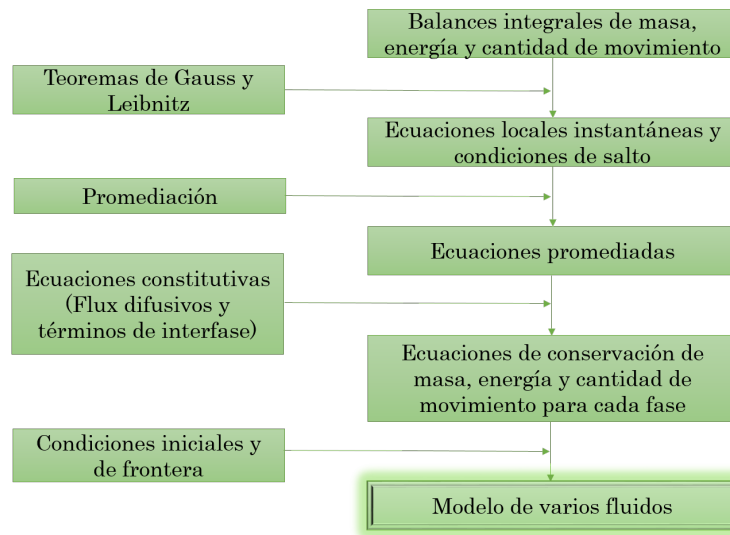


Figura 23. Algoritmo de obtención del modelo matemático sugerido por Enwald et al. (1996) (Paladino, 2005)

4.1.1. Metodología de los volúmenes de control. Esta metodología puede ser utilizada para mostrar un primer acercamiento académico del modelo matemático. Sin embargo, como se verá más adelante, cuenta con limitaciones e inconsistencias en relación a la definición de fracción volumétrica, que no pueden pasar desapercibidas.

Considere $V_\alpha(\vec{x}, t)$ el volumen de la fase α en el interior del volumen de control arbitrario V ocupado por dos fases α y β (Figura 24):

$$R_\alpha(V) = \frac{V_\alpha(\vec{x}, t)}{V} \quad (79)$$

$R_\alpha(V)$ es la relación entre el volumen de la fase α y V . Si se rompe este volumen haciendo que tienda a cero en un punto cualquiera \vec{x} , es posible definir la *fracción volumétrica* $r_\alpha(\vec{x}, t)$ de la

siguiente manera:

$$r_{\alpha}(\vec{x}, t) = \lim_{V \rightarrow 0} R_{\alpha}(\vec{x}, t) \quad (80)$$

El mismo razonamiento aplica para todas las fases presentes en el volumen de control.

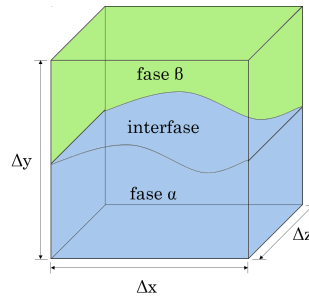


Figura 24. Volumen de control de dimensiones $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ que contiene dos fases inmiscibles y separadas por una interfase Rezende et al. (2015)

En este sentido, es posible también definir la concentración másica de cada fase con el mismo argumento de las ecuaciones (79) y (80); es decir, la masa de la fase α , $M_{\alpha}(V)$ contenida en el volumen V es definida según la ecuación (81):

$$\rho_{\alpha}(\vec{x}, t) = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{M_{\alpha}(V)}{V_{\alpha}(\vec{x}, t)} \quad (81)$$

Note que la concentración másica es calculada por unidad de volumen de la fase α ($V_{\alpha}(\vec{x}, t)$).

La masa de la fase α por unidad de volumen total se define como $r_{\alpha}(\vec{x}, t) \rho_{\alpha}(\vec{x}, t)$. La cantidad de

masa presente en un volumen de control arbitrario como el de la Figura 24 viene dada por:

$$\int_V r_\alpha \rho_\alpha dV \quad (82)$$

Es posible continuar con este razonamiento hasta encontrar las ecuaciones constitutivas de transporte, sin embargo no se procederá con esta metodología (la cual se encuentra detallada en Rezende et al. (2015); Drew (1992)) debido que por la definición de la ecuación (80), cuando el volumen V tiende a cero implica que V tiende al punto \vec{x} , y físicamente dos porciones de materia no pueden estar presentes en el mismo punto del espacio en el mismo instante de tiempo; porque según la hipótesis del continuo existe una distribución continua de la materia y, *para cada punto del espacio físicamente identificado, se asume que hay una única porción de fluido asociada (?)*.

Así, $r_\alpha(\vec{x}, t)$ es igual a uno (1) en el punto \vec{x} cuando la fase α está presente en el volumen V y cuando éste tiende a cero en el punto \vec{x} ; o cero (0) cuando la fase α no esté presente en el punto \vec{x} . La consecuencia es la *discontinuidad* de la ecuación (80), por lo tanto esta definición de $r_\alpha(\vec{x}, t)$ no es una propiedad que pueda definir rigurosamente los campos macroscópicos y según Ishii and Mishima (1984), esta es la principal dificultad en el modelado flujos multifase. En la práctica, lo que se hace es utilizar la definición de fracción volumétrica de la ecuación (79) en vez de la (80). Una forma de “suavizar” las discontinuidades es promediar todas las variables del campo de flujo, por lo tanto es necesario derivar las ecuaciones de balance de masa, energía y cantidad de movimiento utilizando técnicas de promediación.

4.1.2. Promediación. Existen varios procedimientos de promediación para las ecuaciones de transporte, el más conocido es la **Media Temporal** o *Reynolds Average*, el cual, aplicado a las ecuaciones de Navier–Stokes es lo que se denomina como RANS (*Reynolds Average Navier–Stokes Equations*). Esta promediación fue propuesta por Reynolds (1895) con el fin de intentar dar solución al complejo y aleatorio comportamiento de sistemas turbulentos multifase. La media temporal es apropiada para flujos *estadísticamente* estacionarios, es decir, un flujo que a nivel local en promedio no varía con el tiempo (Wilcox et al., 1998). Para poder realizar esta promediación de manera adecuada es necesario tener cuidado con el período de integración: debe ser mucho mayor que la escala de tiempo de fluctuación de las fases y mucho menor que la escala de tiempo de la variación media del flujo. De manera general, la media temporal se define como:

$$F_T(\vec{x}) = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} f(\vec{x}, t) dt \quad (83)$$

Donde T es el intervalo de promediación (detalles en (Rezende et al., 2015)). La interfase puede asumir un comportamiento no estacionario en el espacio, lo que torna a la media temporal inadecuada o difícil de describir. La **Media Volumétrica** o *Volume Average* permite describir el comportamiento medio de este tipo de flujo en el espacio similar al comportamiento medio de un flujo turbulento. Esta media volumétrica es más apropiada para flujos homogéneos (Whitaker,

2013):

$$F_V(t) = \frac{1}{V} \int \int \int f(\vec{x}, t) dV \quad (84)$$

Otra media común es la denominada **Media Conjunta** o media de realizaciones (*Esemble Average*) y viene dada en términos de N experimentos idénticos, así (Drew, 1992):

$$F_R(\vec{x}, t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f_n(\vec{x}, t) \quad (85)$$

Drew (1983) generalizó la promediación conjunta de la siguiente manera: un *proceso* se define como el *conjunto* de los posibles *eventos* que pueden ocurrir con determinadas condiciones iniciales y de frontera; una *realización* se define como un posible evento que podría haber ocurrido dentro del proceso, es decir, uno de los elementos del conjunto de todos los posibles eventos. De esta manera, para un campo cualquiera $f(\vec{x}, t)$ la media conjunta se define como:

$$F_E(\vec{x}, t) = \int_E f(\vec{x}, t; \mu) dm(\mu) \quad (86)$$

Donde $dm(\mu)$ es la probabilidad de observar la realización o evento μ dentro del conjunto (*Esemble-E*) de todos los posibles eventos. Este procedimiento de promediación es el utilizado para obtener el modelo matemático de la presente investigación.

4.1.3. Ecuaciones locales de balance. Dentro de cada fase, las ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento y energía son válidas localmente y escritas en su forma patrón (Rezende et al., 2015; Drew, 1992).

Balance de masa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (87)$$

Donde ρ es la masa específica y \vec{v} el vector velocidad.

Balance de cantidad de movimiento

$$\frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{\vec{T}} + \rho \vec{g} \quad (88)$$

Donde $\vec{\vec{T}}$ es el tensor tensión y \vec{g} la fuerza de la gravedad.

Balance de energía

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \left(U + \frac{1}{2} v^2 \right) + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{v} \left(U + \frac{1}{2} v^2 \right) = \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\vec{T}} \cdot \vec{v} - \vec{q} \right) + \rho (\vec{g} \cdot \vec{v} + \dot{q}) \quad (89)$$

Donde U , \vec{q} y \dot{q} representan la energía interna, el flux de calor y la fuente de calor respectivamente, estos dos últimos términos conforman los efectos térmico y mecánico del sistema. Para

un fluido Newtoniano e incompresible, el término \vec{T} viene dado por:

$$\vec{T} = -p\vec{I} + 2\mu\vec{D} \quad (90)$$

Donde p representa la presión, μ la viscosidad y \vec{D} el tensor de tasa de deformación definido como:

$$\vec{D} = \frac{1}{2} (\vec{\nabla}\vec{v} + \vec{\nabla}\vec{v}^T) \quad (91)$$

Donde $\vec{\nabla}\vec{v}$, es el tensor del gradiente de velocidad y $\vec{\nabla}\vec{v}^T$, su transpuesta. \vec{I} es el tensor identidad, definido:

$$\vec{I} = \delta_{ij}\vec{e}_i\vec{e}_j \quad (92)$$

Donde δ_{ij} es el delta de *Kronecker*: $\delta_{ij} = \begin{cases} 0 \rightarrow i \neq j \\ 1 \rightarrow i = j \end{cases}$

Todas estas ecuaciones son válidas dentro de cada material que compone cada fase. Es posible también expresar las ecuaciones de balance como una ecuación en forma canónica, así:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{v} \phi = \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \rho f \quad (93)$$

Donde ϕ es la propiedad conservada, \vec{J} el flux difusivo de dicha propiedad, f es su fuente

o sumidero y \vec{v} el vector velocidad. En la interfase ocurre la discontinuidad de las propiedades, sin embargo sus flux deben conservarse (condiciones de salto de las ecuaciones de transporte) Passman (1990), por lo tanto:

$$\left[\rho \phi (\vec{v} - \vec{v}_i) + \vec{J} \right] \cdot \vec{n} = S_i^\phi \quad (94)$$

Donde \vec{v}_i representa la velocidad de la interfase, \vec{v} la velocidad del fluido en un determinado lado de la interfase, S_i^ϕ la fuente o sumidero de ϕ sobre la interfase y \vec{n} el vector unitario normal a la interfase. La presencia del salto se produce mediante la diferencia de la ecuación (94) evaluada a ambos lados de la interfase e igualada a S_i^ϕ . En la Tabla 14 se definen las propiedades de cada uno de los términos de las ecuaciones (93) y (94) para cada una de las ecuaciones de transporte.

Tabla 14

Variables de las ecuaciones de conservación (Drew, 1992)

Ecuación de conservación	ϕ	\vec{J}	f	S_i^ϕ
Masa	1	0	0	0
Cantidad de movimiento	\vec{v}	\vec{T}	\vec{g}	\vec{m}_i^σ
Energía	$U + \frac{1}{2}v^2$	$\vec{T} \cdot \vec{v} - \vec{q}$	$\vec{g} \cdot \vec{v} + \dot{q}$	\vec{e}_i^σ

4.1.4. Ecuaciones promediadas. De acuerdo con la Figura 23, un adecuado tratamiento a las ecuaciones locales y condiciones de salto, generan las denominadas: ecuaciones promediadas. El método de promediación utilizado aquí es la media conjunta, dada por ecuación (86). La aplicación de este método de promediación requiere que se defina una “función indicadora de fase” o “variable característica de fase” χ_α , que indica la presencia o no de la fase α en un punto

\vec{x} del dominio de solución en un tiempo t cualquiera, así:

$$\chi_{\alpha}(\vec{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{si en } t \vec{x} \in \alpha \\ 0 & \text{si en } t \vec{x} \notin \alpha \end{cases} \quad (95)$$

χ_{α} es un artificio matemático que ayuda en la deducción de las ecuaciones de conservación y permite lidiar con las discontinuidades físicas y matemáticas inherentes a flujos multifase. La derivada material de χ_{α} en la interfase tiene la propiedad presentada en la ecuación (96).

$$\frac{D_i \chi_{\alpha}}{Dt} = \frac{\partial \chi_{\alpha}}{\partial t} + \vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \chi_{\alpha} = 0 \quad (96)$$

Donde el sub-índice i representa la interfase. Esta ecuación se denomina *ecuación topológica* (Drew, 1992, 1983). Si se multiplica la ecuación (93) por la función indicadora de fase y se aplica el operador de promediación $\langle \rangle$, relacionado con la ecuación (86) se obtiene:

$$\left\langle \chi_{\alpha} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right\rangle + \langle \chi_{\alpha} \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{v} \phi \rangle - \langle \chi_{\alpha} \vec{\nabla} \cdot \vec{J} \rangle - \langle \chi_{\alpha} \rho f \rangle = 0 \quad (97)$$

Los campos de las variables instantáneas pueden ser descompuestos como una superposición lineal de un campo medio más una fluctuación.

$$\begin{aligned} \phi &= \langle \phi \rangle + \phi' & \vec{v} &= \langle \vec{v} \rangle + \vec{v}' \\ \rho &= \langle \rho \rangle + \rho' & \vec{J} &= \langle \vec{J} \rangle + \vec{J}' \end{aligned} \quad (98)$$

Reemplazando (98) en (97) y aplicando propiedades de la promediación, se obtiene la ecuación (99). Los detalles acerca de las propiedades y el procedimiento de cálculo se encuentran en Rezende et al. (2015).

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \chi_\alpha (\rho \langle \phi \rangle) \rangle}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \langle \chi_\alpha (\rho \langle \vec{v} \rangle \langle \phi \rangle) \rangle - \vec{\nabla} \cdot \langle \chi_\alpha \left[\langle \vec{J} \rangle - (\rho \vec{v}' \phi') \right] \rangle - \\ \langle \chi_\alpha \rho f \rangle = \left\langle \left\{ \rho \langle \phi \rangle \left[(\langle \vec{v} \rangle + \vec{v}') - \vec{v}_i \right] - \left(\langle \vec{J} \rangle + \vec{J}' \right) \right\} \cdot \vec{\nabla} \chi_\alpha \right\rangle \end{aligned} \quad (99)$$

La ecuación (99) es la ecuación de conservación promediada de la propiedad ϕ . El paso a seguir es utilizar la Tabla 14 para obtener cada ecuación de conservación:

Conservación de masa

$$\frac{\partial \langle \chi_\alpha \rho \rangle}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \langle \chi_\alpha \rho \langle \vec{v} \rangle \rangle = \langle \rho \left[(\langle \vec{v} \rangle + \vec{v}') - \vec{v}_i \right] \cdot \vec{\nabla} \chi_\alpha \rangle \quad (100)$$

Conservación de cantidad de movimiento

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \chi_\alpha (\rho \langle \vec{v} \rangle) \rangle}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \langle \chi_\alpha (\rho \langle \vec{v} \rangle \langle \vec{v} \rangle) \rangle = \vec{\nabla} \cdot \langle \chi_\alpha \left[\langle \vec{T} \rangle - (\rho \vec{v}' \vec{v}') \right] \rangle + \\ \langle \chi_\alpha \rho \vec{g} \rangle + \left\langle \left\{ \rho \langle \vec{v} \rangle \left[(\langle \vec{v} \rangle + \vec{v}') - \vec{v}_i \right] - \left(\langle \vec{T} \rangle + \vec{T}' \right) \right\} \cdot \vec{\nabla} \chi_\alpha \right\rangle \end{aligned} \quad (101)$$

Conservación de energía

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \langle \chi_\alpha (\rho \langle U + \frac{1}{2} v^2 \rangle) \rangle}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \langle \chi_\alpha (\rho \langle \vec{v} \rangle \langle U + \frac{1}{2} v^2 \rangle) \rangle = \\
& \vec{\nabla} \cdot \langle \chi_\alpha \left\{ \langle \vec{T} \cdot \vec{v} - \vec{q} \rangle - \left[\rho \vec{v}' \left(U + \frac{1}{2} v^2 \right) \right] \right\} \rangle + \langle \chi_\alpha \rho (\vec{g} \cdot \vec{v} + \dot{q}) \rangle + \\
& \langle \left\{ \rho \langle U + \frac{1}{2} v^2 \rangle [(\langle \vec{v} \rangle + \vec{v}') - \vec{v}_i] - \left[\langle \vec{T} \cdot \vec{v} - \vec{q} \rangle + (\vec{T} \cdot \vec{v} - \vec{q}) \right] \right\} \cdot \vec{\nabla} \chi_\alpha \rangle \quad (102)
\end{aligned}$$

Si se quisiera podría reemplazarse \vec{T} promediado en las ecuaciones (101) y (102) para obtener la expresión completa.

$$\langle \vec{T} \rangle = - \langle p \rangle \vec{I} + 2\mu \langle \vec{D} \rangle \quad (103)$$

4.1.5. Variables ponderadas. Hasta el momento, la forma en la que se presentan las ecuaciones (100) a (102) no es del todo apropiada para describir el flujo, debido que todas las propiedades locales se definen en términos de la función indicadora de fase. Cuando se aplica el operador de media a la función indicadora de fase éste resulta en una variable comúnmente denominada “fracción volumétrica”:

$$r_\alpha \equiv \langle \chi_\alpha \rangle \quad (104)$$

La función indicadora de fase es discontinua por definición. En principio, podría parecer que el problema de la singularidad en las ecuaciones aún persiste, sin embargo, únicamente es utilizada la media, es decir, actuando dentro del operador integral como una función *delta de Dirac*.

rac. A la luz de la discusión acerca de los procedimientos de promediación, específicamente, la ecuación (86), la media de la función indicadora de fase representa la “probabilidad” de encontrar la fase α en el punto \vec{x} y tiempo t , y esta probabilidad es continua variando de cero a uno. En el modelo de varios fluidos (estrictamente llamado *Two-Fluid Model*), es común argumentar que los campos de las variables de cada fase son continuos e “interpenetrantes”, es decir, que los campos coexisten sobrepuestos en una posición \vec{x} del espacio. De acuerdo con esta afirmación, dos fases dispersas o no, podrían ocupar el mismo espacio al mismo tiempo, lo que va en contra de la hipótesis del continuo. Sin embargo, esta afirmación cobra sentido cuando se tiene en cuenta el concepto de probabilidad. La ecuación (99) se interpreta así: el valor de un campo ϕ cualquiera de una fase α con coordenadas espacio–tiempo definidas, se obtiene por el valor que el campo asume en este punto, multiplicado por la probabilidad de que esta fase se encuentre presente en dicho punto; si la probabilidad en este punto es cero, el valor del campo observado también es cero.

De esta manera, los resultados obtenidos por el modelo de varios fluidos representan la sobreposición de campos de probabilidad de los campos de las variables instantáneas, en el caso que únicamente éstas estuvieran presentes en el dominio. Así, dos fases pueden coexistir en determinado punto, debido que ambas poseen alguna probabilidad de que se encuentren allí. La única restricción es que la suma de las probabilidades sea igual a uno (Ishii and Hibiki, 2010).

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} r_{\alpha} = 1 \quad (105)$$

Donde N_f representa el número de fases. Es importante resaltar que este modelo es válido únicamente si se asume que las fases se encuentran mezcladas en una escala mucho menor a la que se desea resolver. Ahora bien, debido que los resultados obtenidos con las ecuaciones son una media de las realizaciones, difícilmente los resultados de un único experimento o “realización” serán reproducidos exactamente por el modelo. Las ecuaciones proporcionan la media del conjunto de experimentos, en consecuencia las fluctuaciones instantáneas se pierden con el procedimiento de promediación.

Las demás variables de campo son definidas como **variables ponderadas**. Es posible ponderar una variable de campo en función de χ_α , en este caso se tiene una *media física*; o se puede ponderar por la masa $\chi_\alpha \rho$ denominada *media másica*:

$$\begin{aligned}\langle \phi_\alpha \rangle &\equiv \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \phi \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rho \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \phi \rangle \rangle}{r_\alpha \rho} \\ \langle \phi_\alpha \rangle &\equiv \frac{\langle \chi_\alpha \langle \phi \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \langle \phi \rangle \rangle}{r_\alpha}\end{aligned}\quad (106)$$

De esta manera, se tiene para la concentración másica a partir de una media física:

$$\langle \rho_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \rho \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \rho \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \rho \rangle \quad (107)$$

Para la velocidad por media másica,

$$\langle \vec{v}_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \vec{v}_\alpha \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rho \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \vec{v}_\alpha \rangle \rangle}{r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle} \Rightarrow r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \vec{v}_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \rho \langle \vec{v}_\alpha \rangle \rangle \quad (108)$$

Para la energía interna por media másica,

$$\langle U_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle U_\alpha \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rho \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle U_\alpha \rangle \rangle}{r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle} \Rightarrow r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle U_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \rho \langle U_\alpha \rangle \rangle \quad (109)$$

Presión,

$$\langle p_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \langle p_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \langle p \rangle \rangle \quad (110)$$

Tensor tasa de deformación,

$$\mu_\alpha \langle \vec{D}_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \mu \langle \vec{D} \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \mu \langle \vec{D} \rangle \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \mu_\alpha \langle \vec{D}_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \mu \langle \vec{D} \rangle \rangle \quad (111)$$

Tensor de Reynolds,

$$\vec{T}_\alpha^{Re} \equiv -\frac{\langle \chi_\alpha (\rho \vec{v}' \vec{v}') \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = -\frac{\langle \chi_\alpha (\rho \vec{v}' \vec{v}') \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \vec{T}_\alpha^{Re} = -\langle \chi_\alpha (\rho \vec{v}' \vec{v}') \rangle \quad (112)$$

Flux de calor,

$$\langle \vec{q}_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \langle \vec{q} \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \langle \vec{q} \rangle \rangle}{r_\alpha} \Rightarrow r_\alpha \langle \vec{q}_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \langle \vec{q} \rangle \rangle \quad (113)$$

Fuente de energía,

$$\langle \dot{q}_\alpha \rangle \equiv \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \dot{q}_\alpha \rangle \rangle}{\langle \chi_\alpha \rho \rangle} = \frac{\langle \chi_\alpha \rho \langle \dot{q}_\alpha \rangle \rangle}{r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle} \Rightarrow r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \dot{q}_\alpha \rangle = \langle \chi_\alpha \rho \langle \dot{q}_\alpha \rangle \rangle \quad (114)$$

Y fuerza de cuerpo,

$$\langle \chi_\alpha \rho \vec{g} \rangle = \langle \chi_\alpha \rho \rangle \vec{g} = r_\alpha \rho_\alpha \vec{g} \Rightarrow \langle \chi_\alpha \rho \vec{g} \rangle = r_\alpha \langle \rho \rangle \vec{g} \quad (115)$$

El tensor de Reynolds de la ecuación (112) es interpretado como un campo fluctuante utilizado para el calculo del efecto de las fluctuaciones de una variable en la ecuación de cantidad de movimiento con respecto a su valor medio; además el tensor de *Reynolds* tiene en cuenta los esfuerzos adicionales que se generan por los remolinos, y a diferencia de los esfuerzos viscosos, son de carácter convectivo.

En la ecuación de energía, es conveniente combinar las fluctuaciones de las energías interna, cinética y de trabajo, así (Ishii and Mishima, 1984):

$$\vec{q}_\alpha^{Re} = U_\alpha^{Re} + v_\alpha^{Re} + \vec{q}_\alpha^W \quad (116)$$

Donde,

$$U_{\alpha}^{Re} \equiv \frac{\langle \chi_{\alpha} (\rho \vec{v}'_{\alpha} U'_{\alpha}) \rangle}{\langle \chi_{\alpha} \rangle} = \frac{\langle \chi_{\alpha} (\rho \vec{v}'_{\alpha} U'_{\alpha}) \rangle}{r_{\alpha}} \Rightarrow r_{\alpha} U_{\alpha}^{Re} = \langle \chi_{\alpha} (\rho \vec{v}'_{\alpha} U'_{\alpha}) \rangle \quad (117)$$

$$v_{\alpha}^{Re} \equiv \frac{1}{2} \frac{\langle \chi_{\alpha} (\rho \vec{v}'^2) \rangle}{\langle \chi_{\alpha} \rho_{\alpha} \rangle} = \frac{1}{2} \frac{\langle \chi_{\alpha} (\rho \vec{v}'^2) \rangle}{r_{\alpha} \langle \rho_{\alpha} \rangle} \Rightarrow r_{\alpha} v_{\alpha}^{Re} = \frac{1}{2} \langle \chi_{\alpha} (\rho \vec{v}'^2) \rangle \quad (118)$$

$$\vec{q}_{\alpha}^W \equiv -\frac{\langle \chi_{\alpha} (\vec{T} \cdot \vec{v}'_{\alpha}) \rangle}{\langle \chi_{\alpha} \rangle} = -\frac{\langle \chi_{\alpha} (\vec{T} \cdot \vec{v}'_{\alpha}) \rangle}{r_{\alpha}} \Rightarrow r_{\alpha} \vec{q}_{\alpha}^W = -\langle \chi_{\alpha} (\vec{T} \cdot \vec{v}'_{\alpha}) \rangle \quad (119)$$

Al realizar la promediación de las ecuaciones locales de conservación, surgieron nuevos términos. Estos términos, presentes al lado derecho de la igualdad en la ecuación (99), corresponden a la interacción entre las fases debido a la interfase: Flux convectivo y molecular. A continuación, la representación de cada uno de ellos.

Flux de masa interfacial

$$\Gamma_{\alpha} \equiv \langle \rho [(\langle \vec{v} \rangle + \vec{v}') - \vec{v}_i] \cdot \vec{\nabla} \chi_{\alpha} \rangle \quad (120)$$

Flux de momento interfacial

$$\Gamma_{\alpha} \langle \vec{v}_{\alpha} \rangle \equiv \langle \rho \langle \vec{v} \rangle [(\langle \vec{v} \rangle + \vec{v}') - \vec{v}_i] \cdot \vec{\nabla} \chi_{\alpha} \rangle \quad (121)$$

Flux de energía interna interfacial

$$\Gamma_{\alpha} \langle U_{\alpha} \rangle \equiv \langle \rho \langle U \rangle [(\langle \vec{v} \rangle + \vec{v}') - \vec{v}_i] \cdot \vec{\nabla} \chi_{\alpha} \rangle \quad (122)$$

Flux de energía cinética interfacial

$$\frac{1}{2} \Gamma_{\alpha} \langle v_{\alpha} \rangle^2 \equiv \frac{1}{2} \langle \rho \langle v^2 \rangle [(\langle \vec{v} \rangle + \vec{v}') - \vec{v}_i] \cdot \vec{\nabla} \chi_{\alpha} \rangle \quad (123)$$

Los fluxes moleculares en la interfase actúan como fuentes de masa, cantidad de movimiento, energía o entropía en la interfase. La fuente de cantidad de movimiento, calor y trabajo interfacial se definen de acuerdo con las ecuaciones (124) a (126) respectivamente.

$$\vec{M}_{\alpha} \equiv - \left\langle \vec{T} \cdot \vec{\nabla} \chi_{\alpha} \right\rangle \quad (124)$$

$$\vec{E}_{\alpha} \equiv \langle \vec{q} \cdot \vec{\nabla} \chi_{\alpha} \rangle \quad (125)$$

$$\vec{W}_{\alpha} \equiv - \left\langle \vec{T} \cdot \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \chi_{\alpha} \right\rangle \quad (126)$$

Reemplazando las ecuaciones (107) a (126) en las ecuaciones (100) a (102) se obtienen las ecuaciones de conservación promediadas, así:

Conservación de masa

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle) + \vec{\nabla} \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \vec{v}_\alpha \rangle) = \Gamma_\alpha \quad (127)$$

Conservación de cantidad de movimiento

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \vec{v}_\alpha \rangle) + \vec{\nabla} \cdot (r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \vec{v}_\alpha \rangle \otimes \langle \vec{v}_\alpha \rangle) = & -\vec{\nabla} (r_\alpha \langle p_\alpha \rangle) + \\ & \vec{\nabla} \cdot \left[r_\alpha \left(2\mu_\alpha \langle \vec{D}_\alpha \rangle + \vec{T}_\alpha^{Re} \right) \right] + r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \vec{g} + \Gamma_\alpha \vec{v}_\alpha + \vec{M}_\alpha \end{aligned} \quad (128)$$

Conservación de energía

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \left(\langle U_\alpha \rangle + \frac{1}{2} \langle v_\alpha \rangle^2 + v_\alpha^{Re} \right) \right] + \\ & \vec{\nabla} \cdot \left[r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle \langle \vec{v}_\alpha \rangle \left(\langle U_\alpha \rangle + \frac{1}{2} \langle v_\alpha \rangle^2 + v_\alpha^{Re} \right) \right] = \\ \vec{\nabla} \cdot r_\alpha \left[\left(2\mu_\alpha \langle \vec{D}_\alpha \rangle + \vec{T}_\alpha^{Re} \right) \cdot \langle \vec{v}_\alpha \rangle \langle \vec{q}_\alpha \rangle - \vec{q}_\alpha^{Re} \right] + & r_\alpha \langle \rho_\alpha \rangle (\dot{q}_\alpha + \vec{g} \cdot \langle \vec{v}_\alpha \rangle) + \\ & E_\alpha + W_\alpha + \left\{ U_{\alpha i} + \frac{1}{2} [(v_{\alpha i})^2] \right\} \Gamma_\alpha \end{aligned} \quad (129)$$

Las condiciones de salto promediadas para las ecuaciones de conservación son:

Masa

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} \Gamma_{\alpha} = 0 \quad (130)$$

Cantidad de movimiento

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} \left(\Gamma_{\alpha} \langle \vec{v}_{\alpha} \rangle + \vec{M}_{\alpha} \right) = \langle \vec{m}_i^{\sigma} \rangle \quad (131)$$

Energía

$$\sum_{\alpha=1}^{N_f} \left[\Gamma_{\alpha} \left(U + \frac{1}{2} v^2 \right)_{\alpha} + \vec{E}_{\alpha} + \vec{W}_{\alpha} \right] = \langle \vec{e}_i^{\sigma} \rangle \quad (132)$$

Donde \vec{m}_i^{σ} corresponde a la fuerza ejercida sobre la interfase debido a la tensión superficial y \vec{e}_i^{σ} la fuente de energía interfacial. A diferencia de las ecuaciones obtenidas por la metodología de volúmenes de control donde los términos de la interfase deben postularse, aquí surgieron naturalmente del proceso de promediación. Adicionalmente, las singularidades asociadas a la interfase desaparecen porque la información local no existe más; lo que se tiene es información media, absorbiendo toda la información de micro escala, esta información no desaparece del balance, simplemente surge como dos términos fuente nuevos: uno debido a la cantidad de movimiento transportada por el flux a través de la interfase y el otro por las tensiones que actúan sobre la misma. Las condiciones de salto que eran condiciones de contorno aplicadas a la interfase, pasan a ser solo ecuaciones restrictivas (Rezende et al., 2015). El proceso de promediación elimina las fluc-

tuaciones locales instantáneas y el sistema de ecuaciones que hasta entonces era matemáticamente cerrado, ahora no lo es, debido que parte de la información se pierde, por lo tanto es necesario el uso de ecuaciones constitutivas denominadas modelos de cierre (Ishii and Mishima, 1984).

4.1.6. Modelo heterogéneo: *Two-Fluid*. En este modelo se considera que el campo de presión es compartido por todas las fases:

$$p_1 = p_2 = \dots = p_{N_f} = p \quad (133)$$

Esta consideración facilita el acoplamiento de las ecuaciones por el campo de presión, siendo aceptable para flujos subsónicos Burns and Zwart (2003). En el modelo heterogéneo, cada fase posee su propio campo de velocidad; si el flujo es turbulento, debe determinarse un valor apropiado para el tensor de Reynolds y deben postularse ecuaciones constitutivas para la densidad de fuerza interfacial (Rezende et al., 2015).

4.1.7. Modelado de la densidad de fuerza interfacial. Si se observa la ecuación (124), el término \vec{M}_α es la conexión matemática y física que permite la interacción entre las fases. Los primeros estudios de las fuerzas que actúan sobre la interfase fueron realizados sobre una única esfera rígida en un medio líquido quieto, obteniendo soluciones analíticas que describían las fuerzas que actúan en la superficie de las partículas y de este modo definir su comportamiento dentro del seno del fluido (Basset, 1888a,b; Stokes, 1851). En la segunda mitad del siglo XIX,

Stokes (1851) obtuvo la ley que lleva su nombre:

$$F_d = -6\pi\mu r_p v_s \quad (134)$$

Donde r_p es el radio de la partícula y v_s la velocidad de sedimentación de la misma.

$$v_s = \frac{2}{9}g \frac{\Delta\rho}{\mu} r_p^2 \quad (135)$$

La ecuación (135) es válida para una esfera lisa, número de Reynolds bajo y sin interferencia con otras partículas. Cuando existe equilibrio entre la fuerza de arrastre y la fuerza gravitacional o de empuje,

$$F_g = \Delta\rho g \frac{4}{3}\pi r_p^3 \quad (136)$$

La partícula no acelera más, alcanzando una velocidad constante denominada velocidad terminal (Figura 17). Este abordaje es válido únicamente para casos específicos sin tener en consideración los efectos inerciales y no lineales. Cuando el número de Reynolds es elevado, el término inercial no puede ser despreciado, lo que aumenta la complejidad del problema. Para dar solución a dicho inconveniente, los investigadores Basset, Boussinesq y Oseen crearon la ecuación que lleva su nombre, la cual considera una aproximación lineal para los términos de inercia. La ecuación BBO (Basset–Boussinesq–Oseen) describe el movimiento de una partícula de diámetro pequeño en régimen transitorio de la siguiente manera (Hiltunen et al., 2009):

$$\frac{\pi}{6}\rho_p d_p^3 \frac{d\vec{v}_p}{dt} = \underbrace{3\pi\mu d_p (\vec{v}_f - \vec{v}_p)}_{I} - \underbrace{\frac{\pi}{6}d_p^3 \vec{\nabla} p}_{II} + \underbrace{\frac{\pi}{12}\rho_f d_p^3 \frac{d}{dt} (\vec{v}_f - \vec{v}_p)}_{III} + \underbrace{\frac{3}{2}d_p^2 \sqrt{\pi\rho_f\mu} \int_{t_0}^t \frac{1}{\sqrt{t-t'}} \frac{d}{dt'} (\vec{v}_f - \vec{v}_p) dt'}_{IV} + \underbrace{\sum_k F_k}_{V} \quad (137)$$

Donde el subscrito f corresponde a la fase fluida y p la fase discreta. El término (I) representa el arrastre de Stokes en términos de la velocidad relativa; (II) la fuerza debida al gradiente de presión; (III) la fuerza de masa virtual; (IV) la fuerza de Basset; y (V) las demás fuerzas que puedan actuar sobre la partícula. El gradiente de presión puede obtenerse a partir de la ecuación de Navier–Stokes,

$$-\Delta p = \frac{D\vec{v}_f}{Dt} - \mu \vec{\nabla}^2 \vec{v}_f \quad (138)$$

Otras fuerzas tales como la fuerza de sustentación, lubricación de la pared y disipación turbulenta, intentan maximizar el número de efectos posibles que actúan sobre la partícula. Una práctica común es determinar los efectos término a término y encontrar modelos analíticos cerrados y/o ajustados experimentalmente. A continuación se describen de manera general las fuerzas interfaciales utilizadas en la presente investigación.

4.1.7.1. Fuerza de arrastre. El arrastre se debe a la fricción dinámica entre dos fluidos o un fluido y una superficie rígida. Esta fuerza está presente de manera predominante en

prácticamente todos los flujos multifase y no puede despreciarse. La forma más simple de representar la fuerza de arrastre es mediante la ley de Stokes, que considera la partícula moviéndose en un medio fluido estancado. Cuando el fluido posee movimiento relativo, la fuerza es proporcional a la velocidad relativa como en la ecuación (139).

$$\vec{F}_D = C_{\alpha\beta} (\vec{v}_\beta - \vec{v}_\alpha) \quad (139)$$

Donde $C_{\alpha\beta}$ depende en principio de la masa y diámetro de la partícula. El coeficiente de arrastre es definido como,

$$C_D = \frac{\vec{F}_D}{\frac{1}{2}\rho A \vec{v}^2} \quad (140)$$

Donde A es el área proyectada perpendicular al flujo, ρ y \vec{v} la masa específica y la velocidad de la corriente fluida. Asociando las ecuaciones (139) y (140) se obtiene:

$$\vec{F}_D = \frac{1}{2} C_D \rho_\alpha A \|\vec{v}_\beta - \vec{v}_\alpha\| (\vec{v}_\beta - \vec{v}_\alpha) \quad (141)$$

La ecuación (141) contabiliza la fuerza de arrastre para una única partícula esférica, cuya área proyectada es igual a $\frac{\pi d_p^2}{4}$. La fracción volumétrica de partículas r_β es la relación entre el volumen de partículas $n_p V_p$ y el volumen total de la mezcla. Así el número total de partículas por

unidad de volumen puede calcularse como:

$$n_p = \frac{r_\beta}{V_p} = \frac{6r_\beta}{\pi d_p^3} \quad (142)$$

En consecuencia, la fuerza de arrastre total ejercida en un conjunto de partículas es representada por:

$$\vec{F}_D = \frac{3 C_D}{4 d_p} r_\beta \rho_\alpha \|\vec{v}_\beta - \vec{v}_\alpha\| (\vec{v}_\beta - \vec{v}_\alpha) \quad (143)$$

Comparando las ecuaciones (139) y (143) es posible decir que,

$$C_{\alpha\beta} = \frac{3 C_D}{4 d_p} r_\beta \rho_\alpha \|\vec{v}_\beta - \vec{v}_\alpha\| \quad (144)$$

Existen varias correlaciones que pueden utilizarse para calcular el coeficiente de arrastre, dependiendo de los regímenes de flujo, la forma de las partículas entre otros. El número de Reynolds de partícula se define como:

$$Re_p = \frac{\rho_\alpha |\vec{v}_\beta - \vec{v}_\alpha| d_\beta}{\mu_\alpha} \quad (145)$$

Donde α y β representan la fase continua y discreta respectivamente. La fuerza de arrastre sobre un cuerpo puede dividirse en dos partes, la fuerza debida a la fricción superficial y aquella ejercida por la distribución de tensiones normales axisimétricas en la superficie del cuerpo, llamada arrastre de forma. A medida que Re_p aumenta, el arrastre de forma va incrementando su influencia

hasta llegar a ser la fuerza dominante. De esta manera surgen tres regímenes ampliamente conocidos en la literatura:

- *Régimen de Stokes* ($Re_p \sim 1$): En este régimen, el coeficiente de arrastre viene dado por:

$$C_D = \frac{24}{Re_p} \quad (146)$$

- *Región viscosa* ($1 < Re_p < 1000$): Tanto la fricción superficial como el arrastre de forma son importantes. Existen incontables correlaciones basadas en datos teóricos y experimentales siendo la más utilizada la propuesta por Ishii and Mishima (1984),

$$\frac{24}{Re_p} \left(1 + 0,15Re_p^{0,687} \right) \quad (147)$$

- *Región inercial o turbulenta* ($1000 < Re_p < 2 \times 10^5$): El arrastre de forma domina completamente y el coeficiente se torna prácticamente independiente del valor de Re_p , alcanzando un valor aproximado de

$$C_D = 0,44 \quad (148)$$

4.1.7.2. Fuerza de dispersión turbulenta. La dispersión turbulenta surge de la covarianza entre fluctuaciones del campo de fracción volumétrica y de velocidad (Shi et al., 2004). A partir de la descomposición y promediación de Reynolds aplicada a la ecuación de conservación

de masa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_\alpha \rangle \langle r_\alpha \rangle) + \vec{\nabla} \cdot (\langle \rho_\alpha \rangle \langle r_\alpha \rangle \langle \vec{v}_\alpha \rangle) = -\vec{\nabla} \cdot (\langle \rho_\alpha \rangle \langle r'_\alpha \vec{v}'_\alpha \rangle) \quad (149)$$

El lado derecho de la igualdad se puede aproximar por un mecanismo de difusión de gradiente (igual que los modelos de turbulencia), así:

$$\langle \rho_\alpha \rangle \langle r'_\alpha \vec{v}'_\alpha \rangle \approx \frac{\mu_T}{\sigma_T} \vec{\nabla} \langle r_\alpha \rangle \quad (150)$$

Donde μ_T y σ_T son la viscosidad y el número de *Prandtl-Schmidt* turbulentos. Incluso en situaciones donde se tiene un fluido incompresible o un flujo isocórico, la densidad local de la mezcla sufre fluctuaciones debido a las diferentes proporciones de las fases presentes en cierta región a lo largo del tiempo, y en este caso, es conveniente utilizar una media de Favre para la descripción de las propiedades Burns et al. (2004), de la siguiente manera:

$$\tilde{\vec{v}}_\alpha = \frac{\langle r_\alpha \vec{v}_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} = \langle \vec{v}_\alpha \rangle + \frac{\langle r'_\alpha \vec{v}'_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} \quad (151)$$

Entonces

$$\langle \vec{v}_\alpha \rangle = \tilde{\vec{v}}_\alpha - \frac{\langle r'_\alpha \vec{v}'_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} = \tilde{\vec{v}}_\alpha + \langle \vec{v}''_\alpha \rangle \quad (152)$$

Donde $\langle \vec{v}''_{\alpha} \rangle \equiv -\frac{\langle r'_{\alpha} \vec{v}'_{\alpha} \rangle}{\langle r_{\alpha} \rangle}$, y por la media de Reynolds:

$$\vec{v}_{\alpha} = \langle \vec{v}_{\alpha} \rangle + \vec{v}'_{\alpha} = \tilde{\vec{v}}_{\alpha} + \langle \vec{v}''_{\alpha} \rangle + \vec{v}'_{\alpha} \quad (153)$$

Note que a diferencia de la media de *Reynolds*, $\langle \vec{v}''_{\alpha} \rangle \neq 0$. Así, es posible reescribir la ecuación (149) en función del campo de velocidad ponderado por la media de Favre,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_{\alpha} \rangle \langle r_{\alpha} \rangle) + \vec{\nabla} \cdot (\langle \rho_{\alpha} \rangle \langle r_{\alpha} \rangle \langle \tilde{\vec{v}}_{\alpha} \rangle) = 0 \quad (154)$$

Retornando a la forma patrón de la ecuación de continuidad pero con el campo de velocidad medio de Favre. La fuerza de dispersión turbulenta surge de la aplicación de este procedimiento de descomposición y promediación a los términos de las fuerzas interfaciales, generando igual número de términos con correlaciones entre el campo de velocidad y el de fracción volumétrica en cada fuerza que estuviese actuando: arrastre, masa virtual, Basset, sustentación, entre otras. Incluso, estudiando la fuerza de arrastre, las demás covarianzas no se muestran significativas (Burns et al., 2004). El mecanismo de dispersión se presenta por la acción de los vórtices que arrastran las partículas, y los mismos vórtices sufren acción de la interacción de estas partículas que modulan la turbulencia. Este mecanismo es importante principalmente para números de *Stokes* pequeños, de esta forma, apenas la descomposición de la fuerza de arrastre es tomada en consideración,

$$\vec{F}_D = \underbrace{\frac{6r_{\beta}}{d_p}}_{A_{\alpha\beta}} \overbrace{\frac{\rho C_{D\alpha}}{8} \|\vec{v}_{\beta} - \vec{v}_{\alpha}\|}^{c_{\alpha\beta}} (\vec{v}_{\beta} - \vec{v}_{\alpha}) \quad (155)$$

que por descomposición y promediación devuelve,

$$\vec{F}_D = \langle c_{\alpha\beta} \rangle (\tilde{v}_\beta - \tilde{v}_\alpha) + \vec{F}_{TD} \quad (156)$$

El segundo término del lado derecho de la ecuación se denomina Fuerza de Dispersión Turbulenta, \vec{F}_{TD} , hasta ahora un mecanismo de transporte de masa de carácter difusivo de la ecuación de continuidad. En las ecuaciones de cantidad de movimiento, ésta surge como una fuerza interfacial más Burns et al. (2004):

$$\vec{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left(\frac{\langle r'_\beta \vec{v}'_\beta \rangle}{\langle r'_\beta \rangle} - \frac{\langle r'_\alpha \vec{v}'_\alpha \rangle}{\langle r'_\alpha \rangle} - \frac{\langle A'_{\alpha\beta} (\vec{v}'_\beta - \vec{v}'_\alpha) \rangle}{\langle A'_{\alpha\beta} \rangle} \right) \quad (157)$$

Aplicando la aproximación de difusión de gradiente (Hipótesis de Boussinesq), la ecuación (157) se modela de la siguiente manera:

$$\vec{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left[\left(\frac{\nu_{T\beta}}{\sigma_{T\beta}} \right) \frac{\vec{\nabla} \langle r_\beta \rangle}{\langle r_\beta \rangle} - \left(\frac{\nu_{T\alpha}}{\sigma_{T\alpha}} \right) \frac{\vec{\nabla} \langle r_\alpha \rangle}{\langle r_\alpha \rangle} + \left(\frac{\nu_{T\beta}}{\sigma_{T\beta}} - \frac{\nu_{T\alpha}}{\sigma_{T\alpha}} \right) \frac{\vec{\nabla} \langle A_{\alpha\beta} \rangle}{\langle A_{\alpha\beta} \rangle} \right] \quad (158)$$

En caso de tener un sistema polidisperso, el área interfacial de la fase dispersa β viene dado por:

$$A_{\alpha\beta} = \frac{6r_\beta}{d_{p\beta}} \quad (159)$$

Por lo tanto, se puede escribir

$$\frac{\langle A'_{\alpha\beta} (\vec{v}'_{\beta} - \vec{v}'_{\alpha}) \rangle}{\langle A'_{\alpha\beta} \rangle} = \frac{\langle r'_{\beta} (\vec{v}'_{\beta} - \vec{v}'_{\alpha}) \rangle}{\langle r'_{\beta} \rangle} = \frac{\langle r'_{\beta} \vec{v}'_{\beta} \rangle}{\langle r'_{\beta} \rangle} - \frac{\langle r'_{\beta} \vec{v}'_{\alpha} \rangle}{\langle r'_{\beta} \rangle} \quad (160)$$

Reemplazando este término en la ecuación (157) y simplificando se obtiene la ecuación (161):

$$\vec{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left(\frac{\langle r'_{\beta} \vec{v}'_{\alpha} \rangle}{\langle r'_{\beta} \rangle} - \frac{\langle r'_{\alpha} \vec{v}'_{\alpha} \rangle}{\langle r'_{\alpha} \rangle} \right) \quad (161)$$

la cual, modelada por la aproximación de difusión de gradiente, se reduce a

$$\vec{F}_{TD} = \langle c_{\alpha\beta} \rangle \left(\frac{\nu_{T\alpha}}{\sigma_{T\alpha}} \right) \left(\frac{\vec{\nabla} \langle r_{\beta} \rangle}{\langle r_{\beta} \rangle} - \frac{\vec{\nabla} \langle r_{\alpha} \rangle}{\langle r_{\alpha} \rangle} \right) \quad (162)$$

La ecuación (162) depende de la viscosidad turbulenta y del número de *Prandtl-Schmidt* turbulento de la fase continua. Otro modelo ampliamente utilizado para la fuerza de dispersión turbulenta es el propuesto por Lopez de Bertodano et al. (1994):

$$\vec{F}_{TD} = -C_{TD} \rho_{\alpha} k \vec{\nabla} r_{\alpha} \quad (163)$$

Donde k es la energía cinética turbulenta de la fase continua. Esta ecuación aún conserva la relación funcional con el gradiente de fracción volumétrica, pero considerando una dependencia con la energía cinética turbulenta (ya implícita en el modelo anterior por la viscosidad turbulenta). El parámetro de cierre C_{TD} depende del número de *Stokes*.

4.2. Modelo de turbulencia

La turbulencia consiste en las fluctuaciones del campo de flujo en el tiempo y el espacio, aportando un efecto significativo a las características del flujo. La presencia de turbulencia aumenta la difusión de masa, calor y cantidad de movimiento (Wilcox et al., 1998).

Boussinesq (1877) concibió el transporte de cantidad de movimiento como un proceso de *difusión* de cantidad de movimiento. La hipótesis de asume que las tensiones de cizalla causadas por los vórtices turbulentos se relacionan linealmente con la tasa de deformación del flujo medio. La constante de proporcionalidad se denomina *viscosidad turbulenta*, así (Deschamps, 2002):

$$-\rho \langle u'v' \rangle \equiv \mu_T \frac{\partial U}{\partial y} \quad (164)$$

A partir de la hipótesis de Boussinesq (1877), Kolmogorov (1941) concluyó que las componentes del tensor tensión de *Reynolds* deberían ser definidas como:

$$\tau_{ij} = -\rho \langle u'_i u'_j \rangle = 2\mu_T \langle D_{ij} \rangle - \frac{2}{3}\rho k \delta_{ij} \quad (165)$$

Donde $\langle D_{ij} \rangle$ denota el tensor de tasa de deformación del flujo medio. La viscosidad turbulenta μ_T no es una propiedad del fluido y si del flujo, por lo tanto depende de las condiciones locales del mismo. Finalmente, la viscosidad turbulenta es adicionada a la viscosidad dinámica en las ecuaciones promediadas de transporte (Sección 4.1.5).

4.2.1. Shear Stress Transport – SST Model. El modelo de turbulencia *Shear Stress Transport* fue propuesto por el investigador de la NASA Florian R Menter (1994) y la idea es retener la formulación robusta y exacta del modelo $k - \omega$ en la región cercana a la pared y aprovechar la independencia del modelo $k - \varepsilon$ en la parte externa de la capa límite. Para conseguir esto, el modelo $k - \varepsilon$ se convierte en una formulación $k - \omega$ (Menter, 1994), así: el modelo $k - \omega$ estándar y el modelo $k - \varepsilon$ transformado, son multiplicados por una función de mezcla (F_1) y luego, ambos modelos se suman. La función de mezcla está diseñada para ser uno (1) en la región cercana a la pared, activando el modelo $k - \omega$; y cero (0) lejos de la pared, lo cual activa el modelo $k - \varepsilon$. El modelo SST se muestra a seguir (en términos de la derivada material):

Modelo $k - \omega$ original

$$\frac{D\rho k}{Dt} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_{k_1} \mu_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (166)$$

$$\frac{D\rho \omega}{Dt} = \frac{\gamma_1}{\nu_T} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_1 \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_{\omega_1} \mu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] \quad (167)$$

Modelo $k - \varepsilon$ transformado

$$\frac{D\rho k}{Dt} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_{k_2} \mu_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (168)$$

$$\frac{D\rho\omega}{Dt} = \frac{\gamma_2}{\nu_T} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_2 \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_{\omega_2} \mu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2\rho \sigma_{\omega_2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (169)$$

Donde ν_T es la viscosidad cinemática turbulenta; β^* , β_1 , β_2 , γ_1 , γ_2 , σ_{k_1} , σ_{k_2} , σ_{ω_1} y σ_{ω_2} son constantes. A continuación, las ecuaciones (166) y (167) son multiplicadas por F_1 y las ecuaciones (168) y (169) son multiplicadas por $(1 - F_1)$; al sumar cada grupo de ecuaciones se obtiene:

$$\frac{D\rho k}{Dt} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (170)$$

$$\frac{D\rho\omega}{Dt} = \frac{\gamma}{\nu_T} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_{\omega} \mu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2\rho (1 - F_1) \sigma_{\omega_2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (171)$$

Suponiendo que ϕ_1 representa cualquier constante del modelo $k - \omega$ original, ϕ_2 cualquier constante del modelo $k - \varepsilon$ transformado y ϕ cualquier constante del modelo resultante, entonces la relación entre ellas es:

$$\phi = F_1 \phi_1 + (1 - F_1) \phi_2 \quad (172)$$

Las constantes de las ecuaciones (166), (167) (grupo ϕ_1) y ecuaciones (168), (169) (grupo ϕ_2) son:

$$\begin{aligned} \sigma_{k_1} &= 0,85 ; & \sigma_{\omega_1} &= 0,5 ; & \beta_1 &= 0,075 ; & a_1 &= 0,31 \\ \beta^* &= 0,09 ; & k &= 0,41 ; & \gamma_1 &= \beta_1/\beta^* - \sigma_{\omega_1}k^2/\sqrt{\beta^*} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{k_2} &= 1,0 ; & \sigma_{\omega_2} &= 0,856 ; & \beta_1 &= 0,0828 \\ \beta^* &= 0,09 ; & k &= 0,41 ; & \gamma_2 &= \beta_2/\beta^* - \sigma_{\omega_2}k^2/\sqrt{\beta^*} \end{aligned}$$

Con las siguientes definiciones:

$$\tau_{ij} = \mu_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (173)$$

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4) \quad (174)$$

$$\arg_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0,09\omega y} ; \frac{500\nu}{y^2\omega} \right) ; \frac{4\rho\sigma_{\omega_2}k}{DC_{k\omega}y^2} \right] \quad (175)$$

Donde y es la distancia entre el punto de campo y la pared más cercana; $DC_{k\omega}$ es la porción positiva del término de difusión cruzada de la ecuación (171):

$$DC_{k\omega} = \max \left(2\rho\sigma_{\omega_2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j} ; 10^{-20} \right) \quad (176)$$

Las condiciones de frontera recomendadas para el modelo son (NASA, 2015):

$$\frac{U_\infty}{L} < \omega_\infty < 10 \frac{U_\infty}{L} \quad (177)$$

$$\frac{10^{-5}U_{\infty}^2}{Re_L} < k_{\infty} < \frac{0,1U_{\infty}^2}{Re_L} \quad (178)$$

$$\omega_{pared} = 10 \frac{6\nu}{\beta_1 (\Delta y_1)^2} \quad (179)$$

$$k_{pared} = 0 \quad (180)$$

Donde L es la longitud aproximada del dominio computacional. La combinación de los dos valores lejos de la pared (k_{∞} y ω_{∞}) debe producir una viscosidad turbulenta de flujo libre entre 10^{-5} y 10^{-2} veces la viscosidad laminar de flujo libre; por lo tanto, las condiciones de frontera para la turbulencia en la región lejana a la pared están algo abiertas a interpretación. La viscosidad cinemática turbulenta es definida de la siguiente manera:

$$v_T = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega ; \Omega F_2)} \quad (181)$$

Donde Ω es el valor absoluto de la vorticidad y F_2 se expresa mediante:

$$F_2 = \tanh(\arg_2^2) \quad (182)$$

Donde

$$arg_2 = \max \left(2 \frac{\sqrt{k}}{0,09\omega y} ; \frac{500v}{y^2\omega} \right) \quad (183)$$

4.3. Fase dispersa

La fase dispersa es tratada con un enfoque Lagrangiano, haciendo un seguimiento de las gotas a través de todo el campo de flujo. La fase dispersa intercambia masa, cantidad de movimiento y energía con la fase continua. La trayectoria de las gotas es analizada por medio de un balance de fuerzas, en el cual se iguala la inercia de las gotas con las fuerzas que actúan sobre ella, de la siguiente manera:

$$\frac{du_{i,gota}}{dt} = \frac{u_i - u_{i,gota}}{\tau_r} + \frac{g_i(\rho_{gota} - \rho)}{\rho_{gota}} \quad (184)$$

Las fuerzas consideradas en la ecuación (184) fueron las de arrastre y gravitacional. El segundo término de la ecuación es la fuerza de arrastre por unidad de masa de la gota y τ_r se define según la ecuación (185):

$$\tau_r = \tau_p \frac{24}{C_D Re_p} \quad (185)$$

Donde τ_p es el tiempo de relajación de la partícula, definido según la ecuación (186):

$$\tau_p = \frac{\rho_d d_p^2}{18\mu} \quad (186)$$

u_i es el i -ésimo componente de la velocidad, $u_{i,gota}$ es la velocidad de la gota en la i -ésima dirección, ρ_{gota} y d_{gota} son la densidad y el diámetro de la gota respectivamente. Re_p es el número de Reynolds de la gota basado en la velocidad relativa, el cual se definió en la ecuación (145). C_D es definido según las ecuaciones (146) a (148) (Ishii and Hibiki, 2010).

La dispersión de las gotas debido a la turbulencia de gas puede predecirse utilizando un modelo de seguimiento estocástico (Estakhrsar and Rafee, 2016). En flujos turbulentos, las trayectorias de las gotas se calculan usando la velocidad promediada del gas \bar{u} , en la ecuación (184). La dispersión turbulenta de la gota se considera al incluir la fluctuación de la velocidad del gas dentro del cálculo del arrastre; de esta manera, la velocidad del gas u es substituida por: $u = \bar{u} + u'$ dentro de la ecuación de cantidad de movimiento de la gota (ecuación 184). La fluctuación de la velocidad de la fase gaseosa se calcula por medio del modelo DRW *Discrete Random Walk* también conocido como modelo “*eddy lifetime*”. Este modelo simula la interacción de las gotas con una serie de remolinos (*eddies*) discretos turbulentos. Cada remolino se caracteriza por una fluctuación Gaussiana de la velocidad aleatoriamente distribuida (u', v', w') como se muestra en la ecuación (187) y una escala de tiempo (τ_e).

$$u' = \zeta \sqrt{\bar{u}^2} \quad (187)$$

La ecuación (187) está compuesta por un número aleatorio normalmente distribuido, (ζ) y el valor RMS (*Root-Mean-Square*) local de las fluctuaciones de la velocidad. Cuando se conoce la

energía cinética turbulenta en cada punto del flujo, es posible asumir isotropía en los valores RMS de las fluctuaciones de la velocidad, así:

$$\sqrt{u'^2} = \sqrt{v'^2} = \sqrt{w'^2} = \sqrt{\frac{2k}{3}} \quad (188)$$

El tiempo de vida característico de los remolinos puede definirse de dos formas: la primera es como una constante, según la ecuación (189)

$$\tau_e = 2T_L \quad (189)$$

Donde,

$$T_L = C_L \frac{k}{\varepsilon} \quad (190)$$

C_L es la constante del tiempo de vida de los remolinos y puede variar entre 0,2 – 0,96. La segunda es mediante una variación aleatoria alrededor de T_L .

$$\tau_e = -T_L \ln(r) \quad (191)$$

Donde r es un número aleatorio variando entre 0 y 1. Estudios recientes encontraron que la constante del tiempo de vida de los remolinos C_L , puede afectar significativamente los resultados de la simulación numérica; también concluyeron que el cálculo aleatorio del tiempo de vida característico de los remolinos genera una descripción más realista de la dispersión turbulenta de

la fase dispersa sobre la fase continua (Estakhrsar and Rafee, 2016, 2013; Yao and Fairweather, 2012; Tian and Ahmadi, 2007). El tiempo de cruce de los remolinos de la gota se define de acuerdo con la ecuación (192)

$$t_{cross} = -\tau_r \ln \left[1 - \left(\frac{L_e}{\tau |u - u_{drop}|} \right) \right] \quad (192)$$

Donde L_e es la escala de longitud de los remolinos (*eddies*) y $|u - u_{drop}|$ es la magnitud de la velocidad relativa. EL modelo DRW asume que las gotas interactúan con el remolino de la fase gaseosa sobre el menor entre el tiempo de vida del remolino y el tiempo de cruce del remolino. Cuando se alcanza este tiempo, se obtiene un nuevo valor de la velocidad instantánea mediante la aplicación de un nuevo valor de ζ en la ecuación (187).

4.4. Modelo de película lagrangiana en la pared

De sus siglas en inglés *Lagrangian Wall Film* (LWF), el modelo LWF permite considerar de forma un poco más realista las interacciones gota–pared, debido que modela fenómenos como el arrastre de gotas y la deposición en las paredes. Las condiciones de frontera tradicionales que involucran la interacción entre la gota de líquido y las paredes, se establecen en función de las gotas siendo atrapadas por la superficie en contacto o por medio de coeficientes de rebote arbitrarios; lo cual podría afectar considerablemente los resultados de eficiencia de separación.

En el modelo de película en la pared (Stanton and Rutland, 1996), las gotas de líquido cho-

can con una superficie (pared) y forman una película delgada. Los mecanismos considerados en la formulación general del modelo de formación de película son: gotas chocando, salpicaduras, evaporación, transferencia de calor por convección, fuerzas de corte y separación de la película; tal como se observa en la Figura 25. Para efectos de la presente investigación fueron consideradas únicamente interacciones mecánicas. Fenómenos como evaporación o condensación no tienen lugar en la película.

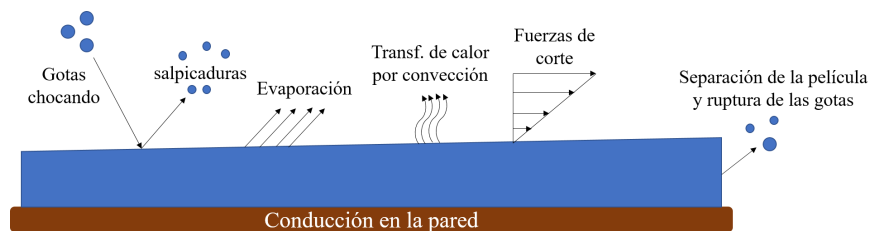


Figura 25. Mecanismos de salpicadura, cantidad de movimiento, transferencia de calor y masa para la formación de película en la pared (Stanton and Rutland, 1996)

El modelado de los principales mecanismos para las interacciones gota–pared fueron desarrollados por Rutland (Stanton and Rutland, 1996) y O’Rourke (O’Rourke and Amsden, 1996). La Figura 26 muestra un diagrama esquemático de la energía de impacto (adimensional) en función de la temperatura de la pared, el cual especifica los regímenes analizados por el modelo durante la interacción.

Debajo de la temperatura crítica del líquido T_{crit} , la gota que choca con la película puede adherirse, propagarse o salpicar; mientras que por encima de la temperatura de transición crítica la gota puede rebotar o salpicar. La energía de impacto (E) se define de acuerdo con la ecuación

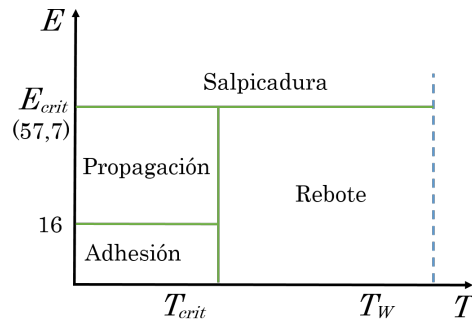


Figura 26. Diagrama esquemático de los regímenes de interacción gota-pared (Stanton and Rutland, 1996)

(193).

$$E^2 = \frac{\rho u_{dn}^2 d_d}{\sigma} \left[\frac{1}{\min\left(\frac{h_0}{d_d}, 1\right) + \frac{\delta_b}{d_d}} \right] \quad (193)$$

Donde u_{dn} es la velocidad de la gota normal a la pared, ρ es la densidad del líquido, d_d es el diámetro de la gota, σ es la tensión superficial del líquido y h_0 es la altura de la película. δ_b es el espesor de la capa límite, definido como:

$$\delta_b = \frac{d_d}{\sqrt{Re}} \quad (194)$$

Donde

$$Re = \frac{\rho u_{dn} d_d}{\mu} \quad (195)$$

La temperatura crítica de transición se define así

$$T_{crit} = T_{crit}^* T_{sat} \quad (196)$$

Donde T_{sat} es la temperatura de saturación y T_{crit}^* es el factor de temperatura crítica, el cual varía entre 1 y 1,5. El régimen de adhesión aplica cuando E está por debajo de 16. Si la temperatura está por encima de la temperatura de crítica, las gotas siguen un régimen de rebote. El régimen de salpicadura ocurre cuando la energía de impacto se encuentra por encima del umbral de energía crítica, es decir, $E_{crit} = 57.7$.

- **Rebote** En el régimen de rebote, la velocidad de la gota viene dada por

$$u_{rt} = \frac{5}{7} u_{dt} \quad (197)$$

$$u_{rn} = e_n u_{dn} \quad (198)$$

Donde u_{rt} y u_{rn} son las componentes tangencial y normal de la velocidad respectivamente, u_{dt} es la componente tangencial de la velocidad de incidencia (choque) y e_n es el coeficiente de restitución normal, definido por:

$$e_n = 0.993 - 1.76\Theta_I + 1.56\Theta_I^2 - 0.49\Theta_I^3 \quad (199)$$

Donde Θ_I es el ángulo de incidencia, medido a partir de la superficie de la pared. El ángulo de desviación de la gota que rebota Ψ , toma un valor aleatorio entre -90° y 90° a partir de la dirección incidente.

- **Salpicadura** La Figura 27 representa gráficamente las variables involucradas en el modelo de Stanton–Rutland: diámetro de la gota incidente d_d , velocidad de la gota incidente u_d , Diámetro de las gotas secundarias salpicadas d_i , velocidad de las gotas secundarias salpicadas u_i y ángulo de reflexión de la gota medido desde la superficie normal a la pared Θ_S .

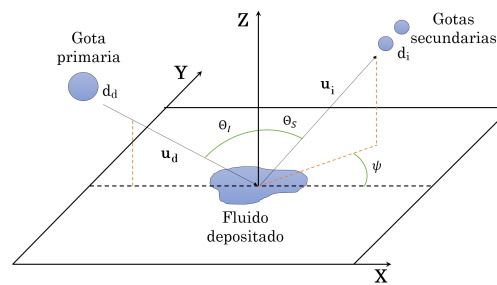


Figura 27. Incidencia y salpicadura de las gotas de líquido de acuerdo con el modelo de Stanton–Rutland (Stanton and Rutland, 1996)

Para cada parcela que salpica, se obtiene un diámetro diferente a través de muestreo de una función de distribución de probabilidad f (Mundo et al., 1995; Weihull, 1951)

$$f(d) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{d}{D} \right)^2 \right] \quad (200)$$

La expresión para el diámetro de la $i^{\text{ésima}}$ parcela salpicada se muestra en la ecuación (201)

$$d_i = D \sqrt{-\ln(1 - c_i)} \quad (201)$$

Donde c_i es la $i^{ésima}$ muestra aleatoria. La fracción másica de la gota salpicada y_s , fue propuesta (mediante ensayos experimentales) por (Yarin and Weiss, 1995; O'Rourke and Amsden, 1996), de la siguiente manera:

$$y_s \begin{cases} 1.8 \times 10^{-4} (E^2 - E_{crit}^2) & E_{crit}^2 < E^2 < 7500 \\ 0.75 & E^2 > 7500 \end{cases} \quad (202)$$

Con el fin de obtener el número total de gotas, debe tenerse en cuenta que la conservación global de masa requiere que la suma de la masa total de las parcelas salpicadas sea igual a la fracción másica salpicada, así:

$$\frac{\rho \pi}{6} N_{tot} \sum_{i=1}^{N_{parcels}} f_i d_i^3 = y_s m_d \quad (203)$$

Donde m_d es la masa total de la parcela incidente; por lo tanto, el número total de gotas salpicadas se obtiene mediante la ecuación (204)

$$N_{tot} = \frac{y_s m_d}{\frac{\rho \pi}{6} \sum_{i=1}^{N_{parcels}} f_i d_i^3} \quad (204)$$

En la literatura existen correlaciones adicionales para calcular la componente normal de la velocidad de salida de las gotas salpicadas (u_i). La densidad de probabilidad viene dada por:

$$f\left(\frac{u_{ni}}{u_{dn}}\right) = \left[\frac{b_v}{\Theta_v} \left(\frac{u_{ni}/u_{dn}}{\Theta_v}\right)^{b_v-1} \right] \exp \left[-\left(\frac{u_{ni}/u_{dn}}{\Theta_v}\right)^{b_v} \right] \quad (205)$$

Donde los índices i y d en la ecuaciones (203) a (205) corresponden a la $i^{ésima}$ gota incidente y salpicada respectivamente (Figura 27). b_v y Θ_v son funciones de Θ_I , de la siguiente manera:

$$b_v \begin{cases} 2.1 & \Theta_I \leq 50^\circ \\ 1.10 + 0.02\Theta_I & \Theta_I > 50^\circ \end{cases} \quad (206)$$

$$\Theta_v = 0.158e^{0.017\Theta_I} \quad (207)$$

La componente tangencial de la velocidad se obtiene a través de la expresión para Θ_S :

$$\Theta_S = 65.4 + 0.22\Theta_I \quad (208)$$

Así:

$$u_{ti} = \tan(\Theta_S) \quad (209)$$

El ángulo azimutal Ψ de la Figura 27 se calcula asumiendo que sigue la distribución $H(\Psi)$ (Naber and Reitz, 1988; Stanton and Rutland, 1996)

$$H(\Psi) \begin{cases} 1/2\pi & \beta = 0 \\ \frac{\beta/\pi}{2(e^\beta - 1)} \exp\left\{\beta \left[1 - \left(\frac{|\Psi|}{\pi}\right)\right]\right\} & \beta > 0 \end{cases} \quad (210)$$

Donde β es un parámetro que se relaciona con Θ_I :

$$\sin\Theta_I = \frac{e^\beta + 1}{e^\beta - 1} \frac{\beta^2}{\beta^2 + \pi^2} \quad (211)$$

Ψ se obtiene integrando las ecuaciones (210) y (211):

- Para $\beta = 0$

$$\Psi = 2\pi p \quad (212)$$

- Para $\beta > 0$

$$\Psi \begin{cases} \left(\frac{\pi}{\beta}\right) \log \left[e^{-\beta} + 2p \left(1 - e^{-\beta}\right) \right] & p < 0.5 \\ \left(\frac{\pi}{\beta}\right) \log \left[2 - e^{-\beta} - 2p \left(1 - e^{-\beta}\right) \right] & p > 0.5 \end{cases} \quad (213)$$

p en las ecuaciones (212) y (213) es un número aleatorio normalmente distribuido entre 0 y

1. Finalmente, se plantea un balance de energía para la nuevas parcelas, de manera que las energías cinética y de superficie de las nuevas gotas no exceda la de las gotas anteriores.

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{parcel}} (m_i u_i^2) + \pi \sigma \sum_{i=1}^{N_{parcel}} (N_i d_i^2) = \frac{1}{2} m_d u_{dn}^2 + \pi \sigma (N_d d_d^2) - E_S \quad (214)$$

Donde E_S es el umbral de energía para que la salpicadura ocurra. Para asegurar la conservación de energía, se calcula el siguiente factor de corrección:

$$E_k = \frac{\frac{1}{2} m_d u_{dn}^2 + \pi \sigma (N_d d_d^2) - E_S - \sum_{i=1}^{N_{parcel}} (N_i d_i^2)}{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{parcel}} (m_i u_i^2)} \quad (215)$$

El umbral de energía E_S

$$E_S = \frac{1}{2} m_d u_S^2 \quad (216)$$

Donde u_S es la velocidad del umbral de salpicadura en función del número de Weber crítico

$$u_S = \sqrt{We_{cr} \frac{\sigma}{\rho d_d}} \quad (217)$$

$$We_{cr} = 18^2 d_d \left(\frac{\rho}{\sigma} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)^{1/4} \left(\frac{u_{dln}}{d_d} \right)^{3/4} \quad (218)$$

Las componentes normal y tangencial de la parcela salpicada se multiplican por la raíz cuadrada de E_k con el fin de asegurar la conservación de energía.

$$u'_{ni} = \sqrt{E_k} u_{ni} \quad \text{and} \quad u'_{ti} = \sqrt{E_k} u_{ti} \quad (219)$$

4.4.1. Colisión y coalescencia de las gotas. Cuando se incluye en los cálculos numéricos el seguimiento Lagrangiano de las gotas, es posible estimar el número de colisiones entre ellas. La dificultad en cualquier cálculo de colisión radica en que para N gotas, cada gota tiene $N - 1$ posibles compañeras para colisionar. Por lo tanto, el número de pares de colisión posibles es aproximadamente $\frac{1}{2}N^2$; lo cual implica un aumento considerable del costo computacional para el cálculo de colisiones directas. Por esta razón se incentiva el uso de “parcelas” (representaciones estadísticas de un número determinado de gotas individuales). El algoritmo utilizado en O'Rourke

and Amsden (1996) reduce significativamente el costo computacional por medio de una estimación estocástica de las colisiones. La probabilidad de cada colisión es calculada a partir del número de Weber colisional (We_c) y ajustada con observaciones experimentales.

$$We_c = \frac{\rho U_{rel}^2 \bar{D}}{\sigma} \quad (220)$$

Donde U_{rel} es la velocidad relativa entre dos parcelas y \bar{D} es el diámetro aritmético de dos parcelas. La distribución de probabilidad del número de colisiones sigue una distribución de *Poisson*. Mayores nivel de detalle acerca del modelo pueden consultarse en O'Rourke and Amsden (1996). Es importante resaltar que el modelo de formación de película en la pared es calculado de manera enteramente integral, es decir, no se resuelven ecuaciones de transporte para la película. Este modelo se aplica como una “condición de frontera” en la solución numérica de las ecuaciones de transporte.

4.5. Modelo de medio poroso (PMM)

El modelo de medio poroso (de las siglas en inglés *Porous Media Model - PMM*) es utilizado en la presente investigación para simular el comportamiento de un eliminador de niebla de tipo malla tejida. Los términos para el modelo de medio poroso son una consecuencia matemática la promediación de las ecuaciones de transporte.

4.5.1. Cantidad de movimiento. El término generado tiene dos componentes: un término de pérdidas viscosas y un término de pérdidas inerciales, así:

$$S_i = - \left(\sum_{j=1}^3 D_{ij} \mu V_j + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |V| V_j \right) \quad (221)$$

Donde S_i es el término fuente para la $i^{ésima}$ ecuación de cantidad de movimiento; $|V|$ es la magnitud de la velocidad, D y C son matrices preestablecidas. La ecuación (221) contribuye al gradiente de presión en el volumen de control poroso, creando una caída de presión que es proporcional a la velocidad del fluido (o velocidad al cuadrado) en el volumen de control. En el caso de utilizar un modelo de medio poroso homogéneo, la ecuación (221) se reduce a:

$$S_i = - \left(\frac{\mu}{\alpha} V_i + C_2 \frac{1}{2} \rho |V| V_i \right) \quad (222)$$

Donde α es el factor de permeabilidad y C_2 es el factor de resistencia inercial. Si el flujo que atraviesa el medio poroso se encuentra en régimen laminar, la caída de presión es proporcional a la velocidad y C_2 puede valer cero. Además, si se ignora la aceleración convectiva y la difusión, la ecuación (222) se reduce a la ley de Darcy:

$$\nabla P = - \frac{\mu}{\alpha} \vec{V} \quad (223)$$

Para flujos con alta velocidad, la constante C_{ij} de la ecuación (221) proporciona una corrección a las pérdidas inerciales en el medio poroso. Esta constante se puede entender como un

coeficiente de pérdida por unidad de longitud; de esa forma es posible especificar la caída de presión en función de la cabeza dinámica.

4.5.2. Energía. En las regiones consideradas como medio poroso, la ecuación estándar de transporte de energía se resuelve con modificaciones en el flux de conducción y en el término transitorio. Cuando se asume que el medio poroso y el fluido circundante se encuentran en equilibrio térmico, el flux de conducción en el medio poroso utiliza una conductividad térmica efectiva y el término transitorio incluye la inercia térmica del sólido sobre el medio, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\gamma \rho_f E_f + (1 - \gamma) \rho_s E_s] + \nabla \cdot [\vec{v} (\rho_f E_f + p)] \\ = S_f^h + \nabla \cdot \left[k_{eff} \nabla T - \left(\sum_i h_i J_i \right) + (\bar{\vec{\tau}} \cdot \vec{v}) \right] \end{aligned} \quad (224)$$

Donde E_f es la energía total del fluido, E_s es la energía total del medio sólido, ρ_f y ρ_s son la densidad del fluido y del medio sólido respectivamente, γ es la porosidad del medio, k_{eff} es la conductividad térmica efectiva en el medio poroso y S_f^h es el término fuente de la entalpía del fluido. k_{eff} se calcula como el promedio volumétrico de la conductividad térmica del fluido y del solido:

$$k_{eff} = \gamma k_f + (1 - \gamma) k_s \quad (225)$$

4.6. Detección de vórtices dentro del GLCC

El conjunto de ecuaciones que detectan vórtices se basan en el *eigen* análisis o análisis propio en el tensor de gradiente de velocidad local (Sujudi and Haimes, 1995; Jeong and Hussain, 1995). A continuación se presenta la notación y ecuaciones relacionadas:

Para el tensor de gradiente de velocidad

$$\vec{\nabla} \vec{u} = \vec{\bar{D}} = [d_{ij}] = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial u}{\partial z} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial z} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} & \frac{\partial w}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (226)$$

Los valores propios del tensor gradiente satisfacen el polinomio característico

$$P(\lambda) = \lambda^3 + P\lambda^2 + Q\lambda + R = 0 \quad (227)$$

Donde

$$P \equiv -tr(\vec{\bar{D}}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = -(d_{11} + d_{22} + d_{33}) \quad (228)$$

$$Q \equiv \frac{1}{2} \left[P^2 - \text{tr}(\bar{\bar{D}}\bar{\bar{D}}) \right] =$$

$$(d_{22}d_{33} - d_{23}d_{32}) + (d_{11}d_{22} - d_{12}d_{21}) + (d_{33}d_{11} - d_{13}d_{31}) \quad (229)$$

$$R \equiv \frac{1}{3} \left[-P^3 + 3PQ - \text{tr}(\bar{\bar{D}}\bar{\bar{D}}\bar{\bar{D}}) \right] =$$

$$d_{11}(d_{23}d_{32} - d_{22}d_{33}) + d_{12}(d_{21}d_{33} - d_{31}d_{23}) + d_{13}(d_{31}d_{22} - d_{21}d_{32}) \quad (230)$$

Al definir

$$q \equiv Q - \frac{1}{3}P^2 \quad (231)$$

$$r \equiv R + \frac{2}{27}P^3 - \frac{1}{3}PQ \quad (232)$$

Entonces, si el discriminante es

$$\Delta \equiv \left(\frac{1}{2}r \right)^2 + \left(\frac{1}{3}q \right)^2 > 0 \quad (233)$$

El tensor tiene un valor propio real λ_r y un par de valores propios complejos conjugados

$\lambda_{cr} \pm i\lambda_{ci}$. Es decir, el tensor se puede descomponer como

$$[d_{ij}] = [\vec{v}_r \vec{v}_{cr} \vec{v}_{ci}] \begin{bmatrix} \lambda_r & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{cr} & \lambda_{ci} \\ 0 & -\lambda_{ci} & \lambda_{cr} \end{bmatrix} [\vec{v}_r \vec{v}_{cr} \vec{v}_{ci}]^{-1} \quad (234)$$

Si se denota

$$\xi_2 = \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} - \frac{r}{2}} \quad (235)$$

$$\xi_3 = \sqrt[3]{\sqrt{\Delta} + \frac{r}{2}} \quad (236)$$

Entonces

$$\lambda_r = \tilde{\lambda}_r - \frac{P}{3} = \xi_2 - \xi_3 - \frac{P}{3} \quad (237)$$

$$\lambda_{cr} = -\frac{\xi_2 - \xi_3}{2} - \frac{P}{3} \quad (238)$$

$$\lambda_{ci} = \frac{\xi_2 + \xi_3}{2} \sqrt{3} \quad (239)$$

Este último se denomina “*Swirling Strength*” y representa la fuerza del movimiento del re-

molino local. En el *software* de post–procesamiento utilizado, la fuerza de remolino es la magnitud tanto del vector de remolino y del remolino normal (Jiang et al., 2002; Roth and Peikert, 1998). La dirección del vector de remolino es el vector propio real v_r y la dirección del remolino normal v_n son mostrados en las ecuaciones (240) y (241) respectivamente (Zhang and Choudhury, 2006).

$$\left[\vec{D} - \lambda_r \vec{I} \right] \vec{v}_r = 0 \quad (240)$$

$$\vec{v}_n = \frac{\vec{v}_{cr} \times \vec{v}_{ci}}{\|\vec{v}_{cr} \times \vec{v}_{ci}\|} \quad (241)$$

4.7. Modelo numérico

Los métodos tradicionales para la solución numérica de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales son: el Método de Diferencias Finitas (MDF), Método de Elementos Finitos (MEF) y Método de Volúmenes Finitos (MVF). Existen otros métodos, los cuales se limitan a casos específicos. En el contexto de los *softwares* comerciales de CFD, el método de volúmenes finitos es más utilizado (Maliska, 2004).

4.7.1. Acoplamiento Presión–Velocidad. Como ya se explicó en la sección 4.1.6, el campo de presión es compartido por todas las fases. La solución del sistema de ecuaciones que representan el comportamiento multifásico de los separadores de gas natural emplea un algoritmo que pertenece a los denominados métodos de proyección (Chorin, 1968). En este método la restricción de conservación de masa del campo de velocidad se obtiene resolviendo una ecuación

de presión (o de corrección de presión). La ecuación de presión se deriva de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento, de tal forma que el campo de velocidad corregido por la presión, satisface la continuidad. Debido al hecho que las ecuaciones de transporte son altamente no lineales y acopladas unas con otras, el proceso de solución involucra iteraciones en las que todo el conjunto de ecuaciones es resuelto repetidamente hasta alcanzar la convergencia deseada. Existen dos algoritmos de solución denominados: segregado y acoplado, los cuales se muestran en la Figura 28.

En el algoritmo segregado, las ecuaciones de transporte para la solución de las variables del sistema se resuelven individualmente una después de la otra. Al ser resueltas, cada ecuación se desacopla o “segrega” de las demás, de ahí su nombre. Este algoritmo tiene la ventaja de requerir poca memoria, debido que las ecuaciones discretizadas solo necesitan ser almacenadas una a la vez; sin embargo, la convergencia es lenta, debido que las ecuaciones se resuelven de manera desacoplada.

A diferencia del algoritmo segregado, el algoritmo acoplado resuelve simultáneamente las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento, esta metodología de solución mejora significativamente la tasa de convergencia con la consecuencia de aumentar el requerimiento de memoria en 1,5 a 2 veces en comparación con el algoritmo segregado debido que todos los campos de cada variable de solución deben almacenarse simultáneamente, lo cual aumenta considerablemente el costo computacional.

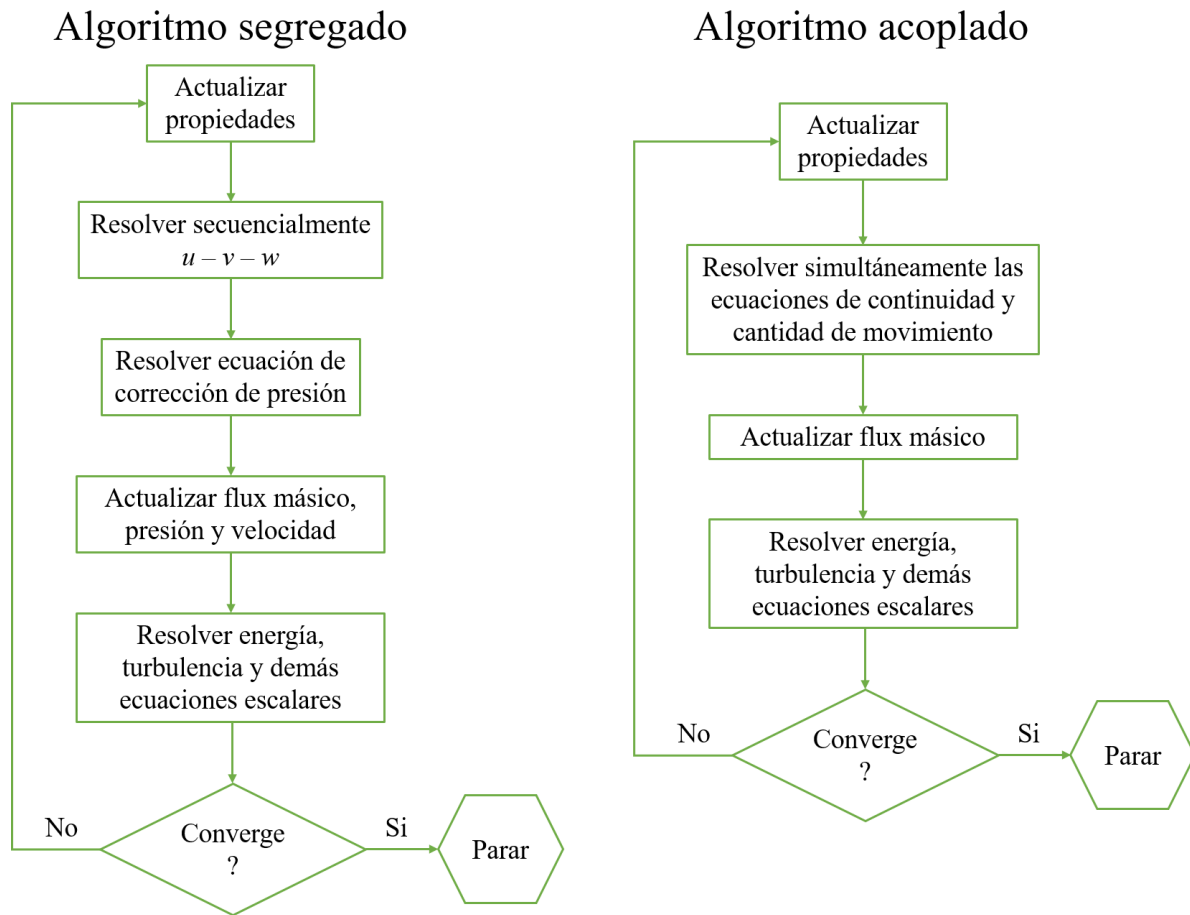


Figura 28. Diagrama esquemático de los algoritmos de acoplamiento presión-velocidad utilizados en la discretización del modelo matemático

4.7.2. Método de Volúmenes Finitos. En el método de volúmenes finitos, la discretización se obtiene a partir de la integración de las ecuaciones de transporte alrededor de un volumen de control finito. Considerando la forma general de las ecuaciones de transporte:

$$\underbrace{\frac{\partial (\rho\phi)}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\vec{v}\phi)}_{II} = \underbrace{\nabla \cdot (\rho\nabla\phi)}_{III} + \underbrace{S_\phi}_{IV} \quad (242)$$

Donde,

I. Término transitorio

II. Término convectivo

III. Término difusivo

IV. Término fuente

Las ecuaciones de transporte se integran en cada celda computacional utilizando el teorema de la divergencia a lo largo de un determinado intervalo de tiempo Δt :

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \oint \rho\phi\vec{v} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\phi \nabla\phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\phi dV \right\} dt \quad (243)$$

Donde ϕ es una variable o propiedad escalar, $d\vec{A}$ es el vector superficie, Γ_ϕ es el coeficiente de difusión para ϕ , $\nabla\phi$ es el gradiente de ϕ y S_ϕ es el término fuente de ϕ por unidad de volumen. Los valores de las variables se obtienen a través del uso de técnicas apropiadas de linealización e interpolación. La linealización transforma las ecuaciones diferenciales en un conjunto de ecuaciones algebraicas lineales. La discretización espacial se relaciona con los términos advectivo y difusivo de la ecuación de transporte, y la discretización temporal se relaciona con el término transitorio de la misma. Las técnicas de discretización de cada uno de los términos de la ecuación (243) se pueden aclarar considerando el volumen finito bidimensional P de la figura 29. De acuerdo con esta notación, el término difusivo puede ser representado mediante la ecuación (244):

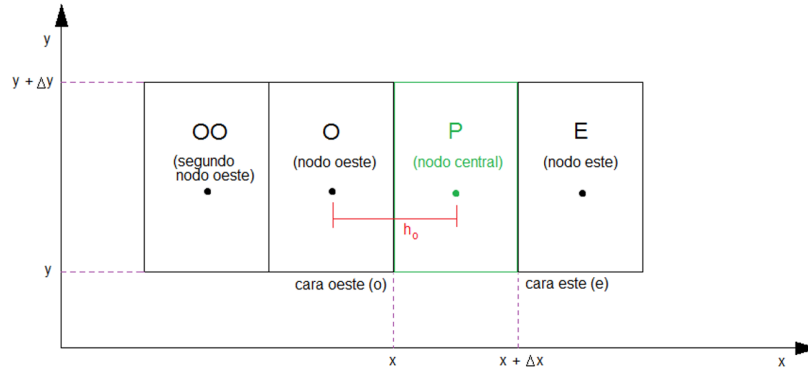


Figura 29. Representación gráfica y notación del método de volúmenes finitos (Prieto, 2011)

$$\oint \Gamma_{\phi} \nabla \phi \cdot d\vec{A} = \frac{\Gamma_{\phi} A_O}{h_O} (\phi_P - \phi_O) = D_O (\phi_P - \phi_O) \quad (244)$$

Donde A_O es el área de la cara oeste, h_O es la distancia entre el nodo oeste (O) y el nodo central (P) y D_O es el coeficiente de difusión de la cara oeste.

4.7.3. Linealización del término fuente. Un término fuente genérico para la linealización puede ser expresado de la siguiente manera:

$$S_{\phi P} V_P = S_C^{\phi} + S_P^{\phi} \phi_P \quad (245)$$

Donde $S_{\phi P}$ es el valor del término fuente S_{ϕ} en el centro de la celda P y V_P es el volumen de la celda computacional centrada alrededor del nodo P . La linealización del término fuente $S_{\phi P}$, debería ser una buena representación de la relación entre S y ϕ . Dependiendo de la forma funcional de $S_{\phi P}$, existen varias maneras de formular los coeficientes S_C^{ϕ} y S_P^{ϕ} . El método sugerido por

Patankar (1980) se muestra a continuación:

$$S_{\phi P} = S_{\phi P}^* + \left(\frac{dS_{\phi P}}{d\phi} \right)^* (\phi_P - \phi_P^*) \quad (246)$$

Donde * indica el valor de la iteración anterior. Este tipo de linealización es recomendado únicamente en los casos en que el término fuente disminuya con el aumento de la variable ϕ . Los coeficientes del término fuente pueden representarse de acuerdo con las ecuaciones (247) y (248):

$$S_C^\phi = \left[S_{\phi P}^* - \left(\frac{dS_{\phi P}}{d\phi} \right)^* \phi_P^* \right] V_P \quad (247)$$

$$S_P^\phi = \left(\frac{dS_{\phi P}}{d\phi} \right)^* V_P \quad (248)$$

4.7.4. Discretización espacial. Una considerable cantidad de métodos se han desarrollado con el objetivo de discretizar espacialmente el sistema de ecuaciones diferenciales parciales. A continuación se presentan los métodos *Upwind* de primer y segundo orden.

4.7.4.1. Upwind de primer orden. El método de discretización *upwind* resuelve ecuaciones diferenciales parciales, usando diferenciación parcial en la dirección determinada por el signo de las velocidades características. En este método, el valor de la función en la cara (ϕ_o) es igual al valor de la función aguas arriba (ϕ_o); de esta forma el término convectivo adopta la

siguiente forma:

$$\oint \rho \phi \vec{v} \cdot d\vec{A} = \rho v_o A_o \phi_o = C_o \phi_o \quad (249)$$

Donde C_o es el coeficiente convectivo de la cara oeste. A partir de la ecuación (249) se genera un coeficiente matricial para el punto nodal oeste (Patankar and Spalding, 1983), así:

$$A_o = \max(C_o, 0) + D_o \quad (250)$$

4.7.4.2. Upwind de segundo orden. Este método mejora la precisión de la discretización espacial comparado con el método de primer orden, debido a la extrapolación de dos puntos *upwind* para la cara determinada; entonces ϕ_o será:

$$\phi_o = \frac{3}{2} \phi_o - \frac{1}{2} \phi_{oo} = \phi_o + \frac{1}{2} (\phi_o - \phi_{oo}) \quad (251)$$

El coeficiente de la cara este y el coeficiente matricial son mostrados a continuación:

$$\phi_e = \frac{3}{2} \phi_P - \frac{1}{2} \phi_o \quad (252)$$

$$A_o = \max(C_o, 0) + \frac{1}{2} \max(C_e, 0) + D_o \quad (253)$$

4.7.5. Discretización temporal. Para simulaciones en estado transitorio, las ecuaciones que rigen el flujo deben ser discretizadas en el espacio y en el tiempo. La discretización temporal implica la integración de cada término de las ecuaciones diferenciales a lo largo de un intervalo de tiempo Δt . La expresión genérica para la evolución temporal de la variable ϕ se representa de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = F(\phi) \quad (254)$$

Donde la función $F(\phi)$ incorpora algún tipo de discretización espacial. La discretización temporal de primer y segundo orden se expresa de acuerdo a las ecuaciones (255) y (256) respectivamente.

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi) \quad (255)$$

$$\frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + \phi^{n-1}}{2\Delta t} = F(\phi) \quad (256)$$

Donde ϕ es cualquier cantidad escalar, $n + 1$ es el valor en el nivel de tiempo siguiente $t + \Delta t$, n es el valor en el nivel de tiempo actual t y $n - 1$ es el valor en el nivel de tiempo anterior $t - \Delta t$. Una vez discretizada la derivada temporal, es necesario estimar $F(\phi)$, para esto, existen dos métodos: integración implícita y explícita del tiempo.

4.7.5.1. Integración implícita en el tiempo. Este método consiste en evaluar $F(\phi)$ en un nivel de tiempo futuro:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi^{n+1}) \Rightarrow \phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t F(\phi^{n+1}) \quad (257)$$

4.7.5.2. Integración explícita en el tiempo. Este método evalúa $F(\phi)$ en el nivel de tiempo actual:

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = F(\phi^n) \Rightarrow \phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t F(\phi^n) \quad (258)$$

Este método es poco recomendable para sistemas que se resuelven mediante acoplamiento Presión–Velocidad.

5. Evaluación de eliminadores de niebla para separación a alta presión

Básicamente, los eliminadores de niebla son dispositivos que se instalan como accesorios dentro de los separadores gravitacionales horizontales o verticales con el fin de promover la coalescencia y separar las gotas más pequeñas que son arrastradas por la fase continua; tal como se introdujo en la Sección 3.3.2. En este capítulo se realiza un análisis individual de dos tipos de eliminadores de niebla con el fin de conocer el accesorio que mejor se acomode a las condiciones de separación a alta presión y acoplarlo posteriormente al equipo de separación principal.

En la literatura se encuentran algunos estudios acerca de la comparación de eliminadores de niebla, tal es el caso de Fewel and Kean (1992), los cuales revisaron las principales características de los eliminadores de niebla tipo *vane pack* tales como eficiencia de separación, caída de presión y capacidad del dispositivo; argumentando que la etapa más importante durante el proceso de diseño es la evaluación de la capacidad de un equipo de separación debido que la mayoría de errores se generan durante el escalamiento, es decir, las propiedades físicas medidas en laboratorio y en el campo de producción son diferentes, por lo tanto el patrón de flujo de la fase gaseosa y la distribución de tamaño de gota de la fase líquida pueden cambiar también. La conclusión del trabajo fue que los eliminadores de niebla tipo *vane pack* tenían mayor capacidad, en comparación con los de tipo *wire mesh*, adicionalmente recomiendan la combinación de medición en campo y simulaciones con CFD para una estimación acertada del comportamiento del *demister*; y lo más importante, con las simulaciones de CFD comprobaron que si excede la velocidad permitida pa-

ra este tipo de dispositivos, es posible aumentar el número de paletas o adicionar algunos platos perforados con el fin de prevenir el arrastre de gotas hacia la corriente de gas y consecuentemente, aumentar la eficiencia de separación.

Brigadeau (2007), desarrolló simulaciones utilizando CFD en un eliminador de niebla tipo *vane pack* a diferentes presiones de operación con el fin de analizar la eficiencia del accesorio, así:

- **LP** (*Low Pressure*): aire/agua a 0,1 MPa,
- **HPNE** (*High Pressure No Entrainment*): gas natural/condensado a 9,2 MPa sin arrastre de gotas y,
- **HPE** (*High Pressure Entrainment*): gas natural/condensado a 9,2 MPa con arrastre de gotas.

En su trabajo, Brigadeau (2007) concluyó que para el sistema HPE es necesario un mayor nivel de análisis debido al excesivo nivel de líquido arrastrado por la corriente gaseosa a causa de los pequeños tamaños de gota. Esta aparentemente obvia pero acertada conclusión se vio forzada debido al hecho que sus simulaciones numéricas no alcanzaron la convergencia.

5.1. Eliminadores de niebla tipo *vane pack*

En la literatura existen varios trabajos de investigación utilizando CFD con el fin de analizar la eficiencia de separación de los eliminadores de niebla convencionales tipo *vane pack*, los cuales consisten en placas paralelas onduladas, estrechamente espaciadas y orientadas en la misma dirección del flujo de gas. Los diámetros de las gotas considerados estuvieron en el intervalo de

100 a 1000 micrómetros (Gillandt et al., 1996), 10 a 50 micrómetros (James et al., 2005; Zhao et al., 2007) y 1 a 20 micrómetros (Wang and James, 1998, 1999). Todos los autores compararon sus simulaciones con datos experimentales de sistemas aire-agua a presión atmosférica y usando los modelos de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar y *LowRe* $k - \varepsilon$ los cuales, está demostrado que no son adecuados para capturar fenómenos en regiones cercanas a la pared. Otros trabajos utilizando CFD se dedicaron a analizar el efecto que tiene la geometría del *demister* sobre la eficiencia de separación, tales como la instalación de canales de drenaje (James et al., 2003; Verlaan, 1991; Wang and Davies, 1996), o la optimización de parámetros geométricos como la distancia entre placas y ángulos de ondulación (Narimani and Shahhoseini, 2010). Sin embargo, éstos últimos no fueron validados con datos experimentales o de industria, aunque evidenciaron mejoras a nivel de eficiencia de separación en comparación con la geometría convencional.

Con relación al modelo de turbulencia, Galletti et al. (2008) desarrollaron el estudio numérico de un eliminador de niebla tipo *vane pack* que incluye canales de drenaje, prestando especial atención a la dispersión turbulenta generada por la fase gas sobre las gotas y comparando los modelos de turbulencia $k - \varepsilon$ y $k - \omega$. Sus resultados fueron comparados con las simulaciones numéricas desarrolladas por Wang and James (1998, 1999) y datos experimentales generados por Phillips and Deakin (1990) y Ghetti (2003). Los mejores resultados fueron obtenidos usando el modelo de turbulencia $k - \omega$ SST. Recientemente, Estakhrsar and Rafee (2016) desarrollaron un análisis acerca del efecto de la longitud de onda y el número de curvaturas de las placas sobre la eficiencia de remoción de gotas y la caída de presión en eliminadores de niebla tipo *vane pack* con

canales de drenaje; fue utilizado un enfoque Euleriano–Lagrangiano, el modelo de interacción de remolinos y el modelo de turbulencia *Reynolds Stress Transport* – RSTM. A pesar que el modelo de turbulencia RSTM es más riguroso que el modelo SST, los resultados no mostraron diferencias significativas con respecto a los datos experimentales; por lo tanto, no se justifica el alto esfuerzo computacional necesario para la implementación del modelo RSTM. Estakhsar and Rafee (2016) encontraron también que un incremento en el número de curvaturas aumenta significativamente la caída de presión, y que, los eliminadores de niebla con menor curvatura en la longitud de onda presentan mayores caídas de presión y eficiencia de remoción de gotas.

A pesar de todos los avances en los estudios con CFD de configuraciones geométricas y campos de flujo en eliminadores de niebla de tipo *vane pack*, los resultados de las simulaciones numéricas han sido aplicados principalmente en mezclas aire–agua a presión atmosférica. Adicionalmente, los estudios realizados con CFD para este tipo de equipos utilizan la condición de frontera en las paredes que “atrapan” las gotas que entran en contacto con su superficie (Estakhsar and Rafee, 2016; Galletti et al., 2008; Wang and James, 1998), en otras palabras, cuando las gotas de la fase dispersa entran en contacto con las paredes, su trayectoria deja de ser calculada. Esto genera una sobre–estimación en términos de la eficiencia de remoción, debido que las gotas forman una película de líquido sobre la superficie de las paredes del eliminador de niebla. Finalmente, a pesar de sus limitaciones y simplificaciones, el modelo de película Lagrangiana en la pared (LWF) presenta una aproximación al comportamiento real de la fase dispersa en la región cercana a las paredes y, en consecuencia, cálculos más realistas de la eficiencia de remoción de gotas. Por tal

razón, en la presente sección se analiza numéricamente el impacto del modelo LWF sobre la eficiencia de remoción de gotas para un flujo multifase de gas natural dentro de un eliminador de niebla de tipo *vane pack* operando a presiones de 2, 4 y 7 MPa.

5.1.1. Modelo computacional.

5.1.1.1. Geometría. La Figura 30 muestra el dominio computacional del eliminador de niebla tipo *vane pack*, el cual consiste en una sección paralela y bidimensional de una de las placas, incluyendo los respectivos canales de drenaje de dimensiones L y W. Las dimensiones del dispositivo son presentadas en la Tabla 15. Estas dimensiones fueron seleccionadas con base en estudios numéricos previos, los cuales analizaron el efecto de la geometría sobre la eficiencia de separación y caída de presión en mezclas gas-líquido (Estakhrsar and Rafee, 2016, 2013; Narihani and Shahhoseini, 2010).

Tabla 15

Dimensiones del eliminador de niebla tipo vane pack (Estakhrsar and Rafee, 2013)

s(mm)	λ (mm)	L(mm)	W(mm)	α (°)
25	118,5	12,5	8,5	45

5.1.1.2. Condiciones termodinámicas y propiedades de los fluidos. Para la validación de los modelos matemáticos de la presente sección, fueron utilizados los datos experimentales obtenidos por Ghetti (2003), quien desarrolló experimentos para una mezcla aire-agua a presión atmosférica (Tabla 16); variando la velocidad del gas u_g entre 2 y 5 m/s, y el diámetro de la gota

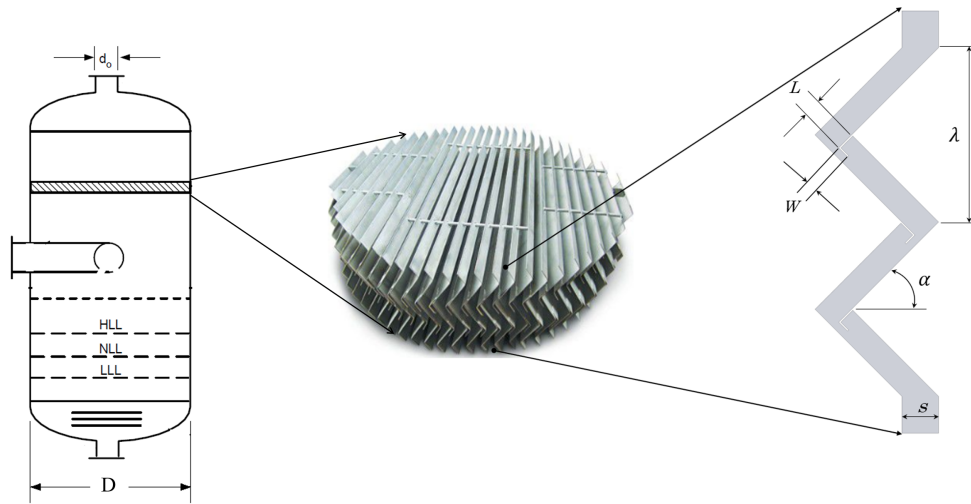


Figura 30. Representación geométrica del dominio de solución usado en las simulaciones numéricas

entre 3 y 20 micrómetros.

Después de la validación a condiciones de presión atmosférica, el modelo matemático y numérico fue utilizado para el análisis de la separación de fases de la mezcla de gas natural (Gas 3) de la Tabla 5, es decir: metano (0,936), etano (0,0263), *i*-butano (0,0149), *n*-butano (0,0149) y *n*-pentano (0,0079) (Valiollahi et al., 2016). La composición de la mezcla gas-líquido fue correlacionada a 260 K y presiones de 2, 4 y 7 MPa; con el fin de determinar la influencia de la presión de operación sobre la eficiencia de separación. La curva de equilibrio de la mezcla, así como el resumen de las propiedades de los fluidos se muestran en la Figura 7 y Tabla 7 respectivamente.

5.1.1.3. Condiciones de frontera. A la entrada se impusieron condiciones de velocidad normal prescritas para la fase gas. Fueron consideradas velocidades de 2, 3, 4 y 5 m/s con el

fin de realizar un análisis paramétrico. Para el cálculo de las variables de la turbulencia a la entrada fueron consideradas una intensidad de turbulencia de 5% y diámetro hidráulico de 25 mm. A la salida se utilizó un condición de frontera de presión definida y una condición de *no slip* en las paredes de la fase continua.

Para la fase discreta fue considerada la condición “*escape*” a la entrada y salida del dominio de solución. Este tipo de condición para la fase discreta establece que cualquier gota que alcanza esta superficies desaparece del dominio computacional. Para el cálculo de la interacción gota–pared, se consideró la formación de película líquida en la pared de acuerdo con el modelo de Stanton–Rutland, es decir, gotas rebotando, salpicando, adheriéndose y propagándose, tal como se describió en la sección 4.4. Con el objetivo de verificar el efecto del modelo de película en la pared; los resultados fueron comparados con cálculos realizados utilizando la condición de frontera “*trap*” en las paredes (Tabla 17), la cual implica que las gotas que alcancen dichas paredes serán removidas del dominio de solución. Sin embargo, como se verá más adelante, esta condición resulta en una sobre–estimación de la eficiencia de remoción de gotas.

5.1.1.4. Implementación del modelo. Las simulaciones numéricas fueron desarrolladas en el *software* comercial ANSYS–FLUENT[®]. Este código usa el método de volúmenes finitos (FVM), *cell–centered* en mallas no estructuradas para la discretización de las ecuaciones de transporte. Para el acoplamiento presión–velocidad fue utilizado el algoritmo segregado SIMPLE *Semi–Implicit Method for Pressure–Linked Equations*, desarrollado por Patankar and Spalding

Tabla 16

Propiedades de los fluidos y condiciones de operación para la validación de los modelos del eliminador de niebla tipo vane pack

Validación de modelos matemáticos				
Mezcla	Superficie	Condición	Valor	Unidades
Aire-Agua	Entrada	Velocidad	2, 3, 4, 5	m/s
	Salida	Presión (estática)	0	Pa
	Paredes	trap		
	Densidad, kg/m^3		Viscosidad, kg/ms	
Aire	1,125		$1,789 \times 10^{-5}$	
Agua	998,2		$1,003 \times 10^{-3}$	
Gotas (agua)	3, 4, 6, 10, 12, 15, 20 μm			
Tipo de simulación	Estado estable, 2D			
Presión de operación	Atmosférica			
Temperatura de operación	273 K			
modelo de turbulencia	$k - \omega$ SST			

(1983). Los términos convectivos fueron discretizados utilizando el esquema *upwind* de segundo orden. El modelo de turbulencia utilizado en las simulaciones fue $k - \omega$ SST (Tablas 18 y 19) (Menter, 1994). La precisión de los resultados generados por este modelo dependen del valor de y^+ , el cual debe estar por debajo de 1 con el fin de capturar los fenómenos que ocurren en la región cercana a la pared (Menter, 1994; Schlichting and Gersten, 2016; Karman, 1934); de lo contrario se obtendrían resultados similares al los presentados por el modelo $k - \varepsilon$ estándar. Por lo tanto, la malla computacional fue construida de tal manera que el valor máximo de y^+ fue de 0,9. El modelo $k - \omega$ SST es recomendado para flujos con recirculación, como es el caso de los canales de drenaje.

Para la fase discreta, fueron inyectadas un total de 720 parcelas en dirección normal a entra-

Tabla 17

Condiciones de operación para las simulaciones a alta presión en el eliminador de niebla tipo vane pack

Pruebas a alta presión	
Fluidos	Mezcla de gas 3, Tablas 5 y 7
Entrada fase gas	Velocidad: 2, 3, 4, 5 m/s
	Temperatura: 260 K
Entrada Fase líquida (modelo DPM)	Velocidad: 2, 3, 4, 5 m/s
	Parcelas: 720 a 0,015 kg/s
	tamaño de gota: 10 μm
Salida	<i>Pressure outlet</i>
Paredes	Trap/LWF
Modelo de turbulencia	$k - \omega$ SST
Presión de operación	2, 4, 7 MPa

da del dispositivo. La validación de los modelos de transporte fue llevada a cabo usando tamaños de gota que varían entre 1 y 20 micrómetros, mientras que para las simulaciones numéricas con gas natural a diferentes presiones de operación se utilizó un tamaño uniforme de gota de 10 micrómetros. En ambos casos, la velocidad de las gotas en el punto de inyección fue igual a la velocidad del gas. La carga total de líquido que se utilizó en todas las simulaciones de este eliminador de niebla fue de 0,015 kg/s (Estakhrsar and Rafee, 2016). El modelo de arrastre de Schiller–Naumann fue utilizado para calcular el arrastre de las gotas (Sección 4.1.7.1) y el modelo de seguimiento estocástico para representar la dispersión turbulenta de las gotas (Sección 4.3). Las gotas de líquido fueron inyectadas desde la entrada, haciendo seguimiento transitorio vía modelo DPM. Las ecuaciones que gobiernan la fase discreta inyectada y coexistiendo con la fase continua fueron resueltas simultáneamente y se consideró un acoplamiento interfacial de dos vías. La física subyacente del modelo DPM es representada mediante ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) mientras que

la fase continua es representada mediante ecuaciones diferenciales parciales (EDP). Por lo tanto, mientras que para la discretización de las ecuaciones de la fase continua se utiliza MVF; el modelo DPM utiliza sus propios mecanismos de discretización. En este caso fue utilizado Runge–Kutta de quinto orden con paso adaptativo para resolver las ecuaciones de transporte de la fase discreta.

Tabla 18

Condiciones numéricas, software y hardware utilizado en las simulaciones computacionales

Software, Hardware y parámetros numéricos		
Procedimiento/equipo	Características	
Geometría	Design Modeler–DM V19 by ANSYS inc	
Malla	Ansys Meshing–AM V19 by ANSYS inc	
Simulación CFD	FLUENT V19 by ANSYS inc	
Equipo	Procesador	16 procesadores Eight-core 3.20 GHz
	Memoria RAM	16 GB
	Sistema operativo	Windows 10 64 bits
Método numérico	Método de volúmenes finitos/Runge Kutta 5 orden	
Discretización	segregado SIMPLE; Upwind segundo orden	
RMS	1×10^{-5}	
Tiempo de cómputo/simulación	7 horas	

5.1.2. Resultados. Los resultados del eliminador de niebla tipo *vane pack* se dividen en tres partes: primero, fueron realizadas las evaluaciones numéricas de independencia de malla (Tabla 21); segundo, la validación de los modelos que representan el fenómeno físico por medio de la comparación con datos experimentales de aire–agua a presión de operación atmosférica, para este dispositivo fueron los únicos datos experimentales encontrados en la literatura. En esta sección se evaluó también la influencia del modelo de turbulencia. Finalmente, con el modelo

Tabla 19

Factores de relajación para las simulaciones numéricas del eliminador de niebla tipo vane pack

<i>Pressure: 0.3</i>
<i>Density: 1</i>
<i>Body forces: 1</i>
<i>Momentum: 0.7</i>
<i>Turbulent Kinetic Energy: 0.8</i>
<i>Specific Dissipation Rate: 0.8</i>
<i>Turbulent viscosity: 1</i>
<i>Energy: 1</i>
<i>Discrete Phase Sources: 0.5</i>

validado, se analizó la eficiencia de separación de las gotas de gas natural en sistemas a alta presión, incluyendo el efecto de los fenómenos de coalescencia y ruptura de la fase discreta. En este último análisis se incluyó el efecto de la presión del sistema y la velocidad de entrada del gas sobre la eficiencia de separación; adicionalmente se estudió el efecto de considerar el modelo de película Lagrangiana en la pared.

5.1.2.1. Independencia numérica de la malla. En el Apéndice 1 se muestra la metodología utilizada en todos los tests de independencia numérica de malla de la presente investigación. Tomando como base el algoritmo de la Figura 82, un total de seis mallas computacionales fueron generadas en el *software* ANSYS-MESHING[®], iniciando con una malla gruesa (A) e incrementando progresivamente el número de elementos, tal como se muestra en la Tabla 20. Las mallas de la A a la E fueron refinadas en la región cercana a las paredes (*mesh inflation*); mientras que todos los elementos de la malla F fueron creados con tamaño uniforme. La Figura 31 mues-

tra el perfil de velocidad del gas perpendicular a la sección del canal después de la primera curva (L1). Esta sección de la geometría se consideró adecuada para evaluar el efecto de la refinación de la malla sobre el campo de velocidad, debido que es después de la primera curva donde empieza a presentarse recirculación del flujo. Las mallas A y B (línea punteada y línea de color rojo respectivamente) muestran diferencias considerables entre ellas, mientras que las mallas C hasta E muestran perfiles similares. También es posible observar la desviación del comportamiento del perfil de velocidad de la malla F; especialmente en la región cercana a las paredes, confirmando la necesidad de refinar la malla correctamente cuando se utiliza el modelo de turbulencia $k - \omega$ SST. Sin embargo, como el comportamiento global del flujo no se afectó aún más, la malla C fue seleccionada para realizar las simulaciones subsecuentes.

Tabla 20

Número de elementos de las mallas utilizadas

Malla	A	B	C	D	E	F
Elementos	9.286	32.819	60.271	93.561	140.698	178.227

Tabla 21

Condiciones de simulación para el test de independencia de malla

Test de independencia de malla	
Software	Ansys Fluent V19
Tipo de Simulación	Estado estable, 2D
Modelo de turbulencia	$k - \omega$ SST
Transferencia de calor	Proceso isotérmico a 260 K
Fluidos	aire-agua
Presión de operación	atmosférica
Intensidad turbulenta	5%

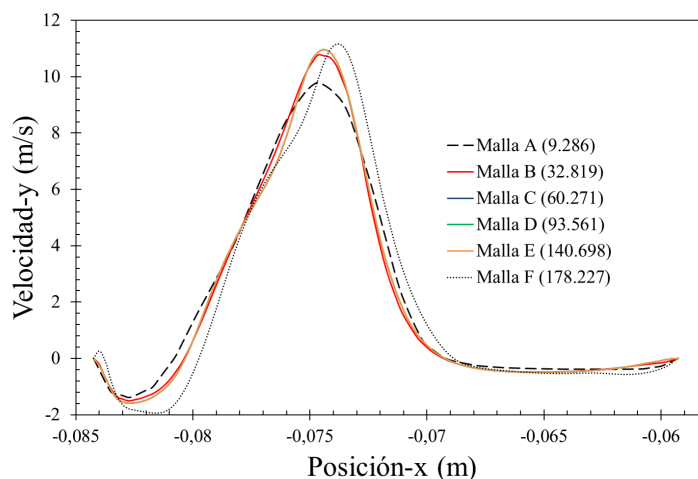


Figura 31. Test de independencia de malla: Distribución de la velocidad axial perpendicular al canal (L1) para todas las mallas evaluadas

La Figura 32 muestra el perfil de velocidad global del gas en dos puntos diferentes del canal del *vane pack* (P1 y P2) en función del número de elementos de malla. Se observa que a partir de la malla C ($\approx 60k$ elementos), se empieza a formar una tendencia asintótica en ambos puntos. La malla C conserva el balance entre precisión de resultados y esfuerzo computacional.

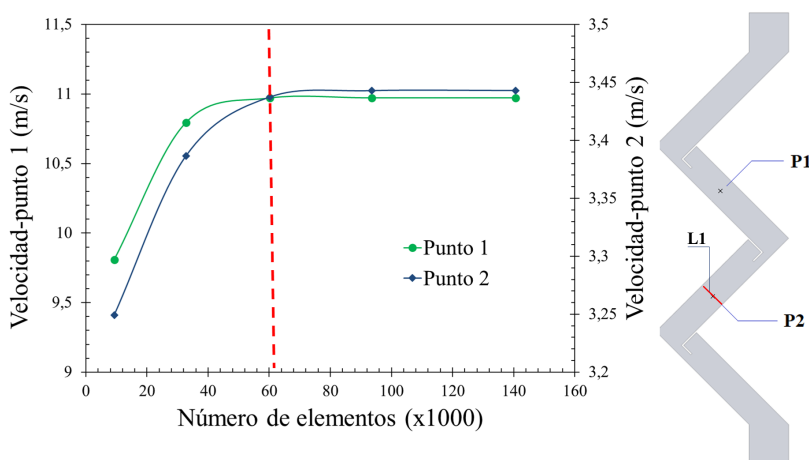


Figura 32. Test de independencia de malla: Velocidad en los puntos específicos P1 y P2 en función del número de elementos

La Figura 33 muestra la estructura de la malla seleccionada y el refinamiento aplicado en las paredes, el cual cumple con la condición de $y^+ < 1$ para el uso correcto del modelo de turbulencia $k - \omega$ SST. Los parámetros de calidad de la malla seleccionada (C) se presentan en la Tabla 22; en esta malla, fueron analizados los parámetros de oblicuidad y ortogonalidad (ver Apéndice 1). Como resultado, menos del 0.04 % de los elementos de la malla son de mala calidad para ambos parámetros.

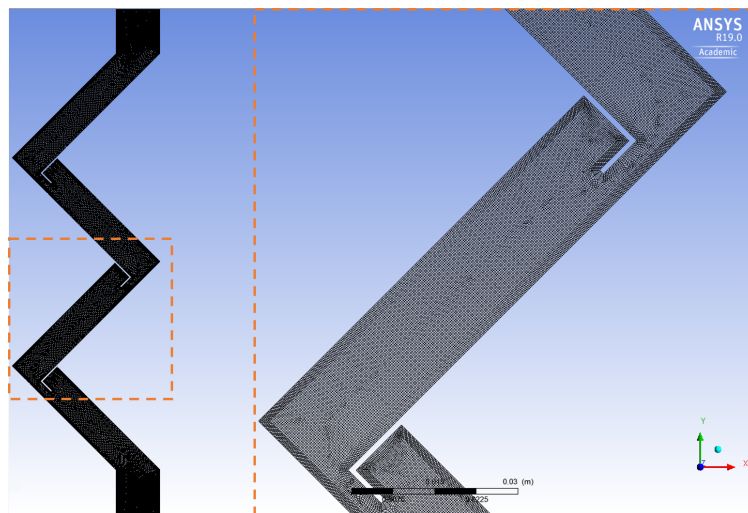


Figura 33. Malla computacional (C) generada para las simulaciones numéricas

5.1.2.2. Validación del modelo. Los resultados obtenidos para la eficiencia de separación de las gotas de líquido en el eliminador de niebla tipo *vane pack* fueron validados con los datos experimentales de Ghetti (2003) y los resultados numéricos de Estakhrsar and Rafee (2016); estos últimos construyeron perfiles de eficiencia de remoción de gotas en función del diámetro de la gota para cuatro diferentes velocidades de gas: 2, 3, 4, y 5 m/s. La eficiencia de remoción de gotas η , aplicable a este tipo de dispositivos se puede definir de acuerdo con la ecuación (259).

Tabla 22

Parámetros de calidad de la malla seleccionada para las simulaciones numéricas del eliminador de niebla

Oblicuidad				
	Min	Max	Prom	Desviación est. ^a
	4,617x10 ⁻⁸	0,7282	8,35x10 ⁻²	0,12513
0,0–0,2	0,2–0,4	0,4–0,6	0,6–0,8	0,8–1,0
86,74 %	9,561 %	3,696 %	0,03126 %	0 %
Ortogonalidad				
	Min	Max	Prom	Desviación est.
	0,49889	1,0	0,97433	6,07x10 ⁻²
1,0–0,8	0,8–0,6	0,6–0,4	0,4–0,2	0,2–0,0
96,827 %	3,142 %	0,0312 %	0 %	0 %

$$^a \quad SD = \sqrt{\frac{\sum |x - \bar{x}|^2}{N}}$$

$$\eta = \frac{\text{masa de gotas removidas}}{\text{masa de gotas entrantes}} \quad (259)$$

Debido que para la presente investigación se asume que las gotas son del mismo tamaño, para cada inyección, la masa de las gotas que son removidas es el producto del número de gotas removidas y la masa de cada gota Estakhsar and Rafee (2016). Adicionalmente, Estakhsar and Rafee (2016) usaron el modelo de turbulencia RSTM y evaluaron también el efecto de la constante de escala tiempo de vida de los remolinos sobre la dispersión turbulenta (C_L en la ecuación 190), considerando: $C_L = 0,075$; $0,05$ y $0,025$. El valor de $C_L = 0,05$ obtuvo los mejores resultados para el intervalo de velocidades del gas estudiado. En esta investigación se utilizó el modelo de turbu-

lencia $k - \omega$ SST y $C_L = 0,05$. La Figura 34 presenta la comparación de los datos experimentales proporcionados por Ghetti (2003) con los resultados numéricos desarrollados por Estakhrsar and Rafee (2016), los cuales utilizaron el modelo de turbulencia RSTM y los resultados numéricos de la presente investigación, realizados utilizando el modelo de turbulencia $k - \omega$ SST.

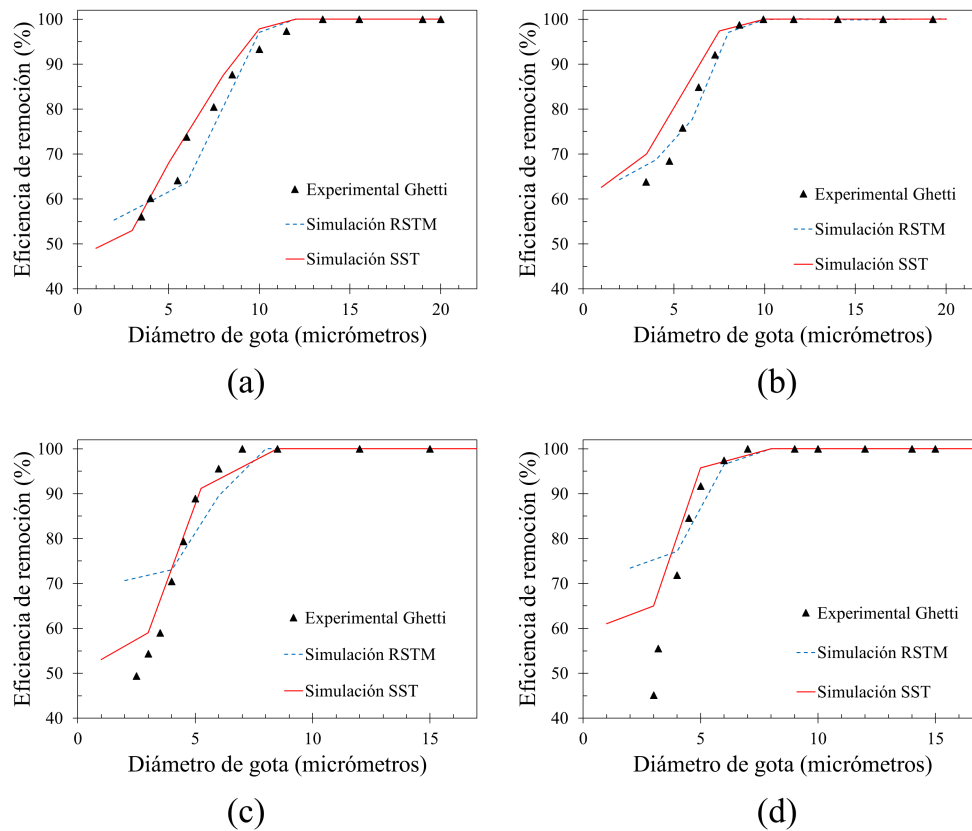


Figura 34. Comparación entre los datos experimentales obtenidos por Ghetti (2003) y la eficiencia de remoción de gotas calculada usando los modelos de turbulencia RSTM (Estakhrsar and Rafee, 2016) y $k - \omega$ SST con $C_L = 0,05$ a diferentes velocidades de gas: (a) $u_g = 2\text{ m/s}$ (b) $u_g = 3\text{ m/s}$ (c) $u_g = 4\text{ m/s}$ (d) $u_g = 5\text{ m/s}$

Los resultados de la Figura 34 muestran que tanto el modelo de turbulencia RSTM como el modelo SST con corrección para bajos números de Reynolds, son adecuados para representar

la remoción de gotas en eliminadores de niebla tipo *vane pack* a bajas velocidades de gas (2 y 3 m/s). En el caso de velocidades altas de gas (4 y 5 m/s), ambos modelos presentan discrepancias a pequeños tamaños de gota, debido a su baja inercia; sin embargo, se observan tendencias más cercanas a los datos experimentales con el modelo SST en comparación con el modelo RSTM de Estakhrsar and Rafee (2016).

5.1.2.3. Efecto de la condición de frontera de película en la pared. En esta sección se analiza el efecto de la condición de frontera considerada para la interacción de las gotas de líquido y las paredes del *vane pack*. La comparación de los resultados se realiza considerando las situaciones con y sin el modelo de formación de película líquida en la pared, la cual se describe en la Sección 4.4. En todos los casos en los que se hable de “sin formación de película” se adoptó una condición de frontera *trap*, lo cual significa que cualquier gota que entre en contacto con dichas paredes es removida del dominio de solución. Como se discutió anteriormente, si bien esta condición ciertamente sobre–estima los valores de eficiencia de separación; la condición de un “coeficiente de rebote” arbitrario, como fue realizado en trabajos anteriores, puede también enmascarar los resultados. Por lo tanto, el uso de un modelo de película Lagrangiana en la pared, incluso con todas sus simplificaciones, parece ser mucho más realista. La Figura 35 muestra el efecto de la inclusión de la formación de película líquida en la pared en función de la velocidad del gas y la presión de operación a través del seguimiento Lagrangiano de la trayectoria de las gotas dentro del eliminador de niebla tipo *vane pack*. Se observa que la condición de frontera *trap* sobre–estima los resultados de eficiencia de separación de las gotas. Se observa también una alta concentración de

gotas en las regiones inferiores, en los casos donde se incluye la formación de película líquida (c y d), esto debido al hecho que nuevas trayectorias Lagrangianas (parcelas) son re-inyectadas desde las paredes al dominio de solución debido al rebote y salpicadura de las gotas desde la película de líquido.

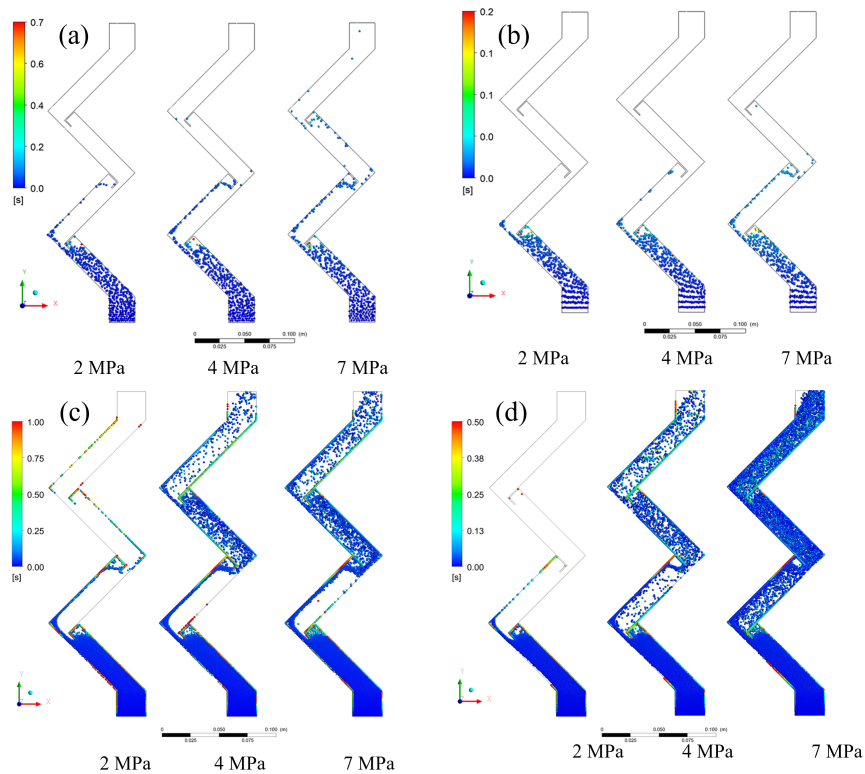


Figura 35. Efecto de la inclusión del modelo de formación de película Lagrangiana en función de la velocidad del gas y presión de operación: (a) $u_g = 2\text{ m/s}$ sin formación de película (b) $u_g = 5\text{ m/s}$ sin formación de película (c) $u_g = 2\text{ m/s}$ con modelo de película (d) $u_g = 5\text{ m/s}$ con modelo de película

La Figura 36 muestra la altura final que alcanzan las gotas de líquido dentro del eliminador de niebla tipo *vane pack*. Esta altura es calculada como la máxima posición vertical (coordenada y) obtenida por la trayectoria Lagrangiana de todas las parcelas. Se observa que, para altas presiones

de operación, la gota tiende a alcanzar la región superior del *vane pack*. Una posible solución sería aumentar la longitud de las placas y los canales de drenaje con el fin de incrementar el tiempo de residencia de las gotas, promoviendo la separación de las fases; sin embargo, esto incrementaría también la caída de presión en el eliminador de niebla.

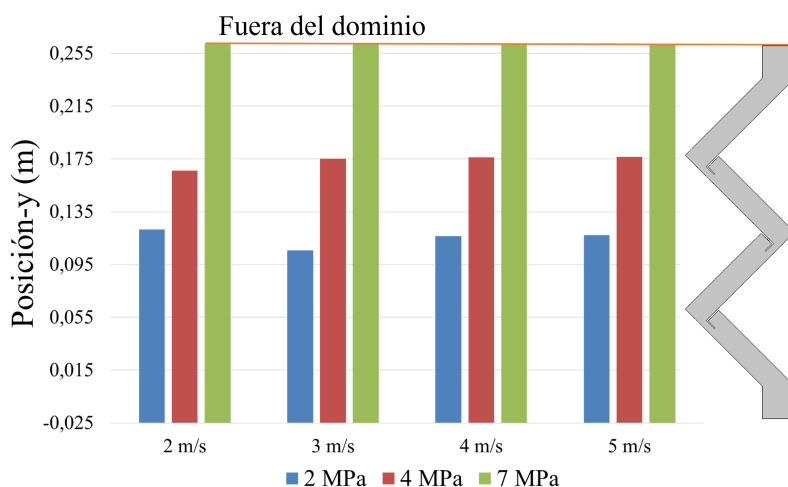


Figura 36. Altura final que alcanzan las gotas de líquido antes de entrar en contacto con las paredes del vane pack sin la condición de frontera de formación de película

5.1.2.4. Separación gas-líquido a alta presión. La función principal de los eliminadores de niebla es separar las gotas líquidas de menor tamaño, por lo tanto, este tipo de dispositivos es indispensable para sistemas de separación que operan a alta presión. A medida que la presión de operación aumenta, las gotas de líquido que se forman serán de menor tamaño y en consecuencia más difíciles de separar. La Figura 37 presenta el porcentaje de la eficiencia de remoción o separación de gotas de líquido (ecuación 259) en función de la presión de operación con y sin la condición de formación de película Lagrangiana en la pared. Es posible analizar dos aspectos

importantes:

- i. La tendencia de la eficiencia de separación de gotas es a disminuir a medida que aumenta la presión de operación. Como era de esperarse, el pequeño diámetro de gota utilizado tiene un impacto directo sobre la remoción de gotas. Adicionalmente, la alta densidad del gas genera un incremento de las fuerzas de arrastre y la dispersión turbulenta de las gotas, aumentando en consecuencia, la capacidad del gas de arrastrar las gotas a través del dispositivo. Como resultado, la condición de operación que arrojó la menor eficiencia de separación fue para el caso en el que la velocidad del gas a la entrada fue de 5 m/s y 7 MPa de presión.

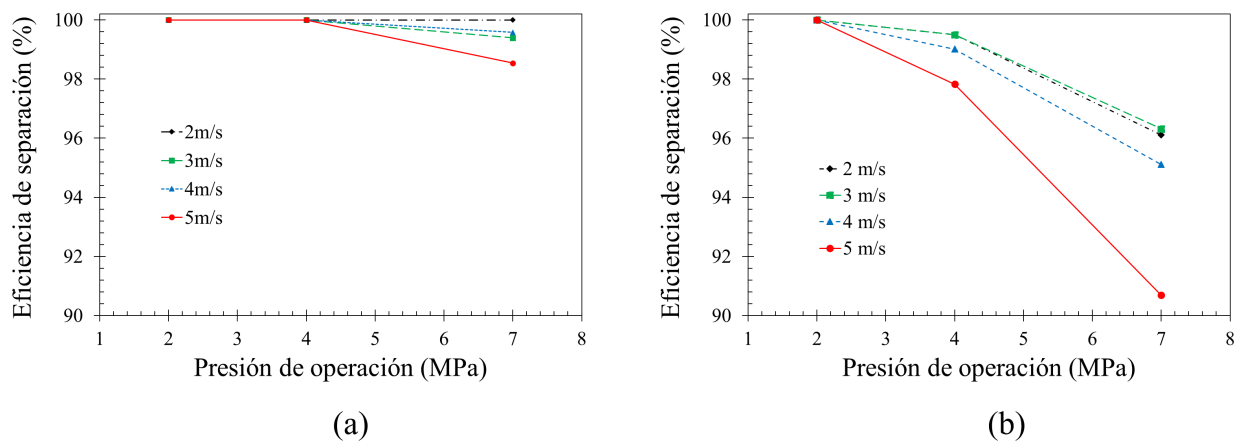


Figura 37. Eficiencia de separación de gotas en función de la presión de operación (a) sin y (b) con la condición de frontera de formación de película

- ii. La sobre-estimación de los valores de eficiencia de remoción de gotas cuando no se incluyen en el análisis fenómenos como choque con las paredes, formación de película y rebote del líquido. Tal como se observa en la Figura 35, las trayectorias de las parcelas no alcanzan la salida antes de desaparecer del dominio computacional, dando como resultado una

eficiencia de separación considerablemente mayor.

La caída de presión en el eliminador de niebla tipo *vane pack* a diferentes velocidades de gas a la entrada y presiones de operación del sistema con y sin la condición de frontera de formación de película de líquido se muestra en la Figura 38. De acuerdo con esta Figura, la mayor pérdida de presión en sistemas que operan a alta presión ocurre cuando la velocidad del gas a la entrada es alta, lo cual genera altos costos operacionales. Es posible observar también que el modelo de formación de película no tiene influencia significativa sobre la caída de presión, lo cual es de esperarse, ya que el balance de cantidad de movimiento se ve afectado indirectamente, únicamente por la diferencia de concentración de la gota en el núcleo del gas, debido a la consideración de un película líquida en la pared Estakharsar and Rafee (2016) mostraron que un incremento en el número de curvas es directamente proporcional a la caída de presión dentro del dispositivo. Al momento de seleccionar las condiciones de operación del *vane pack*, es necesario encontrar un equilibrio técnico y económico entre la eficiencia de separación de gotas y la caída de presión.

El principio físico de los eliminadores de niebla está dividido en interacciones gota–pared y gota–gota. La interacción gota–pared consiste en la formación de la película de líquido en las paredes, que posteriormente desciende debido a la fuerza de gravedad. La interacción gota–gota ocurre cuando varias gotas coalescen para formar gotas de mayor tamaño. Adicionalmente, la fuerza de impacto contra las paredes genera fenómenos de ruptura y arrastre secundario de las gotas. Estas interacciones son representadas mediante el modelo de Stanton–Rutland (Figura 27). La Figura 39 muestran la altura promedio (h_0) que la película de líquido alcanza en las paredes izquierda y

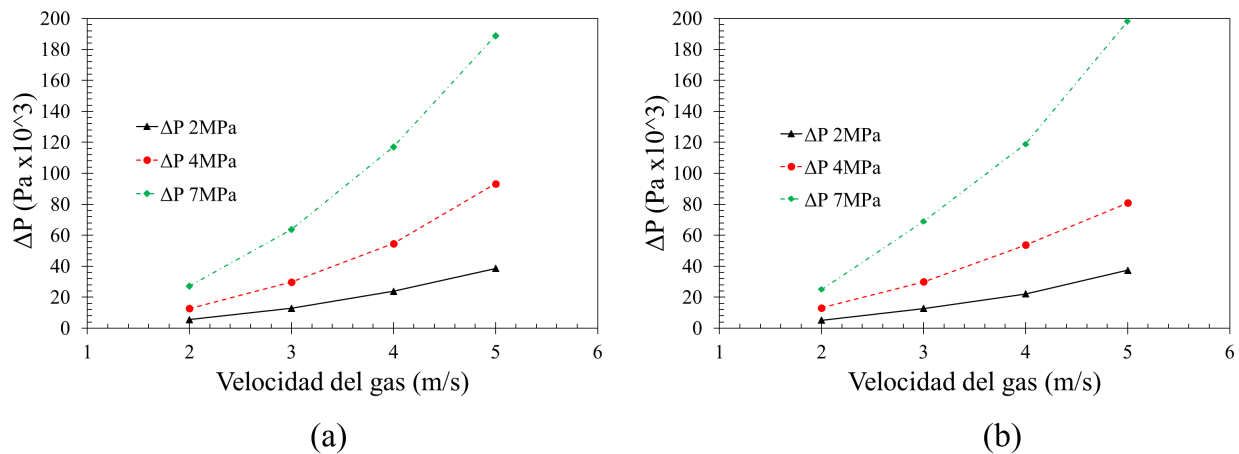


Figura 38. Caída de presión calculada en función de la velocidad de gas a la entrada (a) sin y (b) con la condición de frontera de formación de película

derecha del *vane pack* a diferentes velocidades del gas a la entrada y presiones de operación. Se observan alturas promedio elevadas en la pared izquierda, lo cual evidencia que esta pared soporta la mayor cantidad de líquido, en comparación con la pared derecha. El modelo aquí descrito, considerando la formación de película en la pared, se podría utilizar para la optimización de la geometría en relación con la distribución de la película líquida como, por ejemplo, el efecto de la posición de los canales de drenaje. Esto se deja como recomendación para futuras investigaciones, debido que está fuera del alcance de esta sección.

La Figura 40 presenta los perfiles locales de altura de la película de líquido en las paredes del eliminador de niebla para sistemas a alta presión (7 MPa), operando a velocidades de entrada del gas de 2 m/s y 5 m/s respectivamente. Es posible observar que los picos de altura ocurren en las curvaturas de las placas y los canales de drenaje, lo cual podría sugerir una idea sobre la adaptación del dispositivo para sistemas que operan a alta presión, especialmente los canales de drenaje.

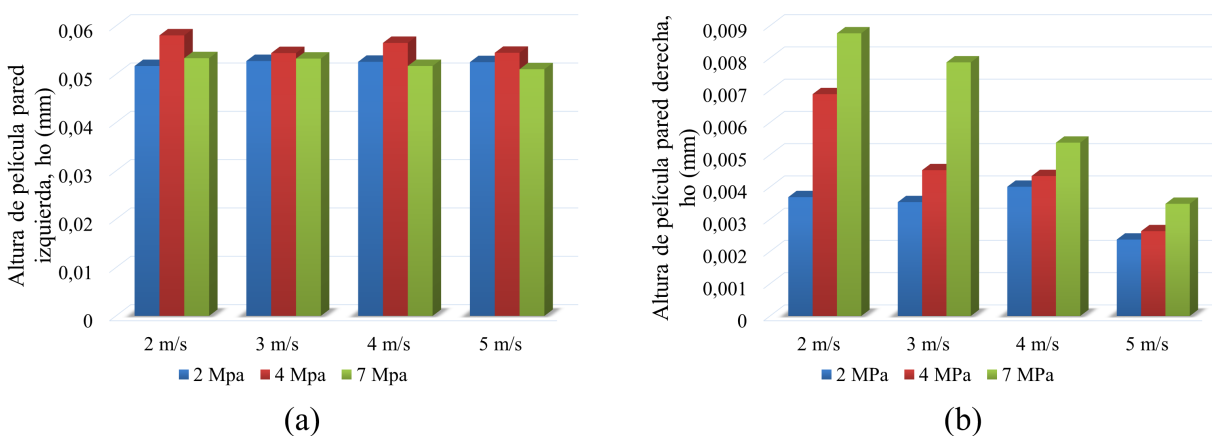


Figura 39. Altura promedio de la película de líquido h_0 en la (a) pared izquierda y la (b) pared derecha; para diferentes velocidades de gas y presiones de operación

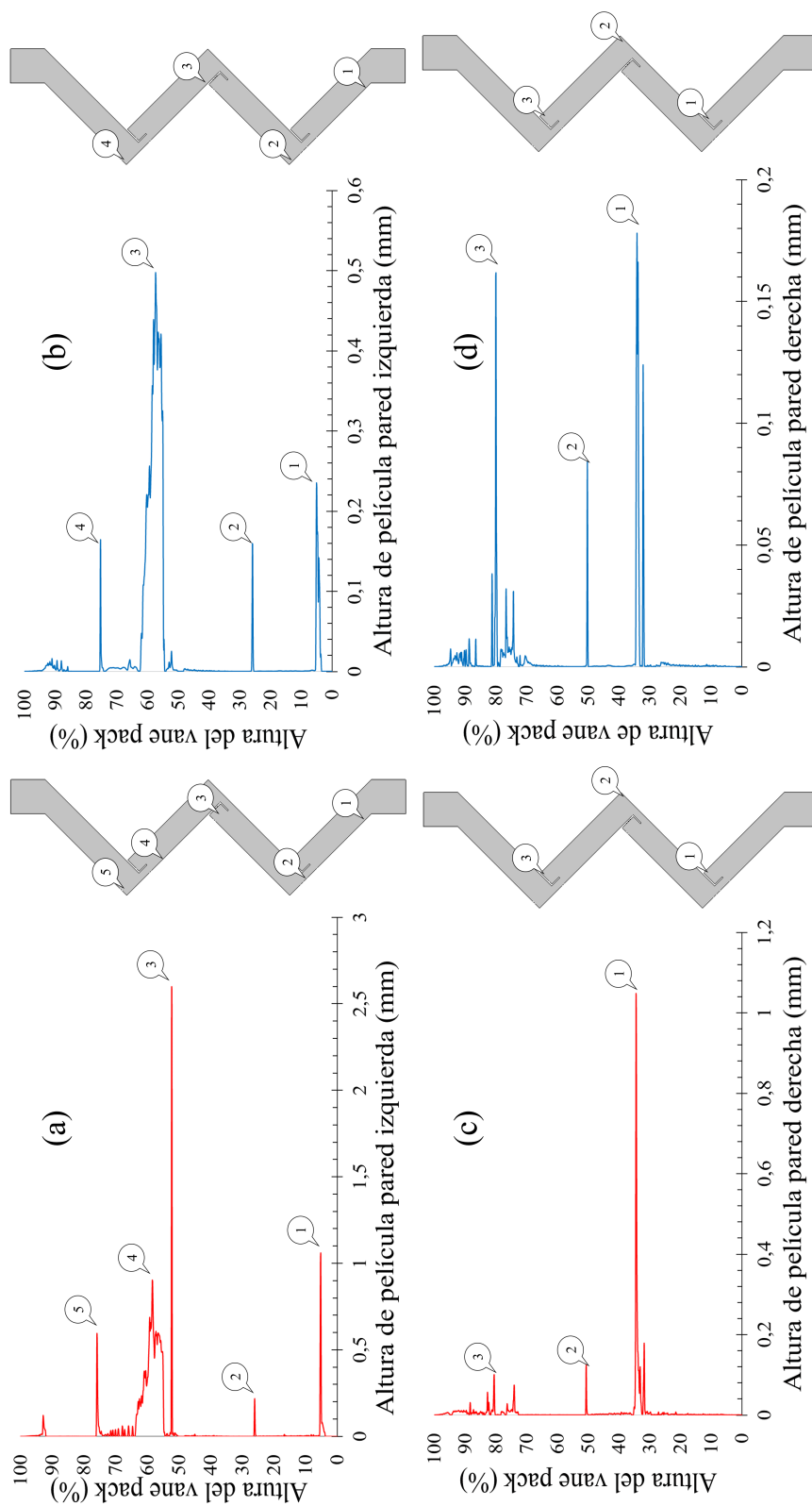


Figura 40. Altura de la película de líquido h_0 en la pared izquierda para condiciones de alta presión (7 MPa) a (a) $u_g = 2\text{ m/s}$ (b) $u_g = 5\text{ m/s}$; y en la pared derecha a (c) $u_g = 2\text{ m/s}$ (d) $u_g = 5\text{ m/s}$

La Figura 41 muestra el campo de velocidades de la fase gaseosa. En el primer canal de drenaje, se produce la retención y recirculación del flujo, lo que también resulta en un mayor tiempo de residencia de las gotas, lo cual es favorable para la separación de fases. Los canales de drenaje a su vez, generan una circulación continua del flujo dentro de las placas paralelas, lo que conduce a mayores caídas de presión, especialmente en los casos donde la presión de operación es alta.

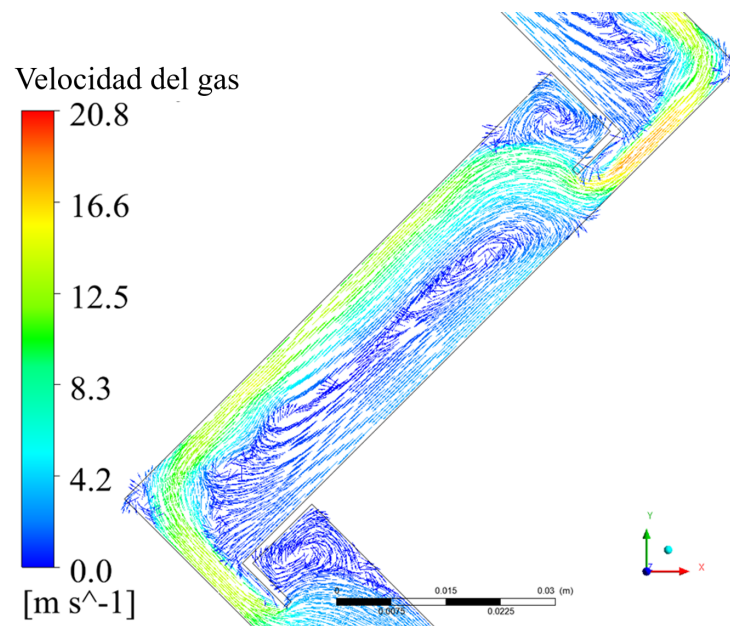


Figura 41. Vectores del campo de velocidad del gas para $u_g = 2\text{ m/s}$ y $P_{op} = 4\text{ MPa}$ incluyendo la formación de película líquida en la pared

Los perfiles de fracción volumétrica de la fase discreta a bajas y altas velocidades de entrada del gas son presentadas en la Figura 42. Estos campos de fracción volumétrica muestran el efecto de la presión de operación sobre los fenómenos de coalescencia y ruptura de la fase líquida. A medida que aumenta la presión de operación, además de la reducción de la diferencia de densidades entre las fases, la tensión superficial también disminuye, lo que hace menos favorable la formación

de gotas grandes y, por el contrario, favorece el arrastre de gotas debido la ruptura de la película y las salpicaduras.

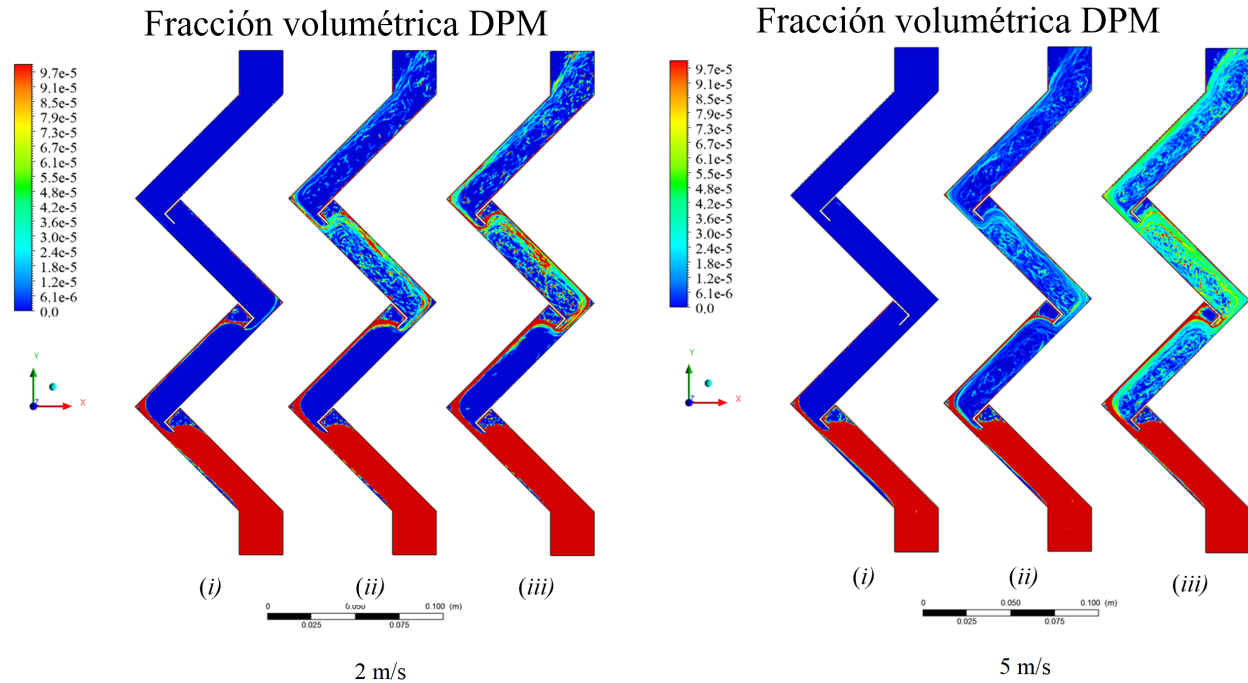


Figura 42. Fracción volumétrica de la fase discreta, incluyendo la formación de película en la pared a velocidad del gas (a) $u_g = 2$ m/s y (b) $u_g = 5$ m/s; para (i) 2 MPa (ii) 4 MPa y (iii) 7 MPa

En ambos casos, es posible observar que, a baja presión de operación, las gotas de líquido tienden a permanecer cerca de las paredes y eventualmente son capturadas por la película. Sin embargo, a medida que aumenta la presión de operación del eliminador de niebla, la inercia de las gotas disminuye y las fuerzas de arrastre y dispersión turbulenta aumentan, causando que las gotas de líquido se distribuyan de manera más aleatoria entre las placas y aumente el arrastre de líquido por parte de la corriente gaseosa, especialmente a 5 m/s y 7 MPa. Para el caso específico de presión de operación más alta, es posible observar además del fuerte arrastre de gotas por parte de la fase

gaseosa después del primer canal de drenaje, la presencia de líquido en la segunda etapa, es decir, después de la primera curva del *vane pack*.

5.2. Eliminadores de niebla tipo *wire mesh*

La Tabla 23 presenta siete eliminadores de niebla de tipo *wire mesh* con diferentes propiedades físicas y geométricas. Las propiedades características son: superficie específica S_{mesh} , diámetro del alambre d_{wire} y porosidad ϵ . Las propiedades fueron proporcionadas por diferentes fabricantes y, para efectos de verificación, la superficie específica y la porosidad fueron calculadas de acuerdo con el siguiente procedimiento:

Tabla 23

Propiedades físicas y geométricas de varios eliminadores de niebla tipo malla tejida (Helsør and Svendsen, 2007)

ID	h(m)	d_{wire} (mm)	ρ_{malla} (kg/m ³)	S_{malla} (m ² /m ³)	S_{malla} (m ² /m ³) ^a	ϵ (%)	ϵ (%) ^b
A	0,1	0,3	60,1	878	600	93,4	95,4
B	0,1	0,28	140,8	251	145	98,2	99
C	0,1	0,28	125,8	224	345	98,4	97,6
D	0,15	0,27	164,1	303	267	98	98
E	0,15	0,27	186,9	345	267	97,7	98
F	0,1	0,27	183,2	338	267	97,7	98
G	0,1	0,28	118,3	211	145	98,5	99

^a Valores proporcionados por el fabricante AMACS (2019)

^b Valores proporcionados por el fabricante Koch-Glitsch (2019)

i. El volumen del *wire mesh* V_{unit} se calculó usando el diámetro del separador y la altura entre

el soporte superior y el fondo h' .

$$V_{unit} = \frac{\pi}{4} d_{sep} h' \quad (260)$$

ii. El peso del material de la malla m_{mesh} sin incluir los soportes se midió y posteriormente se calculó la densidad, así

$$\rho_{mesh} = \frac{m_{mesh}}{V_{unit}} \quad (261)$$

iii. La porosidad fue calculada de acuerdo a la ecuación (262)

$$\varepsilon = \left[1 - \frac{\rho_{mesh}}{\rho_{mat}} \right] \quad (262)$$

Donde ρ_{mat} es la densidad del material del alambre con el que se fabrica la malla tejida.

vi. La superficie específica se define como el área superficial de la malla dividido por el volumen total del dispositivo, de la siguiente manera:

$$S_{mesh} = 4 \cdot \frac{\rho_{mesh}}{\rho_{mat} \cdot d_{wire}} = 4 \cdot \frac{1 - \varepsilon}{d_{wire}} \quad (263)$$

Todos los eliminadores de niebla de malla tejida de la Tabla 23 son fabricados en acero inoxidable, a excepción de la malla A que es fabricada en polipropileno. Generalmente se presentan tres estructuras geométricas: aleatoria (A), estratificada (B, C y G) y enrollada (D, E y F), como se muestra en la Figura 43.

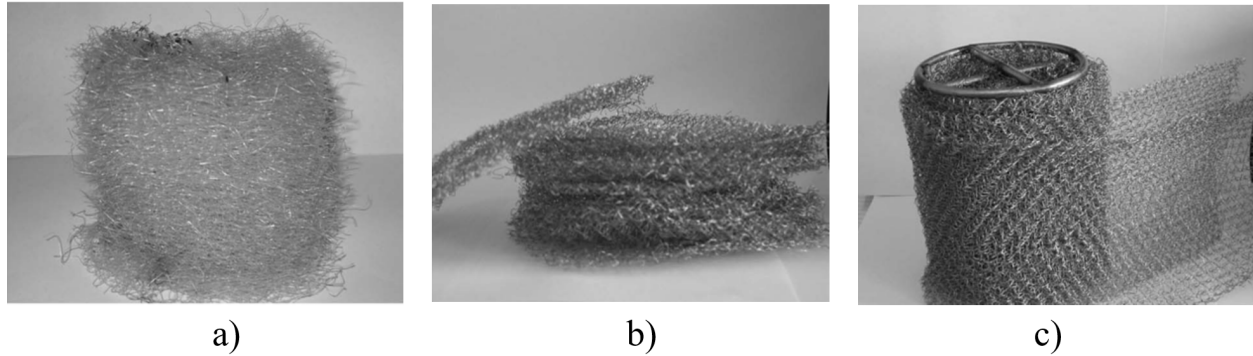


Figura 43. Estructura geométrica real de los eliminadores de niebla tipo malla tejida: a) aleatoria b) estratificada y c) enrollada (Helsør and Svendsen, 2007)

Mediante el modelo de medio poroso PMM (Sección 4.5) es posible simular el comportamiento aproximado de las mallas de alambre tejido de la Figura 43. Para este propósito, es necesario establecer los parámetros del medio poroso que serán utilizados para el cálculo de la caída de presión. En los diseños convencionales se asumía que la caída de presión era tan baja que debía despreciarse. Afortunadamente, Helsør and Svendsen (2007) desarrollaron un estudio experimental en el cual caracterizaron la caída de presión en este tipo de mallas a diferentes condiciones presión de operación (en el intervalo de 2 a 9,2 MPa) para varios tipos de componentes (aire, nitrógeno y gas natural). Los datos fueron ajustados a una ecuación de tipo Hazen-Dupuit-Darcy (264) y los parámetros de correlación (α y C) fueron probados en diferentes tipos de mallas.

$$\frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{\mu}{\alpha} V + C\rho V^2 \quad (264)$$

Comparando la ecuación (264) con el término fuente de la ecuación de cantidad de mo-

vimiento para el medio poroso y su forma simplificada (ecuaciones 221 y 222) se obtienen las constantes D y C_2 en un flujo con dirección normal a la malla así:

$$D = \frac{1}{\alpha} \quad ; \quad C_2 = 2C \quad (265)$$

Donde D es el inverso de la permeabilidad absoluta y C_2 es la resistencia inercial.

Setekleiv and Svendsen (2012) analizaron ocho diferentes tipos de *wire mesh* y un desviador de entrada a 20, 50 y 85 bar para una mezcla de gas natural sintético, sugieren que el diseño de los eliminadores de niebla tipo *wire mesh* debe caracterizarse con un parámetro denominado “*wire packing density*”. También muestran como la velocidad del gas y la tensión superficial afectan la eficiencia del eliminador de niebla. Adicionalmente, previenen acerca de la necesidad de evitar la condición de inundación para no tener disminución en la eficiencia de separación.

La Figura 43 presenta tres diferentes configuraciones reales de un eliminador de niebla tipo *wire mesh*; sin embargo, la simulación con CFD de una muy compacta aglomeración de finos alambres, empotrados en un separador gravitacional es impráctico por no decir imposible en términos de ingeniería, debido a la complejidad de su geometría. A pesar de lo anterior, existe una manera “simplificada” para intentar analizar el comportamiento de este dispositivo promotor de la coalescencia, la cual consiste en asumir el eliminador de niebla como un medio poroso con las propiedades específicas de la Tabla 23, tal como se observa en la Figura 44.

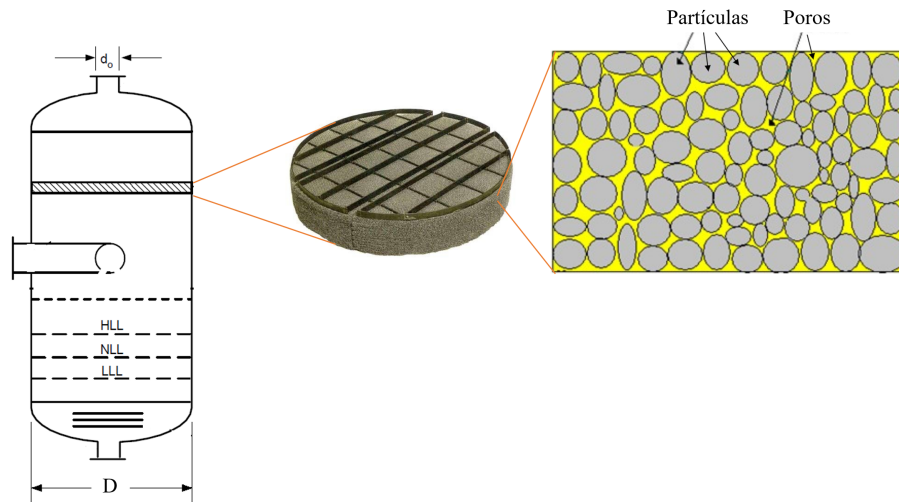


Figura 44. Representación numéricamente equivalente del eliminador de niebla tipo wire mesh como un medio poroso

Laleh (2010) realizó cálculos numéricos de eficiencia de separación en un eliminador de niebla tipo *wire mesh* utilizando el modelo de medio poroso, presión atmosférica y dos tipos de distribuciones de tamaño de gota en el intervalo de 5 a 150 micrómetros y 5 a 2000 micrómetros respectivamente. La geometría propuesta por Laleh (2010) fue similar a la presentada en la Figura 45–Der.; encontrando que la eficiencia de separación del eliminador de niebla tiene un valor máximo, alrededor del 40% a velocidades muy bajas (de 0,05 m/s aproximadamente) y luego cae bruscamente a valores muy bajos de eficiencia. Los resultados revelaron que el aumento de la velocidad del gas dentro del intervalo de operación aumenta el desempeño del *demister*, hasta que alcanza una velocidad máxima segura, después de la cual el aumento de la velocidad del gas causa una rápida pérdida de la eficiencia de separación de las gotas Coker (2014).

Como es de esperarse, la suposición de un medio poroso que represente un eliminador de niebla tipo *wire mesh* no es lo ideal para analizar su comportamiento, debido que la principal función de este dispositivo es promover la coalescencia, lo cual genera inundación en el *demister*. Este fenómeno no se vería reflejado en el medio poroso. Sin embargo, permite un acercamiento a la posible pérdida de carga en equipos con dicha porosidad y densidad.

5.2.1. Modelo computacional. La geometría fue realizada en el software especializado de CAD SOLIDWORKS[®], como alambres de aluminio con estructura estratificada (Figura 43-b) con 0,3 m de diámetro y 0,15 m de altura tal como se observa en la Figura 45–Izq.; con las propiedades de la malla D de la Tabla 23. El modelo CAD de la izquierda confirma la necesidad de descartar la simulación de la geometría real; en cambio se utilizó un dispositivo cilíndrico de 0,3 m de diámetro y 1,5 m de longitud y una sección de 0,15 m donde se aplicó el modelo de medio poroso de ANSYS–FLUENT[®].

La malla computacional hexaédrica de la Figura 46 fue construida en el software comercial ANSYS–MESHING[®] utilizando elementos uniformes en todo el dominio de solución, es decir, sin refinación en las paredes del eliminador de niebla. Las especificaciones de calidad (oblicuidad y ortogonalidad. Ver Secciones 1 y 1 respectivamente) de la malla generada son mostradas en la Tabla 24.

Esta geometría no fue sometida a un *test* de independencia numérica de la malla, debido

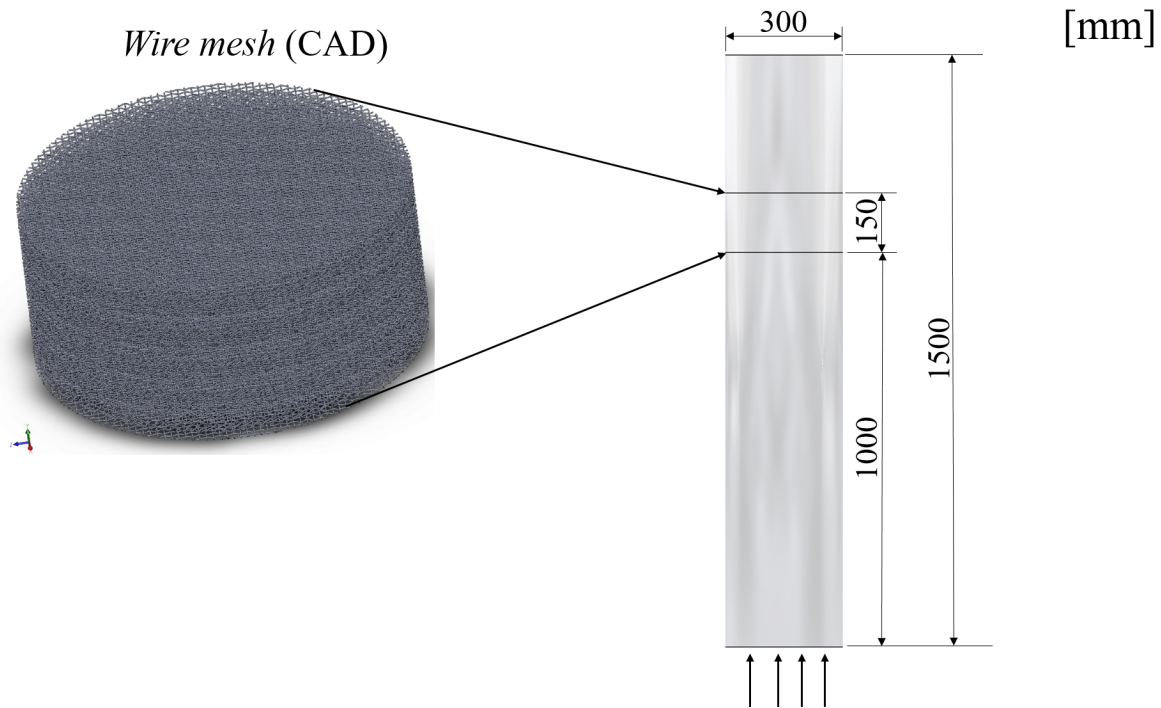


Figura 45. Modelo en CAD del eliminador de niebla tipo *wire mesh* y simplificación a medio poroso de FLUENT™

que el modelo es una simplificación del comportamiento real y por lo tanto no será utilizado para el separador gravitacional completo; únicamente se aseguró que los elementos tuvieran el tamaño y la calidad adecuados para la representación del medio poroso. El objetivo principal de este análisis es incluir el tamaño de gota obtenido en el Capítulo 2 en el medio poroso y verificar la pérdida de carga existente así como el arrastre de gotas por parte de la fase gaseosa.

5.2.1.1. Fluidos y condiciones de frontera. Para el análisis del eliminador de niebla tipo *wire mesh*, igual que para el *vane pack* fue utilizada la mezcla de gas natural número 3 de la Tabla 5 a la temperatura y presión de operación de 260 K y 7 MPa respectivamente. A diferencia

Tabla 24

Parámetros de calidad de la malla realizada para simular el modelo de medio poroso

Oblicuidad		Ortogonalidad	
Máx.	Prom.	Min.	Prom.
0,67735	0,09319	0,45393	0,98186
Elementos		258.970	

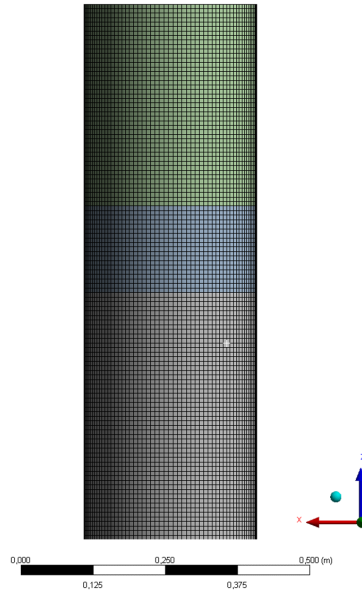


Figura 46. Malla computacional del eliminador de niebla tipo wire mesh

del *vane pack*, para el presente análisis se utilizó un diámetro de gota de 4,18 micrómetros, el cual proviene del resultado de la nucleación del gas natural a dichas condiciones termodinámicas. Las simulaciones numéricas fueron realizadas variando la velocidad de entrada del gas desde 2 m/s hasta 5 m/s, y condición de presión definida a la salida del dispositivo. En las paredes de ambas fases fue utilizada la condición de no deslizamiento y finalmente fueron delimitadas las interfases de la región porosa.

5.2.1.2. Modelo matemático y numérico. Para la implementación del modelo fueron consideradas dos fases continuas en el *software comercial* ANSYS-FLUENT[®]. El sistema se consideró isotérmico y el modelo de turbulencia utilizado fue *k - ε Realizable* con funciones estándar de pared, debido que en este caso no eran tan relevantes las variaciones en la región cercana a la pared y si en el seno del fluido; se utilizó una intensidad de la turbulencia del 3% y diámetro hidráulico de 300 mm. Se optó por el algoritmo *coupled* para el acoplamiento presión-velocidad y discretización de alto orden en los términos convectivos. las Tablas 25 y 26 resumen los parámetros de simulación nombrados anteriormente.

5.2.2. Resultados. En la presente sección se analizan dos variables de respuesta: la caída de presión y la fracción volumétrica del líquido en función de la velocidad de entrada del gas para el sistema operando a alta presión.

La Figura 47 muestra el campo y los perfiles de caída de presión dentro del dispositivo. Se observa un valor constante de la presión en el primer metro de longitud, seguido de un perfil decreciente que corresponde a la región porosa y un salto abrupto en la parte superior del equipo. Se observa también que a medida que aumenta la velocidad de entrada del gas, la caída de presión aumenta también de manera considerable, en el intervalo de 2,5 kPa para 2 m/s hasta 15 kPa para 5 m/s. La pérdida de carga en equipos industriales genera altos costos operacionales, razón por la cual debe buscarse un equilibrio razonable entre la caída de presión y la eficiencia de separación de las fases.

Tabla 25

Condiciones de simulación para el eliminador de niebla tipo wire mesh

Tipo de simulación	Estado estable, 3D	
Fluidos	Mezcla Gas 3. Ver Tablas 5 y 7	
Temperatura	260 K	
Presión	7 MPa	
Tamaño de gota	4,18 μm	
Modelo de turbulencia	$k - \varepsilon$ Realizable	
Intensidad de turbulencia	3 %	
Entrada de las fases	Velocidad	2, 3, 4, 5 m/s
Salida	Presión (estática)	0 Pa
Paredes	No deslizamiento	
Interfases	Porous/Laminar zone	
Software/hardware	Ver Tabla 18	
Discretización	Coupled	
	Pseudo-transient	
	Quick	
	Upwind de 2 orden	
Tiempo de cómputo/simulación	30 min	

La Figura 48 muestra a la izquierda el perfil longitudinal de fracción volumétrica del líquido y a la derecha los perfiles radiales a tres diferentes alturas del medio poroso que actúa como eliminador de niebla tipo *wire mesh*. Se observa retención de gotas de líquido en el medio poroso con perfiles que se concentran en regiones cercanas a la pared. Sin embargo, la diferencia en el valor total de fracción volumétrica se encuentra en el orden de 1×10^{-5} lo cual revela que para el pequeñísimo tamaño de gota (4,18 micrómetros) considerado en la simulación numérica, a pesar de que el medio poroso consigue retener algo de líquido existe una alta tasa de arrastre por parte de la corriente gaseosa, generando en consecuencia una considerable disminución en la eficiencia

Tabla 26

Factores de relajación para las simulaciones numéricas del eliminador de niebla tipo wire mesh

<i>Pressure:</i> 0.5
<i>Momentum:</i> 0.5
<i>Density:</i> 1
<i>Body forces:</i> 1
<i>Volume fraction:</i> 0.5
<i>Turbulent Kinetic Energy:</i> 0.75
<i>Specific Dissipation Rate:</i> 0.75
<i>Turbulent viscosity:</i> 1

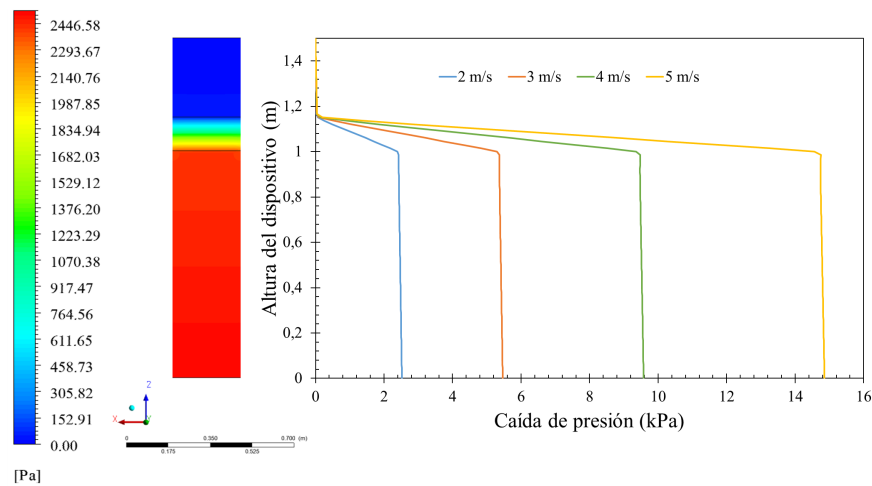


Figura 47. Perfil de presión en las regiones continua y porosa del dispositivo a diferentes velocidades de entrada del gas

de remoción de gotas de líquido. Este arrastre puede deberse a que la velocidad del gas es alta para el dispositivo, ya que Laleh (2010) sugiere que la velocidad de entrada de la fase continua debe permanecer por debajo de 0,1 m/s para alcanzar una eficiencia de separación alrededor del 50%.

La Figura 49 presenta la fracción volumétrica del líquido en la sección transversal del dispositivo a diferentes valores de velocidad de entrada del gas. Tal como se observó en los perfiles

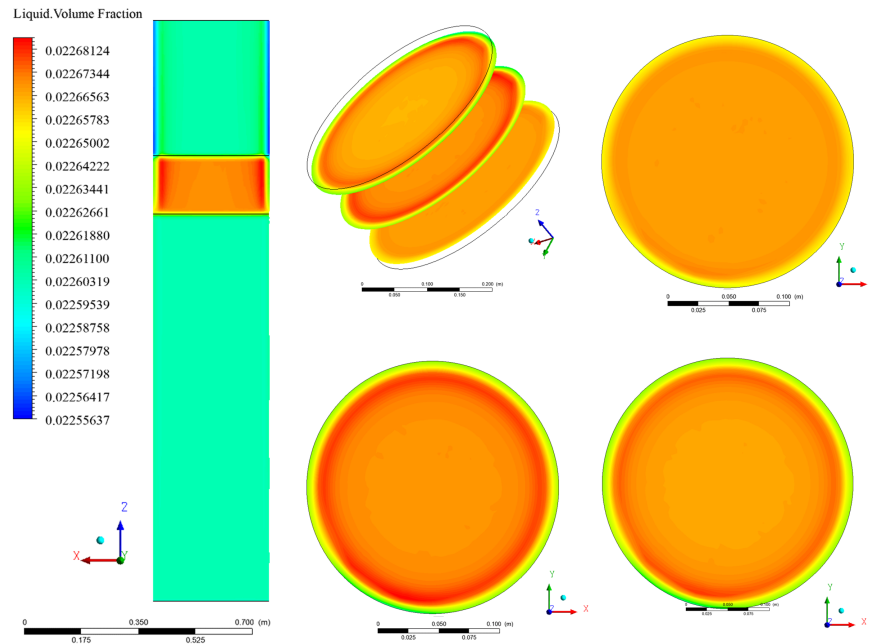


Figura 48. Perfiles longitudinal y radial de la fracción volumétrica de líquido: $u_g= 2$ m/s, $P_{op}= 7$ MPa, $T= 260$ K y $d_{gota}= 4,18$ micrómetros

de caída de presión, el aumento de la fracción volumétrica de líquido es directamente proporcional al aumento de la velocidad, sin embargo, como ya se mencionó la diferencia entre la fracción volumétrica a la entrada y dentro del medio poroso es baja, es decir, que la fase dispersa está siendo arrastrada por la fase continua, como consecuencia de la combinación entre el tamaño de gota y la velocidad del gas. Una forma de profundizar este estudio con el fin de buscar mejoras en la eficiencia de separación sería hacer pruebas del modelo de medio poroso disminuyendo la velocidad del gas hacia los valores recomendados y utilizar una distribución de tamaño de gota con un valor mínimo por encima del propuesto aquí, desafortunadamente se sale del alcance de la presente investigación.

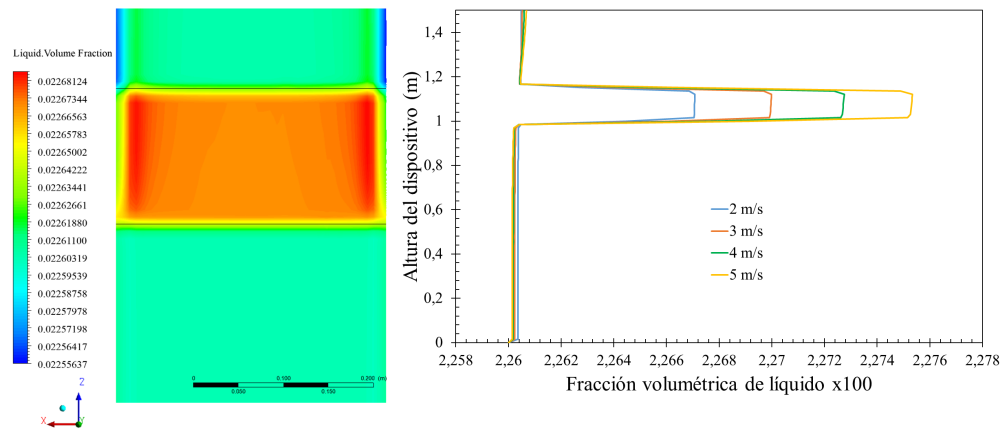


Figura 49. Fracción volumétrica de líquido a diferentes velocidades de entrada del gas

Finalmente, a pesar de las suposiciones y simplificaciones realizadas, el presente análisis numérico proporcionó una idea acerca de la caída de presión que podría generar un eliminador de niebla tipo *wire mesh* y las limitaciones del modelo de medio poroso en términos del tamaño de gota; por tal razón, fueron tomadas las siguientes decisiones para el capítulo siguiente (Capítulo 6): primero, utilizar un eliminador de niebla tipo *vane pack* en el acople del separador gravitacional y, segundo, utilizar un tamaño de gota mínimo de 10 micrómetros para los sistemas analizados a alta presión.

6. Separación gravitacional

La fuerza de gravedad continua siendo la primera opción a la hora de separar mezclas gas-líquido con diferencia de densidad considerable entre las fases; es por eso que las plantas de tratamiento de gas natural a presión atmosférica, industrialmente denominadas VRU (de sus siglas en inglés *Vapor Recovery Unit*) tienen válvulas de estrangulamiento, intercambiadores de calor y compresores trabajando en función de un solo equipo: el separador gravitacional bi o trifásico.

En el Capítulo 3 se hace una descripción detallada del proceso, las condiciones, el equipo y los accesorios necesarios para su correcto funcionamiento; así como del estado de arte, prestando especial atención en sistemas operando a alta presión y estudios utilizando CFD. Todo este bagaje conduce a la selección del equipo que se adapte a las condiciones de los campos menores colombianos. Es importante aclarar que la presente selección se limita a los fluidos y a los procesos, sin tener en cuenta las propiedades del material con el cual deben construirse los equipos. Convendría valerse de la asesoría de un ingeniero mecánico para resolver estas inquietudes, lo cual sale del alcance de la presente investigación.

La literatura y experiencia de campo sugieren que para procesos operando por encima de 4 MPa es necesario tener una relación Longitud/Diámetro de cinco o superior con el fin de dar espacio suficiente para que la fuerza de gravedad actúe (Tabla 12) (Walas, 1990; Austrheim et al., 2008; Svrcek and Monnery, 1993). Adicionalmente, en los casos donde la cantidad de líquido es

baja ($< 4\% \text{vol}$) es aconsejable el separador vertical tipo *scrubber* con eliminadores de niebla de tipo *wire mesh* (Sección 3.3.2). Sin embargo los resultados del Capítulo 5 mostraron que es impráctico a nivel de costo computacional acoplar un *wire mesh* al separador gravitacional, debido a la complejidad de su geometría. Por todo lo anterior, para el análisis de la separación gravitacional de las fases del gas natural, fue seleccionado el separador vertical bifásico de la Figura 50.

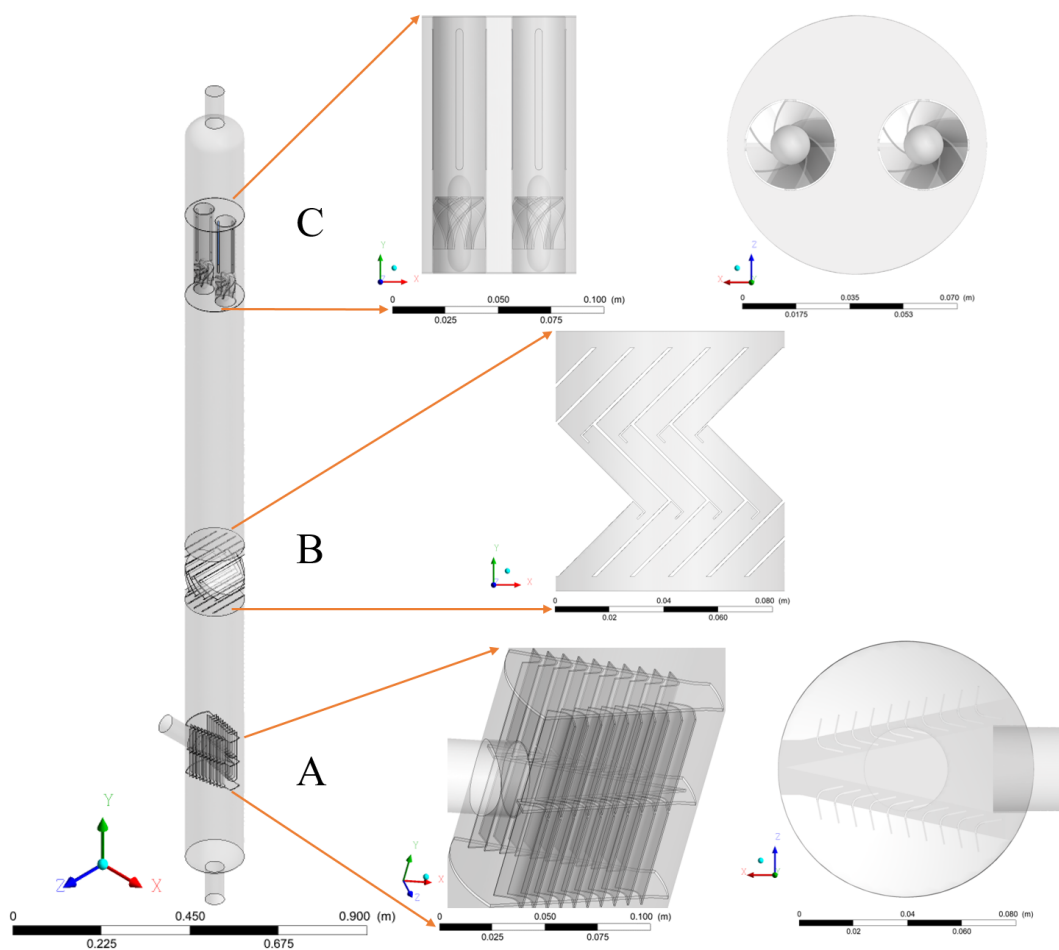


Figura 50. Geometría propuesta del separador gravitacional bifásico, adaptada de Austrheim et al. (2008). **A** Divisor de entrada **B** Eliminador de niebla tipo vane pack **C** AFC

Este separador fue adaptado del trabajo experimental realizado por Austrheim et al. (2008) (las dimensiones y planos detallados son presentados en el Apéndice 2) y consta de tres secciones:

- A** La boquilla de entrada de la mezcla, acompañada del divisor de flujo en forma de placas paralelas, las cuales distribuyen radialmente la mezcla gas-líquido efectuando el cambio abrupto en la dirección de flujo.
- B** El eliminador de niebla fue una adaptación en tres dimensiones de la geometría bidimensional analizada en la Sección 5.1: placas paralelas con canales de drenaje.
- C** Ciclones de flujo axial configurados de acuerdo con la Sección 3.3.3.

6.1. Modelo computacional

La presente geometría demandó obtener tres tipos de resultados: el test de independencia numérica de la malla computacional, la validación de los modelos matemáticos con los datos experimentales y los ensayos a 7 MPa. Sin embargo los tres comparten el modelo multifase de varios fluidos, descrito por las ecuaciones (127) a (132) y el modelo de turbulencia $k - \omega$ SST de las ecuaciones (170) y (171). Las fuerzas interfaciales consideradas fueron la fuerza de arrastre y la dispersión turbulenta entre las fases (Sección 4.1.7). Para el cálculo de las propiedades termodinámicas fueron construidas las curvas de equilibrio de mezcla utilizada en la validación de los modelos con datos experimentales, de acuerdo con el procedimiento del Capítulo 1.

Todas las simulaciones del separador gravitacional fueron realizadas en estado transitorio discretizando las ecuaciones por medio del método de volúmenes finitos utilizando la metodología

SIMPLE para el algoritmo de acoplamiento presión–velocidad y *Upwind de segundo orden* para los términos de las ecuaciones de transporte. Fueron utilizados factores de relajación oscilando entre 0,5 y 1 para las diferentes variables del modelo. Fue simulado un tiempo real de 120 segundos (2 minutos) utilizando pasos de tiempo fijos que variaron entre 0,001 y 0,005 segundos, con un máximo de 50 iteraciones por paso de tiempo; el número de iteraciones fue suficiente para alcanzar convergencia temporal.

6.2. Resultados

Tal como se describió en la sección anterior fueron realizadas tres etapas de estudio: las pruebas de independencia numérica de la malla, donde se utiliza un gas monofásico, con las propiedades de un gas natural seco; la validación de los modelos matemáticos, donde fueron utilizadas las condiciones de operación y fluidos propuestos por Austrheim et al. (2008) y el análisis de la separación del Gas 3 de la Tabla 5 con las propiedades de la Tabla 7 a diferentes condiciones de presión de operación.

6.2.1. Independencia numérica de la malla. El test de independencia numérica de la malla se realizó construyendo cinco mallas tetraédricas con las características de la Tabla 27 y las condiciones de simulación de la Tabla 28.

Se observa que a nivel de parámetros de calidad como la oblicuidad (ver Apéndice 1), a pesar que el valor máximo disminuye a medida que el número de elementos de malla aumenta, la

Tabla 27

Características de las mallas construidas para el separador gravitacional

	A	B	C	D	E
Nº elementos	908.769	1.152.968	2.274.193	3.540.770	5.880.763
Oblicuidad máx.	0,90459	0,90026	0,89999	0,89932	0,89979

Tabla 28

Condiciones de simulación para el test de independencia de malla

Test de independencia de malla		
Software	FLUENT V19 by Ansys Inc	
Tipo de simulación	Estado transitorio, 3D	
Fluido	Gas seco, 98 %mol metano	
Entrada de gas	Flujo másico, kg/s	0,004295
Salida	Presión (estática), Pa	0
Paredes	No deslizamiento	
Modelo de turbulencia	$k - \omega$ SST	
Intensidad de la turbulencia	5 %	
Hardware/software	Ver Tabla 18	
Discretización	SIMPLE/Upwind de 2 orden	
tiempo cómputo/simulación	1-2 semanas	

diferencia no es significativa, manteniendo un promedio de 0,9.

Las simulaciones fueron realizadas en estado transitorio a 294 K y 2,01 MPa, utilizando un gas seco con 98 % de metano y flujo a la entrada de 900 L/h (0,004295 kg/s) (Austrheim et al., 2008). Las propiedades termodinámicas fueron calculadas usando la ecuación de estado cúbica de SRK. Detalles de la malla **E** en la sección de los AFC y resultados de energía cinética turbulenta del gas, medidos justo donde se cruza la boquilla de entrada con el divisor (Figura 50) para cada una de las mallas, se muestran en la Figura 51. A partir de 2.274.193 elementos comienza a presen-

tarse una tendencia asintótica de la energía cinética, siendo la malla **C** seleccionada por presentar equilibrio entre la precisión de los resultados y el costo computacional.

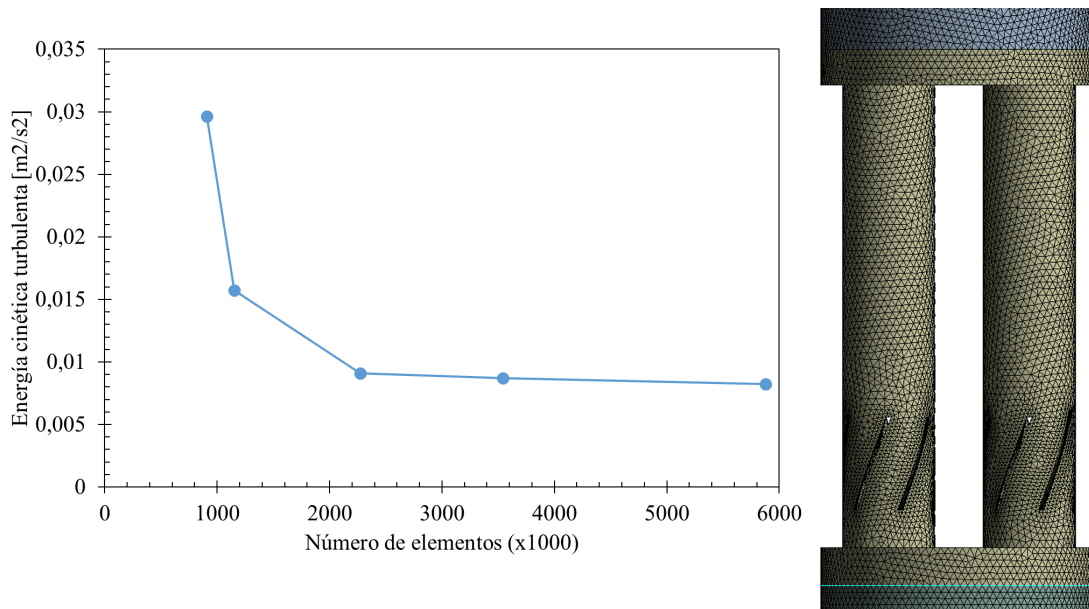


Figura 51. (Izq.) Perfil de la energía cinética turbulenta del gas monofásico en función del número de elementos de malla y (Der.) detalle de los AFC de la malla E

A pesar de los resultados de las prueba de independencia numérica de la malla, para este caso especial del separador gravitacional con tantos accesorios acoplados se adoptó la sugerencia proporcionada por un integrante del equipo de investigación de *TechnipFMC–Europe*, en la cual, los elementos de malla fueron transformados a poliedros debido a su mayor adaptabilidad a diferentes morfologías en comparación con los tetra y hexaédros. En ese orden de ideas, fue tomada la malla **C** y se aplicó la transformación, obteniéndose la malla presentada en la Figura 52. Esta malla fue utilizada en las simulaciones numéricas de validación y análisis de la mezcla de gas natural seleccionada.

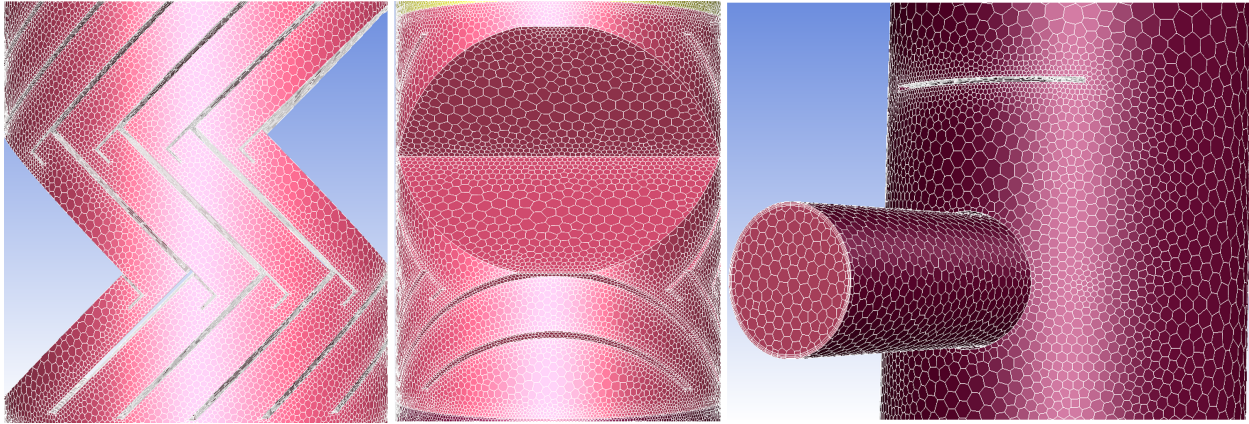


Figura 52. Malla C de la Tabla 27 transformada a poliedros. Detalles del eliminador de niebla y boquilla de entrada de la mezcla

6.2.2. Validación de modelos. La validación de los modelos matemáticos utilizados en las simulaciones numéricas se realizó mediante la comparación con los datos experimentales de eficiencia total de separación en función de la constante K de Souders and Brown (1934), la cual, cuando se consideran constantes las densidades de las fases a ciertas condiciones específicas de presión y temperatura de operación, la variable de comparación es la velocidad de la fase continua (ecuación 74).

Austrheim et al. (2008) midieron la eficiencia de separación de su separador *HP-Rig* instalado en la planta GULFAKS-A de Noruega, en función del líquido acumulado en los tanques de drenaje adyacentes al separador en la configuración experimental. Con el fin de calcular el aumento de nivel, instalaron celdas de presión diferencial y relacionaron ΔP y Δh de acuerdo con la

siguiente expresión:

$$\Delta P = (\rho_l - \rho_g) g \Delta h \quad (266)$$

El líquido acumulado lo encuentran, conociendo el área transversal, así:

$$Q_l = A_{sep} \Delta h_l \quad (267)$$

La mezcla de gas natural sintética utilizada por Austrheim et al. (2008) en sus experimentos y por ende en las simulaciones numéricas está compuesta por las fracciones molares de metano (0,456), etano (0,08) y n-pentano (0,464) a 294 K y operando a 2,01; 5,02 y 9,2 MPa. La Figura 53 muestra las curvas de equilibrio generadas en ASPEN-HYSYS[®] para cada una de las tres presiones utilizando la ecuación de estado de SRK; se especifican también los puntos de operación de las simulaciones con el fin de confirmar que se encuentran en la región de mezcla gas-líquido. La Tabla 29 resume las condiciones utilizadas en las simulaciones realizadas.

Adicional a las curvas de equilibrio, fueron calculadas las propiedades de las fases líquida y gaseosa correspondientes 5,02 y 9,2 MPa, con el fin de validar estos dos puntos de operación. El cálculo de las propiedades promedio de las fases se realiza con el objetivo de utilizar dos fases Eulerianas (o bien una fase Euleriana y una Lagrangiana) en vez del transporte individual de especies, debido que no se consideran reacciones químicas ni cambios de fase, solo el efecto de la separación. Estas propiedades se resumen en la Tabla 30.

Tabla 29

Condiciones de simulación para la validación de los modelos matemáticos del separador gravitacional

Validación de modelos matemáticos		
Tipo de simulación	Estado transitorio, 3D	
Fluidos (%mol)	Metano	45,6
	Etano	8
	n-Pentano	46,4
Propiedades fluidos	Ver Tabla 30	
Temperatura, K	294	
Presión, MPa	5,02/9,2	
Entrada	Velocidad	Ver Tabla 31
Salida	Presión (estática)	0 Pa
Modelo de turbulencia	$k - \omega$ SST	
Intensidad de turbulencia	5 %	
Tamaño de gota	10 μm	
Discretización	SIMPLE/Upwind 2 orden	
Hardware/software	Ver Tabla 18	
Tiempo cómputo/simulación	2–4 semanas	

Definidas las propiedades de la mezcla, se creó la matriz de condiciones de frontera para las ocho simulaciones con diferentes valores de K y su equivalente a la velocidad del gas, calculado de acuerdo con la ecuación (74) tal como se muestra en la Tabla 31.

En cada uno de los casos de la Tabla 31 fue calculada la eficiencia de separación a través del líquido acumulado en el separador, de manera similar a la ecuación 267. Como resultado, fueron dibujados (Figura 54) perfiles de eficiencia de separación total dentro del separador, en función de

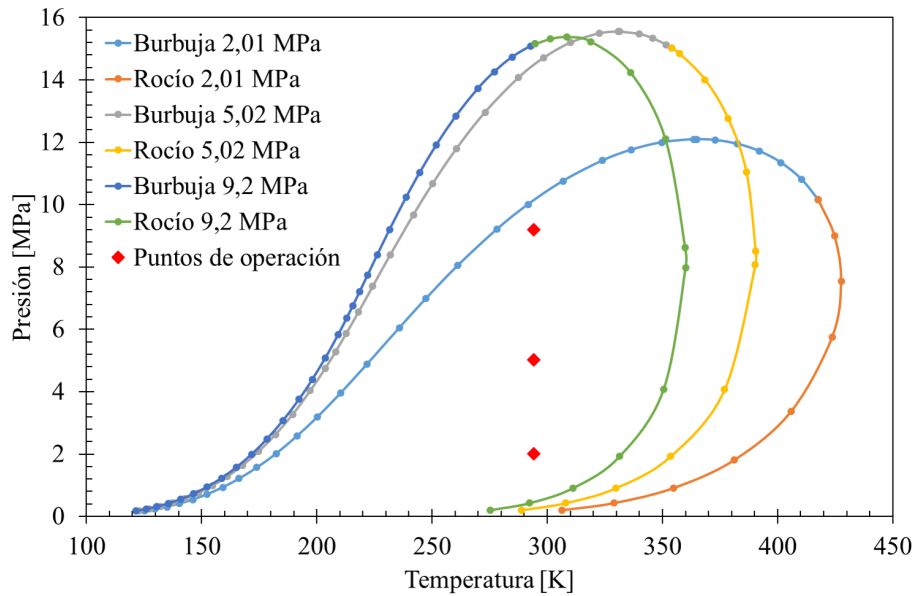


Figura 53. Curvas de equilibrio de la mezcla de gas natural utilizada en la validación de los modelos matemáticos

la constante empírica de Souders and Brown (1934) y se compararon con los datos experimentales proporcionados por Austrheim et al. (2008). De la Figura 54 es posible analizar varios puntos:

- i.* En ambas condiciones de operación (5,02 y 9,2 MPa) se presenta la misma tendencia de disminución de la eficiencia de separación a medida que la constante K aumenta, lo cual confirma que para procesos de separación gravitacional, lo recomendable es mantener la velocidad del gas baja o un valor de $K \leq 0,15$ (Austrheim et al., 2008).
- ii.* El aumento en la presión de operación genera también una disminución en la eficiencia de separación: aumentar de 5,02 a 9,2 MPa en las simulaciones numéricas generó la disminución que varía entre el 3,7 y 11,25 %.
- iii.* A pesar de presentar perfiles con tendencia similar, existe una clara diferencia entre los re-

Tabla 30

Propiedades de la mezcla propuesta por Austrheim et al. (2008) y utilizada en las simulaciones de validación

Prop.	Unidad	Fase gas		Fase líquida	
		5,02 MPa	9,2 MPa	5,02 MPa	9,2 MPa
MW	kg/kmol	19,03	19,5	54,09	42,29
C_p	J/kg-K	2579	3261	2496	2642
ρ	kg/m ³	44,99	96,02	554,1	463,2
K	W/m-K	0,03574	0,04214	0,09303	0,08507
μ	kg/m-s	$1,24 \times 10^{-5}$	$1,47 \times 10^{-5}$	$1,46 \times 10^{-4}$	$9,8 \times 10^{-5}$
H	J/kmol	$-7,92 \times 10^7$	$-8,1 \times 10^7$	$-1,42 \times 10^8$	$-1,22 \times 10^8$
S	J/kmol-K	151954,55	143949	97956,99	111730,18
σ	n/m	–	–	0,01036	0,069
ω_m	–	0,1294			
P_{cm}	MPa	3,33255			
V_{cm}	m ³ /kg	0,1894			
T_{cm}	K	270,56			

sultados experimentales y simulados. La máxima diferencia para las presiones de operación de 5,02 y 9,2 fueron de 4,98 % y 5,65 % respectivamente, ambos evaluados a $K = 0,26m/s$.

Las posibles causas de diferencia se dividen en dos variables: la geometría y las condiciones de simulación. La primera variable tiene que ver con el cambio del eliminador de niebla tipo *wire mesh* por un *vane pack*, lo cual como ya fue aclarado tienen mayor capacidad pero son menos eficientes cuando se trata de pequeños tamaños de gota; este último eliminador de niebla permite mayor escape de gotas y arrastre de las mismas por parte de la fase gaseosa, si bien es importante resaltar que los canales de drenaje, analizados en el Capítulo 5 amortiguan de cierta manera el arrastre. La segunda variable se relaciona con las consideraciones/simplificaciones realizadas al momento de establecer la simulación, a saber: un seguimiento euleriano de la fase discreta, la con-

Tabla 31

Matriz de simulaciones para la validación de modelos

K	5,02 MPa	9,2 MPa
0,26	0,87 m/s	0,5095 m/s
0,2	0,6692 m/s	0,392 m/s
0,15	0,502 m/s	0,2939 m/s
0,1	0,3346 m/s	0,196 m/s

sideración de las gotas como esferas de tamaño uniforme (10 micrómetros) y, posiblemente pero en menor proporción, la promediación de las propiedades físicas de cada fase en vez de incluir cada especie por separado. Los experimentos de Austrheim et al. (2008) no aclaran la presencia de mecanismos de transferencia de masa o cambio de fase durante el proceso, por lo que fueron omitidos también en las simulaciones.

6.2.3. Separación de fases a alta presión. Debido a la complejidad de la simulación, la separación de fases en el equipo gravitacional fue realizada únicamente a alta presión: 7 MPa, 260 K y flujo molar de la mezcla de 1 MPCD (0.2378 kg/s), con fracción volumétrica de líquido a la entrada de 0,00788; medida como la relación de caudales de cada fase. Las propiedades de los fluidos son las mostradas en las columnas 5 y 8 de la Tabla 7. Fue simulado un total de 120 s (2 min) de tiempo real de proceso, con el fin de cubrir el tiempo de residencia de la fase líquida dentro del separador; el paso de tiempo utilizado fue de 0,005 y un máximo de 50 iteraciones por paso de tiempo. Se utilizó el modelo multifase *Two-Fluid* del Capítulo 4 y el modelo de turbulencia $k - \omega$ SST. El tamaño de gota se mantuvo constante en 10 micrómetros y fue considerado el modelo de arrastre propuesto por Ishii and Mishima (1984). Como condiciones de frontera se con-

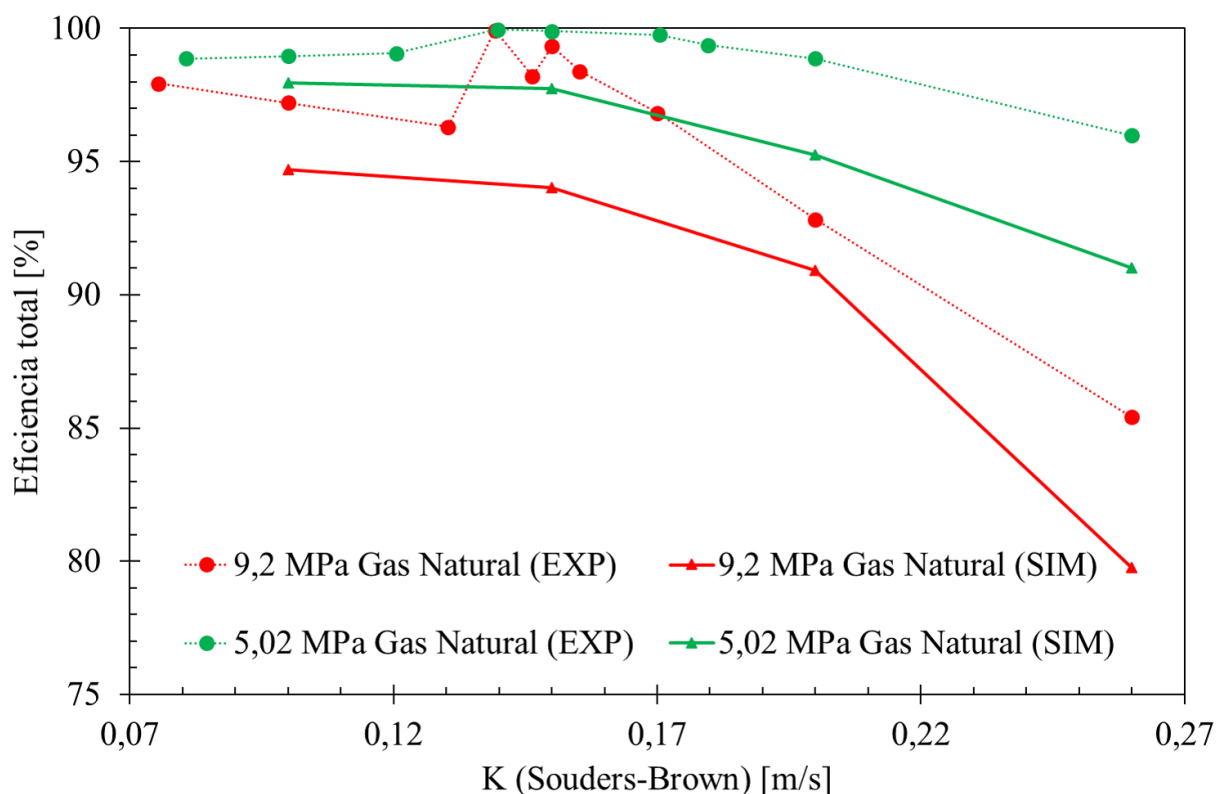


Figura 54. Comparación de los experimentos (línea punteada) realizados por Austrheim et al. (2008) para la eficiencia total de separación con las simulaciones realizadas en ANSYS-FLUENT (línea continua)

sideró flujo másico a la entrada, presión a la salida del gas (boquilla superior) y no deslizamiento en las paredes. La boquilla inferior, concebida inicialmente como salida de líquido, fue sellada y considerada como pared, debido que para la baja cantidad de líquido presente, es recomendable analizar la eficiencia de separación a través de la cantidad de líquido que se deposita tanto en el fondo como en los accesorios —especialmente los AFC—. Para los ajustes del método numérico, fue utilizado el esquema de acoplamiento Presión-Velocidad denominado SIMPLE; fueron adoptados los modelos *Least squares cell based* y *Upwind* de segundo orden implícito para la discretización espacial y transitoria respectivamente. Las Tablas 32 y 33 resumen las condiciones de simulación.

Tabla 32

Condiciones de simulación para la separación gravitacional de gas natural a alta presión

Tipo de simulación	Estado transitorio, 3D	
Hardware/software	Ver Tabla 18	
Temperatura, K	260	
Presión, MPa	7	
Entrada	Flujo másico, kg/s	0,2378
Tamaño de gota	10 μm	
Salida	Presión (estática)	0 Pa
Paredes	No deslizamiento	
Modelo de turbulencia	$k - \omega$ SST	
Intensidad de turbulencia	5 %	
Timestep	0,001–0,005	
Iteración/timestep	50	
RMS (local)	1×10^{-3}	
Discretización	SIMPLE/Upwind 2 orden	
Tiempo real simulado	120 s (2 min)	
Tiempo cómputo/simulación	3–5 semanas	

6.2.3.1. Caída de presión. La Figura 55 presenta el perfil longitudinal de presión y el detalle de cada uno de los accesorios instalados. Se observa que la máxima caída de presión alcanzada es de 0,8 kPa. En el interior de los accesorios, el porcentaje de caída de presión se organiza de mayor a menor de la siguiente manera: ciclones de flujo axial 26,82 %; *vane pack* 25,22 % y desviador de entrada 2,35 %; equivalente a $858,18 \frac{\text{Pa}}{\text{m}}$, $1344,95 \frac{\text{Pa}}{\text{m}}$ y $125,42 \frac{\text{Pa}}{\text{m}}$ respectivamente. Por lo tanto, la mayor caída de presión por unidad de longitud dentro del separador ocurre en el eliminador de niebla tipo *vane pack*. En general, la caída de presión dentro del separador es baja, lo cual se traduce en ahorro energético en virtud de disminuir la re-compresión aguas abajo; es-

Tabla 33

Factores de relajación para las simulaciones numéricas del separador gravitacional a alta presión

<i>Pressure: 0.5</i>
<i>Density: 1</i>
<i>Body forces: 0.7</i>
<i>Momentum: 0.5</i>
<i>Volume fraction: 0.5</i>
<i>Turbulent Kinetic Energy: 0.5</i>
<i>Specific Dissipation Rate: 0.8</i>
<i>Turbulent viscosity: 0.7</i>

pecialmente si se desea mantener el equipo operando a alta presión como es el caso del presente estudio.

6.2.3.2. Velocidad. El principio físico fundamental para que la separación se lleve a cabo, es la sedimentación por gravedad, la cual implica mantener la velocidad de la fase continua (gas) por debajo del valor crítico (ecuaciones 73 y 74); las reglas de dedo gordo sugieren que la velocidad del gas permanezca entre 20 y 25 % por debajo de este valor. Otra forma de establecerlo es a través de la recomendación de Austrheim et al. (2007), obtenida a partir de estudios experimentales, la cual sugiere que el valor de la constante de Souders and Brown (1934) debe mantenerse por debajo de 0,15 para que la separación gravitacional se lleve a cabo.

La Figura 56 presenta a la izquierda el contorno de velocidad del gas a lo largo del separador después de 2 minutos de tiempo real de proceso: la mezcla comienza entrando a 1,7 m/s aproximadamente y lo primero que encuentra es el desviador de entrada, donde el flujo se distribuye

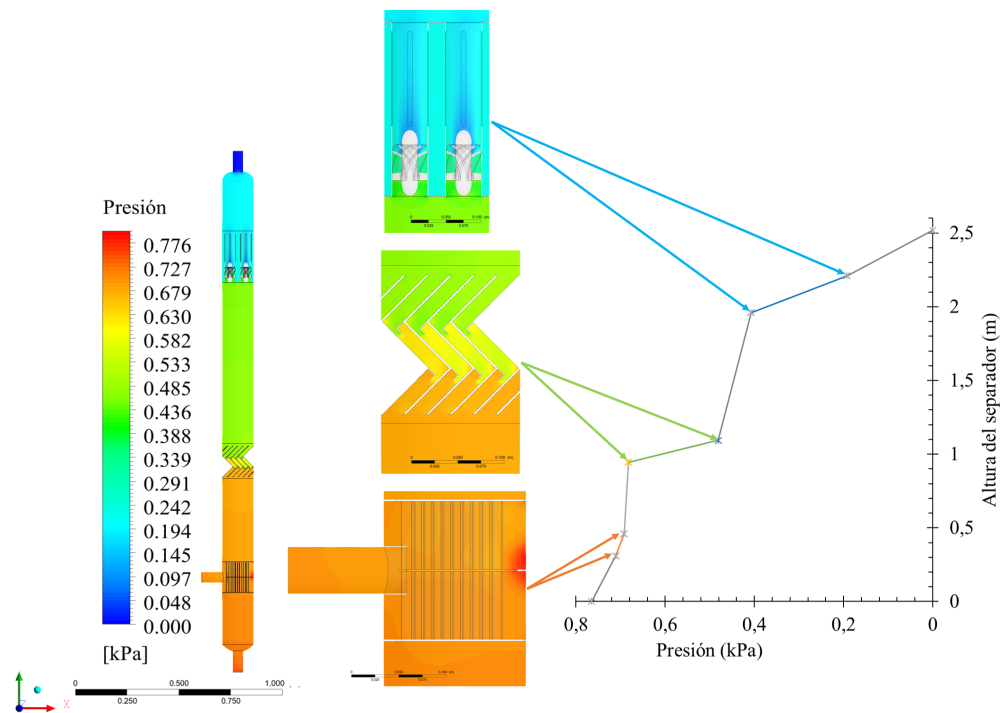


Figura 55. Caída de Presión dentro del separador gravitacional

lateralmente gracias a sus paletas, logrando el cambio abrupto en la dirección de flujo; se observa también que el desviador está cumpliendo su función de calmar el flujo y disminuir la velocidad para que se genere la sedimentación por gravedad. En ambos sectores adyacentes al desviador, la velocidad se encuentra alrededor de 0,15 m/s, de esta manera el líquido puede asentarse en el fondo del separador. A medida que el gas conteniendo gotas de líquido asciende, alcanza el eliminador de niebla donde un nuevo cambio abrupto debido a las placas paralelas hace que la velocidad aumente y el gas tome caminos preferenciales ubicados en la pared contraria a la boquilla de entrada, esto debido a la orientación de las placas del *vane pack*. Finalmente llega a los *afc*, donde los denominados *swirl elements* provocan un aumento de la velocidad, necesario para que la acción de la fuerza centrífuga beneficie la separación de las fases.

El campo vectorial de los accesorios, mostrado al lado derecho de la Figura 56 presenta además de los valores de la velocidad, el recorrido del fluido a lo largo del separador. En primer lugar se observa la calma del fluido en la parte inferior del separador, zona en la cual se espera la acumulación del líquido. Segundo, en el *vane pack* se muestran los caminos preferenciales que toma el gas así como un par de zonas “muertas” en las que se puede presentar estancamiento de la fase dispersa; y tercero, los vectores de los *afc* muestran la acción de los *swirl elements* mediante la formación de los vórtices atribuidos a la fuerza centrífuga del accesorio.

Con el fin de confirmar el campo de velocidad fueron creadas isosuperficies a diferentes valores de velocidad del gas a seguir: 0,2; 0,5; 0,7 1; 1,5 y 2 m/s (Figura 57). Si se considera un valor de $K = 0,15$ m/s, se adopta un valor de 25% por debajo de la velocidad terminal y se reemplaza en la ecuación (74), se obtiene:

$$u_g = 0,75u_t = (0,75)0,15 \text{ m/s} \sqrt{\frac{504,6 \text{ kg/m}^3 - 74,82 \text{ kg/m}^3}{74,82 \text{ kg/m}^3}} = \mathbf{0,2696 \text{ m/s}} \quad (268)$$

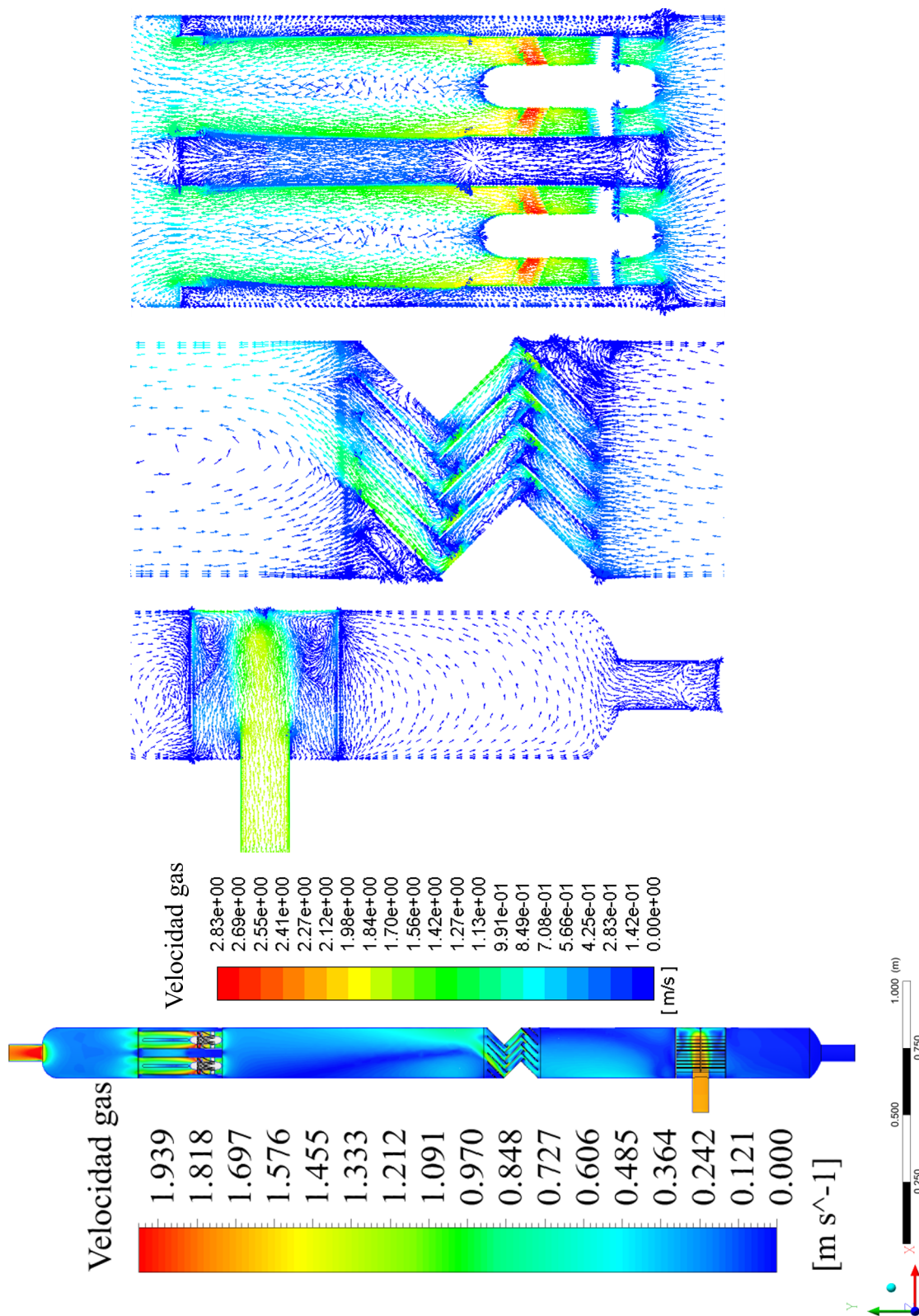


Figura 56. (Izq.) Contorno de velocidad del gas. (Der.) Vectores de velocidad mostrando el recorrido del gas

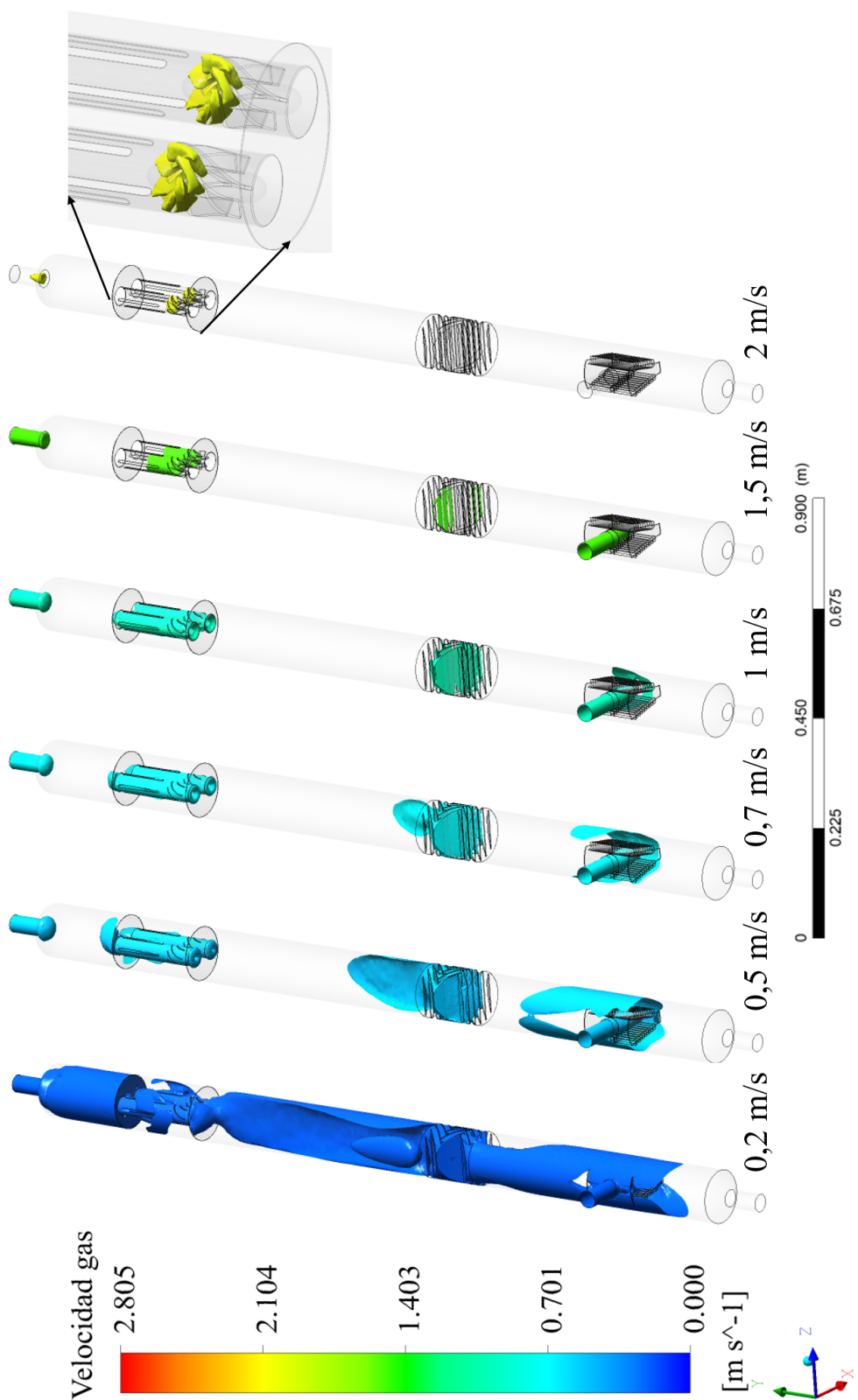


Figura 57. Isosuperficies de velocidad medidas a 0,2; 0,5; 0,7; 1; 1,5 y 2 m/s

Se observa que la porción más representativa del separador mantiene la velocidad en 0,2 m/s, lo cual, como ya se aclaró beneficia la sedimentación por gravedad, principio físico de separación. Como es de esperarse, la máxima velocidad alcanzada, de 2 m/s se presentó a la salida de los *swirl elements* que actúan como aceleradores de flujo y generadores de vórtices o remolinos.

6.2.3.3. Fracción volumétrica. El gas natural utilizado en las simulaciones numéricas se encuentra dentro de la clasificación de “gas seco”. Conteniendo únicamente 0,788 %vol de líquido en la mezcla y trabajando a alta presión (7 MPa); la separación de las fases se complica por ambos frentes. La Figura 58 muestra la evolución de la fracción volumétrica de líquido en el intervalo de 0,005 a 0,018; cada 20 segundos de tiempo real de proceso. Se observan cambios significativos en los primeros 60 segundos tales como la creciente presencia de líquido en el fondo del separador y contenedores de los *afc*; a partir de ese tiempo las condiciones se mantienen relativamente constantes.

En la Figura 59, el detalle de los campos de fracción volumétrica de los accesorios con el tiempo, muestra las zonas de acumulación de líquido, unas deseables que ya fueron nombradas y otras poco deseables como es el caso de la acumulación en el lado izquierdo del eliminador de niebla. A diferencia de los *afc*, el *vane pack* en su diseño no contiene sistema de drenaje del líquido hacia el exterior del separador, lo cual a largo plazo entorpecería la acción del equipo.

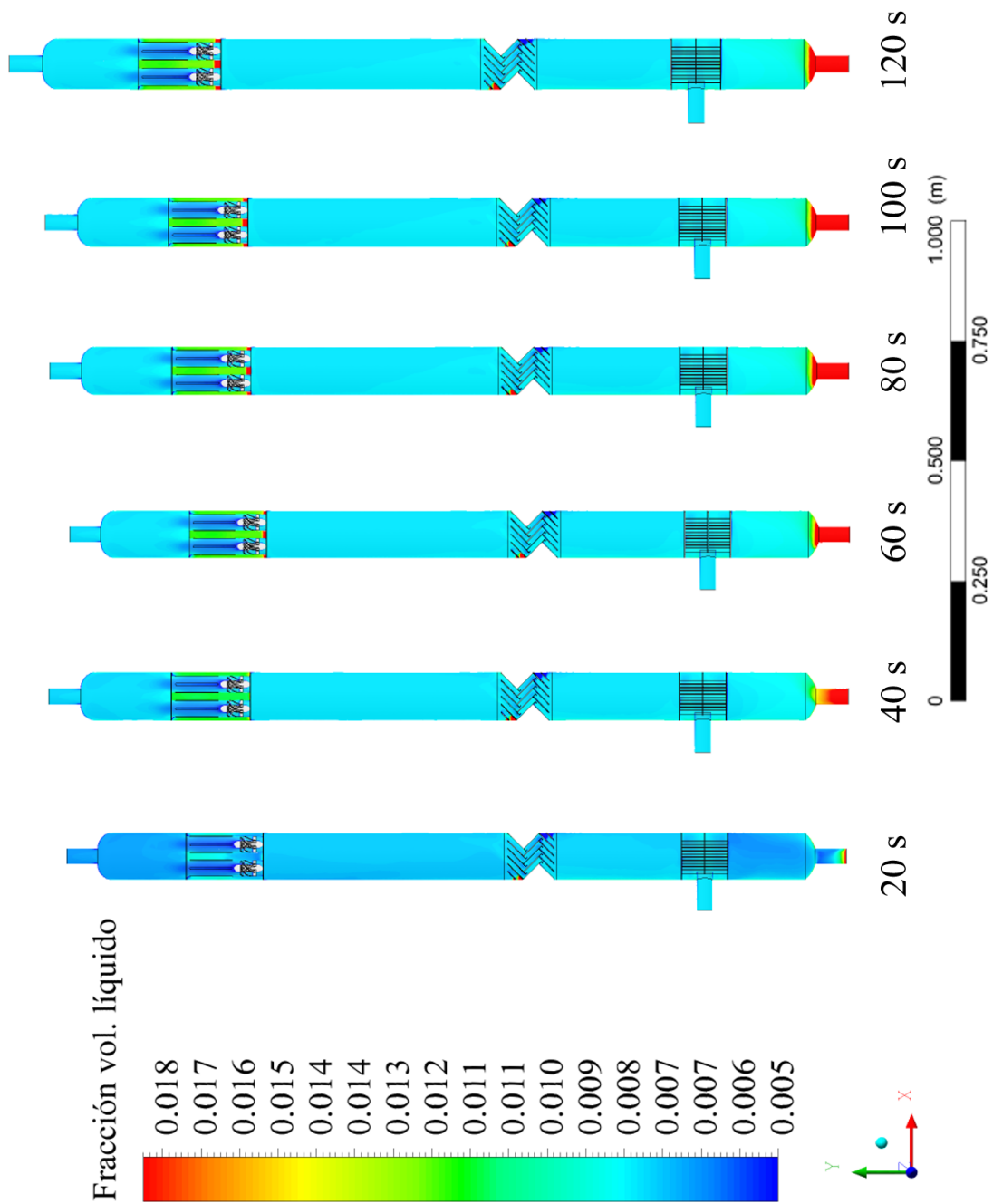


Figura 58. Evolución con el tiempo de residencia de la fracción volumétrica de líquido

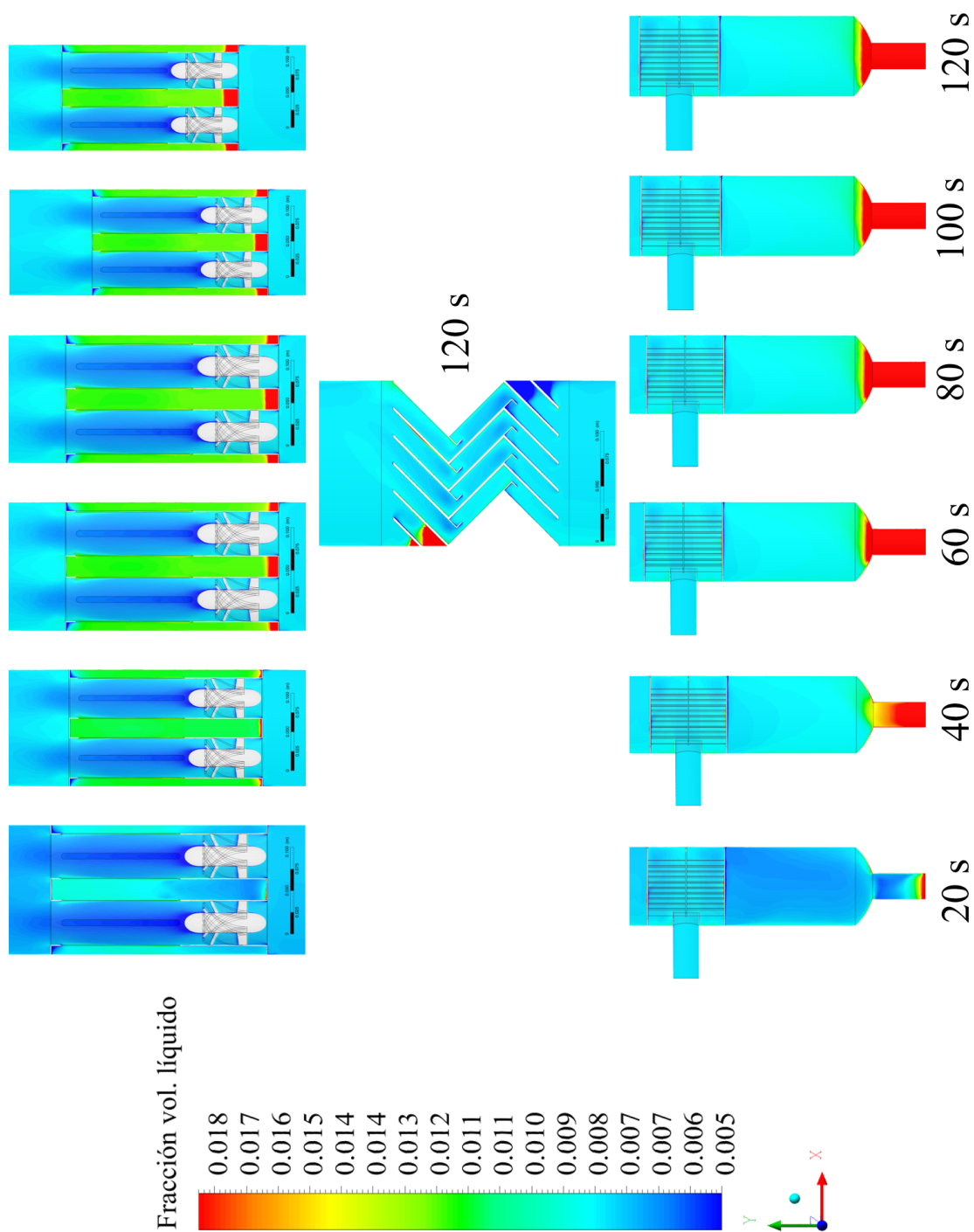


Figura 59. Detalle de los registros temporales de fracción volumétrica de líquido en los accesorios del separador gravitacional

Con el fin de visualizar de manera clara las regiones donde el líquido permanece, teniendo en cuenta la pequeña cantidad presente, fueron construidas las isosuperficies de la Figura 60 en el intervalo de fracción volumétrica entre 0,06 y 0,99; mostrando la importancia que tienen los accesorios en el proceso de separación gravitacional, así: al lado derecho se observa el equipo completo donde se evidencian de manera diferenciada las 4 zonas del equipo, a saber, fondo, desviador, *vane pack* y *afc*; al lado izquierdo la ampliación de las 4 zonas donde se muestran los lugares en que películas delgadas de líquido se impregnan tanto en el desviador de entrada como en los canales presentes entre las placas del eliminador de niebla. En un contexto de la separación de fases del gas natural a alta presión, independientemente del arrastre/escape de líquido debido a la complejidad del proceso bajo estas condiciones de operación, se espera que parte del líquido que ingresa al separador quede atrapado en los accesorios, tal como lo muestra la Figura 60.

Un detalle interesante de las isosuperficies se observa en el fondo tanto del separador como de los *afc* y es la presencia de picos de fracción volumétrica. El perfil de estos picos es mostrado en la Figura 61 donde se observa al lado izquierdo un valor de fracción volumétrica de 0,065 a 10 cm medido desde el fondo del separador después de transcurridos 2 min; y en el lado derecho se visualiza el valor máximo alcanzado a 1,88 m, este valor fue cercano al 20%vol en el tambor contenedor de los ciclones de flujo axial.

En conclusión, hubo necesidad de establecer límites durante la observación de la fracción volumétrica de líquido debido que, tal como muestran las Figuras 58 y 59 existe presencia de

líquido en todas las zonas del separador incluyendo la boquilla de salida superior del alrededor de 0,7%vol. La razón de la presencia de arrastre en el separador se debe al pequeño tamaño de gota generado por la operación del equipo a alta presión y también, el eliminador de niebla tipo *vane pack* no consigue contener de manera eficiente la fase líquida. Las posibles soluciones al problema de arrastre que infortunadamente se presenta en el separador gravitacional a estas condiciones de operación podrían ser la instalación de por lo menos dos eliminadores de niebla tipo *wire mesh* en secuencia o, la posibilidad de migrar a la fuerza centrífuga como principio físico de separación de las fases, ésta última es el tema del Capítulo 7.

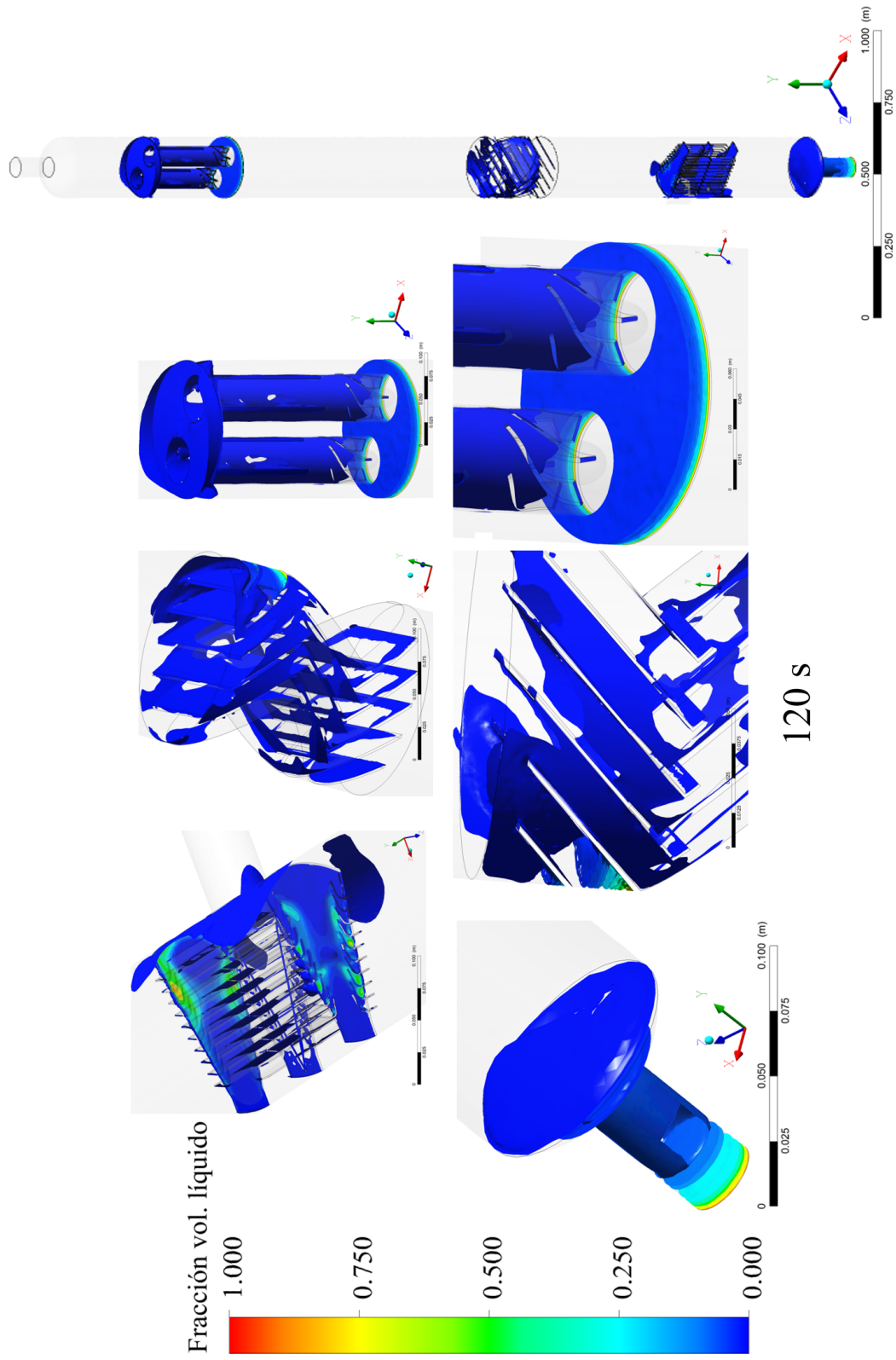


Figura 60. Detalle de las regiones del separador donde se concentra el líquido medidas a 2 min de tiempo real

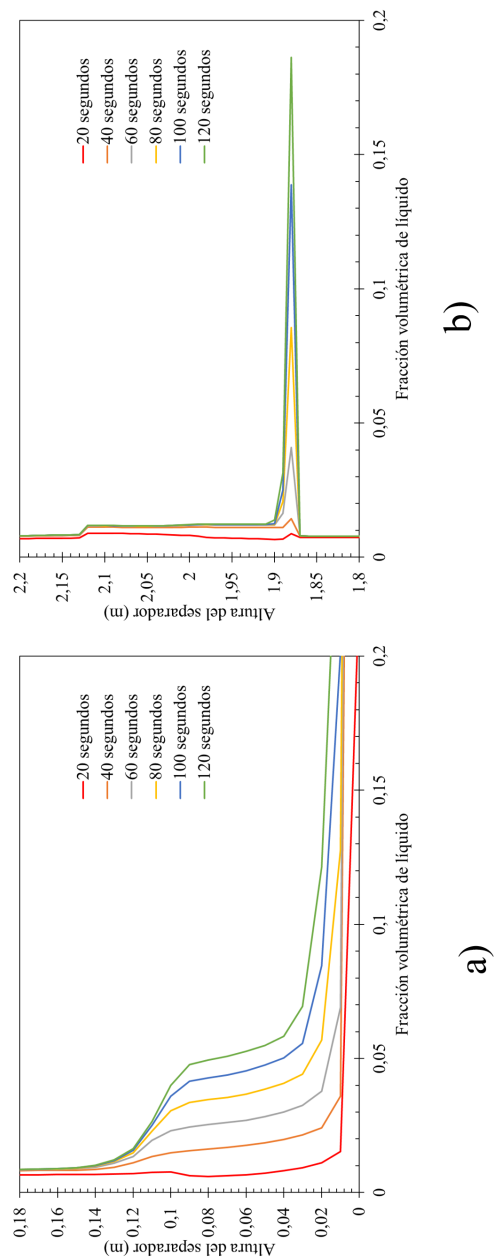


Figura 61. Evolución temporal de los perfiles de fracción volumétrica en **a)** el fondo del separador y **b)** el fondo de los afc

7. Separación centrífuga

El separador Gas-Líquido tipo Ciclón Cilíndrico (GLCC) se presenta como una alternativa a los separadores gravitacionales, siendo compacto, de geometría simple y fácil mantenimiento (Wang et al., 2003). Estos separadores fueron desarrollados en 1995 por la Universidad de Tulsa, y desde entonces se han desarrollado diferentes estudios alrededor de parámetros relevantes de diseño y operación (Kouba et al., 1995, 2006). Por ejemplo Yang et al. (2015) estudiaron el tiempo de residencia de la fase líquida en un separador tipo ciclón, obteniendo que éste disminuye con el incremento de la carga de gotas, mientras que, esta disminución es menor cuando aumenta la velocidad de entrada. Por otro lado, el tiempo de residencia aumenta con el diámetro del cilindro. También fueron analizados utilizando CFD parámetros geométricos como, forma, tamaño, ángulo y número de entradas con el fin de evaluar el efecto de la geometría sobre el arrastre de líquido y gas dentro del separador. Los resultados mostraron que la entrada de la mezcla gas-líquido debe localizarse aproximadamente a 10 cm por encima de la mitad de la longitud axial del separador, con ángulos de inclinación entre 27 y 40 grados. También se encontró que las entradas múltiples son recomendables para sistemas donde la diferencia de densidades entre las fases es considerablemente alta, como es el caso de mezclas aire-agua o aire-glicerina, y una sola entrada para mezclas en las que la densidad de la fase gaseosa aumenta (Kha et al., 2017; Berrio et al., 2018).

Recientemente, Yue et al. (2019) desarrollaron un estudio experimental y numérico sobre USLF (*Upper Swirling Liquid Film*) en separadores GLCC para mezclas de agua, glicerina y

therminol-55 a cuatro regímenes de flujo: flujo de remolino, flujo de rotación, flujo anular y flujo de cinta. Los resultados mostraron que la acción del USLF sobre el fenómeno de arrastre de líquido puede dividirse en tres etapas: etapa de seguridad, etapa de deterioro y etapa estable; las cuales corresponden a los flujos de remolino, rotación y anular respectivamente. También han sido estudiados usos alternativos del GLCC tales como la adaptación de ciclones a la entrada del separador gravitacional, actuando como accesorio previo a la separación (Huang et al., 2018) y el análisis de mezclas gas-líquido con alto contenido de contaminantes sólidos. En el último caso fue estudiado tanto el flujo multifase como la erosión producida por las partículas sólidas (arena) (Vieira et al., 2015).

Los parámetros de diseño relevantes en los separadores GLCC son la relación diámetro/longitud, diámetro y ángulo de la entrada y la correcta posición de las salidas (Ghasemi et al., 2017; Gomez et al., 2000, 1999). El diseño adecuado de estos parámetros evita la presencia de arrastre de líquido y gas, aspectos que afectan de manera negativa la eficiencia de separación (Gomez et al., 1999). El tamaño de la boquilla de entrada controla la intensidad del vórtice, Kouba et al. (1995) recomiendan que la entrada debe tener un ángulo de al menos 27 grados, de manera que los fluidos puedan estratificarse. Adicionalmente, es recomendable una entrada rectangular cuando el gas es la fase continua y cuando la cantidad de líquido es baja, una entrada no convergente muestra mejores resultados (Elsayed and Lacor, 2012).

A pesar de los avances en el estudio del separador GLCC, la mayoría de mezclas utiliza-

das han sido aire–agua a condiciones de alta pureza. El objetivo del presente capítulo es analizar la posibilidad de utilizar un separador GLCC a condiciones de alta presión como alternativa al separador gravitacional; aplicado a campos menores de gas natural (producción neta menor a 1 MPCD) utilizando CFD. Para esto, una validación inicial de los modelos matemáticos fue desarrollada para la mezcla aire–agua a presión atmosférica. Los resultados de variables como velocidad, caída de presión y fracción volumétrica fueron comparados con el trabajo realizado por Hreiz et al. (2011), los cuales evaluaron diferentes modelos de turbulencia en el GLCC y los compararon con los datos experimentales generados por Erdal (2001). Después de la validación, fueron probadas tres configuraciones de entrada al separador: 27, 36 y 45 grados; a fin de seleccionar la entrada que proporcione un vórtice adecuado para la separación de fases (Cornejo Caceres et al., 2019). Finalmente, se realizaron pruebas con el gas natural operando a diferentes condiciones de presión y temperatura de 260 K.

7.1. Modelo computacional

Las dimensiones del GLCC fueron tomadas de la geometría propuesta por Hreiz et al. (2014), la cual consiste en una entrada tangencial con perfil cuadrado y un cilindro con dos salidas perpendiculares en cada extremo (Figura 62-a). Adicionalmente fueron aplicadas variaciones a la entrada tangencial, incrementando el ángulo desde 27 hasta 45 grados (Figura 62-b).

En la primera parte del estudio se utilizó una mezcla aire–agua a presión atmosférica. Las condiciones de frontera para esta mezcla fueron aplicadas con base a las sugerencias de Hreiz et al.

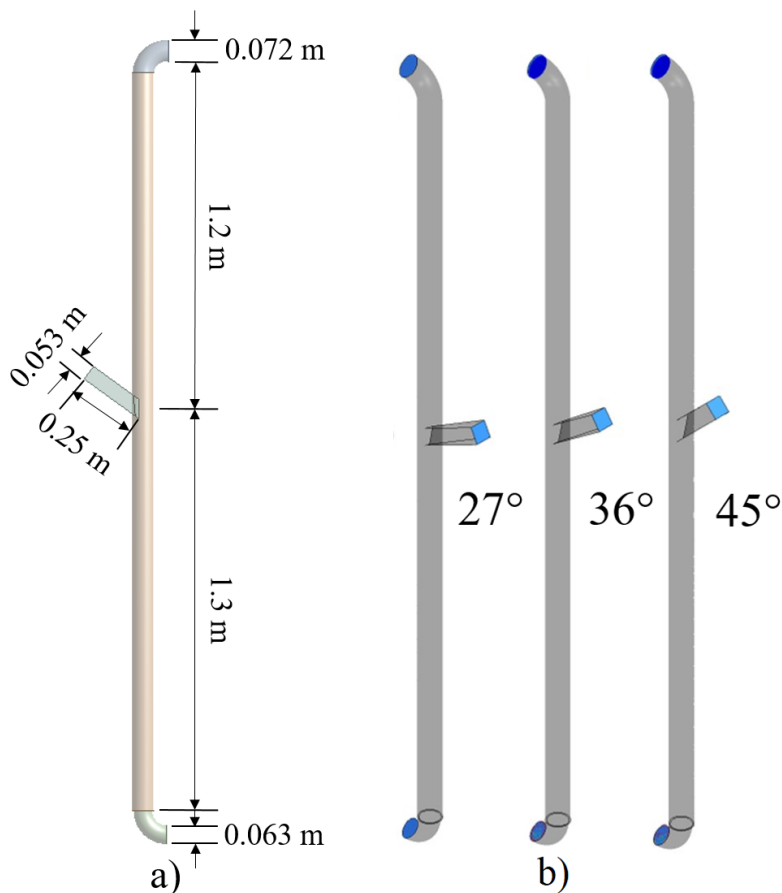


Figura 62. a) Dimensiones del GLCC tomadas de Hreiz et al. (2014) y b) Geometrías propuestas por Cornejo Caceres et al. (2019)

(2014), es decir, una velocidad fija a la entrada y salidas a la atmósfera, tal como se muestra en la Tabla 34.

Fue utilizado el modelo multifase *Two-fluid* (ecuaciones 127 a 129) y el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ *Realizable* con funciones estándar de pared, la razón es porque en el trabajo desarrollado por Hreiz et al. (2011) se compararon modelos *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS), *Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes* (URANS) y *Large Eddy Simulation* (LES) en un flujo

Tabla 34

Condiciones de frontera para las simulaciones de la mezcla aire-agua

Mezcla	Superficie	Condición	Valor		Unidades
Aire-Agua	Entrada	Velocidad	Aire	3,46	m/s
			Agua	0,69	
	Salidas	Presión (estática)	0		Pa
	Paredes	<i>No slip</i>			
	Viscosidad dinámica, kg/ms		Densidad, kg/m^3		
Aire	$1,789 \times 10^{-5}$		1,125		
Agua	$1,003 \times 10^{-3}$		998,2		

bifásico dentro del GLCC; la validación con los datos experimentales de Erdal (2001) mostraron que, a pesar que la metodología LES obtuvo resultados más cercanos al comportamiento experimental (como era de esperarse); el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ *Realizable* también representó de manera adecuada los datos experimentales, con un costo computacional considerablemente menor en comparación con LES.

Para interpolar los términos convectivo-difusivo fue utilizado el esquema *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics* (QUICK) presentada por Patankar (1980), este es un esquema de diferenciación de orden superior que considera una interpolación cuadrática ponderada ascendente de tres puntos para los valores de la cara de la celda. Este esquema utiliza diferencias centrales de segundo orden para el término difusivo, para el término convectivo el esquema es de tercer orden en el espacio y de primer orden en el tiempo. El acoplamiento presión-velocidad se realizó con el esquema PRESTO (*PREssure STaggering Option*) que, a diferencia del método de discretización estándar que interpola la presión en las caras utilizando los valores del centro de la

celda, PRESTO calcula la presión en cada cara (Patankar, 1980).

7.2. Resultados

Esta sección se divide en cuatro etapas: primero la evaluación de la independencia numérica de la malla, segundo la validación del modelo multifase para la mezcla aire-agua a presión atmosférica, tercero la selección del ángulo adecuado para la entrada tangencial y cuarto las pruebas del separador a condiciones de alta presión.

7.2.1. Independencia numérica de la malla. Fueron generadas siete mallas computacionales utilizando el *software* comercial ANSYS–MESHING[®], iniciando con una malla gruesa (A) y aumentando progresivamente el número de elementos de acuerdo con la Tabla 35. La técnica utilizada para refinar las mallas fue la descrita en el Apéndice 1. Todas las mallas tienen elementos tetraédricos en el cilindro principal del separador y hexaédricos en la entrada, con refinación en las regiones cercanas a la pared, tal como se observa en la Figura 63.

Tabla 35

Número de elementos utilizados en el test de independencia de malla

Malla	A	B	C	D	E	F	G
Elementos	53.312	93.054	127.184	180.090	265.251	416.406	721.364

Los perfiles de velocidad en función del número de elementos de la malla, mostrados al lado izquierdo de la Figura 63 fueron tomados a 1; 1,15 y 1,3 m medidos desde el fondo de GLCC.

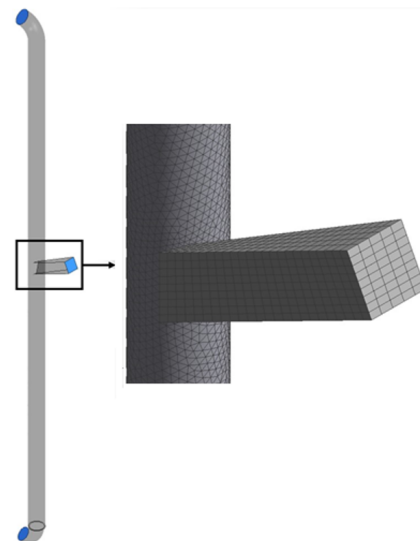
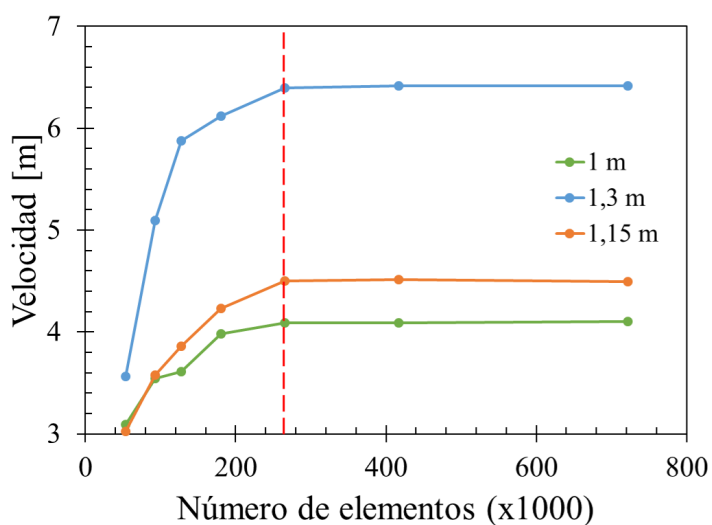


Figura 63. Test de independencia de malla del GLCC

Se observa que a partir de la malla E (265.251 elementos) comienza a presentarse un comportamiento asintótico de la velocidad, independientemente del número de elementos, por lo cual, fue seleccionada esta malla para las simulaciones subsecuentes.

7.2.2. Validación de modelos. La validación de los modelos matemáticos que describen el comportamiento centrífugo de la mezcla aire-agua dentro del separador GLCC, fue realizada mediante la comparación con los datos experimentales de velocidad radial y tangencial presentados por Erdal (2001); las velocidades fueron tomadas a 0,6 m por debajo de la entrada tangencial. El separador experimental consiste en un equipo translúcido de metacrilato de polimetileno (*Plexiglass*[®]) con 72 mm de diámetro interno y 2,5 m de altura. Fue utilizado aire como fase gaseosa y tres fluidos diferentes para la fase líquida: agua de grifo, una solución al 30% de sal sódica de carboximetilcelulosa que actúa como agente viscosificador y una solución acuosa al 0,05 % de

mono-oleato de polietilenglicol sorbital, la cual actúa como espuma surfactante que disminuye la tensión superficial del agua de grifo. La máxima presión relativa fue de 0,8 bar (cercana a la presión atmosférica) y el caudal máximo fue de 550 m³/h. Los experimentos mostraron el efecto de los patrones de flujo y los parámetros geométricos del separador sobre el arrastre de gas y líquido.

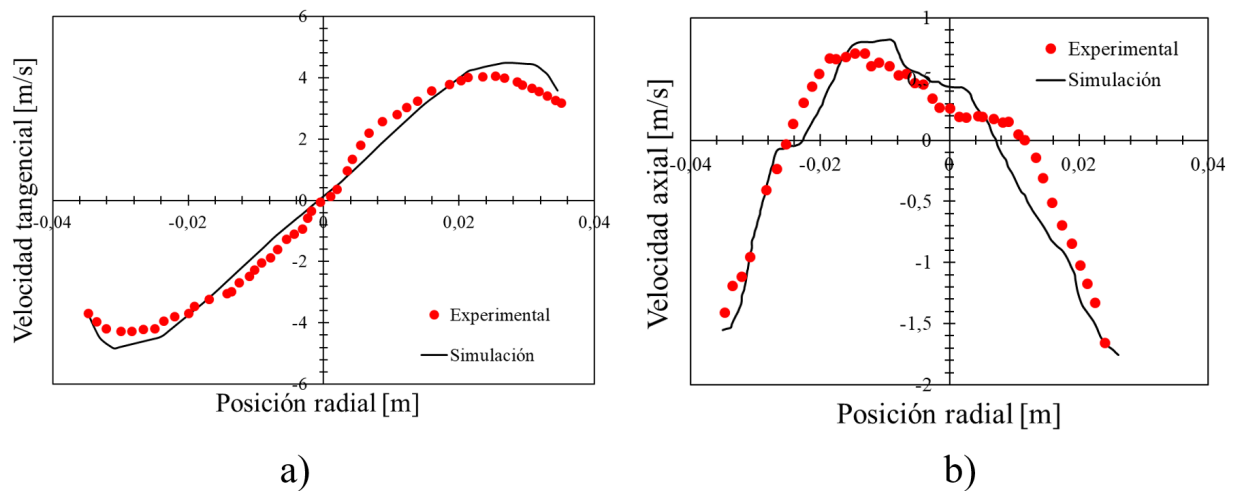


Figura 64. Velocidad tangencial y radial. Comparación entre las simulaciones numéricas y los datos experimentales proporcionados por Erdal (2001)

De acuerdo con la Figura 64, los modelos matemáticos seleccionados para la separación centrífuga de la mezcla gas-líquido reproducen adecuadamente el comportamiento fluidodinámico, debido a la tendencia similar entre los datos experimentales y las simulaciones numéricas; además de presentar una desviación estándar promedio de 0,26 m/s.

7.2.3. Selección del ángulo de entrada. El principio de separación del GLCC es la fuerza centrífuga, que obliga a las gotas de líquido a concentrarse en las paredes del separador y

la fase gaseosa se mantiene formando un vórtice central. La Figura 65 presenta líneas de corriente del gas natural coloreadas con la velocidad de la fase continua para las geometrías de 27, 36 y 45 grados, mostrando el camino del vórtice formado en el centro del GLCC.

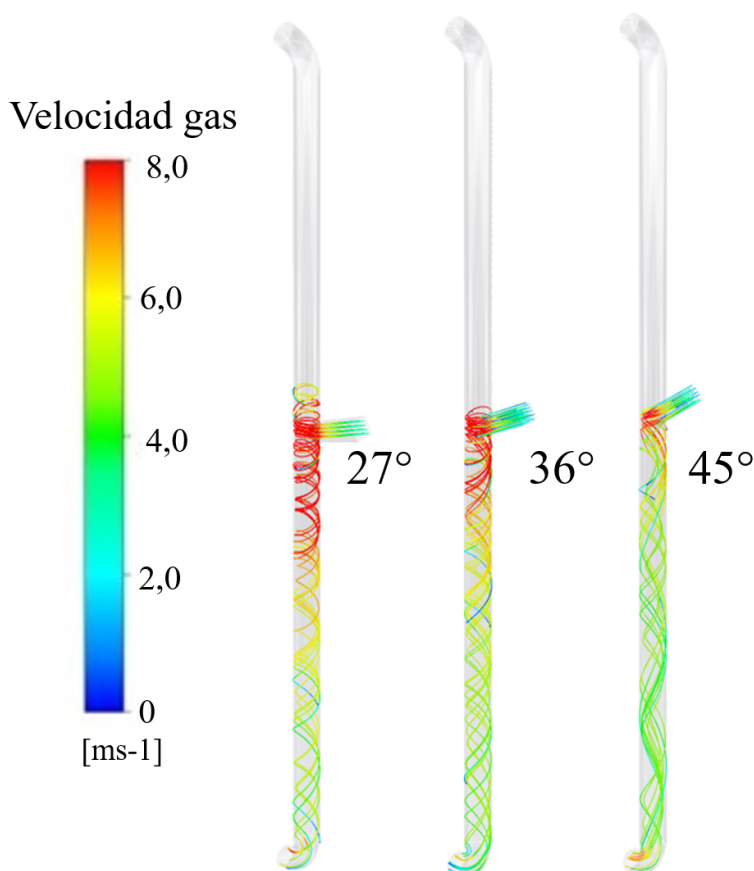


Figura 65. Líneas de corriente coloreadas con la velocidad de la fase continua para cada una de las geometrías propuestas (Cornejo Caceres et al., 2019)

Una manera de cuantificar la formación de vórtices es mediante la denominada *swirling strength*, la cual se define como “la parte imaginaria de los *eigen*-valores complejos del tensor de gradiente de velocidad” este valor es positivo si y solo si el discriminante es positivo y su valor

representa la fuerza del movimiento giratorio alrededor de centros locales. La matemática subyacente a esta fuerza se encuentra en las ecuaciones (226) a (241). La Figura 66 presenta la *swirling strength* en función de la posición radial del separador, medida a 0,6 m debajo de la entrada para cada uno de los ángulos propuestos. Es posible observar que a medida que el ángulo de la boquilla de entrada tangencial al separador aumenta, la *swirling strength* disminuye y en consecuencia, la intensidad de formación de remolino también disminuye. Por lo tanto, en términos de formación de vórtice para el favorecimiento de la fuerza centrífuga, el separador con ángulo de entrada de 27 grados presenta una intensidad de remolino 17% y 66% mayor que las entradas con ángulo de 36 y 45 grados respectivamente.

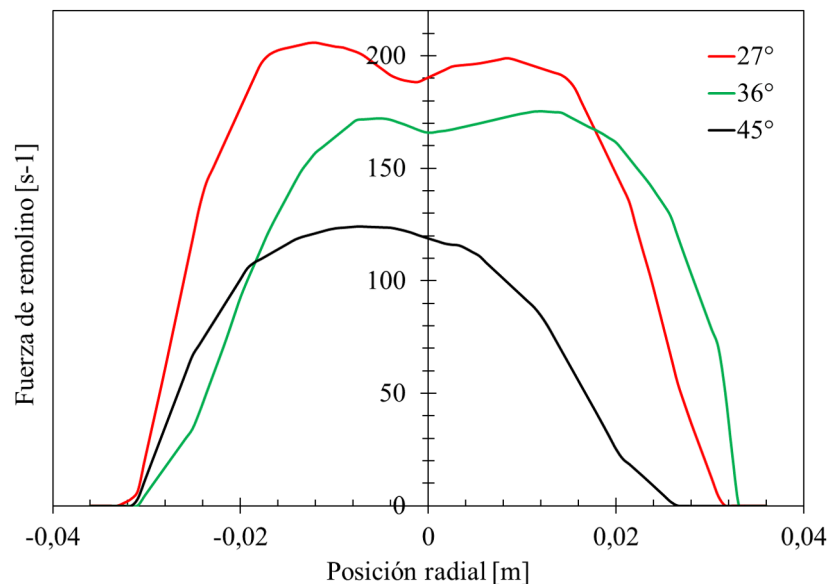


Figura 66. swirling strength en función de la posición radial para cada una de las geometrías propuestas (Cornejo Caceres et al., 2019)

La Figura 67 muestra los campos de presión y el perfil de caída de presión en función de la

altura para cada una de las geometrías propuestas, medido en el plano central de separador GLCC. Como es de esperarse, la mayor caída de presión se presenta en la región de entrada al equipo debido al cambio abrupto de la dirección de flujo, choque con la pared e inicio de la formación del perfil ciclónico. El aumento de la caída de presión se favorece con la disminución del ángulo de entrada.

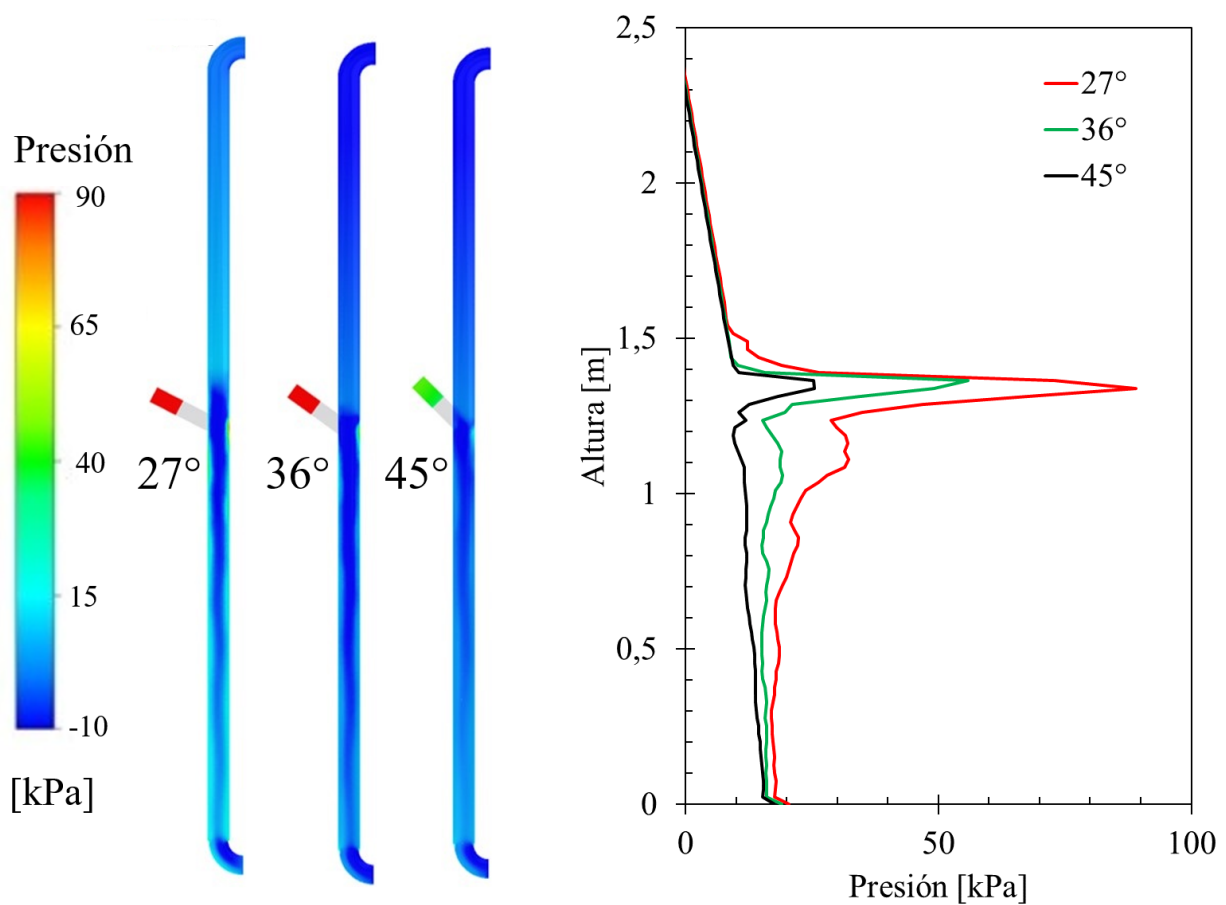


Figura 67. Caída de presión dentro del GLCC de la mezcla aire-agua para las tres geometrías propuestas (Cornejo Caceres et al., 2019)

La Figura 68 presenta el campo de fracción volumétrica y flujo másico de líquido para to-

dos los ángulos de la boquilla de entrada, medido en el plano central de separador GLCC. En los campos de fracción volumétrica se observa la presencia de líquido en las paredes formando una película y dejando el centro del separador para la formación del vórtice de gas; los campos de flujo másico muestran que por encima de la boquilla entrada se puede presentar arrastre de gotas en un porcentaje de 16 %, 11 % y 12 % para los ángulos de 27, 36 y 45 grados respectivamente, comparado con el flujo a la entrada el separador, esta situación podría generar problemas operativos aguas abajo del separador.

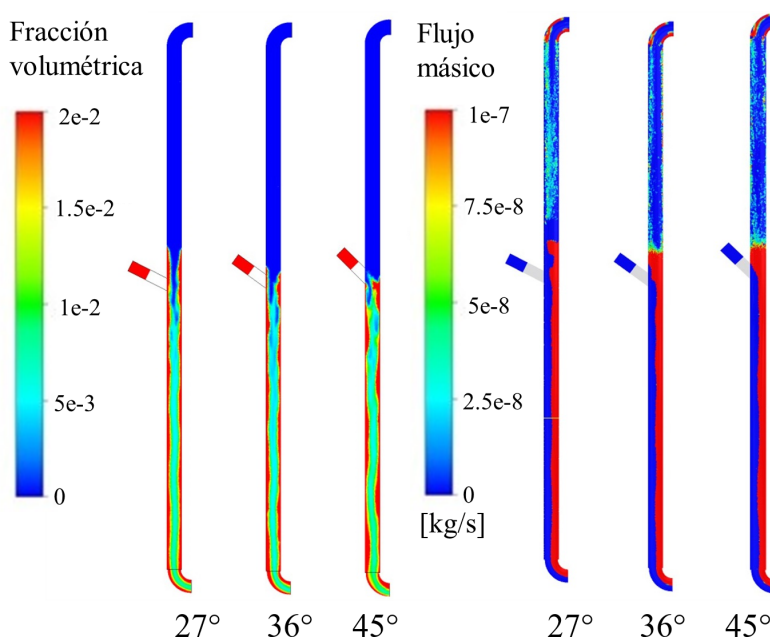


Figura 68. Campos de fracción volumétrica y flujo másico de la fase líquida

La Figura 68 muestra el perfil de fracción volumétrica en dirección radial, medido a una altura de 0,6 m encima del fondo del separador. Se observa la adhesión de líquido en las paredes,

el cual desciende posteriormente hacia el fondo del separador.

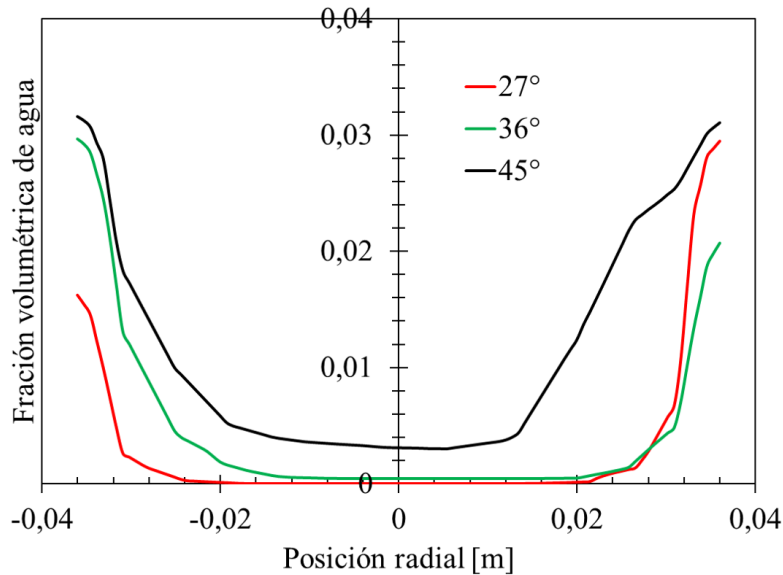


Figura 69. Campos de fracción volumétrica y flujo másico (izq.) y perfil de fracción volumétrica de agua en función de la posición radial (der.)

Cuatro variables de respuesta fueron analizadas durante la selección del ángulo de la boquilla de entrada del GLCC, denominadas: *swirling strength*, caída de presión, fracción volumétrica y flujo másico de líquido. Considerando que es una mezcla aire-agua a presión atmosférica, se creería que cambios en la geometría no tendrían un efecto significativo sobre los resultados; sin embargo, los perfiles de las Figuras 65 a 69 muestran que un aumento en el ángulo de la boquilla de entrada se refleja en una disminución en la *swirling strength*, principal generador de vórtice dentro del separador, el cual otorga la fuerza centrífuga, principio físico de separación de este dispositivo. Por lo tanto, con el análisis de la primera variable, fue descartado el ángulo de 45 grados. El aumento de la velocidad angular viene acompañado, en consecuencia, por un aumento de la

caída de presión; en la industria OGP (*Oil, Gas and Petrochemical*) la pérdida de presión se traduce en un incremento de los costos de operación, debido que, entre otras cosas, sería necesaria mayor cantidad de energía en el sistema de compresión para llevar el gas a las condiciones de la red nacional de transporte. En este sentido, buscando el equilibrio entre la formación de vórtice, caída de presión y disminución del arrastre, fue seleccionada la geometría con boquilla de entrada de 36 grados para los cálculos numéricos del comportamiento de la mezcla de gas natural dentro del GLCC.

7.2.4. Aplicación a campos menores. La mezcla utilizada en la presente aplicación está compuesta por el gas natural ID-3 de la Tabla 5 y propiedades de la Tabla 7. Los modelos matemáticos y numéricos utilizados en las simulaciones fueron los mismos de la mezcla aire-agua. Se realizó una matriz de 9 simulaciones en las cuales se varía la presión de operación de 2, 4 y 7 MPa y el flujo molar de la mezcla de entrada de 0,2; 0,5 y 1 MPCD. Se estableció un tamaño de gota para cada una de las presiones de operación. Las condiciones de frontera a la entrada del separador se resumen en la Tabla 36.

A continuación se muestra el efecto de las principales variables de respuesta utilizando las nuevas condiciones de frontera y fluidos. Estas condiciones y consideraciones de la simulación se resumen en las Tablas 37 y 38. Para todos los efectos, fueron realizadas mediciones a nivel radial en los puntos especificados en la Figura 70, es decir: 0,65; 1; 1,2 y 1,3 m medidos a partir de la base del separador.

Tabla 36

Condiciones de frontera a la entrada para las simulaciones del separador GLCC aplicado a campos menores

	$D_g (\mu m)$	x_l	1MPCD/260K		0,5MPCD/260K		0,2MPCD/260K	
			Gas	Líquido	Gas	Líquido	Gas	Líquido
			$\dot{m} (kg/s)$	$\dot{m} (kg/s)$	$\dot{m} (kg/s)$	$\dot{m} (kg/s)$	$\dot{m} (kg/s)$	$\dot{m} (kg/s)$
2MPa	100	0,0083	0,244	0,006539	0,122	0,003269	0,0488	0,001308
4MPa	50	0,0191	0,2375	0,01308	0,1187	0,006541	0,04749	0,002616
7MPa	10	0,0226	0,2378	0,01274	0,1189	0,006371	0,04756	0,002548

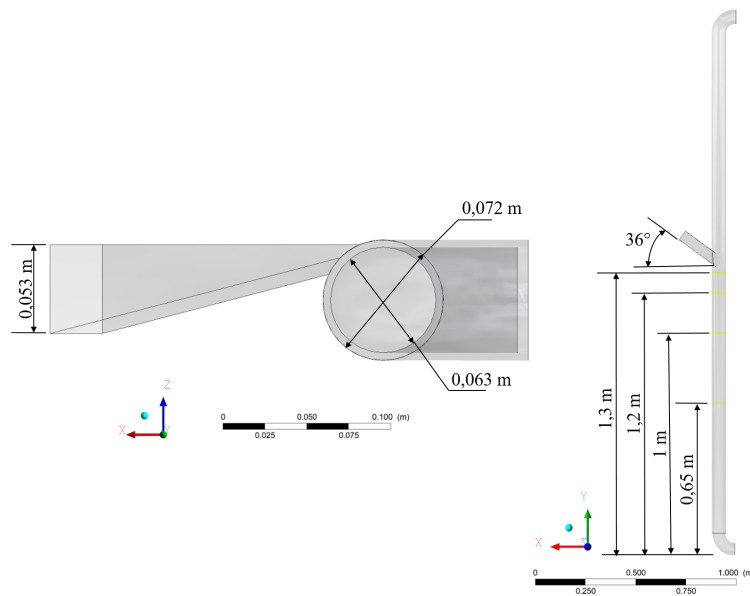


Figura 70. Dimensiones y puntos en los que se midieron las variables de respuesta

7.2.4.1. Fuerza de remolino (Swirling strength). Las Figuras 71 a 76 representan la fuerza de remolino dentro del separador GLCC operando a presiones de 2, 4 y 7 MPa respectivamente. Las Figuras 71 y 72, correspondientes a la presión de operación de 2MPa, muestra que para 1 MPCD se presenta un valor alto de fuerza de formación de remolino, encontrándose valores de

Tabla 37

Condiciones de simulación para la separación centrífuga de gas natural a diferentes presiones

Tipo de simulación	Estado estacionario, 3D	
Hardware/software	Ver Tabla 18	
Temperatura, K	260	
Presión, MPa	2, 4, 7	
Entrada	Flujo másico, kg/s	Ver Tabla 36
Tamaño de gota	100, 50, 10 μm	
Salida	Presión (estática)	0 Pa
Paredes	No deslizamiento	
Modelo de turbulencia	$k - \varepsilon$ Realizable	
Intensidad de turbulencia	5%	
Discretización	Coupled/QUICK/Upwind 2 orden	
Tiempo cómputo/simulación	4–6 días	

hasta $885,57 \text{ s}^{-1}$; considerablemente alto si se compara con los flujos molares de 0,5 ($442,22^{-1}$) y 0,2 ($246,90 \text{ s}^{-1}$) MPCD. Se podría inferir que la formación de remolino se favorece con el aumento del flujo molar total de la mezcla. Es importante resaltar la presencia de los dos picos en las regiones cercanas a la pared, vistos especialmente a 1 m de altura medido desde la base del separador (Figura 72b). De acuerdo con Hreiz et al. (2014) son los perfiles característicos de los vórtices dentro de un separador centrífugo.

El aumento a un valor intermedio entre baja y alta presión, es decir, 4 MPa (Figuras 73 y 74), evidencia perfiles adecuados de formación de vórtice, especialmente para flujos molares altos. No obstante, se observa que al duplicar la presión de operación, la fuerza de remolino se reduce a más de la mitad, en comparación con la separación a baja presión; alcanzando valores máximos de

Tabla 38

Factores de relajación para las simulaciones numéricas del GLCC

<i>Flow Courant Number:</i> 200
<i>Momentum:</i> 0.5
<i>Pressure:</i> 0.5
<i>Density:</i> 1
<i>Body forces:</i> 0.5
<i>Slip velocity:</i> 0.1
<i>Turbulent Kinetic Energy:</i> 0.8
<i>Specific Dissipation Rate:</i> 0.8
<i>Turbulent viscosity:</i> 0.5
<i>Energy:</i> 1

280,81; 316,2 y 66,41 s^{-1} equivalentes a 1, 0,5 y 0,2 MPCD respectivamente.

En sistemas de operación a 7 MPa se observa no solo la falta de uniformidad entre los picos de los perfiles característicos de los vórtices, sino que además se observa una pobre formación de remolino, tal como muestran las Figuras 75 y 76. En vista de los campos y perfiles de fuerza de remolino, de manera preliminar se puede afirmar que la presión alta no atrae beneficio directo a la formación de vórtices necesarios para la separación centrífuga cuando se tienen campos con niveles de producción bajos (recordando que un flujo molar de 1 MPCD ya es considerado bajo a nivel industrial).

Otra manera de analizar como se comporta la formación de remolino en función de la presión de operación dentro del sistema es a través de un seguimiento de las líneas de corriente, tal como se observa en la Figura 77; estas líneas están coloreadas con la velocidad de la fase continua

(gas). Las líneas de los separadores operando a 2 y 4 MPa muestran cierta uniformidad en el flujo centrífugo, mientras que en el separador que opera a 7 MPa se presenta un movimiento más de tipo ondulatorio que centrífugo. Otro aspecto a tener en cuenta es que por un lado, los flujos máxicos y fracciones volumétricas de líquido trabajados son muy bajos, de máximo 0,01274 kg/s y 2,26%vol respectivamente tal como se muestra en la Tabla 36. Por otro lado, durante las simulaciones numéricas se consideró una disminución del tamaño de gota de líquido, proporcional al aumento de la presión de operación del sistema, es decir, 100, 50 y 10 μm para 2, 4 y 7 MPa respectivamente; el conjunto de todas estas variables generaron los resultados de las Figuras 71 a 77.

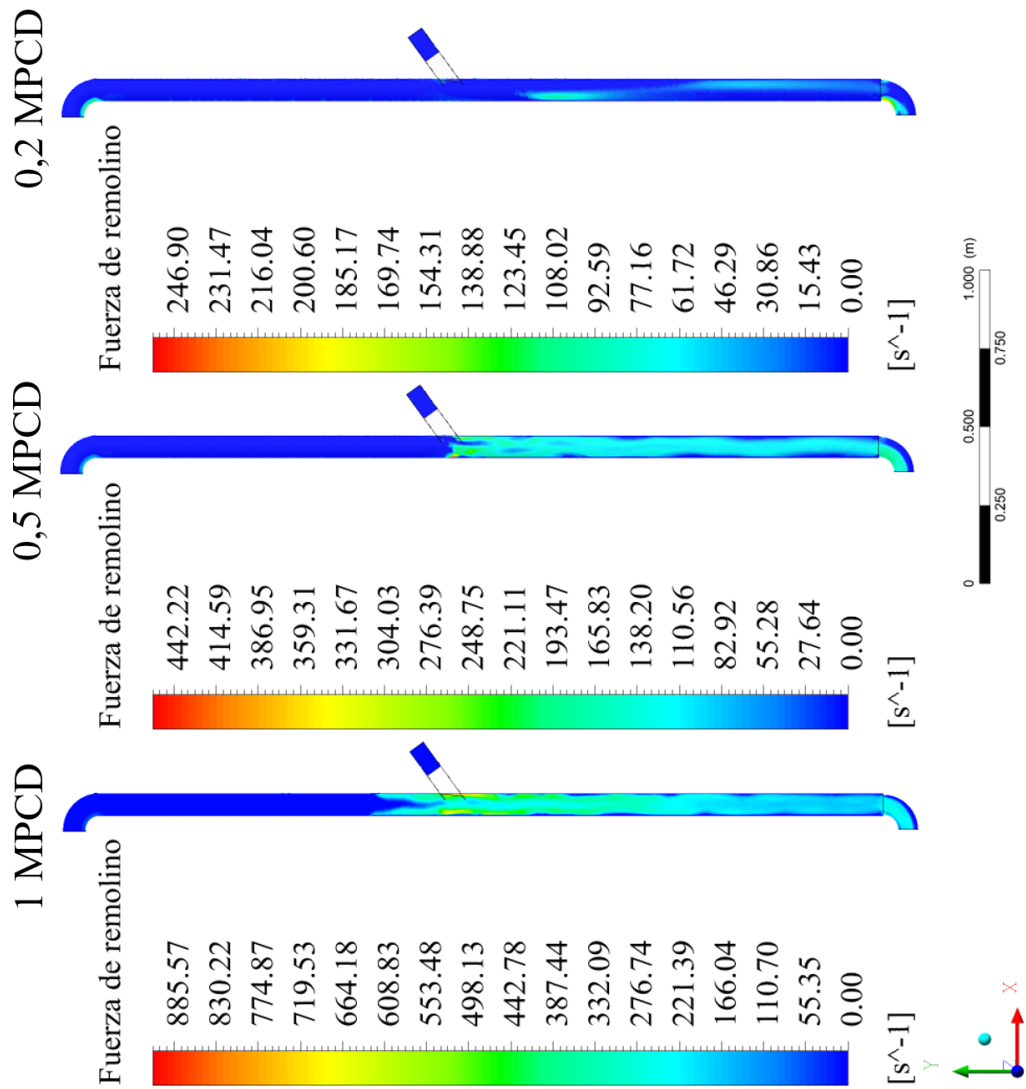


Figura 71. Campos de fuerza de remolino [s^{-1}] a 2 MPa para flujos de 1, 0,5 y 0,2 MPCD

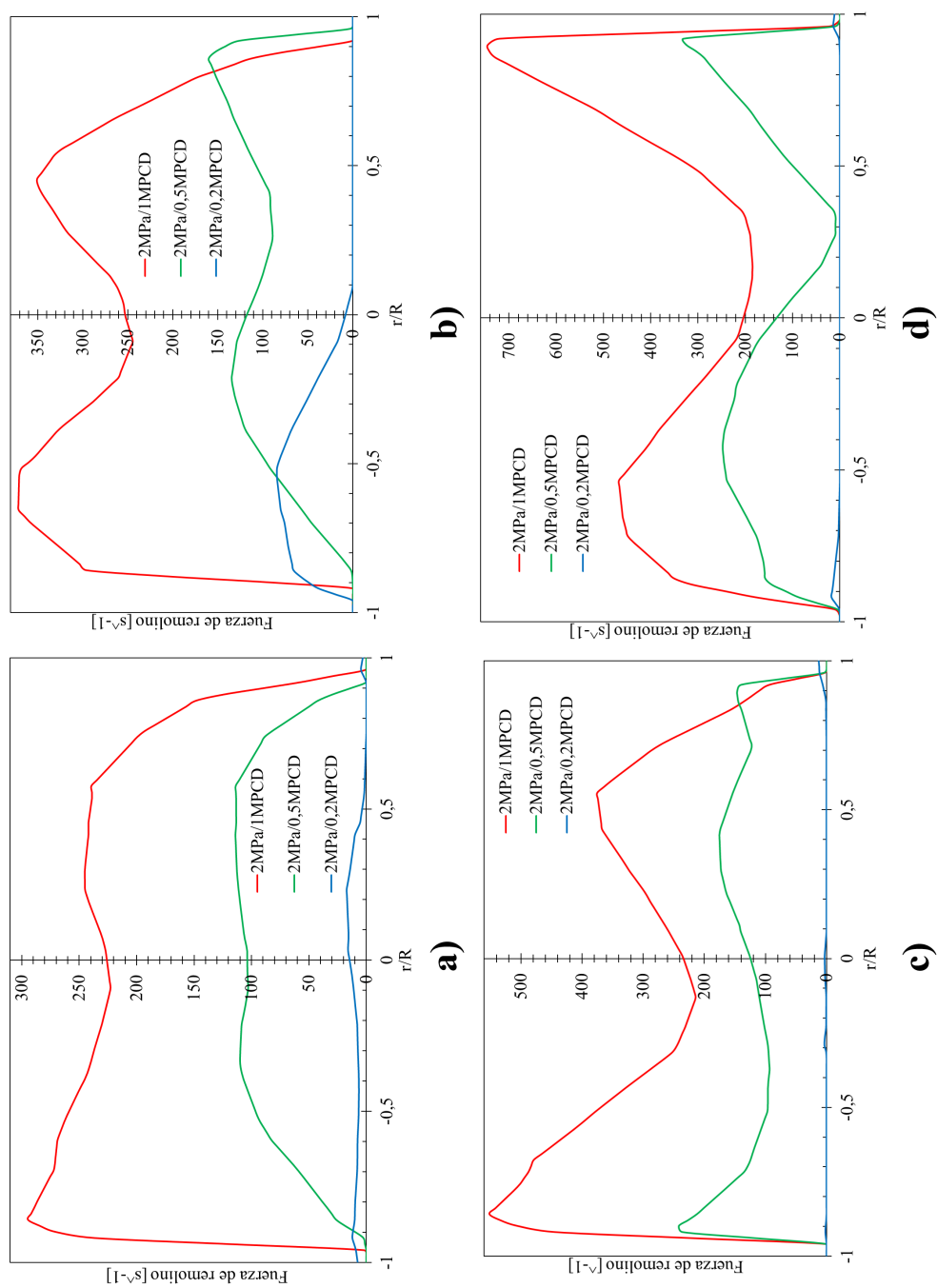


Figura 72. Perfiles de fuerza de remolino a 2 MPa, medidos a las alturas de **a)** 0,65 m **b)** 1 m **c)** 1,2 m y **d)** 1,3 m

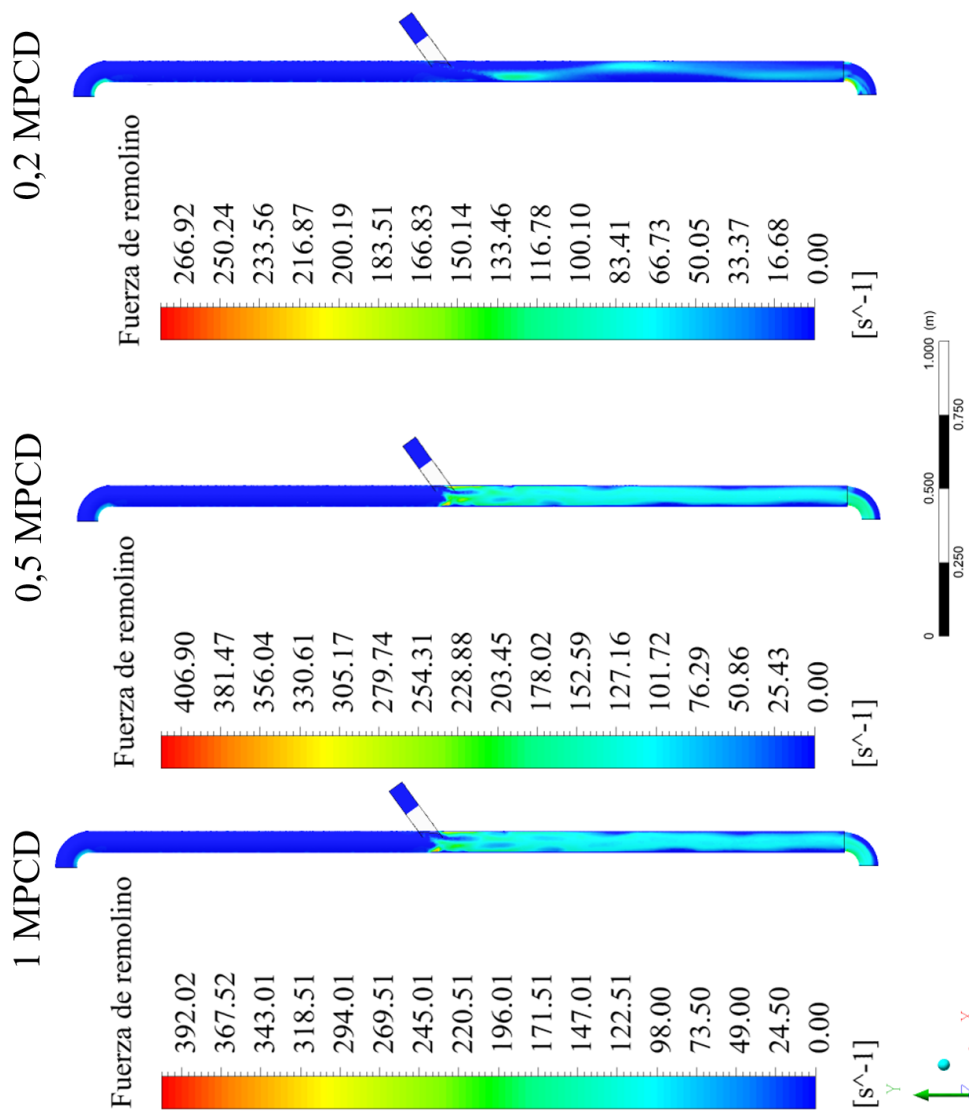


Figura 73. Campos de fuerza de remolino $[s^{-1}]$ a 4 MPa para flujos de 1, 0,5 y 0,2 MPCD

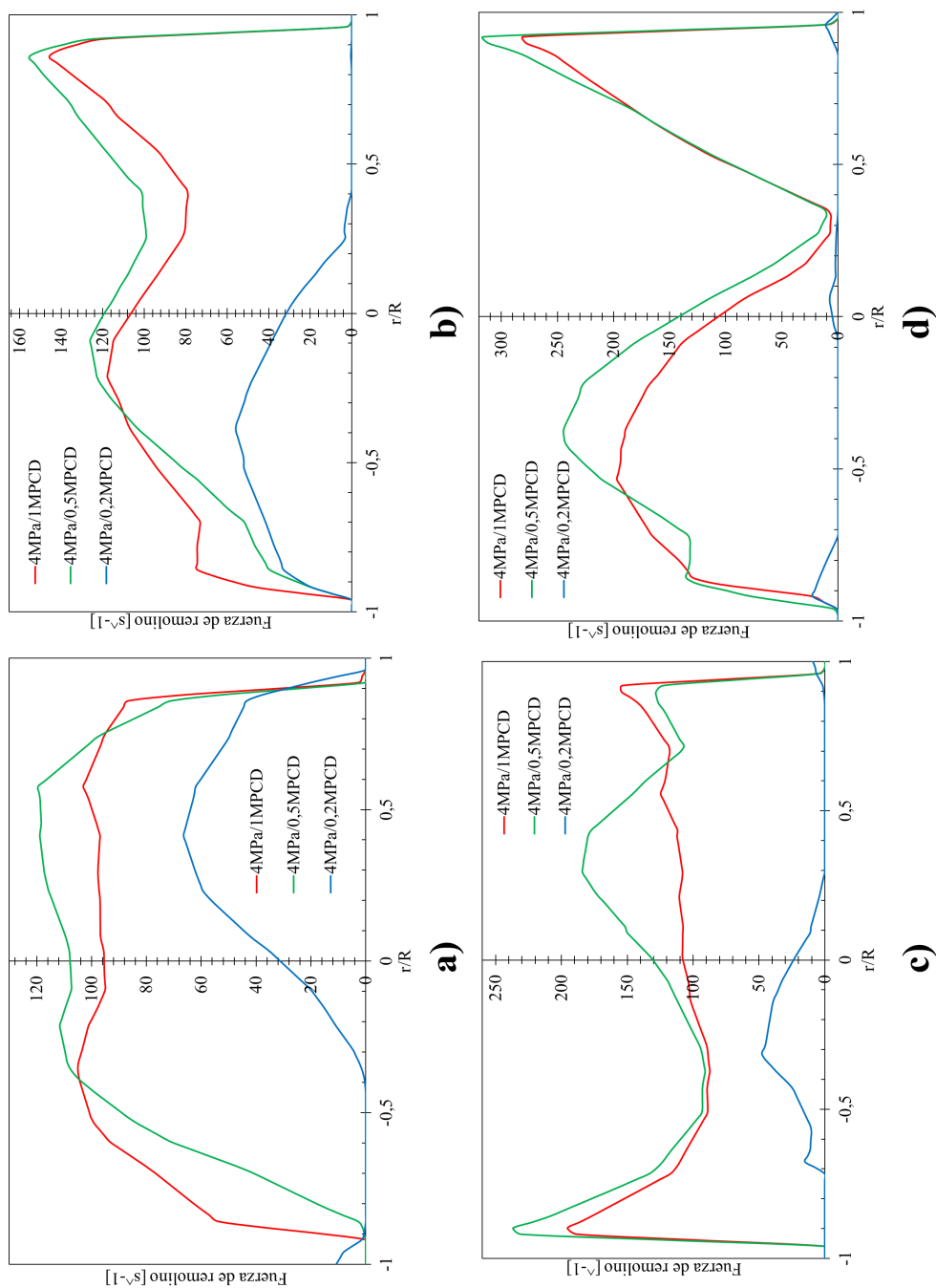


Figura 74. Perfiles de fuerza de remolino a 4 MPa, medidos a las alturas de a) 0,65 m b) 1 m c) 1,2 m y d) 1,3 m

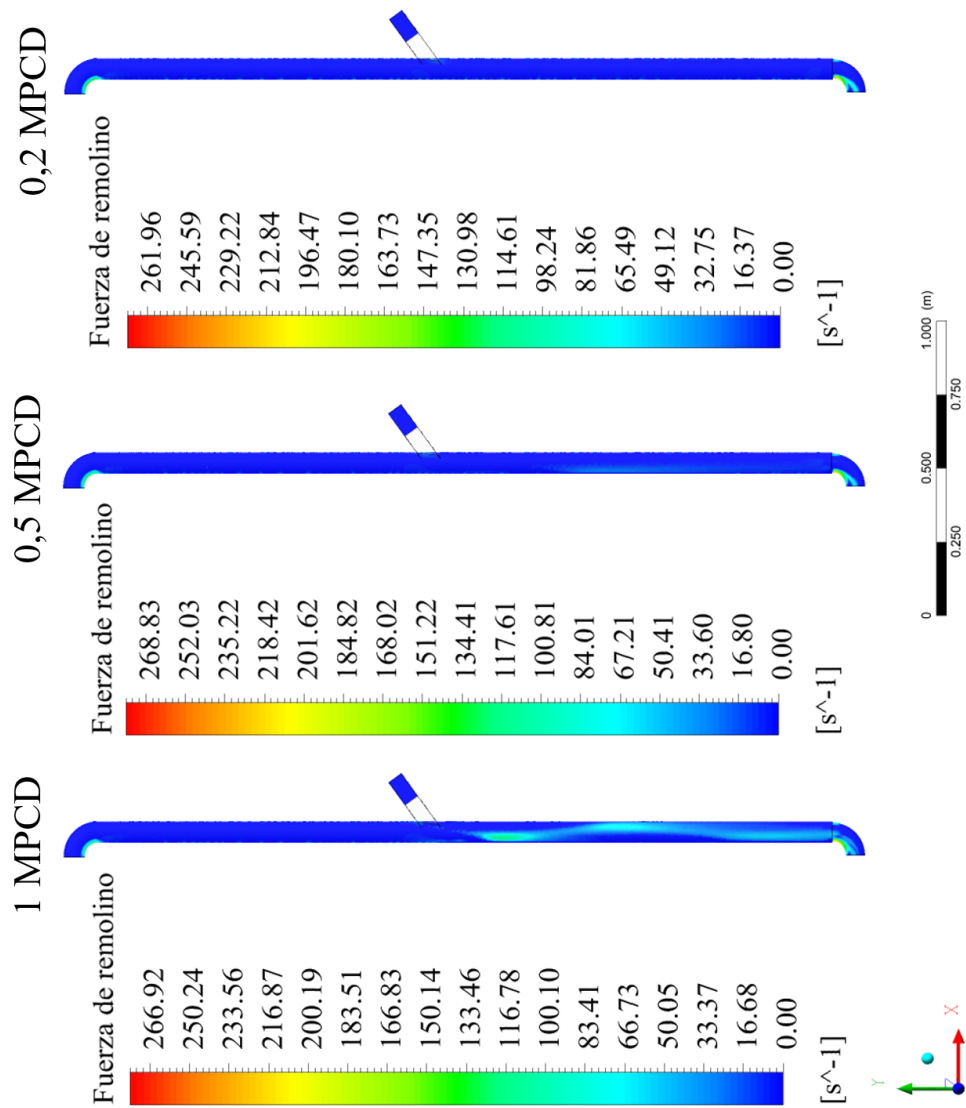


Figura 75. Campos de fuerza de remolino [s^{-1}] a 7 MPa para flujos de 1, 0,5 y 0,2 MPCD

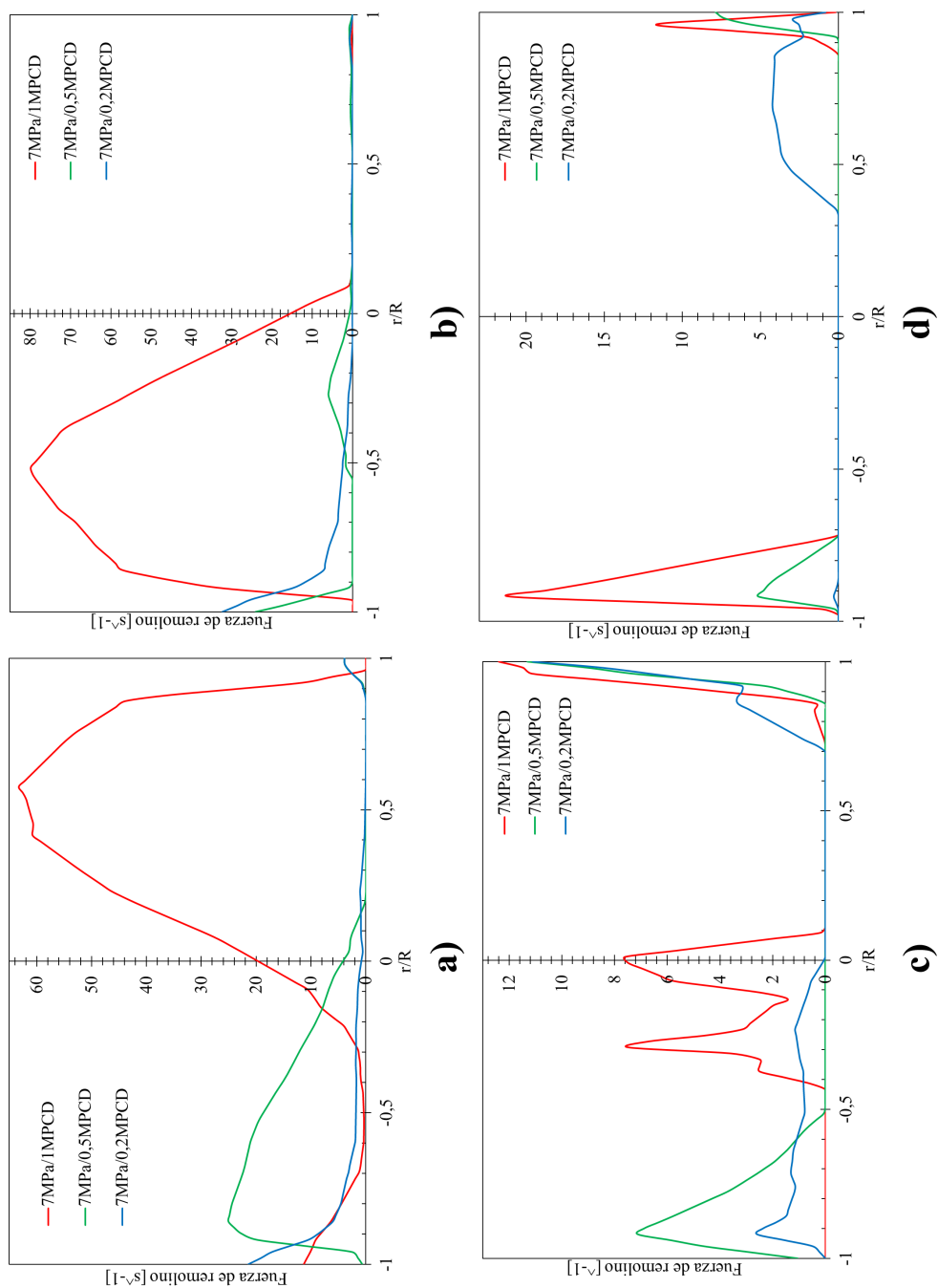


Figura 76. Perfiles de fuerza de remolino a 7 MPa, medidos a las alturas de **a)** 0,65 m **b)** 1 m **c)** 1,2 m y **d)** 1,3 m

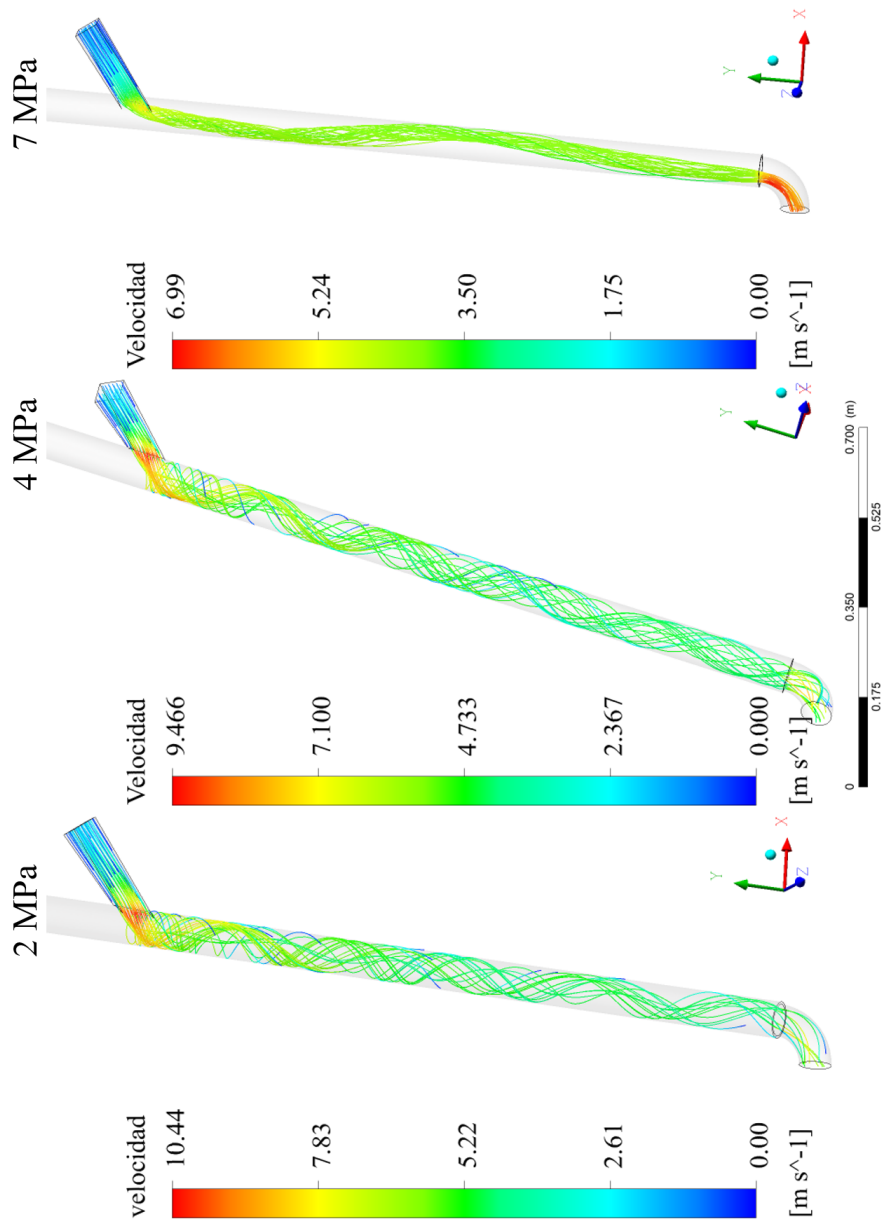


Figura 77. Líneas de corriente mostrando la velocidad del gas a 2, 4 y 7 MPa

7.2.4.2. Caída de presión. La Figura 79 muestra los campos y perfiles de presión correspondientes a la matriz entera de simulaciones realizadas para el análisis de la separación de fases del gas natural utilizando un GLCC, medidos en el centro del equipo. Como es de esperarse, valores altos de presión se presentan en la boquilla de entrada de la mezcla Cornejo Caceres et al. (2019), tal como lo muestran los picos observados al lado derecho de dicha Figura. A medida que los fluidos hacen su recorrido a lo largo del separador, la presión se distribuye.

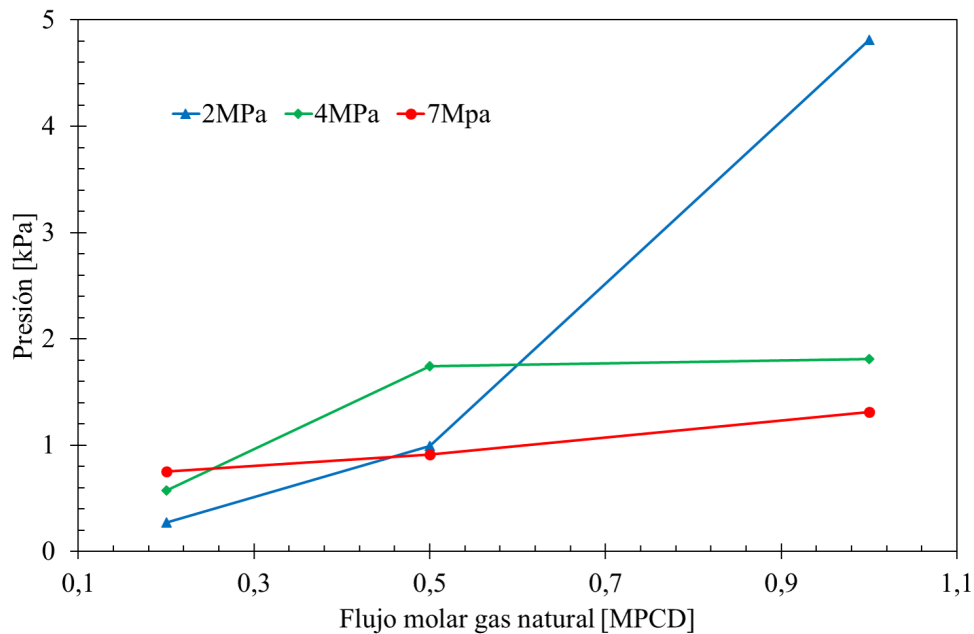


Figura 78. Caída de presión en función del flujo molar de la mezcla para cada una de las presiones de operación del separador

Además de la tendencia de los campos de presión, lo que tuvieron en común todas las simulaciones fue que se presentaron valores bajos de caída de presión, tal como se confirma en la Figura 78. El mayor valor de caída de presión se alcanzó para el caso operando a 2 MPa y 1 MPCD

de flujo molar (4,81 kPa), los demás casos mantuvieron la caída de presión por debajo de los 2 kPa; lo cual se presentaría como una ventaja a la hora del consumo de energía en el sistema de recompresión.

7.2.4.3. Fracción volumétrica de líquido. Las Figuras 80 a 81 muestran los campos de fracción volumétrica de líquido en la dirección longitudinal (en un plano central) y radial del separador, así como los perfiles de fracción volumétrica medidos a 0,65; 1; 1,2 y 1,3 m para cada una de las tres presiones de operación del sistema. Estos perfiles son otra forma de ver como el vórtice dentro del equipo se va deformado a medida que la presión aumenta, es decir, para sistemas a baja presión (Figura 80) se observan perfiles en los que, en su mayoría la concentración de líquido se encuentra en las paredes y en el centro se percibe la ondulación característica del remolino.

A medida que la presión aumenta, se evidencia que el líquido tiende a ocupar una región preferencial dentro del separador, generalmente la pared contraria a la boquilla de entrada. Este efecto se observa principalmente en sistema operando a la máxima presión estudiada, es decir, 7 MPa; donde al parecer la mezcla choca con la pared contraria y el líquido desciende escogiendo este camino preferencial y aglomerándose en este sector. Únicamente en el caso de 7 MPa/1 MPCD (Figura 81a) el líquido intenta trasladarse de pared a pared pero sin que la formación de remolino surta éxito, comprobando los perfiles encontrados en las Figuras 75 y 77. Finalmente, los resultados de fracción volumétrica de las Figuras 80 y 81 conducen a la conclusión de que no existe presencia

de líquido en la salida superior del separador, haciendo la salvedad de que tanto la fase gaseosa como la fase líquida fueron consideradas Eulerianas, por lo que el arrastre de las pequeñas gotas de líquido se pierde a menos que se realice un seguimiento Lagrangiano de las mismas.

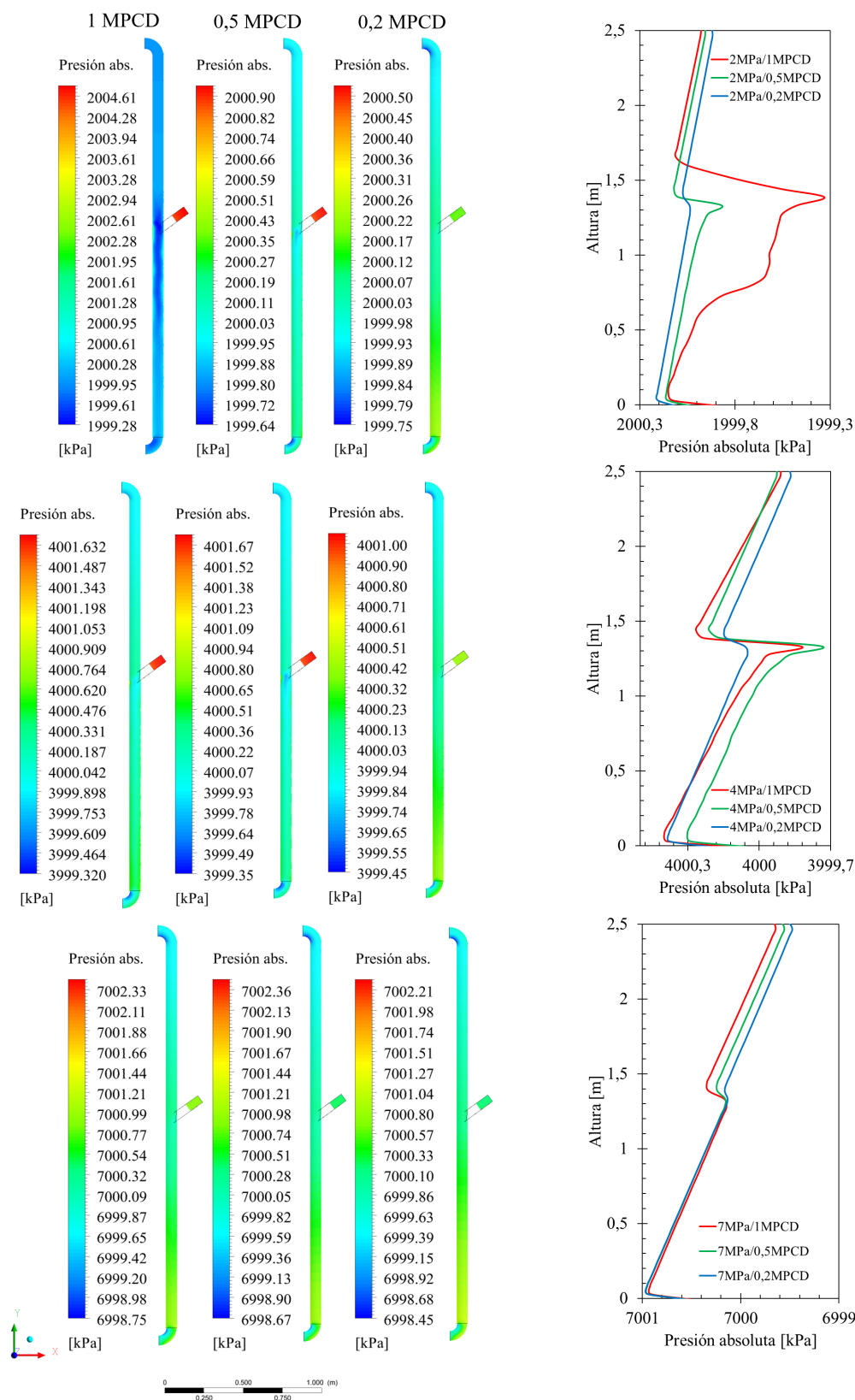


Figura 79. Campos y perfiles de presión para las nueve simulaciones numéricas realizadas en la separación centrífuga de las fases del gas natural

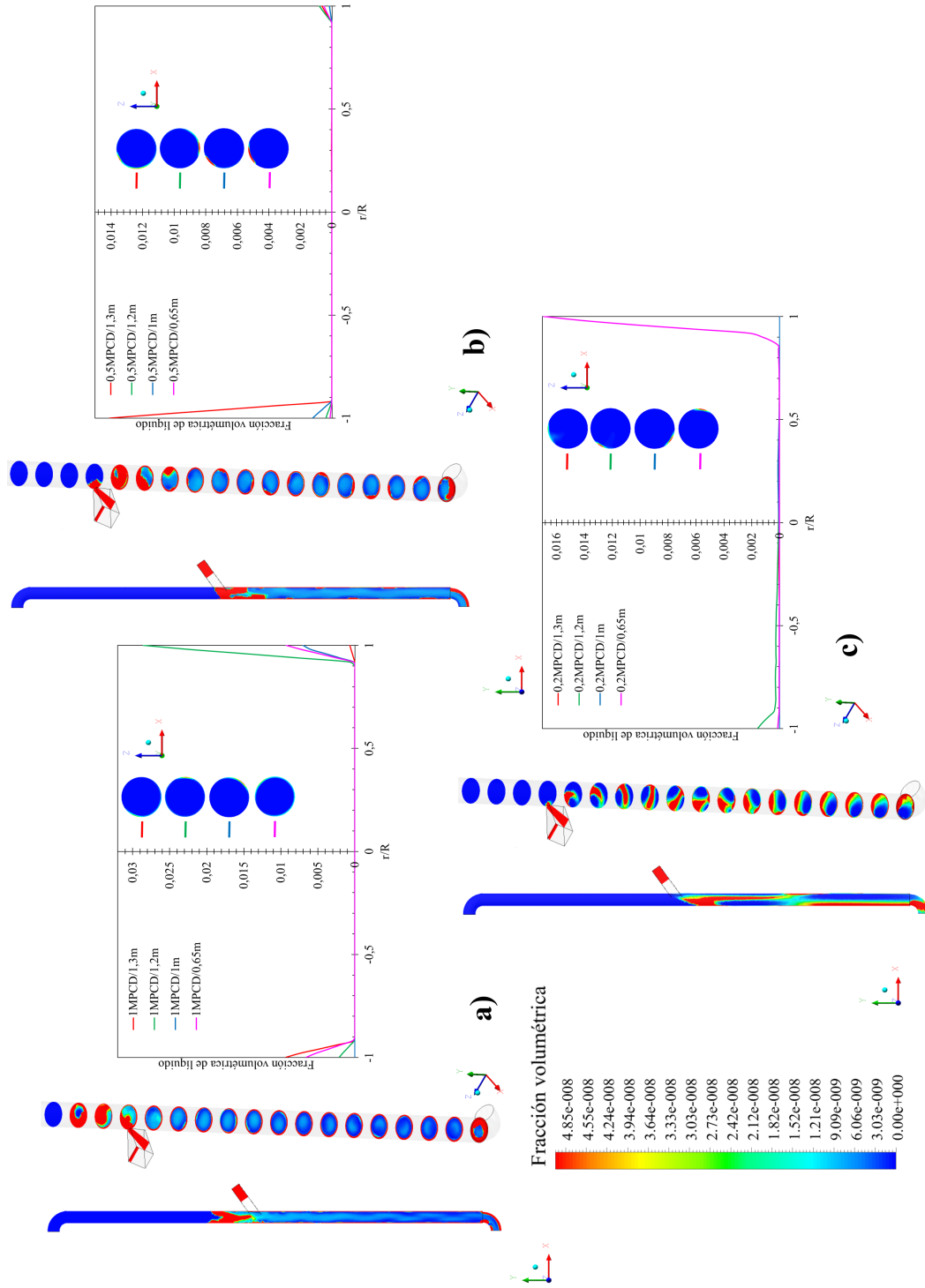


Figura 80. Campos axiales y radiales de fracción volumétrica de líquido a 2 MPa así como perfiles de fracción volumétrica medidos a 0,65; 1; 1,2 y 1,3 m de altura. a) 1 MPCD b) 0,5 MPCD c) 0,2 MPCD

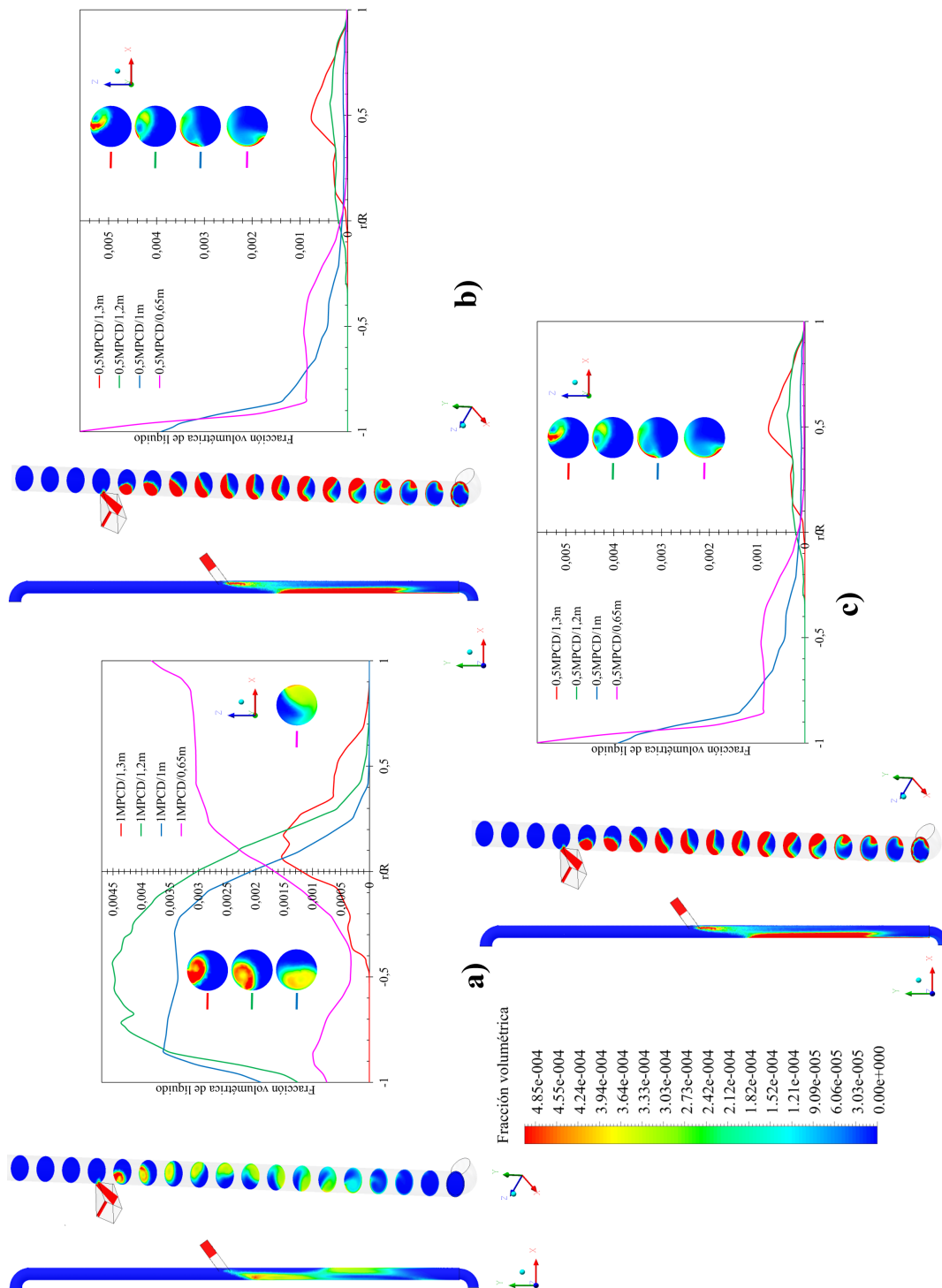


Figura 81. Campos axiales y radiales de fracción volumétrica de líquido a 7 MPa así como perfiles de fracción volumétrica medidos a 0,65; 1; 1,2 y 1,3 m de altura. **a)** 1 MPCD **b)** 0,5 MPCD **c)** 0,2 MPCD

8. Conclusiones y Trabajos Futuros

8.1. Conclusiones

En el Capítulo 1 fue realizada la caracterización del gas natural de la siguiente manera: A partir de curvas de equilibrio experimental de cinco mezclas de gas natural real y sintético Valio-llahi et al. (2016), fueron construidas, comparadas y correlacionadas dichas curvas utilizando tres diferentes ecuaciones de estado: Peng–Robinson, Soave–Redlich–Kwong y GERG2008, con el fin de seleccionar una mezcla adecuada para el análisis de la separación de fases del gas natural. Los resultados mostraron que no existe una diferencia significativa en el cálculo de los puntos cricondéntéricos, presentando un error absoluto máximo del 1 % con respecto a los valores reales. El cálculo de los puntos cricondenbáricos arrojó un error absoluto máximo de 4,36 % cuando se utilizó la ecuación de estado de Peng–Robinson. Por otro lado, tanto la ecuación de Soave–Redlich–Kwong como la ecuación de GERG2008 tienen tasas de error relativamente bajas: entre el 0,15 % y el 2,28 %, en comparación con los datos experimentales.

Con respecto a las curvas de equilibrio, la ecuación de estado utilizada para estimar las propiedades termodinámicas del gas natural a bajas presiones es indiferente, sin embargo, a medida que aumenta la presión, la ecuación de Peng–Robinson no es adecuada para representar el comportamiento del sistema multifase y multicomponente. Los resultados sugieren que, siempre que la mezcla contenga los 21 componentes presentes en la ecuación de estado de GERG2008, ésta es la que mejor estima las propiedades termodinámicas de las mezclas. En caso de tener componen-

tes adicionales, es posible usar la ecuación de Soave–Redlich–Kwong para calcular las curvas de equilibrio, ya que los resultados muestran que los porcentajes de error son bajos para condiciones de alta presión.

Luego de caracterizadas las mezclas a utilizar en las simulaciones numéricas, en el Capítulo 2 las fases del gas natural fueron analizadas en un nivel de estudio microscópico a través de códigos de MATLAB que representaron los procesos de supersaturación, nucleación homogénea (formación) y crecimiento de una gota de gas natural a condiciones de alta presión. El análisis se llevó a cabo utilizando técnicas de simulación molecular, movimientos de Monte Carlo y muestreo sombrilla para acelerar la convergencia de las simulaciones en MATLAB. Los resultados mostraron que a 7 MPa y 260 K se formó un núcleo de treinta y seis (36) moléculas, con un radio de 8,054 nanómetros. Posteriormente, se construyó la curva de crecimiento de la gota utilizando el modelo de Young (1993), obteniendo un diámetro final de 4,18 micrómetros, lo cual está de acuerdo con los resultados que se esperan para la condición de alta presión. Mediante el uso de simulación molecular, hubo mejoras en el cálculo del tamaño de gota inicial del gas natural, en comparación con la Teoría de Nucleación Clásica. Sin embargo, algunas propiedades como la tensión superficial en esta investigación se calculó con modelos macroscópicos; razón por la cual se acredita en parte la diferencia de entre dos a tres cifras significativas en la etapa de validación con datos experimentales, realizada en trabajos anteriores del grupo de investigación. Otras razones por las cuales se presentó tal desviación en la validación de los modelos utilizados en las simulaciones son precisamente la misma falta de estudios experimentales que confirmen o refuten la fiabilidad de

los mismos y la capacidad de computo destinada a las simulaciones, es decir, si se quisiera realizar una simulación en la que la tensión superficial fuera calculada a nivel microscópico, se incluyeran todos los movimientos de Monte Carlo y no solo los más relevantes o se descartara el muestreo sombrija como acelerante (atajo) de la convergencia, el *hardware* disponible actualmente no permitiría realizarla en tiempos razonables.

En la primera parte del Capítulo 5 se estudió la eficiencia de remoción de gotas de un gas natural a alta presión dentro de un eliminador de niebla tipo *vane pack* con canales laterales de drenaje. El análisis incluyó la representación de las interacciones gota-gota y gota-pared a través de los fenómenos de coalescencia/ruptura y de un modelo de formación de película Lagrangiana en las paredes, que incluyó el arrastre de gotas desde la película respectivamente. Para el movimiento de la gota fue usado el modelo de fase dispersa DPM, el cual utiliza un enfoque Lagrangiano. Se usó también el modelo $k - \omega$ SST para el cálculo de la turbulencia de la fase continua (gas) y el modelo DRW (*Discrete Random Walk*) para representar la dispersión turbulenta de las gotas. Fueron analizadas variables como la caída de presión, altura de la película de líquido en las paredes y campos de fracción volumétrica a diferentes condiciones de operación. Los modelos de flujo multifase fueron validados con datos experimentales Ghetti (2003) y comparados con simulaciones numéricas Estakhrsar and Rafee (2016) provenientes de trabajos previos. Los resultados mostraron que para sistemas a alta presión donde no se incluyen fenómenos como coalescencia, ruptura y formación de película en la pared, hubo una diferencia en la eficiencia de remoción de gotas de 7,8% y 3,9% para altas y bajas velocidades de entrada del gas respectivamente. Esta di-

ferencia radicó en el hecho que, en los modelos estándar (sin inclusión de formación de película), cuando las gotas entran en contacto con la superficie de las paredes, éstas son “removidas” del dominio de solución. A pesar de las limitaciones que tiene el modelo de película líquida en términos cuantitativos, especialmente en su aplicación a regiones con recirculación, tales como canales de drenaje, este modelo otorga un panorama mucho más realista del fenómeno que ocurre dentro del eliminador de niebla, en comparación con la consideración de que las gotas son atrapadas por las paredes o de un coeficiente de rebote arbitrario.

Como se esperaba, se encontró la mayor caída de presión para las condiciones de operación de máxima velocidad y presión (5 m/s y 7 MPa). El valor absoluto de la caída de presión para sistemas a alta presión se mantuvo en un intervalo entre 25 kPa y 198 kPa dependiendo de la velocidad del gas a la entrada, lo que significó, cinco veces más que los sistemas operando a condiciones atmosféricas. La inclusión del modelo de formación de película en la pared no mostró influencia significativa sobre los cálculos de caída de presión.

En relación con la formación de la película de líquido, se obtuvieron las mayores alturas promedio en la pared izquierda del eliminador de niebla tipo *vane pack* y los principales picos de altura fueron encontrados en regiones cercanas a las curvas y los canales de drenaje, aumentando el tiempo de residencia de las gotas dentro del *vane pack*. Finalmente, se observó también un arrastre considerable de la fase líquida en la condición de alta presión de operación.

En la segunda parte del Capítulo 5 se realizó la aproximación de un eliminador de niebla tipo *wire mesh* utilizando una sección de medio poroso con características similares a las que tendría el dispositivo real, para esto, fue implementado el modelo PMM de ANSYS-FLUENT, el cual muestra principalmente un valor de pérdida de carga que se asocia con el paso de la mezcla gas-líquido por los filamentos de alambre tejido, prestando especial atención en el diámetro obtenido durante el proceso de nucleación homogénea y crecimiento de gota: 4,18 micrómetros (Capítulo 2). A pesar de no ser éste el dispositivo seleccionado para la separación de las fases en el separador gravitacional por cuestiones de costo computacional y practicidad, el análisis fue útil para comprobar el aumento de la caída de presión a medida que la velocidad del gas aumenta, así como el arrastre que la fase líquida presenta para ese tamaño de gota tan pequeño.

La caracterización del gas natural, el análisis de nucleación homogénea, crecimiento de gota y el estudio del comportamiento de los accesorios, convergen en las simulaciones numéricas realizadas para el Capítulo 6, donde un separador gravitacional de 2,5 m de altura y 0,15 m de diámetro, adaptado del trabajo experimental a alta presión realizado por Austrheim et al. (2008) fue utilizado para analizar la separación de las fases de la mezcla definida en el Capítulo 1. El separador está equipado de un desviador de flujo de tipo paletas, el eliminador de niebla tipo *vane pack* del Capítulo 5 y un par de dispositivos generadores de remolinos denominados AFC (*Axial Flow Cyclone*). Fue realizado un seguimiento Euleriano de las fases mediante el modelo multifase *Two-Fluid* y el modelo de turbulencia $k - \omega$ SST. Las simulaciones fueron realizadas en estado transitorio, un total de dos minutos de tiempo real de proceso con un paso de tiempo de 0,005

y un máximo de 50 iteraciones por paso de tiempo. La adaptación de un separador proveniente de la literatura se hizo con el fin de validar los modelos matemáticos y numéricos con estudios experimentales. Los resultados de la validación mostraron una subestimación de la eficiencia total de separación especialmente a valores de la constante empírica K por encima de 0,15 m/s; lo cual confirma la afirmación de citeastrheim2007 de mantener K por debajo de dicho valor. El máximo error obtenido durante la validación (con una geometría adaptada, no la original) fue de 5,65 %.

Posteriormente, fue probado el equipo a 7 MPa y 260 K con la mezcla de gas seco seleccionado para las simulaciones de la tesis, donde se consiguió mantener la velocidad del gas 25 % por debajo de la velocidad terminal, lo cual favoreció el asentamiento de la fase líquida. A diferencia de las simulaciones realizadas para la validación donde la mezcla contenía alta cantidad de líquido (alrededor del 50 %vol); la mezcla de gas seco a alta presión presenta arrastre significativo de líquido por la corriente de salida del separador; por lo que no fue posible hacer cálculos de eficiencia de separación. La principal razón del alto arrastre podría adjudicarse al uso de un eliminador de niebla que no es el más recomendable para los pequeños tamaños de gota encontrados en sistemas a alta presión, así como las simplificaciones que fueron realizadas en los modelos con el fin de obtener convergencia con la capacidad de computo disponible. Los resultados sugieren también que el separador gravitacional vertical es más eficiente cuando se tienen cantidades del líquido por encima del 4 %vol. En la presente investigación, fue simulado el caso en el que se tenía una mezcla de gas con menos de 1 %vol de líquido.

Una alternativa al proceso convencional de separación gravitacional se estudió en el Capítulo 7 donde fueron desarrolladas simulaciones numéricas de un separador Gas-Líquido de tipo Ciclón Cilíndrico (GLCC) usando ANSYS-FLUENT. En la primera etapa, una mezcla de aire-agua a presión atmosférica fue simulada utilizando el modelo multifase “*Two-Fluid*”, el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ *Realizable* con funciones estándar de pared y condiciones de frontera de velocidad a la entrada, presión a las salidas y no deslizamiento en las paredes. Después de la correspondiente evaluación de independencia numérica de la malla computacional, los modelos matemáticos fueron validados con datos experimentales de la literatura. En la segunda etapa, con la ayuda del Grupo de Investigación en Energía y Medio Ambiente (GIEMA) fueron probados tres ángulos diferentes en la boquilla de entrada al separador, 27, 36 y 45 grados, para obtener un equilibrio entre la formación del vórtice correspondiente a los procesos de separación centrífuga y la caída de presión dentro del equipo. Los resultados mostraron que el ángulo de 36 grados en la entrada tangencial del separador presenta un adecuado equilibrio entre formación de vórtice, caída de presión y disminución del arrastre de la fase líquida. En la tercera y última etapa se realizó la aplicación a campos menores colombianos de gas natural mediante una matriz de 9 simulaciones numéricas en las que se varió la presión de operación (2, 4 y 7 MPa) y el flujo molar de la mezcla (0,2; 0,5 y 1 MPCD). Los resultados mostraron que a presiones bajas y moderadas, la formación del remolino dentro del separador es favorable, mientras que a alta presión, los contornos y líneas de corriente muestran que la tendencia es a chocar con las paredes del separador, lo cual dificulta la separación centrífuga de las fases; este fenómeno se confirma también en los perfiles de fracción

volumétrica, donde a alta presión el líquido toma un camino en la pared contraria a la entrada en lugar de formar el característico *core-annulus*.

Finalmente, a la luz de los análisis realizados por varios frentes de la separación de fases del gas natural a alta presión, nos es necesario concluir que con la tecnología local desarrollada e instalada actualmente en las plantas de tratamiento, a saber, separación gravitacional y/o centrífuga; la remoción de líquido a alta presión de mezclas de gas natural “seco” –característico de los campos menores de Colombia– no es posible dar solución a los altos costos generados por la recompresión del gas. Se sugieren algunas alternativas para trabajos futuros en la siguiente sección.

8.2. Trabajos futuros

Para la caracterización termodinámica de los fluidos, se recomienda la comparación de las ecuaciones de estado en mezclas de gas natural secos y húmedos, endémicos del país, con el fin de caracterizar su potencial de separación a alta presión.

Con respecto a la caracterización molecular del gas natural se recomienda buscar modelos de tipo microscópico para el cálculo de la tensión superficial de la gota de gas natural recién formada. Se recomienda también la actualización del código de MATLAB[®] que permita satisfacer los vacíos en las simulaciones y adaptarse a la capacidad de computo.

Se recomienda para ambos tipos de eliminadores de niebla refinar el análisis de formación

de película y remoción de líquido, utilizando una distribución de Rosin–Rammler Rosin (1933) para el tamaño de las gotas en vez de establecer en las simulaciones un tamaño de gota uniforme. En el caso del eliminador de niebla tipo *wire mesh* se recomienda disminuir el valor de la velocidad de la fase gaseosa por debajo de 0,3 m/s con el fin mantener condiciones favorables al asentamiento de las gotas por gravedad y finalmente, podría estudiarse el comportamiento lagrangiano de la fase discreta dentro del medio poroso.

Por cuestión de tiempo no fue posible probar otro tipo de configuración (geometría) del separador gravitacional, por lo que se recomienda para trabajos futuros pruebas de separación de fases en los equipos que fueron dimensionados de acuerdo con las especificaciones y sugerencias tanto de la literatura como de empresas con amplio recorrido en el sector; estos diseños son presentados en el Apéndice 2. Debido a la baja cantidad de líquido presente en la mezcla analizada, otra recomendación sería, en la medida que la disponibilidad de *hardware* lo permita, realizar un seguimiento Lagrangiano de las gotas de líquido que incluya distribución de tamaño, fenómenos de choque como coalescencia/ruptura, formación de película en las paredes del separador y eliminador de niebla adecuado para gotas con diámetro por debajo de 10 micrómetros.

Las simulaciones del separador GLCC no presentaron arrastre de gotas por parte de la corriente de gas, la altura de 1,2 m por encima de la entrada tangencial podría beneficiar la disminución o ausencia de líquido en la parte superior, sin embargo se recomienda realizar un seguimiento Lagrangiano de una parcela de gotas que incluyan distribución de tamaño, con el fin de conocer su

recorrido promedio dentro del equipo. Es importante también resaltar la necesidad de desarrollar estudios experimentales en los que se involucren mezclas de gas natural a condiciones de presión de operación alta o moderada con el fin de tener una comparación más realista de los modelos matemáticos.

Las alternativas propuestas para dar solución a los altos costos generados por la re-compresión del gas son: en primer lugar, desarrollar estudios que se enfoquen en tecnologías como la velocidad supersónica, la cual en ensayos a escala de laboratorio han demostrado ser más eficientes en comparación con sus antecesoras; en segundo lugar, probar una combinación de equipos gravitacionales/centrífugos que sean específicos para cierto tipo de campo o mezcla de gas y, en tercer lugar, realizar la separación a presión de operación “moderada” (entre 3 y 5 MPa), en este caso la re-compresión no sería eliminada del todo pero si considerablemente reducida.

Referencias Bibliográficas

- Abernathy, W. J. (1993). *Unit Operation Handbook*, chapter Gravity Settlers, Design.
- Allen, M. P. and Tildesley, D. J. (2012). *Computer simulation in chemical physics*, volume 397. Springer Science & Business Media.
- AMACS (13 de Febrero de 2019). www.amacs.com.
- Arnold, K. and Stewart, M. (2008). Surface production operations-design of gas-handling systems and facilities, vol. 2. *Burlington, MA: Elsevier*.
- Athulya, A. and Cherian, R. M. (2016). Cfd modelling of multiphase flow through t junction. *Procedia Technology*, 24:325–331.
- Austrheim, T., Gjertsen, L. H., and Hoffmann, A. C. (2007). Is the souders–brown equation sufficient for scrubber design? an experimental investigation at elevated pressure with hydrocarbon fluids. *Chemical Engineering Science*, 62(21):5715–5727.
- Austrheim, T., Gjertsen, L. H., and Hoffmann, A. C. (2008). Experimental investigation of the performance of a large-scale scrubber operating at elevated pressure on live natural gas. *Fuel*, 87(7):1281–1288.
- Avila, S., Blanco, S. T., Velasco, I., Rauzy, E., and Otín, S. (2002). Thermodynamic properties of synthetic natural gases. 2. dew point curves of synthetic natural gases and their mixtures with water and methanol. measurement and correlation. *Energy & fuels*, 16(4):928–934.

- Bahadori, A. (2014). *Natural gas processing: technology and engineering design*. Gulf Professional Publishing.
- Basset, A. B. (1888a). On the motion of a sphere in a viscous liquid. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. A*, 179:43–63.
- Basset, A. B. (1888b). *A treatise on hydrodynamics: with numerous examples*, volume 2. Deighton, Bell and Company.
- Berrio, J. C., Pereyra, E., and Ratkovich, N. (2018). Computational fluid dynamics modeling of gas–liquid cylindrical cyclones, geometrical analysis. *J Energ Resour–ASME*, 140(9):092003.
- Blezard, R. G., Bradburn, J., Clark, J. G., Cohen, D. H., Downie, A. A., and Fowler, P. (2000). *Modern Petroleum Technology*, chapter Production Engineering. Institution of Petroleum, John Wiley & Sons publisher.
- Bothamley, M. et al. (2013). Gas/liquids separators: Quantifying separation performance-part 2. *Oil and Gas Facilities*, 2(05):35–47.
- Boussinesq, J. (1877). *Essai sur la théorie des eaux courantes*. Imprimerie nationale.
- Braun, S., Kalikmanov, V., and Kraska, T. (2014). Molecular dynamics simulation of nucleation in the binary mixture n-nonane/methane. *The Journal of Chemical Physics*, 140(12):124305.
- Brennen, C. E. and Brennen, C. E. (2005). *Fundamentals of multiphase flow*. Cambridge university press.

- Brigadeau, A. H. (2007). Modeling and numerical investigation of high pressure gas-liquid separation. *Doctoral Thesis Norwegian University of Science and Technology*.
- British, P. (2018). *BP Statistical Review of World Energy*, volume 67. British Petroleum Publishing.
- Burkholz, A. (1989). *Droplet separation*. VCH Publishers.
- Burns, A. and Zwart, P. (2003). Computational fluid dynamics modeling of multiphase flows. *Alpha Beta Numerics, Fulwood, Preston, PR28At, UK*.
- Burns, A. D., Frank, T., Hamill, I., Shi, J.-M., et al. (2004). The favre averaged drag model for turbulent dispersion in eulerian multi-phase flows. In *5th international conference on multiphase flow, ICMF*, volume 4, pages 1–17.
- Bymaster, A., Olson, M., Grave, E., Svedeman, S. J., Viana, F., Akdim, M. R., Mikkelsen, R., et al. (2011). High pressure gas-liquid separation: an experimental study on separator performance of natural gas streams at elevated pressures. In *Offshore Technology Conference*. Offshore Technology Conference.
- Chen, B., Siepmann, J. I., Oh, K. J., and Klein, M. L. (2001). Aggregation-volume-bias monte carlo simulations of vapor-liquid nucleation barriers for lennard-jonesium. *The Journal of Chemical Physics*, 115(23):10903–10913.
- Chen, B., Siepmann, J. I., Oh, K. J., and Klein, M. L. (2002). Simulating vapor-liquid nucleation of n-alkanes. *The Journal of chemical physics*, 116(10):4317–4329.

- Chin, R., Stanbridge, D., Schook, R., et al. (2002). Increasing separation capacity with new and proven technologies. In *SPE Annual Technical conference and exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- Chorin, A. J. (1968). Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104):745–762.
- Coker, A. K. (2014). *Ludwig's applied process design for chemical and petrochemical plants*. gulf professional publishing.
- Contreras Camacho, R. O. et al. (2002). *Determinacion del equilibrio liquido-vapor de agua, aromaticos y sus mezclas mediante simulacion molecular*. PhD thesis, Universitat Rovira i Virgili.
- Cornejo Caceres, J. S., Prieto, N., Gonzalez, G., and Chaves-Guerrero, A. (2019). Numerical simulation of a natural gas cylindrical cyclone separator using computational fluid dynamics. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(31):14323–14332.
- Coutsikos, P., Kalospiros, N. S., and Tassios, D. P. (1995). Capabilities and limitations of the wong-sandler mixing rules. *Fluid Phase Equilibria*, 108(1-2):59–78.
- CREG (2007). Resolución 054 de 2007 de la creg, por la cual se complementan las especificaciones de calidad del gas natural inyectado al sistema nacional de transporte definidas en la resolución creg 071 de 1999. <http://apolo.creg.gov.co/>.
- CREG, editor (2016). *Conferencia: Sector Gas Natural en Colombia – Transporte de Gas*.

- Debenedetti, P. G. (1996). *Metastable liquids: concepts and principles*. Princeton University Press.
- Deschamps, C. J. (2002). Modelos algébricos e diferenciais. *Coleção Cadernos de Turbulência. Associação Brasileira de Ciências Mecânicas–ABCM. Rio de Janeiro*, 1:101–155.
- Drew, D. (1992). Analytical modeling of multiphase flows in heat transfer: Modern developments and advances. *Elsevier Science Publishers. New York*, 2:31 – 83.
- Drew, D. A. (1983). Mathematical modeling of two-phase flow. *Annual review of fluid mechanics*, 15(1):261–291.
- EIA (2016). International energy outlook 2016. [www.eia.gov/forecasts/ieo/pdf/0484\(2016\).pdf](http://www.eia.gov/forecasts/ieo/pdf/0484(2016).pdf).
- Elliott, J. R. and Lira, C. T. (1999). *Introductory chemical engineering thermodynamics*. Prentice Hall PTR Upper Saddle River, NJ.
- Elsayed, K. and Lacor, C. (2012). Modeling and pareto optimization of gas cyclone separator performance using rbf type artificial neural networks and genetic algorithms. *Powder Technology*, 217:84–99.
- Enwald, H., Peirano, E., and Almstedt, A.-E. (1996). Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. *International Journal of Multiphase Flow*, 22:21–66.
- Erdal, F. M. (2001). *Local measurements and computational fluid dynamics simulations in a gas-liquid cylindrical cyclone separator*. PhD thesis, University of Tulsa.

- Estakhrsar, M. and Rafee, R. (2016). Effects of wavelength and number of bends on the performance of zigzag demisters with drainage channels. *Applied Mathematical Modelling*, 40(2):685–699.
- Estakhrsar, M. H. H. and Rafee, R. (2013). Effect of drainage channel dimensions on the performance of wave-plate mist eliminators. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 30(6):1301–1311.
- Eugene, F. M. and Megyesy, P. (2002). Pressure vessel handbook. *University of Tulsa, Oklahoma*.
- Evans, F. L. (1971). *Equipment design handbook for refineries and chemical plants*, volume 2. Gulf Publishing Company.
- ExxonMobil (1999). *ExxonMobil Design Practices*, chapter 5. Drums: Vapor-Liquid Separators. ExxonMobil Research and Engineering Company.
- FERC (2017). Federal energy regulatory commission. <http://https://www.ferc.gov/industries/gas.asp>.
- Fewel, K. J. and Kean, J. A. (1992). Computer modeling aids separator retrofit. *Oil and Gas Journal;(United States)*, 90(27).
- Fisher, M. E. (1967). The theory of condensation and the critical point. *Physics Physique Fizika*, 3(5):255.

- Ford, I., Laaksonen, A., and Kulmala, M. (1993). Modification of the dillmann–meier theory of homogeneous nucleation. *The Journal of chemical physics*, 99(1):764–765.
- Frankiewicz, T., Browne, M. M., Lee, C.-M., et al. (2001). Reducing separation train sizes and increasing capacity by application of emerging technologies. In *Offshore Technology Conference*. Offshore Technology Conference.
- Frankiewicz, T., Lee, C.-M., et al. (2002). Using computational fluid dynamics (cfd) simulation to model fluid motion in process vessels on fixed and floating platforms. In *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- Fransen, M. (2015). *Experimental study of homogeneous water nucleation in a pulse-expansion wave tube*. PhD thesis, Doctoral dissertation, Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, 170.
- Frenkel, D. and Smit, B. (2001). *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*, volume 1. Academic press.
- Fuentes-Osorio, J.-A., Morales-Medina, G., and Chaves-Guerrero, A. (2018). Prediction of drop size of natural gas condensates using molecular simulation and young growth model. *CT&F-Ciencia, tecnología y futuro*, 8(1):67–75.
- Galatro, D. and Marín-Cordero, F. (2014). Considerations for the dew point calculation in rich natural gas. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 18:112–119.

- Gallagher, I., Saint-Raymond, L., and Texier, B. (2014). *From Newton to Boltzmann: hard spheres and short-range potentials*.
- Galletti, C., Brunazzi, E., and Tognotti, L. (2008). A numerical model for gas flow and droplet motion in wave-plate mist eliminators with drainage channels. *Chemical engineering science*, 63(23):5639–5652.
- Ghaffarkhah, A., Shahrabi, M. A., Moraveji, M. K., and Eslami, H. (2016). Application of cfd for designing conventional three phase oilfield separator. *Egyptian Journal of Petroleum*.
- Ghasemi, A., Shams, M., and Heyhat, M. M. (2017). A numerical scheme for optimizing gas liquid cylindrical cyclone separator. *P I Mech Eng E–J Pro*, 231(4):836–848.
- Ghetti, S. (2003). Investigation of entrainment phenomena in inertial separators. *University of Pisa, Pisa, Italy*.
- Gillandt, I., Fritsching, U., and Riehle, C. (1996). Gas-particle flow in a comparison of measurements and simulations. *Forschung Im Ingenieurwesen-Engineering Research*, 62(11-12):315.
- Girshick, S. L. and Chiu, C.-P. (1990). Kinetic nucleation theory: A new expression for the rate of homogeneous nucleation from an ideal supersaturated vapor. *The journal of chemical physics*, 93(2):1273–1277.
- Gomez, L., Mohan, R., Shoham, O., Kouba, G., et al. (2000). Enhanced mechanistic model and field-application design of gas/liquid cylindrical cyclone separators. *Spe Journal*, 5(02):190–198.

- Gomez, L. E., Mohan, R. S., Shoham, O., Marrelli, J. D., Kouba, G. E., et al. (1999). State-of-the-art simulator for field applications of gas-liquid cylindrical cyclone separators. In *SPE ATCE*. Society of Petroleum Engineers.
- GPSA (1998). *GPSA Engineering Data Book*, volume 1. publisher, 11 edition.
- Grødal, E. O., Realff, M. J., et al. (1999). Optimal design of two-and three-phase separators: A mathematical programming formulation. In *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- Guo, B. and Ghalambor, A. (2012). *Natural Gas Engineering Handbook*. Gulf Publishing Company, 2 edition.
- Gyarmathy, G. (1982). The spherical droplet in gaseous carrier streams: review and synthesis. *Multiphase science and technology*, 1(1-4).
- Hakala, R. W. (1961). A new derivation of the boltzmann distribution law. *Journal of Chemical Education*, 38(1):33.
- Hallanger, A., Soenstaboe, F., Knutsen, T., et al. (1996). A simulation model for three-phase gravity separators. In *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- Han, Q., Zhang, C., Xu, B., Chen, J., and Guo, L. (2013). The effect of geometry and operation conditions on the performance of a gas-liquid cylindrical cyclone separator with new structure. In *AIP Conference Proceedings*, volume 1547, pages 350–361. AIP.

- Hansen, E., Heitmann, H., Laksa, B., Ellingsen, A., Ostby, O., Morrow, T., and Dodge, F. (1991). Fluid flow modelling of gravity separators. In *5th Inter Conf Multiph Prod*, page 364.
- Hansen, E., Heitmann, H., Laska, B., et al. (1993). Numerical simulation of fluid flow behavior inside, and redesign of a field separator. In *Proc*, pages 117–129.
- Hansen, E. W. (2001). Phenomenological modelling and simulation of fluid flow and separation behavior in offshore gravity separators. *ASME-PUBLICATIONS-PVP*, 431:23–30.
- Hansen, E. W., Celius, H. K., and Hafskjold, B. (1995). Fluid flow and separation mechanisms in offshore separation equipment. In *International symposium on Two-phase Flow Modelling and Experimentation*, page 16.
- Helsør, T. and Svendsen, H. (2007). Experimental characterization of pressure drop in dry demisters at low and elevated pressures. *Chemical Engineering Research and Design*, 85(3):377–385.
- Hertz, H. (1882). On the evaporation of liquids, especially mercury, in vacuo. *Ann. Phys*, 17:178–193.
- Hiltunen, K., Jäsberg, A., Kallio, S., Karema, H., Kataja, M., Koponen, A., Manninen, M., and Taivassalo, V. (2009). Multiphase flow dynamics. *Theory and Numerics. Tech. Rep*, 722.
- Hoffman, A. C., Stein, L. E., Hoffmann, A. C., and Stein, L. E. (2002). *Gas cyclones and swirl tubes*, volume 56. Springer.

- Hreiz, R., Gentric, C., and Midoux, N. (2011). Numerical investigation of swirling flow in cylindrical cyclones. *Chemical engineering research and design*, 89(12):2521–2539.
- Hreiz, R., Gentric, C., Midoux, N., Lainé, R., and Fünfschilling, D. (2014). Hydrodynamics and velocity measurements in gas–liquid swirling flows in cylindrical cyclones. *Chemical engineering research and design*, 92(11):2231–2246.
- Huang, L., Deng, S., Chen, Z., Guan, J., and Chen, M. (2018). Numerical analysis of a novel gas-liquid pre-separation cyclone. *Sep Purif Technol*, 194:470–479.
- Hubbard, G., Denny, V., and Mills, A. (1975). Droplet evaporation: effects of transients and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 18(9):1003–1008.
- Ishii, M. and Hibiki, T. (2010). *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. Springer Science & Business Media.
- Ishii, M. and Mishima, K. (1984). Two-fluid model and hydrodynamic constitutive relations. *Nuclear Engineering and design*, 82(2-3):107–126.
- James, P., Azzopardi, B., Wang, Y., and Hughes, J. (2005). A model for liquid film flow and separation in a wave-plate mist eliminator. *Chemical Engineering Research and Design*, 83(5):469–477.
- James, P., Wang, Y., Azzopardi, B., and Hughes, J. (2003). The role of drainage channels in the performance of wave-plate mist eliminators. *Chemical Engineering Research and Design*, 81(6):639–648.

- Jarne, C., Avila, S., Blanco, S., Rauzy, E., Otín, S., and Velasco, I. (2004). Thermodynamic properties of synthetic natural gases. 5. dew point curves of synthetic natural gases and their mixtures with water and with water and methanol: measurement and correlation. *Industrial & engineering chemistry research*, 43(1):209–217.
- Jeong, J. and Hussain, F. (1995). On the identification of a vortex. *Journal of fluid mechanics*, 285:69–94.
- Jia, W., Wu, X., Li, C., and He, Y. (2017). Characteristic analysis of a non-equilibrium thermodynamic two-fluid model for natural gas liquid pipe flow. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 40:132–140.
- Jiang, M., Machiraju, R., and Thompson, D. S. (2002). A novel approach to vortex core region detection. In *VisSym*, volume 2, pages 217–225.
- Jiménez, N. P., Silva, G. G., and Guerrero, A. C. (2019). Comparative study of equations of state for the dew curves calculation in high pressure natural gas mixtures. *Logos ciencia y tecnología*.
- Kalikmanov, V. (2013). Computer simulation of nucleation. In *Nucleation Theory*, pages 113–144. Springer.
- Kalikmanov, V., Betting, M., Bruining, J., Smeulders, D. M., et al. (2007). New developments in nucleation theory and their impact on natural gas separation. In *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- Karman, T. (1934). Turbulence and skin friction. *Journal of the Aeronautical Sciences*, 1(1):1–20.

- Kästner, J. (2011). Umbrella sampling. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 1(6):932–942.
- Katz, J. L. and Wiedersich, H. (1977). Nucleation theory without maxwell demons. *Journal of colloid and interface science*, 61(2):351–355.
- Kha, H. M., Phuong, N. N., and Nam, N. T. (2017). The effect of different geometrical configurations of the performances of gas-liquid cylindrical cyclone separators (glcc). In *ICSSE*, pages 646–651. IEEE.
- Kharoua, N., Khezzar, L., and Saadawi, H. (2013). Cfd modelling of a horizontal three-phase separator: A population balance approach. *American Journal of Fluid Dynamics*, 3(4):101–118.
- Klimeck, R. (2000). *Entwicklung einer Fundamentalgleichung für Erdgase für das Gas- und Flüssigkeitsgebiet sowie das Phasengleichgewicht*. Ph.D. Dissertation, Fakultät für Maschinenbau, Ruhr-Universität Bochum, Germany.
- Knapp, H. (1982). *Vapor-liquid equilibria for mixtures of low-boiling substances*, volume 1. Dechema.
- Knudsen, M. (1915). Maximum rate of vaporization of mercury. *Ann. Phys*, 47:697–705.
- Koch-Glitsch (13 de Febrero de 2019). <http://www.koch-glitsch.com>.
- Kolmogorov, A. N. (1941). Equations of turbulent motion in an incompressible fluid. In *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, volume 30, pages 299–303.

- Kouba, G., Wang, S., Gomez, L., Mohan, R., and Shoham, O. (2006). Review of the state-of-the-art gas-liquid cylindrical cyclone (glcc) technology-field applications. In *International Oil and Gas Conference and Exhibition in China. Society of Petroleum Engineers*.
- Kouba, G. E., Shoham, O., and Shirazi, S. (1995). Design and performance of gas-liquid cylindrical cyclone separators. In *Proceedings of the BHR Group 7th International Meeting on Multiphase Flow., Cannes, France*, pages 307–327.
- Kunz, O. and Wagner, W. (2012). The gerg-2008 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures: an expansion of gerg-2004. *Journal of chemical & engineering data*, 57(11):3032–3091.
- Laleh, A., Svrcek, W., Monnery, W., et al. (2011). Computational fluid dynamics simulation of pilot-plant-scale two-phase separators. *Chemical Engineering & Technology*, 34(2):296–306.
- Laleh, P. (2010). *CFD simulation of multiphase separators*, volume 72. Doctoral Thesis University of Calgary.
- Landau, D. P. and Binder, K. (2014). *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge university press.
- Lebon, G., Jou, D., and Casas-Vázquez, J. (2008). *Understanding non-equilibrium thermodynamics*, volume 295. Springer.
- Lee, C.-M., van Dijk, E., Legg, M., Byeseda, J., et al. (2004). Field confirmation of cfd design for fpso-mounted separator. In *Offshore Technology Conference*. Offshore Technology Conference.

- Lee, J. M., Khan, R. I., Phelps, D. W., et al. (2009). Debottlenecking and computational-fluid-dynamics studies of high-and low-pressure production separators. *SPE Projects, Facilities & Construction*, 4(04):124–131.
- Lemmon, E. W. and Span, R. (2006). Short fundamental equations of state for 20 industrial fluids. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 51(3):785–850.
- Lopez de Bertodano, M., Lahey, R., and Jones, O. (1994). Development of a k-e model for bubbly two-phase flow. 116:128 – 134.
- Lu, Y., Lee, J. M., Phelps, D., Chase, R., et al. (2007). Effect of internal baffles on volumetric utilization of an fwko—a cfd evaluation. In *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers.
- Luitjen, C. M. (1998). Nucleation and droplet growth at high pressure. *Doctoral Thesis Technische Universiteit Eindhoven*.
- Lutsko, J. F. (2018). Density functional theory of inhomogeneous liquids. iii. liquid-vapor nucleation. *The Journal of Chemical Physics*, 129(24):244501.
- Mairhofer, J. and Gross, J. (2017). Numerical aspects of classical density functional theory for one-dimensional vapor-liquid interfaces. *Fluid Phase Equilibria*, 444:1–12.
- Maliska, C. R. (2004). *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2 ed. LTC.

- Matthies, K. and Theil, F. (2012). A semigroup approach to the justification of kinetic theory. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 44(6):4345–4379.
- Maxwell, J. (1877). Diffusion collected scientific paper. *Encyclopaedia Britannica*, 53.
- McCabe, W. L., Smith, J. C., and Harriott, P. (1993). *Unit operations of chemical engineering*, volume 1130. McGraw-hill New York.
- Meet, N. (2016). *Proceedings of the Natural Gas – NGAAM*. Wentworth Press.
- Menter, F. R. (1994). Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA journal*, 32(8):1598–1605.
- Merikanto, J. et al. (2007). Monte carlo simulations of molecular clusters in nucleation. *Helsingin yliopisto*.
- Michaelides, E. E. and Feng, Z.-G. (2016). Fundamentals of multiphase flow. *Multiphase Flow Handbook*, page 1.
- MME (2017). Declaración de producción de gas natural para el período 2017–2026. <http://www.minminas.gov.co/web/10180/1332>.
- Mokhatab, S. and Poe, W. A. (2015). *Handbook of natural gas transmission and processing*. Gulf Professional Publishing.
- Monnery, W. and Svrcek, W. (1994). Analytical study of liquid/vapor separation efficiency. *study developed for Petroleum Technology Alliance Canada*.

- Mørch, Ø., Nasrifar, K., Bolland, O., Solbraa, E., Fredheim, A., and Gjertsen, L. (2006). Measurement and modeling of hydrocarbon dew points for five synthetic natural gas mixtures. *Fluid phase equilibria*, 239(2):138–145.
- Movafaghian, S., Jaua-Marturet, J., Mohan, R. S., Shoham, O., and Kouba, G. (2000). The effects of geometry, fluid properties and pressure on the hydrodynamics of gas–liquid cylindrical cyclone separators. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(6):999–1018.
- Mundo, C., Sommerfeld, M., and Tropea, C. (1995). Droplet-wall collisions: experimental studies of the deformation and breakup process. *International journal of multiphase flow*, 21(2):151–173.
- Naber, J. and Reitz, R. D. (1988). Modeling engine spray/wall impingement. *SAE transactions*, pages 118–140.
- Napari, I. (2000). Density functional theory of nucleation and phase behavior in binary fluid systems. *Helsingin yliopisto*.
- Narimani, E. and Shahhoseini, S. (2010). The effect of vane angle on the mist eliminator efficiency. *International Review of Chemical Engineering*, 2(1):95–98.
- NASA (2015). Langley research center: Turbulence modeling resource. turbmodels.larc.nasa.gov/bs1.html.
- Newton, T., Connolly, D., Mokhatab, S., et al. (2007). Tools to model multiphase separation. *Chemical engineering progress*, 103(6):26–31.

- Nieuwstadt, F. T. and Dirkwager, M. (1995). A fluid mechanics model for an axial cyclone separator. *Industrial & engineering chemistry research*, 34(10):3399–3404.
- O'Rourke, P. and Amsden, A. (1996). A particle numerical model for wall film dynamics in port-injected engines. Technical report, SAE Technical Paper.
- Oxtoby, D. W. and Evans, R. (1988). Nonclassical nucleation theory for the gas–liquid transition. *The Journal of chemical physics*, 89(12):7521–7530.
- Oxtoby, D. W. and Kashchiev, D. (1994). A general relation between the nucleation work and the size of the nucleus in multicomponent nucleation. *The Journal of Chemical Physics*, 100(10):7665–7671.
- Paladino, E. E. (2005). *Estudo do escoamento multifásico em medidores de vazão do tipo pressão diferencial*. Tese Doutoral. Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, SC.
- Panagiotopoulos, A. Z. (2002). Direct determination of phase coexistence properties of fluids by monte carlo simulation in a new ensemble. *Molecular Physics*, 100(1):237–246.
- Passman, S. L. (1990). Stress in dilute suspensions. In *Two phase flows and waves*, pages 80–87. Springer.
- Patankar, S. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. Washington, DC, Hemisphere Publishing Corp., 1980. 210 p.
- Patankar, S. V. and Spalding, D. B. (1983). A calculation procedure for heat, mass and momentum

- transfer in three-dimensional parabolic flows. In *Numerical Prediction of Flow, Heat Transfer, Turbulence and Combustion*, pages 54–73. Elsevier.
- Pathak, H. N. (2013). *Nucleation and Droplet Growth During Co-condensation of Nonane and D2O in a Supersonic Nozzle*. PhD thesis, The Ohio State University.
- Peeters, P., Luijten, C., and Van Dongen, M. (2001). Transitional droplet growth and diffusion coefficients. *International journal of heat and mass transfer*, 44(1):181–193.
- Peng, D.-Y. and Robinson, D. B. (1976). A new two-constant equation of state. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15(1):59–64.
- Phillips, H. and Deakin, A. (1990). Measurements of the collection efficiency of various demister devices. In *Proceedings of the Fourth Annual Meeting of the Aerosol Society, Loughborough*.
- Pitzer, K. S. and Curl Jr, R. (1957). The volumetric and thermodynamic properties of fluids. iii. empirical equation for the second virial coefficient¹. *Journal of the American Chemical Society*, 79(10):2369–2370.
- Poiling, B. E., Prausnitz, J. M., and O'connell, J. P. (2004). *The Properties of Gases and Liquids*, chapter chapterChap. 12 Surface Tension, pages 12.1–12.27. McGraw-Hill, fifth edition.
- Prieto, N. J. (2011). *Simulação da Combustão de Coque em Regeneradores FCC Usando Fluidodinâmica Computacional*. Master Thesis - Universidade Estadual de Campinas.

- Prieto-Jiménez, N., González-Silva, G., and Chaves-Guerrero, A. (2019). Review of the natural gas phases separation process at high pressure in the oil&gas industry. *Entramado*, 15(1):312–329.
- Pulvirenti, M. and Simonella, S. (2017). The boltzmann–grad limit of a hard sphere system: analysis of the correlation error. *Inventiones mathematicae*, 207(3):1135–1237.
- Requena, G. and Rodríguez, M. (2006). *Diseño y evaluación de separadores bifásicos y trifásicos*. Proyecto de Graduación. Universidad Central de Venezuela.
- Reynolds, O. (1895). On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion. *Proceedings of the Royal Society of London*, 56(336-339):40–45.
- Rezende, R. V., Almeida, R. A., de Souza, A. A. U., and Souza, S. M. G. U. (2015). A two-fluid model with a tensor closure model approach for free surface flow simulations. *Chemical Engineering Science*, 122:596–613.
- Romero, M. (2012). Efecto de la composición de los gases de combustión en la captura de co2 por nanotubos de carbono: Un estudio de simulación. *Master, Universidad de Sevilla*.
- Rosin, P. (1933). The laws governing the fineness of powdered coal. *Journal of the Institute of Fuel*, 7:29–36.
- Roth, M. and Peikert, R. (1998). A higher-order method for finding vortex core lines. In *Proceedings Visualization'98 (Cat. No. 98CB36276)*, pages 143–150. IEEE.

- Sadus, R. J. (2002). *Molecular simulation of fluids: theory, algorithms, and object-orientation*. Elsevier.
- Santra, M., Chakrabarty, S., and Bagchi, B. (2008). Gas-liquid nucleation in a two dimensional system. *The Journal of Chemical Physics*, 129(23):234704.
- Schlichting, H. and Gersten, K. (2016). *Boundary-layer theory*. Springer.
- Setekleiv, A. E. and Svendsen, H. F. (2012). Operation and dynamic behavior of wire mesh pads. *Chemical engineering science*, 68(1):624–639.
- Shell (2012). *Gas/liquid separators – type selection and design rules*. Shell Group of companies to: FMC Technologies.
- Shi, J., Frank, T., and Burns, A. (2004). Turbulence dispersion force-physics, model derivation and evaluation. 28.-30.
- Shirazi, S. A. (2004). Local velocity measurements and computational fluid dynamics (cfd) simulations of swirling flow in a cylindrical cyclone separator.
- Shoaib, A. M., Bhran, A. A., Awad, M. E., El-Sayed, N. A., and Fathy, T. (2018). Optimum operating conditions for improving natural gas dew point and condensate throughput. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 49:324–330.
- Smit, B. (1995). Grand canonical monte carlo simulations of chain molecules: adsorption isotherms of alkanes in zeolites. *Molecular Physics*, 85(1):153–172.

- Soave, G. (1972). Equilibrium constants from a modified redlich-kwong equation of state. *Chemical Engineering Science*, 27(6):1197–1203.
- Souders, M. and Brown, G. G. (1934). Design of fractionating columns i. entrainment and capacity. *Industrial & Engineering Chemistry*, 26(1):98–103.
- Span, R. and Wagner, W. (2003). Equations of state for technical applications. ii. results for non-polar fluids. *International Journal of Thermophysics*, 24(1):41–109.
- Stanton, D. W. and Rutland, C. J. (1996). Modeling fuel film formation and wall interaction in diesel engines.
- Stokes, G. G. (1851). *On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums*, volume 9. Pitt Press.
- Sujudi, D. and Haines, R. (1995). Identification of swirling flow in 3-d vector fields. In *12th Computational Fluid Dynamics Conference*, page 1715.
- Sulzer (2017). Sulzer mellachevron mist eliminators. <http://www.sulzer.com/br/Products-and-Services/Separation-Technology/Separators>.
- Svrcek, W. and Monnery, W. (1993). Design 2-phase separators within the right limits. *Chemical Engineering Progress*, 90(7).
- Swanborn, R. A. (1988). A new approach to the design of gas-liquid separators for the oil industry. *Doctoral Thesis-Delft University of Technology*.

- Swartzendruber, J., Fadda, D., and Taylor, D. (2005). Accommodating last minute changes: Two phase separation performance validated by cfd. In *ASME 2005 Fluids Engineering Division Summer Meeting*, pages 713–715. American Society of Mechanical Engineers.
- Talanquer, V. and Oxtoby, D. W. (1995). Nucleation in molecular and dipolar fluids: Interaction site model. *The Journal of chemical physics*, 103(9):3686–3695.
- Tankov, I., Yankova, R., Genieva, S., Mitkova, M., and Stratiev, D. (2017). Density functional theory study on the ionic liquid pyridinium hydrogen sulfate. *Journal of Molecular Structure*, 1139:400–406.
- ten Wolde, P. R. and Frenkel, D. (1998). Computer simulation study of gas–liquid nucleation in a lennard-jones system. *The Journal of chemical physics*, 109(22):9901–9918.
- Tian, L. and Ahmadi, G. (2007). Particle deposition in turbulent duct flows. comparisons of different model predictions. *Journal of Aerosol Science*, 38(4):377–397.
- Torres, S. (2016). *Simulación numérica del crecimiento de gota de hidrocarburos condensados en el gas natural*. Trabajo de grado–Universidad Industrial de Santander.
- Ungerer, P., Tavitian, B., and Boutin, A. (2005). *Applications of molecular simulation in the oil and gas industry: Monte Carlo methods*. Editions Technip.
- UPME (2016). *Balance de gas natural Colombia 2016-2025*. Colombia: Ministerio de Minas y Energía.

- Valiollahi, S., Kavianpour, B., Raeissi, S., and Moshfeghian, M. (2016). A new peng-robinson modification to enhance dew point estimations of natural gases. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 34:1137–1147.
- Verlaan, C. C. J. (1991). Performance of novel mist eliminators.
- Vieira, R., Sajeev, S., Shirazi, S., McLaury, B., Kouba, G., et al. (2015). Experiments and modelling of sand erosion in gas-liquid cylindrical cyclone separators under gas production and low-liquid loading conditions. In *17th International Conference on Multiphase Production Technology*. BHR Group.
- Walas, S. M. (1990). *Process Vessels, Chapter 18 in Chemical Process Equipment Selection and Design*. Butterworth-Heinemann.
- Wallis, G. B. (1969). One-dimensional two-phase flow. *McGraw-Hill*.
- Wang, S., Gomez, L. E., Mohan, R. S., Shoham, O., and Kouba, G. E. (2003). Gas-liquid cylindrical cyclone (glcc[®]) compact separators for wet gas applications. *Journal of Energy Resources Technology*, 125(1):43–50.
- Wang, S., Li, H., Wang, R., Wang, X., Tian, R., and Sun, Q. (2019). Effect of the inlet angle on the performance of a cyclone separator using cfd-dem. *Advanced Powder Technology*, 30(2):227–239.
- Wang, W. and Davies, G. (1996). Cfd studies of separation of mists from gases using vane-type separators. *Chemical engineering research & design*, 74(2):232–238.

- Wang, Y. and James, P. (1998). The calculation of wave-plate demister efficiencies using numerical simulation of the flow field and droplet motion. *Chemical Engineering Research and Design*, 76(8):980–985.
- Wang, Y. and James, P. (1999). Assessment of an eddy-interaction model and its refinements using predictions of droplet deposition in a wave-plate demister. *Chemical Engineering Research and Design*, 77(8):692–698.
- Wasilewski, M. and Brar, L. S. (2019). Effect of the inlet duct angle on the performance of cyclone separators. *Separation and Purification Technology*, 213:19–33.
- Weihull, W. (1951). A statistical distribution function of wide applicability. *J Appl Mech*, 18:290–293.
- Whitaker, S. (2013). *The method of volume averaging*, volume 13. Springer Science & Business Media.
- Wilcox, D. C. et al. (1998). *Turbulence modeling for CFD*, volume 2. DCW industries La Canada, CA.
- Wilemski, G. (1995). The kelvin equation and self-consistent nucleation theory. *The Journal of chemical physics*, 103(3):1119–1126.
- Wilkinson, D., Waldie, B., et al. (1994). Cfd and experimental studies of fluid and particle flow in horizontal primary separators. *Chemical engineering research & design*, 72(2):189–196.

- Wilkinson, D., Waldie, B., Nor, M. M., and Lee, H. Y. (2000). Baffle plate configurations to enhance separation in horizontal primary separators. *Chemical Engineering Journal*, 77(3):221–226.
- Wong, D. S. H. and Sandler, S. I. (1992). A theoretically correct mixing rule for cubic equations of state. *AIChE Journal*, 38(5):671–680.
- Xu, W., Li, Q., Wang, J., and Jin, Y. (2016). Performance evaluation of a new cyclone separator—part ii simulation results. *Separation and Purification Technology*, 160:112–116.
- Yang, J., Zhang, X., Shen, G., Xiao, J., and Jin, Y. (2015). Modeling the mean residence time of liquid phase in the gas–liquid cyclone. *Ind Eng Chem Res*, 54(43):10885–10892.
- Yao, J. and Fairweather, M. (2012). Particle deposition in turbulent duct flows. *Chemical engineering science*, 84:781–800.
- Yarin, A. and Weiss, D. (1995). Impact of drops on solid surfaces: self-similar capillary waves, and splashing as a new type of kinematic discontinuity. *Journal of Fluid Mechanics*, 283:141–173.
- Young, J. (1993). The condensation and evaporation of liquid droplets at arbitrary knudsen number in the presence of an inert gas. *International journal of heat and mass transfer*, 36(11):2941–2956.
- Yu, J., Xu, C., Zheng, X., Lin, W., Nie, S., and C., G. (2013). Oil, water and gas three-phase cyclone separator. china patent cn203,355,909u.

- Yue, T., Chen, J., Song, J., Chen, X., Wang, Y., Jia, Z., and Xu, R. (2019). Experimental and numerical study of upper swirling liquid film (uslf) among gas-liquid cylindrical cyclones (glcc). *Chem Eng J*, 358:806–820.
- Zhang, S. and Choudhury, D. (2006). Eigen helicity density: a new vortex identification scheme and its application in accelerated inhomogeneous flows. *Physics of fluids*, 18(5):058104.
- Zhang, X. D., Gou, R. Y., Sun, X. Q., Zhang, Y., and Xu, G. H. (2014). Embedded-type inverted double-cone oil-gas-water triphase cyclone separator. china patent cn103,551,262a.
- Zhao, J., Jin, B., and Zhong, Z. (2007). Study of the separation efficiency of a demister vane with response surface methodology. *Journal of hazardous materials*, 147(1-2):363–369.

Apéndices

Apéndice A. Test de independencia numérica de las mallas

El método de volúmenes finitos permite discretizar el medio continuo para aproximar la solución a las ecuaciones diferenciales que definen el modelo matemático; esta discretización conlleva al concepto de mallado o división del medio continuo llamado “geometría” en volúmenes sobre los cuales se resuelven las ecuaciones de transporte. Dependiendo de la calidad de la malla, los resultados se verán fuertemente influenciados, por lo cual se deben seguir algunas reglas básicas: la primera es utilizar el tipo de volumen de malla más simple que describa el fenómeno que se desea analizar, la segunda es utilizar el mínimo refinamiento que capture el fenómeno físico dominante, es decir, si se refina demasiado en regiones que no son de interés para el análisis, se estarán usando recursos computacionales innecesariamente y tercero, es perentorio que se refine en regiones con altos gradientes de esfuerzo: aperturas, contracciones, cambios abruptos de área transversal, interfases, entre otras.

Existen diferentes maneras de evaluar la independencia numérica de una malla computacional. En función del nivel de detalle, aumenta el nivel de complejidad. La Figura 82 presenta el algoritmo general para evaluar la independencia numérica de las mallas utilizadas en la separación de fases del gas natural.

En general, funciona de la siguiente manera: después de definida y construida la geometría

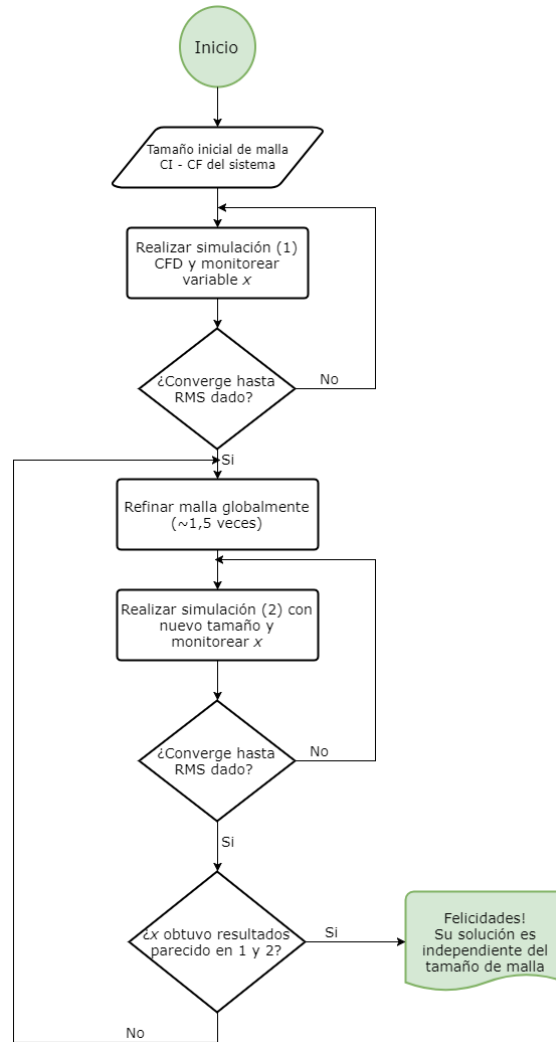


Figura 82. Algoritmo general para desarrollar tests de independencia numérica de las mallas

en un *software* de CAD se crea una malla base, bien sea hexaédrica o tetraédrica, denominada malla “gruesa” o “grosera”, es decir, una malla con volúmenes relativamente grandes comparados con la escala de flujo que se desea analizar. Con esta primera malla se realiza la simulación del proceso que se está estudiando, donde se incluyan los fluidos seleccionados, las condiciones iniciales y de frontera, los parámetros de discretización, entre otros. Si es una simulación en estado estable se monitorean los residuales de manera que se obtenga la convergencia deseada; si es en

estado transitorio se establece un tiempo de flujo real para la simulación en función del tiempo de residencia de los fluidos dentro del equipo y se verifica la convergencia en cada paso de tiempo. Una vez la simulación converge, en la etapa de post–procesamiento de datos se analiza una variable de respuesta (a elección del usuario), en un punto clave (o cualquiera) de la geometría o del desarrollo del flujo. Ese valor de la variable de respuesta ofrece el primer punto de la gráfica de independencia numérica de la malla.

A continuación la malla se refina globalmente, de tal forma que al final resulte una malla con un número de volúmenes aproximadamente 1,5 veces mayor que la malla anterior. Cabe aclarar dos cosas: la primera es que existen varias reglas del dedo gordo para el escalamiento del tamaño de la malla computacional, este valor de 1,5 veces es un parámetro arbitrario que sirve de guía para mantener un aumento uniforme del número total de volúmenes de la malla; y segundo, el término “refinar globalmente” significa que deben tomarse todos los parámetros locales utilizados en la construcción de la malla y ajustarlos de tal forma que a nivel global se refleje el aumento de tamaño deseado.

Posteriormente, se realiza una nueva simulación con los mismos parámetros exactos de la anterior, utilizando la nueva malla refinada y se obtiene el valor de la variable de respuesta siempre en el mismo punto. Este procedimiento se repite tantas veces como sea necesario hasta obtener perfiles como los de las Figuras 32, 51 y 63.

Parámetros de calidad de la malla

Adicional al monitoreo de las variables de respuesta presentado en el algoritmo de la Figura 82 existen parámetros de calidad inherentes a la malla construida, los dos parámetros que se verificaron en las mallas de la presente tesis fueron dos: la oblicuidad y la ortogonalidad.

Oblicuidad. La oblicuidad o asimetría (*skewness*) permite establecer qué tan cerca están los volúmenes de tener una cara ideal. Una cara ideal para un elemento triangular (2D) o tetraédrico (3D) es un triángulo equilátero perfecto (Figura 83); en el caso de mallas hexaédricas, lo ideal es obtener cara “equiangulares”. En ambos casos existe la posibilidad de presentarse oblicuidades las cuales disminuyen la calidad de la malla. La Figura 83 presenta también una escala aproximada sobre la cual debe mantenerse la oblicuidad de los elementos de malla. Lo deseable es que permanezca en el intervalo entre 0 y 0,25. El valor máximo aceptable es de 0,79; de lo contrario el *software* tendrá problemas de convergencia debidos a la calidad de la malla.

Ortogonalidad. La Figura 84 nos conduce a una idea de la ortogonalidad: considere un elemento con tres vectores de interés; el vector normal a la cara, es decir, el vector que se proyecta hacia afuera del elemento (\vec{A}_i); el vector que se proyecta desde el centroide de la celda (elemento) hasta el centroide de la cara (\vec{f}_i) y el vector que se proyecta desde el centroide del elemento al centroide del elemento adyacente (\vec{c}_i). El parámetro de ortogonalidad describe que tan bien empalmado está un elemento con respecto al otro. En cada cara i se calculan dos cantidades:

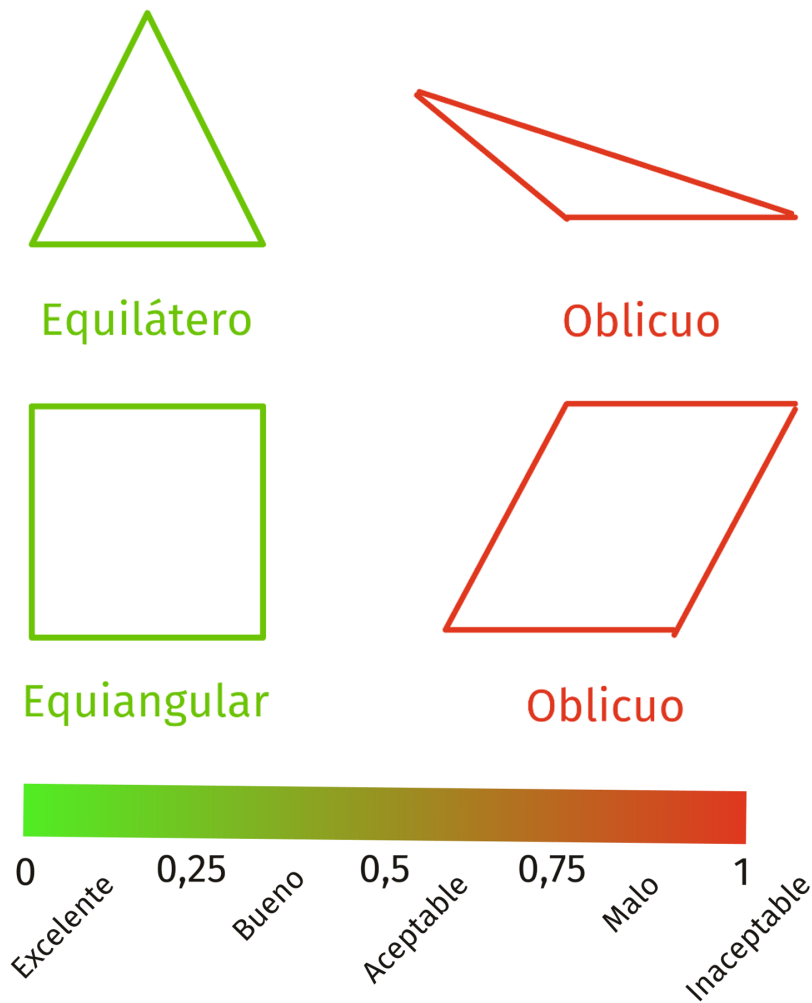


Figura 83. Diagrama esquemático e intervalo del parámetro de oblicuidad

el producto punto normalizado del vector \vec{A}_i y el vector \vec{f}_i ; así como el producto punto normalizado entre \vec{A}_i y \vec{c}_i , así:

$$\frac{\vec{A}_i \cdot \vec{f}_i}{|\vec{A}_i| |\vec{f}_i|} \quad (269)$$

$$\frac{\vec{A}_i \cdot \vec{c}_i}{|\vec{A}_i| |\vec{c}_i|} \quad (270)$$

El mínimo valor entre los resultados de las ecuaciones (269) y (270) para todas las caras define la ortogonalidad de la celda. Si existe un desfase entre los distintos vectores normales tanto de las caras como de los centroides, la calidad de la malla disminuirá. Es recomendable evitar valores de ortogonalidad por debajo de 0,2.

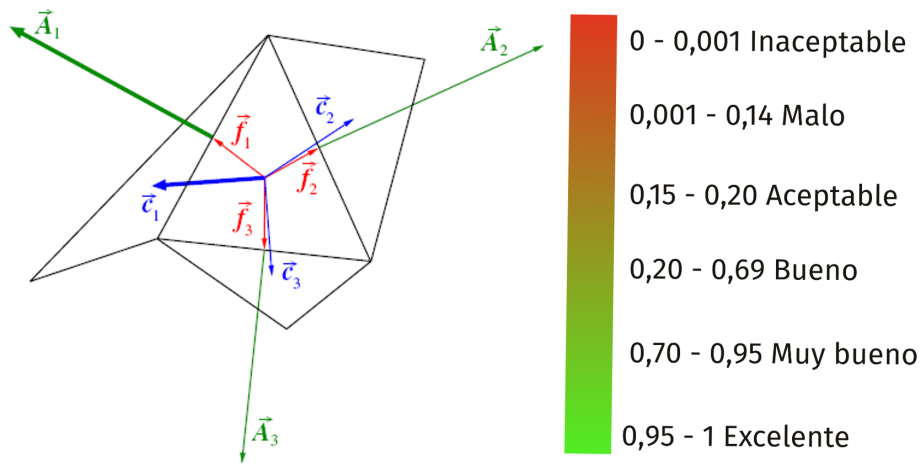


Figura 84. Diagrama esquemático e intervalo del parámetro de ortogonalidad

Apéndice B. Especificación de los separadores gravitacionales

A partir del trabajo experimental realizado por Austrheim et al. (2008), fue adaptado y construido el separador gravitacional de la Figura 85. Este separador fue utilizado tanto para la validación de los modelos multifase como para el análisis de separación de las fases del gas natural a alta presión del Capítulo 6.

Adicionalmente fue realizado con propósito de trabajos futuros el dimensionamiento de un separador vertical y horizontal (Figuras 86 y 87 respectivamente) adecuados para el pre-tratamiento de gases provenientes de campos menores, es decir, no mas de 1 MPCD. La variable base para los diseños es la constante empírica de Souders and Brown (1934), K (ecuaciones 74 y 75); con ayuda de la literatura (Monnery and Svrcek, 1994; Abernathy, 1993; Eugene and Megyesy, 2002) y la experiencia industrial (ExxonMobil, 1999; Requena and Rodríguez, 2006; Shell, 2012).

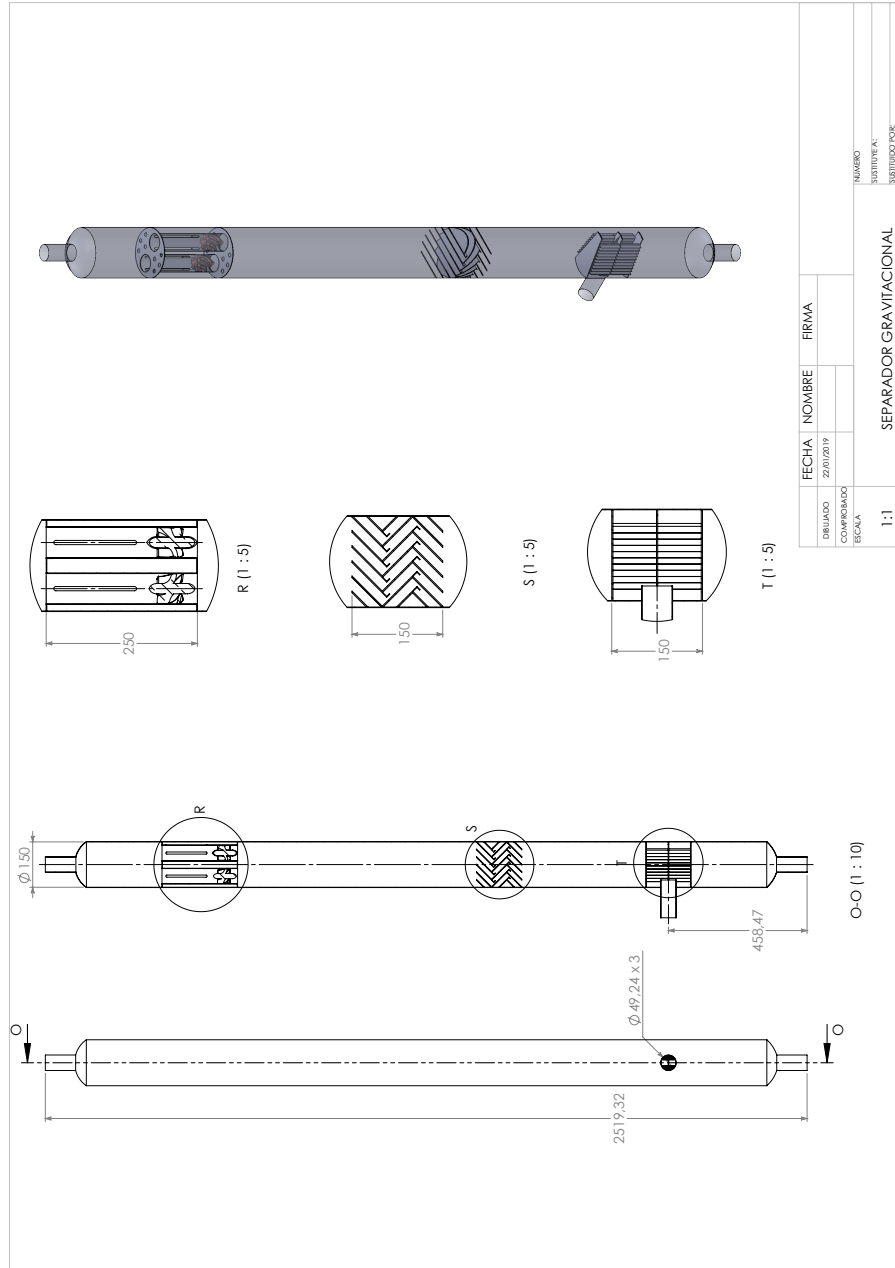


Figura 85. Plano del separador gravitacional usado en el Capítulo 6, escala 1:10 y dimensiones en mm

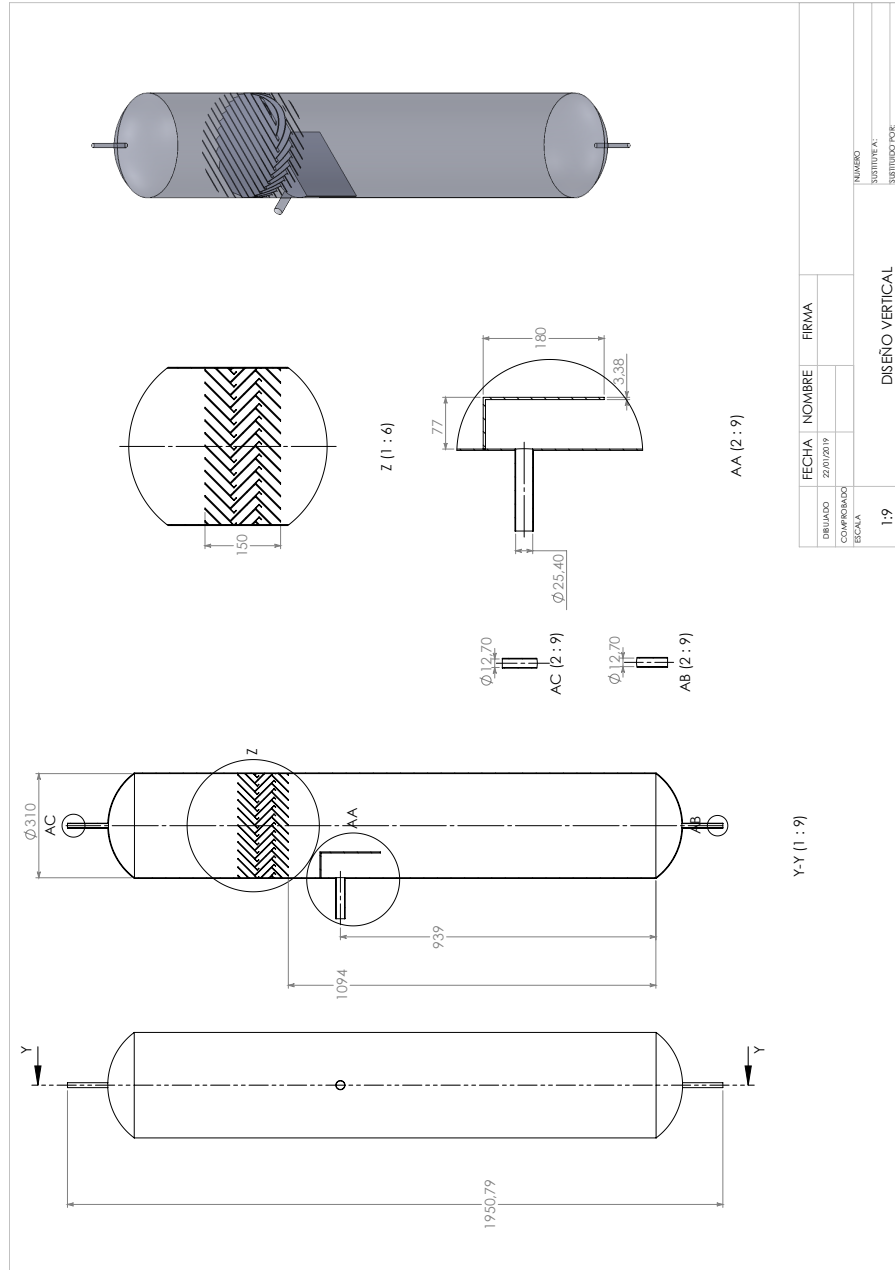


Figura 86. Plano del separador vertical basado en el diseño propuesto para alta presión, escala 1:9 y dimensiones en mm

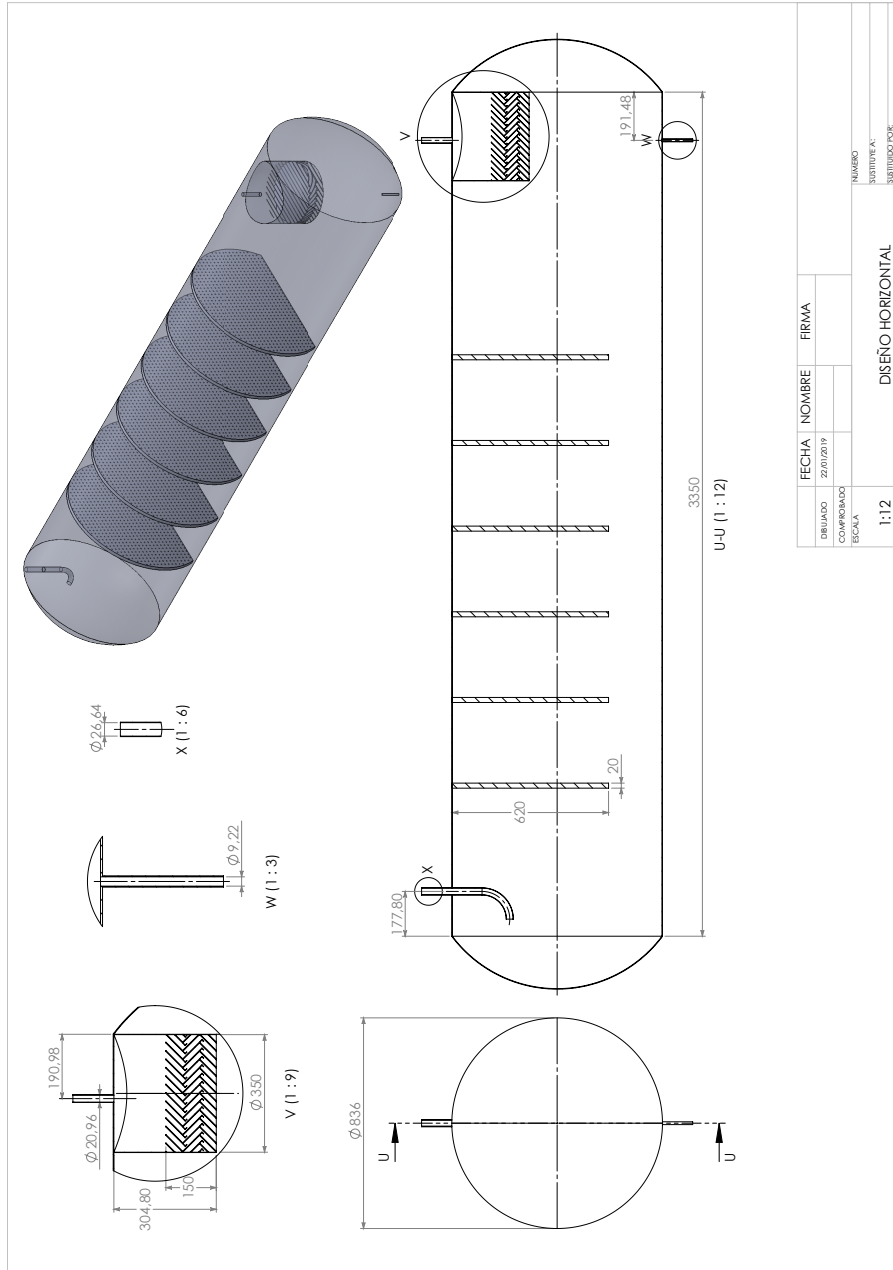


Figura 87. Plano del separador horizontal basado en el diseño propuesto para alta presión, escala 1:12 y dimensiones en mm

Apéndice C. Algoritmo utilizado para el cálculo de la formación de gota

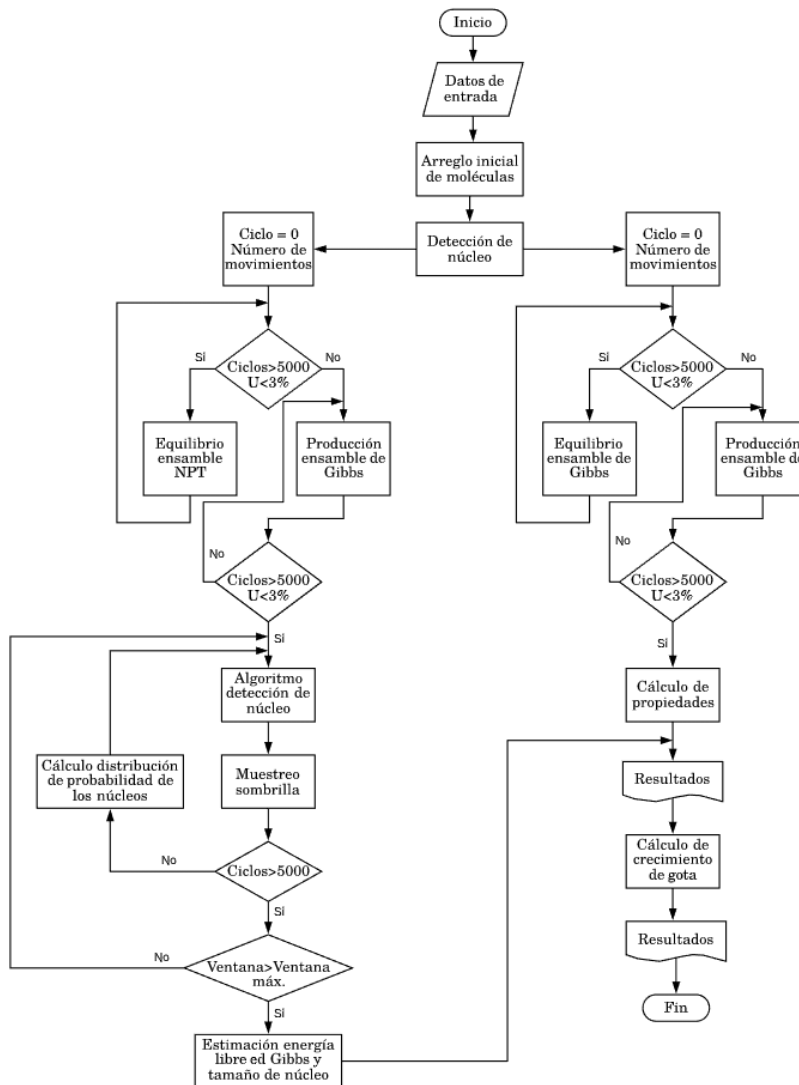


Figura 88. Algoritmo general para el cálculo de la formación de una gota de gas natural utilizando simulación molecular y el modelo de Young (1993); Fuentes-Osorio et al. (2018)