

EXTENSIÓN DEL MODELO PREDICTIVO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE
PARAFINA “MICHIGAN WAX PREDICTOR” A UN CAMPO DE FLUJO BIDIMEN-
SIONAL UTILIZANDO DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

PEDRO ALEJANDRO FELIPE BECERRA SIERRA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
MAESTRÍA EN INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA

2019

EXTENSIÓN DEL MODELO PREDICTIVO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE
PARAFINA “MICHIGAN WAX PREDICTOR” A UN CAMPO DE FLUJO BIDIMEN-
SIONAL UTILIZANDO DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

PEDRO ALEJANDRO FELIPE BECERRA SIERRA

Trabajo de grado para optar al título de
Magíster en Ingeniería Química

Director

Arlex Chaves Guerrero. Ph.D. Ingeniería Química

Codirectores

David Fuentes Díaz. Ph.D. Tecnología Energética

Helver Álvarez Castro. Ph.D. Ingeniería Química

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FISCOQUÍMICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA
MAESTRÍA EN INGENIERÍA QUÍMICA
BUCARAMANGA

2019

DEDICATORIA

A la memoria de Jesús María Becerra Hernandez.

Gran ingeniero, tío y amigo.

AGRADECIMIENTOS

A mi director y codirectores por su infinita paciencia y dedicación, sin su ayuda no hubiera sido posible realizar este trabajo.

A cada una de las personas que compartió conversaciones y momentos conmigo en estos años; aunque no lo sepan, cada una de sus acciones hizo de este proceso un camino más ameno.

CONTENIDO

Pág.

INTRODUCCIÓN.....	18
1. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE SOBRE MODELOS DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA	22
1.1 <i>WAX APPEARANCE TEMPERATURE</i>	22
1.2 MECANISMOS DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS	23
1.3 MECANISMO DE DIFUSIÓN MOLECULAR EN LA FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINAS	26
1.4 DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL	28
1.5 MODELOS DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINAS	31
2. METODOLOGÍA PARA EL DESARROLLO DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA	54
2.1 PLANTEAMIENTO DEL MODELO DE SIMULACIÓN:.....	54
2.2 VALIDACIÓN DE LAS CLASES DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA:.....	63
2.3 VALIDACIÓN DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINAS EN UN PROCESO CON CRUDO SINTÉTICO:	64
2.4 ANÁLISIS DEL CASO BASE DE ESTUDIO INCLUYENDO LA COMPONENTE RADIAL DE LA VELOCIDAD:.....	65
3. DESARROLLO DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA....	67
3.1 CAMPO DE FLUJO	67
3.2 TRANSFERENCIA DE MASA Y ENERGÍA	68
3.3 CONDICIONES DE FRONTERA	70
3.4 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN FVM	71
3.5 MODELO DE CRECIMIENTO Y ENVEJECIMIENTO DEL DEPÓSITO	78
3.6 ALGORITMO DE CÁLCULO.....	86
4. RESULTADOS DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA	90
4.1 VALIDACIÓN INDIVIDUAL DE LAS CLASES DE C++ IMPLEMENTADAS	90

4.2 DIFUSIÓN	92
4.3 CONVECCIÓN-DIFUSIÓN	94
4.4 CAMPO DE FLUJO (NAVIER-STOKES)	99
4.5 ANÁLISIS DE MALLA PARA EL PROBLEMA DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS..	107
4.6 VALIDACIÓN DEL CRECIMIENTO Y ENVEJECIMIENTO DE DEPÓSITOS DE PARAFINA UTILIZANDO UN CAMPO DE FLUJO UNIDIMENSIONAL	112
4.7 EVALUACIÓN DE LA FORMACIÓN DE DEPÓSITOS USANDO UN CAMPO DE FLUJO BIDIMENSIONAL.....	139
5. CONCLUSIONES	147
6. RECOMENDACIONES	149
BIBLIOGRAFÍA.....	150
ANEXO A. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS	160

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1 Tubería tapada por depósitos de parafina en las paredes.	18
Figura 2 Uso de una reacción química para contrarrestar la formación de depósitos de parafinas en tuberías.	19
Figura 1 Esquema de los dos tipos de parafina que podrían causar la formación de depósitos en la tubería.....	24
Figura 2 Precipitación, difusión y acumulación de compuestos parafinicos en una pared.....	26
Figura 3 Fuerzas ejercidas por el fluido sobre el depósito de parafinas.	39
Figura 4 Envejecimiento del depósito para diferentes temperaturas de seno/pared.	40
Figura 5 Difusión a través de aberturas equi-espaciadas o poros.	41
Figura 6 Perfil radial de concentración de parafinas para un número de Reynolds de 7350 a diferentes valores de kr	43
Figura 7 Metodología para el desarrollo del modelo de simulación	56
Figura 8 Distribución de carbonos para las parafinas en el crudo mobil M140.	59
Figura 9 Curva de solubilidad para las parafinas en el crudo mobil M140.	59
Figura 10 Radio interno de la tubería y fracción másica de las parafinas.....	61
Figura 11 Cambios en la distribución de los carbonos dentro del depósito.	61
Figura 12 Montaje experimental.....	65
Figura 13 Aspecto final promedio de los cristales de parafina para distintos caudales	69
Figura 14 Dominio de simulación.....	71
Figura 15 Dominio discretizado unidimensionalmente.....	72
Figura 16 Notación para un espacio bidimensional discretizado en volúmenes de control	73
Figura 17 Notación para distancias en un espacio unidimensional discretizado en volúmenes de control.....	73
Figura 18 Discretización de un dominio en coordenadas cilíndricas.....	74

Figura 19 Dominio de simulación para coordenadas cilíndricas.	74
Figura 20 Elemento cilíndrico 2D.	75
Figura 21 Balance radial de parafinas.	81
Figura 22 Acumulación en la interfase del depósito.	84
Figura 23 Espesor del depósito.	86
Figura 24 Diagrama de flujo general.	87
Figura 25 Loop de cálculo para NS.	88
Figura 26 Diagrama cálculo del crecimiento y envejecimiento.	89
Figura 27 Estructura de clases para la implementación del problema de acumulación.	91
Figura 28 Dominio para la conducción de calor en un cilindro hueco	93
Figura 29 Perfil axial de temperatura para $r=0.9$ dentro de la pared del cilindro.	93
Figura 30 Contornos de temperatura para el plano r - z en un cilindro hueco.	94
Figura 31 Dominio para el estudio del problema de Graetz.	95
Figura 32 Contornos de temperatura para el problema de Graetz.	96
Figura 33 Perfil de temperatura axial para $r=0$	96
Figura 34 Dominio para el estudio de un problema de calentamiento de un fluido a través de un tubo circular.	97
Figura 35 Contornos de temperatura para el problema de calentamiento de un fluido a través de un tubo circular.	98
Figura 36 Perfil de temperatura axial en $r = 0$	99
Figura 37 Dominio para la simulación de flujo entre placas no paralelas.	101
Figura 38 Velocidad axial como función de la posición en x	101
Figura 39 V_x como una función de la posición y para un corte en $x = 0.5L$	102
Figura 40 V_y como una función de la posición en y para un corte en $x = 0.5L$	103
Figura 41 Geometría de un ducto con una sección convergente.	103
Figura 42 Dominio de simulación para el flujo en un ducto con sección convergente.	105
Figura 43 Contornos de velocidad para el dominio de simulación de un ducto con sección convergente.	105

Figura 44 Perfil de velocidad axial para las tres secciones del ducto.	106
Figura 45a Error para la temperatura radial para la sección media.	108
Figura 46a Error para la temperatura radial para la sección media.	109
Figura 47 Error en el cálculo de la clase de NS para distintos valores del parámetro de relajación.....	111
Figura 48 Residuo de las mallas.....	111
Figura 49 Error en el cálculo de la clase de NS para distintos valores del parámetro de relajación.....	112
Figura 50 Radio interno promedio de la tubería para el set 1 en los 5 días de formación del depósito.	114
Figura 51 Efecto de la constante de precipitación sobre el perfil de concentración de parafinas en el depósito.	115
Figura 52 Radio promedio para distintas secciones de la tubería ($t = 5\text{días}$).	115
Figura 53 Temperatura radial en distintas secciones de la tubería ($t=5\text{días}$).	116
Figura 54 Comparación entre el valor experimental, el modelo IHMT, el modelo de solubilidad y el modelo computacional desarrollado por Lee	117
Figura 55 Espesor del depósito para distintos valores de k_r, cloud en los 5 días de formación del depósito.	118
Figura 56 F_w promedio para el set 1 en los 5 días de formación del depósito. ...	118
Figura 57 Cambio en la fracción másica del depósito realizando un ajuste en el parámetro α	120
Figura 58 Difusividad efectiva para una dependencia lineal y no lineal entre los parámetros α y F_w	120
Figura 59 Difusividad efectiva en la sección media de la tubería ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).....	121
Figura 60 Temperatura radial en la sección media de la tubería para el set 1 ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).	122
Figura 61 Fracción másica en la dirección radial para el set 1 ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).	123
Figura 62 Espesor del depósito para el set 2 en los 5 días de formación del depósito.	

.....	124
Figura 63 Fracción másica promedio para el set 2 en los 5 días de formación del depósito.	124
Figura 65 Fracción másica en la dirección radial para el set 2 ($z = 1.22m$ y $t = 5días$).....	125
Figura 66 Espesor del depósito para un caudal de 1 gpm en los 4 días de formación del depósito.....	127
Figura 67 Espesor del depósito para un caudal de 2 gpm en los 4 días de formación del depósito.....	127
Figura 68 Espesor del depósito para un caudal de 1 gpm en los 4 días de formación del depósito.....	127
Figura 69 Espesor del depósito para una temperatura de pared de $4.5^{\circ}C$ en los 4 días de formación del depósito.	128
Figura 70 Espesor del depósito para una temperatura de pared de $9.5^{\circ}C$ en los 4 días de formación del depósito.	128
Figura 71 .Espesor del depósito para una temperatura de pared de $14.5^{\circ}C$ en los 4 días de formación del depósito.	128
Figura 72a Temperatura de pared a $4.5^{\circ}C$ y distintos flujos volumétricos ($z = 1.22m$)	129
Figura 73 Curva de solubilidad para el crudo en el segundo grupo de pruebas. .	131
Figura 74 Espesor final del depósito para 2 gpm, $T_{wall} = 4.5^{\circ}C$ y $t = 4días$	132
Figura 75 Fracción másica en la dirección radial para el set 1 ($z = 1.22m$ y $t = 4días$).....	132
Figura 76 Datos numéricos y experimentales para el envejecimiento radial del depósito para el set 1 en los 4 días de formación del depósito.	133
Figura 77 Envejecimiento del depósito para el set 1 en los 4 días de formación del depósito.	134
Figura 78 Datos numéricos y experimentales para el envejecimiento del depósito para el set 1 en los 4 días de formación del depósito.	135
Figura 79 Fracción másica en la dirección radial para el set 2 ($z = 1.22m$ y $t =$	

4dias).....	135
Figura 80 Datos numéricos y experimentales para el envejecimiento radial del depósito para el set 2 en los 4 días de formación del depósito.	135
Figura 81 Envejecimiento del depósito en el tiempo para el set 2 en los 4 días de formación del depósito.	136
Figura 82 Datos numéricos y experimentales para el envejecimiento del depósito para el set 2 en los 4 días de formación del depósito.	137
Figura 83 Forma del depósito a lo largo de la tubería para el grupo 1 y grupo 2.	138
Figura 85 Perfil radial de concentración para la sección media de la tubería ($z = 1.22m$ y $t = 5dias$).	140
Figura 86 Velocidad axial para la sección media de la tubería ($z = 1.22m$ y $t = 5dias$).	141
Figura 87 Velocidad radial para la sección media de la tubería ($z = 1.22m$ y $t = 5dias$).	141
Figura 88 Predicción del espesor del depósito hecha por Hoteit en los 5 días de formación del depósito.	142
Figura 89 Espesor adimensional del depósito en los 5 días de formación del depósito.	143
Figura 90 Perfil radial de temperatura para la sección media de la tubería ($z = 1.22m$ y $t = 5dias$).	143
Figura 91 Forma del depósito para un caudal de 1 gpm y una temperatura de pared $7.2^{\circ}C$ ($t = 5dias$).	145
Figura 92 Dominio discretizado unidimensionalmente.....	161
Figura 93 Sistema de notación general para un nodo general P y sus vecinos...	162
Figura 94 Nodo general P y sus vecinos en una sección de malla bidimensional.	166
Figura 95 Modelo de tanques y tubos.....	169

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1 Condiciones de frontera para el modelo de simulación.	71
Tabla 2 Flux convectivo y difusivo.....	77
Tabla 3 Difusividades y términos fuente.....	78
Tabla 4 Información requerida para el problema de formación de depósitos.....	107
Tabla 5 Datos del crudo para el primer grupo de pruebas	112
Tabla 6 Condiciones de operación para el primer grupo de pruebas	113
Tabla 7 Datos del crudo para el segundo grupo de pruebas.....	126
Tabla 8 Condiciones de operación para el segundo grupo de pruebas.	126
Tabla 9 Coeficientes esquema Upwind.	170

LISTA DE ANEXOS

pág.

ANEXO A. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS.....	161
---	-----

RESUMEN

TÍTULO: Extensión del modelo predictivo de formación de depósitos de parafina “Michigan Wax Predictor” a un campo de flujo bidimensional utilizando dinámica de fluidos computacional*

AUTOR: Pedro Alejandro Felipe Becerra Sierra**

PALABRAS CLAVE: Deposición, Parafina, CFD, transporte, flujo.

DESCRIPCIÓN: La presencia de depósitos de parafina en líneas de flujo puede ocasionar problemas de transporte, incrementando los costos relacionados a mantenimiento y operación, y aunque existen distintos métodos preventivos y correctivos para este problema, gran parte de estos requieren conocer información tal como la ubicación, dureza y tamaño del depósito de parafina formado. Por esta razón, el modelamiento matemático del proceso de formación de depósitos de parafina en tuberías ha sido un tema con un desarrollo continuo en las últimas décadas. Sin embargo, los modelos desarrollados suelen reducir el problema a una predicción de la información requerida a partir de variables del proceso mediante correlaciones experimentales; consideran los efectos convectivos mediante correlaciones aplicadas en la interfase del depósito, y en caso de considerar la convección directamente, se suele despreciar el efecto convectivo en la dirección radial. Este trabajo propone representar el proceso de una manera más apegada a la física, por esto se propone la extensión del modelo conocido como «Michigan Wax Predictor» a un campo de flujo bidimensional. El modelo propuesto en este trabajo resuelve el transporte de masa, energía y momento para flujo laminar y monofásico en una tubería cilíndrica utilizando dinámica de fluidos computacional (CFD) y el método de volúmenes finitos (FVM). Este trabajo presenta la solución numérica obtenida y los resultados experimentales obtenidos de la literatura con los cuales se verificó el funcionamiento del modelo.

* Trabajo de investigación.

** Facultad de Ingenierías Físico-Químicas, Escuela de Ingeniería Química. Director: Arlex Chaves, Ingeniero Químico, Ph.D.

ABSTRACT

TITLE: Extension of the wax deposition predictive model “Michigan Wax Predictor” to a bidimensional flow field using computational fluid dynamics*.

AUTHOR: Pedro Alejandro Felipe Becerra Sierra**.

KEYWORDS: Deposition, Wax, CFD, mass transfer, flow.

DESCRIPTION: The presence of wax deposits in pipelines might cause transport problems, increasing the maintenance and operational costs. Although, there are preventive and corrective methods for this problem, most of them require information such as: location, hardness and thickness of the deposit. For this reason, the mathematical modeling of the wax deposition process in pipelines has been a topic with continuous development in the last decades. However, the models developed: reduce the problem to a prediction of the required information based on the process data through experimental correlations; include the convective effects using correlations applied to the deposit interface, and in case the models include the convective effects directly, the assumption of neglecting the radial convection is employed often. This work aim to represent the physics of the process in a faithful way, therefore, the extension of the model known as “Michigan Wax Predictor” to a bidimensional flow field is proposed. The proposed model solves the mass, energy and momentum transport for a single-phase laminar flow in a cylindrical pipeline using computational fluid dynamics (CFD) and the finite volume method (FVM). This document presents the numerical solution obtained using the model and the experimental results obtained from the literature, used to validate the model performance.

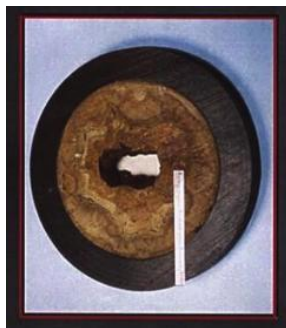
* Master Thesis

** Facultad de Ingenierías Físico-Químicas, Escuela de Ingeniería Química. Director: Arlex Chaves, Ingeniero Químico, Ph.D.

INTRODUCCIÓN

Los crudos son una mezcla compleja de compuestos saturados (parafinas), aromáticos, asfaltenos, resinas, y naftas¹. Entre estos compuestos, las parafinas de alto peso molecular y los asfaltenos han sido reconocidos como los de mayor responsabilidad en los problemas generados en los procesos de extracción y transporte por tuberías submarinas². La formación de depósitos de parafinas en la superficie interna de las tuberías es un fenómeno común en este tipo de transporte de crudos en donde las temperaturas rodean los 4°C, aunque en extracción en tierra («Onshore») también se presenta. Este fenómeno ocurre a medida que el crudo transportado se aleja del yacimiento sufriendo una disminución en su temperatura debido a las pérdidas de energía con los alrededores. Una vez la temperatura del crudo desciende a valores inferiores a su temperatura de aparición de cera (WAT por sus siglas en inglés, «Wax Appearance Temperature») ³ la solubilidad de las parafinas en el crudo disminuye generando la precipitación y acumulación de estas sobre la superficie de la tubería ⁴ como se muestra en la Figura 1.

Figura 1 Tubería tapada por depósitos de parafina en las paredes.



Tomada de Singh *et al.* ⁵.

¹ Hyun Su Lee, *Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines* (Ph.D. dissertation. Chemical Eng., University of Michigan, Michigan, 2008).

² Hyun Su Lee, *Ibíd.*.

³ A Berne-Allen y Lincoln T Work, "Solubility of Refined Paraffin Waxes in Petroleum Fractions", *Industrial & Engineering Chemistry*, 30.7 (1938), 806–12.

⁴ Jr. Reistle, C. E., *Paraffin and Congealing-Oil Problems*, 1932.

⁵ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5

Una vez formado el depósito, deben aplicarse métodos correctivos ya sean químicos o mecánicos. El método mecánico más común, es el «pigging»; consiste en introducir una sonda «pig» con cepillos o cuchillas a través de la tubería para retirar los sólidos de las paredes⁶ y su costo puede ascender a 35000 dólares por milla de tubería⁷. Sin embargo, debe conocerse la forma y dureza del depósito, de lo contrario se corre el riesgo de que el «pig» quede atascado, empeorando la situación⁸. Una situación desafortunada usando el «pigging» ocurrió en el golfo de México en junio de 2005, específicamente en la línea de exportación de crudo MP 225 en «The Marlin Tension Leg Platform». Debido a fallas técnicas en una válvula del sistema, el «pigging» no pudo ser realizado en las fechas establecidas, por lo que debió ser postergado. Sin embargo, para la nueva fecha de realización, los operadores desconocían el estado del depósito y se decidió atacar gradualmente el problema, enviando cada vez sondas con mayores diámetros y niveles de agresividad. El accidente ocurrió debido a que la evaluación del estado de la sonda y de la cantidad de parafinas removidas fue subjetivo⁹, esto sumado a una pobre comunicación con el centro de operaciones llevó al atascamiento de la sonda dentro de la línea de exportación.

Por otro lado, el método químico correctivo para re-disolver las parafinas en el crudo es basado en una reacción química exotérmica, Figura 2. Infortunadamente, este método posee dos grandes desventajas como son el alto costo¹⁰ y los riesgos implicados en una liberación de calor no controlada que podría afectar la integridad del sistema si no se conoce con precisión la composición y localización del depósito.

Figura 2 Uso de una reacción química para contrarrestar la formación de depósitos

(2000), 1059–74.

⁶ Thomas S Golczynski y Elijah C Kempton, “Understanding wax problems leads to deepwater flow assurance solutions”, *World Oil*, 227.3 (2006).

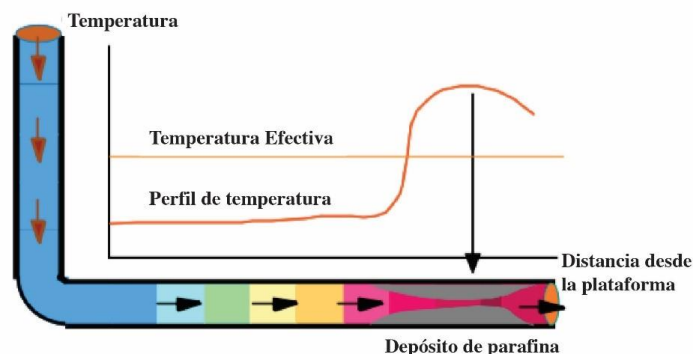
⁷ Nicholas Newman, “Cleaning, Maintaining, Inspecting all Part of a Day’s Work”, *Pipeline & Gas Journal*, 243.10 (2016), 51–52.

⁸ G Fung et al., “To Pig or Not to Pig: The Marlin Experience With Stuck Pig”, en *Offshore Technology Conference, 1-4 May, Houston, Texas, USA* (Offshore Technology Conference, 2006), p. 1–7.

⁹ G Fung et al., *Ibíd*, p. 1–7.

¹⁰ Overa S. Majeed A, Bringedal B, “Model calculates wax deposition for N. Sea oils.”, *Oil and Gas Journal*, 88.25 (1990), 63–69.

de parafinas en tuberías.



(Adaptada de: Nguyen¹¹)

En general, este problema ha generado grandes pérdidas económicas a la industria del petróleo generando costos de reparación que suelen llegar a cifras tan elevadas, que en algunos casos, ha sido más económico abandonar la estructura y realizar la construcción de una nueva. Ese fue el caso del campo de Lasso en el Reino Unido, donde la formación de depósitos era tan severa y frecuente que se abandonó la instalación de un costo aproximado de USD \$100'000.000¹². Por otro lado, la construcción y extracción costa afuera es cada día más grande, llegando a representar el 29% de la extracción total mundial de crudo en el año 2015 y es liderada por países como Arabia Saudita (13%), Brasil (10.9%), México (7%), Noruega (7%) y Estados Unidos (5.9%) ¹³. No obstante, debido a la gran crisis económica por la que ha pasado la industria del petróleo en los últimos años, se ha propuesto reducir la exploración y construcción de nuevos puntos de extracción e iniciar la mejora de los procesos en las actuales plataformas para incrementar la eficiencia, reduciendo los costos de producción y transporte. Por estas razones es

¹¹ D A Nguyen, "Fused chemical reactions to remediate paraffin plugging in sub-sea pipelines" (University of Michigan, 2004).

¹² Duc A Nguyen, H Scott Fogler y Sumaeth Chavadej, "Fused Chemical Reactions. 2. Encapsulation: Application to Remediation of Paraffin Plugged Pipelines", Industrial & Engineering Chemistry Research, 40.23 (2001), 5058–65, Singh, Venkatesan, Fogler, et al.

¹³ Matthew Manning, "U.S. Energy Information Administration. Independent Statistics & Analysis.", *Offshore production nearly 30% of global crude oil output in 2015* <<https://www.eia.gov/todayinenergy/detail.php?id=28492>> [consultado 30 noviembre 2018].

de suma importancia el entendimiento de los mecanismos y fenómenos de formación de depósitos de parafinas, con el fin de desarrollar técnicas que permitan el empleo de los mecanismos preventivos y correctivos de manera adecuada. Esto le reduciría costos a la industria petrolera en términos de gastos de operación, los cuales en el caso del transporte en tierra (en el cual este problema es aún menor) han sido reportados alrededor de los \$4.5-\$5 millones de dólares anuales¹⁴.

Uno de los modelos importantes en la predicción del espesor y envejecimiento de depósitos de parafinas es el «Michigan Wax Predictor» desarrollado en la Universidad de Michigan por el Profesor Scott Fogler y colaboradores. Sin embargo, una de las más importantes simplificaciones del modelo es asumir que el campo de velocidad es unidireccional ($v \approx v_z(z)i_z$) lo que llevaría a una disminución en la precisión del modelo especialmente cuando el espesor del depósito es grande y su forma es irregular. En este sentido se planteó la siguiente pregunta de investigación: ¿La inclusión de un campo de velocidad bidimensional ($v \approx v_r(r, z)i_r + v_z(r, z)i_z$) en el modelo implementado por Fogler y conocido como «Michigan Wax Predictor», tiene un efecto significativo sobre la predicción del espesor y envejecimiento del depósito de parafinas? Para resolver esta pregunta, en este trabajo se complementó el modelo MWP a través del cálculo del campo de flujo considerando la forma y espesor del depósito para luego ser acoplado a los balances de energía y especies químicas. El modelo se solucionó usando la técnica de volúmenes finitos (FVM). Para lo cual fue necesario implementar el balance en la interfase sólido-líquido acordes al FVM, y la técnica de bloqueo de celdas para la representación del depósito en el cálculo del campo de flujo. Una vez desarrollado, implementado y resuelto numéricamente, se estudiaron los efectos de la componente de velocidad radial en las variables de respuesta del proceso (temperatura, concentración, y espesor del depósito) de manera cualitativa y cuantitativa.

¹⁴ C A Bilderback y L A McDougall, "Complete Paraffin Control in Petroleum Production", *Journal of Petroleum Technology*, 1969, 1151–56.

1. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE SOBRE MODELOS DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA

A continuación se explicará de manera breve los conceptos más importantes sobre mecanismos de formación de depósitos y propiedades de los crudos, con el fin de tener un mayor entendimiento sobre el proceso de acumulación de parafinas. Adicionalmente, se presentan algunos conceptos básicos de dinámica de fluidos computacional, y una revisión de los modelos comerciales y académicos actuales para la predicción de la formación de depósitos.

1.1 WAX APPEARANCE TEMPERATURE

Un parámetro importante en el estudio de la precipitación y de formación de depósitos de parafina en los procesos de producción y transporte de crudos es la temperatura de aparición de ceras (WAT) o punto de nube (*cloud point*). El WAT representa la temperatura más alta a la cual la nucleación y precipitación de componentes parafínicos se da durante el proceso de enfriamiento en el transporte por tuberías. Experimentalmente esta temperatura se puede definir como la temperatura a la cual se pueden detectar los primeros cristales de parafina, no obstante, dependiendo de la técnica, los primeros cristales pueden tener tamaños desde 55 nm hasta 1 μm ¹⁵, por esta razón, el valor del WAT para un mismo crudo puede variar dependiendo de la técnica empleada para medirlo. Sin embargo, este debe ser evaluado constantemente ya que el WAT puede verse alterado por cambios en el yacimiento y en las condiciones de operación en el proceso de transporte¹⁶. Si la temperatura del crudo decae a valores inferiores al WAT, los cristales de parafina pueden seguir creciendo, y dependiendo de las condiciones del flujo, se puede presentar acumulación de sólidos¹⁷.

¹⁵ Z. Huang, S. Zheng, y H.S. Fogler, *Wax Deposition: Experimental Characterizations, Theoretical Modeling, and Field Practices*, Emerging Trends and Technologies in Petroleum Engineering (CRC Press, 2016).

¹⁶ A. Hunt, "Uncertainties remain in predicting paraffin deposition", *Oil and Gas Journal*, 94.31 (1996), 1–9.

¹⁷ Daniel R Molina V., Emiliano Ariza Leon, y Arlex Chaves-Guerrero, "Understanding the effect of

1.2 MECANISMOS DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS

La formación de depósitos de parafinas en las tuberías es un problema ocasionado por la pérdida de energía térmica del crudo transportado hacia los alrededores, reduciendo su temperatura por debajo de la WAT. Esta condición térmica induce la precipitación de una parte de las parafinas en forma de cristales sólidos mientras que otra parte se mantiene disuelta.

A continuación se mencionan algunos mecanismos que se han propuesto en la literatura para explicar la formación de los depósitos de parafinas en la superficie de las tuberías, y que se fundamentan en el estado físico en que estas se encuentran en el crudo:

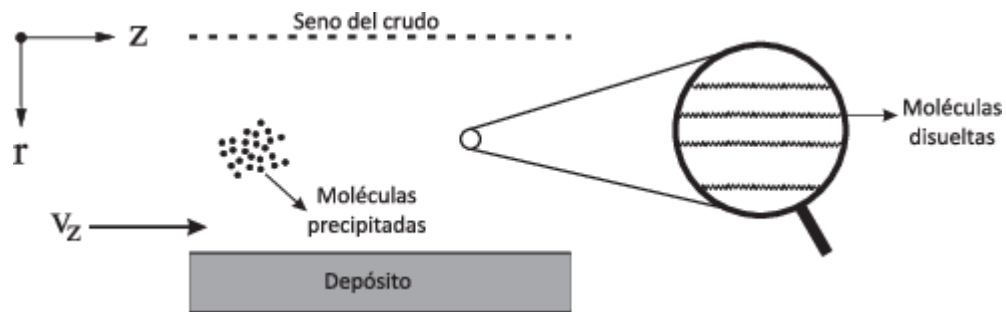
- Difusión molecular: gradientes de temperatura en dirección radial inducen un gradiente de concentración de parafinas en la misma dirección, generando la difusión de las moléculas disueltas de parafina hacia la pared y su posterior acumulación.
- “Shear dispersion”: las parafinas se depositan debido a la dispersión hacia la pared de las partículas precipitadas.
- Difusión Browniana: los choques entre partículas parafinicas en el crudo generan un movimiento aleatorio (Browniano) lo cual resulta en un transporte difusivo de los compuestos hacia la pared de la tubería.
- Sedimentación por gravedad: las parafinas se depositan debido al asentamiento de las partículas precipitadas de las parafinas hacia el fondo de la tubería.

La principal diferencia entre los mecanismos mencionados es el estado físico de las parafinas que contribuyen al proceso de formación de depósitos, como se muestra en la Figura 3. En el caso del mecanismo de difusión molecular, la parafina

chemical structure of asphaltenes on wax crystallization of crude oils from colorado oil field”, *Energy & Fuels*, 31.9 (2017), 8997–9005.

depositada está disuelta en el crudo, mientras que en los otros tres mecanismos el material depositado son las partículas de parafina suspendidas en el crudo. Con el fin de determinar cuáles de estos mecanismos tienen el mayor peso en el fenómeno, se han realizado distintos experimentos bajo condiciones de flujo similares a las empleadas en el transporte industrial de crudos.

Figura 3 Esquema de los dos tipos de parafina que podrían causar la formación de depósitos en la tubería.



Adaptada de: Huang *et al.*¹⁸

Estos experimentos han mostrado que el mecanismo de difusión browniana de partículas no es válido ya que debería darse desde la pared de la tubería hasta el seno del líquido, lo que es contrario a las observaciones experimentales¹⁹.

Por otro lado, el mecanismo de sedimentación por gravedad se ha considerado de escasa relevancia, ya que no se han encontrado depósitos más gruesos en el fondo que en el tope de la tubería. No obstante, el tema se encuentra abierto a discusión ya que existen diversos factores que podrían confirmar un aporte por sedimentación, entre estos el diámetro de tubería y el régimen de flujo, esto siempre y cuando se trate de flujo monofásico, en el caso de transporte de crudo-gas, el gas causa asimetrías en los depósitos.

¹⁸ Z. Huang, S. Zheng, y H.S. Fogler, *Wax Deposition: Experimental Characterizations, Theoretical Modeling, and Field Practices*, Emerging Trends and Technologies in Petroleum Engineering (CRC Press, 2016).

¹⁹ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

El «Shear dispersion» fue considerado inicialmente por varios investigadores²⁰ y ha sido incluido en el simulador de flujo industrial OLGA (abreviatura para “oil and gas simulator”). Sin embargo, en un estudio realizado por Bern, Withers y Cairns²¹ encontraron que la velocidad de formación del depósito no incrementaba al aumentar la velocidad de deformación del fluido. Otros trabajos basados en la teoría de mecánica de fluidos de partículas²² y los basados en velocimetría de partículas²³ encontraron que las partículas localizadas en la capa viscosa cerca a la pared tienden a ser re-arrastradas al seno del fluido por una fuerza de elevación generada por el flujo turbulento (conocida «Saffman lift force»), razón por la cual fue sugerido que este mecanismo no es significativo o incluso posible²⁴.

Finalmente, por los extensos estudios realizados en las últimas décadas²⁵ la difusión molecular fue encontrada como la mayor fuente de depósitos de parafinas

²⁰ J.J.C. Hsu y J.P. Brubaker, “Wax Deposition Measurement and Scale-Up Modeling for Waxy Live Crudes under Turbulent Flow Conditions”, en International Meeting on Petroleum Engineering (Society of Petroleum Engineers, 1995), pp. 14–17; E.D. Burger, T.K. Perkins y J.H. Striegler, “Studies of Wax Deposition in the Trans Alaska Pipeline”, *Journal of Petroleum Technology*, 33.06 (1981), 1075–86.

²¹ Peter A. Bern, Vincent R. Withers, y Roger J.R. Cairns, “Wax Deposition in Crude Oil Pipelines”, en *European Offshore Technology Conference and Exhibition* (Society of Petroleum Engineers, 1980).

²² J W Cleaver y B Yates, “Mechanism of detachment of colloidal particles from a flat substrate in a turbulent flow”, *Journal of Colloid And Interface Science*, 44.3 (1973), 464–74; P Saffman G., “The lift on a small sphere in a slow shear flow”, *Journal of Fluid Mechanics*, 22.02 (1965), 385–400.

²³ Javier Jiménez et al., “Ejection mechanisms in the sublayer of a turbulent channel”, *Physics of Fluids*, 31.6 (1988), 1311–13 <<https://doi.org/10.1063/1.866721>>; T. Urushihara, C. D. Meinhart, y R. J. Adrain, “Investigation of the logarithmic layer in pipe flow using Particle Image Velocimetry”, en *Near Wall Turbulent Flows* (Amsterdam, Netherlands., 1993), pp. 433–46; M. García, F. López, y Y. Niño, “Characterization of near-bed coherent structures in turbulent open channel flow using synchronized high-speed video and hot-film measurements”, *Experiments in Fluids*, 19.1 (1995), 16–28.

²⁴ Z. Huang, S. Zheng, y H.S. Fogler, *Wax Deposition: Experimental Characterizations, Theoretical Modeling, and Field Practices*, Emerging Trends and Technologies in Petroleum Engineering (CRC Press, 2016).

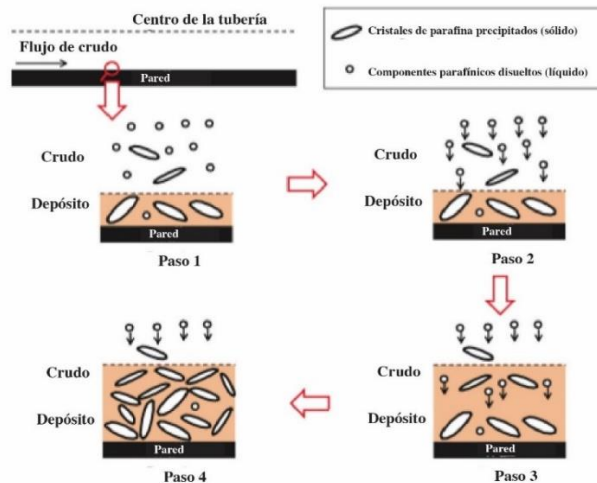
²⁵ Mark R Jemmett et al., “Applicability of Cloud Point Depression to “Cold Flow””, *Energy & Fuels*, 26.5 (2012), 2641–47; Elton B. Hunt Jr., “Laboratory Study of Paraffin Deposition”, *Journal of Petroleum Technology*, 14.11 (1962), 1259–69; T S Brown, V G Niesen y D. D. Erickson, “Measurement and Prediction of the Kinetics of Paraffin Deposition”, en SPE Annual Technical Conference and Exhibition (Houston, Texas: Society of Petroleum Engineers, 1993), p. 16; J.L Creek et al., “Wax deposition in single phase flow”, *Fluid Phase Equilibria*, 158–160 (1999), 801–11; Singh, Venkatesan, Fogler, et al.; Rainer Hoffmann y Lene Amundsen, “Single-Phase Wax Deposition Experiments”, *Energy & Fuels*, 24.2 (2010), 1069–80.

en el transporte de crudo en tuberías; en este mecanismo los cristales de parafina formados lejos de la pared no parecen contribuir a la formación del depósito, sino fluir con el crudo formando una suspensión en la mezcla.

1.3 MECANISMO DE DIFUSIÓN MOLECULAR EN LA FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINAS

Este mecanismo de formación de depósitos se divide en cuatro pasos principales ²⁶ y son representados en la Figura 4:

Figura 4 Precipitación, difusión y acumulación de compuestos parafinicos en una pared.



Adaptada de: Huang *et al.*²⁷

- Paso 1: Precipitación de las moléculas de parafina disueltas.
- Paso 2: Generación del gradiente radial de concentración de los componentes parafinicos disueltos.
- Paso 3: Acumulación de los componentes parafinicos en la superficie de un

²⁶ Z. Huang, S. Zheng, y H.S. Fogler, *Wax Deposition: Experimental Characterizations, Theoretical Modeling, and Field Practices*, Emerging Trends and Technologies in Petroleum Engineering (CRC Press, 2016).

²⁷ Zhenyu Huang, Hyun Su Lee, et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

depósito existente.

- Paso 4: Difusión interna de los componentes parafinicos en el depósito.

A continuación se comentan cada uno de estos pasos.

Paso 1: Precipitación de las moléculas de parafina disueltas

Cuando el crudo ha disminuido su temperatura por debajo de su WAT, los componentes parafinicos disueltos en el crudo comienzan a precipitarse e inician la formación de cristales. Estos cristales se pueden formar en cualquier punto del crudo siempre y cuando la temperatura sea inferior a su WAT, no obstante, solo las partículas que se precipitan cerca a la pared forman la capa incipiente del depósito. Este proceso también es conocido como nucleación.

Paso 2: Generación del gradiente radial de concentración de los componentes parafinicos disueltos

El modelo supone que el crudo cercano a la pared interna de la tubería alcanza temperaturas menores que las del centro de la tubería, por lo tanto, el grado de precipitación de los componentes parafinicos en la pared es mayor que en el centro del tubo, lo que resulta en un gradiente en la misma dirección. El gradiente radial de concentración genera una difusión radial de las partículas de parafina hacia la pared de la tubería.

Paso 3: Acumulación de los componentes parafinicos en la superficie de un depósito existente

La precipitación de los componentes parafinicos en la superficie del tubo contribuye a la formación del depósito. Una vez una capa incipiente ha sido formada, el límite del crudo se vuelve esta superficie del depósito, y a medida que la precipitación de los componentes disueltos se sigue dando, se presenta un crecimiento de este. Este fenómeno de acumulación se seguirá dando hasta que el sistema haya alcanzado un equilibrio en la concentración de las fases, esto es, que la concentración de parafinas en el sólido cercano a la interfase; en la interfase, y en el fluido cercano a

la interfase sean aproximadamente iguales.

Paso 4: Difusión interna de los componentes parafinicos en el depósito

A pesar de que la difusión trae constantemente moléculas de los componentes parafinicos hacia la interfase crudo-depósito, no todas las moléculas se depositan en la interfase, una fracción de las partículas se difunden hacia el interior del depósito resultando en un incremento de su contenido de parafinas. Este fenómeno se conoce como envejecimiento del depósito, y ha sido estudiado por un gran número de investigadores²⁸.

El depósito de parafinas que se forma no se considera como un sólido sino como una red de cristales de parafina precipitados, en la cual queda atrapado el crudo líquido formando un gel. La formación de esta estructura fue propuesta y validada por varios investigadores²⁹

1.4 DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

La técnica conocida como dinámica de fluidos computacional nació como una herramienta de estudio para casos donde pruebas experimentales no puedan ser hechas debido a condiciones extremas de operación (altos números de Reynolds, presión y temperatura). Posteriormente, evolucionó para convertirse en una

²⁸ H. J. Lund, "Investigation of Paraffin Deposition During Single-phase Liquid Flow in Pipelines" (University of Tulsa, 1998); Chengyu Bai y Jinjun Zhang, "Effect of Carbon Number Distribution of Wax on the Yield Stress of Waxy Oil Gels", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52.7 (2013), 2732–39; E.D. Burger, T.K. Perkins, y J.H. Striegler, "Studies of Wax Deposition in the Trans Alaska Pipeline", *Journal of Petroleum Technology*, 33.06 (1981), 1075–86; Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18; Ramachandran Venkatesan y H. Scott Fogler, "Comments on analogies for correlated heat and mass transfer in turbulent flow", *AIChE Journal*, 50.7 (2004), 1623–26; Ivan Noville y Lilia Naveira, "Comparison Between Real Field Data and the Results of Wax Deposition Simulation", en *SPE Latin America and Caribbean Petroleum Engineering Conference* (Mexico City, Mexico, 2012), p. 12; Rainer Hoffmann y Lene Amundsen, "Single-Phase Wax Deposition Experiments", *Energy & Fuels*, 24.2 (2010), 1069–80.

²⁹ M. Dirand et al., "Multicomponent paraffin waxes and petroleum solid deposits: structural and thermodynamic state", *Fuel*, 77.12 (1998), 1253–60; Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; R Venkatesan et al., "The strength of paraffin gels formed under static and flow conditions", *Chemical Engineering Science*, 60.13 (2005), 3587–98.

herramienta de simulación para distintos tipos de procesos (flujo en tuberías, aerodinámico, hidrodinámico, entre otros), ofreciendo resultados sin la necesidad de adquirir o construir los prototipos físicos de experimentación.

Esta técnica es una combinación entre la experimentación y teoría pura, brindando una tercera aproximación al análisis de procesos, reduciendo los costos de experimentación y ofreciendo un entorno más seguro para ésta³⁰. La dinámica de fluidos computacional (CFD) se basa en los métodos matemáticos de elementos y volúmenes finitos como método de solución para las ecuaciones que describen un problema. Inicialmente se plantea una transformación del espacio continuo en uno discreto, lo que se representa matemáticamente como una transformación del conjunto de ecuaciones diferenciales en un conjunto de ecuaciones algebraicas aplicadas en el dominio. La discretización del espacio se hace mediante un proceso conocido como mallado, en el que el dominio se divide en un número finito de puntos o nodos, que se encuentran agrupados en celdas; nodos en los cuales se aplican las ecuaciones fenomenológicas encargadas de describir el proceso³¹.

En la actualidad se cuentan con distintos software comerciales de CFD, entre los más utilizados: COMSOL Multiphysics y Ansys Inc. Estos programas cuentan con una interfase de simulación en donde se puede acceder de manera sencilla a todas las ecuaciones de los modelos implementados en la herramienta. Por otra parte, debido a los altos precios de las licencias para utilizar los paquetes comerciales y a las limitaciones en cuanto modelamiento que estos puedan tener, algunos desarrolladores de código se han inclinado por crear sus propios paquetes de simulación por medio de la creación de librerías utilizando un lenguaje de programación robusto, generalmente C o C++, y un entorno de desarrollo integrado (IDE, por sus siglas en inglés, «Integrated Development Environment»). De esta

³⁰ J Anderson, *Computational Fluid Dynamics*, Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications (McGraw-Hill Education, 1995).

³¹ Jiyuan Tu, Guan-Heng Yeoh, y Chaoqun Liu, “Chapter 2 - CFD Solution Procedure - A Beginning”, en *Computational Fluid Dynamics (Second Edition)*, Second Edi (Butterworth-Heinemann, 2013), pp. 31–60.

manera se obtiene un mayor control sobre los métodos de discretización espacial (Upwind, Quick, Híbrido, etc.), temporal (implícito, explícito, semi-implícito, etc.) y de solución (minimización ortogonal, gradiente biconjugado estabilizado, métodos SOR, entre otros), brindando flexibilidad en las distintas etapas para la resolución de cada problema particular.

Tanto las librerías desarrolladas como los software comerciales de simulación por CFD se basan en tres etapas principales que se describen a continuación³²:

1. Pre-procesamiento: En esta fase se hace el modelado de la geometría del proceso a simular por medio de una herramienta de diseño asistido por computadoras (CAD, computer-aided design). Posteriormente, se indican las secciones de la geometría que van a actuar como fronteras para la simulación (zonas en las que se aplicarán las condiciones de frontera del caso de estudio). Una vez se cuenta con la geometría, ésta debe ser sometida a un proceso de mallado, este dependerá de los fenómenos a simular y de la sensibilidad de las variables del proceso al tamaño de celda. En el caso de las librerías de programación, se debe implementar un código encargado de crear el dominio geométrico y realizar su mallado con las condiciones indicadas, y finalmente, ubicar las zonas con condiciones de frontera o utilizar un mallador comercial que pueda acoplarse a las librerías, como Gmsh.
2. Procesamiento: En la segunda etapa se debe realizar la elección de las ecuaciones de transporte de masa, cantidad de momento y energía, además de las ecuaciones auxiliares de transporte y ecuaciones de estado. Una vez se cuente con ecuaciones de transporte se deben seleccionar los modelos físicos como turbulencia, combustión, radiación, etc. Finalmente se aplican las condiciones de frontera a la simulación, se ajustan los tipos de cálculo

³² Jiyuan Tu, Guan-Heng Yeoh, y Chaoqun Liu, "Chapter 2 - CFD Solution Procedure - A Beginning", en *Computational Fluid Dynamics (Second Edition)*, Second Edi (Butterworth-Heinemann, 2013), pp. 31–60.

para cada una de las variables principales (acoplamiento presión-velocidad, orden de las ecuaciones algebraicas, términos de relajación) en caso de que sea requerido, se ajustan los parámetros de solución (número de iteraciones, tamaño de los pasos, número máximo de iteraciones, criterios de convergencia) y se monitorea la solución hasta que finalice el ciclo iterativo. De igual manera al emplear librerías programadas, se deben escribir el mismo tipo de ecuaciones principales y auxiliares, expresando de manera general dichas ecuaciones para emplearlas en cualquier tipo de problema que requiera solución.

3. Post-procesamiento: La etapa final de simulación se centra en el análisis de los resultados, en este caso, de las variables del proceso que se calcularon a lo largo de la simulación. Los software comerciales de CFD cuentan con aplicaciones para realizar diagramas XY, contornos, vectores, líneas de flujo y renderización 3D, entre otras formas de gráficos. Sin embargo, al hablar de librerías desarrolladas en un IDE, estos no suelen contar con interfase para gráficos y análisis de estos, por esto, en esta etapa se centran en la exportación de los datos obtenidos en la etapa de procesamiento con los formatos requeridos para ser analizados en software externos (OriginLab, Paraview, Matlab, entre otros).

1.5 MODELOS DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINAS

La revisión de literatura muestra que los modelos pueden ser divididos en dos grupos: comerciales y académicos. Dentro de los modelos comerciales se distinguen los siguientes modelos:

- Modelo de Rygg, Rydahl, and Rønningsen³³ y modelo de Matzain *et al.*³⁴; estos modelos consideran mecanismos como la difusión molecular, el «*shear*

³³ O. B. Rygg, A. K. Rydahl, y H. P. Rønningsen, "Wax deposition in offshore pipeline systems", en *1st North American Conference Multiphase Technology*. (Baniff, Canada., 1998).

³⁴ Mandar S Apte et al., "Investigation of Paraffin Deposition During Multiphase Flow in Pipelines and Wellbores-Part 2: Modeling", *Journal of Energy Resources Technology*, 123.2 (2001), 150–57.

dispersion» y la remoción por efectos viscosos («*shear stripping*»). Están implementados en el simulador de flujo multifase OLGA el cual ha sido desarrollado durante varias décadas y es ampliamente usado industrialmente.

- Modelo de Lindeloff y Krejbjerg³⁵, actualmente implementado en el módulo DepoWax del software PVTsim, este software ha sido usado por la industria del petróleo en caracterización de fluidos.
- Modelo de Edmonds, Moorwood, Szczepanski y Zhang³⁶, es usado como base del Software FloWax desarrollado por Infochem.

Dentro de los modelos académicos tenemos el modelo de formación de depósitos de parafinas de la Universidad de Tulsa y el Michigan Wax predictor, los cuales se detallan a continuación.

1.5.1 Modelo de formación de depósitos de parafinas de la Universidad de Tulsa Desarrollado a través del grupo «Tulsa University Paraffin Deposition Projects» (TUPDP), el modelo es llamado TUWAX y sus primeros estudios fueron llevados a cabo por Matzain³⁷. Sin embargo, se han realizado varias modificaciones del mismo con el fin de ajustarlo a observaciones experimentales, dando como resultado diferentes versiones³⁸. Estas versiones de TUWAX se encuentran disponibles para los miembros del TUPDP y han sido aplicadas en las prácticas de

³⁵ Niels Lindeloff y Kristian Krejbjerg, "A Compositional Model Simulating Wax Deposition in Pipeline Systems", *Energy & Fuels*, 16.4 (2002), 887–91.

³⁶ Beryl Edmonds et al., "Simulating wax deposition in pipelines for flow assurance", *Energy and Fuels*, 22.2 (2008), 729–41.

³⁷ A Matzain, Single phase liquid paraffin deposition modeling, ed. University of Tulsa (University of Tulsa, 1996).

³⁸ H. J. Lund, "Investigation of Paraffin Deposition During Single-phase Liquid Flow in Pipelines" (University of Tulsa, 1998); O. C. H. Perez, *Investigation of Single-phase Paraffin Deposition Characteristics* (University of Tulsa, 2002); Mandar S Apte et al., "Investigation of Paraffin Deposition During Multiphase Flow in Pipelines and Wellbores-Part 2: Modeling", *Journal of Energy Resources Technology*, 123.2 (2001), 150–57; Guilherme Couto et al., "An Investigation of Two-Phase Oil/Water Paraffin Deposition", *SPE Production & Operations*, 23.1 (2008), 1–7; O.C. Hernandez et al., "Improvements in Single-Phase Paraffin Deposition Modeling", *SPE Production & Facilities*, 19.04 (2004), 237–44.

remediación en campo. Cabe resaltar que la versión de TUWAX para una fase está basada en el trabajo de Hernández *et al.*³⁹, trabajo que se revisa más adelante.

1.5.2 Michigan Wax Predictor (MWP) Este Modelo fue desarrollado por el Grupo de Investigación de Medios Porosos de la Universidad de Michigan, se fundamenta en el trabajo de Singh, Venkatesan, Scott Fogler y Nagarajan⁴⁰. Este modelo tiene en cuenta el envejecimiento del depósito, y además tiene gran éxito en la predicción del espesor del depósito de parafinas. El MWP ha sido validado por varios estudios experimentales⁴¹ y extendido a condiciones de flujo turbulento. Posteriormente el modelo fue mejorado gracias a las investigaciones de Singh, Venkatesan, Fogler y Nagarajan⁴² junto con el trabajo propuesto por Huang, Lee, Senra y Scott Fogler⁴³. Es un modelo reconocido académicamente debido al gran ajuste con los datos experimentales y por lo tanto, se consideró como el modelo a seguir y adaptar en el proceso de simulación por CFD en el presente trabajo.

Para una correcta descripción del modelo y sus ecuaciones, se deben tener en cuenta los posibles escenarios límite en el proceso de acumulación de las parafinas. Estos escenarios se definen para justificar el uso de determinadas correlaciones experimentales con el fin de calcular los coeficientes de transporte de masa y energía en la interfase. Estas correlaciones fueron empleadas en los modelos en los cuales se basó el MWP. A continuación, se presentan los escenarios límite del modelo «Michigan Wax Predictor».

³⁹ O.C. Hernandez et al., "Improvements in Single-Phase Paraffin Deposition Modeling", *SPE Production & Facilities*, 19.04 (2004), 237–44.

⁴⁰ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

⁴¹ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64; Zhenyu Huang et al., "Wax deposition modeling of oil/water stratified channel flow", *AIChE Journal*, 57.4 (2011), 841–51; D. V R Fontoura, E. M. Matos, y J. R. Nunhez, "A three-dimensional two-phase flow model with phase change inside a tube of petrochemical pre-heaters", *Fuel*, 110 (2013), 196–203; Yingda Lu et al., "Counterintuitive Effects of the Oil Flow Rate on Wax Deposition", *Energy & Fuels*, 26.7 (2012), 4091–97.

⁴² Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

⁴³ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64

1.5.2.1 Método de transferencia independiente de masa y calor (IHMT) Para la descripción de la transferencia de masa y energía en el proceso de acumulación de parafinas se planteó el uso de las siguientes correlaciones para transporte⁴⁴:

$$Nu = 1.24 \left(\frac{d}{L} Re * Pr \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

$$Sh = 1.24 \left(\frac{d}{L} Re * Sc \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2)$$

Donde Re, Nu, Pr, Sh y Sc son los números de Reynolds, Nusselt, Prandtl, Sherwood y Schmidt respectivamente. También, d y L son el diámetro y la longitud de la tubería. La correlación de transporte de masa no tiene en cuenta la precipitación en el seno del crudo. No obstante, trabajo experimental en régimen turbulento ha mostrado que existe una precipitación significativa por lo que esta correlación solo es válida para régimen laminar. Debido a esta suposición, el modelo sobreestima la cantidad de parafinas disueltas en el crudo que a la postre genera valores sobrestimados del espesor del depósito de parafinas. Por esta razón este método es considerado el límite superior en el modelo.

1.5.2.2 Método de solubilidad Para tener en cuenta la precipitación de las moléculas de parafina en el crudo, se planteó el método de solubilidad como un límite inferior⁴⁵. Este método tiene en cuenta que la cantidad de parafinas precipitadas depende directamente de la temperatura del crudo y la temperatura en la interfase⁴⁶. En su estudio Venkatesan y Fogler ⁴⁷ usaron la correlación de Dittus y Boelter ⁴⁸ para determinar el coeficiente de transferencia de calor.

$$Nu = 0.023 * Re^{0.83} Pr^{0.33} \quad (3)$$

⁴⁴ E N Sieder y G E Tate, "Heat Transfer and Pressure Drop of Liquids in Tubes", *Industrial and Engineering Chemistry*, 28.12 (1936), 1429–35.

⁴⁵ Ramachandran Venkatesan y H. Scott Fogler, "Comments on analogies for correlated heat and mass transfer in turbulent flow", *AIChE Journal*, 50.7 (2004), 1623–26.

⁴⁶ *Ibíd.*, p 1623–26.

⁴⁷ *Ibíd.*, p 1623–26.

⁴⁸ F. W. Dittus y L. M.K. Boelter, "Heat transfer in automobile radiators of the tubular type", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 12.1 (1985), 3–22.

En su trabajo, Venkatesan y Fogler ⁴⁹ proponen una correlación para estimar el coeficiente de transferencia de masa como función del número de Nusselt y de la razón de cambio de la concentración de saturación con la temperatura, y es representada por la Ec. (4).

$$Sh = Nu \left(\frac{dC_{ws}}{dT} \right)_{inter} * \frac{T_{bulk} - T_{inter}}{C_{ws,bulk}(T) - C_{ws,inter}(T)} \quad (4)$$

Donde $C_{ws}(T)$ es la concentración de saturación a la temperatura T , T_{bulk} es la temperatura en el seno del fluido, y T_{inter} es la temperatura en la interfase crudo-depósito. Con estas correlaciones se puede calcular la velocidad de transferencia de masa para el caso en que la concentración de parafina en el crudo está en equilibrio termodinámico con las partículas sólidas de parafina precipitadas. Desde un punto de vista físico, este modelo supone que la cantidad de parafinas que excede la concentración de saturación a la temperatura del fluido precipita instantáneamente en el crudo al alcanzar el WAT, y fluyen con el crudo sin contribuir al crecimiento del depósito⁵⁰, esto lleva a que el modelo subestime el crecimiento del depósito de parafinas. El método de solubilidad puede ser usado como límite inferior en situaciones donde se dé el régimen de flujo turbulento. Los coeficientes de transferencia de masa y energía calculados por el método de solubilidad y el IHMT no se utilizan en el MWP pero siguen empleándose como teoría de los casos límite para el modelamiento del proceso de acumulación.

1.5.2.3 Modelo matemático del MWP Para cuantificar los efectos de la cinética de la precipitación en el estudio de la acumulación de parafinas se deben plantear los balances de energía y especies químicas en la tubería. El análisis es realizado suponiendo estado cuasiestacionario desde el punto de vista que en las ecuaciones de balance de energía en las fases líquida y sólida no toman en cuenta el término temporal, sin embargo, el tiempo aparece en las ecuaciones que representan el

⁴⁹ Ramachandran Venkatesan y H. Scott Fogler, "Comments on analogies for correlated heat and mass transfer in turbulent flow", *AIChE Journal*, 50.7 (2004), 1623–26.

⁵⁰ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

crecimiento y envejecimiento del depósito. El estado pseudoestacionario se justifica ya que la escala de tiempo de formación del depósito es mayor que la escala de tiempo para la conducción del calor⁵¹.

Las Ecs. (5) a (15) conforman el modelo de formación de depósitos, y se da solución a este sistema de ecuaciones utilizando métodos numéricos. A continuación se presentan las ecuaciones de transporte en el dominio de simulación:

Transferencia de calor:

$$v_z \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r(\epsilon_H + \alpha_T) \frac{\partial T}{\partial r} \right] \quad (5)$$

En este caso, α_T es la difusividad térmica definida como $k/\rho C_p$. Cabe resaltar que la Ec. (5) es válida tanto fuera como dentro del depósito ya que en los elementos computacionales correspondientes al depósito la velocidad es nula ($v_z = 0$) y la conductividad térmica dependerá de la cantidad de parafinas acumuladas.

Transferencia de masa:

$$v_z \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r(\epsilon_M + D_{wo}) \frac{\partial C}{\partial r} \right] - k_r [C - C_{ws}(T)] \quad (6)$$

Para flujo laminar los parámetros difusivos turbulentos ϵ_M y ϵ_H se hacen cero. En la Ec. (6), k_r representa la velocidad de precipitación, y D_{wo} es la difusividad de las parafinas en el crudo calculada por la correlación de Hayduk y Minhas⁵².

$$D_{wo} = 13.3 \times 10^{-12} * \frac{(T^{1.47} \mu Y)}{V_A^{0.71}}; \gamma = \frac{10.2}{V_A} - 0.791 \quad (7)$$

En la Ec. (7) V_A representa el volumen molar de las parafinas (. Las condiciones de frontera para la Ec. (5) son:

$$T(r, 0) = T_o \quad (8)$$

⁵¹ Bautista Prada Diego Fernando, "Implementación de un modelo fenomenológico para la predicción de depósitos de parafinas en el campo escuela colorado" (Universidad Industrial de Santander, 2014).

⁵² W Hayduk y B S Minhas, "Correlations for Prediction of Molecular Diffusivities in Liquids **", en *30th Canadian Chemical Engineering Conference* (Edmonton, Alberta., 1982), pp. 295–99.

$$\left(\frac{dT}{dr}\right)_{r=0} = 0 \quad (9)$$

$$k_{dep} \left(\frac{dT}{dr}\right)_{r=r_i} = h_0(T_{coolant} - T_{wall}) \quad (10)$$

Y para la Ec. (5):

$$C(r, 0) = C_o \quad (11)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{r=0} = 0 \quad (12)$$

$$C = C_{ws}(T); r_d \leq r \leq r_i \quad (13)$$

La condición de frontera térmica asume que hay un “flux” de calor en la pared con coeficiente externo de transporte de calor h_0 constante, el cual tiene en cuenta la resistencia del material aislante y la temperatura de la sustancia que rodea la tubería (*Coolant*). La condición para transferencia de masa asume que la concentración de parafinas sigue un equilibrio líquido-sólido (concentración de saturación) en el depósito. Por practicidad se puede asumir una condición de frontera asignando una temperatura constante a la pared de la tubería, la cual debe ser igual a la temperatura de los alrededores ($T = T_{coolant}$ para $r = R$). La temperatura del refrigerante (coolant) se refiere al líquido usado en el montaje experimental para representar el agua del escenario industrial.

1.5.2.4 Ecuaciones fenomenológicas para el depósito y su interfase El flux difusivo de masa en el depósito contribuye al incremento de la fracción de parafinas en el depósito⁵³ y se representa por medio de la Ec. (14).

$$\pi \rho_{depósito} (R^2 - r_i^2) \frac{d\bar{F}_w}{dt} = 2\pi r_i \left(-D_{eff} \frac{dC}{dr} \right)_{interfase} \quad (14)$$

Y la diferencia entre el flux de masa hacia la interfase crudo-depósito y el flux

⁵³ Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

difusivo entrante al depósito, representa el crecimiento del espesor del depósito⁵⁴.

$$2\pi r_i \rho_{\text{depósito}} \bar{F}_w \frac{d\delta}{dt} = 2\pi r_i \left(-D_{wo} \frac{dC}{dr} \right)_{\text{interfase}} - 2\pi r_i \left(-D_{\text{eff}} \frac{dC}{dr} \right)_{\text{interfase}} \quad (15)$$

Donde δ es el espesor del depósito, R es el radio de la tubería, r_i es el radio interno disponible de la tubería, D_{wo} es la difusividad de las parafinas en el crudo (Ec. (7)) y D_{eff} es la difusividad efectiva de las parafinas en el depósito, calculada por la correlación de Cussler, Hughes, Ward y Aris⁵⁵.

En el modelo final planteado por Huang *et al.*⁵⁶ los parámetros ajustables escogidos fueron el parámetro de relación de aspecto (relación largo/ancho) α , el cual capta los cambios morfológicos de los cristales de parafina en el depósito en función de su contenido másico de compuestos parafínicos, y la constante de velocidad de precipitación a la temperatura de nube $k_{r,\text{cloud}}$. Aunque el parámetro $k_{r,\text{cloud}}$ puede ser ajustado, debe estar dentro de un rango lógico de valores, en este caso, se encuentra limitado por el modelo de IHMT en el límite superior y el “*Solubility Model*” como límite inferior.

Debido a las limitaciones del modelo propuesto por Singh *et al.*⁵⁷ se decidió realizar un estudio más riguroso para la predicción del envejecimiento de los depósitos, realizado por Singh *et al.*⁵⁸, quienes tuvieron en cuenta el cambio en la concentración de parafinas del depósito en dirección radial. Aunque inicialmente, se usaron fuerzas compresivas⁵⁹ sobre el depósito para explicar su envejecimiento

⁵⁴ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

⁵⁵ E L Cussler et al., “Barrier membranes”, *Journal of Membrane Science*, 38.2 (1988), 161–74.

⁵⁶ Zhenyu Huang et al. op. cit, 2955–64.

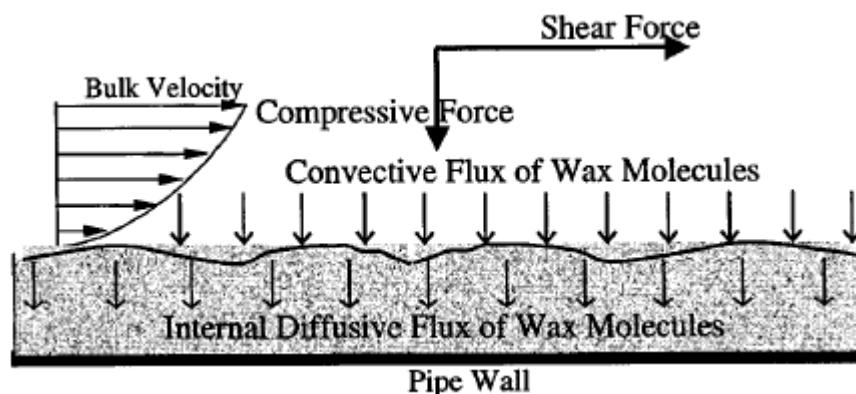
⁵⁷ Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

⁵⁸ Probjot Singh et al., “Morphological evolution of thick wax deposits during aging”, *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

⁵⁹ Singh P. et al. Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74. plantearon que debido a la naturaleza rugosa de los depósitos de parafinas se pueden generar fuerzas de compresión sobre este (Figura 5), “exprimiendo” el crudo fuera del depósito, explicando así el aumento en la concentración de las parafinas dentro de este (fenómeno de envejecimiento del depósito). Para validar esta suposición se planteó un experimento en donde se hace fluir el crudo a una presión constante mientras se disminuye el gradiente de temperatura dentro del depósito. En la Figura 6 se puede resaltar que la velocidad

(Figura 5), pruebas experimentales (Figura 6) mostraron que su efecto no es significativo, por lo que no fue tenido en cuenta en el modelo al igual que el fenómeno de *shear-removal* en la interfase. El envejecimiento es representado por medio de balances másicos internos.

Figura 5 Fuerzas ejercidas por el fluido sobre el depósito de parafinas.



Tomada de Singh ⁶⁰

En el trabajo de Huang *et al.* ⁶¹ se continuó el estudio sobre envejecimiento de depósitos de parafinas bajo condiciones de flujo laminar y turbulento. Este modelo representa la precipitación de parafinas con un modelo cinético de primer orden, una vez la temperatura del crudo alcanza valores inferiores a su WAT, esta precipitación se estima por medio del último término en la Ec. (6). En el caso de flujo laminar, la constante de precipitación es considerada cero, por lo que se entiende que no hay una caída de concentración prominente del lado del fluido al acercarse a la interfase crudo-depósito.

de envejecimiento del depósito se hace casi nula cuando se disminuye el gradiente de temperatura de 15°C a 3.3°C. Estos resultados confirman que el proceso de envejecimiento es una función del gradiente de temperatura más que de las fuerzas compresivas creadas por el flujo de crudo, descartando así la suposición de envejecimiento por “exprimido” de crudos hacia afuera del depósito.

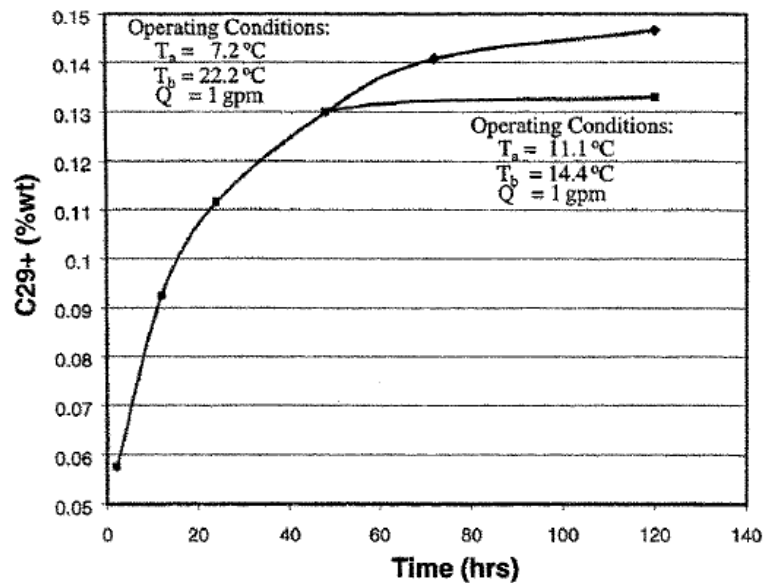
⁶⁰ Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

⁶¹ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

1.5.2.5 Cálculo de la difusividad efectiva de parafinas en crudo Un depósito de parafina es una mezcla de crudo-parafina sólida (gel) que actúa como un medio poroso ⁶², por lo que es conveniente usar un modelo apropiado para el coeficiente de difusión como por ejemplo, la ecuación planteada por Aris⁶³:

$$D_{eff} = \frac{D_{w0}}{1+R_2+R_3+R_4} \quad (16)$$

Figura 6 Envejecimiento del depósito para diferentes temperaturas de seno/pared.



Tomada de Singh⁶⁴

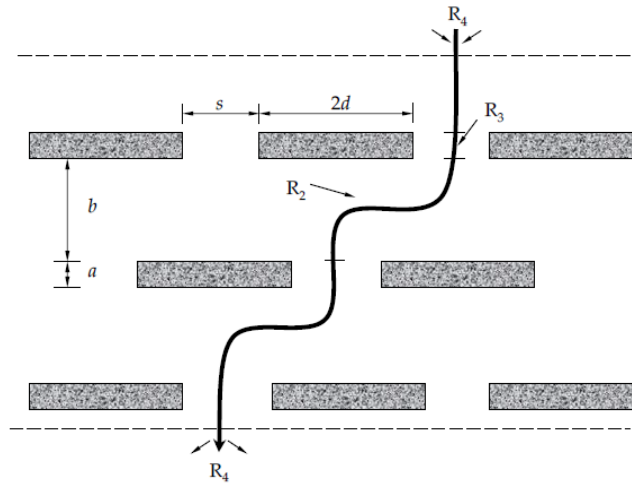
El modelo plantea estimar el coeficiente de difusión efectiva en términos de una serie de resistencias a la transferencia de masa a través del depósito, ilustradas en la Figura 7.

⁶² Hyun Su Lee, "Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines" (The University of Michigan 2008, 2008).

⁶³ Rutherford Aris, "On the permeability of membranes with parallel, but interconnected, pathways", *Mathematical Biosciences*, 77.1 (1985), 5–16.

⁶⁴ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

Figura 7 Difusión a través de aberturas equi-espaciadas o poros.



Tomada de Lee ⁶⁵

Como se aprecia en la Figura 7, R_2 es la resistencia a la difusión a través del camino tortuoso paralelo a los cristales de parafinas; R_3 es la resistencia a la difusión en el camino entre las aberturas y R_4 es el estrangulamiento que sufre el soluto para salir y entrar del medio⁶⁶. Remplazando los términos para cada resistencia en la Ec. (16) obtenemos la Ec. (17).

$$D_{eff} = \frac{D_w o}{1 + \frac{\alpha^2 F_w^2}{1 - F_w} + \frac{\alpha F_w}{\sigma} + \frac{4\alpha F_w}{\pi(1 - F_w)} \ln \left[\frac{\pi \alpha^2 F_w}{\sigma(1 - F_w)} \right]} \quad (17)$$

Si se desprecian las resistencias R_3 y R_4 , el modelo de Aris ⁶⁷ se convierte en el modelo de difusividad efectiva de Cussler *et al.* ⁶⁸, el cual es el más empleado en los modelos académicos de acumulación de parafinas ⁶⁹ y está dado por la Ec. (18).

⁶⁵ Hyun Su Lee, "Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines" (The University of Michigan 2008, 2008).

⁶⁶ Wayne R. Falla, Michael Mulski, y E. L. Cussler, "Estimating diffusion through flake-filled membranes", *Journal of Membrane Science*, 119.1 (1996), 129–38.

⁶⁷ Rutherford Aris, "On the permeability of membranes with parallel, but interconnected, pathways", *Mathematical Biosciences*, 77.1 (1985), 5–16.

⁶⁸ E L Cussler et al., "Barrier membranes", *Journal of Membrane Science*, 38.2 (1988), 161–74.

⁶⁹ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64; Oluwatosin Emmanuel Ajayi, "Modelling of Controlled Wax Deposition and Loosening in Oil and Gas Production Systems" (Norwegian University of Science and Technology, 2013); Beryl Edmonds et al., "Simulating wax deposition in pipelines for flow assurance",

$$D_{eff} = \frac{D_{wo}}{1 + \frac{\alpha^2 F_w^2}{1 - F_w}} \quad (18)$$

El parámetro $\alpha = d/a$ representa la relación de aspecto (relación largo/ancho) de los cristales de parafina que permite tener en cuenta el cambio en la morfología de los cristales con el envejecimiento del depósito; $\sigma = s/a$ es la relación entre la separación en las aberturas y el ancho del cristal; F_w es la fracción volumétrica de parafinas en una sección del depósito.

Huang *et al.*⁷⁰ continuaron el estudio sobre envejecimiento de depósitos de parafinas bajo condiciones de flujo laminar y turbulento. La precipitación de parafinas fue representada por un modelo cinético de primer orden que corresponde al último término en la Ec. (6). En el caso de flujo laminar, la constante de precipitación (k_r) es considerada cero, por lo que se entiende que no hay una caída de la concentración de parafinas prominente del lado del fluido.

1.5.2.6 Constante de velocidad de precipitación Como se mencionó anteriormente, la constante k_r determina la velocidad de precipitación de las moléculas de parafina en el seno del crudo. Cabe resaltar que si no se presenta precipitación de parafinas ($k_r = 0$), las ecuaciones de transporte de masa y energía se desacoplan, y por lo tanto el modelo seguiría una conducta similar a la del IHMT. De otro lado, a medida que k_r incrementa y se aproxima al infinito, la concentración de parafinas se acerca a la concentración de equilibrio termodinámico $C_{ws}(T)$, lo cual representa el modelo de solubilidad para el límite inferior. En la Figura 8, se muestra el efecto de la constante cinética de precipitación sobre la concentración de parafinas en el crudo. Aunque Huang *et al.*⁷¹ mencionan que para el caso de flujo en régimen laminar no se presenta precipitación ($k_r = 0$), Lee⁷² señala que la

Energy and Fuels, 22.2 (2008), 729–41; Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., “Morphological evolution of thick wax deposits during aging”, *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

⁷⁰ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

⁷¹ Zhenyu Huang et al. op. cit, 2955–64.

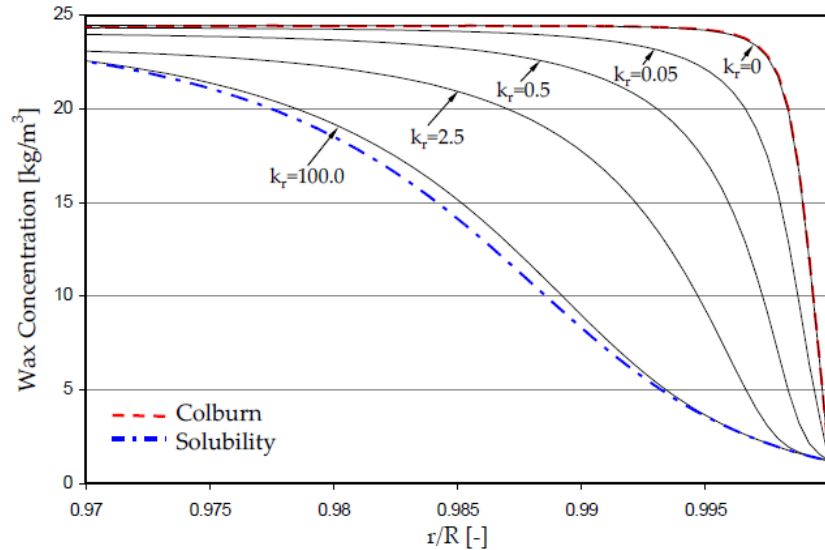
⁷² Hyun Su Lee, “Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines” (The University of Michigan 2008, 2008).

constante tiene un valor pequeño mas no despreciable y debe ser incluido en el modelo para una mejor predicción.

Huang *et al.*⁷³, determinaron una expresión para k_r , desde un punto de vista del crecimiento del núcleo de parafinas, y se encuentra relacionada con la densidad de núcleos ρ_n , el diámetro del núcleo d_n y la difusividad de las parafinas en el crudo D_{wo} .

$$k_r = \frac{\pi d_n \rho_n}{2} D_{wo}(T) \quad (19)$$

Figura 8 Perfil radial de concentración de parafinas para un número de Reynolds de 7350 a diferentes valores de k_r .



Tomado de Lee⁷⁴.

Debido a la complejidad del cálculo de estos parámetros relacionados con la nucleación de las parafinas, Huang *et al.*⁷⁵ plantean relacionar k_r con la constante de precipitación en el punto de nube $k_{r,cloud}$ para cualquier temperatura, esta

⁷³ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

⁷⁴ Hyun Su Lee, "Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines" (The University of Michigan 2008, 2008).

⁷⁵ Zhenyu Huang et al., op. cit, 2955–64.

relación plantea que la dependencia de k_r con la temperatura está directamente relacionada con la dependencia de D_{wo} con la temperatura, por lo que usando la Ec. (7) y remplazando la viscosidad por medio de una relación de Arrhenius se obtiene la Ec. (20):

$$\frac{k_r}{k_{r,cloud}} = \left(\frac{T}{T_{cloud}}\right)^{1.47} \exp \left[\frac{\gamma E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{cloud}} \right) \right] \quad (20)$$

1.5.3 Antecedentes en modelos predictivos de formación de depósitos de parafinas La revisión del estado del arte permitió dividir los modelos predictivos en 3 grupos principales según su planteamiento:

1. Modelos termodinámicos de equilibrio líquido - sólido (LS) y gas - líquido - sólido (GLS).
2. Modelos correlacionales de formación de depósitos.
3. Modelos de flujo con inclusión de mecanismos de formación de depósitos.

Los modelos termodinámicos⁷⁶ usan ecuaciones de estado y otras correlaciones para determinar coeficientes de fugacidad, temperatura y presión crítica, factor acéntrico etc., con el fin de determinar las fracciones en el equilibrio sólido-líquido-vapor a condiciones de operación determinadas. Estos modelos logran predecir acertadamente la fracción de parafinas sólidas, sin embargo no consideran los efectos de la dinámica de flujo en las tuberías por lo que deben ser acoplados a un modelo dinámico para proporcionar información sobre la forma del depósito y su variación en el tiempo y dominio.

Los modelos correlacionales buscan obtener información relevante (tamaño del depósito, caída de presión en tuberías, potencial de formación de depósitos) como

⁷⁶ Adel M Elsharkawy et al., "Determination and Prediction of Wax Deposition from Kuwaiti Crude Oils", en *1999 SPE Latin American and Caribbean that can be classified as paraffins, naphthenes and aromatics Petroleum Engineering Conference* (Caracas, Venezuela., 1999); Baojun J. Liu et al., "The Thermodynamic Model on Paraffin Wax Deposition Prediction", *Engineering*, 7 (2015), 827–32; E. M. Abdallah y N. El-khatib, "Modeling wax deposition in crude oil", en *2011 National Postgraduate Conference*, 2011, pp. 1–7; Reza Dalirsefat y Farzaneh Feyzi, "A thermodynamic model for wax deposition phenomena", *Fuel*, 86.10–11 (2007), 1402–8.

funciones de las variables en la tubería o en el pozo de donde se extrae el crudo en estudio. Por lo general, estos modelos utilizan pruebas de laboratorio que incluyen parámetros de escalamiento para incluir efectos de flujo en campos reales⁷⁷. Por otro lado, los modelos de flujo representan el movimiento del fluido a través del dominio, la deformación del dominio por la presencia de los depósitos, su influencia en el proceso global y los fenómenos internos que puedan presentarse en el fluido o en el sólido.

Hunt⁷⁸ realizó una revisión del estado de los modelos de predicción de acumulación de parafinas en 1996 y de la incertidumbre que estos tenían. Aunque habría que realizar una revisión extensa de la evolución de cada uno de los puntos resaltados en su trabajo, se puede resaltar un punto crítico, el WAT tiende a asociarse como un valor fijo de un crudo estudiado, contrario a esto Hunt advierte que este parámetro puede variar con las condiciones de flujo, además de existir una incertidumbre de hasta de 10°C empleando diferentes técnicas en su medición. Esto podría generar incertidumbre en los modelos de acumulación que basen los fenómenos de transporte en ecuaciones relacionadas al WAT del crudo.

El trabajo de Adewusi⁷⁹ calcula un potencial de acumulación de parafinas basado en los cambios de presión, viscosidad y temperatura del pozo de donde se extrae el crudo. Además, este trabajo advierte de dos problemas con los que se debe ser cuidadoso en la simulación. Primero, se debe hacer un seguimiento constante de las propiedades del crudo, como por ejemplo el WAT, que puede variar según las condiciones de extracción del pozo, introduciendo incertidumbre en la predicción. Segundo, se debe evitar hacer interpolaciones/extrapolaciones de las propiedades de los crudos, en lo posible se deben realizar mediciones directas para evitar aumentar el error en los valores calculados.

⁷⁷ A. Hunt, "Uncertainties remain in predicting paraffin deposition", *Oil and Gas Journal*, 94.31 (1996), 1–9.

⁷⁸ A. Hunt, *Ibíd*, p.1-9

⁷⁹ Victor A. Adewusi, "Prediction of wax deposition potential of hydrocarbon systems from viscosity-pressure correlations", *Fuel*, 76.12 (1997), 1079–83.

Singh *et al.*⁸⁰ propusieron un modelo de acumulación fundamentado en la difusión molecular como mecanismo de acumulación. Este modelo asume que no hay variación radial del contenido de parafina dentro del depósito y que este solo incrementa con el tiempo, los resultados se validan por medio de experimentación y el modelo predictivo consigue representar exitosamente el espesor y fracción másica del depósito. Los efectos de flujo son introducidos indirectamente por medio de las correlaciones experimentales aplicadas en la interfase para el cálculo de los coeficientes de transporte másico y térmico.

Singh *et al.*⁸¹ realizaron una extensión de su trabajo⁸² ya que el modelo inicial tenía simplificaciones que le impedía ser aplicado a situaciones más generales. Singh encontró que bajo distintas condiciones de operación y para altas concentraciones de parafinas en el crudo, el contenido de parafina en el depósito no es uniforme, y los depósitos formados eran más grandes (hasta 40% del diámetro de la tubería). Estas observaciones motivaron modificaciones de las correlaciones experimentales para intercambio en la interfase y el uso del parámetro α en el cálculo del coeficiente de difusión dentro del depósito. Este parámetro fue señalado por Hernández *et al.*⁸³ y criticado por Eskin, Ratulowski y Akbarzadeh⁸⁴ ya que es el parámetro empírico de mayor efecto en el ajuste de los resultados del envejecimiento del depósito

Cordoba y Schall⁸⁵ además de estudiar el proceso de transporte del solvente dentro del depósito, propusieron un modelo de acumulación basado en el transporte de energía térmica. El depósito de parafinas una vez formado en la pared de la tubería

⁸⁰ Probjot Singh *et al.*, "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

⁸¹ Probjot Singh *et al.*, "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

⁸² Probjot Singh *et al.*, *op. cit.*, 1059–74.

⁸³ O.C. Hernandez *et al.*, "Improvements in Single-Phase Paraffin Deposition Modeling", *SPE Production & Facilities*, 19.04 (2004), 237–44.

⁸⁴ Dmitry Eskin, John Ratulowski, y Kamran Akbarzadeh, "A model of wax deposit layer formation", *Chemical Engineering Science*, 97 (2013), 311–19.

⁸⁵ A J Cordoba y C A Schall, "Application of a heat transfer method to determine wax deposition in a hydrocarbon binary mixture", *Fuel*, 80.9 (2001), 1285–91; A J Cordoba y C A Schall, "Solvent migration in a paraffin deposit", *Fuel*, 80.9 (2001), 1279–84.

actúa como una resistencia térmica entre el fluido y la pared de la tubería. Este trabajo propone una relación entre el espesor del depósito y la diferencia de temperatura entre la entrada y la salida del crudo a la sección de estudio. Los resultados fueron validados con información del depósito obtenida por análisis gravimétrico. El modelo presenta una incertidumbre alta (desde $\pm 10\%$ hasta $\pm 30\%$ del valor), además su uso se encuentra restringido a condiciones de operación que propicien la formación de un depósito de gran espesor con el fin de que la resistencia térmica adherida no sea despreciable. Finalmente, este modelo no predice el envejecimiento, solo el espesor del depósito.

El trabajo de Hernández *et al.*⁸⁶ modifica el modelo TUWAX para una fase, al incluir el fenómeno de envejecimiento propuesto por Singh *et al.*⁸⁷ además de la remoción por esfuerzos viscosos. Por otro lado, Hernández *et al.* presentaron un análisis sobre el efecto de las relaciones empíricas usadas enfatizando que se requiere conocer a priori parámetros como la velocidad de remoción de parafinas por efectos viscosos y el cambio en parámetros morfológicos de las láminas de parafinas que se están depositando (Figura 15), entre otros. También, concluyen que la relación ancho/largo (α) de los cristales de parafina es el parámetro empírico que mayor efecto tiene en el envejecimiento del depósito, ya que una variación de $\pm 50\%$ en el valor de alfa produce un cambio de aproximadamente 30% en el valor final de la concentración de parafina en el depósito.

Un trabajo que presentó un enfoque distinto al proceso de acumulación de parafinas fue realizado por Banki, Hoteit y Firoozabadi⁸⁸. Ellos usaron una aproximación entalpía-porosidad, que considera al depósito como un medio poroso en el cual el fluido sufre una desaceleración. Adicionalmente, Banki *et al.*⁸⁹ consideran el

⁸⁶ O.C. Hernandez et al., "Improvements in Single-Phase Paraffin Deposition Modeling", *SPE Production & Facilities*, 19.04 (2004), 237–44.

⁸⁷ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

⁸⁸ R Banki, Hussein Hoteit y Abbas Firoozabadi, "Mathematical formulation and numerical modeling of wax deposition in pipelines from enthalpy–porosity approach and irreversible thermodynamics", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), 3387–98.

⁸⁹ R Banki, Hussein Hoteit, y Abbas Firoozabadi, *Ibíd*, p. 3387-98.

transporte convectivo en dirección radial en medio poroso además del difusivo, difusión térmica de los componentes debido a los gradientes de temperatura y un modelo de equilibrio termodinámico acoplado a un modelo multi-componente de transporte de masa. Esto último, con el fin de evitar la elección del número crítico de carbonos ya que consideran que los componentes depositados pueden variar con las condiciones de operación del proceso. Este modelo fue validado utilizando datos recolectados por Singh *et al.*⁹⁰ y Cordoba y Schall⁹¹ obteniendo resultados comparables. La validación del modelo de Banki *et al.*⁹² y la presentación de los resultados del mismo, fueron a llevados a cabo por Hoteit *et al.*⁹³.

Guozhong y Gang⁹⁴ propusieron una correlación para calcular el diámetro interno disponible para el flujo en la tubería por medio de una relación en la diferencia de la presión diferencial entre una sección de referencia y una sección de prueba (en la cual sucede la acumulación). Este trabajo encontró que el efecto de la temperatura en la viscosidad del crudo puede causar variaciones en el proceso de acumulación. Cuando la temperatura del crudo es inferior a la temperatura de solidificación de las parafinas, el crudo estudiado presenta una viscosidad muy alta y formación de estructuras sólidas lo cual reduce la difusividad de las partículas parafinicas sobresaturadas a través de este.

Por otro lado, Bayat, Aminian, Bazmi, Shahhosseini y Sharifi⁹⁵ estudiaron el ensuciamiento de pre-calentadores para crudos, usando un abordaje de

⁹⁰ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

⁹¹ A J Cordoba y C A Schall, "Application of a heat transfer method to determine wax deposition in a hydrocarbon binary mixture", *Fuel*, 80.9 (2001), 1285–91; A J Cordoba y C A Schall, "Solvent migration in a paraffin deposit", *Fuel*, 80.9 (2001), 1279–84.

⁹² R Banki, Hussein Hoteit, y Abbas Firoozabadi, "Mathematical formulation and numerical modeling of wax deposition in pipelines from enthalpy–porosity approach and irreversible thermodynamics", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), 3387–98 .

⁹³ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

⁹⁴ Zhang Guozhong y Liu Gang, "Study on the wax deposition of waxy crude in pipelines and its application", *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 70.1–2 (2010), 1–9.

⁹⁵ Mahmoud Bayat et al., "CFD modeling of fouling in crude oil pre-heaters", *Energy Conversion and Management*, 64 (2012), 344–50.

pseudocompuestos para agrupar los componentes del crudo en tres categorías: petróleo, asfáltenos y sales. Ellos aplicaron el modelo de transporte de especies para simular la mezcla y transporte de especies químicas, y altas viscosidades para tener en cuenta la posible adhesión de las especies involucradas en el ensuciamiento a las paredes de la tubería. El modelo de simulación reportó datos concordantes con los datos experimentales, por lo que los autores recomiendan usarlo para futuras investigaciones sobre las condiciones del proceso en el ensuciamiento de las tuberías en equipos de calentamiento para crudos.

El modelo propuesto por Eskin *et al.*⁹⁶ se resalta por haber representado los efectos de “Shear-Removal”; la suposición de no utilizar la condición de frontera de no permeabilidad en la pared de la tubería, y no usar la correlación de Cussler (cálculo de la difusividad efectiva) en las ecuaciones del modelo. Debido a que el trabajo de Huang *et al.*⁹⁷ utiliza parámetros para ajustar los parámetros del modelo, ha sido criticado por Eskin *et al.*⁹⁸. Por la sensibilidad de los modelos de formación de depósitos a los parámetros de ajuste⁹⁹, se ha restado credibilidad en el uso general de estos para la predicción en distintos crudos, ya que estos ajustes llevarían a pensar que el modelo fue ajustado al caso específico de estudio para el que fue creado y no prestan una predicción para un rango amplio de tipos de crudo o condiciones de operación.

El trabajo realizado por Fontoura, Matos y Nunhez¹⁰⁰ sobre la formación de coque en los pre-calentadores del proceso de craqueo térmico fue realizado con ayuda del software OpenFOAM. El trabajo propuso un modelo de simulación multifase en donde se presenta un cambio de fase liquido-gas en tuberías cilíndricas. La simulación se planteó como un modelo Euleriano - Euleriano bifásico utilizando las

⁹⁶ Dmitry Eskin, John Ratulowski, y Kamran Akbarzadeh, “A model of wax deposit layer formation”, *Chemical Engineering Science*, 97 (2013), 311–19.

⁹⁷ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

⁹⁸ Dmitry Eskin, John Ratulowski, y Kamran Akbarzadeh, op. cit, p. 311–19.

⁹⁹ Dmitry Eskin, John Ratulowski, y Kamran Akbarzadeh, *Ibid.* p. 311–19.

¹⁰⁰ D. V R Fontoura, E. M. Matos, y J. R. Nunhez, “A three-dimensional two-phase flow model with phase change inside a tube of petrochemical pre-heaters”, *Fuel*, 110 (2013), 196–203.

ecuaciones incluidas en OpenFOAM para conservación de momento y turbulencia, y rutinas adicionales para estimar el cambio de fase y la transferencia de masa y energía. Este modelo de simulación no pudo ser validado directamente por datos experimentales por lo que las ecuaciones individuales usadas en CFD tuvieron que ser validadas por ecuaciones experimentales como la ecuación de Fanning, la correlación para el factor de fricción de Bhramara, Rao, Sharma y Reddy¹⁰¹ y datos experimentales propuestos por Laufer¹⁰² para el flujo de gases dentro de tuberías. El modelo representa de una manera robusta los fenómenos observados en la industria, sin embargo, requiere de ecuaciones de vaporización más precisas para su refinamiento¹⁰³.

Gooya, Gooya y Dabir¹⁰⁴ estudiaron los efectos de la temperatura, flujo volumétrico y propiedades de crudo para distintos diámetros de tubería utilizando un crudo del medio oriente. Este estudio se realizó utilizando el software comercial OLGA, el cual incluye mecanismos como la difusión Browniana y la remoción por efectos viscosos e incluye los efectos del régimen de flujo por medio de constantes dependientes del número de Reynolds y el tipo de flujo (estratificado, anular, slug, burbuja). Los resultados se comparan con el modelo de Singh *et al.*¹⁰⁵, aunque las tendencias en la predicción del espesor del depósito al variar las condiciones de operación se cumplen, el valor comparado con los datos experimentales presentados por Singh difiere significativamente.

Bautista¹⁰⁶ realizó la implementación del modelo de Singh *et al.*¹⁰⁷ para evaluar la

¹⁰¹ P Bhramara et al., "CFD Analysis of Two Phase Flow in a Horizontal Pipe - Prediction of Pressure Drop", *World Academy of Science, Engineering and Technology*, 40 (2008), 315–21.

¹⁰² J Laufer, *The structure of turbulence in fully developed pipe flow*, NACA report 1174, 1954.

¹⁰³ D. V R Fontoura, E. M. Matos, y J. R. Nunhez, "A three-dimensional two-phase flow model with phase change inside a tube of petrochemical pre-heaters", *Fuel*, 110 (2013), 196–203.

¹⁰⁴ Reza Gooya, Mehdy Gooya y Bahram Dabir, "Effect of flow and physical parameters on the wax deposition of Middle East crude oil under subsea condition : heat transfer viewpoint", 2013, 1205–16.

¹⁰⁵ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹⁰⁶ Bautista Prada Diego Fernando, "Implementación de un modelo fenomenológico para la predicción de depósitos de parafinas en el campo escuela colorado" (Universidad Industrial de Santander, 2014).

¹⁰⁷ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5

precipitación de parafinas del campo Escuela Colorado, en Colombia. Bautista¹⁰⁸ utilizó de manera combinada los métodos de volúmenes finitos y diferencias finitas para obtener la solución numérica. Bautista consideró un campo de flujo unidimensional y solucionó el campo de temperatura y concentración de parafinas asumiendo un estado pseudoestacionario; la evolución en el tiempo fue introducida en el modelo según la metodología planteada por Singh *et al.*¹⁰⁹. En su trabajo se evaluó el efecto de las condiciones de operación como flujo volumétrico y temperatura de pared en el crecimiento y envejecimiento del depósito. Además, se evaluaron distintas condiciones de frontera de temperatura para emular el comportamiento en distintas superficies marinas. El código, se implementó en el lenguaje de programación C++ utilizando el entorno de desarrollo integrado Visual Studio.

También se cuenta con el estudio realizado por Li *et al.*¹¹⁰ del cambio de fase y la formación de coque en calentadores de refinación de petróleo usando CFD. El propósito de este trabajo fue continuar con estudios iniciados por Fontoura *et al.*¹¹¹ para crear un modelo de simulación tridimensional bajo una estructura Euleriana. En este, el líquido es considerado una fase continua, mientras los sólidos y gases como una fase dispersa y todas las fases como un «interpenetrating continuum». Algunos términos de transferencia interfacial de momento y energía, entre otras ecuaciones interfaciales, fueron modelados mediante el modelo de partículas y el modelo de superficie libre. Los cálculos fueron realizados en Ansys CFX 14.0 y validados por los datos experimentales reportados por Sawarkar, Pandit y Joshi¹¹².

(2000), 1059–74.

¹⁰⁸ Bautista Prada Diego Fernando, “Implementación de un modelo fenomenológico para la predicción de depósitos de parafinas en el campo escuela colorado” (Universidad Industrial de Santander, 2014).

¹⁰⁹ Probjot Singh *et al.*, “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

¹¹⁰ Xue-Gang Li *et al.*, “CFD modeling of phase change and coke formation in petroleum refining heaters”, *Fuel Processing Technology*, 134 (2015), 18–25.

¹¹¹ D. V R Fontoura, E. M. Matos, y J. R. Nunhez, “A three-dimensional two-phase flow model with phase change inside a tube of petrochemical pre-heaters”, *Fuel*, 110 (2013), 196–203.

¹¹² A N Sawarkar, A B Pandit, y J B Joshi, “Studies in Coking of Arabian Mix Vacuum Residue”, *Chemical Engineering Research and Design*, 85.4 (2007), 481–91.

Se realizaron pruebas para distintas variedades de petróleo y temperaturas de la pared, en donde se observaron comportamientos asimétricos debido al efecto de la gravedad. Finalmente se concluye que este modelo de simulación puede ser empleado en el diseño óptimo de hornos industriales de combustión.

El trabajo realizado por Haghshenasfard y Hooman¹¹³ sobre el modelado mediante CFD de la cinética de formación de depósitos de asfaltenos en crudos se acerca más al objetivo de este proyecto. El modelo planteado por Haghshenasfard y Hooman¹¹⁴ considera el flujo por convección forzada de crudos a través de una tubería vertical y fue resuelto usando el software comercial Ansys Fluent 12.0. Las condiciones iniciales de simulación fueron tomadas del trabajo experimental realizado por Bennett¹¹⁵. Las condiciones especificadas incluían velocidad de entrada, temperatura, cantidades referentes a la turbulencia, y fracción másica de los componentes. Las paredes fueron modeladas usando la condición de no deslizamiento y se utilizó una condición de presión de salida ya que no se cuenta con un perfil de velocidad específico para el caso de estudio. La formación de depósitos de asfaltenos fue modelada como una reacción en las paredes de la tubería; las propiedades térmicas y de transporte fueron asumidas dependientes de la temperatura usando el «*piece-wise linear temperature-dependent property model*». Este modelo de simulación fue reportado satisfactorio en el análisis de la formación de depósitos de asfaltenos y formación de coque, y permitió analizar eficientemente el efecto de los factores como velocidad del crudo, concentración de asfaltenos, temperaturas de las paredes y otros parámetros en el coeficiente de transferencia de calor del proceso.

Adicionalmente se han desarrollado otras técnicas para la predicción de formación de depósitos de parafinas en el transporte de crudos, estas técnicas incluyen el uso

¹¹³ M Haghshenasfard y K Hooman, "CFD modeling of asphaltene deposition rate from crude oil", *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 128 (2015), 24–32.

¹¹⁴ M Haghshenasfard y K Hooman, *Ibíd.*, p. 24–32.

¹¹⁵ Christopher A. Bennett, "A Theory Describing Asphaltene Adhesion Fouling Inside Heat Exchanger Tubes", *Heat Transfer Engineering*, 33.15 (2012), 1246–50.

de redes neuronales para crear correlaciones entre variables¹¹⁶, estimación «online» (en línea) del espesor del depósito utilizando métodos no invasivos/destructivos como quimiometría acústica¹¹⁷ o por «prompt gamma-ray neutron activation analysis» (PGNAA)¹¹⁸ el cual puede calcular la presencia de elementos desde microgramos hasta gramos y reconstruir con esto la imagen del depósito. Ya que estos modelos no son compatibles con los objetivos de este proyecto no se entra en detalle.

¹¹⁶ Ying Xie y Yu Xing, “A prediction method for the wax deposition rate based on a radial basis function neural network”, *Petroleum*, 3.2 (2017), 237–41; Ekeh Modesty Kelechukwu, Hikmat Said Al-Salim, y Ahmmed Saadi, “Prediction of wax deposition problems of hydrocarbon production system”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 108 (2013), 128–36.

¹¹⁷ Maths Halstensen et al., “Online estimation of wax deposition thickness in single-phase sub-sea pipelines based on acoustic chemometrics: A feasibility study”, *Fuel*, 105 (2013), 718–27.

¹¹⁸ Can Cheng et al., “Feasibility study for wax deposition imaging in oil pipelines by PGNAA technique”, *Applied Radiation and Isotopes*, 128 (2017), 171–74.

2. METODOLOGÍA PARA EL DESARROLLO DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA

En la Figura 9 se presenta la metodología que se utilizó para el desarrollo del modelo de formación de depósitos de parafina presentado en este trabajo de investigación.

2.1 PLANTEAMIENTO DEL MODELO DE SIMULACIÓN:

2.1.1 Análisis de modelos de formación de depósitos de parafinas Los modelos actuales tanto académicos como comerciales fueron revisados en la sección 1.5.3 de este documento, esto sirvió como base para seleccionar los fenómenos y mecanismos de formación de depósitos que fueron implementados en Visual Studio usando el lenguaje de programación C++. Para el desarrollo de este modelo de simulación se seleccionó la difusión molecular como único mecanismo de formación de depósitos de parafinas, se dio solución a las ecuaciones de Navier-Stokes para la dirección radial y axial (utilizando axi-simetría) en el sistema de coordenadas cilíndricas, a diferencia de los modelos presentados por Huang *et al.*¹¹⁹ y Singh *et al.*¹²⁰ los cuales utilizan una única componente de velocidad axial. No se tuvo en cuenta el «*shear removal*» propuesto por Eskin *et al.*¹²¹ ni la sedimentación por gravedad.

De los modelos de simulación revisados en la sección 1.5.3 de este documento, se concluyó que la aproximación de pseudocompuestos propuesta por Haj-Shafiei, Serafini, y Mehrotra¹²², Singh *et al.*¹²³ y Huang *et al.*¹²⁴ para representar el

¹¹⁹ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64 .

¹²⁰ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹²¹ Dmitry Eskin, John Ratulowski, y Kamran Akbarzadeh, "A model of wax deposit layer formation", *Chemical Engineering Science*, 97 (2013), 311–19.

¹²² Samira Haj-Shafiei, Dalia Serafini, y Anil K Mehrotra, "A steady-state heat-transfer model for solids deposition from waxy mixtures in a pipeline", *Fuel*, 137 (2014), 346–59.

¹²³ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹²⁴ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE*

comportamiento de los grupos de compuestos presentes en el crudo es importante. Debido al gran número de compuestos presentes en los crudos a trabajar, y la complejidad en los modelos termodinámicos necesarios para describir el equilibrio líquido-sólido, se utilizó un único pseudocompuesto representativo de las parafinas en la ecuación de transporte de especies para poder simular el proceso como monofásico bi-componente en el que el crudo se soluciona de manera implícita.

El «*shear removal*» o «*shear stripping*» no se consideró ya que este fenómeno se presenta principalmente bajo condiciones de flujo turbulento¹²⁵ y requiere de experimentación para calibrarlo. De los modelos revisados, el modelo de Huang *et al.*¹²⁶ y Banki *et al.*¹²⁷ son los que tienen una representación más física que matemática ya que intentan representar los fenómenos de formación de depósitos más que correlacionar variables (lo que los hace más atractivos para el FVM). El modelo de Huang (MWP) fue escogido por su simplicidad en cuanto al campo de flujo a resolver, este modelo asume el depósito como una estructura cristalina en la que no hay transporte convectivo. Además, las parafinas depositadas se consideraron como un pseudocompuesto, por lo que no es coherente utilizar un modelo termodinámico de equilibrio LS para calcular la fracción sólida. Aunque en régimen laminar la precipitación no está presente, la precipitación se modeló según lo propuesto por Huang *et al.*¹²⁸ para analizar el comportamiento de las variables de respuesta al presentarse cambios en la constante de precipitación.

El campo de flujo fue resuelto por medio del método SIMPLE, los balances de masa y energía se obtuvieron por las Ecs. (5) y (6) extendidas al campo de flujo calculado, y finalmente, el espesor y fracción másica se calcularon solucionando los balances

Journal, 57.11 (2011), 2955–64 .

¹²⁵ Wenda Wang y Qiyu Huang, “Prediction for Wax Deposition in Oil Pipelines Validated by Field Pigging”, *Journal- Energy Institute*, 87 (2014), 196–207.

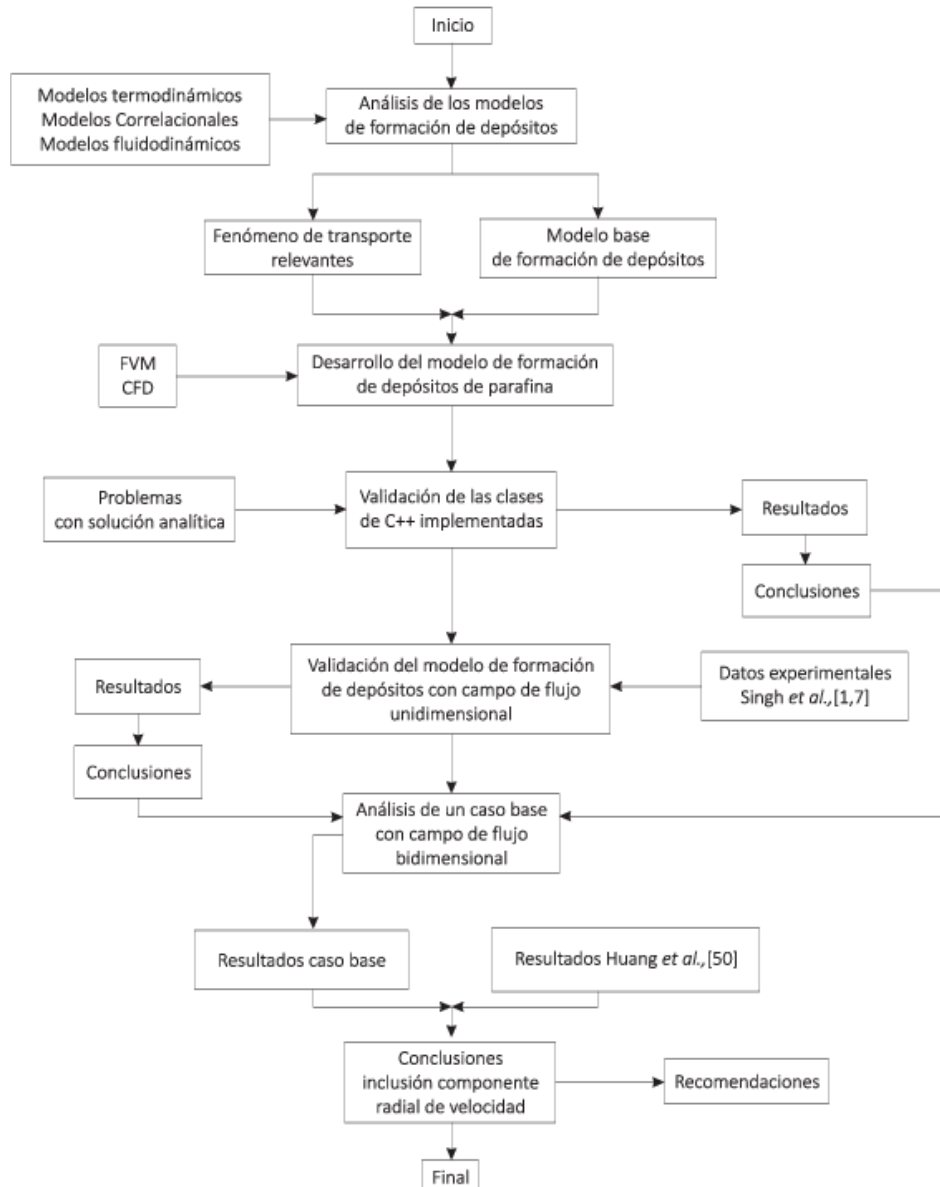
¹²⁶ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

¹²⁷ R Banki, Hussein Hoteit, y Abbas Firoozabadi, “Mathematical formulation and numerical modeling of wax deposition in pipelines from enthalpy–porosity approach and irreversible thermodynamics”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), 3387–98.

¹²⁸ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

de masa en la interfase e interior del depósito adecuados al FVM. Todo esto se solucionó en un dominio bidimensional utilizando una condición de axi-simetría. La solidificación y acumulación de las parafinas en las paredes de la tubería se modeló utilizando la aproximación de bloqueo de regiones presentada por Patankar¹²⁹.

Figura 9 Metodología para el desarrollo del modelo de simulación



¹²⁹ Suhas Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980.

El crecimiento del depósito se modeló de la misma manera que en la Ec. (15) evaluando los flujos en la interfase. Sin embargo, el envejecimiento propuesto por el MWP (Ec. (14)) es conocido como método de sistemas concentrados, el cual asume que para este problema la concentración de parafina en el depósito depende sólo del tiempo. Por esta razón se resolvió la ecuación de transporte para difusión pura (balance radial de masa) dentro del depósito, como lo propone Singh *et al.*¹³⁰, lo que permite calcular las variaciones radiales dentro del depósito. La difusividad de las parafinas en el crudo se calculó por la correlación de Hayduk y Minhas¹³¹ y la difusividad de las parafinas en el depósito utilizando el modelo de difusividad efectiva de Cussler *et al.*¹³². Se utilizó la información recogida por Singh *et al.* sobre la dependencia del parámetro morfológico alfa con las condiciones de operación. La conductividad térmica del depósito fue modelada por una correlación de Maxwell¹³³.

2.1.2 Elección de los datos experimentales para validación. El MWP está basado en el trabajo de Singh *et al.*¹³⁴ por lo que se usaron datos experimentales presentados en esos trabajos para realizar la validación del modelo de simulación. El primer grupo de pruebas consiste en 6 experimentos: 3 variando la temperatura de pared con el resto de parámetros fijos y 3 variando el flujo másico con el resto de parámetros fijos, estas pruebas se realizaron con un crudo y unas condiciones de operación que propician la formación de depósitos de bajo espesor¹³⁵. El segundo grupo de pruebas consiste en 6 experimentos divididos de la misma manera que el primer grupo, sin embargo, en este caso las condiciones de operación y la cantidad de parafinas presentes en el crudo propician la formación

¹³⁰ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹³¹ W Hayduk y B S Minhas, "Correlations for Prediction of Molecular Diffusivities in Liquids **", en *30th Canadian Chemical Engineering Conference* (Edmonton, Alberta., 1982), pp. 295–99.

¹³² E L Cussler et al., "Barrier membranes", *Journal of Membrane Science*, 38.2 (1988), 161–74.

¹³³ H. S. Carslaw y Jaeger J. C., "Conduction of Heat in Solids", en *Clarendon Press 2nd ed.* (Oxford, 1959).

¹³⁴ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹³⁵ Probjot Singh et al., *Ibid* p. 1059–74.

de depósitos de gran espesor. El propósito de estas pruebas es comprobar que las tendencias en las variables de respuesta se cumplan al hacer las variaciones en los parámetros de entrada. Estas pruebas de validación se realizan utilizando un campo de flujo unidireccional en la coordenada axial, según la metodología que Huang *et al.*¹³⁶ presentan en el MWP.

Finalmente, se tienen los datos presentados por Huang *et al.*¹³⁷ para una prueba a escala de laboratorio, el objetivo de esta prueba fue comparar directamente el efecto de la inclusión de la componente radial de la velocidad en las variables del proceso encontradas por el presente trabajo de investigación con los datos presentados por Huang *et al.*¹³⁸.

La información necesaria para el modelado del crudo como es su composición (compuestos parafinicos), curva de solubilidad, sus propiedades físicas, y resultados de pruebas experimentales realizadas, se tomaron del trabajo de Singh *et al.*¹³⁹. En esta sección se presenta parte de la información del crudo, sin embargo, en la validación del modelo se resumirá toda la información necesaria para la simulación. La distribución por número de carbonos para el crudo mobil M140 se presenta en la Figura 10.

Ya que la precipitación del MWP es modelada por medio de una relación con la concentración de saturación para las parafinas, se debe contar con la curva de solubilidad para el crudo, la cual se presenta en la Figura 11.

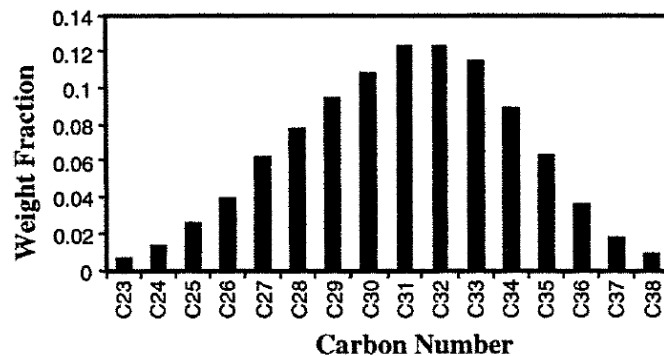
¹³⁶ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64 .

¹³⁷ Zhenyu Huang et al., *Ibíd*, p. 2955–64 .

¹³⁸ Zhenyu Huang et al., *Ibíd*, p. 2955–64 .

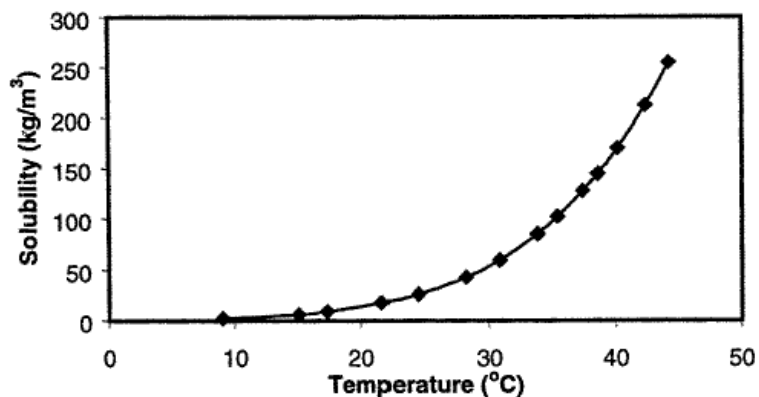
¹³⁹ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

Figura 10 Distribución de carbonos para las parafinas en el crudo mobil M140.



Tomada de Singh *et al.*¹⁴⁰.

Figura 11 Curva de solubilidad para las parafinas en el crudo mobil M140.



Tomada de Singh *et al.*¹⁴¹.

Por otra parte, los datos experimentales sobre el espesor del depósito y la fracción de parafinas como una función en el tiempo se muestran en la Figura 12, en donde se pueden observar las tendencias de crecimiento y envejecimiento de este.

Además, se cuenta con el cambio en la fracción másica dentro del depósito (Figura

¹⁴⁰ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

¹⁴¹ Probjot Singh et al., *Ibíd*, p., 1059–74.

13), corroborando los fenómenos de contra-difusión de los compuestos livianos llevando al envejecimiento del depósito.

Adicionalmente se cuenta con análisis del efecto de la temperatura de pared y del flujo volumétrico en las variables de respuesta, la caída de presión para la tubería en el tiempo y el cambio en la morfología de los cristales de parafinas para distintas condiciones de flujo, sin embargo estos resultados se irán presentando durante la validación del modelo.

2.1.3 Propiedades del crudo. El modelo desarrollado en este trabajo de investigación cuenta con una expresión para el cálculo de la conductividad térmica del depósito, esta es función de la conductividad térmica del crudo y de las parafinas, además de la capacidad calorífica de estos. El documento que tiene las propiedades del crudo utilizado para una parte de las pruebas ¹⁴² solo presenta viscosidad, densidad y distribución de compuestos por número de carbonos. Los datos faltantes fueron suministrados directamente por el Profesor Scott Fogler (quien hace parte del grupo de investigación donde se desarrolló el MWP), y se presentan en la sección de resultados. Aunque el crudo utilizado en la segunda sección de pruebas se sintetizó de la misma manera que el de la primera sección, la cantidad de parafinas presente cambia del 0.67% al 3% por lo que se espera un cambio en las propiedades, sin embargo, Singh *et al.* ¹⁴³ no presentaron los datos en el documento. Los datos faltantes para la segunda sección de pruebas fueron obtenidos del trabajo de Hoteit, Banki y Firoozabadi ¹⁴⁴ en el cual utilizaron las pruebas experimentales de Singh *et al.* ¹⁴⁵ para realizar la validación.

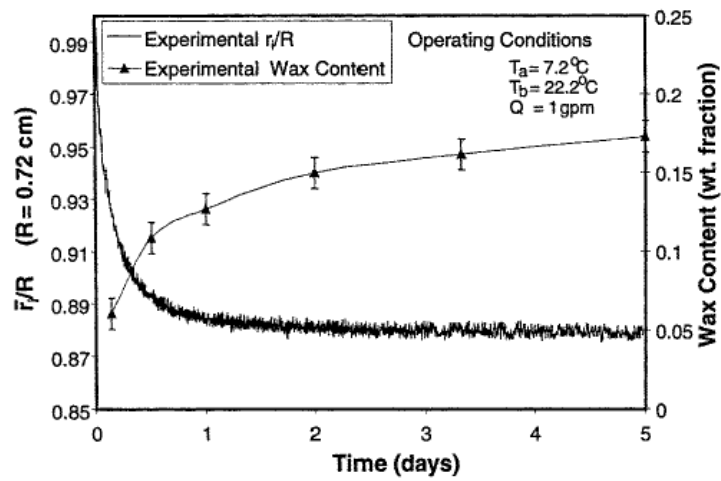
¹⁴² Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

¹⁴³ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹⁴⁴ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

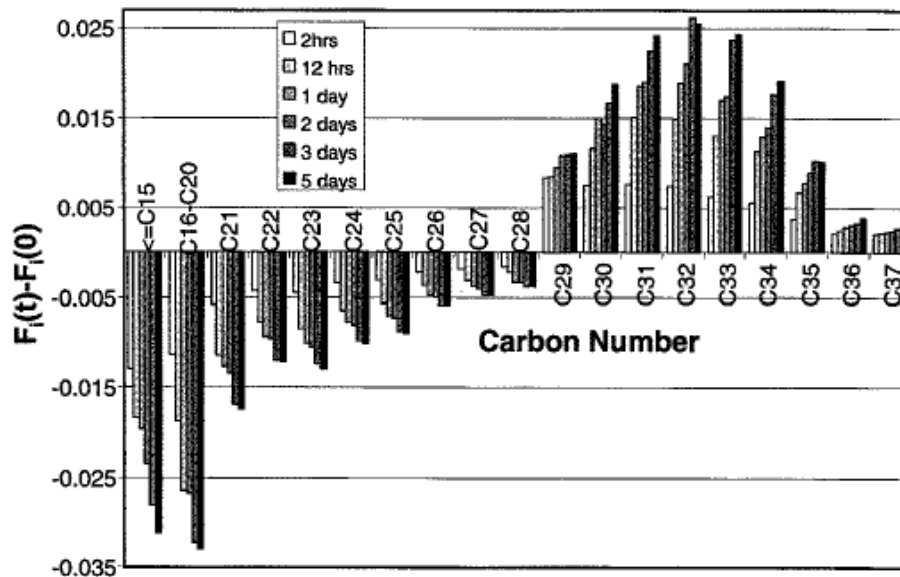
¹⁴⁵ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

Figura 12 Radio interno de la tubería y fracción másica de las parafinas



Tomada de Singh *et al.*¹⁴⁶.

Figura 13 Cambios en la distribución de los carbonos dentro del depósito.



Tomada de Singh *et al.*¹⁴⁷.

2.1.4 Planteamiento del modelo final de simulación La implementación del

¹⁴⁶ Probjot Singh *et al.*, "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

¹⁴⁷ Probjot Singh *et al.*, *Ibíd*, p. 1059–74.

modelo de simulación mediante librerías de C++ se hizo como un proceso por etapas con revisión y validación individual. Los problemas de fenómenos de transporte relacionados en este trabajo se dividen en tres grupos: difusión pura, convección-difusión con campo de flujo conocido, convección-difusión con cálculo de campo de flujo. Cada etapa es requerida para el cálculo de la siguiente, por esta razón se validaron individualmente, asegurando de esta forma que cualquier problema encontrado en la implementación pudiera ser depurado de manera satisfactoria.

Adicionalmente se realizó un estudio de mallado con el fin de captar los fenómenos que ocurren de manera adecuada, especialmente los fenómenos en la región próxima a la pared de la tubería en donde se forma el depósito. Al ser una zona de interés, se realizó un mallado densificado (con mayor número de elementos) hacia la pared para aumentar la precisión de los cálculos sin tener que utilizar una número exageradamente alto de elementos en la dirección radial.

Ya que el espacio disponible para la región fluida cambia con el tiempo debido a la disminución del diámetro efectivo de la tubería por la formación del depósito, se debe recalcular el campo de flujo para cada paso de tiempo, para esto se utilizó la aproximación presentada por Patankar¹⁴⁸ para el bloqueo de regiones, con el fin de imponer una velocidad igual a cero en la zona interna del depósito. Aunque esto se puede implementar de una manera sencilla dentro del modelo de simulación, no es rentable en términos computacionales. Para calcular variables como la temperatura y concentración se requiere conocer previamente el campo de flujo por lo tanto este debe haber convergido con un error lo suficientemente bajo como para asegurar que la temperatura y concentración obtenidas en cada punto del dominio tengan el menor error posible. El proceso de convergencia en el cálculo del campo de flujo para alcanzar un residuo de $1 * 10^{-6}$ toma entre 5 y 8 horas, si se realiza para cada paso de tiempo, el tiempo total de computo sería extremadamente elevado, cabe aclarar que esto no se debe al modelo de simulación sino al equipo utilizado para el

¹⁴⁸ Suhas Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980.

proceso de simulación, el sistema operativo en el que fue ejecutado y la falta de procesamiento en paralelo.

Para lidiar con los tiempos de computación elevados se propuso una alternativa de cálculo. Se estableció un parámetro para calcular el campo de flujo cada vez que el depósito creciera un 1% o hubieran pasado 12 horas (de proceso simulado) desde la última vez que se calcularon las velocidades. Esta estrategia se adoptó para buscar un equilibrio entre el error y los tiempos de cómputo requeridos para completar una prueba.

2.2 VALIDACIÓN DE LAS CLASES DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA:

Ya que el modelo de simulación se implementó utilizando clases del lenguaje de programación C++, se escogieron problemas de la literatura que cuentan con una solución analítica para la respectiva validación de cada clase.

Los problemas escogidos fueron:

- Difusión pura: Conducción en estado estacionario en un cilindro hueco¹⁴⁹
- Convección-difusión (con campo de flujo): Convección forzada con flujo de calor en la envoltura¹⁵⁰ y con temperatura fija en la pared.
- Convección-difusión (con cálculo de campo de flujo): Flujo entre placas no paralelas¹⁵¹ y flujo en un ducto con sección convergente¹⁵².

Una vez realizada la validación para el cálculo del campo de flujo (Ecuaciones de Navier-Stokes), y el transporte por convección y difusión en las distintas geometrías,

¹⁴⁹ W M Deen, *Analysis of Transport Phenomena*, Topics in Chemical Engineering (OUP USA, 1998).

¹⁵⁰ R. Bird, W. Stewart, y E. Lightfoot, *Fenómenos de transporte*, 2a ed. (México: John Wiley & Sons, 2006).

¹⁵¹ W M Deen, *Analysis of Transport Phenomena*, Topics in Chemical Engineering (OUP USA, 1998).

¹⁵² R. Byron; Bird, Robert C.; Armstrong, y Ole Hassanger, *Dynamics of polymeric liquids, Fluid mechanics*, ed. Wiley, Wiley interscience, 2a ed., 1987, xxv.

se validó el modelo acoplado de transporte de momento, masa y energía, junto con las ecuaciones para acumulación. Todas las validaciones fueron realizadas comparando directamente la variable de estudio obtenida mediante la solución analítica y la solución numérica con su respectivo error por medios gráficos.

2.3 VALIDACIÓN DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINAS EN UN PROCESO CON CRUDO SINTÉTICO:

El modelo fue validado utilizando los datos tomados de los trabajos de Huang *et al.*¹⁵³ y Singh *et al.*¹⁵⁴. El caso de simulación se trata de una tubería de 2.4 m de longitud y 1.44 cm de diámetro interno para el primer grupo de pruebas; y 2.2 cm para el segundo grupo. El fluido de prueba usado en la experimentación es un crudo sintético elaborado a partir de una mezcla de aceite mineral y keroseno junto con parafina de calidad alimentaria. La distribución de carbonos de la parafina es de C_{23} a C_{28} . Las condiciones del proceso a simular se encuentran dentro del régimen laminar y el fluido se deja circular por un periodo de 120 horas para el primer grupo de pruebas y 96 horas para el segundo grupo.

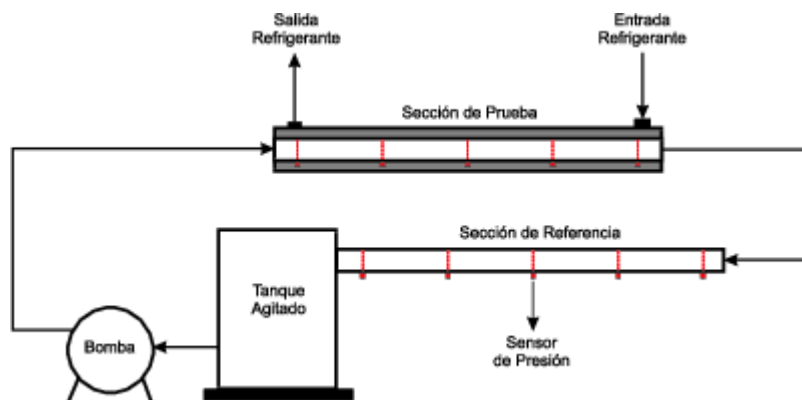
El montaje experimental empleado por Singh *et al.*¹⁵⁵ consiste de un tanque agitado en el cual se mantiene una reserva de crudo a una temperatura superior al WAT del crudo, dicho crudo se bombea hacia una sección de prueba donde se enfría utilizando un intercambiador de chaqueta por el cual se hace pasar un refrigerante, finalmente el crudo regresa al tanque agitado atravesando la sección de referencia. Tanto en la sección de prueba como en la de referencia se instalaron sensores de presión para calcular el crecimiento del depósito mediante diferencias de presión entre cada sección. Los sensores de presión se instalaron cada 60 cm dividiendo así la tubería en 4 secciones, esto se muestra en la Figura 14.

¹⁵³ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64 .

¹⁵⁴ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹⁵⁵ Probjot Singh et al., *Ibíd*, p. 1059–74; Probjot Singh et al., *Ibíd*, p. 6–18.

Figura 14 Montaje experimental.



Adaptada de Singh *et al.*¹⁵⁶.

2.4 ANÁLISIS DEL CASO BASE DE ESTUDIO INCLUYENDO LA COMPONENTE RADIAL DE LA VELOCIDAD:

Una vez se realizó la validación del modelo de simulación, se compararon los resultados del espesor del depósito obtenidos para tres escenarios: suministrando el campo de flujo para una tubería circular recta, calculando el campo de flujo teniendo en cuenta las variaciones en el campo de flujo creadas por la presencia del depósito de parafinas, y los datos obtenidos por el MWP, todo esto junto a los datos experimentales obtenidos originalmente por Singh *et al.*¹⁵⁷. Adicionalmente se realizó el análisis del efecto de la componente radial en la temperatura y concentración y las repercusiones de estos efectos en los valores finales del espesor del depósito. Esto se consigue comparando perfiles radiales de temperatura presentados por diferentes autores¹⁵⁸ y gráficas para la velocidad axial y radial en la sección media de la tubería¹⁵⁹, junto a las predicciones del espesor del

¹⁵⁶ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

¹⁵⁷ Probjot Singh et al., *Ibíd.*, p. 1059–74.

¹⁵⁸ Probjot Singh et al., *Ibíd.*, p. 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18; Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

¹⁵⁹ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

depósito como una función del tiempo para el experimento estudiado¹⁶⁰.

¹⁶⁰ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64; Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

3. DESARROLLO DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA

Luego de hacer la revisión de todos los modelos comerciales, académicos y de flujo nombrados en el capítulo 1, se decidió utilizar el MWP como base para nuestro trabajo, ya que se considera que la elección de simplificaciones y suposiciones son las más adecuadas para representar exitosamente la acumulación de parafinas. El objetivo del trabajo de investigación es la extensión del MWP a un campo de flujo bidimensional.

El modelo de simulación se divide en 3 conjuntos de ecuaciones:

- Ecuaciones de Navier-Stokes en coordenadas cilíndricas para el cálculo del campo de flujo.
- Ecuación de energía y especies para la fase sólida y la fase fluida.
- Balances interfaciales para obtención del espesor del depósito y la fracción másica de parafinas en el depósito.

Todas las ecuaciones presentadas en esta sección fueron discretizadas según el método de volúmenes finitos presentado en el Anexo A, utilizando el esquema de discretización espacial híbrido y un esquema de discretización temporal implícito.

3.1 CAMPO DE FLUJO

Para la situación estudiada es supuesto que $\mathbf{v} = v_r(\mathbf{r}, \mathbf{z}, t)\mathbf{i}_r + v_z(\mathbf{r}, \mathbf{z}, t)\mathbf{i}_z$, por tanto las componentes r y z de la ecuación de Navier-Stokes son:

$$\rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial r} - \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr}) + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} \right) \quad (21)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} - \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz}) + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) \quad (22)$$

Es de resaltar que a diferencia de los otros modelos estudiados donde es usado el perfil de velocidad para flujo totalmente desarrollado en tubería, aquí se resuelve el campo de flujo con el objetivo de tener en cuenta la componente de velocidad

generada por la forma del depósito. Cabe aclarar que aunque el MWP ha sido extendido a régimen turbulento, en este trabajo solo se consideraron pruebas en régimen laminar.

3.2 TRANSFERENCIA DE MASA Y ENERGÍA

EL modelo resuelve el campo de temperatura y concentración, solucionando las Ecs. (23) y (24) en la región fluida y la Ec. (25) en la región sólida. Las ecuaciones son discretizadas de la misma manera que las ecuaciones de NS.

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + v_z \frac{\partial T}{\partial z}\right) = \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha_T r \frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right] \quad (23)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} + v_r \frac{\partial C}{\partial r} + v_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) = \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_{wo} r \frac{\partial C}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right] - k_r [C - C_{ws}(T)] \quad (24)$$

$$\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha_T^s r \frac{\partial T^s}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 T^s}{\partial z^2}\right] = 0 \quad (25)$$

El campo de concentración de parafinas dentro del depósito no es obtenido solucionando ecuaciones de transporte ya que la concentración en cada volumen de control está dada por la concentración de saturación a la temperatura del volumen de control. Para la solución de elementos pertenecientes al depósito, el valor de la concentración es fijado por medio del término fuente (Ec. (108))¹⁶¹.

La Ec. (7) para D_{wo} empleada en la Ec. (24) requiere de: V_A que es el volumen molar de las parafinas que para este caso es de $430 \text{ cm}^3/\text{mol}$, y γ es un parámetro adimensional, que para este trabajo tiene un valor de $\gamma = -0.767$ ¹⁶². La difusividad de las parafinas en el depósito se calcula por medio del modelo de difusividad efectiva de Cussler, Ec. (17).

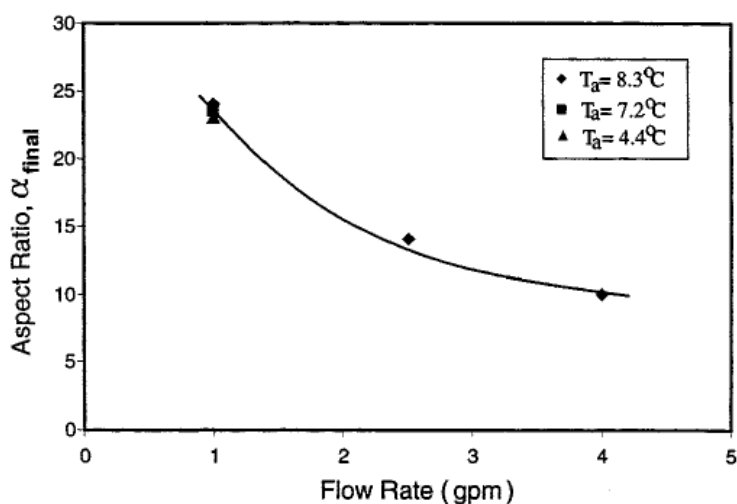
El parámetro α varía con el tiempo, desde el momento que se inicia el proceso de nucleación incrementa con la fracción másica de parafinas dentro del depósito.

¹⁶¹ Suhas Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980.

¹⁶² Hyun Su Lee, "Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines" (The University of Michigan 2008, 2008).

Distintos autores¹⁶³ realizaron estudios experimentales sobre este aspecto morfológico de las parafinas, del cual concluyeron que el valor final del aspecto (α_{final}) está relacionado directamente con el caudal empleado en cada una de las pruebas (Figura 15), además, poco se ve afectado por los cambios en otras condiciones de operación, como temperatura de entrada o de pared. Los autores sugieren una dependencia lineal del parámetro α con F_w , de esta manera se puede realizar el ajuste para cada prueba según se desee calibrar el modelo, tema que se tratará en el análisis de resultados.

Figura 15 Aspecto final promedio de los cristales de parafina para distintos caudales



Tomada de Singh et al.¹⁶⁴.

La conductividad térmica del depósito para la solución de la ecuación de energía dentro del depósito se puede expresar por medio de una correlación de Maxwell, la cual se puede expresar como una función del contenido de parafinas dentro del depósito¹⁶⁵.

¹⁶³ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹⁶⁴ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

¹⁶⁵ H. S. Carslaw y Jaeger J. C., "Conduction of Heat in Solids", en *Clarendon Press 2nd ed.* (Oxford,

$$k_{dep} = \frac{[2k_{wax} + k_{oil} + (k_{wax} - k_{oil})F_w]}{[2k_{wax} + k_{oil} - 2(k_{wax} - k_{oil})F_w]} k_{oil} \quad (26)$$

Finalmente la precipitación de los compuestos parafínicos es calculada por la Ec. (20).

$$\frac{k_r}{k_{r,cloud}} = \left(\frac{T}{T_{cloud}}\right)^{1.47} \exp\left[\frac{\gamma E}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{cloud}}\right)\right] \quad (27)$$

El parámetro $k_{r,cloud}$ es un parámetro sintonizable para cada uno de los crudos, y aunque sirva para sintonizar la constante de precipitación, esta debe estar limitada por condiciones físicas reales, descritas por los casos explicados en las secciones 1.5.2.1 y 1.5.2.2. Sin embargo, por los límites del alcance de este trabajo, las pruebas para validación se realizaron en régimen laminar, y bajo estas condiciones, la constante de velocidad de precipitación es igual a cero ($k_r = 0$)¹⁶⁶, lo que indica que la precipitación de parafina es despreciable y el proceso se reduce a lo propuesto en el escenario 1 de la sección 1.5.2 que corresponde al modelo IHMT.

3.3 CONDICIONES DE FRONTERA

En la Figura 16 se presenta el dominio de simulación para el modelo y las zonas en donde las condiciones de frontera presentadas en las Ecs. (28) y (29) junto a las presentadas en la Tabla 1.

Para este dominio la condición de simetría fue empleada en el centro de la tubería para todas las variables, lo cual matemáticamente se expresa de la siguiente manera:

$$\frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial v_z}{\partial r} = v_r = 0 \quad (28)$$

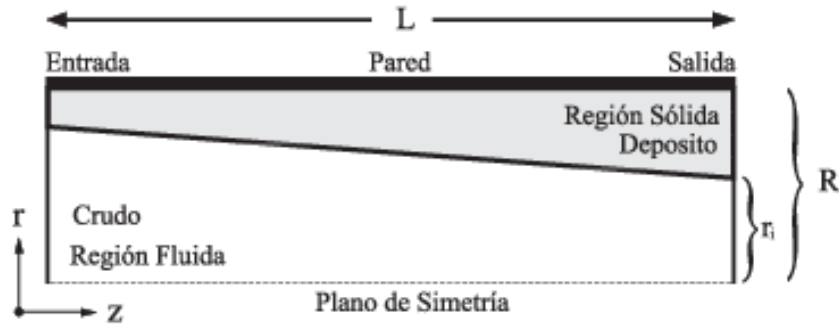
Al final de la tubería se utilizó la condición conocida como “*Outflow*”, que matemáticamente implica:

1959).

¹⁶⁶ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

$$\frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial v_z}{\partial z} = \frac{\partial v_r}{\partial z} = 0 \quad (29)$$

Figura 16 Dominio de simulación.



El resto de las condiciones de frontera utilizadas se resumen en la Tabla 1, los valores a la entrada de la tubería son los valores iniciales para cada una de las propiedades, para la ecuación de conservación de momento se utiliza la condición de no deslizamiento en la pared, para la conservación de especies la condición de no-permeabilidad y finalmente, se fija una temperatura constante en la pared.

Tabla 1 Condiciones de frontera para el modelo de simulación.

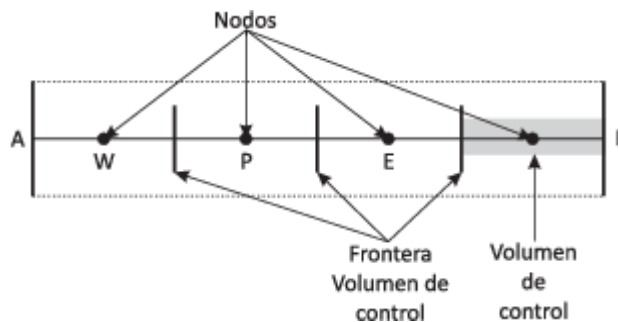
Propiedad	v_z	v_r	T	C
Entrada	$v_{z,o}$	0	T_o	C_o
Pared	0	0	T_{wall}	$\frac{\partial C}{\partial r} = 0$

3.4 ECUACIONES DE CONSERVACIÓN FVM

3.4.1 Sistema de referencia y notación Las ecuaciones del modelo de formación de depósitos de parafina son solucionadas empleando la técnica conocida como dinámica de fluidos computacional y el método de volúmenes finitos (Anexo A). Este método convierte un espacio continuo en un espacio discreto mediante el uso de un

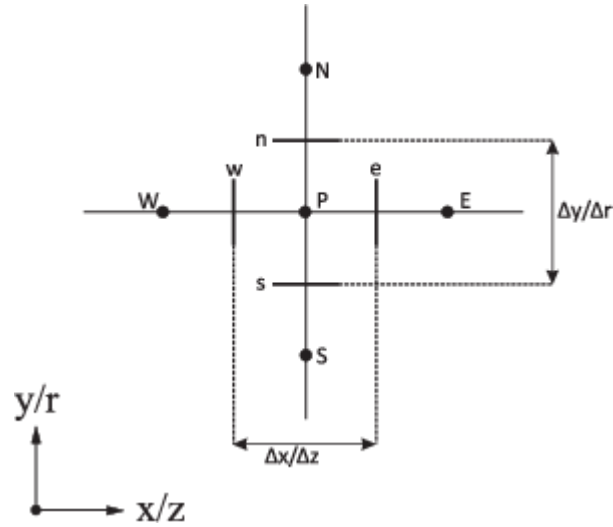
procedimiento conocido como mallado; esto permite convertir el conjunto de ecuaciones diferenciales en un conjunto de ecuaciones algebraicas, las cuales se aplican sobre el dominio discreto. Cada elemento de la malla en donde se aplican las ecuaciones algebraicas se conoce como volumen de control (VC) y está compuesto por un centroide y fronteras; estas lo separan de los otros volúmenes de control como se observa en la Figura 17.

Figura 17 Dominio discretizado unidimensionalmente



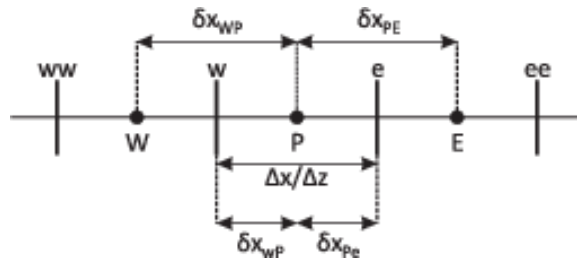
Para establecer un sistema de referencia para una malla en coordenadas cartesianas o cilíndricas se presenta en la Figura 18 un volumen de control P. Ya que en el método de volúmenes finitos se deben evaluar propiedades en posiciones relativas al centroide del volumen de control P, la notación en el sistema de referencia es relativa al centroide de P. Las letras mayúsculas N, S, W y E son utilizadas para indicar que la posición a la que se hace referencia es el centroide de los volúmenes de control ubicados al norte, sur, oeste y este del volumen de control P respectivamente. Por otro lado, un volumen de control P tiene cuatro fronteras conocidas como caras, cuya referencia se denota con las letras minúsculas n, s, w y e para las caras norte, sur, oeste y este respectivamente. De esta manera, podemos observar en la Figura 18 que el volumen de control P conecta con su vecino norte (N), sur (S), oeste (W) y este (E) por las caras norte (n), sur (s), oeste (w) y este (e). Entendiéndose por norte la dirección en la que aumenta en sentido positivo el eje y o eje r y por este, la dirección en la que aumenta en sentido positivo el eje x o el eje z .

Figura 18 Notación para un espacio bidimensional discretizado en volúmenes de control



Además de requerir una notación para posiciones relativas al centroide del volumen de control P, se deben definir distancias medidas desde este punto, como la distancia desde el centroide de P hasta el centroide de uno de sus vecinos o a una de sus caras. Siguiendo la notación presentada en la Figura 19, la distancia entre el centroide del volumen de control P hasta cualquiera de sus caras o centroides de vecinos estará denotada por el símbolo δ acompañado de los subíndices que indican el punto de inicio y el punto final. De esta manera, la distancia entre el centroide de P y el centroide de E está denotada por δ_{PE} , mientras que la distancia desde el centroide de P hasta su cara este será denotada por δ_{Pe} . La notación para el resto de direcciones se obtiene de la misma manera.

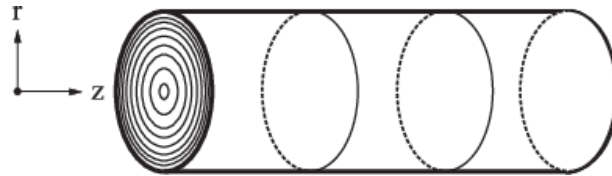
Figura 19 Notación para distancias en un espacio unidimensional discretizado en volúmenes de control



Esta notación se emplea a lo largo del presente trabajo de investigación para denotar propiedades o cantidades evaluadas en puntos específicos de los volúmenes de control, así que de este punto en adelante, el subíndice que acompaña a una cantidad indica en donde debe ser evaluada dicha cantidad.

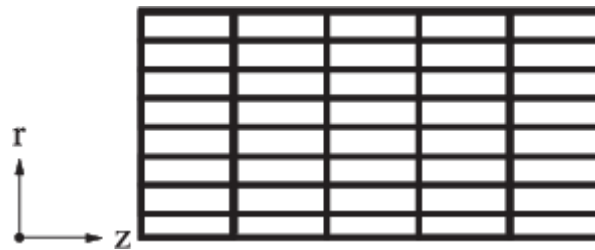
3.4.2 Elementos cilíndricos Para utilizar el FVM en coordenadas cilíndricas se definió un volumen de control con forma de anillo como el que se muestra en la Figura 20.

Figura 20 Discretización de un dominio en coordenadas cilíndricas



Este tipo de VC se definió aprovechando la simetría axial de una tubería cilíndrica y del proceso de formación de depósitos. Por lo tanto el dominio de simulación se reduce al plano $r - z$, el cual se muestra en la Figura 21.

Figura 21 Dominio de simulación para coordenadas cilíndricas.



Las áreas de transferencia y el volumen del VC son calculados por medio del teorema de Pappus-Guldin¹⁶⁷.

¹⁶⁷ J.L. Meriam y L.G. Kraige, *Engineering Mechanics: Statics*, ed. John Wiley & Sons, 7th ed. (Wiley, 2011).

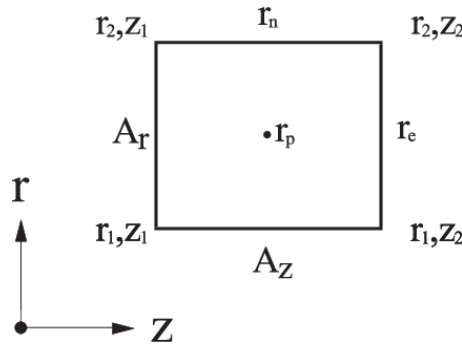
Para las áreas de transferencia el primer teorema establece que:

El área (A) de una superficie de revolución generada mediante la rotación de una curva plana alrededor de un eje externo a tal curva sobre el mismo plano, es igual a su longitud (L), multiplicada por la distancia (d), recorrida por su centroide en una rotación completa (2π) alrededor de dicho eje.

Por lo tanto el área está dada por:

$$A = 2\pi Ld \quad (30)$$

Figura 22 Elemento cilíndrico 2D.



Utilizando la Figura 22 podemos reescribir la Ec. (30) para las áreas de transferencia perpendiculares a los ejes r y z utilizando la cara este (e) y la cara norte (n) respectivamente, de la siguiente manera:

$$A_z = A_e = 2\pi(r_2 - r_1) \left(\frac{r_1 + r_2}{2} \right) = 2\pi r_e \Delta r \quad (31)$$

Donde, $r_2 - r_1 = \Delta r$ y es la distancia desde el eje de revolución hasta el centroide de la cara. Para el área de transferencia perpendicular al eje r tenemos:

$$A_r = A_n = 2\pi(z_2 - z_1) \left(\frac{r_2 + r_1}{2} \right) = 2\pi r_n \Delta z \quad (32)$$

De la misma manera se pueden plantear las áreas para las caras oeste y sur (A_w y A_s respectivamente). Para calcular el volumen (Ω) del elemento se utiliza el segundo teorema:

El volumen(Ω), de un sólido de revolución generado mediante la rotación de un área plana alrededor de un eje externo, es igual al producto del área (A), multiplicada por la distancia (d), recorrida por su centroide en una rotación completa (2π) alrededor de dicho eje.

El volumen (Ω) está dado por:

$$\Omega = 2\pi Ad \quad (33)$$

Utilizando la Figura nuevamente podemos reescribir la Ec. (33) de la siguiente manera:

$$\Omega = 2\pi(z_2 - z_1)(r_2 - r_1) \left(\frac{r_1 + r_2}{2} \right) \quad (34)$$

Ya que el mallado es estructurado y ortogonal, el área de revolución es $\Delta r \Delta z$ y $(r_1 + r_2)/2$ es la distancia desde el eje de revolución hasta el centroide del VC, por lo que la ecuación se puede reescribir como:

$$\Omega = 2\pi r_p \Delta z \Delta r \quad (35)$$

Empleando las Ecs (31), (32) y (35), el proceso de discretización de las ecuaciones de transporte en coordenadas cilíndricas para las coordenadas r y z no requiere de pasos adicionales a los presentados en el Anexo A. Se presenta la ecuación general para FVM con un esquema de tiempo implícito y un esquema espacial híbrido, utilizando la nomenclatura introducida en las secciones A.1 a A.4 y remplazando las áreas de transferencia correspondientes.

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_P^o \phi_P^o + S_u \quad (36)$$

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_P^o + \Delta F - S_P \quad (37)$$

Los coeficientes de los nodos vecinos al elemento P se calculan según el esquema híbrido:

$$a_W = \max \left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right), 0 \right] \quad (38)$$

$$a_E = \max \left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right), 0 \right] \quad (39)$$

$$a_S = \max \left[F_s, \left(D_s + \frac{F_s}{2} \right), 0 \right] \quad (40)$$

$$a_N = \max \left[-F_n, \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right), 0 \right] \quad (41)$$

$$a_P^o = \frac{\rho \Omega_P}{\Delta t} \quad (42)$$

$$\Delta F = F_e - F_w + F_n - F_s \quad (43)$$

Los flux se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2 Flux convectivo y difusivo

Cara	w	e	s	n
<i>F</i>	$(\rho u)_w A_w$	$(\rho u)_e A_e$	$(\rho u)_s A_s$	$(\rho u)_n A_n$
<i>D</i>	$\frac{\Gamma_w}{\delta z_{WP}} A_w$	$\frac{\Gamma_e}{\delta z_{PE}} A_e$	$\frac{\Gamma_s}{\delta r_{SP}} A_s$	$\frac{\Gamma_n}{\delta r_{PN}} A_n$

Finalmente se establecen los valores de Γ para cada caso y los posibles términos fuente se muestran en la Tabla 3.

Donde S_u y S_p son los términos fuente en la Ec. (131). Para la imposición del valor de la concentración en los elementos pertenecientes a la región sólida no se utilizó la misma técnica de término fuente. La inclusión de términos fuente del orden de magnitud de $1 * 10^{30}$ genera comportamientos no deseados dentro de la matriz que se desea resolver, esto debido a que el coeficiente difusivo es del orden de $1 * 10^{-10}$ y el número de elementos sólidos es considerable (10 – 40% de los elementos totales).

Tabla 3 Difusividades y términos fuente

		Fluido ($f_s = 0$)			Sólido ($f_s = 1$)		
Ecuación	ϕ	Γ	S_u	S_p	Γ	S_u	S_p
Momento en r	v_r	μ	$-\frac{\partial P}{\partial r}$	-	-	0	1×10^{30}
Momento en z	v_z	μ	$-\frac{\partial P}{\partial z}$	-	-	0	1×10^{30}
Energía	T	$\frac{k_{oil}}{C_p}$	-	-	$\frac{k_{dep}(F_w)}{C_p}$	-	-
Especies	C_{wax}	$D_{wo}(T)$	$k_r C_{ws}(T)$	k_r	-	$C_{ws}(T)$	1

Para fijar el valor de la concentración en los elementos sólidos se modificó directamente la línea correspondiente al VC dentro de la matriz. Los contribuciones correspondientes de los vecinos al elemento P e iteraciones anteriores se anularon ($a_w = a_E = a_S = a_N = a_P^0 = 0$), el coeficiente central del VC se fijó como uno ($a_P = 1$) y el término fuente se utilizó para introducir la solución directamente $S_u = C_{ws}(T)$, de esta manera la ecuación correspondiente al VC sólido P se convierte en:

$$(1)C_P = (0)C_w + (0)C_e + (0)C_s + (0)C_n + (0)C^0 + C_{ws}(T) \quad (44)$$

$$C_P = C_{ws}(T) \quad (45)$$

3.5 MODELO DE CRECIMIENTO Y ENVEJECIMIENTO DEL DEPÓSITO

Para realizar la validación de las ecuaciones para el cálculo del espesor del depósito y su fracción másica se debe utilizar el modelo acoplado (Navier-Stokes, temperatura, concentración, crecimiento y envejecimiento del depósito). Sin embargo, antes de simular el proceso de acumulación utilizando el campo de flujo obtenido solucionando las Ecs. (21) y (22), se resolvió suponiendo un perfil de velocidad parabólico para la velocidad axial como lo hacen los modelos previamente

discutidos¹⁶⁸, con el fin de validar el campo de temperatura y concentración de manera separada y con los resultados obtenidos por Singh *et al.*¹⁶⁹ y Huang *et al.*¹⁷⁰.

$$v_z = v_{\max} \left[1 - \left(\frac{r}{\bar{r}_i} \right)^2 \right]; v_{\max} \equiv \frac{2Q}{\pi \bar{r}_i^2} \quad (46)$$

Donde $\bar{r}_i \equiv R - \delta$ y Q es el caudal del fluido.

En este punto se encontró la primera dificultad en la implementación del modelo acoplado, y es que no cumple con la conservación de la masa dentro del dominio discretizado, lo que rompe con el fundamento del método de volúmenes finitos. Para dar solución a este incidente se utilizó una velocidad máxima promedio basada en el radio interno promediado en la dirección axial en el tiempo t , de esta manera el perfil de velocidad axial se expresa como:

$$r < \bar{r}_i \rightarrow v_z = \frac{2Q}{\pi \bar{r}_i^2} \left[1 - \left(\frac{r}{\bar{r}_i} \right)^2 \right] \quad (47)$$

$$r \geq \bar{r}_i \rightarrow v_z = 0 \quad (48)$$

El efecto de esta aproximación sobre los resultados se discute en la sección de resultados.

¹⁶⁸ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64; Hyun Su Lee, “Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines” (The University of Michigan 2008, 2008); Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., “Morphological evolution of thick wax deposits during aging”, *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18; Z. Huang, S. Zheng, y H.S. Fogler, *Wax Deposition: Experimental Characterizations, Theoretical Modeling, and Field Practices*, Emerging Trends and Technologies in Petroleum Engineering (CRC Press, 2016).

¹⁶⁹ Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., “Morphological evolution of thick wax deposits during aging”, *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹⁷⁰ Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64 >.

Adicionalmente, el campo de flujo es calculado cada vez que se cumpla un criterio de crecimiento del depósito o un criterio de tiempo desde el último cálculo, esto se puede expresar de la siguiente manera:

$$\frac{\frac{\bar{r}_i^{\text{old}}}{R} - \frac{\bar{r}_i^{\text{new}}}{R}}{\frac{\bar{r}_i^{\text{old}}}{R}} * 100 = \% \text{crecimiento} \quad (49)$$

En donde $\bar{r}_i^{\text{old}}$ es el valor promedio del radio disponible en el cálculo anterior de las velocidades y $\bar{r}_i^{\text{new}}$ es el valor promedio del radio disponible evaluado en la iteración actual en el tiempo t . Si el **%crecimiento** es mayor o igual al 1% o han pasado 12 horas desde el último cálculo, el campo de flujo debe ser recalculado. La condición de 12 horas se utilizó para recalcular el campo de flujo después de las primeras 24 horas ya que aunque en este periodo el crecimiento es lento, existe un cambio en la forma del depósito y debe considerarse en el cálculo de las velocidades.

3.5.1 Envejecimiento del depósito La ecuación para el envejecimiento del depósito (Ec. (14)) está planteada en forma integral:

$$\Omega \frac{dc}{dt} = -AJ \quad (50)$$

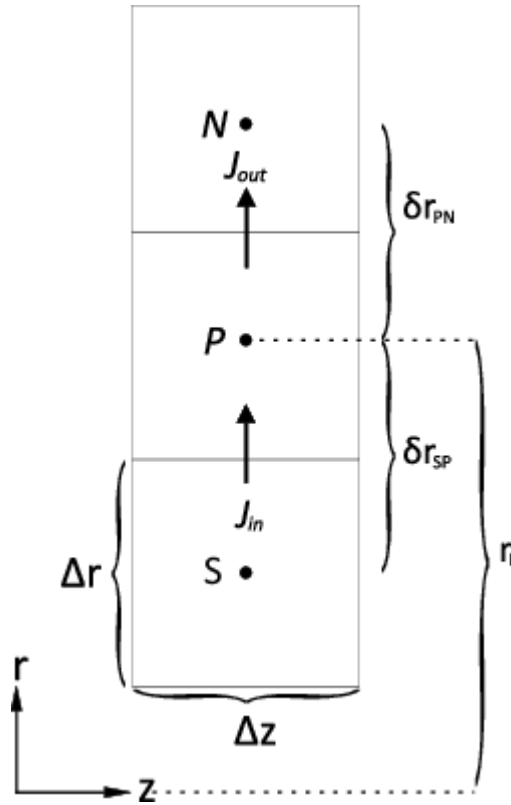
Donde Ω es el volumen cerrado que recibe la masa, A es el área de transferencia en la interfase del volumen y J es el flux del componente que está entrando al volumen a través de la interfase. Para el caso de depósitos de bajo espesor este modelo representa una buena aproximación a la realidad ya que la variación radial en la concentración es baja¹⁷¹, sin embargo, cuando las condiciones de operación favorecen la acumulación severa, el envejecimiento del depósito en la dirección radial puede ser considerable y debe ser incluido.

¹⁷¹ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

Para discretizar la ecuación de balance de masa en el depósito se considera que los cambios en la temperatura en la dirección axial son despreciables en comparación a los cambios en la dirección radial, por lo que el balance de parafinas en el depósito se limitó a la dirección radial.

Por lo tanto, teniendo en cuenta la notación presentada en la Figura 23 para el volumen de control **P**.

Figura 23 Balance radial de parafinas.



La fracción másica de parafina dentro del depósito sólido se expresa como:

$$\rho \Omega_P \frac{dF_w}{dt} = (A j_r)_{r - \frac{\delta r_{SP}}{2}} - (A j_r)_{r + \frac{\delta r_{PN}}{2}} \quad (51)$$

Donde Ω_P representa el volumen del elemento P y está dado por la Ec. (35). Remplazando la expresión para los flux másicos j_r , y llevando la Ec. (51) a una

forma discreta para el volumen de control **P**, obtenemos:

$$\rho\Omega_P \frac{F_w^{t+\Delta t} - F_w^t}{\Delta t} = (Aj_r)_{in} - (Aj_r)_{out} \quad (52)$$

Reorganizando términos

$$F_w^{t+\Delta t} = F_w^t + \frac{\Delta t}{\rho\Omega_P} [(Aj_r)_{in} - (Aj_r)_{out}] \quad (53)$$

Donde el producto de los fluxes másicos por el área está dado por las Ecs. (54) y (55).

$$(Aj_r)_{in} = \left[-(2\pi r_i \Delta z D_{eff})_{r=\frac{\delta r_{SP}}{2}} \left(\frac{C_P - C_S}{\delta r_{SP}} \right) \right] \quad (54)$$

$$(Aj_r)_{out} = \left[-(2\pi r_i \Delta z D_{eff})_{r=\frac{\delta r_{PN}}{2}} \left(\frac{C_N - C_P}{\delta r_{PN}} \right) \right] \quad (55)$$

Si la concentración se expresa en kg/m³, la diferencia de fluxes se entiende como el flujo neto de parafinas entrante al volumen de control P, y el término Ω_P como la masa total almacenada en el volumen del elemento P (kg_{total}), entonces la Ec. (53) representa la acumulación de parafinas en el depósito sólido del elemento P en un intervalo de tiempo Δt , o en otras palabras, el incremento en la fracción másica (envejecimiento) del depósito.

3.5.2 Crecimiento del depósito La discretización en volúmenes finitos del balance de masa interfacial a partir del cual se obtiene la velocidad a la cual crece el depósito requirió de un tratamiento especial que se detalla a continuación.

En el primer modelo, Singh *et al.*¹⁷² solo tuvieron en cuenta cambios en la concentración del depósito y en su espesor en la dirección axial. Se utilizaron correlaciones experimentales para obtener los coeficientes de transporte presentes en los balances interfaciales de masa y energía para calcular el crecimiento y envejecimiento del depósito en el tiempo.

¹⁷² Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

En su trabajo posterior, Singh *et al.*¹⁷³ consideraron los cambios radiales en el envejecimiento, por esto el dominio computacional fue bidimensional. Se usó un cambio de variable en las ecuaciones de acumulación para que una frontera del dominio siempre coincidiera con la interfase del depósito, sin embargo, los efectos de flujo los siguieron incluyendo por medio de las correlaciones experimentales para los coeficientes de transporte en la interfase.

Por otro lado, el modelo de Huang *et al.*¹⁷⁴ (Ec. (15)) consideran una región fluida, las correlaciones experimentales no son incluidas y el envejecimiento promedio del depósito se utiliza para calcular el crecimiento. La ubicación del depósito se utiliza indirectamente en las Ecs (5) y (6) como un criterio para calcular la velocidad axial (Ecs (47) y (48)).

A diferencia de los trabajos de Singh *et al.*¹⁷⁵ y Huang *et al.*¹⁷⁶, en el presente modelo se tiene en cuenta el efecto de la forma del depósito sobre el campo de flujo, y a su vez, el efecto del campo de flujo sobre el espesor del depósito y la concentración de parafinas en el mismo. Para desarrollar esta estrategia se planteó iniciar el proceso de acumulación en dos pasos:

1. Una vez los volúmenes de control inmediatos a la pared de la tubería alcanzan valores por debajo del WAT del crudo, se consideran sólidos ($f_s = 1$). De esta manera se simula la adhesión de la capa incipiente de parafinas lo cual da inicio al proceso de formación del depósito.
2. El volumen de control inmediato a la primera capa sólida de parafinas (volúmenes de control de pared) pasa a servir como interfase entre el fluido

¹⁷³ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹⁷⁴ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

¹⁷⁵ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹⁷⁶ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64 .

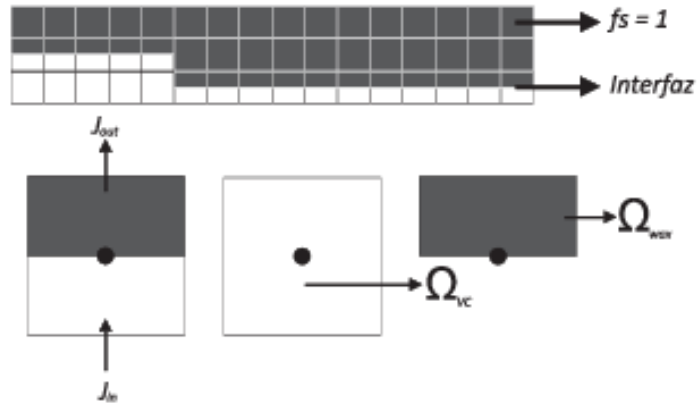
3. y el depósito.

De otro lado, para cuantificar el crecimiento es necesario realizar balances en la interfase del depósito, razón por la cual fue necesario diseñar una estrategia para poder localizar el elemento que sirve como interfase. La estrategia consiste en: identificar el VC cuya fracción sólida sea igual a cero (líquido) y esté conectado por su cara norte a un VC cuya fracción sólida sea igual a uno (sólido). Este elemento servirá como interfase y sobre este VC se realizarán los balances de crecimiento, como se muestra en la Figura 24.

Realizando un balance de masa sobre el elemento presentado en la Figura 24 se puede establecer que la acumulación sobre el volumen de control es igual a la diferencia del flujo de parafinas desde el fluido hacia la interfase y el flujo de parafinas desde la interfase al interior del depósito (Ec. (56)).

$$\frac{d\Omega_{wax}}{dt} = \frac{(Aj_r)_{in} - (Aj_r)_{out}}{(\rho F_w)_n} \quad (56)$$

Figura 24 Acumulación en la interfase del depósito.



Donde el producto de los fluxes másicos por el área está dados por las Ecs (57) y (58).

$$(Aj_r)_{in} = \left[-(2\pi r_i \Delta z D_{wo})_{r-\frac{\delta r_{SP}}{2}} \left(\frac{C_P - C_S}{\delta r_{SP}} \right) \right] \quad (57)$$

$$(Aj_r)_{out} = \left[-(2\pi r_i \Delta z D_{eff})_{r=\frac{\delta r_{PN}}{2}} \left(\frac{C_N - C_P}{\delta r_{PN}} \right) \right] \quad (58)$$

Reorganizando términos y discretizando la ecuación en el tiempo obtenemos la expresión discreta para el cálculo de la acumulación (Ec. (59)).

$$\Omega_{wax}^{t+\Delta t} = \Omega_{wax}^t + \frac{\Delta t}{(\rho F_w)_N} [(Aj_r)_{in} - (Aj_r)_{out}] \quad (59)$$

Es necesario aclarar, que en la Ec. (59) debería aparecer $(\rho[F_w^s - F_w^L])$ en el denominador, sin embargo, teniendo en cuenta que $(F_w^s \gg F_w^L)$, la concentración en el líquido se desprecia resultando así ρF_w^s , donde el superíndice s se elimina por comodidad, mientras que el subíndice N indica que se evalúa en el VC conectado por la cara norte a la interfase (sólido).

La Ec. (59) permite estimar el flujo volumétrico de parafinas entrante al volumen de control. Sin embargo, el volumen de control no puede recibir parafinas indefinidamente ya que tiene un volumen (Ω_{VC}) finito, por lo que se debe establecer un límite en el volumen que este puede recibir, por esta razón la acumulación se evaluó como una cantidad relativa al volumen de la interfase (Ec (60)).

$$\frac{\Omega_{wax}}{\Omega_{VC}} = \text{Acumulación} \quad (60)$$

De esta manera, la acumulación de parafinas en la interfase está controlada tomando valores entre 0 y 1. En caso de que la acumulación calculada en el tiempo $t + \Delta t$ sea igual a la unidad, el volumen de control pasa a considerarse completamente sólido ($f_s = 1$) y el volumen de control vecino pasa a servir como una nueva ubicación para la interfase.

$$\frac{\Omega_{wax}}{\Omega_{VC}} \geq 1; \quad f_s = 1 \quad (61)$$

Aunque en este punto se cuenta con una expresión para calcular el crecimiento del depósito (Ec. (59)), aún debe calcularse el valor del espesor del depósito para poder contrastar la información de la simulación con los datos recolectados para validación.

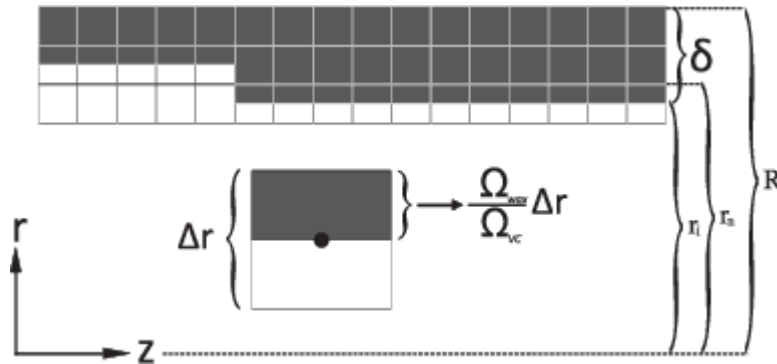
Inicialmente se planteó calcular el valor del radio interno como la coordenada en donde el parámetro de fracción sólida (f_s) cambie de cero a uno (líquido a sólido), pero el valor de la fracción sólida es un valor entero (0 o 1) por lo que no logra capturar el valor exacto hasta que un nuevo VC se solidifique, así que el desarrollo de otra expresión fue necesario. Para este fin, el parámetro de acumulación puede reutilizarse según se muestra en la Figura 25, el valor del radio interno estará dado por la coordenada de la cara ubicada entre elementos con $f_s = 0$ y $f_s = 1$ al sur y al norte respectivamente (entendiendo como norte la dirección positiva en el eje r), menos el porcentaje que se haya acumulado en la interfase, el cual está relacionado con la acumulación.

De esta manera el espesor del depósito puede ser calculado por medio de la Ec. (62).

$$\delta = R - r_i \quad (62)$$

$$r_i = r_n - \left(\frac{\Omega_{wax}}{\Omega_{VC}} \right) \Delta r \quad (63)$$

Figura 25 Espesor del depósito.



3.6 ALGORITMO DE CÁLCULO

En la Figura 26 se presenta el diagrama de flujo para la toma de decisiones en el problema de formación de depósitos:

3.6.1 Algoritmo de cálculo para el campo de flujo El loop de cálculo para las componentes de la velocidad se presenta en la Figura 27.

Las componentes de la velocidad deben iterarse hasta alcanzar errores bajos, el paso de tiempo elegido para resolver las ecuaciones de NS fue escogido bajo dos criterios, la condición CFL (Courant-Friedrichs-Levy) y la velocidad de convergencia. Inicialmente se calculó el número de Courant (C) para asegurar que se cumpla con la condición CFL.

$$C = \frac{v_r \Delta t}{\Delta r} + \frac{v_z \Delta t}{\Delta z} \quad (64)$$

Figura 26 Diagrama de flujo general.

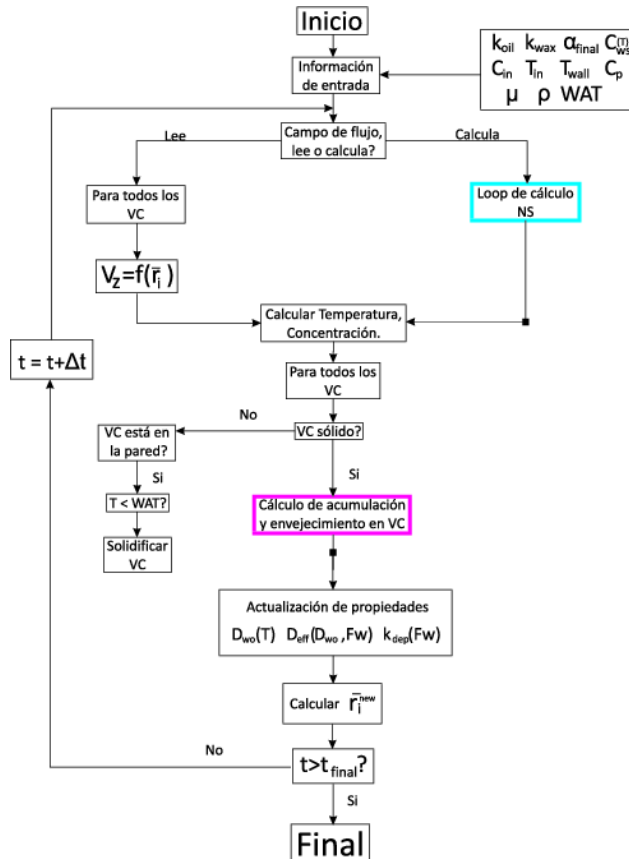
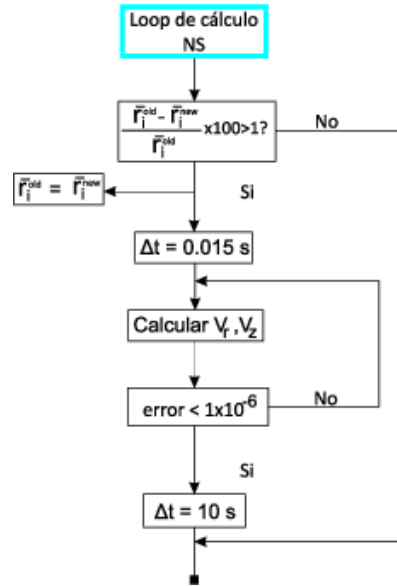


Figura 27 Loop de cálculo para NS.



Ya que el crudo va a sufrir una aceleración debido a la reducción del área transversal disponible, se debe tener en cuenta esta aceleración para calcular la condición CFL bajo el máximo flujo que se pueda presentar. Para tener un estimado del valor máximo que puedan presentar las componentes de la velocidad se utilizó la información para la velocidad radial de Hoteit *et al.*¹⁷⁷ y un estimado hecho por la reducción del radio $\bar{r}_i/R$. Según Hoteit *et al.*¹⁷⁸ el orden de magnitud de la velocidad radial es de $1 * 10^{-4}$ para la prueba escogida para validación, y la relación es de 0.85.

$$v_{z,\max} = \frac{2Q}{A} = \frac{2Q}{\pi(0.85R)^2} = 1.072 \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad (65)$$

El valor de Δr y Δz se obtienen de la malla escogida después de realizar el análisis de sensibilidad de la malla, el cual se presenta más adelante. Remplazando los valores en la Ec. (64) y teniendo en cuenta que el número de Courant no puede ser

¹⁷⁷ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

¹⁷⁸ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

superior a uno (1.0):

$$\frac{1 \cdot 10^{-4} \Delta t}{6 \cdot 10^{-5}} + \frac{1.072 \Delta t}{2.541 \cdot 10^{-2}} \leq 1 \quad (66)$$

Despejando para Δt se obtiene que el paso máximo de tiempo permitido es:

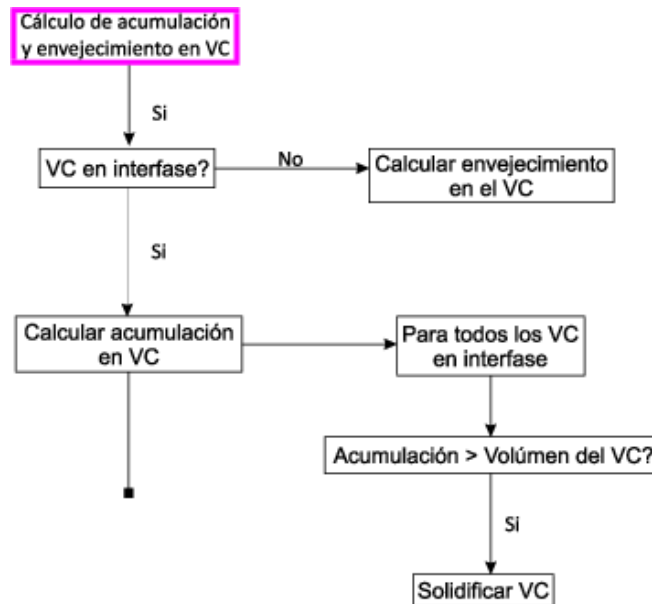
$$\Delta t \leq 2.28 \cdot 10^{-2} s \quad (67)$$

Sin embargo, para dejar un margen para posibles diferencias con los resultados esperados se fija un paso de tiempo de $\Delta t = 0.015s$.

3.6.2 Algoritmo de cálculo para el crecimiento y envejecimiento del depósito

Finalmente, el diagrama para el cálculo del crecimiento y envejecimiento del depósito se presenta en la Figura 28.

Figura 28 Diagrama cálculo del crecimiento y envejecimiento.



4. RESULTADOS DEL MODELO DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS DE PARAFINA

Los resultados numéricos obtenidos por el modelo desarrollado por este trabajo de investigación se presentan a continuación y se dividen en 3 partes:

1. Resultados de la validación individual de las partes del modelo de simulación (difusión, convección-difusión, campo de flujo) por medio de problemas académicos con solución analítica.
2. Resultados de la validación del modelo aplicado a problemas de formación de depósitos de parafina utilizando un campo de flujo unidimensional.
3. Resultados del modelo de formación de depósitos aplicado a un caso base de estudio con campo de flujo bidimensional.

4.1 VALIDACIÓN INDIVIDUAL DE LAS CLASES DE C++ IMPLEMENTADAS

Siguiendo la metodología planteada, la implementación y validación del modelo fue realizado utilizando clases en C++ para cada tipo de transporte. En la Figura 29, se esquematizan las clases independientes en las que se dividió el modelo de formación de depósitos de parafina.

La finalidad de cada una de las clases implementadas en el modelo y mostradas en la Figura son las siguientes:

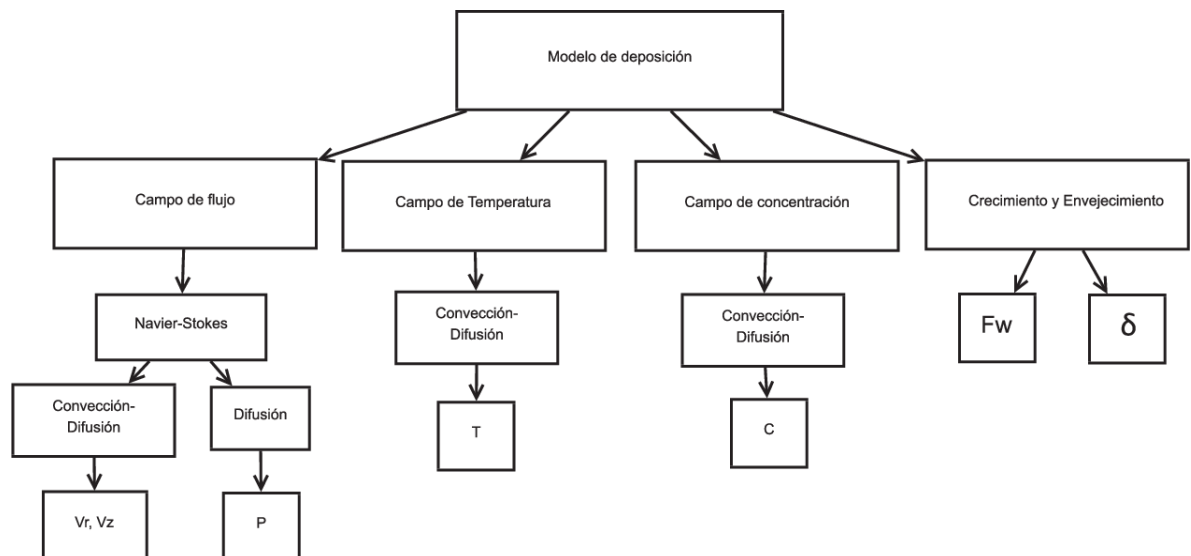
- Difusión: clase encargada de solucionar un campo de una cantidad transportada por difusión pura.
- Convección-Difusión: clase encargada de solucionar un campo de una cantidad transportada por convección-difusión. A esta clase se le debe suministrar el campo de velocidades necesario para calcular los flujos en los elementos discretizados.
- Navier-Stokes: es una clase compuesta, a su vez por una clase de convección-difusión para cada componente de la ecuación de Navier Stokes

involucrada en el problema, y una clase de difusión encargada de solucionar la ecuación de corrección de presión para la obtención del campo de presión final.

- Crecimiento y envejecimiento: la información del depósito como lo es la fracción másica de parafinas y el espesor del depósito no requieren la creación de una clase para su solución, son funciones implementadas individualmente y calculadas a partir de los valores obtenidos de los campos de temperatura y concentración.

A continuación se muestra la validación de cada una de las clases por comparación con soluciones analíticas de problemas de transferencia de calor y de flujo seleccionados.

Figura 29 Estructura de clases para la implementación del problema de acumulación.



4.2 DIFUSIÓN

La primera etapa consistió en la validación de la clase para difusión pura mediante un problema de conducción de calor en un cilindro hueco ilustrado en la Figura 30. El modelo matemático que determina el campo de temperatura del cilindro está dado por la Ec. (68).

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0 \quad (68)$$

Con condiciones de frontera:

$$T(kR, z) = 0 \quad (69)$$

$$T(R, z) = 0 \quad (70)$$

$$T(r, 0) = 1 \quad (71)$$

$$T(r, 1) = 0 \quad (72)$$

Cuya solución analítica usando el método de transformada finitas de Fourier es presentada por Deen y está dada por las Ecs. (73) a (77).

$$T(r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \Theta_n(r) \Phi_n(z) \quad (73)$$

$$\Phi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left(\frac{n\pi z}{L} \right) \quad (74)$$

$$\Theta_n(r) = A_n I_0 \left(\frac{n\pi r}{L} \right) + B_n K_0 \left(\frac{n\pi r}{L} \right) + \left(\frac{L}{n\pi} \right) \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (75)$$

$$A_n = - \left(\frac{L}{n\pi} \right) \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \right) \left[\frac{K_0(n\pi/L) - K_0(n\pi kR/L)}{I_0(n\pi kR/L) K_0(n\pi/L) - I_0(n\pi/L) K_0(n\pi kR/L)} \right] \quad (76)$$

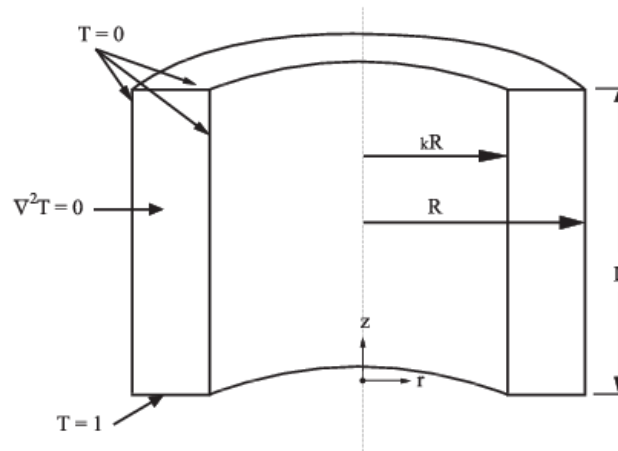
$$B_n = - \left(\frac{L}{n\pi} \right) \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \right) \left[\frac{I_0(n\pi kR/L) - I_0(n\pi/L)}{I_0(n\pi kR/L) K_0(n\pi/L) - I_0(n\pi/L) K_0(n\pi kR/L)} \right] \quad (77)$$

Donde I_0 y K_0 son las funciones de Bessel modificadas de orden cero.

El radio externo del cilindro es $R = 1$ y el radio interno $kR = 0.8$. La comparación de

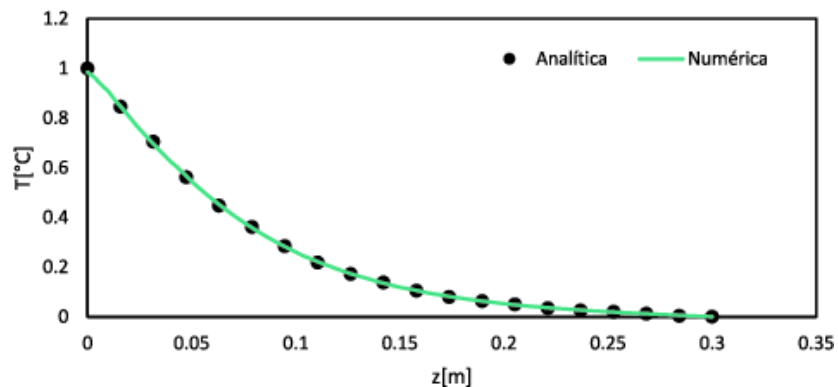
la solución analítica y de la solución numérica obtenida coincide como se puede observar en la Figura 31. Por lo tanto, se dio como validada la clase encargada de solucionar ejercicios de difusión pura.

Figura 30 Dominio para la conducción de calor en un cilindro hueco



Adaptada de Deen ¹⁷⁹

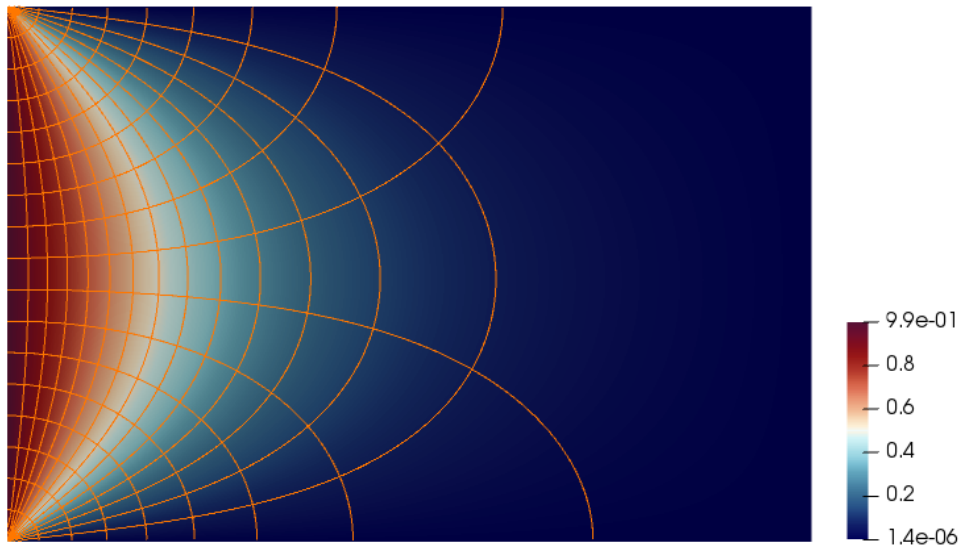
Figura 31 Perfil axial de temperatura para $r=0.9$ dentro de la pared del cilindro.



Para la solución se empleó una malla estructurada de 1296 elementos anulares, la solución se presenta como una función de la coordenada axial para un valor de $R = 0.9$ (coordenada en la mitad de la pared del cilindro).

¹⁷⁹ W M Deen, *Analysis of Transport Phenomena*, Topics in Chemical Engineering (OUP USA, 1998).

Figura 32 Contornos de temperatura para el plano r-z en un cilindro hueco.



Como se puede observar en la Figura 32, los contornos muestran la simetría dentro de la pared del cilindro, esto se esperaba dadas las condiciones de frontera idénticas para la pared externa e interna. Las líneas naranja indican la dirección del flujo de energía, lo que confirma la simetría en el proceso de conducción en el cilindro. Además, se puede observar como la temperatura disminuye desde la base del cilindro ($T = 1$) hasta el tope de este ($T = 0$), como era de esperarse.

4.3 CONVECCIÓN-DIFUSIÓN

Una vez validada la difusión pura, se agregó el cálculo del transporte por convección suministrando el campo de flujo, para realizar la validación de esta etapa se eligieron dos problemas de transporte de energía por convección-difusión, el problema de Graetz y el problema «Calentamiento de un fluido en flujo laminar a través de un tubo circular», de convección forzada del libro de Bird, Stewart y Lightfoot¹⁸⁰.

4.3.1 Problema de Graetz La versión del problema de Graetz empleada para la validación del código consiste en un fluido que entra a una tubería con un perfil de

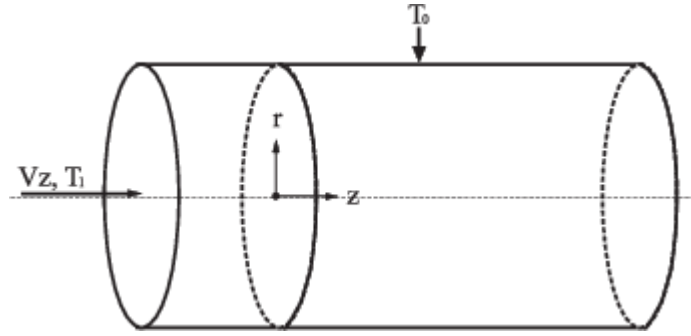
¹⁸⁰ R. Bird, W. Stewart, y E. Lightfoot, *Fenómenos de transporte*, 2a ed. (México: John Wiley & Sons, 2006).

velocidad parabólico desarrollado y una temperatura $T_1 = 1$, el cual fluye por una tubería con una temperatura $T_0 = 0$ en las paredes, como se muestra en la Figura 33.

El objetivo es encontrar el perfil de temperatura en el fluido, la ecuación diferencial que describe el proceso de transporte de energía es la Ec. (78).

$$\rho C_p V_{z,\max} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial T}{\partial z} = k \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (78)$$

Figura 33 Dominio para el estudio del problema de Graetz.



La solución analítica de este modelo es presentada por Belhocine y Wan Omar ¹⁸¹ en la Ec (79) y está en términos de funciones hipergeométricas confluentes.

$$\theta = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-\beta_n^2 \zeta} e^{-\frac{\beta_n \xi^2}{2}} F\left(\frac{1}{2} - \frac{\beta_n}{4}, 1, \beta_n \xi^2\right) \quad (79)$$

Donde F es la función hipergeométrica confluyente o función de Kummer, β_n son eigenvalores y C_n son coeficientes obtenidos usando la propiedad de ortogonalidad de sistemas Sturm-Liouville¹⁸², y ζ y ξ son las coordenadas r y z adimensionalizadas.

¹⁸¹ A. Belhocine y W.Z. Wan Omar, "An analytical method for solving exact solutions of the convective heat transfer in fully developed laminar flow through a circular tube", *Heat Transfer - Asian Research*, 46.8 (2017), 1–12.

¹⁸² A. Belhocine y W.Z. Wan Omar, "An analytical method for solving exact solutions of the convective heat transfer in fully developed laminar flow through a circular tube", *Heat Transfer - Asian Research*, 46.8 (2017), 1–12.

Los contornos de temperatura obtenidos por la solución numérica se presentan en la Figura 34.

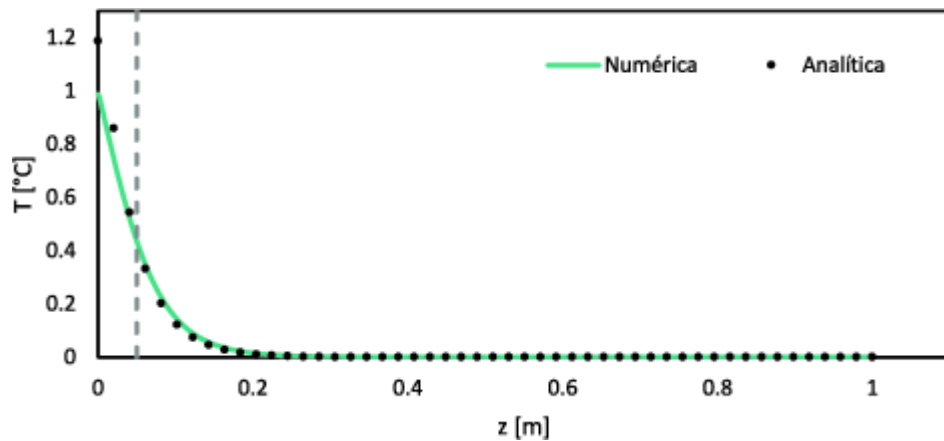
Figura 34 Contornos de temperatura para el problema de Graetz.



Dada la forma de las coordenadas cilíndricas y de la naturaleza simétrica del problema de Graetz, este pudo ser solucionado usando la mitad de la tubería como dominio de simulación ahorrando tiempo de computo. Nuevamente se puede observar la disminución de la temperatura en la región de entrada de la tubería. Se puede destacar que para la velocidad máxima escogida ($v_{\max} = 0.15 \text{ m/s}$) la tendencia de la solución se aproxima al campo de temperatura escogido para la validación de la clase de difusión, sin embargo, el tipo de solución dependerá del número de Péclet que describa el problema.

La solución se confirma con los resultados presentados a continuación. La solución analítica y numérica se presenta en la Figura 35.

Figura 35 Perfil de temperatura axial para $r=0$.



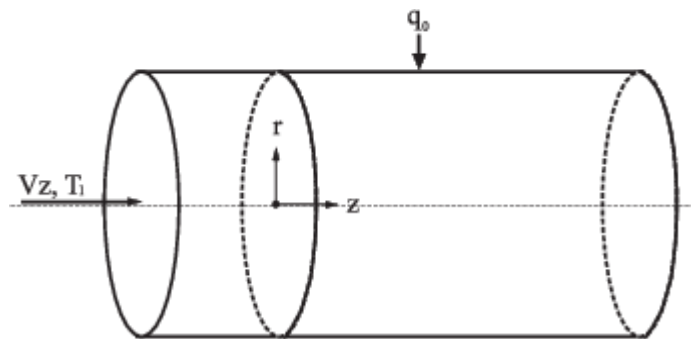
La solución analítica planteada por Belhocine y Wan Omar¹⁸³ es una sumatoria, la cual fue evaluada utilizando pocos términos, por esta razón la solución solo se hace válida para valores mayores a 0.05 en la coordenada axial. Sin embargo, se puede observar que la solución analítica resuelve exitosamente el campo de temperatura en la región de entrada de la tubería. Estos resultados fueron obtenidos con una malla estructurada de 11520 elementos anulares.

4.3.2 Calentamiento de un fluido en flujo laminar a través de un tubo circular

El segundo problema usado para validar la clase de difusión-convección, es similar al anterior, diferenciándose solo en que se evalúa el flujo de calor contante sobre la superficie de la tubería. Esto representa la situación donde el fluido es calentado por el uso de una resistencia eléctrica sobre la pared. Por lo tanto, el balance de energía representado en la Ec. (78) sigue aplicando en este problema.

El segundo ejercicio de convección forzada elegido para validar la clase de convección-difusión consta de un fluido con perfil de velocidad parabólico y una velocidad máxima de 0.01 m/s, el cual entra a una temperatura T_1 a una tubería que se le suministra un flujo de calor constante q_0 en la superficie de la tubería, como se muestra en la Figura 36.

Figura 36 Dominio para el estudio de un problema de calentamiento de un fluido a través de un tubo circular.



¹⁸³ A. Belhocine y W.Z. Wan Omar, "An analytical method for solving exact solutions of the convective heat transfer in fully developed laminar flow through a circular tube", *Heat Transfer - Asian Research*, 46.8 (2017), 1–12.

El objetivo fue encontrar el perfil de temperatura del fluido para grandes valores de z ; nuevamente se realizó la simulación en la mitad de la tubería aprovechando la simetría axial del problema. Teniendo en cuenta que la única diferencia con respecto al problema anterior es la condición de frontera en la pared, la ecuación de balance de energía es la representada en la Ec. (80).

$$\rho C_p v_{z,\max} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial T}{\partial z} = k \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (80)$$

Bird *et al.*¹⁸⁴ presentan una solución asintótica (Ec. (81)) para el caso de grandes valores de z , la cual por simplicidad es usada aquí para validar el problema.

$$\Theta(\zeta, \xi) = 4\zeta + \xi^2 - \frac{1}{4}\xi^4 - \frac{7}{24} \quad (81)$$

Donde Θ es la temperatura adimensional y ξ y ζ son las coordenadas r y z respectivamente adimensionalizadas.

$$\Theta = \frac{T - T_1}{q_0 R / k} \quad (82)$$

$$\xi = \frac{r}{R} \quad (83)$$

$$\zeta = \frac{z}{\rho C_p v_{z,\max} R^2 / k} \quad (84)$$

Los contornos de temperatura obtenidos se muestran en la Figura 37.

Figura 37 Contornos de temperatura para el problema de calentamiento de un fluido a través de un tubo circular.

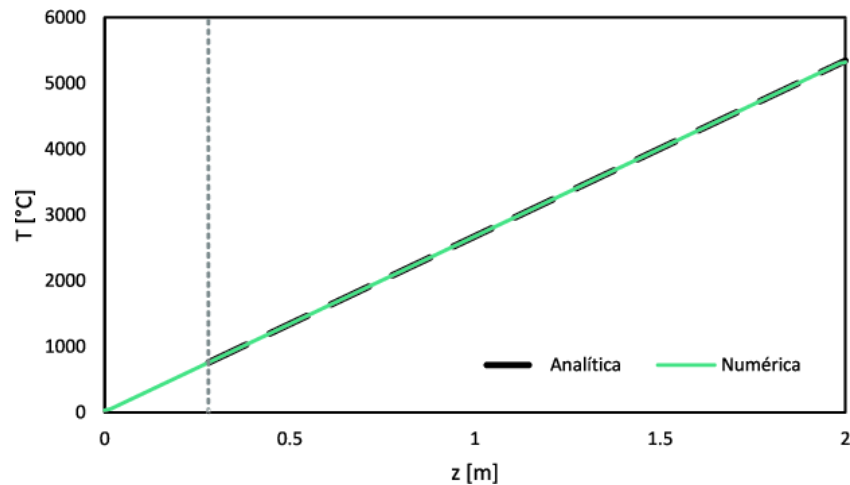


¹⁸⁴ R. Bird, W. Stewart, y E. Lightfoot, *Fenómenos de transporte*, 2a ed. (México: John Wiley & Sons, 2006).

Se puede observar nuevamente que los contornos presentan tendencias coherentes con los resultados esperados. La temperatura del fluido incrementa linealmente con la coordenada axial, ya que el flujo aplicado en la dirección radial es constante, y se confirma ya que las líneas de flujo (líneas naranjas) indican la dirección de la transferencia de energía, siendo perpendiculares a la pared de la tubería. La validación se realiza mediante la comparación de datos de punto a punto.

La malla utilizada para este problema fue una malla estructurada de 14400 elementos. Como se puede observar en la Figura 38, nuevamente la solución numérica se aproxima a la solución analítica obtenida, la solución no puede ser comparada por debajo de la línea punteada gris ya que la solución analítica es asintótica. En este caso se calculó un error promedio 0.1% utilizando 10 puntos de cada solución para el cálculo. Ya que los resultados numéricos del problema con temperatura constante en la pared y flujo de calor constante en la pared concuerdan con las soluciones analíticas, se da por validada la clase para el cálculo de transporte por convección-difusión para campos de flujo conocidos.

Figura 38 Perfil de temperatura axial en $r = 0$.



4.4 CAMPO DE FLUJO (NAVIER-STOKES)

Para la validación de la clase encargada del cálculo del campo de flujo se seleccionaron dos problemas que incluyen coordenadas cartesianas y cilíndricas de

sección transversal no constante, lo cual genera una componente de velocidad extra.

4.4.1 Flujo entre placas no paralelas «*Tapered Channel*» El primer problema evaluado es el flujo entre placas no paralelas generado por un gradiente de presión, como se ilustra en la Figura. En este caso el vector de velocidad es dado por $\mathbf{v} = v_x(x, y)\mathbf{i}_x + v_y(x, y)\mathbf{i}_y$ lo cual hace considerablemente más difícil la consecución de una solución analítica. Sin embargo, para el caso donde la inclinación de las placas es pequeña, es decir, que una de las componentes de velocidad es despreciable, se puede obtener una solución analítica. Para este caso, Deen¹⁸⁵ presenta una solución analítica usando la aproximación de lubricación, dada por las Ecs. (85) y (86).

$$v_x(x, y) = \frac{3-q}{4h(x)} \left[1 - \left(\frac{y}{h_0 + (h_L - h_0)\frac{x}{L}} \right)^2 \right] \quad (85)$$

$$v_y(x, y) = \frac{3-q}{4h(x)} \frac{dh}{dx} \left[\left(\frac{y}{h(x)} \right) - \left(\frac{y}{h(x)} \right)^3 \right] \quad (86)$$

En donde q es el caudal y $h(x)$ la altura del canal, la cual es definida como $h(x) = h_0 + (h_L - h_0)\frac{x}{L}$. Debe tenerse en cuenta que la expresiones del campo de velocidad son validas para situaciones donde se cumpla la Ec. (87):

$$\frac{h_0 - h_L}{L} \ll 1; \left(\frac{q}{2v} \right) \frac{h_0 - h_L}{L} \ll 1 \quad (87)$$

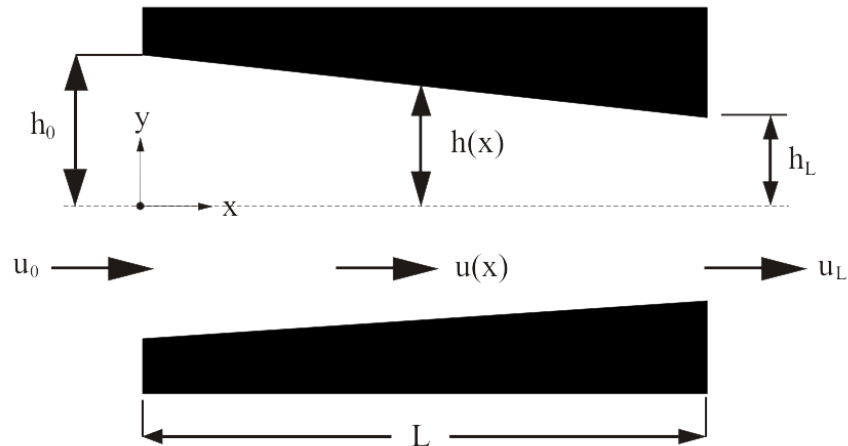
En las Figuras 40, 41 y 42 se presentan los valores de las componentes de la velocidad obtenidos por la solución numérica y comparados con la respectiva solución analítica.

Como se puede observar la solución numérica presentada en la Figura 40 concuerda con la solución analítica propuesta sobre la mayoría del dominio, la discrepancia en la entrada de la tubería se debe a que la solución analítica no tiene en cuenta los efectos en la región de entrada, mientras que la solución numérica

¹⁸⁵ W M Deen, *Analysis of Transport Phenomena*, Topics in Chemical Engineering (OUP USA, 1998).

muestra como es el desarrollo del fluido en esta sección.

Figura 39 Dominio para la simulación de flujo entre placas no paralelas.



Adaptada de Deen [85]

Como se esperaba el perfil de velocidad para la componente axial presentado en la Figura 41 es descrito por un perfil parabólico y la coherencia entre la solución numérica y analítica nos indica que se ha conseguido solucionar la ecuación de transporte de cantidad de momento para esta componente de la velocidad de manera satisfactoria.

Figura 40 Velocidad axial como función de la posición en x.

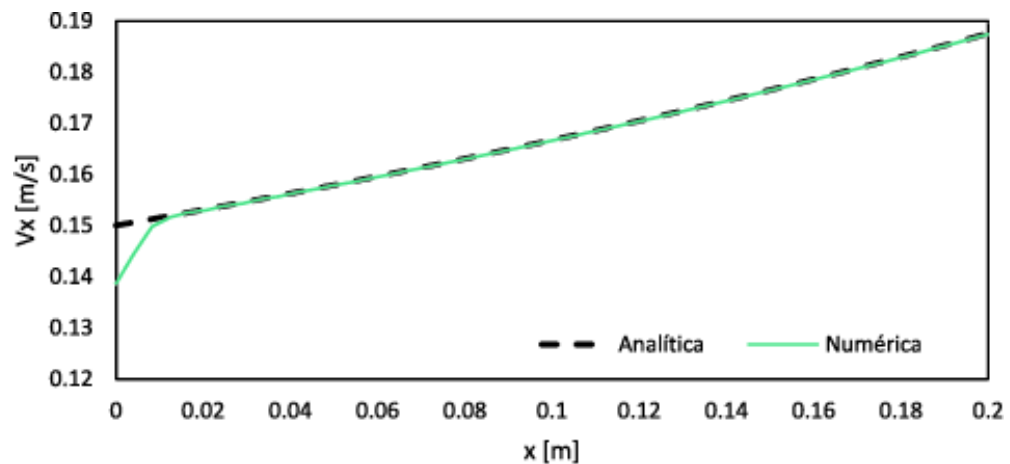
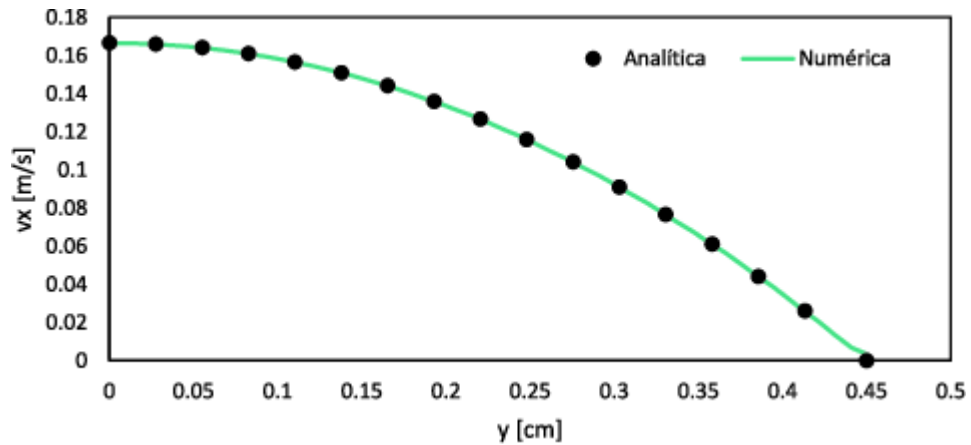


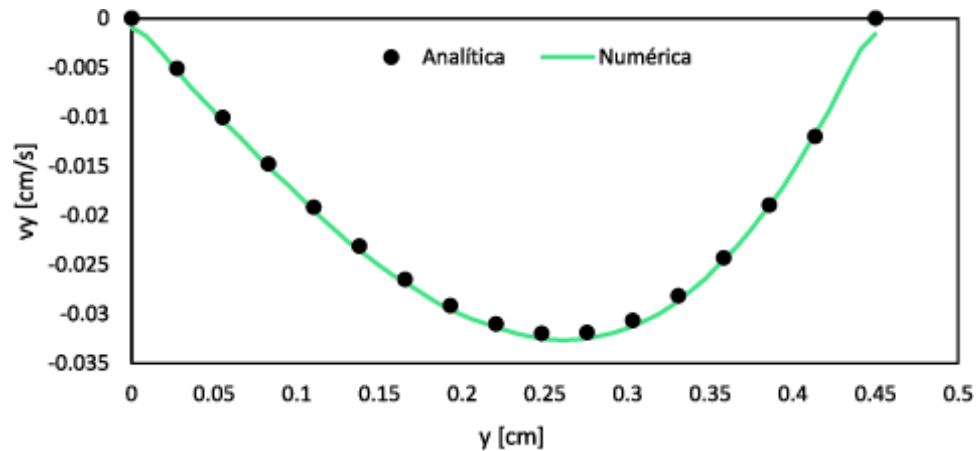
Figura 41 V_x como una función de la posición y para un corte en $x = 0.5L$.



Ahora es necesario analizar la solución de la componente v_y de la velocidad a lo largo del eje y , la cual se presenta en la Figura 42.

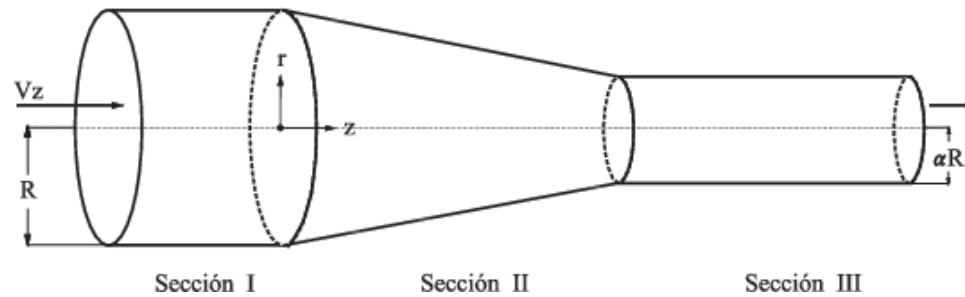
La solución numérica obtenida para v_y concuerda con la solución analítica presentada en la Figura 42, excepto en la pared del canal. La discrepancia en ese punto ($x = 0.5L$, $y = 0.45$) se debe a que el programa de posprocesamiento ParaView, obtiene el valor en las fronteras extrapolando el valor desde los nodos internos, sin embargo este valor en las fronteras está bien definido ya que es una condición de frontera necesaria para la simulación. Con estos resultados se concluye que el algoritmo SIMPLE se encuentra bien implementado y es capaz de predecir ambas componentes del campo de velocidad de manera exitosa, por esta razón se prosigue con la solución de las ecuaciones de NS en coordenadas cilíndricas.

Figura 42 V_y como una función de la posición en y para un corte en $x = 0.5L$.



4.4.2 Flujo en un ducto con sección convergente Para realizar la validación del algoritmo de solución del campo de flujo en coordenadas cilíndricas se solucionó el flujo de un fluido newtoniano dentro de una tubería cuyo radio se ve reducido gradualmente por medio de una sección convergente como la que se muestra en la Figura 43.

Figura 43 Geometría de un ducto con una sección convergente.



Adapta de Bird ¹⁸⁶

La solución numérica es comparada directamente con la solución analítica propuesta por Bird, Armstrong y Hassanger¹⁸⁷, la cual presenta una ecuación para la velocidad en la dirección axial para cada una de las secciones. La solución de

¹⁸⁶ R.Byron; Bird, Robert C.; Armstrong, y Ole Hassanger, *Dynamics of polymeric liquids, Fluid mechanics*, ed. Wiley, Wiley interscience, 2a ed., 1987, xxv.

¹⁸⁷ R.Byron; Bird, Robert C.; Armstrong, y Ole Hassanger, *Dynamics of polymeric liquids, Fluid mechanics*, ed. Wiley, Wiley interscience, 2a ed., 1987, xxv.

este problema tuvo dos objetivos: solucionar satisfactoriamente las ecuaciones de NS en coordenadas cilíndricas, y plantear una estrategia para representar cambios en la geometría sobre la cual se solucionan dichas ecuaciones.

Al solucionar la acumulación de parafinas hay que tratar un problema con fronteras móviles, lo que implica que hay que desplazar las condiciones de no deslizamiento a la interfase fluido-sólido para la solución del campo de flujo. Los problemas de fronteras móviles pueden ser abordados de distintas formas, la más común es la creación de una nueva malla computacional que se adapte a la frontera cada vez que esta se vea modificada, sin embargo, este es un método que implica altos costos de cómputo por lo que no es atractiva. Patankar¹⁸⁸ propone una técnica alternativa para lidiar con este tipo de fronteras, conocida como “*Blocked-off Regions*”. Esta consiste en el bloqueo de volúmenes de control dentro de la malla computacional, donde la solución puede ser alterada de distintas formas utilizando el término fuente revisado en la sección 1. La velocidad es «forzada» mediante la inclusión de un término fuente a las Ecs. (21) y (22) de la siguiente manera:

$$\bar{S} = S_u + S_p \phi_p \quad (88)$$

$$S_p = -10^{30} \quad (89)$$

$$S_u = 10^{30} \phi_{deseado} \quad (90)$$

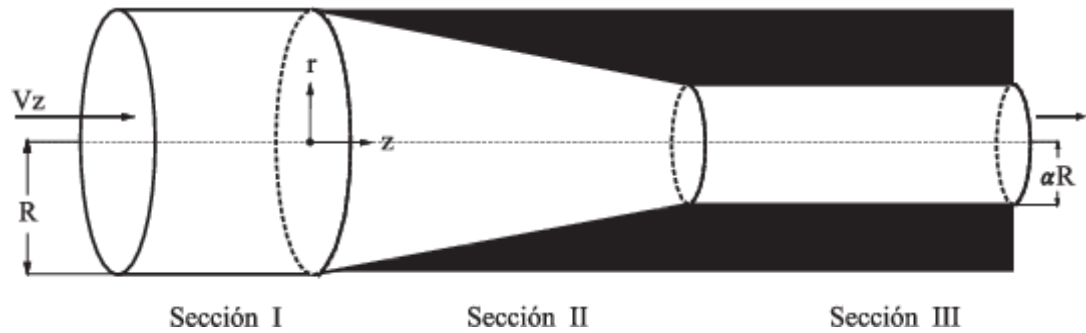
En donde $\phi_{deseado} = v_r = v_z = 0$.

Otra forma de lograrlo, es hacer que en los elementos de la malla que estén definidos como “bloqueados”, el valor de la viscosidad del fluido tome valores extremadamente altos ($\mu = 1 * 10^{30}$) lo cual representa una resistencia muy alta en la zona, por lo que el fluido no entra en ella, haciendo la velocidad igual a cero en la zona del depósito. Aunque existen dos posibilidades para lograr el objetivo, se encontró que fijar el valor de la viscosidad a valores de órdenes de magnitud elevados puede causar problemas de estabilidad en el proceso de solución de las

¹⁸⁸ Suhas Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980.

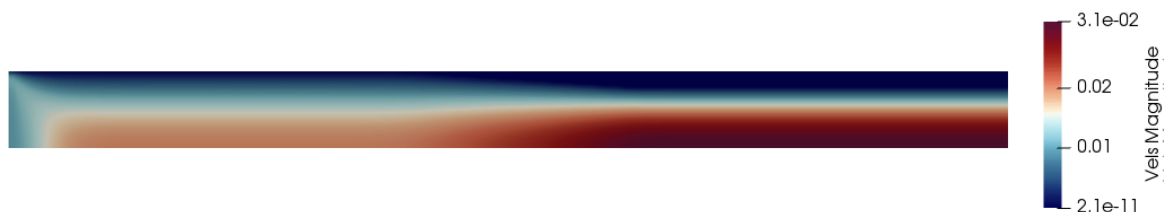
matrices por lo que se eligió el método de modificación de términos fuentes para fijar el valor de las velocidades.

Figura 44 Dominio de simulación para el flujo en un ducto con sección convergente.



Para validar el uso de esta técnica se planteó resolver el problema utilizando un dominio de simulación rectangular como el representado por el rectángulo negro en la Figura 44. Para representar la geometría real dentro del dominio de simulación se definió una fracción sólida f_s la cual toma el valor de la unidad en las zonas no pertenecientes al dominio real o “bloqueadas” (zona negra) y cero dentro de la geometría del ducto (zona blanca) como se observa en la Figura 44. Los resultados de la solución numérica se presentan en la Figura 45.

Figura 45 Contornos de velocidad para el dominio de simulación de un ducto con sección convergente.



Teniendo en cuenta que el ducto tiene un radio de 1 cm en la sección I y un radio de 0.8 cm en la sección III, se puede apreciar como por medio del bloqueo de volúmenes de control se puede representar de manera implícita una geometría real en el dominio de simulación. Analizando cualitativamente los contornos de velocidad para el ducto se considera que la solución es exitosa ya que la velocidad en los

elementos que no pertenecen al dominio real del ducto es virtualmente cero, sin embargo, se debe analizar la velocidad axial para cada una de las secciones internas del ducto con su respectiva solución analítica.

El ducto tiene una longitud de 1.3 m y está repartida de la siguiente forma:

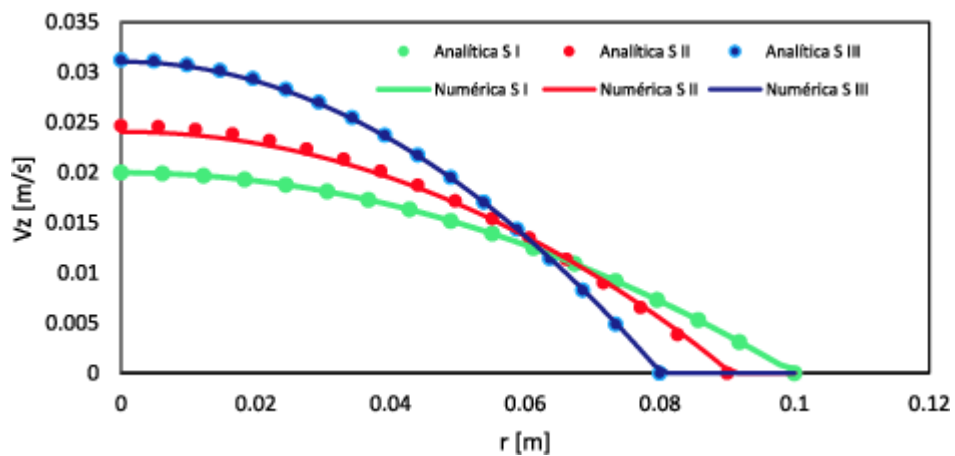
$$\text{sección I} = 0 < z < 0.5 \quad (91)$$

$$\text{sección II} = 0.5 < z < 0.8 \quad (92)$$

$$\text{sección III} = 0.8 < z < 1.3 \quad (93)$$

En la Figura 46 se puede observar la velocidad axial para un corte transversal en la mitad de cada una de las secciones $z = 0.25, 0.65, 1.05$, para los cuales el valor del radio en la pared corresponde a $r = 0.1, 0.09, 0.08$. La solución para la sección I no tiene mayor dificultad ya que se limita a la solución de un flujo de Pouiseuille, sin embargo, para la sección II y III es resaltable que se consiguió fijar la velocidad a un valor de cero en la pared del ducto y dentro de la región bloqueada, lo que nos permite simular satisfactoriamente el campo de flujo en la geometría real, utilizando la aproximación “*Blocked-off Regions*”.

Figura 46 Perfil de velocidad axial para las tres secciones del ducto.



4.5 ANÁLISIS DE MALLA PARA EL PROBLEMA DE FORMACIÓN DE DEPÓSITOS

El estudio del mallado se realizó utilizando el problema de formación de depósitos de parafina para el caso de un flujo volumétrico de 1 gpm, una temperatura de pared de 7.2°C, y 1000 segundos de proceso. La información requerida para la simulación se presenta en la Tabla 4.

Inicialmente se estudió el efecto del refinamiento de la malla en la dirección radial utilizando mallas de 48 * 60, 48 * 90 y 48 * 120 elementos en las direcciones z y r respectivamente, los resultados se muestran en la Figura 47.

Aunque el refinamiento de la malla en la dirección radial no parece tener un efecto notable en el campo de flujo y temperatura, el espesor predicho a los 1000 segundos de proceso indica que se debe realizar un refinamiento en esta dirección, sin embargo, mas de 120 elementos en la dirección radial causan inestabilidad en la solución del campo de flujo. Por esta razón se utilizaron 120 elementos pero con un densificado de la malla hacia la pared de la tubería para compensar la falta de refinamiento. En la Figura 48 se presenta el refinamiento en la dirección axial.

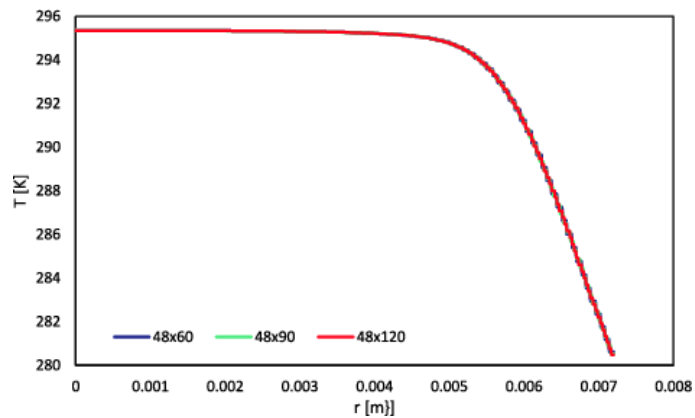
Tabla 4 Información requerida para el problema de formación de depósitos.

Parámetro	Valor	Unidad
L	2.44	m
R	7.2	mm
F_w^{inicial}	0.67	%wt
T_{entrada}	22.2	°C
C_{in}	5.62	
ρ	838.5	
μ	8.7	mPa. s
Tiempo	1000	s

Parámetro	Valor	Unidad
WAT	13.9	°C

El refinamiento en la dirección axial no tiene mayor efecto en las variables de respuesta, pero tiene efecto en la velocidad de convergencia, este refinamiento se eligió con base en el tiempo requerido para alcanzar un error bajo ($1 * 10^{-6}$), esto se presenta en la Figura 49.

Figura 47a Error para la temperatura radial para la sección media.



Además, se puede observar en la Figura 50 el número de iteraciones requeridas por cada malla para alcanzar un error de $1 * 10^{-6}$.

Figura 47b Error para Velocidad axial en la sección media de la tubería.

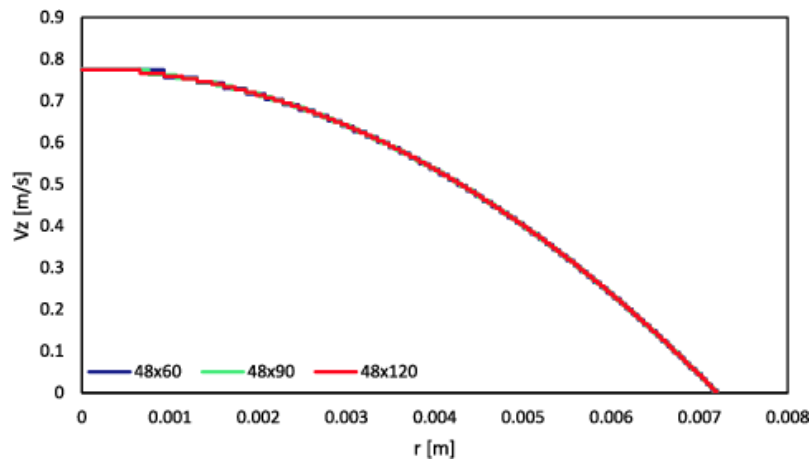


Figura 47c Error para la velocidad axial a lo largo del eje de simetría.

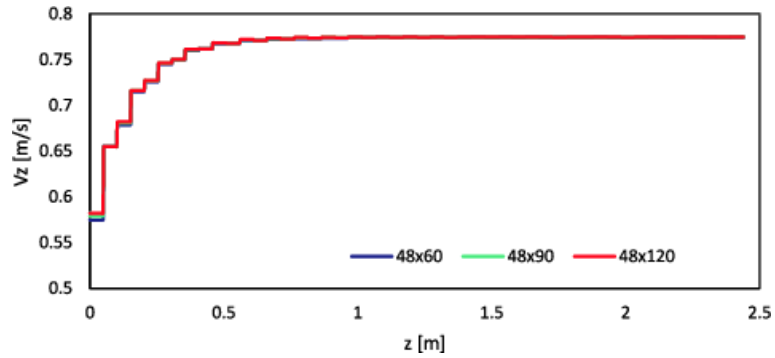
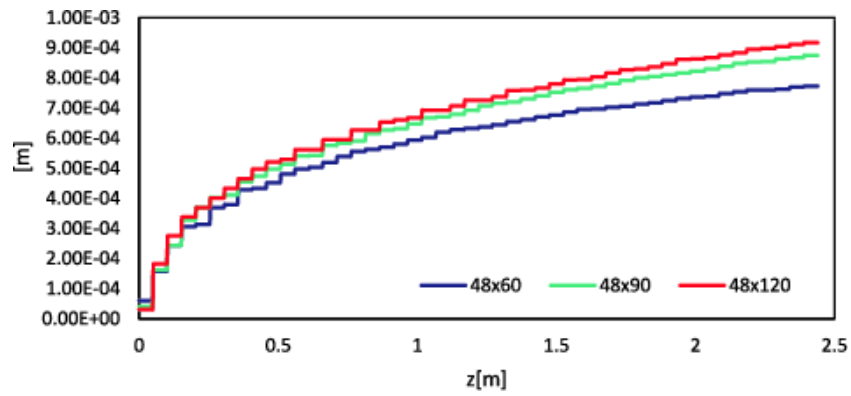


Figura 47d Error para el espesor del depósito.



Después de analizar estos resultados se escogió la malla de 96*120 elementos en la dirección axial y radial respectivamente, aunque la malla de 60*120 requiere menos tiempo para alcanzar el error de 1×10^{-6} , la malla de 96*120 alcanza el

Figura 48a Error para la temperatura radial para la sección media.

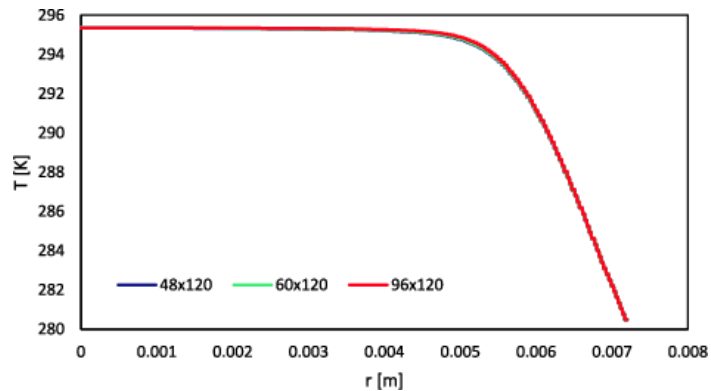


Figura 48b Error para Velocidad axial en la sección media de la tubería.

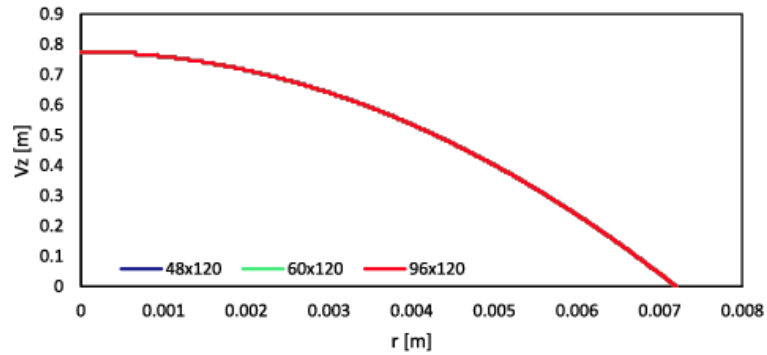
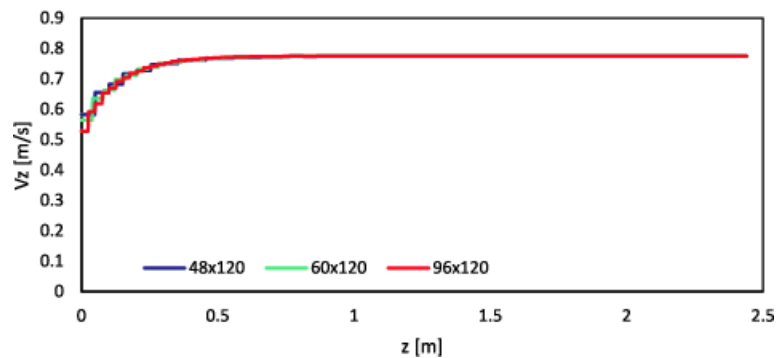
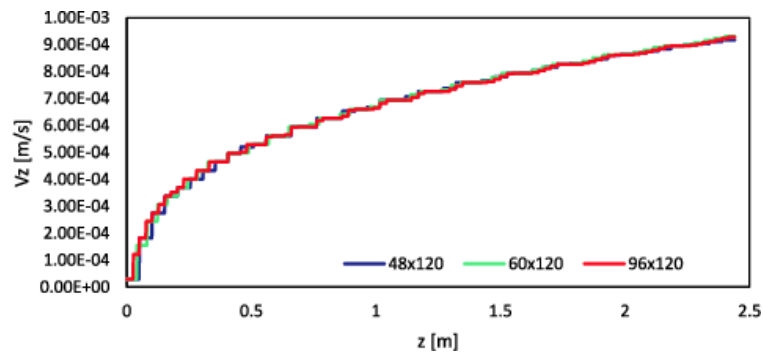


Figura 48c Error para la velocidad axial a lo largo del eje de simetría.



mismo error en un número menor de iteraciones, además, mantener el aspecto lo más rectangular posible ayuda a la convergencia una vez el depósito alcance valores significativos en su espesor. Como una medida adicional se realizó un estudio del efecto del parámetro de relajación en la Ec. (162) en la convergencia del modelo, esto se presenta en la Figura 51.

Figura 48d Error para el espesor del depósito.



Se encontró que el valor de α_p que favorece a la convergencia se encuentra entre 0.18 y 0.2, finalmente se estableció como 0.2.

Figura 49 Error en el cálculo de la clase de NS para distintos valores del parámetro de relajación.

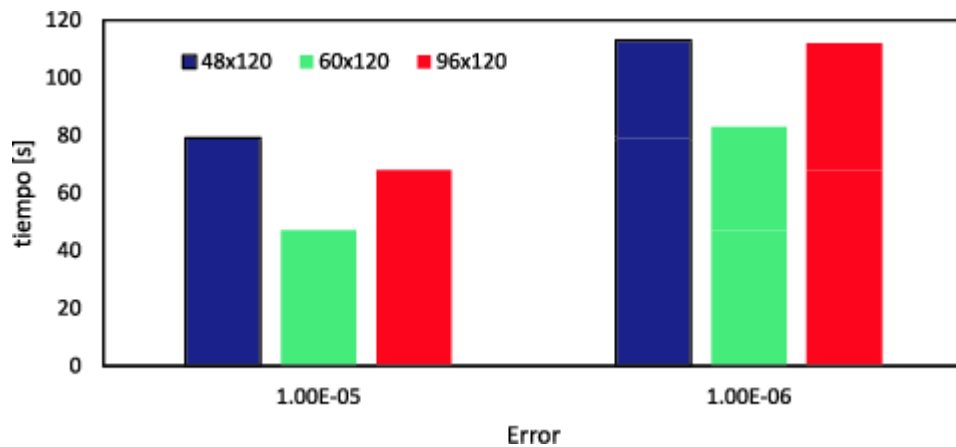
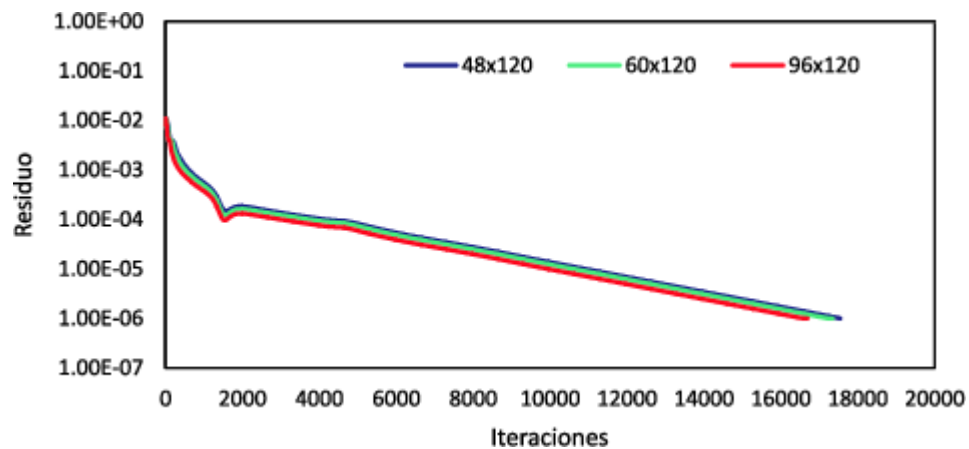
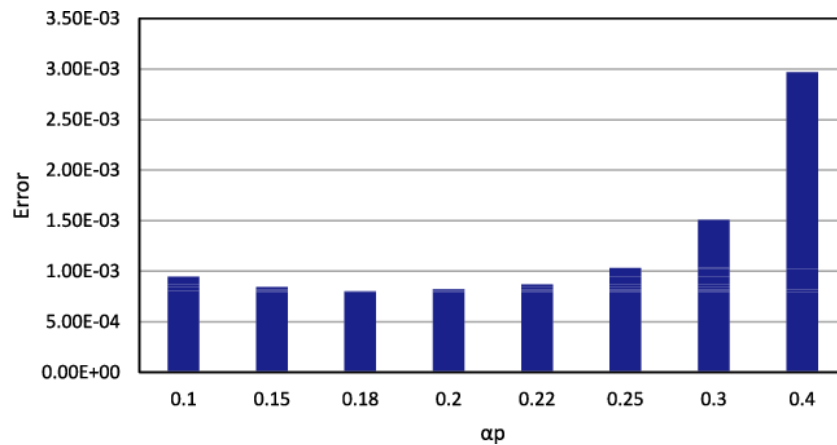


Figura 50 Residuo de las mallas



Para la validación del crecimiento y envejecimiento del depósito se utilizó una malla de 48*180 elementos en la dirección axial y radial respectivamente, ya que no se calcula el campo de flujo, no es de interés el refinamiento en la dirección axial y se pueden emplear más elementos en la dirección radial sin tener repercusiones en la estabilidad del modelo.

Figura 51 Error en el cálculo de la clase de NS para distintos valores del parámetro de relajación.



4.6 VALIDACIÓN DEL CRECIMIENTO Y ENVEJECIMIENTO DE DEPÓSITOS DE PARAFINA UTILIZANDO UN CAMPO DE FLUJO UNIDIMENSIONAL

Esta etapa de la validación se distinguió entre depósitos de bajo y gran espesor. En las secciones siguientes se presentan los resultados para las variables principales, su análisis, y los ajustes que se necesitaron para calibrar el modelo de formación de depósitos presentado en este trabajo.

Tabla 5 Datos del crudo para el primer grupo de pruebas

Parámetro	Valor	Unidad
L	2.44	m
R	7.2	mm
F_w^{inicial}	0.67	%wt
T_{entrada}	22.2	°C
C_{in}	5.62	kg/m³
ρ	838.5	kg/m³
μ	8.7	mPa·s
Tiempo	5	días
WAT	13.9	°C

4.6.1 Depósitos de bajo espesor La primer parte de esta validación emplea los resultados presentados por Singh *et al.*¹⁸⁹, los cuales promueven el crecimiento de un depósito de bajo espesor, que corresponde a una reducción máxima de 18% del radio de la tubería, la información requerida para la simulación se presenta en la Tabla 5.

Bajo esta configuración del crudo se realizaron dos sets de pruebas; la primera mantiene la temperatura en la pared constante y varía el caudal; el segundo set fija el caudal y varía la temperatura de pared; las condiciones se resumen en la Tabla 6.

Tabla 6 Condiciones de operación para el primer grupo de pruebas

Q	T _{pared}	Q	T _{pared}
1 gpm	8.3°C	1 gpm	4.4°C
2.5 gpm	8.3°C	1 gpm	7.2°C
4 gpm	8.9°C	1 gpm	8.3°C

4.6.1.1 Variación en el caudal Aunque la idea del set 1 es mantener la temperatura de pared fija, Singh *et al.*¹⁹⁰ modificaron este valor para el caso de 4 gpm sin razón aparente. La Figura 52 muestra los resultados para el radio interno de la tubería (solución de la Ec. 62) variando el caudal. Cabe resaltar que los valores experimentales fueron obtenidos por medio de una correlación con los cambios de presión en las secciones de referencia a lo largo de la tubería¹⁹¹, por esta razón se pueden apreciar distintas oscilaciones en la medición. Ya que no se contó con los valores tabulados para estas variables, los valores fueron obtenidos por el software de interpolación gráfica WebPlotDigitizer, por lo que estos resultados tienen un error

¹⁸⁹ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

¹⁹⁰ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

¹⁹¹ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

relacionado con la sensibilidad en la calibración del software.

Se puede observar que para los 3 casos existe una sobrepredicción del crecimiento del depósito en las horas iniciales de crecimiento, y en menor grado en el valor final del espesor del depósito para los caudales de 1 y 2.5 gpm. De otro lado, existe una mayor diferencia en el espesor del depósito predicho por el modelo a largos tiempos para el caudal de 4 gpm. El error en el cálculo del espesor en el crecimiento inicial del depósito se puede asociar a tres factores:

i) El crecimiento del depósito en las horas iniciales (primeras 12 horas) está controlado por la cantidad disponible de parafinas en la fase fluida cerca de la interfase, por lo tanto, a mayor cantidad de parafinas en el fluido, mayor será el flux entrante al depósito. Este gradiente de concentración de parafinas en la proximidad de la interfase ha sido calculado usando correlaciones experimentales como se explicó en la sección 1.5.2.1 y 1.5.2.2. Sin embargo, en el MWP se ajusta por medio de la precipitación de los compuestos parafinicos utilizando la Ec. (k_r), como se muestra en la Figura. 53 y 57. En síntesis, un cambio en la concentración en la cercanía de la interfase afecta los valores de los flujos de entrada y salida evaluados en la interfase, modificando así el comportamiento del crecimiento.

Figura 52 Radio interno promedio de la tubería para el set 1 en los 5 días de formación del depósito.

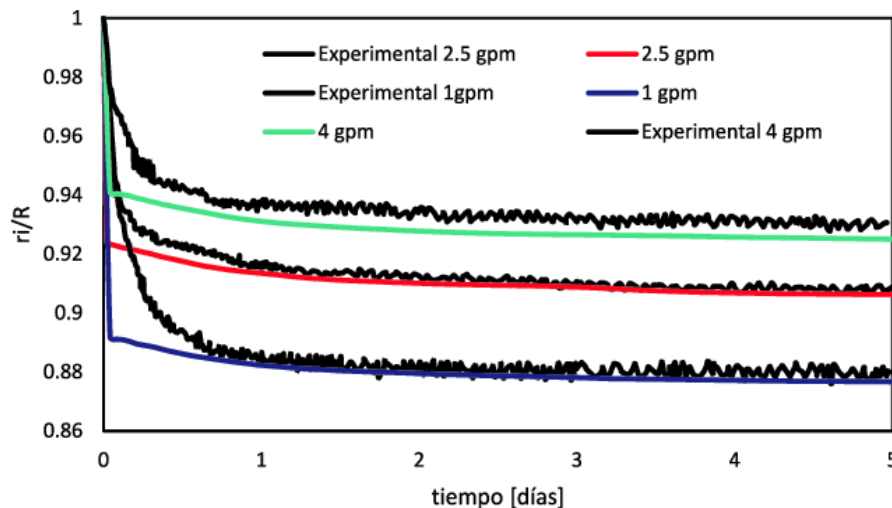
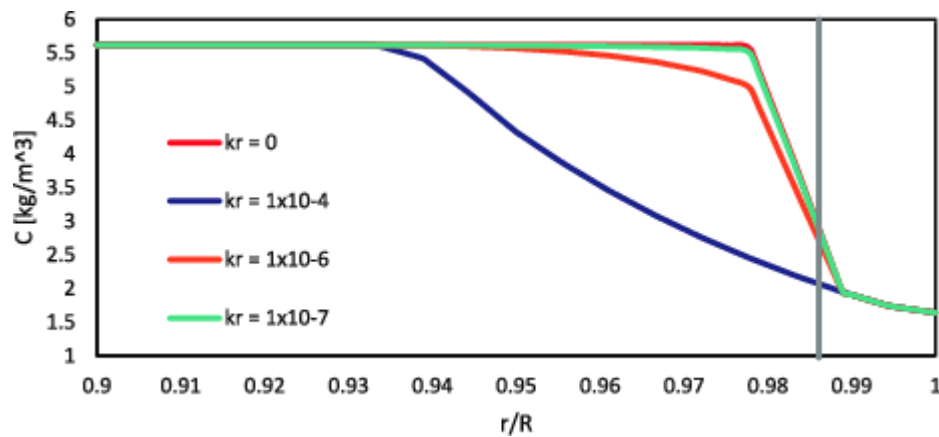
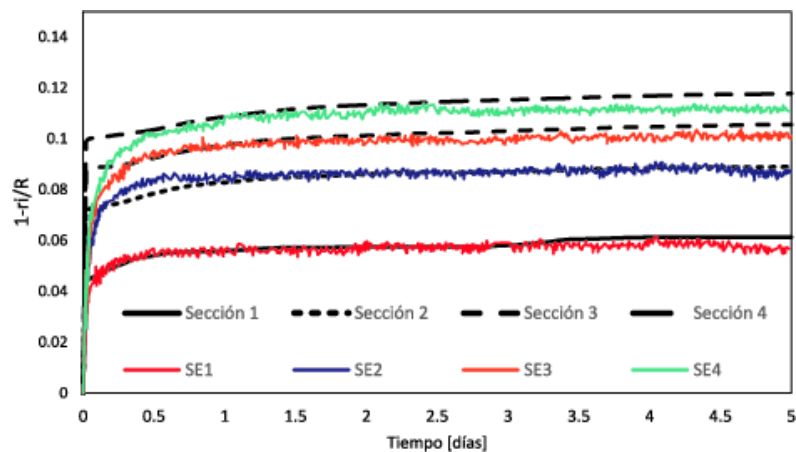


Figura 53 Efecto de la constante de precipitación sobre el perfil de concentración de parafinas en el depósito.



muestra en la Figura 55.

Figura 54 Radio promedio para distintas secciones de la tubería ($t = 5 \text{ días}$).



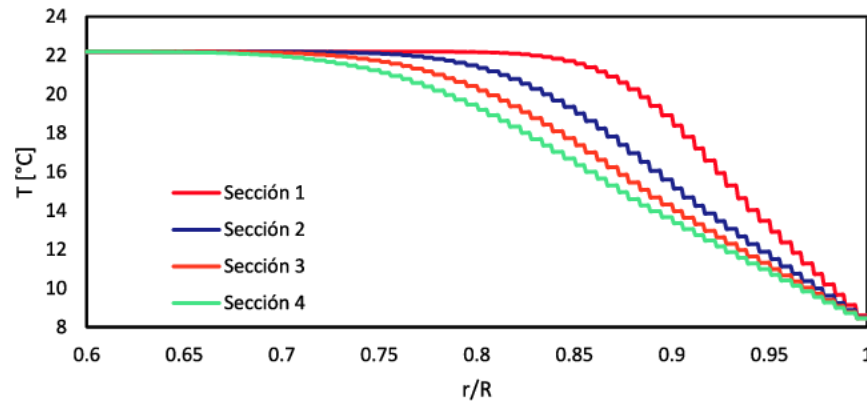
En la Figura 54 se presenta la relación de tubería ocupada por el depósito para cada una de las 4 secciones en que fue dividida y se comparan los datos obtenidos por Singh *et al.*¹⁹² y los resultados numéricos del modelo de simulación. Se puede observar que la sección uno y dos se encuentran bien representadas por el modelo

¹⁹² Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

de formación de depósitos actual. Por el contrario, el espesor en las secciones tres y cuatro es sobreestimado. Ya que el ajuste del modelo por medio de k_r tiene mayor efecto a mayores gradientes de temperatura en la dirección radial, este ajuste tendría mayor efecto en las secciones 3 y 4, que en las secciones 1 y 2, como se

Al realizar un ajuste por medio de la precipitación (k_r), las secciones tres y cuatro serían las mas afectadas, de esta manera se controla el crecimiento en ellas, y el espesor promediado en el tiempo se asemeja a los datos experimentales.

Figura 55 Temperatura radial en distintas secciones de la tubería (t=5días).



El MWP¹⁹³ sugiere que en régimen laminar la precipitación es despreciable y por lo tanto se puede fijar $k_{r,cloud} = 0$ en la Ec. (24). Sin embargo, Lee¹⁹⁴ asegura que el valor de la constante de precipitación aunque sea pequeño, no es despreciable y debe calibrarse de acuerdo a los datos experimentales para reducir el error en el modelo. Si $k_{r,cloud} = 0$ entonces la predicción va a seguir la teoría del IHMT (o analogía Chilton-Colburn), y si $k_{r,cloud}$ toma un valor muy grande seguirá la predicción hecha por el método de solubilidad, como se muestra en la Figura 56.

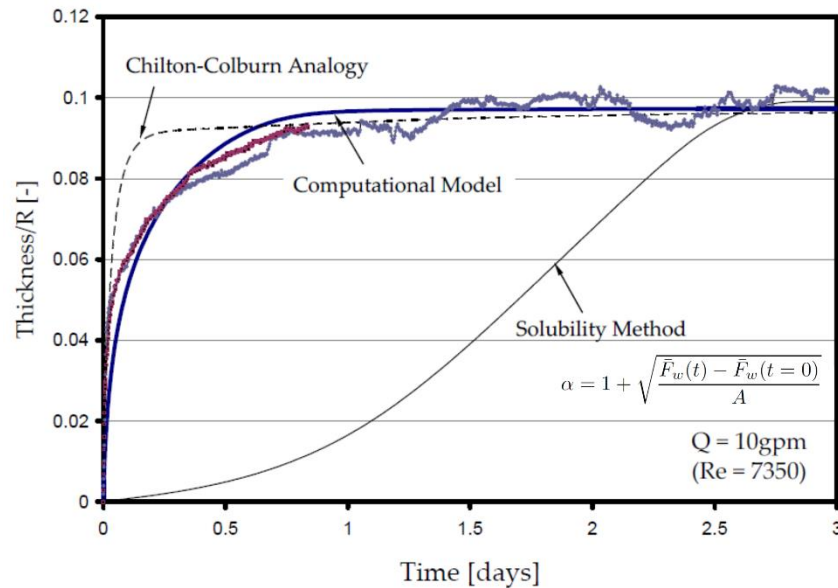
Para comprobar esta afirmación se realizaron varias simulaciones para un caudal de 2.5 gpm y una temperatura de pared de 8.3°C variando el valor de $k_{r,cloud}$, estos

¹⁹³ Zhenyu Huang et al., "A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines", *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

¹⁹⁴ Hyun Su Lee, "Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines" (The University of Michigan 2008, 2008).

resultados se presentan en la Figura 57.

Figura 56 Comparación entre el valor experimental, el modelo IHMT, el modelo de solubilidad y el modelo computacional desarrollado por Lee¹⁹⁵



Tomado de: Lee¹⁹⁶.

Los resultados son acordes a la teoría de los modelos límite (IHMT y modelo de solubilidad), las pruebas presentadas en la Figura 57 señalan que el valor de $k_{r,cloud}$ debe ser del orden de $1 * 10^{-6}$, sin embargo, realizar este tipo de ajustes no se encuentra dentro de los objetivos de este trabajo, por lo que no se insistió en encontrar el valor exacto ni utilizar este ajuste en el estudio del efecto de la inclusión del campo de flujo.

ii) La segunda razón está relacionada con la solución a la ecuación para el envejecimiento del depósito (Ec. (53)), primero se presentan los resultados y luego se realiza una discusión sobre estos y el efecto del parámetro α en la predicción del

¹⁹⁵ Hyun Su Lee, "Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines" (The University of Michigan 2008, 2008).

¹⁹⁶ Hyun Su Lee, "Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines" (The University of Michigan 2008, 2008).

envejecimiento y en el coeficiente de difusión dentro del depósito.

Figura 57 Espesor del depósito para distintos valores de $k_{r,cloud}$ en los 5 días de formación del depósito.

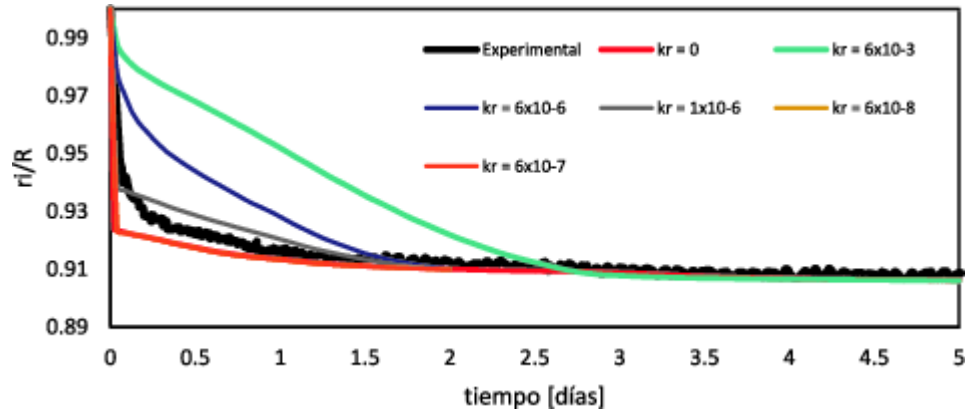
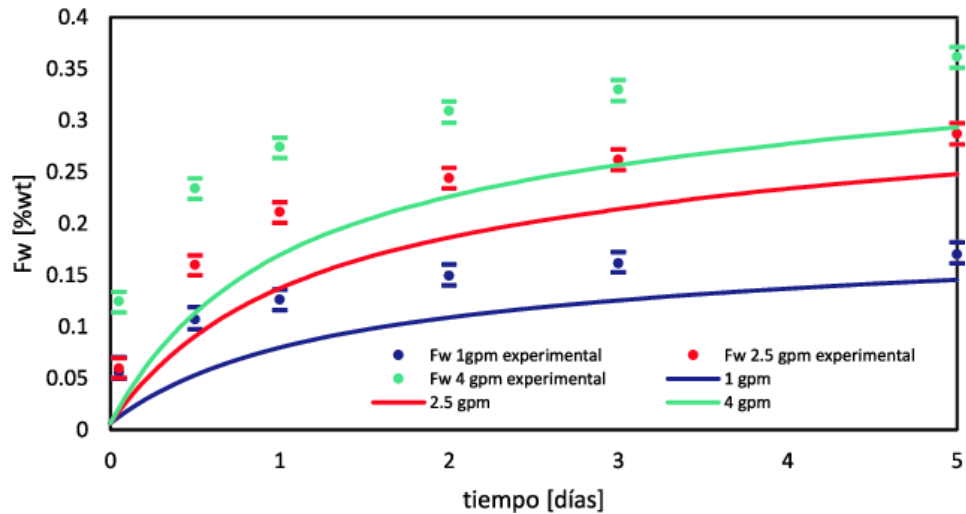


Figura 58 Fw promedio para el set 1 en los 5 días de formación del depósito.



Aunque inicialmente los resultados presentados en la Figura 58 indicarían que la ecuación propuesta no puede representar correctamente el envejecimiento del depósito, se realizó una revisión de las posibles causas.

Inicialmente el modelo de simulación desarrollado en este trabajo de investigación fue ajustado con los parámetros propuestos por cada uno de los trabajos

originales¹⁹⁷, sin embargo, en la implementación de las ecuaciones fenomenológicas se realizaron modificaciones que requieren de una nueva calibración, específicamente del parámetro morfológico α .

Los modelos en los cuales se basa el MWP¹⁹⁸ sugieren una dependencia lineal entre el parámetro α y la fracción másica F_{wax} , por lo que para realizar el ajuste se requieren dos puntos.

$$t = 0; F_w = F_{w, inicial}; \alpha = 1 \quad (94)$$

$$t = t_{final}; F_w = F_{w, final}; \alpha = \alpha_{final} \quad (95)$$

El valor de α_{final} se obtuvo de la Figura 15, sin embargo, el valor final de F_w debe ser conocido de antemano para así introducirlo en el modelo de simulación. El problema con este procedimiento es que el ajuste se realiza con un valor experimental de $(\overline{F_w})$ promediado en las direcciones radial y axial para cada paso de tiempo, e incluso al introducirlo al modelo de simulación, el modelo de Singh *et al.*¹⁹⁹ no considera variaciones radiales en la fracción másica. Por esta razón, el valor final de F_w presentado en la Figura 15 no es adecuado para realizar el ajuste de α en el modelo actual.

Para el presente modelo de simulación se intentó hacer un ajuste (Figura 59) considerando la variación radial dentro del depósito de parafina, calculando la relación de α con el valor máximo supuesto de F_w , de tal manera que al realizar el promedio espacial y temporal, se ajuste a la información proveniente de la literatura (manteniendo los valores de ajuste dentro de los límites reales). Por otra parte, se

¹⁹⁷ Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., “Morphological evolution of thick wax deposits during aging”, *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18; Zhenyu Huang et al., “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57.11 (2011), 2955–64.

¹⁹⁸ Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., “Morphological evolution of thick wax deposits during aging”, *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

¹⁹⁹ Probjot Singh et al., “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

podría proponer un ajuste no lineal²⁰⁰, modificando así la difusividad efectiva como se muestra en la Figura 60, pero para facilidad del estudio no se evaluó los posibles efectos de este ajuste junto a los efectos del cálculo del campo de flujo bidimensional.

Figura 59 Cambio en la fracción másica del depósito realizando un ajuste en el parámetro α .

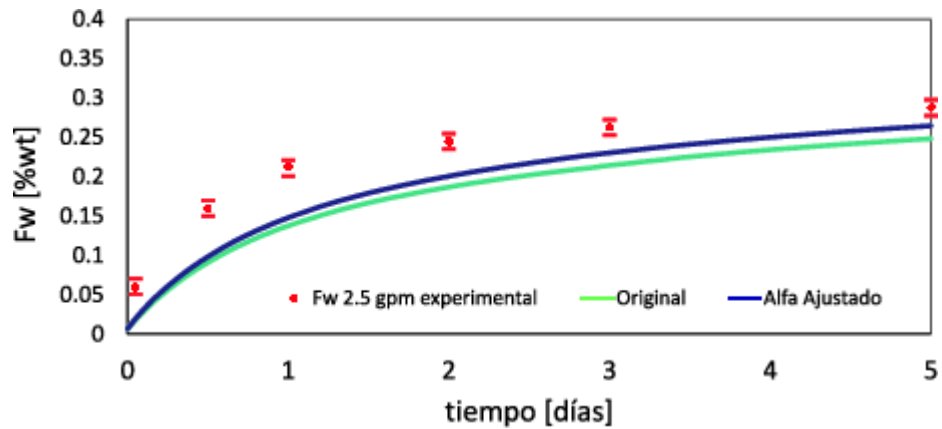
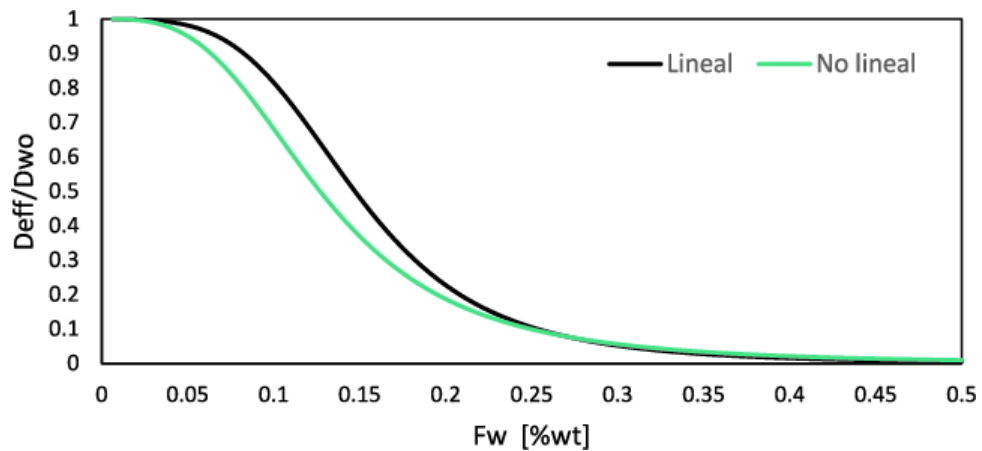


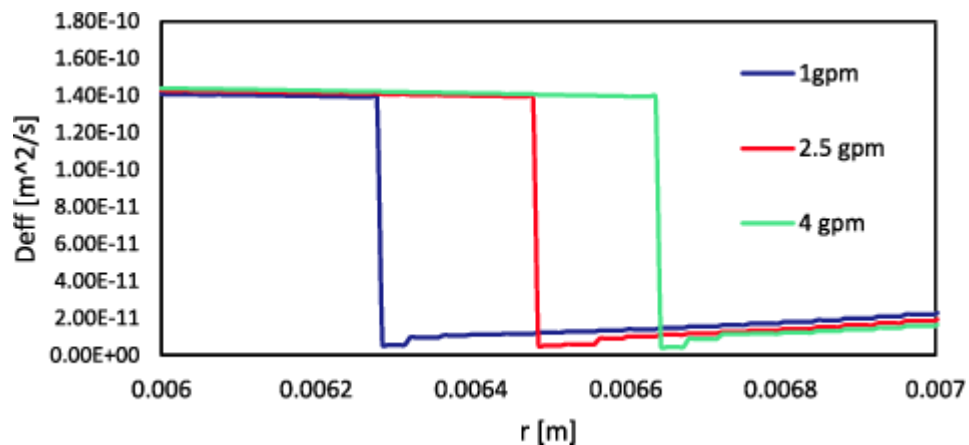
Figura 60 Difusividad efectiva para una dependencia lineal y no lineal entre los parámetros α y F_w .



²⁰⁰ Hyun Su Lee, “Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines” (The University of Michigan 2008, 2008); O.C. Hernandez et al., “Improvements in Single-Phase Paraffin Deposition Modeling”, *SPE Production & Facilities*, 19.04 (2004), 237–44.

El efecto combinado de la difusividad efectiva y la fracción másica en la interfase del depósito pueden afectar el crecimiento del depósito, como se aprecia en la Figura 61, donde la difusividad efectiva decae en un orden de magnitud al llegar a la interfase del depósito, afectando así el flux desde la interfase hacia el depósito (J_{out}) en la Ec. (59).

Figura 61 Difusividad efectiva en la sección media de la tubería ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).



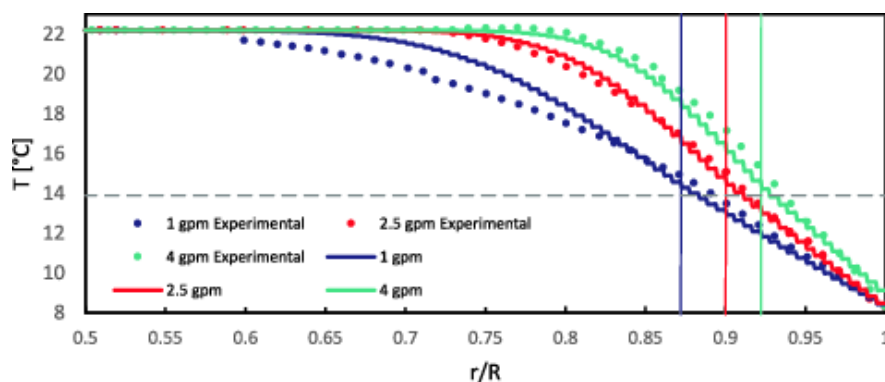
La predicción del espesor del depósito es afectada por la subestimación de la fracción másica, se puede observar que F_w está presente en el denominador de la Ec. (59), lo cual se puede interpretar como que a menor cantidad de parafinas sólidas (menor saturación del depósito) este permite mayores flujos de parafina entrante, y así, un menor crecimiento de éste.

iii) El tercer factor que afecta el valor final del espesor del depósito está relacionado con el equilibrio de concentraciones en la interfase, este factor será tratado en la sección de depósitos de gran espesor para facilitar su explicación ya que en dicho caso es más evidente.

Como una medida adicional para la validación se comparan los perfiles radiales de temperatura en la sección media de la tubería, los cuales se presentan en la Figura 62.

La línea horizontal punteada (Figura 62) marca el WAT del crudo, las líneas verticales corresponden a la ubicación de la interfase fluido-sólido para cada uno de los tres casos. En la zona interior del depósito (valores a la derecha de la interfase) la energía es transportada exclusivamente por difusión ya que el depósito se considera computacionalmente sólido. En esta región los valores obtenidos se asemejan lo suficiente a los resultados experimentales. Por otro lado, en la región fluida la temperatura presenta diferencias con los valores obtenidos por Singh *et al.*²⁰¹ (datos experimentales en la Figura 62), en esta zona la energía está siendo transportada por convección y difusión; considerando que menores velocidades generan mayores gradientes de temperatura y que el perfil de velocidad asumido no corresponde al campo de flujo real, este error en la predicción de la temperatura se asocia a esta fuente.

Figura 62 Temperatura radial en la sección media de la tubería para el set 1 ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).



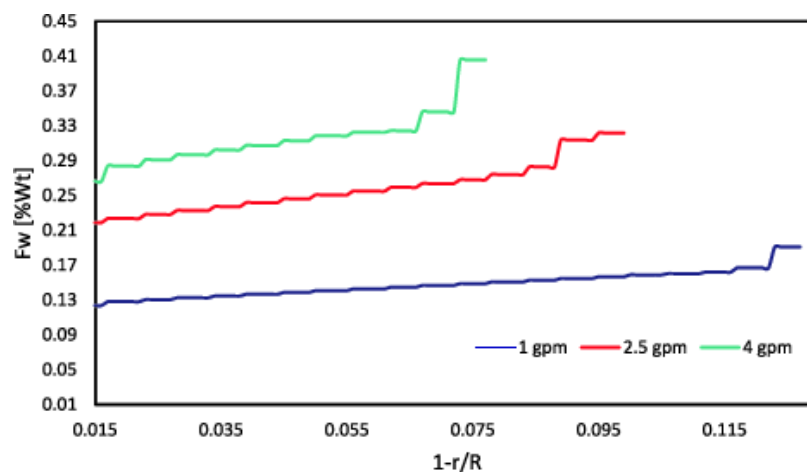
En la Figura 63 se presenta la variación de la fracción másica (F_w) en la coordenada radial.

Ya que los datos encontrados en la literatura no presentan las variaciones radiales, y el modelo considera que la variación radial es despreciable, los resultados de este trabajo para estas pruebas no pueden ser contrastados. En la Figura 63 se puede

²⁰¹ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

apreciar que la fracción en la interfase es más alta que en la cercanía a la pared, este comportamiento es explicado por Singh y se debe a que la longitud característica para la difusión de moléculas parafinicas es menor que el espesor del depósito, lo que causa un envejecimiento no uniforme , y el hecho de que depósitos más estrechos (que corresponden a mayor flujo volumétrico) presenten un mayor contenido de parafinas se debe a que los compuestos parafinicos deben viajar una distancia menor desde el líquido antes de acumularse en el depósito.

Figura 63 Fracción másica en la dirección radial para el set 1 ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).



4.6.1.2 Variación en la temperatura En la Figura 64 se presentan los resultados obtenidos para el segundo set de pruebas.

Las Figuras 64 y 65 muestran que el modelo predice con un error bajo el crecimiento y envejecimiento del depósito. Este error se asocia a las causas explicadas anteriormente.

Como se observa en la Figura 66 el error en la predicción del campo de temperatura en el fluido sigue existiendo, esto se asocia nuevamente a la diferencia del perfil de velocidad asumido, a menor caudal la diferencia en la velocidad asumida tiene mayor efecto en el transporte convectivo de las variables.

Si se compara el contenido de parafinas presentado en las Figuras 67 y 63 se puede resaltar que las variaciones en el caudal no tienen mayor efecto en la

distribución radial de la fracción másica mientras que una disminución en la temperatura de pared genera mayores variaciones. Este aumento en la distribución radial se debe a un parámetro importante en el proceso de acumulación definido como $\Delta T = WAT - T_{wall}$, a mayor ΔT en el proceso, la concentración de saturación C_{ws} en el «líquido» atrapado dentro del depósito va a tener un rango mas amplio, el cual está dado por la curva de saturación.

Figura 64 Espesor del depósito para el set 2 en los 5 días de formación del depósito.

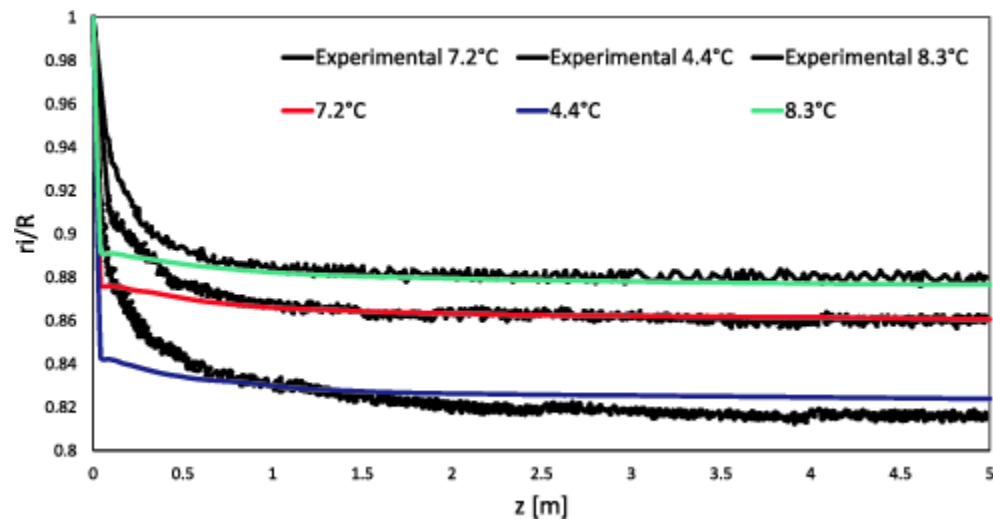
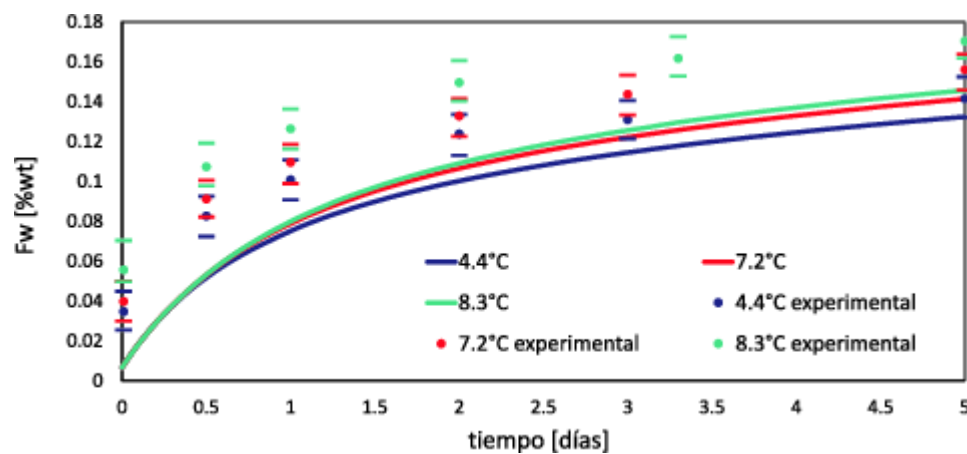
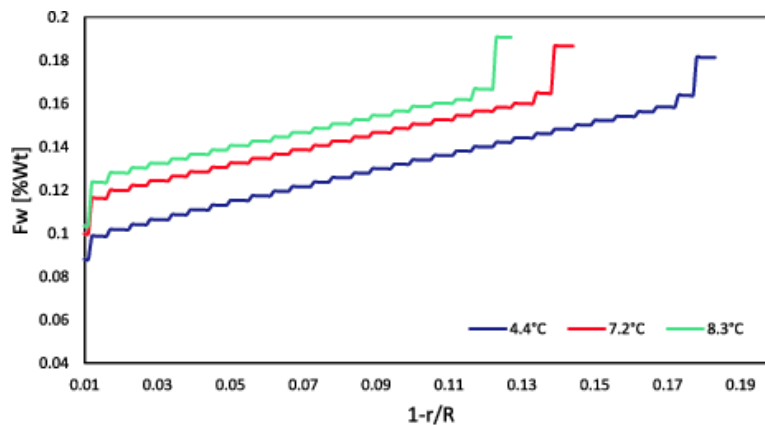


Figura 65 Fracción másica promedio para el set 2 en los 5 días de formación del depósito.



Como se explicó anteriormente, estos resultados fueron obtenidos realizando el ajuste de α como es sugerido por el autor²⁰², pero el hecho de obtener mayores distribuciones de F_w en el depósito indica que el proceso de ajuste debe realizarse nuevamente para disminuir el error mostrado en la Figura 65.

Figura 66 Fracción másica en la dirección radial para el set 2 ($z = 1.22m$ y $t = 5días$).



4.6.2 Depósitos de gran espesor La segunda parte de la validación corresponde a las pruebas realizadas por Singh *et al.*²⁰³ las cuales promueven el crecimiento de un depósito de gran espesor, que corresponde a una reducción máxima del 40% del radio de la tubería, la información requerida para la simulación se presenta en la Tabla 7.

Bajo esta configuración del crudo se realizaron dos sets de pruebas similares al de depósitos de bajo espesor, es decir, mantener la temperatura en la pared constante y variar el caudal, el segundo set fija el caudal y varía la temperatura de pared, las condiciones operativas se presentan en la Tabla 8.

²⁰² Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

²⁰³ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

En las Figuras 68, 69, 70, 71, 72 y 73 se presentan los resultados del espesor del depósito obtenido para todas las pruebas del segundo grupo de la validación.

En las Figuras 68 a 73 se observa que el modelo sobreestima el crecimiento del depósito en las primeras 6 horas pero subestima el valor final de este a los 4 días. Para encontrar la razón de este comportamiento se realizó un análisis el cual se presenta junto a las gráficas de temperatura radial en la sección media de la tubería.

Tabla 7 Datos del crudo para el segundo grupo de pruebas.

Parámetro	Valor	Unidad
L	2.44	m
R	11	mm
F_w^{inicial}	3	%wt
T_{in}	29.5	°C
C_{in}	25.2	kg/m ³
ρ	832.5	kg/m ³
μ	11.7	mPa·s
Tiempo	4	días
WAT	26	°C

Tabla 8 Condiciones de operación para el segundo grupo de pruebas.

Q	T_{pared}	Q	T_{pared}
1 gpm	4.5°C	1 gpm	4.5°C
2 gpm	4.5°C	1 gpm	9.5°C
4 gpm	4.5°C	1 gpm	14.5°C

Figura 67 Espesor del depósito para un caudal de 1 gpm en los 4 días de formación del depósito.

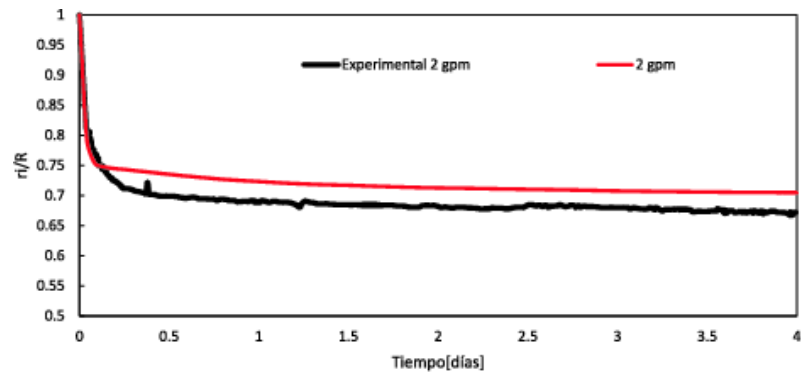


Figura 68 Espesor del depósito para un caudal de 2 gpm en los 4 días de formación del depósito.

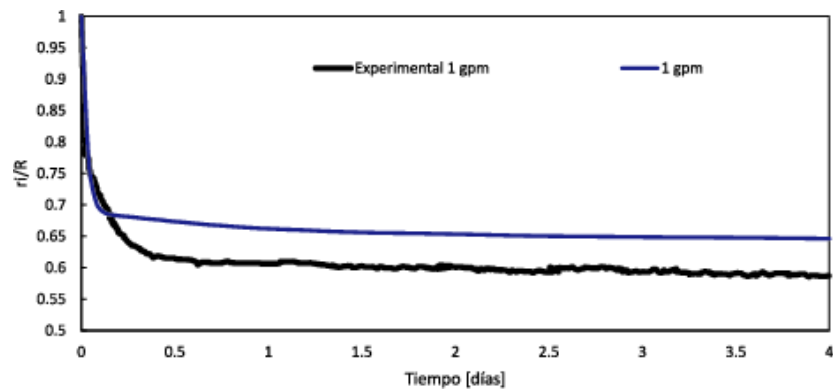


Figura 69 Espesor del depósito para un caudal de 1 gpm en los 4 días de formación del depósito.

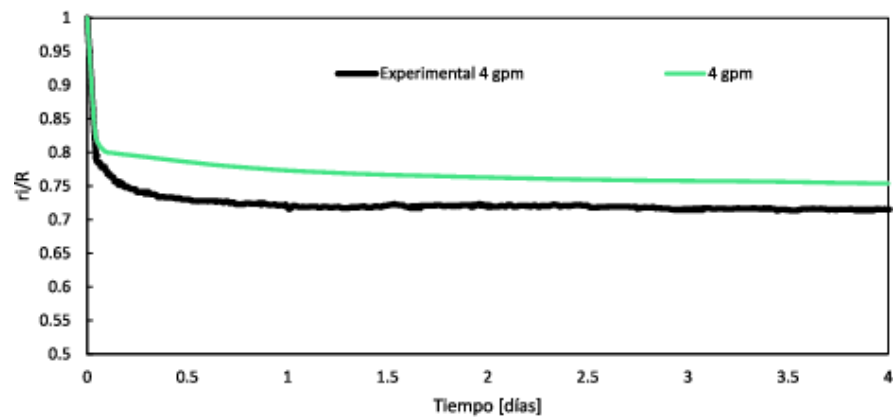


Figura 70 Espesor del depósito para una temperatura de pared de 4.5°C en los 4 días de formación del depósito.

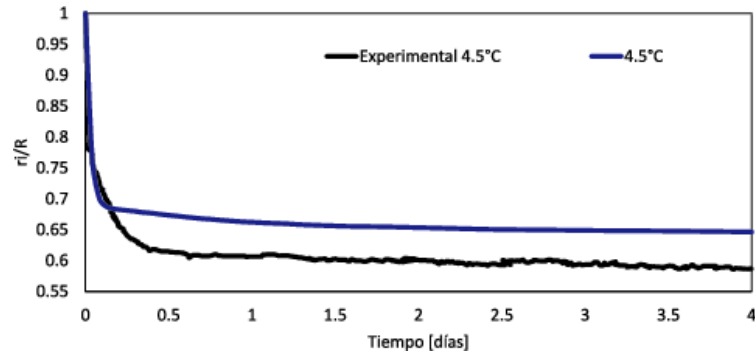


Figura 71 Espesor del depósito para una temperatura de pared de 9.5°C en los 4 días de formación del depósito.

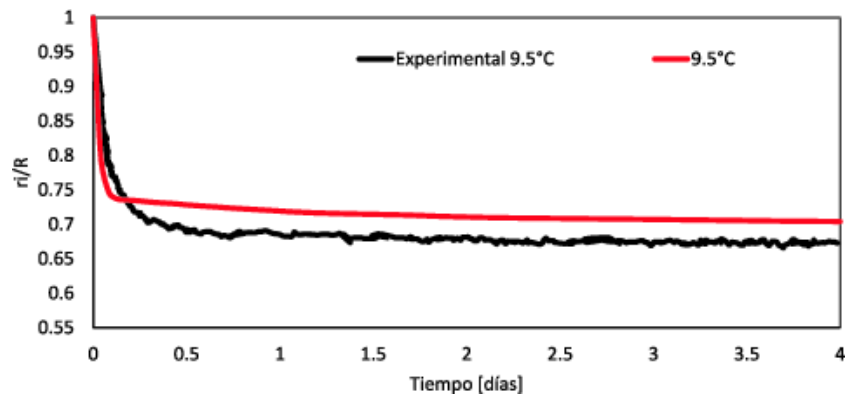
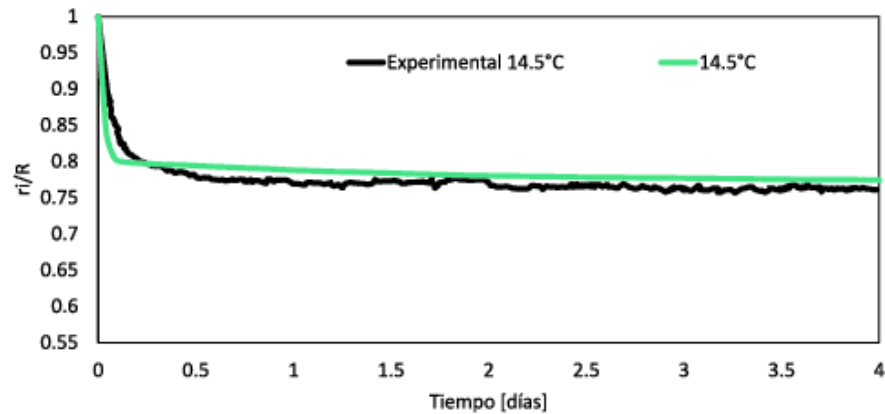


Figura 72 .Espesor del depósito para una temperatura de pared de 14.5°C en los 4 días de formación del depósito.



En las Figuras 74a y 74b se presentan los perfiles de temperatura radial para el set 1 y set 2 respectivamente.

Figura 73a Temperatura de pared a 4.5°C y distintos flujos volumétricos ($z = 1.22\text{m}$)

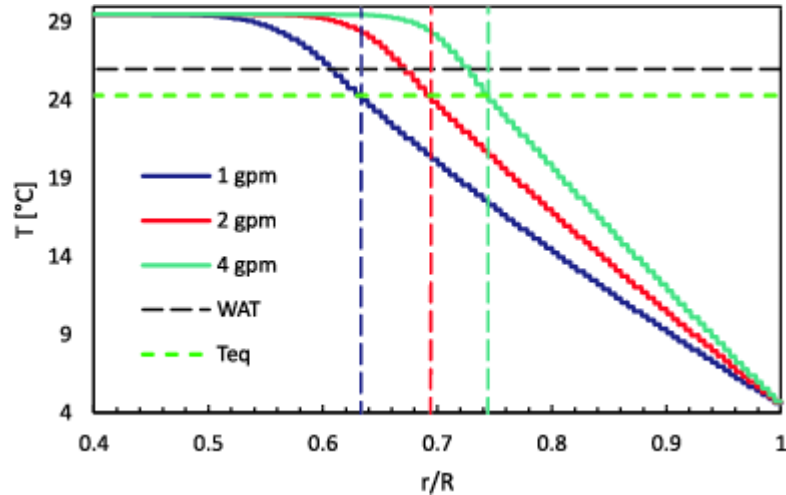
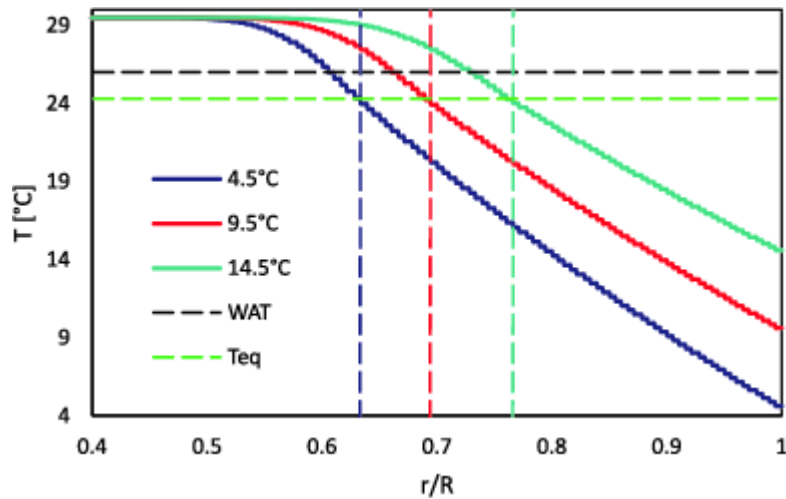


Figura 74b Caudal de 1 gpm y distintas temperaturas de pared ($z = 1.22\text{ m}$).



En las Figuras 74a y 74b la línea horizontal punteada negra representa el WAT del crudo, la línea punteada horizontal verde corresponde a la temperatura donde se detuvo el crecimiento del depósito, mientras que las líneas verticales representan la ubicación de la interfase líquido-sólido para cada uno de los casos. Contrario a lo sucedido en los depósitos de bajo espesor, en este caso, el crecimiento del depósito

se detuvo antes de que la temperatura de la interfase alcanzara el WAT del crudo. Para explicar esta situación, retomamos la expresión para la acumulación de parafinas en la interfase del depósito.

El crecimiento del depósito se detendrá cuando los flujos de entrada y salida de parafinas a la interfase se igualen, o cuando la diferencia entre estos flujos sea muy pequeña. En otras palabras, cuando la concentración de parafinas del fluido evaluada en la interfase sea igual a la concentración de equilibrio a la temperatura de la interfase (Ec. (96)). Ya que no se tiene en cuenta precipitación de las parafinas, la concentración en el fluido se asume igual a la concentración de entrada a la tubería.

$$C_{ws}(T_i) = C_{in} \quad (96)$$

La concentración de saturación del crudo para las condiciones del grupo 1 y del grupo 2 de simulación se puede obtener por medio de la Ec. (97).

$$C_{ws}(T) = a(T + b)^c \quad (97)$$

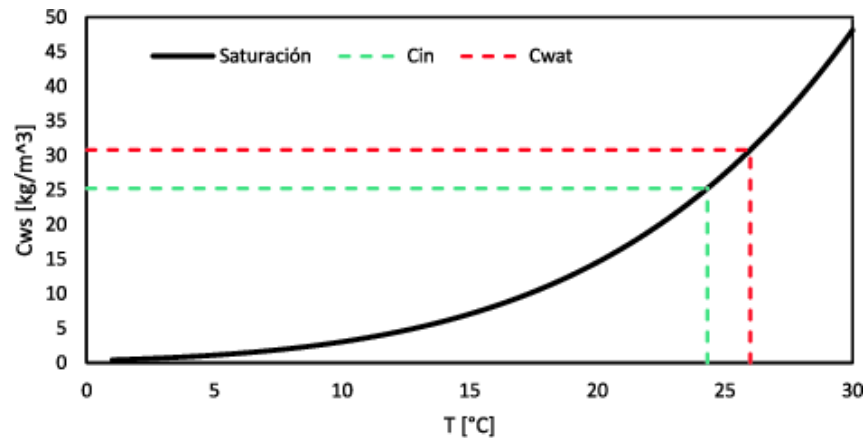
En donde $a = 4.9 * 10^{-9} \text{ kg/m}^3 \text{K}^6$; $b = 17.8^\circ\text{C}$, y $c = 6$ para el crudo del primer grupo de pruebas y $a = 1.31 * 10^{-7} \text{ kg/m}^3 \text{K}^{5.1}$; $b = 17.8^\circ\text{C}$, y $c = 5.1$. La concentración de entrada de parafinas para el segundo grupo de pruebas es de 25.2 kg/m^3 así que el flujo de entrada evaluado en la interfase se detendrá cuando la concentración de saturación sea igual a este valor. Solucionando la Ec. (97) para un valor de concentración de parafinas inicial de 25.2 kg/m^3 , encontramos la temperatura a la que se detiene el crecimiento, la cual se presenta en la Figura 75.

$$\begin{aligned} a(T + b)^c &= 25.2 \\ T &= 24.3055^\circ\text{C} \end{aligned}$$

Regresando nuevamente a las Figuras 74a y 74b se ubica esta temperatura como la línea negra punteada, lo que coincide nuevamente con el argumento presentado en la sección anterior, el crecimiento del depósito se detiene cuando la interfase alcanza la temperatura a la cual la concentración de saturación es igual a la concentración de entrada de parafinas en el crudo. En la Figura 75, se observa que

la concentración de saturación al WAT es mayor que la concentración de entrada, por esta razón el depósito no puede crecer hasta alcanzar el WAT en la interfase. Con esto queda demostrado que el modelo es coherente matemáticamente, el error en la predicción se debe al error al calcular el campo de temperatura, lo cual se

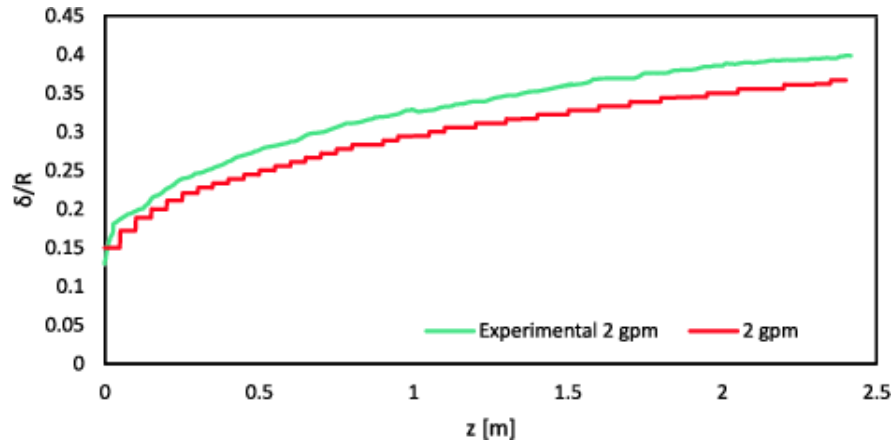
Figura 74 Curva de solubilidad para el crudo en el segundo grupo de pruebas.



atribuye nuevamente al asumir un campo de velocidades que no cumple con la conservación dentro del dominio. Cabe aclarar que el mismo análisis aplica para la predicción del depósito de bajo espesor, la concentración de entrada para ese caso es de 5.61 kg/m^3 , sin embargo la temperatura a la que la concentración de saturación es igual a la concentración de entrada es 14.55°C , temperatura mayor al WAT del crudo (13.6°C), explicando en cierto grado la sobreestimación del espesor del depósito.

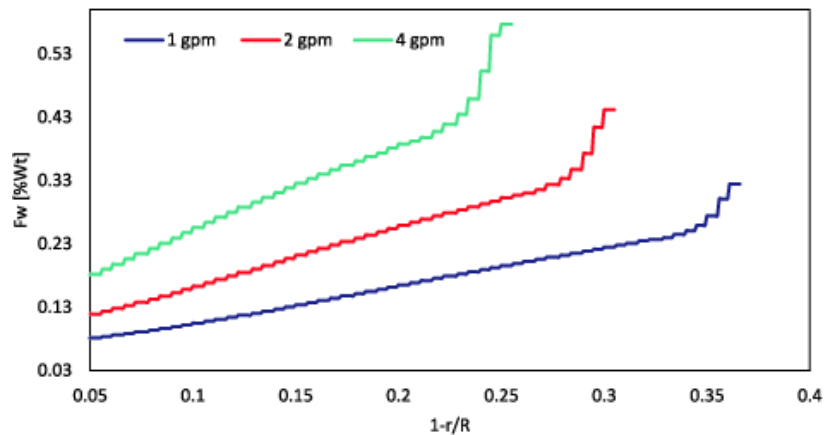
Para comprobar que el depósito crezca adecuadamente, se compara la forma final a los 4 días de acumulación para el caso de 2 gpm y 4.5°C en la pared de la tubería, estos resultados se presentan en la Figura 76.

Figura 75 Espesor final del depósito para 2 gpm, $T_{wall} = 4.5^{\circ}\text{C}$ y $t = 4\text{días}$.



La Figura 76 muestra que el depósito crece en la forma correcta, sin embargo, existe una subestimación del espesor a lo largo de la tubería, lo cual puede solucionarse al calcular el campo de temperatura utilizando el campo de flujo real que se presenta en este caso. A continuación se presenta la variación de la fracción másica en la dirección radial para el set 1 de pruebas en la Figura 77.

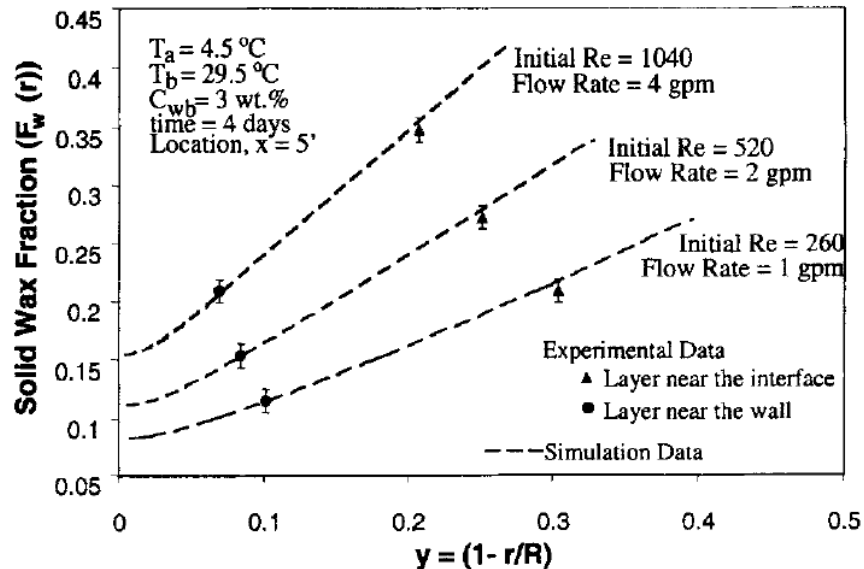
Figura 76 Fracción másica en la dirección radial para el set 1 ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 4\text{días}$).



El incremento en la pendiente de las curvas cerca de la interfase en la Figura 77 se debe a un problema computacional en la discretización del dominio; computacionalmente la interfase del depósito queda ubicada en un volumen de control durante muchas horas de simulación después de que se detiene el

crecimiento del depósito, lo que representa una exposición a un flujo de parafinas directamente desde el fluido, el cual está limitado únicamente por la saturación del depósito, sin embargo, en la realidad en un dominio continuo la interfase se mueve lentamente y el envejecimiento del depósito en la cercanía de la interfase se hace más gradual. A pesar de esto, los resultados son acordes a los resultados obtenidos por Singh *et al.*²⁰⁴ tanto numérica como experimentalmente. Al aumentar el caudal, el depósito se hace más pequeño pero la diferencia en la fracción másica entre la interfase y la pared aumenta, como se evidencia en la Figura 78.

Figura 77 Datos numéricos y experimentales para el envejecimiento radial del depósito para el set 1 en los 4 días de formación del depósito.



Los promedios en el tiempo no se comparan directamente con los resultados experimentales ya que Singh *et al.*²⁰⁵ indican que los datos presentados son tomados «cerca de la interfase» y «cerca de la pared» pero no se indica una posición exacta a lo largo de la tubería, por esto los datos presentados en la Figura

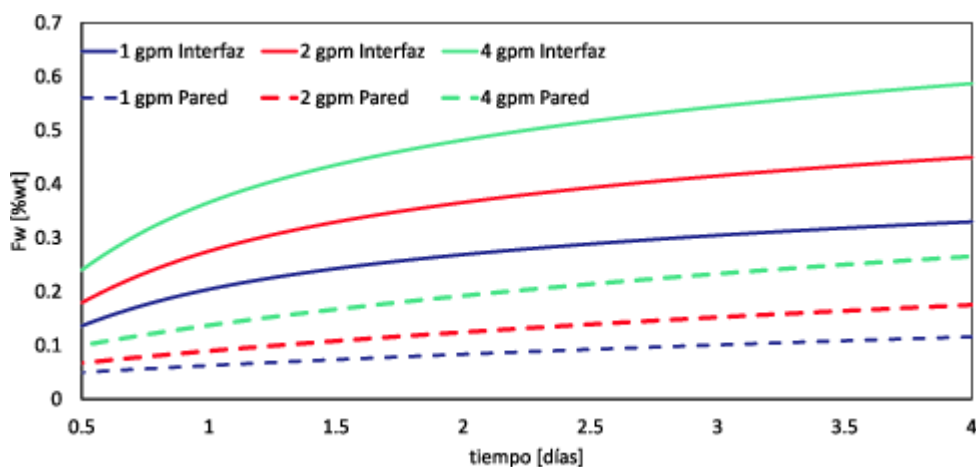
²⁰⁴ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

²⁰⁵ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

79 se comparan por medio de tendencias con los datos experimentales obtenidos por Singh *et al.*²⁰⁶ (Figura 80).

Las tendencias se cumplen nuevamente, al aumentar el flujo volumétrico en la tubería la fracción másica de parafinas es mayor tanto en la pared como en la interfase, como se puede apreciar comparando la Figura 79 con los datos presentados por Singh *et al.*²⁰⁷ en la Figura 80.

Figura 78 Envejecimiento del depósito para el set 1 en los 4 días de formación del depósito.



En la Figura 81 se presentan los resultados para el envejecimiento del depósito para un flujo volumétrico constante y distintas temperaturas de pared, mientras que los datos numéricos y experimentales para la validación se muestran en la Figura 82.

Comparando los resultados numéricos obtenidos en el presente trabajo (Figura 81) y los experimentales de Singh *et al.*²⁰⁸ (Figura 82) se concluye que las tendencias se mantienen, la distribución en el contenido de parafinas es similar a la experimental, el error de acumulación en unos elementos se sigue presentando.

²⁰⁶ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

²⁰⁷ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

²⁰⁸ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

Figura 79 Datos numéricos y experimentales para el envejecimiento del depósito para el set 1 en los 4 días de formación del depósito.

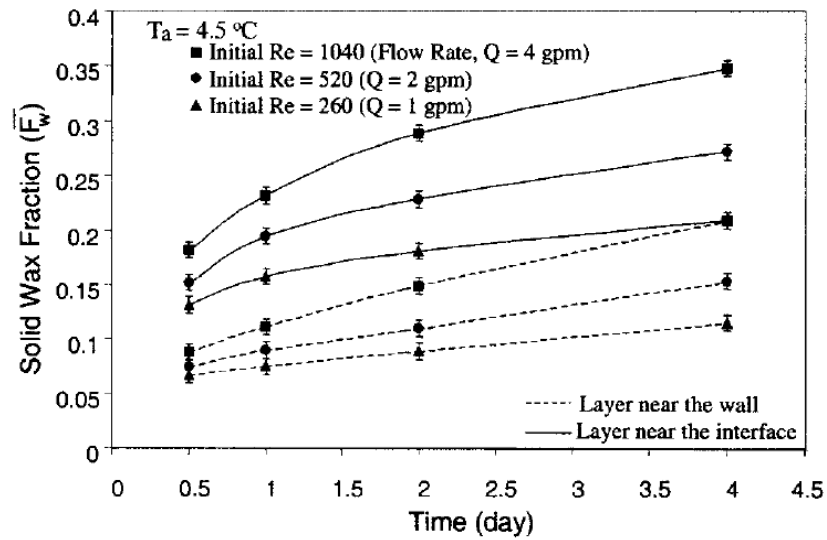


Figura 80 Fracción másica en la dirección radial para el set 2 ($z = 1.22m$ y $t = 4$ días).

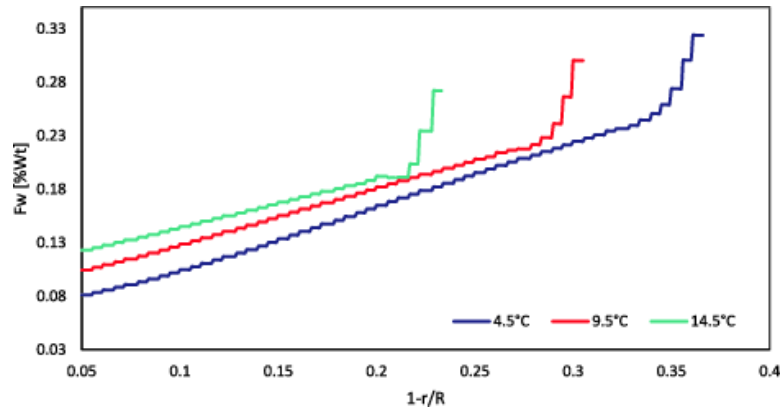
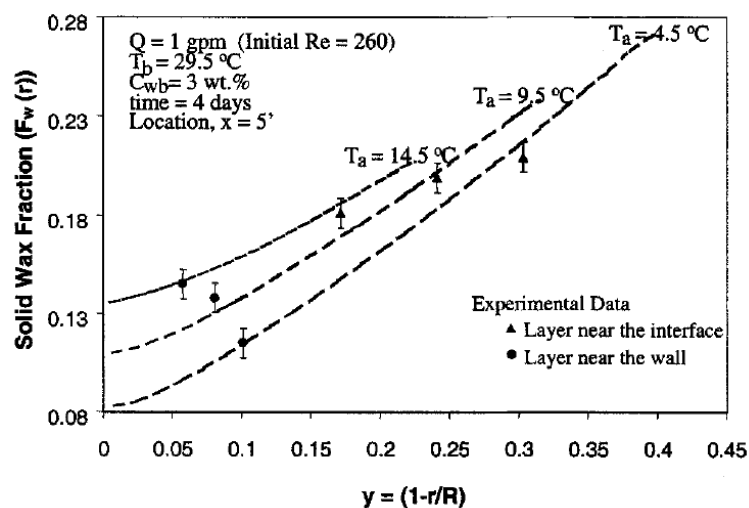


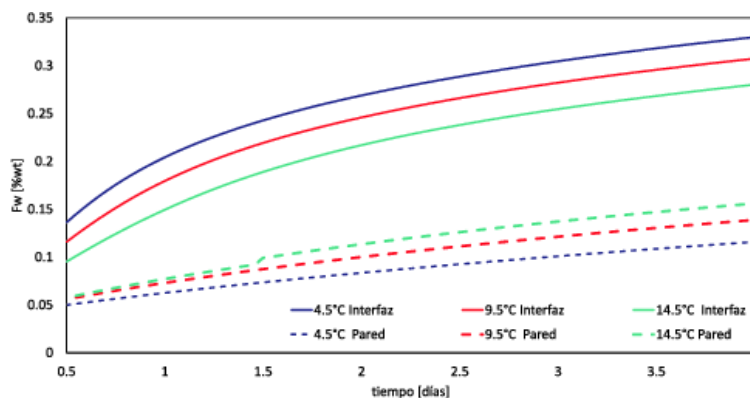
Figura 81 Datos numéricos y experimentales para el envejecimiento radial del depósito para el set 2 en los 4 días de formación del depósito.



Y el promedio de la fracción másica de parafinas en el tiempo se presenta en las Figuras 83 y 84.

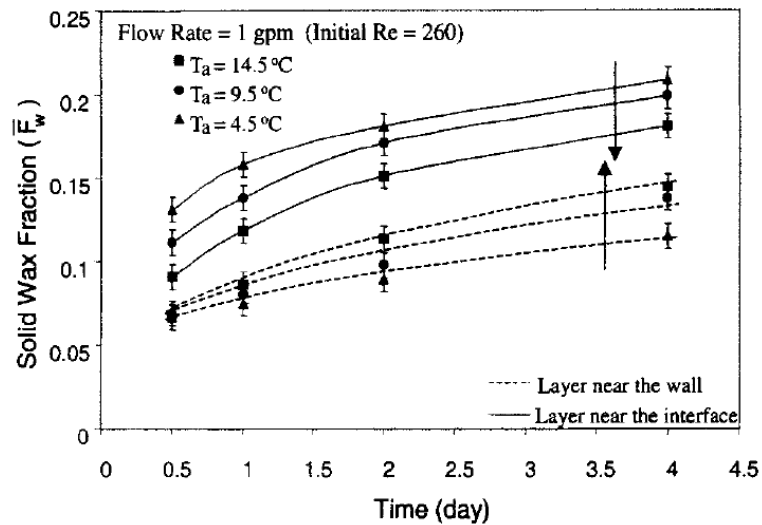
Para el set 2 de pruebas se cumplen las tendencias, al aumentar la temperatura en la pared la fracción másica de parafinas disminuye en la vecindad de la interfase pero incrementa cerca a la pared de la tubería, lo cual se puede apreciar en la solución numérica obtenida por este trabajo (Figura 83) y coincide con la solución numérica y datos experimentales (Figura 84) recogidos por Singh *et al.*²⁰⁹.

Figura 82 Envejecimiento del depósito en el tiempo para el set 2 en los 4 días de formación del depósito.



²⁰⁹ Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

Figura 83 Datos numéricos y experimentales para el envejecimiento del depósito para el set 2 en los 4 días de formación del depósito.

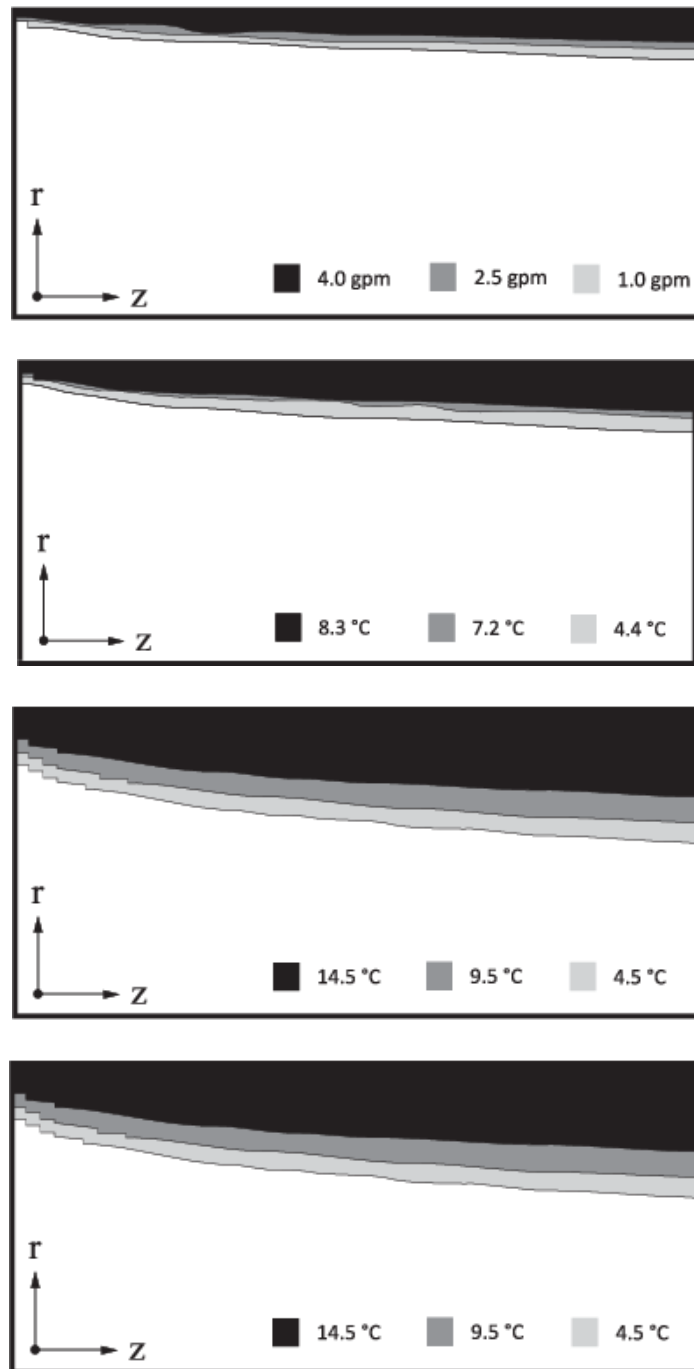


Finalmente en la Figura 85 se presenta la forma de los depósitos al final del proceso de acumulación para todos los set de pruebas.

- Con esto se identifican claramente los efectos de las condiciones de operación en el espesor del depósito formado:
- Un mayor flujo volumétrico genera depósitos de menor espesor.
- Una mayor temperatura de pared genera depósitos de menor espesor.
- A mayor concentración de parafinas disueltas en el crudo se obtienen depósitos de mayor espesor.

Todo esto, relativo al diámetro de la tubería.

Figura 84 Forma del depósito a lo largo de la tubería para el grupo 1 y grupo 2.



4.7 EVALUACIÓN DE LA FORMACIÓN DE DEPÓSITOS USANDO UN CAMPO DE FLUJO BIDIMENSIONAL

Con los resultados obtenidos en la sección 4.6 se da por validado el modelo matemático de simulación y la solución numérica de los balances de energía y especies químicas del fluido y el depósito. Esta sección se centra en el análisis del cálculo del campo de flujo bidimensional y el efecto que tiene este en las variables del proceso tales como la concentración, temperatura y espesor del depósito.

Como se mencionó en la sección 4.5.3, Banki *et al.*²¹⁰ y Hoteit *et al.*²¹¹, evaluaron el crecimiento de depósitos de parafinas usando un campo de flujo bidimensional, sin embargo, se presentan dos diferencias principales con el modelo de este trabajo de investigación. Hoteit *et al.*²¹² (quienes realizaron las pruebas utilizando el modelo de Banki *et al.*²¹³) obtuvieron el campo de flujo tratando el depósito como un medio poroso, y el crecimiento del depósito se calculó solucionando un equilibrio termodinámico líquido-sólido. No obstante, los resultados de los campos de temperatura y de flujo de ese modelo²¹⁴ se utilizaron para comprobar los resultados obtenidos en este trabajo de investigación. La prueba escogida para el estudio del cálculo del campo de flujo corresponde a la prueba número uno del set 2 de la sección 4.6.1, en esta se opera con un flujo volumétrico de 1 gpm y una temperatura de pared de 7.2°C.

²¹⁰ R Banki, Hussein Hoteit, y Abbas Firoozabadi, "Mathematical formulation and numerical modeling of wax deposition in pipelines from enthalpy-porosity approach and irreversible thermodynamics", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), 3387-98.

²¹¹ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693-2706.

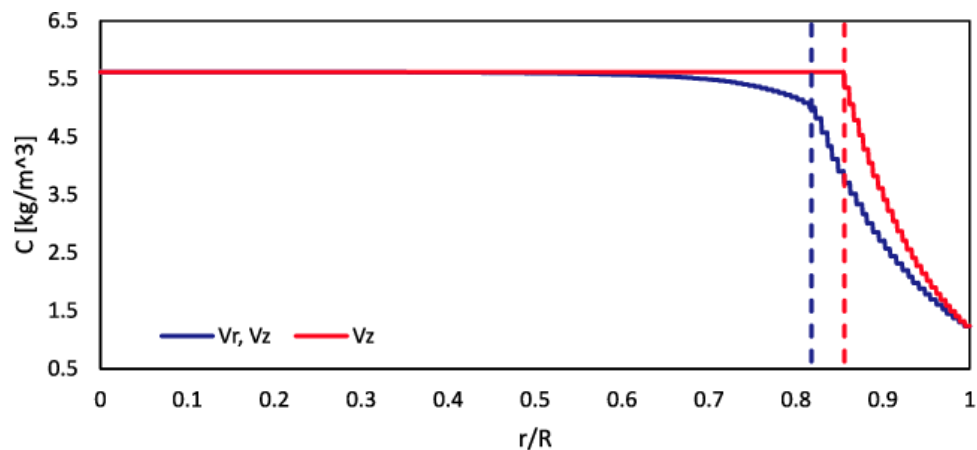
²¹² Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693-2706.

²¹³ R Banki, Hussein Hoteit, y Abbas Firoozabadi, "Mathematical formulation and numerical modeling of wax deposition in pipelines from enthalpy-porosity approach and irreversible thermodynamics", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), 3387-98.

²¹⁴ R Banki, Hussein Hoteit, y Abbas Firoozabadi, "Mathematical formulation and numerical modeling of wax deposition in pipelines from enthalpy-porosity approach and irreversible thermodynamics", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), 3387-98; Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693-2706.

En la Figura 86 se muestran los perfiles de concentración en la dirección radial para la sección media de la tubería, para campos de flujo uni y bidimensional.

Figura 85 Perfil radial de concentración para la sección media de la tubería ($z = 1.22m$ y $t = 5días$).



En esta Figura se aprecia que el cálculo del campo de flujo bidimensional ocasiona una disminución o «suavizado» en la curva de concentración en la cercanía de la interfase del lado del fluido, similar al efecto de la constante de precipitación presentada en la Figura 53. Esto debería causar una desaceleración en el crecimiento del depósito, sin embargo, no es posible estudiar su efecto aislado ya que este efecto se encuentra acoplado al campo de flujo, el cual depende de la forma del depósito, y esta a su vez depende del perfil de temperatura y concentración calculados con el campo de flujo. Sin embargo, en este caso el crecimiento no se detiene al alcanzar la concentración de 5.61 como sucedía anteriormente, en la Figura 86 se observa que la concentración del lado del líquido (región a la izquierda de la interfase) es menor que la concentración en el seno del fluido, esta corresponde a un valor de 5 kg/m^3 .

Continuando con la validación, se analizan las componentes de velocidad axial y radial en la sección media de la tubería obtenidas después de los 5 días de formación del depósito, se presentan en las Figuras 87 y 88.

Figura 86 Velocidad axial para la sección media de la tubería ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).

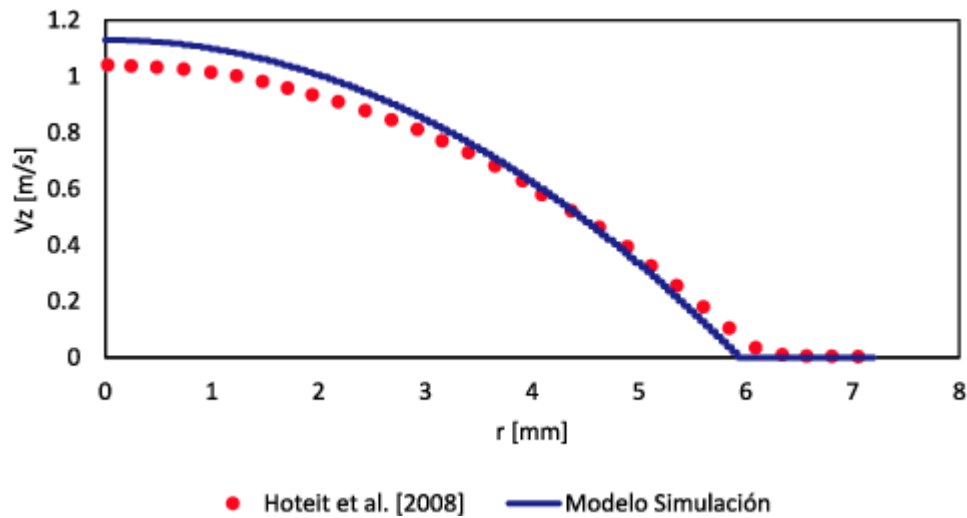
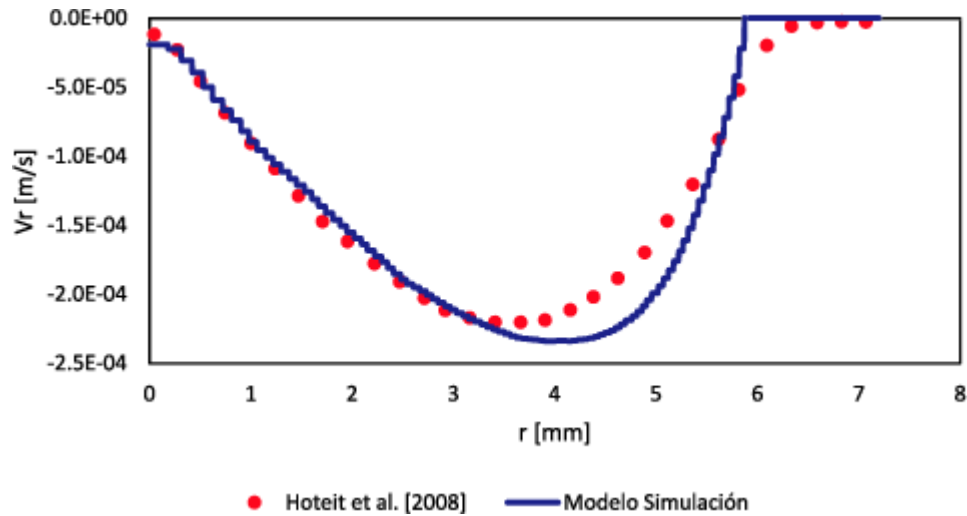


Figura 87 Velocidad radial para la sección media de la tubería ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).

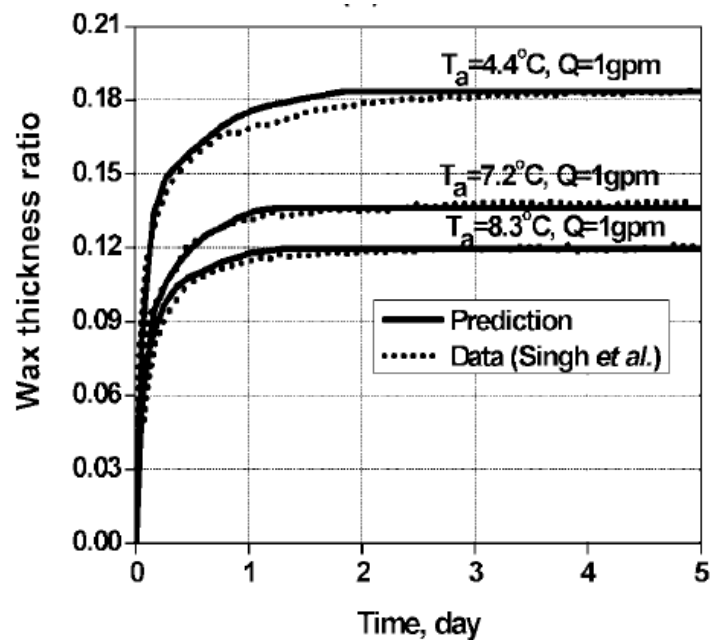


Los resultados obtenidos en este trabajo de investigación se aproximan con los valores calculados por Hoteit *et al.*²¹⁵, las diferencias corresponden a la predicción del espesor final del depósito, lo que se podría traducir en el área de flujo disponible, sin embargo, se resalta que el orden de magnitud de la componente en z (1 m/s) y en r (1×10^{-4} m/s) de la predicción realizada es acorde.

²¹⁵ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

Para estudiar las posibles diferencias en el área de flujo disponible en la sección media de la tubería, se revisa la predicción de este trabajo de investigación y los resultados de Hoteit *et al.*²¹⁶, en la Figura 89 se presenta la predicción realizada por Hoteit *et al.*²¹⁷ para el set 2 de pruebas de la sección 8.6.1, en este se aprecia el éxito en la predicción del crecimiento del depósito del modelo propuesto por Banki *et al.*²¹⁸, siendo contrastado con los datos experimentales obtenidos por Singh *et al.*²¹⁹.

Figura 88 Predicción del espesor del depósito hecha por Hoteit en los 5 días de formación del depósito.



En la Figura 90 se presentan los datos para el espesor adimensionalizado obtenido experimentalmente, por el MWP, y por este trabajo de investigación asumiendo un

²¹⁶ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, “Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics”, *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

²¹⁷ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, “Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics”, *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

²¹⁸ R Banki, Hussein Hoteit, y Abbas Firoozabadi, “Mathematical formulation and numerical modeling of wax deposition in pipelines from enthalpy–porosity approach and irreversible thermodynamics”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), 3387–98.

²¹⁹ Probjot Singh *et al.*, “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

campo de flujo unidimensional (v_z) y calculando el campo de flujo bidimensional (v_r, v_z).

En la Figura 90 se evidencia una sobreestimación del espesor del depósito durante los 5 días de proceso cuando se calcula el campo de flujo bidimensional, mientras que el MWP logra una predicción exitosa, seguida por la predicción hecha por este trabajo de investigación utilizando un campo de flujo unidimensional. Este comportamiento se revisa nuevamente por medio del perfil de temperatura radial en la sección media de la tubería, la cual se muestra en la Figura 91.

Figura 89 Espesor adimensional del depósito en los 5 días de formación del depósito.

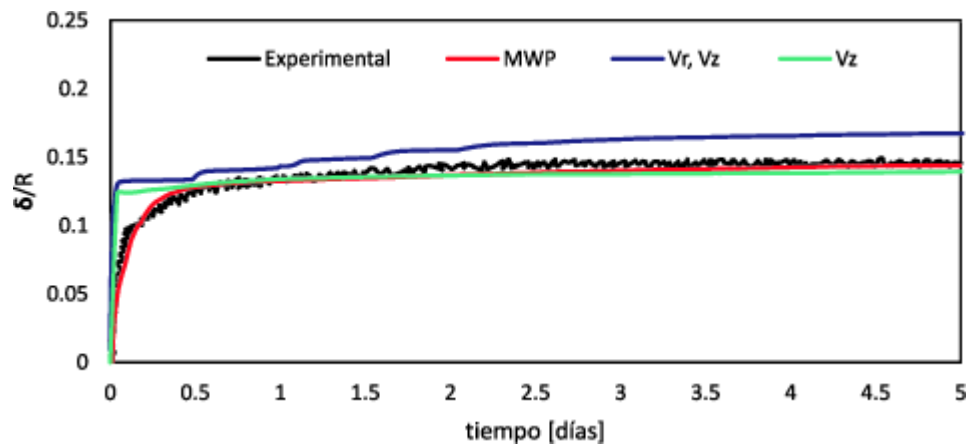
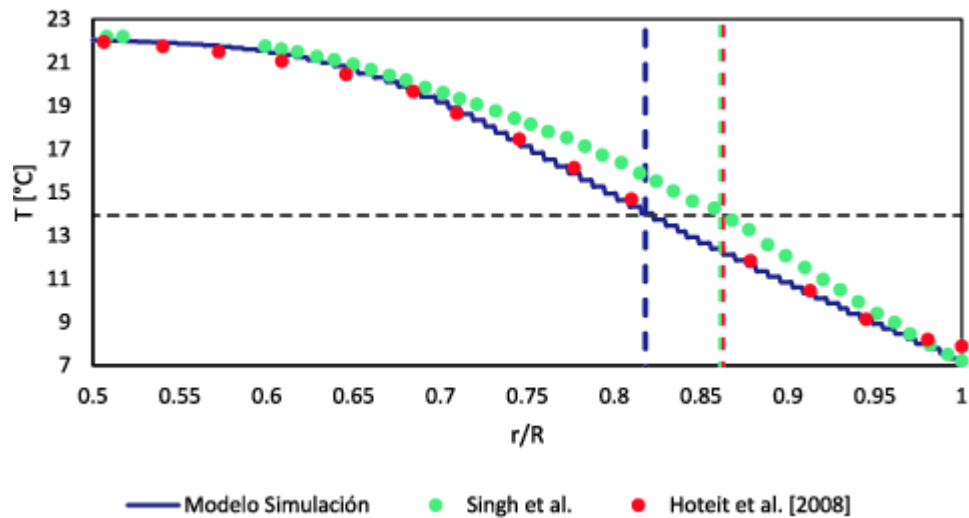


Figura 90 Perfil radial de temperatura para la sección media de la tubería ($z = 1.22\text{m}$ y $t = 5\text{días}$).



La Figura 91 evidencia que la inclusión del campo de flujo en el cálculo de otras variables como la temperatura y la concentración tiene un efecto notable. El gradiente de temperatura es mayor para este caso, lo que resulta en menores temperaturas a lo largo de la dirección radial, y si retomamos el análisis (Ec. (59)) para la acumulación que fue propuesto en la sección anterior, el crecimiento del depósito se dará nuevamente hasta que la concentración de saturación en la interfase del depósito se iguale a la concentración de parafinas en el fluido. Para este caso la temperatura a la que sucede este hecho es de aproximadamente 13.9°C y está señalada en la Figura 91 como la línea negra horizontal punteada, lo que permite concluir que el modelo sigue siendo matemáticamente coherente. Esta sobreestimación del espesor del depósito puede ser apreciada nuevamente en la Figura 92.

Retomando la Figura 90 y 91, aunque Hoteit *et al.*²²⁰ presentan un campo de temperatura diferente al calculado por Singh *et al.*²²¹, este logra calcular exitosamente el espesor del depósito; como se mencionó anteriormente, no utilizaron los mismos fenómenos para representar el crecimiento. El modelo desarrollado en el presente trabajo de investigación sobreestima el crecimiento del

²²⁰ Hussein Hoteit, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, "Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics", *Energy and Fuels*, 22.4 (2008), 2693–2706.

²²¹ Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74.

depósito por el criterio de parada implícito en los flujos del balance interfacial, por esta razón habría que considerar alternativas en el cálculo con el fin de incluir distintos fenómenos que puedan reducir el error en la predicción.

Figura 91 Forma del depósito para un caudal de 1 gpm y una temperatura de pared 7.2°C ($t = 5$ días)



Finalmente se resalta que aunque el modelo predictivo para la formación de depósitos planteado en este trabajo sobreestima ligeramente los datos experimentales, desde el punto de vista cualitativo, el modelo predice acertadamente el efecto de las variables de flujo sobre el depósito. No obstante, resulta curioso que en la validación, el modelo simplificado (campo de flujo unidimensional) de Singh *et al.*²²² se ajuste mejor a los datos experimentales que el modelo que calcula un campo de flujo acorde a la situación física representada. Esta situación, puede ser explicada por el hecho que el MWP depende de parámetros (como α y k_r), que no son conocidos de manera precisa, pero que tienen un gran efecto sobre las predicciones del modelo. Esta situación ya había sido puesta en evidencia por Eskin *et al.*²²³, quien afirma que el ajuste de los modelos de formación de depósitos a resultados experimentales utilizando parámetros de ajuste, es una tarea sencilla. Por otro lado, la única manera de garantizar predicciones precisas es

²²² Probjot Singh et al., "Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels", *AIChE Journal*, 46.5 (2000), 1059–74; Probjot Singh et al., "Morphological evolution of thick wax deposits during aging", *AIChE Journal*, 47.1 (2001), 6–18.

²²³ Dmitry Eskin, John Ratulowski, y Kamran Akbarzadeh, "A model of wax deposit layer formation", *Chemical Engineering Science*, 97 (2013), 311–19.

que los modelos de formación de depósitos tengan una representación robusta sobre los fenómenos involucrados en el proceso y no se enfoquen en el ajuste a datos experimentales obtenidos en dispositivos de flujo de Couette o «*Flow loops*», como el presentado en la Figura 14. Esto lleva a concluir que se requiere seguir trabajando en lograr mejores estimados de parámetros fenomenológicos como la conductividad térmica y el coeficiente de difusión en el depósito.

5. CONCLUSIONES

1. El modelo de predicción de formación de depósitos de parafinas «Michigan Wax Predictor» fue implementado y extendido a un campo de flujo bidimensional utilizando dinámica de fluidos computacional y el método de volúmenes finitos mediante el presente trabajo de investigación.
2. El modelo fue validado por medio de 12 pruebas de acumulación bajo distintas condiciones de operación propuestas por Singh y colaboradores, lo cual permitió estudiar el efecto de la temperatura de pared y del flujo volumétrico en las variables de respuesta: espesor y contenido de parafinas del depósito.
3. El modelo sigue las tendencias de acumulación al modificar los parámetros de operación; el espesor del depósito disminuye al aumentar el caudal o al aumentar la temperatura de pared, y el envejecimiento es menos drástico al disminuir el flujo volumétrico o al disminuir la temperatura de pared.
4. El modelo de acumulación propuesto en este trabajo predice el espesor del depósito en situaciones de flujo que propician el crecimiento tanto de depósitos de bajo espesor (desde el 4% del radio de la tubería) como de depósitos de gran espesor (hasta 40% del radio de la tubería) de manera aceptable.
5. El modelo pseudoestacionario planteado en este modelo de investigación predice el fenómeno de formación de depósitos bajo régimen laminar.
6. El proceso de crecimiento está controlado por el valor de la concentración de parafina en la vecindad de la interfase del depósito, el depósito crecerá hasta que se llegue a un equilibrio entre la concentración del fluido y la concentración de saturación en el sólido.
7. El modelo de acumulación calcula correctamente el campo de flujo en presencia de depósitos que obstruyen el paso del fluido utilizando la técnica de «*Blocked-Off Regions*».

8. La inclusión de la componente radial de la velocidad tiene un efecto notable en las propiedades transportadas por el fluido, el gradiente de temperatura es mayor al calcular el campo de flujo real, lo que se percibe como una mayor caída en la temperatura en la dirección radial. El efecto de la componente radial de la velocidad en el campo de concentración es una disminución notable en la cantidad de parafinas en la zona fluida en las cercanías de la interfase.
9. La disminución de la concentración de parafinas en el fluido causada por la velocidad radial disminuye la temperatura a la cual los flux máxicos se hacen despreciables y el proceso de crecimiento se detiene.

6. RECOMENDACIONES

1. El modelo de formación de depósitos planteado por este trabajo de investigación predice de manera aceptable el espesor del depósito, pero aún requiere una sintonización del aspecto morfológico α , se debe investigar de una manera más estricta la dependencia del parámetro con el contenido de parafinas en el depósito para poder establecer si el comportamiento es lineal o no lineal.
2. Se recomienda investigar otras expresiones para evaluar la difusividad efectiva dentro del depósito para evitar el uso de parámetros empíricos como α .
3. Considerar los cambios en la viscosidad del fluido asociados a los cambios en la temperatura el crudo.
4. En futuros trabajos asumir el depósito como medio poroso con el fin de incluir el flux de masa por transporte convectivo.
5. Considerar el transporte relacionado a la difusividad térmica propuesto por Banki y colaboradores, y Hoteit y colaboradores.
6. Incluir un modelo de turbulencia para extender el modelo a régimen turbulento y de esta manera poder contrastar los resultados del modelo contra más pruebas experimentales e incluir los efectos del «*shear removal*».
7. Implementar este modelo para cálculo en paralelo con el fin de reducir tiempos de cómputo o implementarlo en un sistema operativo con menos restricciones para el procesamiento.
8. Incluir el efecto de la sedimentación por gravedad para distintas condiciones de operación.

BIBLIOGRAFÍA

- ABDALLAH, E. M., y N. El-khatib, "Modeling wax deposition in crude oil", en *2011 National Postgraduate Conference*, 2011, p. 1–7
- ADEWUSI, Victor A., "Prediction of wax deposition potential of hydrocarbon systems from viscosity-pressure correlations", *Fuel*, 76 (1997), 10 p. 79–83
- AJAYI, OLUWATOSIN Emmanuel, "Modelling of Controlled Wax Deposition and Loosening in Oil and Gas Production Systems" (Norwegian University of Science and Technology, 2013)
- ANDERSON, J, *Computational Fluid Dynamics*, Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications (McGraw-Hill Education, 1995)
- APTE, Mandar S, AHMADBAZLEE Matzain, Hong-Quan ZHANG, Michael VOLK, James P BRILL, y Jeff L CREEK, "Investigation of Paraffin Deposition During Multiphase Flow in Pipelines and Wellbores-Part 2: Modeling", *Journal of Energy Resources Technology*, 123 (2001), 1 p. 50–57
- ARIS, Rutherford, "On the permeability of membranes with parallel, but interconnected, pathways", *Mathematical Biosciences*, 77 (1985), p. 5–16
- BAI, Chengyu, y JINJUN Zhang, "Effect of Carbon Number Distribution of Wax on the Yield Stress of Waxy Oil Gels", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52 (2013), 27 p. 32–39
- BANKI, R, Hussein Hoteit, y Abbas Firoozabadi, "Mathematical formulation and numerical modeling of wax deposition in pipelines from enthalpy–porosity approach and irreversible thermodynamics", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51 (2008), 33 p. 87–98
- BAYAT, Mahmoud, Javad Aminian, Mansour Bazmi, Shahrokh Shahhosseini, y Khashayar Sharifi, "CFD modeling of fouling in crude oil pre-heaters", *Energy Conversion and Management*, 64 (2012), 3 p. 44–50

- BELHOCINE, A., y W.Z. Wan Omar, "An analytical method for solving exact solutions of the convective heat transfer in fully developed laminar flow through a circular tube", *Heat Transfer - Asian Research*, 46 (2017), p. 1–12
- BENNETT, Christopher A., "A Theory Describing Asphaltene Adhesion Fouling Inside Heat Exchanger Tubes", *Heat Transfer Engineering*, 33 (2012), 12 p. 46–50
- BERN, Peter A., Vincent R. Withers, y Roger J.R. Cairns, "Wax Deposition in Crude Oil Pipelines", en *European Offshore Technology Conference and Exhibition* (Society of Petroleum Engineers, 1980)
- BERNE-ALLEN, A, y Lincoln T Work, "Solubility of Refined Paraffin Waxes in Petroleum Fractions", *Industrial & Engineering Chemistry*, 30 (1938), 8 p. 06–12
- BHRAMARA, P, V. D. Rao, K. V. Sharma, y T. K. K. Reddy, "CFD Analysis of Two Phase Flow in a Horizontal Pipe - Prediction of Pressure Drop", *World Academy of Science, Engineering and Technology*, 40 (2008), 3 p. 15–21
- BILDERBACK, C A, y L A McDougall, "Complete Paraffin Control in Petroleum Production", *Journal of Petroleum Technology*, 1969, 11 p. 51–56
- BIRD, R., W. Stewart, y E. Lightfoot, *Fenómenos de transporte*, 2a ed. (México: John Wiley & Sons, 2006)
- BIRD, R.Byron;, Robert C.; Armstrong, y Ole Hassanger, *Dynamics of polymeric liquids, Fluid mechanics*, ed. Wiley, *Wiley interscience*, 2a ed., 1987, xxv
- BROWN, T S, V G Niesen, y D D Erickson, "Measurement and Prediction of the Kinetics of Paraffin Deposition", en *SPE Annual Technical Conference and Exhibition* (Houston, Texas: Society of Petroleum Engineers, 1993), p. 16
- BURGER, E.D., T.K. Perkins, y J.H. Striegler, "Studies of Wax Deposition in the Trans Alaska Pipeline", *Journal of Petroleum Technology*, 33 (1981), 10 p. 75–86
- CARSLAW, H. S., y Jaeger J. C., "Conduction of Heat in Solids", en *Clarendon Press 2nd ed.* (Oxford, 1959)

CHENG, Can, Wenbao Jia, Daqian Hei, Zhiyong Wei, y Hongtao Wang, “Feasibility study for wax deposition imaging in oil pipelines by PGNA technique”, *Applied Radiation and Isotopes*, 128 (2017), 1 p. 71–74

CLEAVER, J W, y B Yates, “Mechanism of detachment of colloidal particles from a flat substrate in a turbulent flow”, *Journal of Colloid And Interface Science*, 44 (1973), 4 p. 64–74

CORDOBA, A J, y C A Schall, “Application of a heat transfer method to determine wax deposition in a hydrocarbon binary mixture”, *Fuel*, 80 (2001), 12 p. 85–91

———, “Solvent migration in a paraffin deposit”, *Fuel*, 80 (2001), 12 p. 79–84

COUTO, Guilherme, Hong Chen, Emmanuel Delle-case, Cem Sarica, y Michael Volk, “An Investigation of Two-Phase Oil/Water Paraffin Deposition”, *SPE Production & Operations*, 23 (2008), p. 1–7

CREEK, J.L, Hans Jacob Lund, James P Brill, y Mike Volk, “Wax deposition in single phase flow”, *Fluid Phase Equilibria*, 158–160 (1999), 8 p. 01–11

CUSSLER, E L, Stephanie E Hughes, William J Ward, y Rutherford Aris, “Barrier membranes”, *Journal of Membrane Science*, 38 (1988), 1 p. 61–74

DALIRSEFAT, Reza, y Farzaneh Feyzi, “A thermodynamic model for wax deposition phenomena”, *Fuel*, 86 (2007), 14 p. 02–8

DEEN, W M, *Analysis of Transport Phenomena*, Topics in Chemical Engineering (OUP USA, 1998)

DIEGO FERNANDO, Bautista Prada, “Implementación de un modelo fenomenológico para la predicción de depósitos de parafinas en el campo escuela colorado” (Universidad Industrial de Santander, 2014)

DIRAND, M., V. Chevallier, E. Provost, M. Bouroukba, y D. Petitjean, “Multicomponent paraffin waxes and petroleum solid deposits: structural and thermodynamic state”, *Fuel*, 77 (1998), 12 p. 53–60

- DITTUS, F. W., y L. M.K. Boelter, "Heat transfer in automobile radiators of the tubular type", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 12 (1985), p. 3–22
- EDMONDS, Beryl, Tony Moorwood, Richard Szczepanski, y Xiaohong Zhang, "Simulating wax deposition in pipelines for flow assurance", *Energy and Fuels*, 22 (2008), 7 p. 29–41
- ELSHARKAWY, Adel M, Taher A Al-sahhaf, Mohamed A Fahim, y Wafaa Al-zabbai, "Determination and Prediction of Wax Deposition from Kuwaiti Crude Oils", en *1999 SPE Latin American and Caribbean that can be classified as paraffins, naphthenes and aromatics Petroleum Engineering Conference* (Caracas, Venezuela., 1999)
- ESKIN, Dmitry, John Ratulowski, y Kamran Akbarzadeh, "A model of wax deposit layer formation", *Chemical Engineering Science*, 97 (2013), 3 p. 11–19
- FALLA, Wayne R., Michael Mulski, y E. L. Cussler, "Estimating diffusion through flake-filled membranes", *Journal of Membrane Science*, 119 (1996), 1 p. 29–38
- FONTOURA, D. V R, E. M. Matos, y J. R. Nunhez, "A three-dimensional two-phase flow model with phase change inside a tube of petrochemical pre-heaters", *Fuel*, 110 (2013), p. 196–203
- FUNG, G, W P Backhaus, S McDaniel, y M Erdogmus, "To Pig or Not to Pig: The Marlin Experience With Stuck Pig", en *Offshore Technology Conference, 1-4 May, Houston, Texas, USA* (Offshore Technology Conference, 2006), p. 1–7
- GARCÍA, M., F. LÓPEZ, y Y. NIÑO, "Characterization of near-bed coherent structures in turbulent open channel flow using synchronized high-speed video and hot-film measurements", *Experiments in Fluids*, 19 (1995), p.16–28
- GOLCZYNSKI, Thomas S, y ELIJAH C Kempton, "Understanding wax problems leads to deepwater flow assurance solutions", *World Oil*, 227 (2006)
- GOOYA, Reza, MEHDY Gooya, y BAHRAM Dabir, "Effect of flow and physical parameters on the wax deposition of Middle East crude oil under subsea condition :

heat transfer viewpoint”, 2013, 1205–16

GUOZHONG, ZHANG, y Liu GANG, “Study on the wax deposition of waxy crude in pipelines and its application”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 70 (2010), 1–9

HAGHSHENASFARD, M, y K HOOMAN, “CFD modeling of asphaltene deposition rate from crude oil”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 128 (2015), 24–32

HAJ-SHAFIEI, Samira, Dalia SERAFINI, y Anil K MEHROTRA, “A steady-state heat-transfer model for solids deposition from waxy mixtures in a pipeline”, *Fuel*, 137 (2014), 346–59

HALSTENSEN, Maths, Benjamin Kaku Arvoh, Lene Amundsen, y Rainer Hoffmann, “Online estimation of wax deposition thickness in single-phase sub-sea pipelines based on acoustic chemometrics: A feasibility study”, *Fuel*, 105 (2013), 7 p. 18–27

HAYDUK, W, y B S Minhas, “Correlations for Prediction of Molecular Diffusivities in Liquids *”, en *30th Canadian Chemical Engineering Conference* (Edmonton, Alberta., 1982), p. 295–99

HERNANDEZ, O.C., H. Hensley, C. Sarica, J.P. Brill, M. Volk, y E. Delle-Case, “Improvements in Single-Phase Paraffin Deposition Modeling”, *SPE Production & Facilities*, 19 (2004), 2 p. 37–44

HOFFMANN, Rainer, y Lene Amundsen, “Single-Phase Wax Deposition Experiments”, *Energy & Fuels*, 24 (2010), 10 p. 69–80

HOTEIT, Hussein, Reza Banki, y Abbas Firoozabadi, “Wax deposition and aging in flowlines from irreversible thermodynamics”, *Energy and Fuels*, 22 (2008), 2693–2706

HSU, J.J.C., y J.P. Brubaker, “Wax Deposition Measurement and Scale-Up Modeling for Waxy Live Crudes under Turbulent Flow Conditions”, en *International Meeting on*

Petroleum Engineering (Society of Petroleum Engineers, 1995), p. 14–17

HUANG, Z., S. Zheng, y H.S. Fogler, *Wax Deposition: Experimental Characterizations, Theoretical Modeling, and Field Practices*, Emerging Trends and Technologies in Petroleum Engineering (CRC Press, 2016)

HUANG, Zhenyu, Hyun Su Lee, Michael Senra, y H. Scott Fogler, “A fundamental model of wax deposition in subsea oil pipelines”, *AIChE Journal*, 57 (2011), 29 p. 55–64

HUANG, Zhenyu, Michael Senra, Ravi Kapoor, y H. Scott Fogler, “Wax deposition modeling of oil/water stratified channel flow”, *AIChE Journal*, 57 (2011), 8 p. 41–51

HUNT, A., “Uncertainties remain in predicting paraffin deposition”, *Oil and Gas Journal*, 94 (1996), p. 1–9

HUNT Jr., Elton B., “Laboratory Study of Paraffin Deposition”, *Journal of Petroleum Technology*, 14 (1962), 12 p. 59–69

JEMMETT, Mark R, Milind Deo, Jessica Earl, y Patrick Mogenhan, “Applicability of Cloud Point Depression to #Cold Flow”, *Energy & Fuels*, 26 (2012), 26 p. 41–47

JIMÉNEZ, Javier, P. Moin, R. Moser, y L. Keefe, “Ejection mechanisms in the sublayer of a turbulent channel”, *Physics of Fluids*, 31 (1988), 13 p. 11–13

LAUFER, J, *The structure of turbulence in fully developed pipe flow*, NACA report 1174, 1954

LEE, Hyun Su, *Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines* (Ph.D. dissertation. Chemical Eng., University of Michigan, Michigan, 2008)

———, “Computational and Rheological Study of Wax Deposition and Gelation in Subsea Pipelines” (The University of Michigan 2008, 2008)

LI, Xue-Gang, Lu-Hong Zhang, Rong-Ya Zhang, Yong-Li Sun, Bin Jiang, Ming-Fang Luo, et al., “CFD modeling of phase change and coke formation in petroleum refining

heaters”, *Fuel Processing Technology*, 134 (2015), p. 18–25

LINDELOFF, Niels, y Kristian Krejbjerg, “A Compositional Model Simulating Wax Deposition in Pipeline Systems”, *Energy & Fuels*, 16 (2002), 8 p. 87–91

LIU, Baojun J., Wanting T. Sun, Chengting T. Liu, y Liping P. Guo, “The Thermodynamic Model on Paraffin Wax Deposition Prediction”, *Engineering*, 7 (2015), 8 p. 27–32

LU, Yingda, Zhenyu Huang, Rainer Hoffmann, Lene Amundsen, y H Scott Fogler, “Counterintuitive Effects of the Oil Flow Rate on Wax Deposition”, *Energy & Fuels*, 26 (2012), 40 p. 91–97

LUND, H. J., “Investigation of Paraffin Deposition During Single-phase Liquid Flow in Pipelines” (University of Tulsa, 1998)

MAJEED A, Bringedal B, Overa S., “Model calculates wax deposition for N. Sea oils.”, *Oil and Gas Journal*, 88 (1990), p. 63–69

MANNING, Matthew, “U.S. Energy Information Administration. Independent Statistics & Analysis.”, *Offshore production nearly 30% of global crude oil output in 2015* <<https://www.eia.gov/todayinenergy/detail.php?id=28492>> [consultado 30 noviembre 2018]

MATZAIN, A, *Single phase liquid paraffin deposition modeling*, ed. University of Tulsa (University of Tulsa, 1996)

MERIAM, J.L., y L.G. Kraige, *Engineering Mechanics: Statics*, ed. John Wiley & Sons, 7th ed. (Wiley, 2011)

MODESTY Kelechukwu, Ekeh, Hikmat Said Al-Salim, y Ahmmed Saadi, “Prediction of wax deposition problems of hydrocarbon production system”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 108 (2013), 1 p. 28–36

NEWMAN, Nicholas, “Cleaning, Maintaining, Inspecting all Part of a Day’s Work”, *Pipeline & Gas Journal*, 243 (2016), p. 51–52

NGUYEN, D A, “Fused chemical reactions to remediate paraffin plugging in sub-sea pipelines” (University of Michigan, 2004)

NGUYEN, Duc A, H Scott Fogler, y Sumaeth Chavadej, “Fused Chemical Reactions. 2. Encapsulation: Application to Remediation of Paraffin Plugged Pipelines”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 40 (2001), 50 p. 58–65

NOVILLE, Ivan, y Lilia Naveira, “Comparison Between Real Field Data and the Results of Wax Deposition Simulation”, en *SPE Latin America and Caribbean Petroleum Engineering Conference* (Mexico City, Mexico, 2012), p. 12

PATANKAR, Suhas, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980

PEREZ, O. C. H., *Investigation of Single-phase Paraffin Deposition Characteristics* (University of Tulsa, 2002)

REISTLE, C. E., Jr., *Paraffin and Congealing-Oil Problems*, 1932

RYGG, O. B., A. K. Rydahl, y H. P. Rønningsen, “Wax deposition in offshore pipeline systems”, en *1st North American Conference Multiphase Technology*. (Baniff, Canada., 1998)

SAFFMAN G., P, “The lift on a small sphere in a slow shear flow”, *Journal of Fluid Mechanics*, 22 (1965), p. 385–400

SAWARKAR, A N, A B Pandit, y J B Joshi, “Studies in Coking of Arabian Mix Vacuum Residue”, *Chemical Engineering Research and Design*, 85 (2007), 4 p. 81–91

SIEDER, E N, y G E Tate, “Heat Transfer and Pressure Drop of Liquids in Tubes”, *Industrial and Engineering Chemistry*, 28 (1936), 14 p. 29–35

SINGH, Probjot, Ramachandran Venkatesan, H. Scott Fogler, y Nagi Nagarajan, “Formation and aging of incipient thin film wax-oil gels”, *AIChE Journal*, 46 (2000), 10 p. 59–74

SINGH, Probjot, Ramachandran Venkatesan, H. Scott Fogler, y N. R. Nagarajan, “Morphological evolution of thick wax deposits during aging”, *AIChE Journal*, 47

(2001), p. 6–18

TU, Jiyuan, Guan-Heng Yeoh, y Chaoqun Liu, “Chapter 2 - CFD Solution Procedure - A Beginning”, en *Computational Fluid Dynamics (Second Edition)*, Second Edition (Butterworth-Heinemann, 2013), p. 31–60

URUSHIHARA, T., C. D. Meinhart, y R. J. Adrain, “Investigation of the logarithmic layer in pipe flow using Particle Image Velocimetry”, en *Near Wall Turbulent Flows* (Amsterdam, Netherlands., 1993), 4 p. 33–46

V., Daniel R Molina, Emiliano Ariza Leon, y Arlex Chaves-Guerrero, “Understanding the effect of chemical structure of asphaltenes on wax crystallization of crude oils from colorado oil field”, *Energy & Fuels*, 31 (2017), 8997–9005

VENKATESAN, R, N R Nagarajan, K Paso, Y.-B. Yi, A M Sastry, y H S Fogler, “The strength of paraffin gels formed under static and flow conditions”, *Chemical Engineering Science*, 60 (2005), 35 p. 87–98

VENKATESAN, Ramachandran, y H. Scott Fogler, “Comments on analogies for correlated heat and mass transfer in turbulent flow”, *AIChE Journal*, 50 (2004), 16 p. 23–26

VERSTEEG, H K, y W Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, 2007)

WANG, Wenda, y Qiyu Huang, “Prediction for Wax Deposition in Oil Pipelines Validated by Field Pigging”, *Journal- Energy Institute*, 87 (2014), 196–207

XIE, Ying, y Yu Xing, “A prediction method for the wax deposition rate based on a radial basis function neural network”, *Petroleum*, 3 (2017), 2 p. 37–41

ANEXOS

ANEXO A. MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS

Para el desarrollo del método de volúmenes finitos (FVM, por sus siglas en inglés, «*Finite Volume Method*») se utilizó el fenómeno de transporte más simple: difusión pura. En esta sección se explicarán las bases del método en una dimensión y su extensión a dos dimensiones utilizando el libro de Malalasekera y Versteeg²²⁴. Si consideramos un dominio en el cual se analiza una cantidad ϕ por unidad de masa, se puede obtener una forma genérica para las ecuaciones de flujo dentro de este dominio. Utilizando una notación vectorial tenemos que la ecuación de conservación de ϕ tiene la forma:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi u) = \text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) + S_\phi \quad (98)$$

Donde Γ es el coeficiente de difusión, u es el vector de velocidad y S_ϕ las fuentes (o sumideros) de ϕ en el dominio. Esta ecuación se puede describir en el mismo orden como:

$$\begin{aligned} & \text{Tasa de incremento de } \phi \text{ en el dominio} \\ & + \text{flujo neto de } \phi \text{ saliendo del dominio por convección} \\ & = \text{tasa de incremento de } \phi \text{ por difusión} \\ & + \text{tasa de incremento de } \phi \text{ por fuentes externas} \end{aligned}$$

Eliminando los términos transitorio y convectivo, obtenemos la ecuación que gobierna el transporte estacionario de ϕ por difusión pura:

$$\text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) + S_\phi = 0 \quad (99)$$

El paso clave del método es la integración de la ecuación gobernante sobre el volumen de control (CV, por sus siglas en inglés, «*Control Volume*»)

$$\int_{CV} \text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) dV + \int_{CV} S_\phi = 0 \quad (100)$$

²²⁴ H K Versteeg y W Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, 2007).

Las integrales de volumen se pueden expresar como integrales sobre toda la superficie del volumen de control utilizando el teorema de la divergencia de Gauss, obteniendo así la siguiente ecuación:

$$\int_{CV} \text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) dV + \int_{CV} S_\phi = \int_A \mathbf{n} \cdot \Gamma \text{grad}(\phi) dA + \int_{CV} S_\phi \quad (101)$$

En donde $\mathbf{n}$ es el vector unitario perpendicular al área de cada una de las caras del CV.

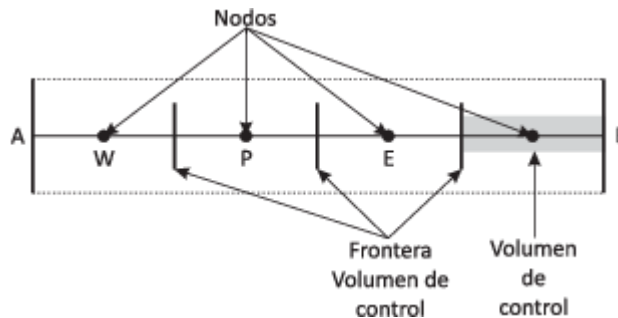
FVM PARA DIFUSIÓN EN ESTADO ESTABLE EN 1D

A continuación, se ilustra el proceso de discretización de la ecuación de balance para un problema de difusión pura en tres pasos. El proceso de difusión de la propiedad ϕ en un dominio unidimensional está gobernado por la Ec. (102) y se estudia en un dominio como el presentado en la Figura 93.

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + S = 0 \quad (102)$$

Los valores de ϕ en los puntos A y B están definidos como constantes (condiciones de frontera). A continuación se explicarán los 3 pasos del método de volúmenes finitos.

Figura 92 Dominio discretizado unidimensionalmente

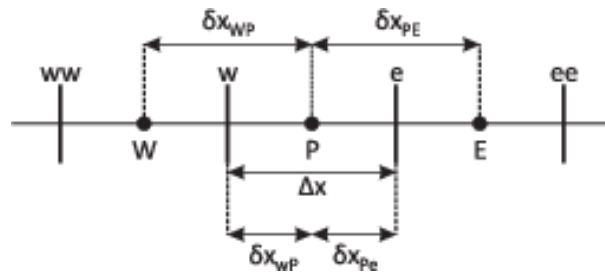


Paso 1. Generación del mallado

Este paso consiste en la división del dominio en un número finito de volúmenes de control, para esto, se ubican nodos en el espacio entre los puntos A y B, y se ubican las caras entre dichos nodos, por lo tanto, cada nodo está delimitado por un número

de caras o fronteras, componiendo así el volumen de control. La distancia entre los nodos y la ubicación de las caras puede variar dependiendo de la geometría del dominio y el tipo de malla que se desee implementar. Para realizar la discretización de la ecuación sobre el volumen de control, es necesario establecer un sistema de referencia. En la Figura 94 se muestra la convención más usada en desarrollos de CFD²²⁵.

Figura 93 Sistema de notación general para un nodo general P y sus vecinos



Un nodo general es identificado con la letra P, y sus vecinos unidimensionales, nodo este con la letra E y oeste con W. Por otro lado, la nomenclatura utilizada para las caras se refiere a la frontera del volumen de control, este con la letra e y oeste con w. La distancia entre los nodos W y P, y entre P y E se identifica con δx_{WP} y δx_{PE} respectivamente. De la misma manera, la distancia entre la cara w y el nodo P y la distancia entre el nodo P y la cara e, se denotan como δx_{wP} y δx_{Pe} .

Paso 2. Discretización

Este procedimiento inicia con la integración de la ecuación gobernante sobre el volumen de control, utilizando el teorema de la divergencia de Gauss como en la Ec. (101) para posteriormente obtener una ecuación discretizada sobre los nodos y caras del volumen de control.

$$\int_{CV} \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) dV + \int_{CV} S dV = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w + \bar{S} \Delta V = 0 \quad (103)$$

Donde A es el área transversal de la cara perteneciente al volumen de control, ΔV es

²²⁵ H K Versteeg y W Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, 2007).

el volumen del elemento, y $\bar{S}$ es el valor de las fuentes S promediado en el volumen de control. Malalasekera y Versteeg²²⁶ resaltan la importancia de este método, ya que la ecuación discretizada obtenida posee un sentido físico explicable. La Ec. (103) indica que el flujo difusivo de ϕ que está saliendo por la cara este, menos el flujo difusivo de ϕ que está entrando por la cara oeste, es igual a la generación de ϕ , por lo tanto, representa un balance de la cantidad ϕ en el volumen de control. Sin embargo, la ecuación expresada de esta manera no es útil para la resolución del problema, por lo que se deben realizar modificaciones adicionales. En el método de volúmenes finitos se tiene como práctica común definir y evaluar los valores de las propiedades, sus coeficientes difusivos y gradientes en los nodos, sin embargo la Ec. (103) requiere los valores de las propiedades evaluados en las caras. Por esta razón, se debe encontrar la manera de calcular las propiedades y variables en las caras del volumen de control. Esto se hace suponiendo las posibles distribuciones de la propiedad a lo largo del dominio (o una sección de este) y finalmente realizar una interpolación según la distribución asumida. En el caso de asumir distribuciones lineales, este tipo de interpolación se conoce como diferenciación centrada. En una malla con nodos equidistantes, los valores interpolados linealmente para Γ_e y Γ_w están dados por:

$$\Gamma_e = \frac{\Gamma_P + \Gamma_E}{2} \quad (104)$$

$$\Gamma_w = \frac{\Gamma_W + \Gamma_P}{2} \quad (105)$$

Y los flujos difusivos se evalúan de la siguiente manera:

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) \quad (106)$$

$$\left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) \quad (107)$$

En la resolución de ciertos problemas se pueden presentar términos fuente que

²²⁶ H K Versteeg y W Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, 2007).

sean función de la variable dependiente ϕ que se está calculando, en este caso el método de volúmenes finitos aproxima el término fuente de manera lineal como:

$$\bar{S}\Delta V = S_u + S_p\phi_P \quad (108)$$

Remplazando las Ecs (104) a (108) en la Ec. (103) se obtiene:

$$\Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_{PE}} \right) - \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_{WP}} \right) + S_u + S_p \phi_P = 0 \quad (109)$$

Reorganizando los términos para crear los coeficientes de los valores nodales de la variable ϕ tenemos que:

$$\left(\frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} + \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} - S_p \right) \phi_P = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \phi_W + \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \phi_E + S_u \quad (110)$$

Nombrando los coeficientes que acompañan a ϕ_P , ϕ_W y ϕ_E como a_P , a_W y a_E , podemos reescribir la Ec. (110) como:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u \quad (111)$$

Donde:

$$\begin{aligned} a_P &= a_W + a_E - S_p \\ a_W &= \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w \\ a_E &= \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \end{aligned} \quad (112)$$

Las Ecs. (108) y (111) representan la forma discreta de la Ec. (99) y son fundamentales para el desarrollo del método en problemas más complejos.

Paso 3. Solución de las ecuaciones

Una vez obtenida la forma discretizada de las ecuaciones de transporte, estas deben ser evaluadas en cada uno de los nodos del dominio con el fin de construir un sistema de ecuaciones lineales. En algunos casos los nodos cercanos a las fronteras del dominio requieren modificaciones simples para integrar la condición de frontera dentro de la ecuación, y finalmente, se debe solucionar el sistema de ecuaciones por algún método de resolución de matrices.

FVM EN 2D PARA DIFUSIÓN PURA

Para la aplicación del método de volúmenes finitos en dos dimensiones, se presenta la ecuación de difusión de una propiedad para un sistema de coordenadas cartesianas.

$$\frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) + \frac{d}{dy} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dy} \right) + S_\phi = 0 \quad (113)$$

Los puntos elegidos para la discretización de la ecuación en un elemento de la malla bidimensional se pueden observar en la Figura 95.

Repitiendo el procedimiento empleado para la discretización en una dimensión, se obtiene la ecuación discretizada:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + S_u \quad (114)$$

En donde los coeficientes están dados por:

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N - S_P \quad (115)$$

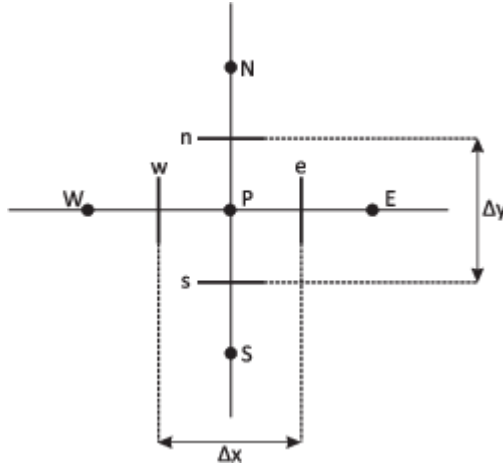
$$a_W = \frac{\Gamma_w}{\delta_{x_{WP}}} A_w \quad (116)$$

$$a_E = \frac{\Gamma_e}{\delta_{x_{PE}}} A_e \quad (117)$$

$$a_S = \frac{\Gamma_s}{\delta_{y_{SP}}} A_s \quad (118)$$

$$a_N = \frac{\Gamma_n}{\delta_{y_{PN}}} A_n \quad (119)$$

Figura 94 Nodo general P y sus vecinos en una sección de malla bidimensional.



FVM EN 1D PARA PROBLEMAS DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN

Es común encontrar problemas de difusión y convección que requieran de solución por FVM en una o dos dimensiones, por esta razón se extiende la técnica a solución de problemas donde el flujo juega un papel importante en los fenómenos de transporte.

La ecuación en estado estacionario para el transporte por convección-difusión de una cantidad se puede derivar de la Ec. (98).

$$\text{div}(\rho\phi u) = \text{div}(\Gamma \text{grad}(\phi)) + S_\phi \quad (120)$$

Al integrarla sobre el volumen de control tenemos:

$$\int_A \mathbf{n} \cdot (\rho\phi u) dA = \int_A \mathbf{n} \cdot \Gamma \text{grad}(\phi) dA + \int_{CV} S_\phi \quad (121)$$

Considerando el esquema de discretización presentado en la Figura 95 y la notación empleada anteriormente, la integración de la ecuación de transporte sobre un volumen de control da:

$$(\rho\phi u)_e - (\rho\phi u)_w = \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma A \frac{d\phi}{dx} \right)_w \quad (122)$$

Para obtener la ecuación final es común introducir dos nuevas cantidades, F y D, que representan el flux másico y la conductancia difusiva en las caras de la celda

respectivamente²²⁷.

$$F = \rho u; D = \frac{\Gamma}{\delta x} \quad (123)$$

Esto, junto con la suposición de una malla homogénea, que implica que:

$$A_e = A_w = A \quad (124)$$

Esto nos permite dividir ambos lados de la ecuación por A . Considerando que no existen términos fuente, y usando el esquema de diferencias centradas para la interpolación de los términos convectivos, obtenemos:

$$F_w \phi_w + F_e \phi_e = D_e(\phi_E - \phi_P) + D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (125)$$

Integrando de la misma manera la ecuación de continuidad sobre el volumen de control obtenemos que:

$$(\rho u)_e - (\rho u)_w = 0 \quad (126)$$

Por lo que podemos concluir que sobre cada CV se debe cumplir que:

$$F_e - F_w = 0 \quad (127)$$

Resultado que es útil en la deducción de los coeficientes nodales de la ecuación de convección-difusión discretizada. Haciendo una pausa en esta sección, se debe hacer énfasis en un aspecto importante.

Uno de los retos en el análisis del FVM para problemas de convección-difusión es el esquema de interpolación para el cálculo de la velocidad en las caras, ya que dependiendo del transporte predominante (convectivo o difusivo) se deben utilizar esquemas capaces de captar los cambios de ϕ en el dominio. En el problema de difusión se utilizó el esquema de diferencias centradas, el primer razonamiento lógico sería emplear el mismo esquema para el manejo de la velocidad, y aunque posiblemente se pueda solucionar el problema, esta solución estará limitada por parámetros de la discretización, como el tamaño de la celda en cada dimensión²²⁸.

²²⁷ H K Versteeg y W Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, 2007).

²²⁸ H K Versteeg y W Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite*

Por esta razón se deben plantear distintos esquemas de discretización que disminuyan las limitaciones de la solución a parámetros temporales o espaciales. Estos parámetros se presentarán en la siguiente sección, por lo que la ecuación discretizada final dependerá del esquema escogido.

Esquemas de discretización espacial Existe una gran cantidad de esquemas de discretización por lo que no es conveniente entrar en detalle en todos. Sin embargo, se desea presentar tres esquemas que debido a su simpleza y eficiencia son utilizados como primera medida en el FVM.

Esquema de diferencias centradas

Para una malla uniforme, empleando este esquema, tenemos que la ecuación de interpolación para ϕ es:

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (128)$$

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad (129)$$

Haciendo el remplazo en la Ec. (125) tenemos que el transporte por convección-difusión está representado por:

$$\frac{F_e}{2}(\phi_P + \phi_E) + \frac{F_w}{2}(\phi_W + \phi_P) = D_e(\phi_E - \phi_P) + D_w(\phi_P - \phi_W) \quad (130)$$

Reorganizando la ecuación, agrupando términos e identificando los coeficientes de ϕ_P , ϕ_W y ϕ_E como a_P , a_W y a_E , se puede reescribir la Ec. (130) como:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + S_u \quad (131)$$

$$a_P = a_W + a_E - S_P \quad (132)$$

$$a_W = D_w + \frac{F_w}{2} \quad (133)$$

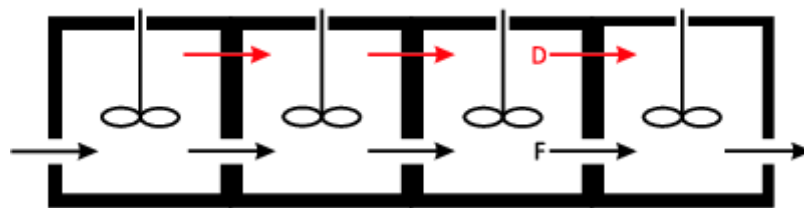
$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} \quad (134)$$

Finalmente se puede observar que la ecuación para convección-difusión tiene la misma forma general de la ecuación de difusión, con la única diferencia de la inclusión del flux másico dentro de los coeficientes nodales.

Esquema Upwind

Una de los mayores inconvenientes con el esquema de diferencias centradas es su inhabilidad para reconocer la dirección de flujo, por esta razón se introduce el esquema Upwind. La diferenciación aplicada en este esquema toma en cuenta la dirección del flujo cuando determina el valor de la cantidad ϕ en una cara. El valor extrapolado en una cara será tomado igual al del nodo próximo en la dirección “corriente arriba”. La explicación a esta estrategia es tratada por Patankar²²⁹, quien interpreta los volúmenes de control como tanques agitados separados por paredes como se ilustra en la Figura 96; la comunicación por los tubos es la parte convectiva, mientras la difusiva se da por las paredes de los tanques. En los tanques agitados se asume que la temperatura es uniforme en todo el espacio, y el valor de dicha temperatura es transportado por el fluido dentro de la tubería, por esto se asume que el fluido no posee información alguna del tanque al cual se dirige, sin embargo, lleva toda la información del tanque del cual proviene, este es el fundamento en el esquema Upwind.

Figura 95 Modelo de tanques y tubos.



Adaptada de Gosman, Pun, Runchal, Spalding, and Wolfstein, 1969.

Sin entrar en mayor detalle en la deducción de los coeficientes nodales, la ecuación discretizada para convección-difusión utilizando el esquema Upwind obtiene la

²²⁹ Suhas Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980.

forma general:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (135)$$

En donde el coeficiente del nodo central tiene la misma forma:

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (136)$$

Con la diferencia de que los coeficientes de los nodos vecinos están dados según se indica en la Tabla 9.

Tabla 9 Coeficientes esquema Upwind.

	a_w	a_e
$F_w > 0, F_e > 0$	$D_w + F_w$	D_e
$F_w < 0, F_e < 0$	D_w	$D_e - F_e$

O de otra manera:

$$a_w = D_w + \max(0, F_w) \quad (137)$$

$$a_e = D_e + \max(0, -F_e) \quad (138)$$

Esquema Híbrido

El esquema de diferenciación híbrido se basa en los esquemas de diferencias centradas y Upwind. Antes de explicar el razonamiento detrás de este esquema, se debe introducir un número adimensional importante, el número de Péclet.

El número de Péclet expresa la relación entre el transporte convectivo a difusivo de la cantidad ϕ dentro del volumen de control, es decir, indica cual es el fenómeno que predomina en ese punto en el espacio. El número de Péclet se define como:

$$Pe = \frac{\rho u L}{\Gamma} \quad (139)$$

Si se evalúa al nivel del volumen de control sobre una de sus caras, se puede expresar como:

$$Pe_e = \frac{F_e}{D_e} \quad (140)$$

El esquema de diferencias centradas funciona bien para problemas con un número

de Péclet pequeño ($Pe < 2$, problemas de difusión predominante²³⁰), mientras que el esquema Upwind es empleado para problemas donde el transporte de ϕ se da principalmente por el mecanismo convectivo ($Pe \geq 2$). El esquema híbrido emplea un modelo de interpolación basado en el número de Peclet en la celda o volumen de control, sin entrar en detalles en la deducción de los coeficientes nodales, la ecuación para convección-difusión utilizando el esquema híbrido es:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E \quad (141)$$

El coeficiente del nodo central se define de la siguiente manera

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) \quad (142)$$

Con la diferencia de que los coeficientes de los nodos vecinos están dados por:

$$a_W = D_w + \max\left(F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2}\right), 0\right) \quad (143)$$

$$a_E = D_e + \max\left(-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2}\right), 0\right) \quad (144)$$

Por esto, el valor de los coeficientes tomará el valor del coeficiente calculado por diferencias centradas o por el esquema Upwind, dependiendo del número de Péclet. Para obtener la ecuación de transporte discretizada en dos dimensiones, se reescriben los coeficientes de nodos vecinos en cada una de las cuatro direcciones de la misma manera que se hizo en el caso de difusión pura.

A.3.2 Esquemas de discretización temporal Para encontrar la solución de problemas en estado transitorio, se debe repetir el proceso de discretización incluyendo el término temporal, la ecuación para el transporte difusivo unidimensional para una cantidad ϕ se describe a continuación:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Gamma \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \quad (145)$$

Γ es la agrupación de términos respectivos al coeficiente difusivo de transporte. La idea general del procedimiento es obtener una solución avanzando en el tiempo, a

²³⁰ Suhas Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980.

partir de una distribución inicial de ϕ dada. En un caso general la tarea es encontrar los valores de ϕ en un tiempo $t + \Delta t$ a partir de los valores ya obtenidos para un tiempo t ²³¹. Las variables en el tiempo t serán denotadas con un superíndice 0 y las variables para un tiempo $t + \Delta t$ no tendrán superíndice. De esta manera, al integrar la Ec. (145) en el intervalo de tiempo entre t y $t + \Delta t$, obtenemos:

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \Gamma \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dt \quad (146)$$

Asumiendo que el valor de la propiedad en el nodo prevalece a lo largo del volumen de control, el término temporal de la Ec. (146) puede ser representado por medio de la siguiente expresión:

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial \phi}{\partial t} dt dx = \Delta x (\phi_P - \phi_P^0) \quad (147)$$

Suponiendo además que la variación de ϕ en cada uno de los nodos se puede representar por medio de un factor f que varía entre 0 y 1, nos permite expresar la Ec. (146) en forma discreta de la siguiente forma:

$$a_P \phi_P = a_E [f \phi_E + (1 - f) \phi_E^0] + a_W [f \phi_W + (1 - f) \phi_W^0] + [a_P^0 - (1 - f) a_E - (1 - f) a_W] \phi_P^0 \quad (148)$$

En donde los coeficientes a_E y a_W dependen del esquema de discretización espacial escogido (haciendo $\Gamma = k$). Los coeficientes a_P y a_P^0 se definen como:

$$a_P^0 = \frac{\rho c \Delta x}{\Delta t} \quad (149)$$

$$a_P = f a_E + f a_W + a_P^0 \quad (150)$$

Dependiendo del valor escogido para el factor de ponderación f , la Ec. (148) puede obtener formas predeterminadas y conocidas de esquemas utilizados para la resolución de ecuaciones parabólicas. Los tres casos más conocidos son $f = 0$, $f = 0.5$, $f = 1$, que se tratarán de manera breve a continuación.

²³¹ Suhas Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980.

Cuando $f = 0$, el esquema obtiene el nombre de explícito, en este caso la Ec. (148) se reduce a:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E^0 + a_W \phi_W^0 + [a_P^0 - a_E - a_W] \phi_P^0 \quad (151)$$

Lo que se puede interpretar como que la ϕ_P a calcularse en un tiempo $t + \Delta t$ solo depende de valores conocidos en el tiempo t , y su valor puede ser obtenido de manera explícita. Cualquier valor de f diferente a 0 convierte la Ec. (148) en implícita.

Un valor de $f = 1$ se conoce como esquema completamente implícito, en este caso la cantidad ϕ_P es función de los valores desconocidos de ϕ_W y ϕ_E en el tiempo $t + \Delta t$, por esto se debe resolver de manera simultánea un sistema de ecuaciones. Aunque el sistema explícito parezca una mejor opción por su simplicidad tienen una restricción importante, el orden de magnitud del parámetro Δt está limitado por la expresión:

$$\Delta t < \frac{\rho c (\Delta x)^2}{2k} \quad (152)$$

Finalmente, para el caso en que $f = 0.5$, la Ec. (148) obtiene el nombre de esquema de Crank - Nicholson, que supone una variación lineal entre el valor ϕ_P^0 en el tiempo t y el valor ϕ_P en $t + \Delta t$. Este esquema se conoce como incondicionalmente estable, sin embargo, usuarios con poca experiencia en su manejo pueden realizar una mala selección de los parámetros temporales y esto puede llevar a resultados oscilatorios en el proceso de solución; eventualmente la estabilidad del esquema hará desaparecer la oscilación, sin que esto signifique que la solución obtenida sea la correcta, o incluso en algunas situaciones, físicamente posible. Sin embargo, con el parámetro de tiempo adecuado, los resultados llegan a ser más precisos que los del sistema completamente implícito²³². Por estas razones no hay un esquema particular de interés, solo la física del problema modelado y la pericia del usuario

²³² H K Versteeg y W Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, 2007); Suhas Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1980.

determinan la posible elección del esquema de discretización temporal.

CÁLCULO DEL CAMPO DE FLUJO

La consecución del campo de flujo puede llegar a ser uno de los procesos más delicados en la solución de un problema por medio de la dinámica de fluidos computacional. Aunque las ecuaciones de momento que describen el flujo en el sistema sean solo un caso particular de la ecuación general discretizada ($\phi = u, \Gamma = \mu$), el reto consiste en la obtención del campo de presión correcto, esto debido al acoplamiento que existe entre velocidad-presión. Para sobrepasar este obstáculo se debe plantear un procedimiento iterativo para su solución.

Si se considera la componente x de la ecuación de momento lineal, esta se dará como resuelta cuando el campo de presión empleado se conozca de antemano o se suponga de manera correcta, en el caso contrario, la velocidad obtenida u_e^* no satisfará la ecuación de continuidad y deberá ser corregida.

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b + (P_P^* - P_E^*) A_e \quad (153)$$

Todos los valores de las variables que tengan el superíndice «*» se consideran como valores temporales que deben ser corregidos. La idea principal del método de solución se basa en que si se corrige de manera apropiada las presiones supuestas, estas deben llegar al valor de la presión correcta.

$$p = p^* + p' \quad (154)$$

El superíndice «'» indica que el valor es una corrección de una variable. Siguiendo esta idea, la velocidad también se puede expresar como una suma de la velocidad supuesta y su corrección.

$$u = u^* + u' \quad (155)$$

La tarea en este punto es encontrar las expresiones adecuadas para calcular las correcciones de la velocidad y la presión. La ecuación para la velocidad como una función de la corrección de la presión se presenta a continuación:

$$u_e = u_e^* + d_e(P'_p - P'_E) \quad (156)$$

De esta manera, el trabajo restante es encontrar una ecuación para obtener la corrección de la presión. Para el caso de fluidos incompresibles esta corrección se obtiene a partir de la ecuación de continuidad, en el caso de fluidos compresibles se debe obtener por otros métodos (ecuaciones de estado entre los más comunes) que no se tratarán en este escrito.

Al discretizar la ecuación de continuidad tenemos:

$$\frac{(\rho_P - \rho_P^0)\Delta y}{\Delta t} + [(\rho u)_e - (\rho u)_w]\Delta y = 0 \quad (157)$$

Si remplazamos la expresión para la velocidad obtenida en la Ec. (156) en la Ec. (157), y reordenamos, obtenemos la ecuación para la corrección de la presión:

$$a_P P'_p = a_E P'_E + a_W P'_W + b \quad (158)$$

En donde los coeficientes están definidos de la siguiente manera:

$$a_E = \rho_E d_E \Delta y \quad (159)$$

$$a_W = \rho_W d_W \Delta y \quad (160)$$

$$b = \frac{(\rho_P - \rho_P^0)\Delta y}{\Delta t} + [(\rho u)_w - (\rho u)_e]\Delta y \quad (161)$$

El segundo término del lado derecho de la Ec. (161) se conoce como desbalance de masa y es el negativo del segundo término en la Ec. (157), esto se puede interpretar como que en el momento en el que el desbalance de masa sea igual a cero, las velocidades supuestas en conjunto con los valores de la densidad satisfacen la ecuación de continuidad y no se requiere una corrección de presión posterior. En este caso se presentaron las ecuaciones correspondientes a la ecuación de momento en la dirección x, de la misma manera se pueden obtener para cada una de las dimensiones consideradas en el problema a resolver.

La ecuación para la corrección de la presión es susceptible a divergencia, a menos de que se aplique un parámetro de relajación²³³ como se indica en la Ec. (162).

$$p^{new} = p^* + \alpha_p p' \quad (162)$$

Las velocidades también se deben relajar de la siguiente manera:

$$u^{new} = \alpha_u u + (1 - \alpha_u) u^{n-1} \quad (163)$$

En donde el término u^{n-1} es la velocidad calculada en la iteración anterior.

Para la solución del campo de flujo no es necesario conocer los valores exactos del campo de presión ya que para flujos incompresibles es el gradiente de presión lo que determina el flujo, no el valor absoluto de la presión, lo que permite iniciar el método iterativo desde un campo de presión aleatorio que favorezca la velocidad de convergencia del problema.

²³³ H K Versteeg y W Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, 2007).