



Soledad de Graciano Sánchez, S.L.P. **23/febrero/2026**
Oficio No. 124/2026

EDUARDO TORO GARCÍA
ALUMNO DEL PROGRAMA DE
MAESTRÍA EN INGENIERIA ELECTRÓNICA
PRESENTE

El que suscribe, jefe de la División de Estudios de Posgrado e Investigación, por este medio me permito comunicar a Usted que se autoriza la impresión de su trabajo de tesis titulado: **"Estudio de la simulación numérica de fluidización de partículas en aplicaciones para micro y nano electrónica"**, para que con ello pueda usted continuar con los trámites para la obtención de grado como Maestro en Ingeniería Electrónica.

Lo anterior de conformidad con el dictamen emitido favorablemente por los integrantes del H. Comité Tutorial, integrado por:

DR. RAMÓN DÍAZ DE LEÓN ZAPATA
Presidente

DR. HUGO ROJAS CHÁVEZ (IT TLÁHUAC II)
Secretario

DR. JUAN FRANCISCO CASTILLO LEÓN
Vocal Propietario

ATENTAMENTE
Excelencia en Educación Tecnológica
Con Tecnología y Espíritu una Patria forjaré



EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO

INSTITUTO TECNOLÓGICO
DE SAN LUIS POTOSÍ

JOSE ISAIAS MARTINEZ CORONA
JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE
POSGRADO E INVESTIGACIÓN.

Copia. - Expediente

JIMC/acb



2026
año de
Margarita
Maza



INSTITUTO TECNOLÓGICO DE SAN LUIS POTOSÍ



TESIS

Estudio de la simulación numérica de fluidización de partículas en aplicaciones para micro y nano electrónica.

NOMBRE DEL ALUMNO: EDUARDO TORO GARCÍA

NUMERO DE CONTROL: 2318M015

PROGRAMA: MAESTRÍA EN INGENIERÍA ELECTRÓNICA

CORREO ELECTRONICO: 12318m015@slp.tecnm.mx

ASESOR: RAMÓN DÍAZ DE LEÓN ZAPATA

CO-ASESOR: DR. HUGO ROJAS CHÁVEZ


Vo. Bo.

Capítulo 1: Introducción.

Una de las técnicas utilizadas en el sector metalúrgico para la separación del mineral de hierro (entre otros), consiste en someter la mezcla extraída (con impurezas) a un flujo de líquido (típicamente agua); durante este proceso el agua ya no puede volver a aprovecharse (reciclar) y queda contaminada, por lo que tampoco puede ser parte de algún otro uso o proceso.

La alternativa que se estudia es que la fluidización de la mezcla sólida, con fines de separación del mineral de hierro se lleve a cabo en aire, siendo posible con ello que, al final del proceso, las partículas remanentes no deseadas (típicamente compuestos de silicatos) se separen fácilmente del aire (gas), elimine la contaminación de agua y se reduzca de manera significativa la contaminación del aire.

En este trabajo se revisarán simulaciones numéricas con fines de caracterización del comportamiento de las partículas en un medio fluidizado.

La dificultad de la sustitución del agua por aire en el proceso de extracción del hierro de las mezclas pulverizadas, radica en el adecuado diseño de los recipientes contenedores de las mezclas, así como de la geometría de los infusores de aire y de comprender el comportamiento de la dinámica de las partículas en un medio gaseoso y las variables adicionales que aparezcan como consecuencia del cambio en el medio en que las partículas interactúan.

El método para la caracterización de las partículas en el medio fluido, será la simulación numérica a través de la aplicación de la técnica del elemento finito, resolviendo las ecuaciones integro diferenciales que definen la dinámica de un sistema fluidizado (partículas que presentan características peculiares cuando se encuentran en un flujo turbulento).

La presente tesis revisa, analiza y discute algunas de las técnicas de simulación numérica de lechos fluidizados que pueden ser utilizados en la separación de partículas para fines de obtención de materia prima en aplicaciones para la fabricación de baterías que alimentarán circuitos electrónicos.

Capítulo 2: Marco Teórico.

2.1.-Fluidización.

La fluidificación es un fenómeno físico que se refiere a la transición de un material de un estado sólido o semisólido a un estado que se comporta como un fluido. Este proceso es fundamental en diversas aplicaciones industriales y científicas, especialmente en el contexto de la ingeniería de materiales y la geotecnia. La fluidificación puede ser inducida por diferentes factores, incluyendo cambios en la presión, temperatura, o la introducción de un fluido que actúa como un agente de separación entre las partículas sólidas [1].

La caracterización de los materiales y la comprensión de los parámetros que afectan la fluidización, como la velocidad del fluido y las propiedades del sólido, son aspectos críticos para el diseño y operación de sistemas fluidizados. Investigaciones recientes han abordado la optimización de estos parámetros para maximizar la eficiencia de los procesos industriales [2].

La fluidización ocurre cuando pequeñas partículas sólidas son suspendidas por una corriente de un fluido que se dirige de abajo hacia arriba venciendo el peso de las mismas. Cuando la velocidad del fluido debe ser lo suficientemente alta como para suspender las partículas, pero a la vez no tan elevada como para expulsar las partículas fuera del recipiente. Las partículas sólidas rotan en el lecho rápidamente, creándose un excelente mezclado. El material que se fluidiza es casi siempre un sólido y el medio que fluidiza puede ser tanto líquido como gas. Las características y comportamiento de los lechos fluidizados dependen fuertemente de las propiedades del sólido y del fluido [2].

A continuación, se resumen las propiedades y/o sus influencias más generales en la fluidización en fase gaseosas que sirven de marco teórico:

Densidad: Una mayor densidad del gas conduce a una mayor resistencia a las partículas y, por tanto, a una fluidización más temprana y vigorosa. La densidad del gas aumenta al aumentar la presión y disminuye al aumentar la temperatura. El comportamiento ideal del gas generalmente se puede asumir como una buena aproximación al evaluar el papel de la temperatura y la presión en lechos fluidizados con gas.

La densidad de las partículas afecta directamente la velocidad mínima de fluidización, que es la velocidad del fluido necesaria para suspender las partículas en el lecho. Según Vilches, el efecto de la densidad es más pronunciado a bajas velocidades de fluidización, mientras que, a altas velocidades, los materiales del lecho tienden a comportarse de manera más similar. Esto indica que la densidad de las partículas puede influir en la estabilidad y la homogeneidad del lecho fluidizado [3].

Viscosidad: Una mayor viscosidad del gas provoca una mayor resistencia en el caso de partículas pequeñas, pero desempeña sólo un papel pequeño en el caso de partículas más grandes. La viscosidad del gas es casi independiente de la presión, pero aumenta al aumentar la temperatura.

La viscosidad de un fluido es una medida de su resistencia al flujo y a la deformación. En un lecho fluidizado, la viscosidad del fluido influye en la velocidad mínima de fluidización, que es la velocidad necesaria para que las partículas sólidas sean suspendidas en el fluido. Según Cardona la viscosidad dinámica de fluidos puede ser modelada utilizando ecuaciones que consideran la concentración y la temperatura, lo que es crucial para optimizar procesos de fluidización en aplicaciones industriales [4].

Humedad: (contenido de vapor de agua) de un gas puede afectar las cargas electrostáticas de las partículas, afectando así las propiedades y el arrastre desde los lechos fluidizados con gas. Esta propiedad se espera que juegue un papel relevante en etapas posteriores a este proyecto, cuando se pretenda llevar a cabo el proceso de separación de partículas por medios electrostáticos o magnéticos

El modelado matemático de la cinética de secado es una herramienta útil para predecir el comportamiento de la humedad en fluidos. García-Culqui menciona que se han utilizado modelos como Henderson y Pabis para describir la cinética de secado del maíz, mostrando que la velocidad de secado a mayores temperaturas favorece la transferencia de masa y energía. Este tipo de modelado es crucial para optimizar los procesos de secado en lechos fluidizados, permitiendo ajustar las condiciones operativas para lograr un contenido de humedad deseado [5].

Absorbancia: La presencia de componentes gaseosos que se adsorben en la superficie de las partículas puede afectar las fuerzas entre partículas de Van der Waals, influyendo así en las propiedades de los lechos fluidizados, especialmente si las partículas son relativamente finas.

La absorbancia también es relevante en el diseño de reactores de fluidización, donde se busca maximizar la transferencia de calor y masa. Ren y Zhang comparan los efectos de reactores de lecho fluidizado y de lecho fijo en la descomposición catalítica asistida por microondas, destacando que los catalizadores con alta capacidad de absorción de microondas son esenciales para alcanzar rápidamente la temperatura de reacción. Esto implica que la capacidad de absorción de los materiales utilizados en el lecho fluidizado puede influir en la eficiencia del proceso de reacción [6].

Diámetro de partícula: El tamaño de las partículas es muy importante en los procesos de fluidización. El tamaño se expresa como un diámetro, generalmente basado en el análisis de tamiz (cribado), como la media de los tamaños de abertura del último tamiz

a través del cual pasó la partícula y el tamiz a través del cual no pasó. Para partículas no esféricas, esto corresponde aproximadamente a la dimensión máxima (o longitud de la cuerda) en la segunda de las tres direcciones principales (ortogonales). También se utilizan ampliamente varios diámetros equivalentes a esferas, como el diámetro equivalente en volumen (diámetro de una esfera con el mismo volumen que la partícula). De estos diámetros equivalentes, el promedio más apropiado para la fluidización es la media de Sauter.

El diámetro de partícula tiene un impacto significativo en la velocidad mínima de fluidización (U_{mf}). Andrade y Tarqui realizaron un estudio sobre la velocidad de caída de sedimentos no cohesivos, encontrando que partículas con diámetros más grandes requieren velocidades de fluidización más altas para ser suspendidas en el fluido. Esto se debe a que las fuerzas de arrastre deben superar el peso de las partículas, lo que es más difícil para partículas más grandes. Por otro lado, Rojas-Reyes discuten cómo el diámetro de partícula afecta la reología de fluidos, lo que puede influir en la eficiencia de la fluidización. En su investigación sobre fluidos a base de desechos mineros, observaron que el comportamiento del fluido cambia con el tamaño de las partículas, lo que puede afectar la estabilidad del lecho fluidizado. [7, 8].

Forma de la partícula: En la práctica, relativamente pocas partículas de interés práctico son perfectamente esféricas. En ingeniería es común designar un único "factor de forma" para caracterizar el grado de desviación de lo esférico. El factor de forma más común es la "esfericidad".

La forma de las partículas puede clasificarse en esférica, no esférica y otras geometrías complejas. Según Liu, la fluidización de partículas no esféricas presenta desafíos únicos en comparación con las esféricas. Las partículas no esféricas tienden a tener una mayor resistencia al flujo, lo que puede resultar en una velocidad mínima de fluidización más alta. Esto se debe a que la forma irregular puede aumentar la fricción entre las partículas y el fluido, dificultando su suspensión [9].

$$Esfericidad = \phi = \frac{\text{área de la superficie de una esfera del mismo volumen que la partícula}}{\text{Superficie real del área exterior de la partícula}}$$

La esfericidad se puede calcular utilizando diferentes fórmulas, siendo una de las más comunes la propuesta por Mendes, que define la esfericidad como la relación entre el área superficial de la partícula y el área superficial de una esfera que tiene el mismo volumen. Esta medida numérica indica cuán cerca está la partícula de tener una forma esférica, donde valores cercanos a 1 indican

una forma más esférica, mientras que valores más bajos indican formas más irregulares [10].

$$\text{Circularidad} = \mathfrak{C} = \frac{\text{perímetro de la esfera de la misma área proyectada}}{\text{perímetro real proyectado de la partícula}}$$

La circularidad de las partículas afecta la velocidad mínima de fluidización (U_{mf}) y la estabilidad del lecho. Según Kuo, las partículas con alta circularidad tienden a fluidizarse más fácilmente debido a su menor resistencia al flujo. Esto se debe a que las partículas más circulares tienen una menor área de contacto con el fluido, lo que reduce la fricción y permite una mejor suspensión en el lecho fluidizado. Además, la circularidad puede influir en la formación de burbujas y la dinámica de flujo en un lecho fluidizado. Partículas con formas más irregulares pueden interferir con la formación y el movimiento de burbujas [10].

Coeficientes de restitución (partícula - partícula y partícula - pared): El coeficiente de restitución es la relación entre la velocidad relativa de una partícula inmediatamente después de una colisión y la anterior a la colisión. Por tanto, un coeficiente de restitución de 1 corresponde a colisiones elásticas (sin pérdida de energía), mientras que un valor de 0 correspondería a una colisión perfectamente inelástica sin “rebote”. En la práctica, ninguna colisión es perfectamente elástica, por lo que los coeficientes de restitución son siempre <1 . Los coeficientes para las colisiones entre partículas difieren, en general, de los de las colisiones entre partículas y paredes; ambos coeficientes afectan el movimiento de las partículas fluidizadas al afectar la energía perdida cuando las partículas chocan entre sí y con las paredes del recipiente que las contiene.

El coeficiente de restitución partícula-partícula [11] se define como la relación entre la velocidad relativa de separación y la velocidad relativa de acercamiento de dos partículas durante una colisión. Este coeficiente es crucial para modelar el comportamiento de las partículas en un lecho fluidizado, ya que afecta la dinámica de las colisiones y, por ende, la estabilidad del lecho. Según Bai, el coeficiente de restitución normal y tangencial [12].

Constante dieléctrica y conductividad eléctrica: La constante dieléctrica de las partículas y su conductividad eléctrica afectan la tendencia de las partículas a ganar y retener cargas electrostáticas.

La constante dieléctrica es una medida de la capacidad de un material para almacenar energía eléctrica en un campo eléctrico. Esta propiedad es crucial en el diseño de dispositivos electrónicos, capacitores y materiales aislantes. La constante dieléctrica puede variar significativamente dependiendo de la composición del material, la temperatura y la frecuencia de la señal aplicada [13].

Propiedades térmicas: El calor específico y la conductividad térmica de las partículas son propiedades importantes de las partículas que afectan la transferencia de calor.

La conductividad térmica es una medida de la capacidad de un material para conducir el calor. En el contexto de la fluidización, la conductividad térmica de las partículas y del fluido es crucial para la transferencia de calor en procesos como el secado y la combustión. Santacruz-Vázquez destacan que durante el secado por fluidización de esferas de melón, se observan cambios en las propiedades físicas, incluida la conductividad térmica, debido a la variación en la humedad y la textura de las partículas. Esto sugiere que la conductividad térmica puede influir en la eficiencia del secado y en la calidad del producto final [14].

Propiedades de bulto (bulk) de la partícula: Las partículas de interés en lechos fluidizados suelen tener un tamaño que puede analizarse convenientemente mediante análisis de tamiz (a veces llamado tamiz), aunque a menudo se utilizan otras técnicas, como los contadores Coulter y los mastersizer Malvern, para determinar las distribuciones de tamaño de partículas, particularmente cuando una fracción sustancial de partículas tienen menos de aproximadamente 40 μm de diámetro. de partícula de mayor interés suele ser la media de Sauter (superficie-volumen).

La porosidad es otra propiedad crítica que afecta la densidad de bulto y el comportamiento de las partículas en un lecho fluidizado. La porosidad se refiere al volumen de espacios vacíos en un material en relación con su volumen total. En el contexto de la fluidización, una mayor porosidad puede facilitar la circulación del fluido y mejorar la transferencia de masa y calor. Seo discuten cómo la estructura porosa de los aglomerados de proteínas lácteas mejora su capacidad de humectación y, por ende, su comportamiento en un lecho fluidizado [15].

Velocidad mínima de fluidización: La velocidad superficial del gas o líquido a la que se inicia la fluidización, denominada velocidad mínima de fluidización y denominada U_{mf} , es una propiedad importante de las partículas y del fluidizante. Es independiente de la profundidad del lecho. Esta velocidad es importante para establecer el caudal mínimo requerido para lograr la fluidización en una columna determinada y también aparece en muchas de las relaciones resumidas en este libro para predecir otras propiedades de los lechos fluidizados. Esta sección trata sobre métodos para medir y predecir la velocidad mínima de fluidización.

La velocidad mínima de fluidización se define como la velocidad del fluido necesaria para suspender completamente las partículas en un lecho. En este estado, las fuerzas de arrastre del fluido igualan el peso de las partículas, lo que permite que el lecho

se expanda y se comporte como un fluido. La U_{mf} se puede calcular utilizando diferentes modelos, siendo uno de los más comunes la ecuación de Wen & Yu, que considera el tamaño, la forma y la densidad de las partículas, así como la densidad del fluido. Factores que Afectan la Velocidad Mínima de Fluidización Varios factores influyen en la velocidad mínima de fluidización, incluyendo:

1. **Tamaño y Forma de las Partículas:** Las partículas más grandes y de forma irregular generalmente requieren velocidades más altas para fluidizarse. Según Deen et al. la forma de las partículas puede afectar la resistencia al flujo, lo que a su vez influye en la U_{mf} .

2. **Densidad de las Partículas y del Fluido:** La densidad de las partículas y del fluido también juega un papel crucial. A medida que la densidad de las partículas aumenta, la velocidad mínima de fluidización tiende a aumentar. Esto se debe a que un mayor peso de las partículas requiere una mayor fuerza de arrastre para mantenerlas en suspensión.

3. **Concentración de Sólidos:** La concentración de sólidos en el lecho influye en la U_{mf} . En mezclas de partículas, como se menciona en el estudio de Zhao observa que la velocidad mínima de fluidización disminuye con una mayor fracción de partículas más ligeras en la mezcla [15].

Todos estos parámetros habrán de ser cuidadosa y convenientemente ingresados al software de simulación que, para efectos de referencia, se considera como núcleo básico de la simulación el programa COMSOL Multiphysics, elegido por su capacidad para resolver más de una simulación física como lo es el caso del presente proyecto, donde se consideraran la mecánica de fluidos, la trayectoria de partículas y posteriormente los métodos de optimización, a la par del uso de otros programas computacionales de apoyo o soporte como Matlab o Solid Works (entre otros posibles).

Cabe mencionar que no basta el hecho de ingresar los datos de las variables asociados a la fluidización, sino que también debe realizarse un cuidadoso proceso de validación de los resultados parciales obtenidos en la simulación numérica con el fin de que se consideren confiables para continuar con las siguientes etapas.

2.2.- Dinámica de Fluidos por computadora.

La dinámica de fluidos por computadora, conocida como CFD (Computational Fluid Dynamics), es una herramienta fundamental en la ingeniería moderna que permite simular y analizar el comportamiento de fluidos en diversas aplicaciones. Esta técnica utiliza métodos numéricos para resolver las ecuaciones que describen el movimiento de los fluidos, lo que facilita la comprensión de fenómenos complejos que son difíciles de estudiar experimentalmente [16].

Capítulo 3: Antecedentes.

3.1.- Simulación de extracción de litio por fluidización.

Generación de baterías de iones de litio: los fosfatos de hierro (FePO_4) están despertando un gran interés. Estos materiales presentan una alta capacidad de intercalación de litio (Li), así como mayor estabilidad en comparación con los compuestos laminares utilizados en la actualidad. Estos fosfatos presentan propiedades electroquímicas interesantes; sus estructuras son del tipo romboédrico (tipo Nasicon) con estequiometría $\text{Li}_3\text{Fe}_2(\text{PO}_4)_3$ estequiometría LiFePO_4 .

El LiFePO_4 es un material con la capacidad de ser utilizado como un material catódico de referencia para la nueva generación de baterías de iones de litio. A pesar de tener un polianión grande, presenta una red 3D flexible y abierta, así como excelentes propiedades electroquímicas, siendo resistente a la degradación térmica y a sobrecargas debido a su excelente estabilidad química y térmica. Estas propiedades y algún inconveniente como la baja conductividad pueden ser mejorados si se distribuyen las dimensiones del LiFePO_4 . Es decir, la reducción del tamaño de las partículas soluciona estas deficiencias si el LiFePO_4 se obtiene en forma de nanopartículas.

Uno de los enfoques más efectivos para mejorar el diseño y obtención de materiales es a través de estudios teórico-experimentales. Por lo que, debido a su aplicación del LiFePO_4 , sus propiedades electroquímicas y estructurales, entre otras, también se han investigado a nivel atómico utilizando estudios de cálculos de primeros principios. Si bien los resultados experimentales han generado los métodos y las estrategias para sintetizar el LiFePO_4 , los estudios teóricos y teórico-experimentales enriquecen nuestra comprensión sobre la miniaturización y los mecanismos de crecimiento. Por lo tanto. En este proyecto se pretende contribuir a mejorar el rendimiento del cátodo LiFePO_4 para baterías de iones de Li mediante molienda mecánica de alta energía, mientras que de forma paralela se elucidará el efecto de su crecimiento en estado sólido. La originalidad de este proyecto radica en realizar una descripción computacional atómica, mientras que experimentalmente, durante la molienda, se determinará la tendencia de nitración y crecimiento del LiFePO_4 .

Metodología computacional. El método dentro de DFT que se eligió fue el aportado por el funcional de intercambio-correlación PBE. Además, se usan pseudopotenciales ultrasuaves en todos los átomos y corrección de dispersión "D2" de Grimme, según lo reportado previamente en la literatura. La zona de Brillouin se define mediante una malla centrada en el punto gamma de $4 \times 4 \times 1$ puntos k, en el caso de las

superceldas. El método completo se utiliza tal como está implementado en el paquete de cómputo.

Componente del modelo químico experimental. Con los datos de estructura y composición de todas las fases en el sistema, en función del tiempo de procesamiento, entonces se puede proponer un modelo químico para predecir la formación del LiFePO_4 . Para estudios de no equilibrio de fases, se requieren técnicas experimentales estándar en masa, por ejemplo, difracción de rayos X, espectrometría de masas de iones secundarios, microanálisis con sonda electrónica, microscopía electrónica de barrido, entre otras. Además, éstas deben complementarse con mediciones experimentales de superficie precisas, por ejemplo, microscopía electrónica de transmisión de alta resolución y espectroscopia fotoelectrónica de rayos X.

3.2.- Simulación de estructuras optoelectrónicas para la generación y almacenamiento de energía.

Las nanoestructuras capaces de recolectar y convertir el calor en energía eléctrica, así como los avances en su fabricación en sustratos flexibles, resulta técnicamente factible proponer un estudio encaminado a su aplicación para el aprovechamiento de la energía térmica emanada por los seres vivos, que en el caso de las personas, pudieran portarlo en su vestimenta, pues ese remanente térmico pudiera ser capaz de generar la suficiente corriente como para almacenar carga en alguna batería o recargar algún dispositivo electrónico.

La idea principal consiste en que, cuando la radiación electromagnética del sol induce una corriente en la antena esta calentará por efecto Joule su estructura, lo que generará un gradiente de temperatura entre el centro de la antena y sus extremos. Este gradiente de temperatura generará un voltaje en las terminales de la antena. Este voltaje se almacenará ya sea en un nanocapacitor o en una batería de película delgada.

habrán de estudiar las características eléctricas de operación. Podrá llevarse a cabo por medio de simulación numérica con el objetivo de caracterizar el sistema en su conjunto, esto con apoyo de software computacional que incluye, aunque no está limitado a Comsol Multiphysics, Matlab y Autocad.

Con los resultados obtenidos de la simulación numérica, se fabricarán los dispositivos que resulten apropiados y se caracterizarán en sus principales propiedades optoelectrónicas de interés.

Dentro de la amplia gama de algoritmos evolutivos, se elige en las primeras etapas del proyecto al algoritmo genético mono objetivo, mismo que será implementado en

matlab® y la evaluación de dicha función, así como la caracterización por simulación numérica de la nanoantena bajo estudio, serán llevadas a cabo en COMSOL Multiphysics® a través de iteraciones entre estos programas con auxilio del módulo LiveLink-for-matlab® creando un proceso completamente automatizado anulando posibles errores por intervención humana y garantizando los resultados óptimos.

Capítulo 4: Metodología.

A través de la aplicación del cálculo numérico y por el método del elemento finito [17-20] se resolverán las ecuaciones que rigen la dinámica del sistema multifásico fluido-partículas, donde el flujo toma las características de turbulencia (ecuaciones 5 a la 10).

donde las variables dependientes son la velocidad del fluido $\mathbf{u}$, presión y las llamadas variables de transporte k (energía cinética de turbulencia) y ϵ (tasa de disipación de la turbulencia).

Se simulará el proceso de fluidización de partículas en un cilindro de cuya base emanará el flujo de aire en estado gaseoso, resolviendo por medio de software especializado (COMSOL Multiphysics), las ecuaciones del modelo conocido como "Reynolds-averaged Navier-Stokes" (RANS) donde la velocidad del fluido es tratada como la suma determinística promedio del flujo y una velocidad de perturbación aleatoria puede representar las corrientes de Eddie.

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + (\mu + \mu_T)(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)] + \mathbf{F} \quad (5)$$

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (6)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{k} = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla \mathbf{k} \right] + P_k - \rho \epsilon \quad (7)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\epsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (8)$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (9)$$

$$P_k = \mu_T [\nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)] \quad (10)$$

Dada la simetría biaxial del sistema es posible, inicialmente, simplificar el cilindro tridimensional a su equivalente en un plano (rectángulo) sin afectar los resultados coadyuvando a no sobrecargar innecesariamente el proceso computacional y pudiendo posteriormente extenderse esos resultados, una vez validados, a una geometría tridimensional a efectos de obtener una visualización realista del sistema completo.

Con los resultados (datos) obtenidos, se llevará a cabo un proceso de caracterización de las principales variables que intervienen en el fenómeno físico de fluidización de partículas, con lo que se revisará el comportamiento de la mezcla y la capacidad predictiva de la separación de partículas de distintas densidades (materiales) con el fin de extraer solo aquellas de interés que, en este caso, corresponde a la separación del hierro de los silicatos.

Capítulo 5: Simulaciones, discusión y conclusiones.

Caso de estudio 1 "Flujo a través de un cilindro" [21].

El flujo de un fluido a través de un cuerpo sólido, como es el caso de las partículas de materiales de silicio, hierro o litio, es difícil de calcular debido a los flujos no estacionarios. La estela detrás de dicho cuerpo consiste en remolinos desordenados (provocados por las corrientes de Eddie) de todos los tamaños que crean un gran arrastre sobre el cuerpo.

En contraste, la turbulencia en las delgadas capas límite junto a los cuerpos no aerodinámicos pero diminutos, solo crea débiles perturbaciones del flujo. Una excepción a esto ocurre cuando se coloca un cuerpo esbelto en ángulo recto con un flujo lento porque los remolinos (las corrientes de Eddie) se sincronizan y aparecen especiales remolinos, llamados vórtices de Von Kármán con una frecuencia predecible y que implica la eyección de remolinos de lados alternos (ejemplo cotidiano de este fenómeno se observa en la antena de radio de un automóvil que vibra en una corriente de aire).

Desde un punto de vista ingenieril, es importante predecir la frecuencia de las vibraciones a diferentes velocidades de fluido y evitar así resonancias no deseadas entre las vibraciones de las estructuras sólidas y la eyección de vórtices. Para ayudar a reducir estos efectos, los ingenieros de planta colocan una espiral en la parte superior de los cilindros de fluidización; la variación resultante en la fluidización prohíbe la interferencia constructiva de los elementos de vórtice permitiendo la generación adecuada de un lecho fluidizado para fines de separación de materiales.

Para ilustrar cómo se pueden estudiar estos efectos, el siguiente modelo examina el flujo inestable e incompresible pasando por un cilindro largo colocado en un canal en ángulo recto con el fluido entrante.

Con un perfil de velocidad de entrada simétrico, el flujo necesita algún tipo de asimetría para desencadenar la producción de vórtices. Esto se puede lograr colocando el cilindro con un pequeño desplazamiento desde el centro del flujo.

En este caso, se utiliza una malla no estructurada y la pequeña asimetría en la malla resulta ser suficiente para desencadenar la producción de vórtices.

El tiempo de simulación necesario para que aparezca un patrón de flujo periódico es difícil de predecir. Un predictor clave es el número de Reynolds, que se basa en el diámetro del cilindro. Para valores bajos (por debajo de 100), el flujo es estable.

En esta simulación, el número de Reynolds es igual a 100, lo que garantiza la aparición de vórtices de Von Kármán, pero el flujo aún no es completamente turbulento.

La frecuencia y amplitud de las oscilaciones son características estables, pero los detalles del flujo son extremadamente sensibles a las perturbaciones. Para apreciar esta sensibilidad, se pueden comparar imágenes de flujo tomadas al mismo tiempo, pero con diferencias menores como las creadas por diferentes tolerancias para el paso de tiempo.

Es importante tener en cuenta que esta sensibilidad es una realidad física y no simplemente un artefacto numérico. Antes de calcular las fuerzas variables en el tiempo sobre el cilindro, se debe validar el método de cálculo en un número de Reynolds más bajo utilizando el solucionador no lineal directo. Esto ahorra tiempo porque se puede encontrar y corregir errores antes de la simulación final dependiente del tiempo, que requiere un tiempo considerable. Las fuerzas viscosas sobre el cilindro son proporcionales al gradiente del campo de velocidad en la superficie del cilindro.

Evaluar el gradiente de velocidad en el límite mediante la diferenciación directa de la solución FEM es posible pero no muy preciso. La diferenciación produce polinomios de 1er orden cuando se utilizan elementos de 2do orden para el campo de velocidad. Un enfoque más viable es utilizar un par de operadores de fuerza de reacción para calcular los integrales de las fuerzas viscosas, comparables con integrales de segundo orden de las fuerzas viscosas.

Otro enfoque alternativo sería utilizar un par de variables de restricción débil para hacer cumplir la condición de no deslizamiento.

Se prefiere utilizar el operador de fuerza de reacción en lugar de restricciones débiles al calcular integrales de fuerzas de reacción o flujos en el postprocesamiento. Las fuerzas de resistencia y sustentación en sí mismas no son tan interesantes como los coeficientes de resistencia y sustentación adimensionales. Estos dependen solo del número de Reynolds y la forma de un objeto, no de su tamaño.

Tras la ejecución de la simulación, se obtuvieron los siguientes resultados. La figura 1 muestra el patrón del flujo y la distribución de las partículas sometidas a la fluidización.

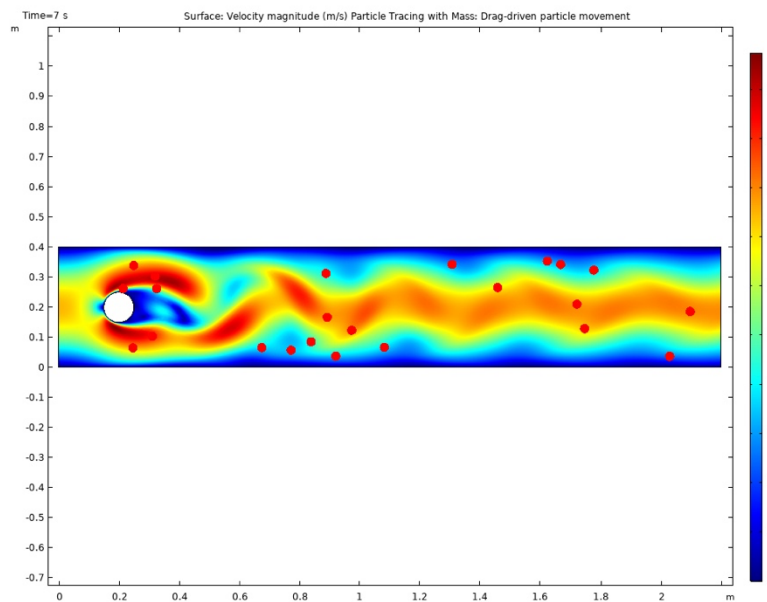


Figura 1. Gráfica del último cálculo en el tiempo que claramente muestra la turbulencia de Von Kármán.

La figura 2 muestra la distribución de la presión de las partículas fluidizadas, donde se puede apreciar que el máximo punto de presión se encuentra justo en el centro del cilindro.

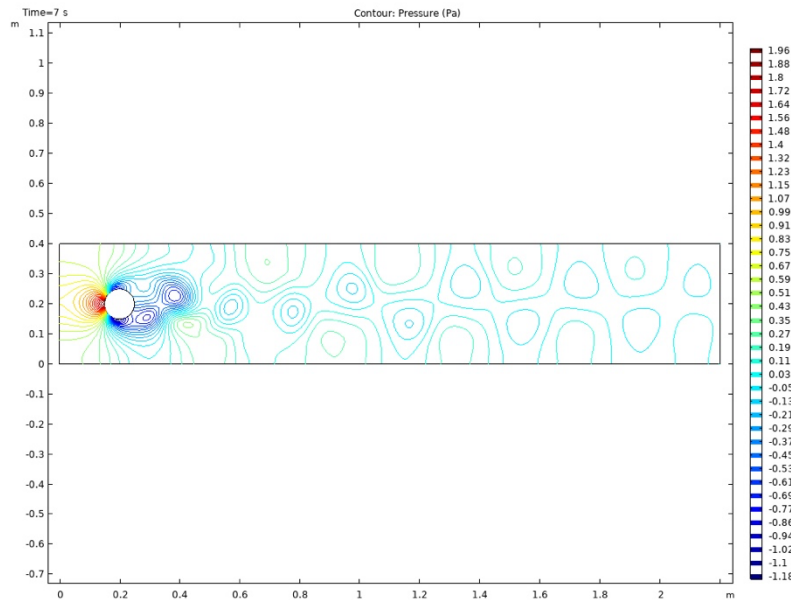


Figura 2. Gráfica que muestra, cualitativamente, la presión ejercida por el flujo sobre el cilindro y sus alrededores.

Para efectos de validación, se puede apreciar, en la figura 3, la forma en que varía el coeficiente de deslizamiento.

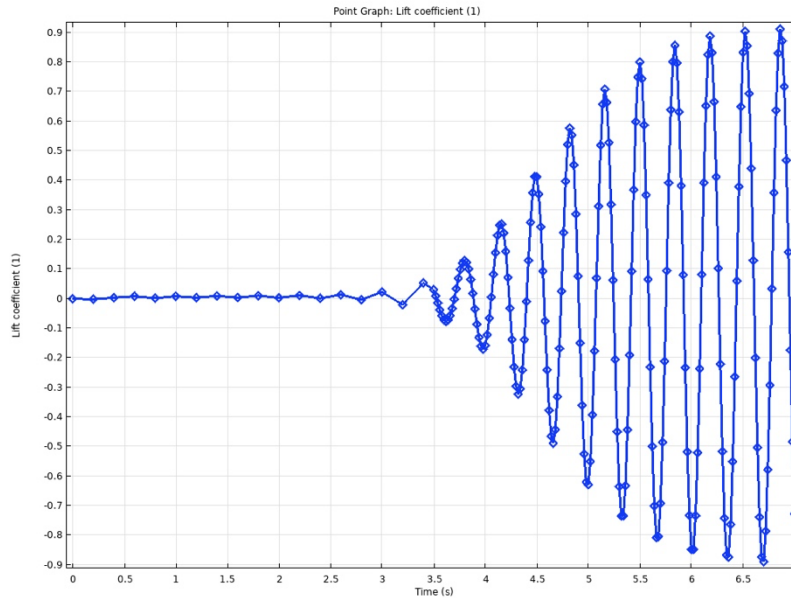


Figura 3. Comportamiento del coeficiente de deslizamiento.

De igual forma, se puede apreciar en la figura 4, el comportamiento del coeficiente de arrastre.

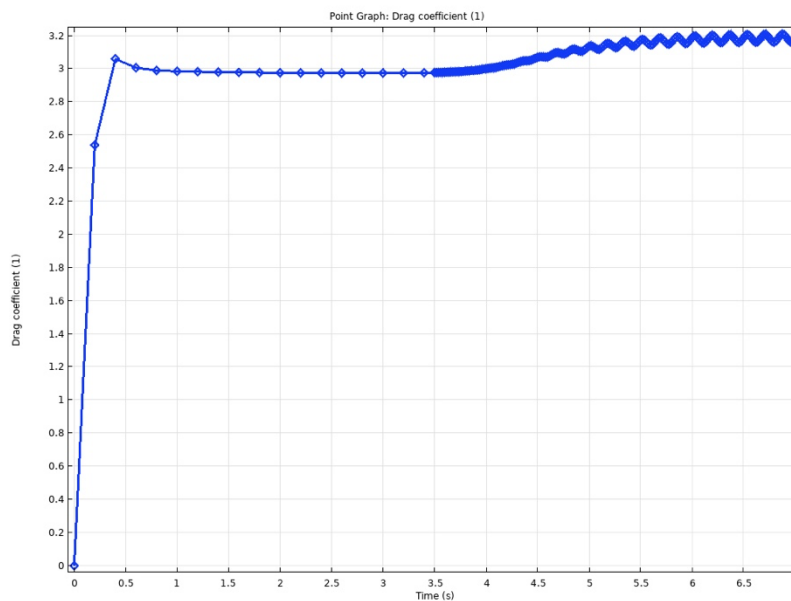


Figura 4. El coeficiente de arrastre se mantiene en un rango estable, pero oscilante, consecuencia del flujo turbulento.

Caso de estudio 2 "Dispersión de partículas pesadas en un canal de flujo turbulento" [22].

En este modelo de referencia, partículas sólidas se liberan en un flujo de canal turbulento completamente desarrollado. La fuerza total que actúa sobre las partículas en un fluido comprende un gran número de fenómenos físicos, incluyendo, pero no limitándose a la fuerza de resistencia, fuerza de gravedad, fuerza de flotabilidad, fuerza de gradiente de presión, efecto de masa añadida, fuerza de sustentación y fuerza de Brown. En este ejemplo, se supone que la fuerza de resistencia es el factor dominante en la determinación de las trayectorias de las partículas. Si el flujo en el flujo de canal turbulento se modela utilizando las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas de Reynolds (RANS), entonces la velocidad del fluido se trata como la suma de un término de flujo medio determinista y una perturbación de velocidad aleatoria que representa los remolinos. La ventaja de las ecuaciones RANS sobre la simulación numérica directa (DNS) es que las ecuaciones RANS pueden resolverse sin requerir una malla que sea lo suficientemente fina como para resolver todos los remolinos en el flujo, lo que puede ser impracticablemente costoso en términos computacionales. Además, al tratar el aspecto caótico del flujo turbulento en un sentido estadístico o promediado en el tiempo, las ecuaciones RANS permiten soluciones estacionarias a problemas de flujo turbulento, mientras que en la realidad el campo de flujo está constantemente evolucionando a medida que se crean, transportan y destruyen remolinos de todos los tamaños. Este ejemplo proporciona una visión general de las consideraciones esenciales al modelar el movimiento de partículas en un flujo de canal turbulento. Entre los factores considerados en este ejemplo se encuentran:

- El tratamiento de la fuerza de resistencia como conteniendo una parte determinista (advección) y una parte aleatoria (difusión),
- El efecto de la anisotropía de los remolinos turbulentos sobre el movimiento de partículas en flujos limitados por paredes, y
- El efecto de la inercia de las partículas sobre la duración de las interacciones partícula-remolino.

Si bien este ejemplo acopla la interfaz de seguimiento de partículas para flujo de fluido al campo de velocidad del fluido y la energía cinética turbulenta basada en un modelo RANS, las distribuciones de partículas resultantes se comparan con datos de DNS recopilados por Marchioli et al. [23], que muestran un acuerdo razonablemente bueno. Al igual que en la referencia antes citada, se observa que las partículas se agrupan cerca de la

pared del canal para un rango intermedio de números de Stokes donde tienen suficiente inercia para cruzar algunos remolinos en el flujo, pero no suficiente para ser reflejadas consistentemente en la pared del canal.

La figura 5 muestra la magnitud de la velocidad en la superficie de la geometría.

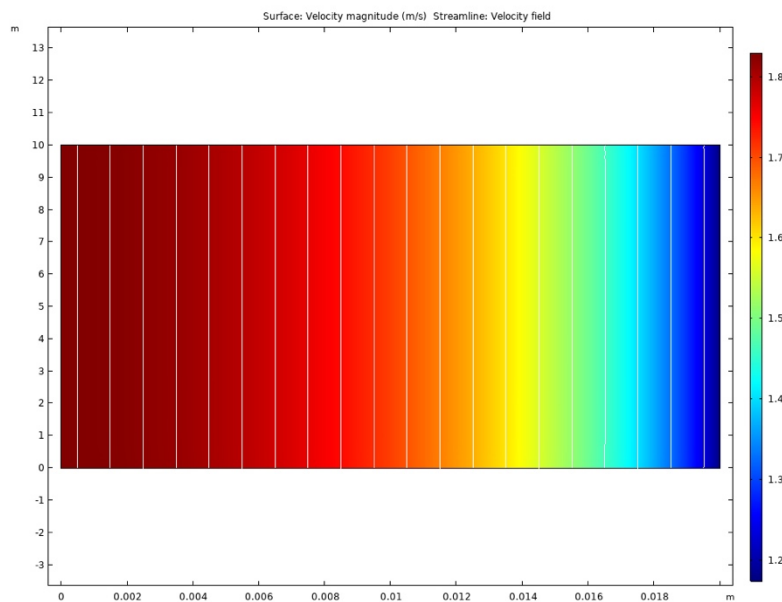


Figura 5. Líneas de corriente y la distribución de la velocidad en la superficie de la geometría. Nótese que la máxima velocidad se genera en la entrada del sistema (izquierda).

La figura 6 muestra un diagrama de contorno de la distribución de la presión del lecho fluido, donde se puede apreciar que la velocidad y la presión son ortogonales.

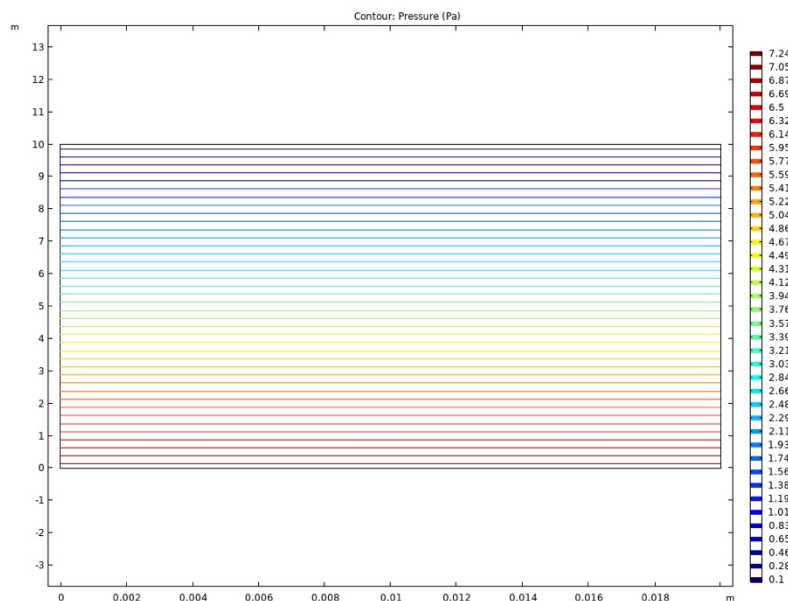


Figura 6. Distribución de la presión del lecho fluido.

La figura 7 muestra una representación cualitativa de la turbulencia generada por el lecho fluídico, donde se aprecia que a la entrada del sistema, se genera la máxima turbulencia.

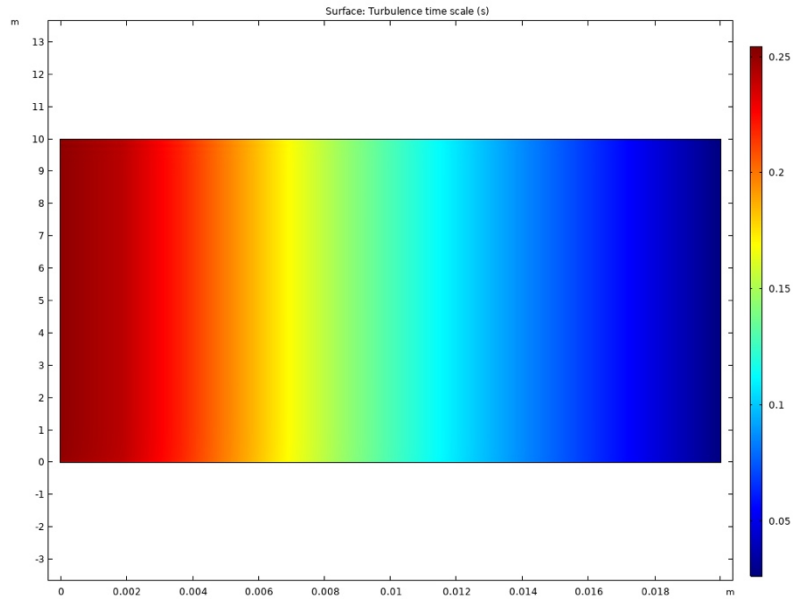


Figura 7. Distribución de la turbulencia dentro del medio fluídico.

En la figura 8 se aprecian las partículas y su distribución al tiempo final de la simulación.

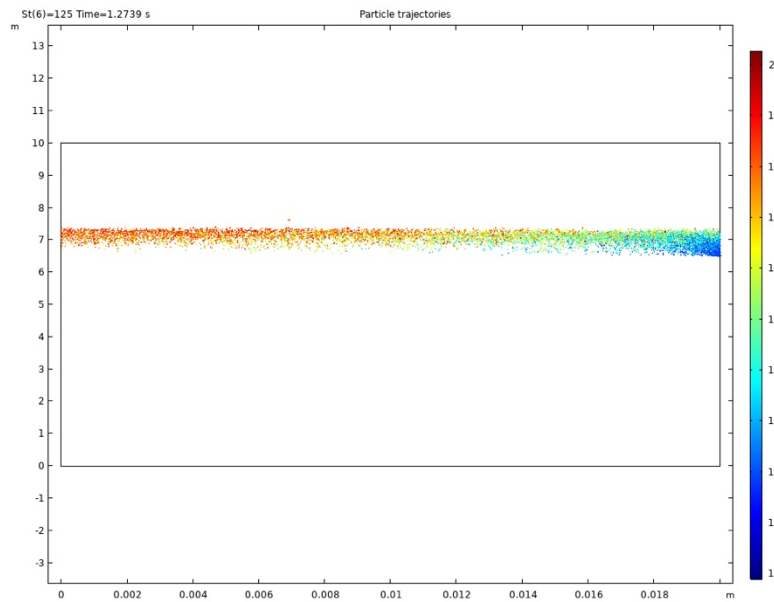


Figura 8.

En la figura 9 se puede apreciar la distribución de partículas para dos coeficientes de arrastre distintos.

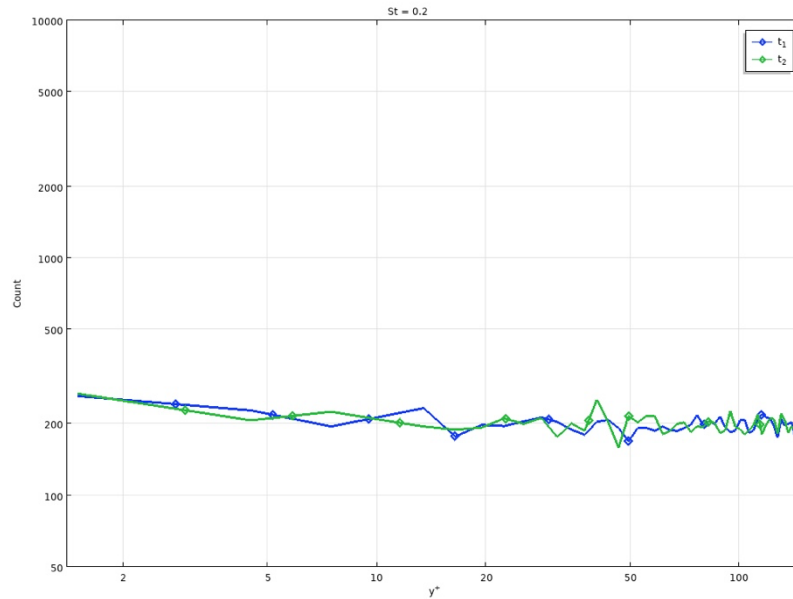


Figura 9. Distribución de las partículas a lo largo del tiempo para dos coeficientes de arrastre distintos.

Caso de estudio 3 "Cama de circulación fluidizada" [24].

Este modelo simula el funcionamiento de una cama fluidizada circulante (CFB). En este aparato, la fase dispersa, que consiste en partículas esféricas sólidas, se fluidiza con un gas y se transporta a través de un ascensor vertical. Al llegar a la salida, la fase dispersa se reinyecta en la vecindad de la entrada de gas en la parte inferior de la cama. Para estudiar el flujo en la cama fluidizada, el modelo utiliza el modelo Euler-Euler. Las propiedades de la fase y la configuración del modelo siguen las indicadas en la referencia [25].

La figura 10 muestra, en forma cualitativa, el aspecto de la turbulencia a los dos segundos de haberse iniciado el flujo.

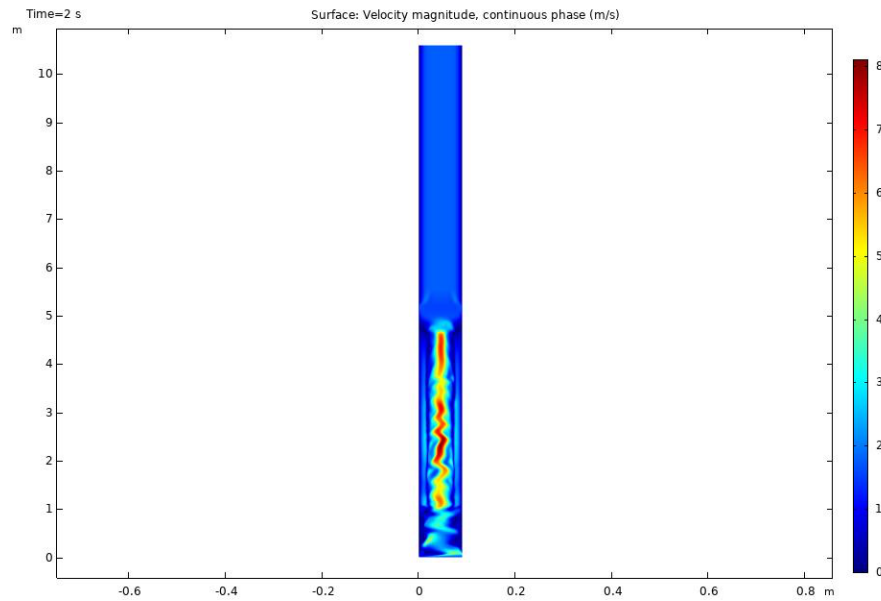


Figura 10. Representación de la turbulencia en un tiempo $t = 2$ s. del lecho fluidizado. El análisis de la evolución en el tiempo, permite validar la simulación.

La figura 11 representa el comportamiento de la fase dispersa, un parámetro útil para caracterizar cada partícula de manera independiente y evaluar posteriormente algún proceso de optimización del generador del flujo en la base.

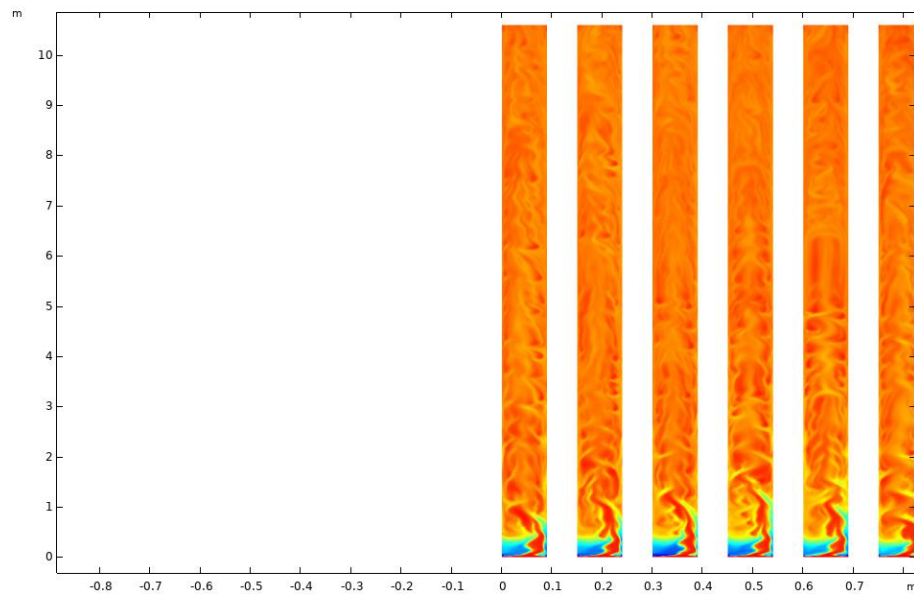


Figura 11. Representación cualitativa de la fase dispersa para distintos tiempos de aplicación de flujo.

La figura 12 muestra, secuencialmente, el proceso de fluidización desde el momento en que se inicia la inyección de fluido desde la base de la columna, hasta un

tiempo $t=10$ segundos. Estos resultados que se representan cualitativamente en la figura, tienen su origen en datos que son el resultado de la resolución de las ecuaciones diferenciales que rigen la dinámica del sistema fluido, datos que se pueden utilizar para caracterizar con precisión el comportamiento de las partículas en su proceso de separación.

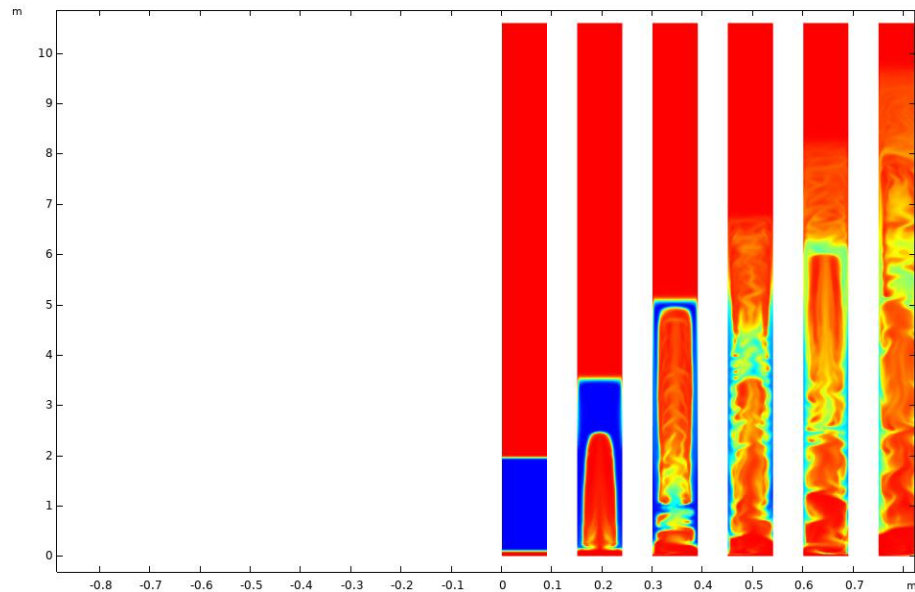


Figura 12. Comparativa de la evolución del proceso de fluidización para diferentes tiempos de generación de flujo desde la base de la geometría.

La figura 13 muestra la gráfica de los datos obtenidos a través de la resolución de las ecuaciones diferenciales que definen el sistema fluido.

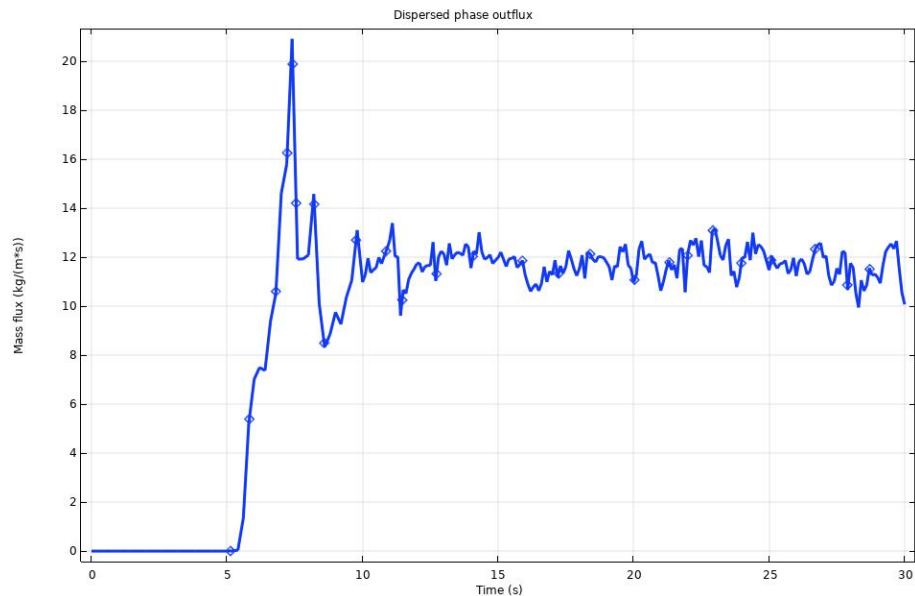


Figura 13. Gráfica (cuantitativa) del flujo en fase dispersa.

La figura 14 muestra cuantitativamente los resultados del cálculo de la velocidad en fase continua del proceso de fluidización. Parámetro útil que nos indicará el momento en que se alcanza la máxima velocidad en partículas distintas cuando se analice el proceso de separación de partículas.

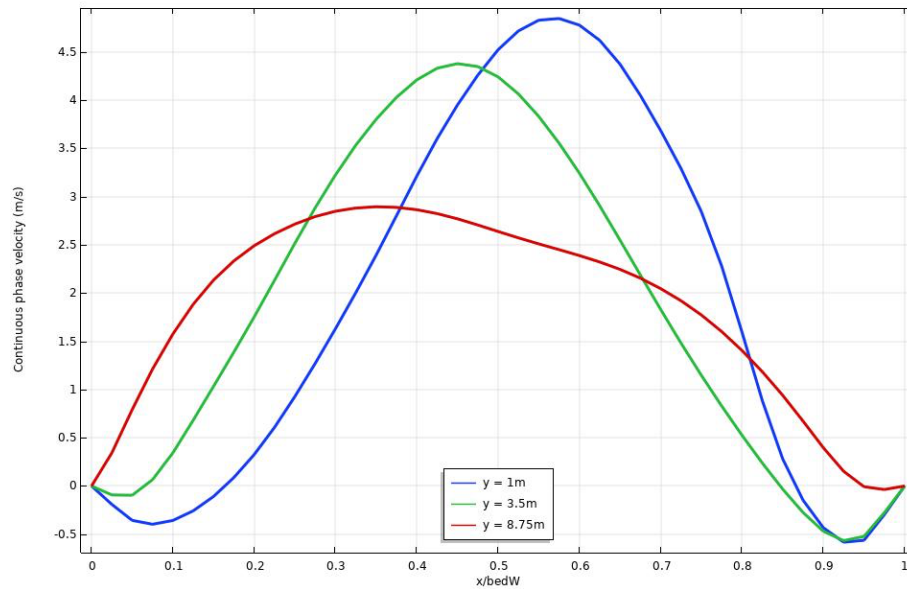


Figura 14. Gráfica de los datos que resultan de la resolución de las ecuaciones de velocidad de fase de un medio fluidizado.

Discusión.

Con algunas adaptaciones al primer ejercicio de simulación ahora para las necesidades específicas de extracción de partículas, se ha repetido el estudio para el caso del cilindro vertical, así como la sustitución del elemento que causa la turbulencia, por una interfaz (condición de frontera) en la base del cilindro que generará la turbulencia. La figura 16 muestra los resultados de la ejecución de la simulación adaptada.

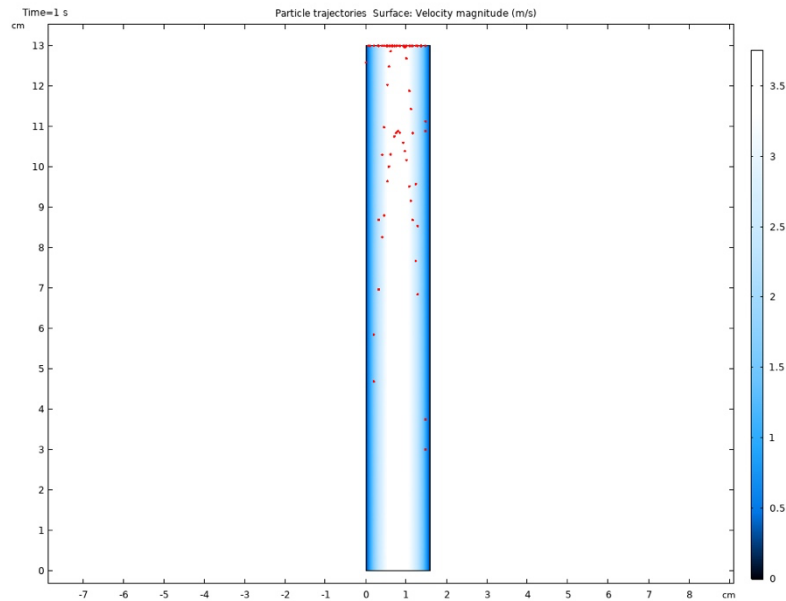


Figura 16. Adaptación al ejemplo de fluidización. Nótese que se ha sustituido el cilindro, se han agregado más partículas y el proceso de generación de turbulencia se ha cambiado a una condición de frontera en la base del cilindro.

Si bien este ejemplo se acerca mucho al modelo que se pretende simular, carece de la posibilidad de agregar partículas de distintos tamaños y materiales sin embargo resulta muy útil para caracterizar por simulación numérica, cada partícula por separado de las que serán separadas en el proceso real.

Para el caso del segundo ejemplo de simulación, nótese que la separación de las partículas se puede generar por la diferencia en la presión provocada por el lecho fluido (ver figura 8).

Este ejemplo se adapta adecuadamente a la necesidad de separación de partículas, siempre y cuando posean el mismo coeficiente de arrastre, sin embargo, no será el caso para el objetivo de la separación de partículas distintas, sin embargo, resulta útil para caracterizar el comportamiento individual de las partículas que se pretenden separar y gestionar los ajustes necesarios para incluir la segunda partícula en la simulación.

La tercera simulación resulta muy precisa para describir el fenómeno de fluidización, sin embargo, no sería posible conocer la distribución exacta de las partículas. Para los objetivos de separación de partículas, conocer la posición exacta de las partículas no es estrictamente necesario ya que, finalmente, el lecho fluidizado se sigue considerando como un fluido, aún cuando contiene partículas sólidas.

Este último ejercicio resultará extremadamente útil para los objetivos de análisis del comportamiento del lecho fluidizado cuando se requiera establecer la optimización del mecanismo de fluidización que se colocará en la base del cilindro.

Conclusiones.

El llevar a cabo las simulaciones y algunas de ellas comenzar a hacerles algunos ajustes para que se comiencen a adecuar a los objetivos de separación de litio, han permitido un acercamiento al entendimiento tanto del proceso de fluidización como el de la simulación numérica.

De los resultados obtenidos de las simulaciones, se puede concluir que, para el caso de la fluidización con fines de separación de al menos dos partículas distintas en el mismo lecho fluido (litio y silicatos u otras combinaciones de interés) es necesaria la combinación de al menos las tres técnicas estudiadas, además de la necesidad de ampliar el conocimiento acerca de las condiciones de frontera inherentes a la capacidad de simular dos partículas distintas simultáneamente, situación que queda como un trabajo futuro o para las siguientes generaciones que aborden y den continuidad al presente trabajo de tesis.

Bibliografía / Referencias

- [1] L. Luna, B. Gutierrez, N. Caballero, and A. Fernandez, "Estructuras de deformacion en la margen noreste del Rio Quequen Salado, provincia de Buenos Aires, Argentina," *Pesquisas em Geociencias*, vol. 45, no. 1, 2018, doi: 10.22456/1807-9806.85640.
- [2] A. Michelen, "Técnicas de clasificación supervisadas para la detección de anomalías en el control de procesos industriales," in *XLIII Jornadas de Automática*, Logroño (La Rioja), 2022: Servizo de Publicacións da UDC, pp. 224-232.
- [3] T. Vilches, E. Sette, and H. Thunman, "Behaviour of biomass particles in a large scale (2–4MWth) bubbling bed reactor," pp. 151-160, 2015, doi: 10.2495/MPF150131.
- [4] L. Cardona, J. Velásquez, and L. Forero, "Modelamiento de la viscosidad dinámica de sustancias puras a partir de la teoría de entropía residual," *Información tecnológica*, vol. 32, no. 4, pp. 39-52, 2021, doi: 10.4067/S0718-07642021000400039.
- [5] R. García-Culqui, L. Guevara-Narváez, F. Verdezoto-Mendoza, and J. Gaibor-Chávez, "Estudio De La Cinética De Secado Del Maíz Suave (Zea Mays L) Variedad Guagal (INIAP 111)," *Bionatura*, vol. 8, no. 4, pp. 1-9, 2023, doi: 10.21931/rb/2023.08.04.5.
- [6] L. Ren and J. Zhang, "Comparison of the Effects of Fluidized-Bed and Fixed-Bed Reactors in Microwave-Assisted Catalytic Decomposition of TCE by Hydrogen," *Advances in Materials Science and Engineering*, vol. 2012, pp. 1-4, 2012, doi: 10.1155/2012/728472.
- [7] B. Comini, d. Andrade, and J. Zegarra Tarqui, "Determinación experimental de la velocidad de caída de sedimentos no cohesivos," *Ingeniare. Revista chilena de ingeniería*, vol. 28, no. 2, pp. 236-247, 2020, doi: 10.4067/S0718-33052020000200236.
- [8] N. Rojas Reyes, G. Quitian Chila, and W. Saldarriaga Agudelo, "CARACTERIZACIÓN MAGNETO-REOLÓGICA DE UN FLUIDO A BASE DE DESECHOS MINEROS," *Ciencia en Desarrollo*, vol. 8, no. 2, 2017, doi: 10.19053/01217488.v8.n2.2017.7263.
- [9] B. Liu, X. Zhang, L. Wang, and H. Hong, "Fluidization of non-spherical particles: Sphericity, Zingg factor and other fluidization parameters," *Particuology*, vol. 6, no. 2, 2008, doi: 10.1016/j.cpart.2007.07.005.

- [10] G. Araújo, K. Bicalho, and F. Tristão, "ANÁLISE DE IMAGENS NA DETERMINAÇÃO DA FORMA E TEXTURA DE AREIAS," *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, vol. 39, no. 1, pp. 94-99, 2015, doi: 10.1590/01000683rbc20150274.
- [11] T. Xu, "Computational Fluid Dynamics and Its Application to Fluidization," *Essentials of Fluidization Technology*, vol. 2020, 2020.
- [12] J. Bai, "Study of the Deposition Characteristics of Particles on the Slag Wall of a Gasifier," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 62, no. 9, 2023, doi: 10.1021/acs.iecr.2c04156.
- [13] L. Ramajo, J. Taub, and M. Castro, "Influencia de la adición de CuO sobre las propiedades dieléctricas y piezoeléctricas de cerámicos K1/2Na1/2NbO3," *Matéria (Rio de Janeiro)*, vol. 18, no. 4, pp. 1483-1490, 2013, doi: 10.1590/S1517-70762013000400009.
- [14] V. Santacruz-Vazquez, C. Santacruz-Vazquez, S. Toxqui Lopez, and J. Laguna-Cortes, "Cambios en la textura de la superficie de esferas de melón (*Cucumis melo cantalupensis*) durante el secado por fluidización," *Vitae*, vol. 20, no. 3, pp. 161-171, 2013, doi: 0.17533/udea.vitae.13063.
- [15] C. W. Seo, "Improvements in the Physical Properties of Agglomerated Milk Protein Isolate/Skim Milk Powder Mixtures Via Fluidized Bed Agglomeration," *Journal of Dairy Science and Biotechnology*, vol. 40, no. 3, pp. 134-142, 2022, doi: 10.22424/jdsb.2022.40.3.134.
- [16] L. Cardona Palacio, J. Arismendy, G. Quintana Marín, H. Alzate Gil, and D. Hincapié, "Simulación dinámica computacional en tanques agitados de fondo cónico con turbina Rushton y de palas inclinadas," *Revista EIA*, vol. 20, no. 40, 2023, doi: 10.24050/reia.v20i40.1676.
- [17] C. S. Desai and J. F. Abel, *Introduction to the Finite Element Method: A Numerical Approach for Engineering Analysis*. New York: Van Nostrand Reinholds, 1972.
- [18] E. Hinton and D. R. J. Owen, *An Introduction to Finite Element Computations*. Swansea, UK: Pineridge Press, 1979.
- [19] M. N. O. Sadiku, "A simple introduction to finite element analysis of electromagnetic problems," *IEEE Trans.*, vol. 32, no. 2, pp. 85-93, 1989.
- [20] E. Süli, "Lecture Notes on Finite Element Methods for Partial Differential Equations," ed. United Kingdom: University of Oxford, 2012.
- [21] A. B. Comsol Multiphysics, "Flow Past Cylinder," ed: Comsol, A B, 2025.
- [22] A. B. Comsol Multiphysics, "Dispersion of Heavy Particles in a Turbulent Channel Flow," ed: Comsol, A B, 2025.
- [23] C. Marchioli, M. Picciotto, and S. A., "Influence of gravity and lift on particle velocity statistics and transfer rates in turbulent vertical channel flow," vol. 33, no. 3, p. 24, 2007.
- [24] A. B. Comsol Multiphysics, "Circulating Fluidized Bed," ed: Comsol, A B, 2025.
- [25] N. Yang, W. Wang, W. Ge, and J. Li, "CFD simulation of concurrent-up gas-solid flowing fluidized beds with structure-dependent drag coefficient," *Chemical Engineering Journal*, vol. 96, pp. 71-80, 2003.