

**Universidad Católica de Santa María**  
**Facultad de Ciencias e Ingenierías Físicas y Formales**  
**Escuela Profesional de Ingeniería Mecánica, Mecánica-Eléctrica y Mecatrónica**



**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE SELLOS DE LABERINTO EN UN  
REACTOR DE COMPRESIÓN PULSADA (PCR) PARA LA  
PRODUCCIÓN DE NANOPARTÍCULAS**

Tesis presentada por el Bachiller:

**Velasquez Coila, Briam Rudy**

Para optar el Título Profesional de  
**Ingeniero Mecatrónico**

Asesor:

**Ing. Alcázar Rojas, Hermann  
Enrique**

**Arequipa – Perú**

**2022**

UCSM-ERP

**UNIVERSIDAD CATÓLICA DE SANTA MARÍA**  
**INGENIERIA MECATRONICA**  
**TITULACIÓN CON TESIS**  
**DICTAMEN APROBACIÓN DE BORRADOR**

Arequipa, 26 de Marzo del 2022

**Dictamen: 005706-C-EPIMMEM-2022**

Visto el borrador del expediente 005706, presentado por:

**2016101801 - VELASQUEZ COILA BRIAM RUDY**

Títulado:

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE SELLOS DE LABERINTO EN UN REACTOR DE COMPRESIÓN  
PULSADA (PCR) PARA LA PRODUCCIÓN DE NANOPARTÍCULAS**

Nuestro dictamen es:

**APROBADO**

**1893 - CASTRO VALDIVIA JORGE LUIS  
DICTAMINADOR**



**1895 - CARPIO RIVERA MARCO ANTONIO  
DICTAMINADOR**



**2396 - CACERES NUÑEZ AUGUSTO EMILIO CARLOS  
DICTAMINADOR**





### **DEDICATORIA**

*Este trabajo de Investigación está dedicado a mis padres Cirilo y Elena, por ser mis pilares brindándome su cariño y apoyo incondicional en todos estos años, guiándome para cumplir mis metas. A mi hermano Dennys que me acompaña y me brindo su apoyo a lo largo de esta maravillosa etapa.*

## AGRADECIMIENTOS

Primero quiero agradecer a mi padres y mi hermano que son las personas que creyeron en mí, y me brindaron la oportunidad y los medios para desarrollar mis habilidades y aptitudes, que se ven plasmadas en este trabajo de investigación.

Me gustaría agradecer al Ph. D. Hermann E. Alcázar Rojas, por brindarme su apoyo desde el inicio de este trabajo de investigación y guiarme en el mismo, fue un placer trabajar y aprender de él.

Me gustaría agradecer además al Dr. Leopoldo O. Alcázar Rojas, por guiarme para tener una mejor comprensión de los fenómenos presentes en los sellos de laberinto.



## RESUMEN

Se propone un sistema de sellado mediante sellos laberínticos para minimizar las fugas de gas en un Reactor de Compresión Pulsada, para lo cual se evalúan los parámetros geométricos de las siguientes formas: triangular, rectangular y trapezoidal. Para cada una de las geometrías, se optimizó un grupo de parámetros geométricos minimizando la fuga de gas, utilizando el Algoritmo Genético Multi-Objetivo, actualizando la geometría utilizando scripts desarrollados en ANSYS SpaceClaim usando Python. Para un nuevo conjunto de parámetros, forma altura, ancho, ángulo, espacio entre cavidades y longitud del pistón. La simulación CFD evalúa la fuga de gas para la geometría dada y las condiciones de contorno constantes, presión de entrada 10 MPa, velocidad del pistón 25 m/s, diámetro del pistón 60 mm y un espacio de 40  $\mu\text{m}$ . Los parámetros más sensibles son la longitud del pistón y la altura de la cavidad para todas las formas. La forma trapezoidal presentó el mejor rendimiento para minimizar las fugas de flujo másico. Luego para la forma trapezoidal se analiza la influencia del gap, con una longitud de pistón de 150 mm y un ángulo de cavidad de 35 °, los demás parámetros se analizaron en un rango más amplio de valores. La fuga de flujo mínima es de 0,001024 kg/s con un espacio de 30  $\mu\text{m}$ . Al comparar entre pistón liso y ranurado, hay regiones en las que tener una superficie lisa es mejor que ranurarla. En general, por encima de un valor umbral de separación de gap de 150  $\mu\text{m}$ , es mejor utilizar un pistón con sellos de laberíntico.

**Palabras Clave:** Sellos de laberinto, reactor de compresión pulsada, simulación CFD, Ansys Fluent.

## ABSTRACT

A sealing system using labyrinth seals is proposed to minimize gas leaks in a Pulsed Compression Reactor, for which the geometric parameters of the following forms are evaluated: triangular, rectangular, and trapezoidal. For each of the geometries, a group of geometric parameters was optimized minimizing gas leakage, using the Multi-Objective Genetic Algorithm, updating the geometry using scripts developed in ANSYS SpaceClaim using Python. For a new set of parameters shape height, width, angle, cavity spacing, and piston length. CFD simulation evaluates gas leakage for a given geometry and constant boundary conditions, an inlet pressure of 10 MPa, a piston velocity of 25 m/s, a piston diameter of 60 mm, and a gap of 40  $\mu\text{m}$ . The most sensitive parameters of all configurations are the length of the piston and the height of the cavity. The trapezoid shape performs best to minimize mass flow leakage. Then for the trapezoidal shape, the influence of the gap is analyzed, with a piston length of 150 mm and a cavity angle of 35 °, the other parameters were analyzed in a wider range of values. The minimum flow leakage is 0.001024 kg/s with a 30  $\mu\text{m}$  gap. When comparing between smooth and grooved piston, there are regions where having a smooth surface is better than grooving it. In general, above a gap separation threshold value of 150  $\mu\text{m}$ , it is better to use a piston with labyrinth seals.

**Keywords:** Labyrinth seals, pulsed compression reactor, CFD simulation, Ansys Fluent.

## ÍNDICE

	<u>Página</u>
<b>DEDICATORIA .....</b>	<b>iii</b>
<b>AGRADECIMIENTOS .....</b>	<b>iv</b>
<b>RESUMEN .....</b>	<b>v</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>vi</b>
<b>ÍNDICE.....</b>	<b>vii</b>
<b>ÍNDICE DE FIGURAS .....</b>	<b>ix</b>
<b>ÍNDICE DE TABLAS .....</b>	<b>xi</b>
<b>ABREVIATURAS Y LISTAS DE SÍMBOLOS .....</b>	<b>xii</b>
<b>INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
<b>Capítulo 1 MARCO METODOLÓGICO .....</b>	<b>3</b>
1.1 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA .....	3
1.2 JUSTIFICACIÓN.....	4
1.3 ALCANCES.....	5
1.4 VARIABLES .....	5
1.4.1 Variables Independientes .....	5
1.4.2 Variables Dependientes.....	5
1.5 OBJETIVOS.....	6
1.5.1 Objetivo General.....	6
1.5.2 Objetivos Específicos.....	6
1.6 ANTECEDENTES.....	6
<b>Capítulo 2 MARCO TEÓRICO .....</b>	<b>9</b>
2.1 NANOMATERIALES, NANOESTRUCTURAS Y NANOPARTÍCULAS .....	9
2.1.1 Clasificación de las Nanopartículas (NPs).....	10
2.1.2 Propiedades de las Nanopartículas basadas en carbono.....	11
2.2 SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS A BASE DE CARBONO .....	11
2.2.1 Métodos Top-Down .....	12
2.2.2 Métodos Bottom-Up .....	12
2.3 REACTOR DE COMPRESIÓN PULSADA.....	13
2.3.1 Compresión Adiabática.....	14
2.4 SELLOS DE LABERINTO .....	15
2.5 DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL.....	17

<b>Capítulo 3</b>	<b>OPTIMIZACIÓN NUMÉRICA DE SELLOS DE LABERINTO .....</b>	<b>20</b>
3.1	METODOLOGÍA .....	21
3.1.1	Geometría.....	21
3.1.2	Mallado .....	24
3.1.3	Simulación Numérica.....	25
3.2	RESULTADOS .....	28
3.2.1	Sellos de laberinto Triangulares.....	28
3.2.2	Sellos de laberinto Rectangulares .....	33
3.2.3	Sellos de laberinto Trapezoidales .....	37
3.2.4	Sin sellos de laberinto (pistón liso).....	41
<b>Capítulo 4</b>	<b>OPTIMIZACIÓN NUMÉRICA DE SELLOS DE LABERINTO</b>	
<b>TRAPEZOIDAL.....</b>		<b>43</b>
4.1	METODOLOGÍA .....	43
4.1.1	Geometría.....	43
0.5-10.0	.....	44
4.1.2	Mallado .....	46
4.1.3	Simulación Numérica.....	46
4.1.4	Correlación y optimización de parámetros .....	47
4.2	RESULTADOS .....	49
4.2.1	Variación de la distancia entre cavidades .....	50
4.2.2	Variación del ancho .....	51
4.2.3	Variación de la profundidad.....	51
4.2.4	Comparación de ancho, profundidad y distancia entre cavidades .....	52
4.2.5	Valores Óptimos .....	54
<b>CONCLUSIONES .....</b>		<b>56</b>
<b>RECOMENDACIONES .....</b>		<b>58</b>
<b>REFERENCIA.....</b>		<b>59</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS

	<u>Página</u>
Figura 2.1 Clasificación de los nanomateriales.....	10
Figura 2.2 Esquema de la clasificación de los dos métodos de síntesis de nanopartículas .....	12
Figura 2.3 Reactor de Compresión Pulsada de doble cámara .....	13
Figura 2.4 Reactor de Compresión Pulsada de una cámara .....	14
Figura 2.5 Compresor con pistón balístico .....	15
Figura 2.6 Esquema de PCR con sellos de laberinto .....	16
Figura 2.7 Flujo de fuga dentro del sello de laberinto .....	16
Figura 2.8 Las diferentes disciplinas que comprende la dinámica de fluidos computacional.....	17
Figura 2.9 Las funciones de interconectividad de los tres elementos principales dentro de un marco de análisis CFD.....	18
Figura 3.1 Programas pertenecientes a ANSYS empleados en el presente estudio.....	21
Figura 3.2 Definición de geometría para formas triangulares, rectangulares y trapezoidales .....	21
Figura 3.3 Diagrama de flujo para la creación de la geometría .....	23
Figura 3.4 Geometría generadas por los códigos de programación realizados.....	23
Figura 3.5 Seccionado virtual de la geometría.....	24
Figura 3.6 Mallado del dominio del fluido para cada una de las tres configuraciones estudiadas .....	25
Figura 3.7 Esquema de PCR con las Condiciones de Contorno del modelo .....	26
Figura 3.8 Problemas de convergencia durante el proceso de simulación.....	27
Figura 3.9 Reconfiguración de las condiciones de contorno en la entrada .....	27
Figura 3.10 Convergencia de Residuales para cada una de las formas de sello de laberinto estudiadas .....	28
Figura 3.11 Sensibilidad de parámetros forma triangular .....	29
Figura 3.12 Flujo masico de fuga en función de los parámetros geométricos de la forma triangular .....	30
Figura 3.13 Vectores de velocidad en la primera y última cavidad de forma triangular.....	31
Figura 3.14 Perfil de Velocidad de la forma triangular .....	32
Figura 3.15 Caída de presión e incremento de la energía cinética de turbulencia forma triangular .....	33

Figura 3.16	Sensibilidad de parámetros forma rectangular.....	33
Figura 3.17	Flujo masico de fuga en función de los parámetros geométricos de la forma rectangular.....	34
Figura 3.18	Vectores de velocidad en la primera y última cavidad de forma rectangular .....	35
Figura 3.19	Perfil de Velocidad de la forma rectangular .....	36
Figura 3.20	Caída de presión e incremento de la energía cinética de turbulencia forma triangular .....	36
Figura 3.21	Sensibilidad de parámetros forma trapezoidal.....	37
Figura 3.22	Flujo masico de fuga en función de los parámetros geométricos de la forma trapezoidal .....	38
Figura 3.23	Vectores de velocidad en la primera y última cavidad de forma trapezoidal.....	39
Figura 3.24	Perfil de Velocidad de la forma trapezoidal .....	40
Figura 3.25	Caída de presión e incremento de la energía cinética de turbulencia forma triangular .....	40
Figura 3.26	Caída de presión e incremento de la energía cinética de turbulencia en un pistón liso.....	41
Figura 4.1	Definición de geometría para forma trapezoidal .....	44
Figura 4.2	Aumento radial del pistón debido al cambio de temperatura .....	45
Figura 4.3	Mallado del dominio del fluido para cada la cavidad trapezoidal .....	46
Figura 4.4	Convergencia de Residuales cavidad trapezoidal.....	47
Figura 4.5	Diagrama de bloques de optimización y correlación de parámetros .....	47
Figura 4.6	Diagrama de bloques de optimización y correlación de parámetros .....	48
Figura 4.7	Sensibilidad de parámetros para la forma trapezoidal.....	49
Figura 4.8	Fugas vs gap y distancia entre cavidades, para valores mínimos.....	50
Figura 4.9	Fugas vs gap y ancho de la cavidad, para valores mínimos .....	51
Figura 4.10	Fugas vs gap y profundidad de la cavidad, para valores mínimos .....	51
Figura 4.11	Umbral entre liso y pistón con juntas laberínticas.....	52
Figura 4.12	Energía cinética de turbulencia a lo largo del pistón, espacio de 250 $\mu\text{m}$ .....	53
Figura 4.13	Caída de presión a lo largo del pistón, espacio de 250 $\mu\text{m}$ .....	54
Figura 4.14	Valores óptimos de distancia entre cavidades, ancho de cavidad y profundidad de cavidad para diferentes valores de gap.....	55

## ÍNDICE DE TABLAS

	<u>Página</u>
Tabla 3.1	Parámetros constantes para una geometría de cavidad determinada ..... 22
Tabla 3.2	Parámetros variables para una geometría de cavidad determinada ..... 22
Tabla 3.3	Definición de los parámetros y modelos para el comportamiento del fluido..... 26
Tabla 3.4	Definición de las Condiciones de Contorno del modelo ..... 26
Tabla 3.5	Candidatos resultantes de la optimización para la forma triangular..... 31
Tabla 3.6	Candidatos resultantes de la optimización para la forma rectangular ..... 35
Tabla 3.7	Candidatos resultantes de la optimización para la forma trapezoidal..... 39
Tabla 3.8	Valores óptimos de los parámetros para una de las configuraciones ..... 42
Tabla 4.1	Parámetros constantes para una geometría trapezoidal ..... 44
Tabla 4.2	Parámetros variables para una geometría trapezoidal ..... 44
Tabla 4.3	Fugas mínimas de flujo masico ..... 49
Tabla 4.4	Valores óptimos de los parámetros para un gap de 250 $\mu\text{m}$ ..... 53

## ABREVIATURAS Y LISTAS DE SÍMBOLOS

### Abreviaturas

CC	Condición de Contorno
CFD	(Computational Fluid Dynamics) Dinámica de Fluidos Computacional
CNT	Nanotubos de carbono
CSP	Porcentaje de Estabilidad Convergente
CVD	(Chemical Vapor Deposition) Deposición Química de Vapor
DE	Distribución de Entropía
DECT	Distribución de Energía cinética de Turbulencia
DET	Distribución de Energía Total
DP	Distribución de presión
DT	Distribución de temperatura
IC	(Internal Combustion) Combustión Interna
MAPP	(Maximum Allowable Pareto Percentage) Condiciones Máximas Permisibles de Porcentaje
MOGA	(Multi-Objective Genetic Algorithm) Algoritmo Genético Multiobjetivo
NMs	Nanomateriales
NPs	Nanopartículas
OQ	(Orthogonal Quality) Calidad Ortogonal
PCR	(Pulsed Compression Reactor) Reactor de Compresión Pulsada
PVD	(Physical Vapor Deposition) Deposición Física de Vapor
TKE	(Turbulent Kinetic Energy) Energía Cinética de Turbulencia

### Lista de símbolos

$C_2$	Constante del modelo de Turbulencia $k-\varepsilon$ Realizable
$CH_4$	Metano
$G$	Espacio radial entre el cilindro y el pistón
$H$	Profundidad de la cavidad
$J_{min}$	Longitud mínima libre inicial/final
$J_{in}$	Longitud inicial libre
$J_{out}$	Longitud libre final
$J$	Longitud libre inicial
$L$	Longitud del pistón
$R^2$	Coefficiente de determinación de la regresión cuadrática
$W$	Longitud de la cavidad
$e$	Distancia entre cavidades
$k$	(Turbulent Kinetic Energy) Energía Cinética de Turbulencia
$\varnothing d$	Diámetro del pistón
$\dot{m}$	Flujo masico de fuga
$y^+$	Distancia adimensional a la pared
$\alpha$	Angulo de la cavidad
$\varepsilon$	Tasa de disipación de la Energía Cinética de Turbulencia
$\sigma_\varepsilon$	Número de Prandtl turbulento para $\varepsilon$
$\sigma_k$	Números de Prandtl turbulento para $k$
$\beta$	Coefficiente de dilatación lineal
$\Delta R$	Variación de radio
$R_0$	Radio inicial
$\Delta T$	Variación de temperatura

## INTRODUCCIÓN

El sellado en las máquinas rotativas y de desplazamiento positivo es importante en este tipo de máquinas, ya que evita la fuga de gas y esto ocasiona que existan pérdidas de eficiencia en el sistema. Los Reactores de Compresión Pulsada (PCR) al ser máquinas que poseen un sistema reciprocante (cilindro-pistón) que trabajan con fluidos gaseosos, requieren de un sistema de sellado que pueda evitar las fugas en este tipo de reactor. Es por ello por lo que en el presente trabajo se materializa una investigación de los sellos de laberinto para el Reactor de Compresión Pulsada (PCR).

Para ello la presente investigación está seccionada en cuatro capítulos. En el primer capítulo se expone el Marco metodológico en donde se describen el problema, la justificación, la hipótesis, las variables, los objetivos y los antecedentes de la investigación., Seguidamente en el segundo capítulo se encuentran las definiciones de los nanomateriales, nanopartículas, sus propiedades y aplicaciones además de los métodos de síntesis de los mismos, además de la definición del PCR la compresión adiabática, los sellos de laberinto y una breve explicación de la Dinámica de Fluidos Computacional.

En el tercer capítulo se realiza la definición de los parámetros necesarios que definen las formas geométricas de las tres formas geométricas de los sellos de laberinto, también se realizará el análisis de la generación de la geometría para pasar luego por el mallado de la geometría necesario para realizar la simulación numérica, seguidamente el análisis del comportamiento del gas dentro de los sellos de laberinto empleando métodos numéricos mediante el programa ANSYS Fluent. También, se presentan los resultados, el postprocesamiento, la correlación de parámetros, la optimización de los parámetros geométricos y el análisis de los resultados obtenidos para cada una de las tres configuraciones de sellos de laberinto y además se encuentra dentro de este capítulo los

resultados para un caso en el cual no se tiene sellado es decir cuando el pistón y cilindro son lisos.

En el cuarto capítulo se analizan a mayor profundidad los sellos de laberinto de la forma trapezoidal, tomando en cuenta otros parámetros geométricos como el gap, empleando también el mismo método para la generación de la geometría, el mallado de la geometría necesario para realizar la simulación numérica, y el análisis del comportamiento del gas dentro de los sellos de laberinto empleando métodos numéricos mediante el programa ANSYS Fluent. En este capítulo también se muestran los resultados conseguidos después de emplear las simulaciones numéricas y también se realiza una comparación entre los sellos de laberinto trapezoidales y un pistón liso.

Para terminar con la investigación se presenta las conclusiones de la investigación y también se brindan recomendaciones para realizar futuras investigaciones relacionadas con los sellos de laberinto para Reactores de Compresión Pulsada.

## Capítulo 1

### MARCO METODOLÓGICO

#### 1.1 DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

En la actualidad las nanopartículas están siendo cada vez más utilizadas gracias a las grandiosas propiedades que presentan comparados con los materiales empleados tradicionalmente. Estas tienen aplicaciones en: electrónica, energías renovables y protección ambiental, catálisis, medicina, alimentos, construcción, cosméticos y protección solar.

Para llegar a dichas aplicaciones, las nanopartículas se producen en laboratorios de síntesis modernos utilizando equipos especializados, pero también han existido en la naturaleza durante mucho tiempo y se remontan a la antigüedad (Heiligtag & Niederberger, 2013). El efecto de tamaño hace que se tenga interés en las propiedades morfológicas/estructurales, térmicas, electromagnéticas, ópticas y mecánicas (Naito et al., 2018).

Por lo tanto, la síntesis de nanopartículas es una rama importante de la ciencia e ingeniería de materiales, actualmente existen muchos métodos diferentes para sintetizarlas,

estos métodos se adaptan según el material precursor, ya sea en forma sólida, líquida o gaseosa (Masala & Seshadri, 2004).

Cada uno de los métodos existentes para la síntesis de NPs, tiene sus ventajas y desventajas, por ejemplo, algunas desventajas que tienen métodos como flama de aerosol, es que necesitan que los gases precursores sean inflamables, es decir, que contengan combustible y oxígeno. La producción de muchas partículas metálicas y cerámicas libres de óxido o carbono es imposible en el método de flama de aerosol, el método de plasma, necesita una gran cantidad de electricidad para calentar los reactivos y el gas portador a la temperatura de reacción, esto representa en la producción en masa, altos gastos de energía (*Pulsed Compression Reactor for Nanoparticles Manufacturing*, n.d.).

Entonces surge otra propuesta para la síntesis de nanopartículas dada por Kronberg (2008), empleando un Reactor de Compresión Pulsada (PCR) en el cual se puede lograr altas temperaturas y presiones, estas condiciones hacen que los enlaces del gas precursor se rompan, y se separen para formar nanopartículas y permite la producción a gran escala, este método muestra altas eficiencias.

El reactor de compresión pulsada (PCR) tiene muchas aplicaciones, tales como: producción de alquenos por deshidrogenación de parafinas; síntesis de gas e hidrógeno; generación controlada de nanopartículas cerámicas, y otros (Kronberg, 2008). Pero este PCR presenta algunos problemas de ingeniería y diseño para que pueda trabajar en una producción a gran escala, estos son: el control térmico, la estabilización necesaria para el funcionamiento a largo plazo, los métodos de puesta en marcha eficaces, el intercambio de gas en cámaras (geometría de las cámaras, posición, tamaño y forma), los materiales de pistón y cilindro, y la lubricación y sellado eficaces (Kronberg, 2008). De entre todos los problemas descritos, en el presente trabajo se estudia el sellado en el sistema cilindro pistón del PCR utilizando sellos de laberinto de forma triangular, rectangular y trapezoidal en el pistón.

## 1.2 JUSTIFICACIÓN

Autores como Schaller et al. (2018), L. Wang et al. (2019) muestran que la lubricación sin aceite transporta el gas completamente seco y evita la contaminación del aceite con el gas, entonces si se equipa el mismo con un sello sin contacto, este no tendría desgaste y en

consecuencia una vida útil casi ilimitada. La característica distintiva del compresor de pistón con sellos laberínticos es que no produce fricción entre el cilindro-pistón (Kläy, 1975).

En la actualidad la información del uso de sellos de laberinto en reactores de compresión pulsada es prácticamente inexistente, en los PCRs propuestos a la fecha no dan detalles de la eficacia de sellado que presentan los sellos de laberinto. La mayoría de las investigaciones relacionadas con sellos laberínticos, estudian el sistema rotor-estator, es decir para elementos rotativos, existen pocos estudios para sistemas cilindro-pistón, todos ellos trabajados estudiados en compresores con diferencias de presiones de hasta 1 MPa.

Siendo el sistema de sellado una parte importante del Reactor de Compresión Pulsada. Este estudio permitirá avanzar en el desarrollo del PCR para la producción de nanopartículas en la Universidad Católica de Santa María. Abriendo así camino a futuras investigaciones en la línea de los nanomateriales.

### **1.3 ALCANCES**

El presente trabajo de investigación contempla el análisis de tres tipos de sellos de laberinto, empleando simulación numérica mediante el entorno de ANSYS, posteriormente realizado además la optimización de los parámetros para cada una de formas geométricas estudiadas triangular, rectangular y trapezoidal, comparándolas con un pistón liso.

### **1.4 VARIABLES**

#### **1.4.1 Variables Independientes**

- Longitud del Pistón
- Ángulo de la cavidad
- Ancho de la cavidad
- Profundidad de la cavidad
- Distancia entre cavidades

#### **1.4.2 Variables Dependientes**

- Flujo másico de fuga

## 1.5 OBJETIVOS

### 1.5.1 Objetivo General

Optimizar los parámetros geométricos de tres formas de sello laberíntico para el sistema cilindro-pistón del Reactor de Compresión Pulsante (PCR), con la finalidad de obtener la menor fuga para un pistón que se mueve a 25 m/s con 60 mm de diámetro y una presión de 10 MPa manométricos de metano mediante el uso de simulación numérica.

### 1.5.2 Objetivos Específicos

- Crear geometrías paramétricas que representen el dominio del fluido.
- Analizar la sensibilidad de los parámetros geométricos de los sellos de laberinto triangulares, rectangulares y trapezoidales.
- Analizar el comportamiento del fluido dentro de los sellos de laberinto en el sistema cilindro-pistón del PCR.
- Encontrar la forma de sellos de laberinto óptima.
- Encontrar los valores de los parámetros óptimos.

## 1.6 ANTECEDENTES

En cuanto a los reactores de compresión pulsada, en el pasado se han realizado muchos esfuerzos para desarrollar reactores químicos comerciales basados en el principio de compresión pulsada, los autores que han realizado estudios detallados en esta área son: Longwell et al. (1958), Kolbanovskiy et al. (1982), Morrison & Reimer (1989). Sin embargo, las máquinas de compresión de disparo único definitivamente no son adecuados para las aplicaciones industriales (Kronberg, 2008).

Por otro lado, muchos investigadores como: Von Szeszich (1956), Jan & Van Dijck (1957), Van Dijck (1957), Oberdorfer & Winch (1961), Yamamoto et al. (1963), Karim & Moore (1963), Karim & Moore (1990), Lowther & Bohon (1990), Dolinskij et al. (1997) intentaron usar diseños de motores IC o similares a este como reactores. Sin embargo, emplear motores IC modificados como reactores químicos es limitado porque: usan aceite, altas pérdidas energéticas por enfriamiento, baja presión máxima, problemas de escalamiento, imposibilidad de ajustar la relación de compresión cuando cambia la composición de los reactantes (Kronberg, 2008).

Gloushenkov con las siguientes patentes: Glouchenkov (1997), Glouchenkov (1998), Glouchenkov (1999), proporciono una solución técnica radicalmente nueva, que supera los problemas de los reactores basados en motores de combustión interna y los reactores de pistón libre anteriormente desarrollados, este reactor, promete grandes avances en eficiencia energética, costos de capital y portabilidad de muchos procesos químicos intensos en energía y capital, teóricamente el reactor proporciona calentamiento y compresión de gas de forma gratuita; una de las características esenciales de los reactores es la lubricación de gas, que se usa para evitar cualquier contacto entre el pistón y el cilindro (Kronberg, 2008).

Graunke & Ronnert (1984) muestran que el primer compresor equipado con sello de laberinto se construyó en 1935. Más recientemente, Larjola et al. (2010) realizaron modelos de sellos de laberinto para generadores lineales con pistón libre. También Braga & Deschamps (2017) realizaron un modelo basado en simulación de la formulación de la ecuación de Reynolds de flujo compresible para predecir las fugas en el espacio libre entre el pistón y el cilindro de un pequeño compresor recíprocante para la refrigeración doméstica sin sellos (pistón liso), muestran además que la formulación de flujo compresible debe de considerarse para predecir con precisión la fuga de gas.

Pang et al. (2019) realizaron una simulación dinámica y experimental de las fugas de un compresor de aire con sellos de laberinto para presiones de descarga de 0.2 a 0.5 MPa y velocidades rotacionales de 400 a 900 rpm, concluyendo que las caídas de presión en las cavidades del sello de laberinto aumenta gradualmente y que la tercera parte del total de la longitud represento alrededor del 50 % de la caída de presión, otro autor que realizo un estudio transitorio fue L. Wang et al. (2019). Por otro lado, Feng et al. (2018) estudiaron las características de fuga en compresores con sellos de laberinto, empleando CFD lo utilizan para predecir la influencia de diferentes parámetros estructurales del sello, además también realizaron una plataforma experimental para la verificación del modelo de simulación encontrando una buena concordancia entre ellos, también detallan que la relación entre la profundidad de la cavidad y el espacio radial libre entre el pistón y el cilindro debe de ser mayor a 2.7 para lograr un flujo de fuga mínimo.

Tang et al. (2017) compararon los resultados del método CFD con el de los cálculos de fórmulas y descubrió que el rendimiento de sellado era mejor cuando el ángulo del diente era de 60° y la profundidad de la cavidad de 3.5 a 4 mm. Muchos investigadores como,

Cangioli et al. (2018), Cangioli et al. (2017), Vermes (1961), Hodgkinson (1939), exploraron el método de cálculo de flujo de sello laberíntico. Kläy (1975) implemento sellos de laberinto con éxito para compresores recíprocos sin aceite para helio. Los principales métodos de investigación actuales de fugas laberínticas son el análisis teórico termodinámico, el análisis numérico, la medición de fugas, el método de visualización de flujo y otras investigaciones sobre el mecanismo de maquinaria rotativa, combinados con métodos CFD y el análisis teórico para estudiar el patrón de flujo dentro del sello laberíntico.

Las patentes existentes de sellos de laberinto, en la patente de X. Zhang et al. (2017) presentan un sello de laberinto con forma cicloidal, C. Zhang et al. (2013) presentan un sello de laberinto que tiene una forma en U en el cilindro y el pistón, Dai et al., (2006) propone una estructura de sellado que puede ser usado para comprimir un gas sin contaminarlo, Peng et al. (2013) proponen una forma de parábola, argumentando que presenta mejor efecto de sellado que las formas tradicionales triangular, trapezoidal, con una capacidad de disipar la energía de los medios de sellado en un 30-49 % mayor. En el caso de Peng et al. (2011b), la estructura presentada se caracteriza porque el ancho del espacio entre un sello de laberinto y el cuerpo del cilindro es de 0.4 mm, la profundidad de la cavidad es de 1.6 mm, el ángulo de inclinación es de 35 °, la longitud total de una sección de sellado es de 15 mm. A su vez, Peng et al. (2011a) también muestran otra estructura que se caracteriza porque la parte posterior de una cavidad hueca de la estructura de sello de paso recto se fabrica en una forma redonda achaflanada, y el ángulo de inclinación es de 60 grados; y la anchura de un espacio entre el sello laberíntico y el cuerpo del cilindro es de 0,2 mm, la profundidad de la cavidad es de 0,33 mm y la forma de la cavidad hueca de la estructura del sello es de 0,4 mm. Su & Koo (2017) presentan una máquina recíproca para la compresión de gases, con el uso de sellos de laberinto.

## Capítulo 2

### MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presentan algunos conceptos como los nanomateriales, nanoestructuras, nanopartículas, su clasificación y aplicaciones. Además, se presenta con mayor detalle el Reactor de Compresión Pulsada y los sellos de laberinto para sistemas cilindro/pistón.

#### 2.1 NANOMATERIALES, NANOESTRUCTURAS Y NANOPARTÍCULAS

Según Gogotsi & Presser (2013) los nanomateriales son materiales con unidades estructurales en una escala nanométrica en al menos una dirección. Estas tienen una configuración estructural característica de nanopartículas, estas se pueden clasificar en nanoestructuras individuales y colecciones de nanoestructuras según (Chintamani Nagesa Ramachandra Rao et al., 2004).

Los nanomateriales pueden ser a nana escala en una dimensión cero: (a) fullereno, (b) cuántico, (c) grupo metálico. De una dimensión (por ejemplo, películas de superficie) (d) nanotubo de carbono, (e) nanotubo de óxido de metal. En dos dimensiones (por ejemplo, hebras o fibras), como él (f) grafeno; (g) nano fajas de óxido de metal o en tres dimensiones

(por ejemplo, precipitados, coloides), (h) nano diamante, (i) estructuras orgánicas de metal MOFs como se muestra en la Figura 2.1. Pueden existir en formas individuales, fusionadas, agregadas o aglomeradas con formas esféricas, tubulares e irregulares (N. Kumar & Kumbhat, 2016). Las nanoestructuras son el sistema ordenado de una, dos o tres dimensiones de nano materiales, ensambladas con escala nanométrica en cierto patrón que incluye nano esferas, nanotubos, nano varillas (nanorods), nano cables y nano fajas (nanobelts), (Sajanlal et al., 2011).

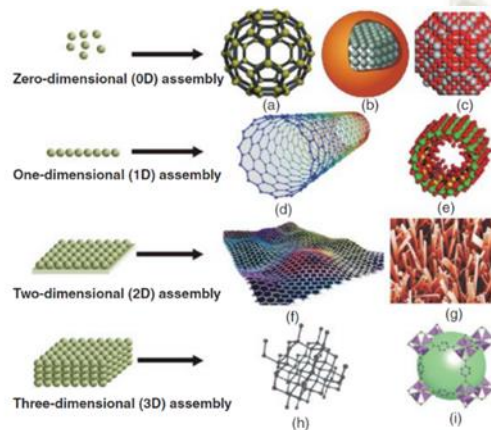


Figura 2.1 Clasificación de los nanomateriales

Fuente: Extraído de N. Kumar & Kumbhat (2016)

Según Naito et al. (2018) las nanopartículas son partículas ultrafinas del tamaño de un orden nanométrico, en el sentido más estricto, se consideran partículas menores de 10-20 nm. Autores como Laurent et al. (2008) definen a las nanopartículas como una gran clase de materiales, incluidas las partículas, cuyo tamaño es inferior a 100 nm. Dependiendo de la forma general, estos materiales pueden ser 0D, 1D, 2D o 3D (Tiwari et al., 2012).

### 2.1.1 Clasificación de las Nanopartículas (NPs)

Las NPs se dividen en varios tipos según su morfología, tamaño y propiedades químicas. Basado en las características físicas y químicas, algunas de los tipos de NPs son:

- NPs a base de carbono
- NPs de metales
- NPs de cerámicos
- NPs de semiconductores
- NPs poliméricos

#### f) NPs a base de lípidos

En el presente trabajo se tomará en cuenta solo las nanopartículas a base de carbono, son por ello que ahora se presentara las propiedades que tienen este tipo de nanopartículas.

### 2.1.2 Propiedades de las Nanopartículas basadas en carbono

- Fullerenos: Seguro e inerte, semiconductor, conductor y superconductor, transmite luz en función de la intensidad (Tenne, 2002).
- Grafeno: Extrema resistencia, térmica, conductividad eléctrica, absorción de luz (Huang et al., 2010).
- Nanotubos de carbono (CNT): Alta conductividad eléctrica y térmica, resistencia a la tracción, flexible y elástica (De Volder et al., 2013).
- Nanofibras de carbono: Altas propiedades térmicas, eléctricas, de frecuencia y mecánicas (Leer, 2010), (Al-Saleh & Sundararaj, 2011), (S. Kumar et al., 2007).
- Negro de carbón (Carbon Black): Alta resistencia y conductividad eléctrica, área de superficie; resistente a la degradación UV (Fawole et al., 2016).

## 2.2 SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS A BASE DE CARBONO

La síntesis de nanopartículas es una rama importante de la ciencia y la ingeniería de materiales. Las nanopartículas se pueden producir a través de una serie de procesos químicos, físicos o biológicos, algunos de los cuales son completamente nuevos e innovadores, mientras que otros han existido durante mucho tiempo (N. Kumar & Kumbhat, 2016). En la actualidad, existen varios métodos para sintetizar NPs, que se adaptan según el material precursor (sólido, líquido o gas). Generalmente, la mayoría de estas tecnologías se pueden dividir en dos métodos: método top-down y método bottom-up (Masala & Seshadri, 2004), (Y. Wang & Xia, 2004), estos se muestran en la Figura 2.2.

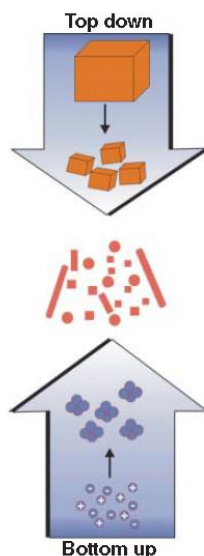


Figura 2.2 Esquema de la clasificación de los dos métodos de síntesis de nanopartículas

Fuente: Extraído de N. Kumar & Kumbhat (2016)

### 2.2.1 Métodos Top-Down

En este método, se emplea un camino destructivo. Ya que, a partir de una molécula más grande, que se divide en unidades más pequeñas y luego estas unidades se convierten en NPs adecuadas. Estos procesos son realizados en una atmosfera inerte o en el vacío. (N. Kumar & Kumbhat, 2016).

- Descarga por arco eléctrico
- Ablación con láser
- Métodos electroquímicos

### 2.2.2 Métodos Bottom-Up

La producción de NPs empieza desde los átomos, son básicamente los procesos químicos basados en transformaciones en gas, líquido o forma de aerosol (N. Kumar & Kumbhat, 2016). Las NPs están formadas desde sustancias relativamente simples, por lo tanto, este acercamiento es además llamado enfoque de construcción (Khan et al., 2019).

- Síntesis Hidrotermal
- Síntesis mediante microondas
- Deposición Química De Vapor (CVD)
- Ashing

- e) Síntesis mediante Sol-gel
- f) Pirolisis

### 2.3 REACTOR DE COMPRESIÓN PULSADA

Es una máquina el cual permite lograr altas temperaturas y presiones empleando compresión adiabática, estas condiciones hacen que los enlaces del gas precursor se rompan, este método muestra altas eficiencias, y la habilidad de crear condiciones únicas de reacción (Glouchenkov et al., 2002).

Este tipo de reactor presenta se clasifica en dos tipos. El primero se trata de un reactor de doble cámara, esto significa que las reacciones químicas toman lugar en ambas cámaras, Figura 2.3; en la segunda configuración es de una sola cámara, las reacciones solo ocurren en una de las dos cámaras, la segunda cámara es usada como una parte de un sistema de accionamiento neumático, Figura 2.4. Para mantener la alternancia del pistón se suministra gas comprimido dentro de la cámara (Kronberg, 2008).

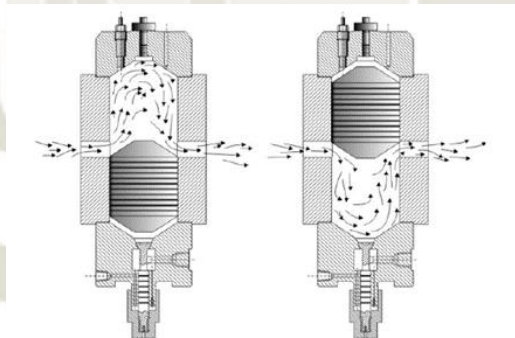


Figura 2.3 Reactor de Compresión Pulsada de doble cámara  
Fuente: Extraído de Kronberg (2008)

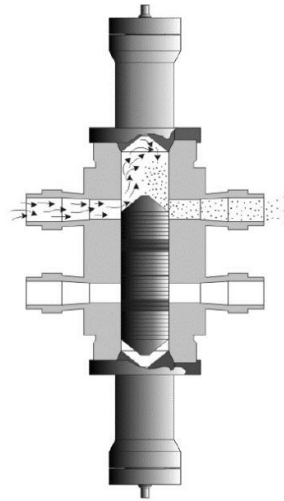


Figura 2.4 Reactor de Compresión Pulsada de una cámara

Fuente: Extraído de Kronberg (2008)

Las aplicaciones de este tipo de reactor las describe Kronberg (2008), y son las siguientes:

- Producción de Alquenos por deshidrogenación de parafinas
- Síntesis de Gas e Hidrogeno
- Destrucción térmica de impurezas que se descargan en escapes de procesos industriales (limpieza de aire) y compuestos tóxicos.
- Acetileno
- Óxido Nítrico
- Cianuro de Hidrógeno
- Generación controlada de nanopartículas cerámicas, metálicas y amorfas mono dispersas por descomposición térmica de precursores apropiados (compuestos de carbonilo y organometálicos, sales, etc.).

### 2.3.1 Compresión Adiabática

El método presentado por Kronberg (2008), utiliza un reactor de compresión pulsante de pistón libre, para lograr una compresión adiabática, entonces si se logra una compresión de gas sin pérdidas de calor, este va acompañado de aumentos de temperatura del gas, y si la compresión es suficientemente rápida, el proceso se acerca a uno adiabático. Al utilizar este método un ciclo completo no excede los 10 milisegundos, el periodo de tiempo con extremas temperaturas y presiones es alrededor de 1 milisegundo, este corto periodo hace

que el intercambio de calor entre el gas y las paredes del cilindro sea mínimo (Glouchenkov et al., 2002).

En este método, una mezcla de gases reactivos en un tubo es comprimido por un pistón libre que se mueve a una velocidad de 5-40 m/s (Kronberg, 2008). Se muestra una de las configuraciones en la Figura 2.5. Esta configuración es impulsada por la alta presión del gas (por ejemplo,  $N_2$ ) almacenado en un receptor de arranque. El pistón ejecuta solo una carrera de compresión gastando toda su energía cinética en la compresión y el calentamiento del gas. Luego, el gas comprimido caliente devuelve el pistón a la posición inicial y se detiene allí mediante un amortiguador.

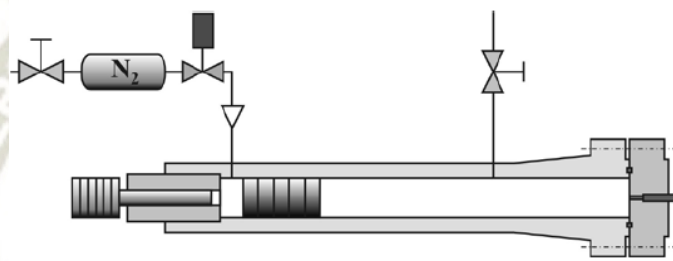


Figura 2.5 Compresor con pistón balístico

Fuente: Extraído de Kronberg (2008)

## 2.4 SELLOS DE LABERINTO

Un sello laberíntico es una estructura que consiste en múltiples cavidades donde el flujo circula dentro de ellas y debido a la fricción con las paredes, la energía cinética del fluido se disipa, de esta manera se reduce el flujo de fuga, en la Figura 2.6 se muestra la disposición de los sellos de laberinto dentro del PCR. Las ventajas de los sellos laberínticos son la simplicidad, la robustez y la idoneidad para altas presiones (Schaller et al., 2018). En lugar de anillos de pistón, los laberintos en el pistón están provistos de una gran cantidad de ranuras que producen un efecto de sellado laberíntico contra la pared del cilindro, que también está ranurada; el pistón se mueve con suficiente espacio libre, de modo que no se produce contacto entre este último y la pared del cilindro (Kläy, 1975).

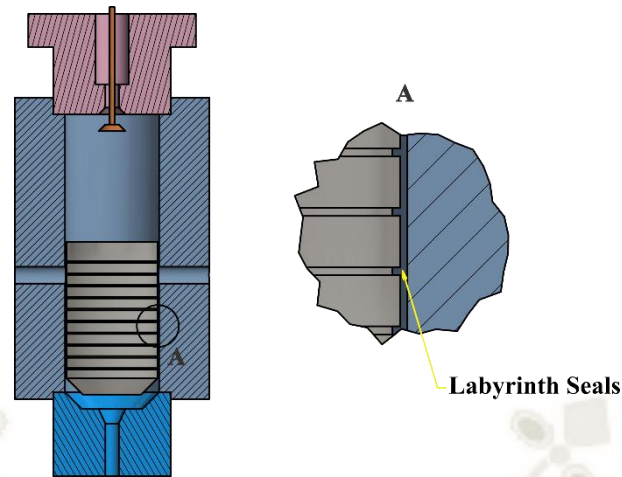


Figura 2.6 Esquema de PCR con sellos de laberinto

La acción de sellado del laberinto puede explicarse de la siguiente manera: debido a las diferencias de presión de una cámara a otra, el punto de estrangulamiento actúa como una boquilla para el gas; Parte de la energía de presión en la cámara anterior se convierte en energía cinética en la boquilla; en la siguiente cámara, la velocidad se retrasa casi hasta cero, y la energía cinética se disipa en parte como calor y se transforma en parte en energía de vórtice, Figura 2.7. Al proporcionar una sucesión de estos sistemas de punto de estrangulación y cámara, la presión se reduce desde el nivel alto antes del pistón al nivel bajo después de él (Graunke & Ronnert, 1984).

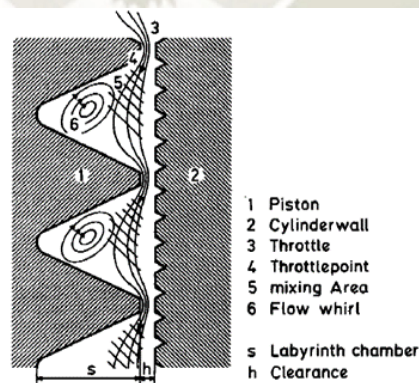


Figura 2.7 Flujo de fuga dentro del sello de laberinto

Fuente: Extraído de Graunke & Ronnert (1984)

El proceso de flujo en el laberinto puede describirse teóricamente mediante algunas ecuaciones diferenciales; además de la ecuación de estado de gas ideal, se han utilizado la

ecuación de continuidad, la ecuación de movimiento o la ley del impulso, y la ley de la conservación de la energía (Graunke & Ronnert, 1984).

## 2.5 DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

La dinámica de fluidos computacional o su abreviatura CFD en inglés es el análisis de sistemas que involucran el flujo de fluidos, la transferencia de calor y fenómenos relacionados, como las reacciones químicas, utilizando simulaciones por computadora. (Versteeg et al., 2007). Se ha convertido en una nueva rama que integra las disciplinas de la mecánica de fluidos no solo con las matemáticas, sino también con la informática (Tu et al., 2018), en la Figura 2.8, se muestra las áreas que alberga el CFD.

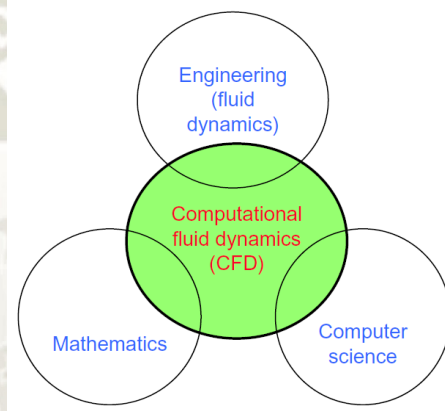


Figura 2.8 Las diferentes disciplinas que comprende la dinámica de fluidos computacional

Fuente: Extraído de Tu et al. (2018)

Un análisis CFD completo consta de tres elementos principales: Preprocesador, solucionador y postprocesador, esto se detalla en la Figura 2.9.

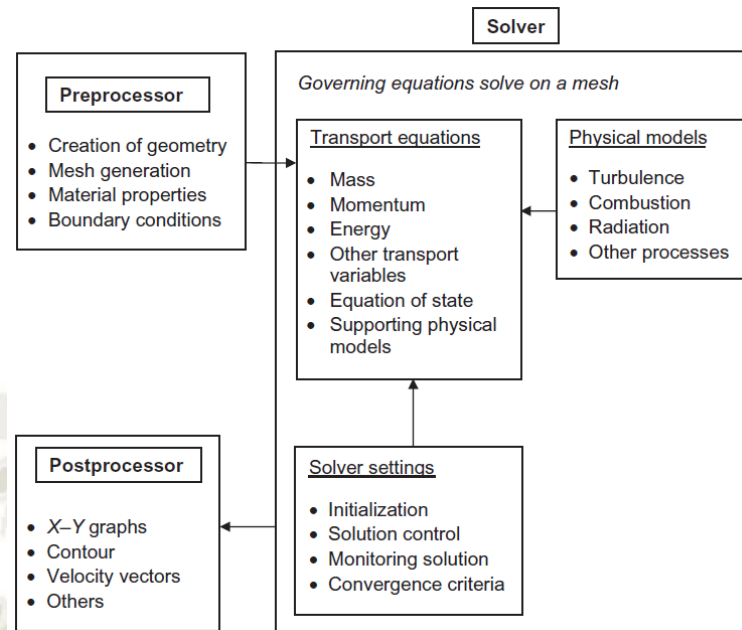


Figura 2.9 Las funciones de interconectividad de los tres elementos principales dentro de un marco de análisis CFD

Fuente: Extraído de Tu et al. (2018)

Los métodos de solución numéricos utilizados para la evaluación computacional de fluidos (CFD), se dividen en:

- a) **Método de Diferencias Finitas:** El método de diferencias finitas es el más antiguo para la solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales. En cada punto nodal de la cuadrícula usado para describir el dominio del flujo de fluido, las expansiones de la serie de Taylor se usan para generar aproximaciones de diferencia finita a las derivadas parciales de las ecuaciones gobernantes. En principio, las diferencias finitas se pueden aplicar a cualquier tipo de sistema de cuadrícula/rejilla (grid system). Sin embargo, el método se aplica más comúnmente a rejillas estructuradas, ya que requiere una malla que tenga un alto grado de regularidad (Tu et al., 2018).
- b) **Método de Volúmenes Finitos:** El método de volumen finito discretiza la forma integral de las ecuaciones de conservación directamente en el espacio físico. El dominio computacional se divide en un número finito de bloques de control contiguos, donde los estados resultantes expresan la conservación exacta de propiedades relevantes para cada uno de los volúmenes de control. En el centroide

de cada uno de los volúmenes de control, se calculan los valores de las variables. Como el método de volumen finito funciona con volúmenes de control y no con los puntos de intersección de la cuadrícula, es capaz de adaptarse a cualquier tipo de rejilla (grid). Aquí, en lugar de cuadrículas estructuradas, se pueden emplear cuadrículas no estructuradas que permiten una gran cantidad de opciones para la definición de la forma y ubicación de los volúmenes de control (Tu et al., 2018).

- c) Método de Elementos Finitos: Este método es similar al de volúmenes finitos. Tanto el método de elementos finitos como el de volumen finito son adecuados para dominios computacionales irregulares, lo que significa que pueden adaptarse a geometrías complejas. Una característica distintiva del método de elementos finitos es que las ecuaciones que gobiernan primero se aproximan por multiplicación con las llamadas funciones de forma antes de que se integren en todo el dominio computacional (Tu et al., 2018).



## Capítulo 3

### OPTIMIZACIÓN NUMÉRICA DE SELLOS DE LABERINTO

El presente estudio incluye principalmente dos etapas características. La primera etapa incluye la creación de la geometría hasta obtener el flujo másico de fuga de un modelo base. En la segunda etapa se lleva a cabo la correlación de parámetros y la optimización de la geometría para evaluar la menor fuga de gas. Estas etapas se realizan para cada una de las formas geométricas propuestas (triangular, rectangular y trapezoidal).

Para realizar esta investigación fueron elegidos los programas de ANSYS, Inc. Esta empresa desarrolla, comercializa y respalda programas de simulación para ingeniería que se utiliza para predecir cómo se comportarán los diseños de productos en entornos del mundo real (ANSYS Inc, 2020a). Los programas empleados son los siguientes: ANSYS Workbench, SpaceClaim Direct Modeler, Meshing, Fluent, CFD-Post y la aplicación DesingXplorer, Figura 3.1.

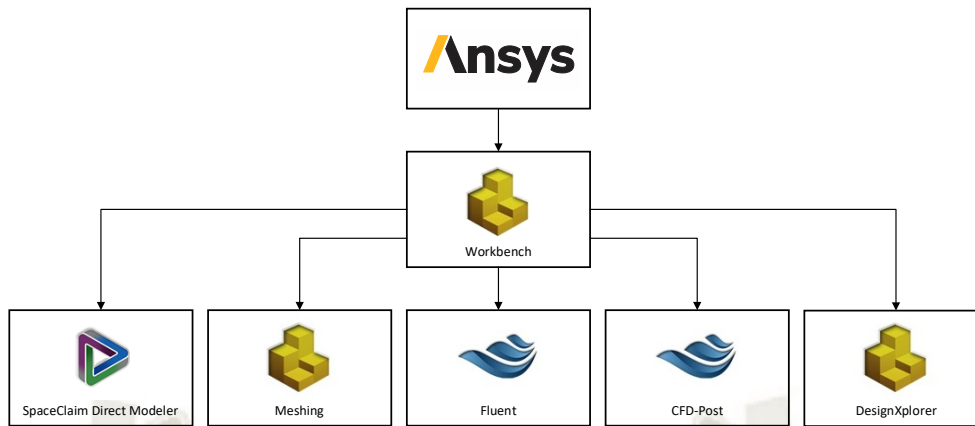


Figura 3.1 Programas pertenecientes a ANSYS empleados en el presente estudio

### 3.1 METODOLOGÍA

#### 3.1.1 Geometría

Las formas de sellos de laberinto a evaluar fueron triangular, rectangular y trapezoidal, como se muestra en la Figura 3.2. Para cada uno de ellos se analizó los parámetros geométricos que definen su forma por completo. Estos parámetros son el diámetro del pistón, la longitud del pistón, el espacio radial entre el cilindro y el pistón (gap), la longitud de la cavidad, la profundidad de la cavidad, el ángulo de la cavidad y la distancia entre cavidades. En este estudio el diámetro del pistón y el gap fueron considerados constantes y tienen los valores de 60 mm y 40  $\mu\text{m}$  respectivamente, Tabla 3.1. Los demás parámetros pueden variar dentro de los valores límite indicados en la Tabla 3.2.

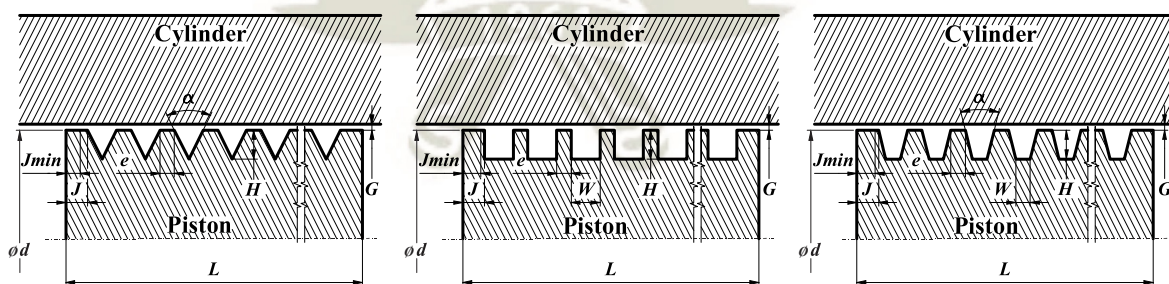


Figura 3.2 Definición de geometría para formas triangulares, rectangulares y trapezoidales

Dado que el objetivo principal es optimizar los parámetros geométricos para cada configuración seleccionada (triangular, rectangular y trapezoidal), es necesario crear una geometría paramétrica, por lo que se observa que no es factible crear una geometría paramétrica directa para este estudio. Es posible especificar directamente algunos valores

geométricos como parámetros en el programa CAD, pero no es viable parametrizar el número de cavidades como valores variables en un objeto bidimensional. Sin embargo, el proceso de optimización se puede completar cambiando manualmente el número de cavidades de la geometría cada vez y volviendo a dibujar la geometría, lo que resultará en una gran cantidad de tiempo dedicado a generar nueva geometría, y también se extenderá a las otras dos configuraciones.

Tabla 3.1 Parámetros constantes para una geometría de cavidad determinada

Diámetro del pistón $\varnothing d$ [mm]	Espacio radial entre el cilindro y el pistón (gap) $G$ [ $\mu\text{m}$ ]	Longitud mínima libre inicial y final $J_{min}$ [mm]
60	40	2

Tabla 3.2 Parámetros variables para una geometría de cavidad determinada

Longitud del pistón $L$ [mm]	Ancho de la cavidad $W$ [mm]	Profundidad de la cavidad $H$ [mm]	Angulo de la cavidad $\alpha$ [ $^{\circ}$ ]	Distancia entre cavidades $e$ [mm]	Longitud libre inicial y final $J$ [mm]
30.0 - 150.0	0.5 - 5.0	0.5 - 5.0	30 - 75 $^{\circ}$	1.0 5.0	$J \geq J_{min}$

Es por ello por lo que se decidió automatizar el proceso mediante scripts, ya que reduce el tiempo empleado en modificar la geometría. El programa elegido fue CAD ANSYS SpaceClaim Direct Modeler, porque presenta un entorno de desarrollo amigable, además que facilita el flujo de trabajo porque tiene una buena interacción con los demás programas empleados. Se desarrolló un script en el lenguaje de programación Python para cada una de las formas de los sellos laberínticos, el diagrama de flujo se muestra en la Figura 3.3. Todos los parámetros se definen dentro de los límites mostrados en la Tabla 3.2, tomando solo valores fabricables.

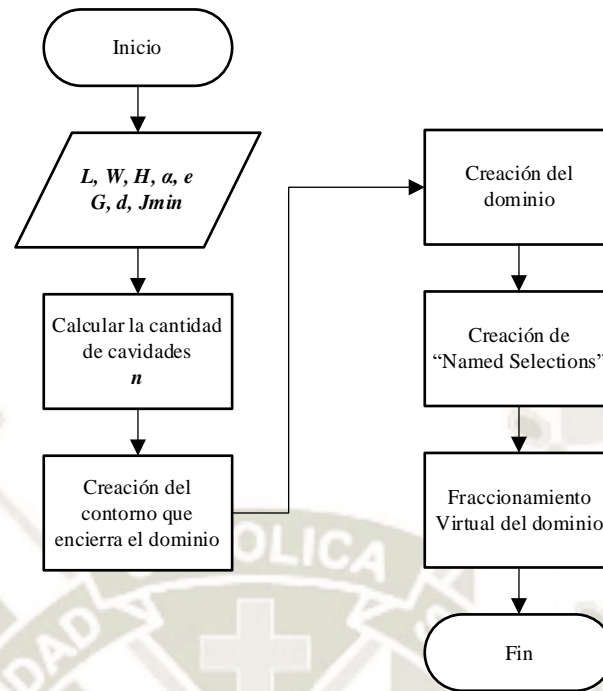


Figura 3.3 Diagrama de flujo para la creación de la geometría

Las geometrías generadas por los scripts son geometrías bidimensionales que representan el dominio del fluido como se muestra en la Figura 3.4 donde (a) triangular, (b) rectangular, (c) trapezoidal. Estas geometrías además presentan un seccionado virtual, es decir, no es un corte que no implica un significado físico como la presencia de una pared, una superficie de intercambio de condiciones o similar, el motivo de este para poder realizar un mejor mallado del dominio, Figura 3.6. Se decidió utilizar geometrías bidimensionales para el estudio, debido a que se espera que el fluido presente un comportamiento axisimétrico. Este comportamiento reduce los recursos computacionales, en comparación con un estudio tridimensional.

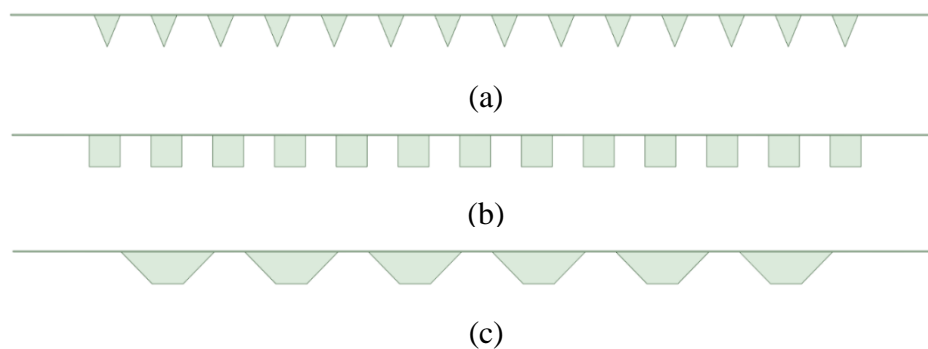


Figura 3.4 Geometría generadas por los códigos de programación realizados

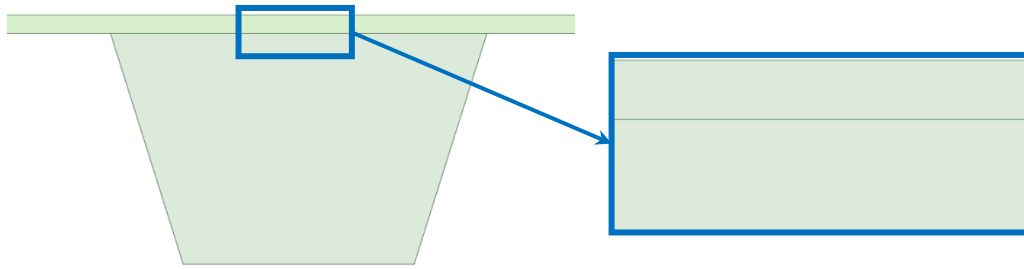


Figura 3.5 Seccionado virtual de la geometría

### 3.1.2 Mallado

El mallado representa un aspecto importante dentro del estudio porque un mallado inadecuado puede provocar problemas de convergencia durante el proceso de simulación. Este consiste en una disposición de un número discreto de puntos que se superponen a toda la geometría del dominio. A través de la subdivisión de este dominio, se genera un número de mallas más pequeñas o celdas de rejilla (grid cells), (Tu et al., 2018).

Los criterios para generar el mallado fueron: relación de aspecto, Calidad Ortogonal (Orthogonal Quality)  $OQ \approx 1$ , y la distancia adimensional a la pared  $y^+ \approx 30-300$ . Teniendo esto en consideración, el mallado se realizó empleando uno estructurado multi bloque con elementos mayoritariamente cuadriláteros y una minoría de elementos triangulares, tomando como tamaño de elemento base de  $20 \mu\text{m}$ , para el espacio radial entre el cilindro y el pistón (gap), adicionalmente se realizó un dimensionamiento de borde (Edge sizing) con un número de divisiones de 30 con un sesgo (bias) que tiene un factor de 3, para un patrón de acumulamiento de elementos en los extremos, como se muestra en la Figura 3.6, donde (a) triangular, (b) rectangular, (c) trapezoidal.

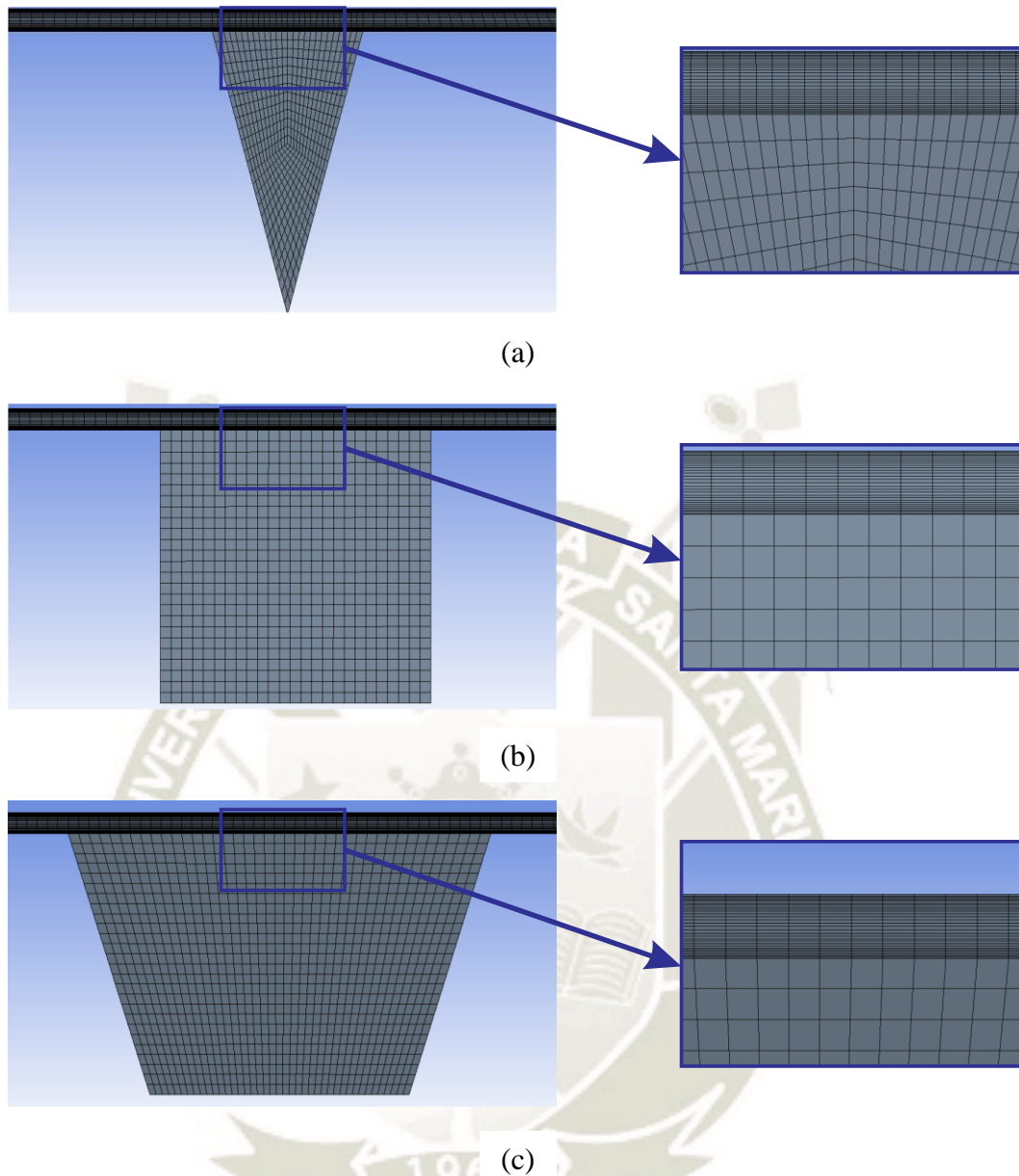


Figura 3.6 Mallado del dominio del fluido para cada una de las tres configuraciones estudiadas

### 3.1.3 Simulación Numérica

Se utilizó el programa ANSYS Fluent para el análisis de fluidos de las tres formas de sello de laberinto propuestas. Dentro del programa, el tipo de simulador se configuró como: basado en presión y además se definió un análisis axisimétrico. Se eligió el modelo de viscosidad k- $\epsilon$  Realizable, ya que mostró una mejor convergencia en comparación con las otras variaciones del modelo k- $\epsilon$  y los modelos k- $\omega$ . Además, la Guía Teórica del programa recomienda este modelo en los casos en que las características de flujo incluyen

vórtices (ANSYS Inc, 2020c). La Tabla 3.3 muestra la configuración del comportamiento del fluido colocado en ANSYS Fluent.

Tabla 3.3 Definición de los parámetros y modelos para el comportamiento del fluido

Modelo del gas	Modelo de Turbulencia	$C_2$	$\sigma_k$	$\sigma_\epsilon$
Gas ideal (piecewise-polynomial)	$k-\epsilon$ Realizable	1.9	1.0	1.2

La Tabla 3.4 y la Figura 3.7, muestran las condiciones de contorno (CC). Este proyecto de investigación se centra en la compresión de metano, por lo cual el metano se utiliza como gas compresible, con una presión estática manométrica de entrada de 10 MPa, una presión manométrica de salida de 0 MPa (atmosférica) y una velocidad del pistón de 25 m/s.

Tabla 3.4 Definición de las Condiciones de Contorno del modelo

Gas	Entrada CC	Salida CC	Velocidad Pistón $V_P$
Metano, $CH_4$ (gas compresible)	$P_{in}=10$ MPa @ 300 K	Atmosfera 0 MPa @ 300 K	25 m/s

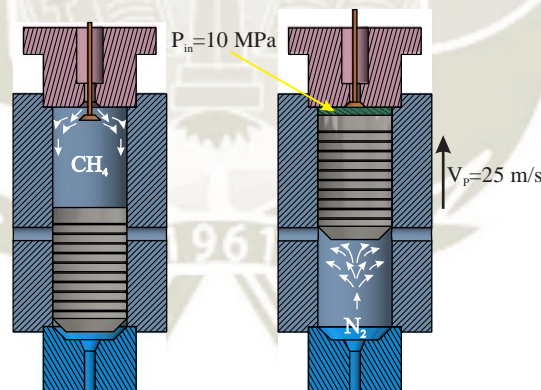


Figura 3.7 Esquema de PCR con las Condiciones de Contorno del modelo

Para el caso de las CC en la entrada (presión de entrada), se vio que el fluido dentro del dominio exhibía un comportamiento supersónico llegando a valores de Mach alrededor de 1.2 para las condiciones dadas, y esto conlleva a problemas de convergencia, ya que las CC colocadas están configuradas para un comportamiento subsónico, esto se muestra en la Figura 3.8, donde (a) Convergencia de residuales y (b) convergencia del flujo másico de fuga. Es por esta razón que se tuvo que reconfigurar la CC en la entrada, añadiendo una presión estática inicial llamada dentro del programa como “Supersónica/Presión

manométrica inicial”, con un valor de 0,95 veces la presión estática manométrica de 10 MPa. Además, se colocó la condición "Prevenir flujo inverso" en la entrada, Figura 3.9. Para la inicialización se configuró como “Standard Initialization” basado en las CC de la entrada.

El número de iteraciones para cada simulación se limitó a 1500 iteraciones, lo que muestra que para este número la convergencia fue aceptable obteniendo residuales del orden de  $10^{-3}$  y  $10^{-4}$ , Figura 3.10, donde (a) triangular; (b) rectangular; (c) trapezoidal. Este límite de iteraciones también se ve justificado con la convergencia del Flujo másico de fuga que muestra que se estabiliza en un valor determinado, estos valores cambian dependiendo de la geometría evaluada, Figura 3.11.

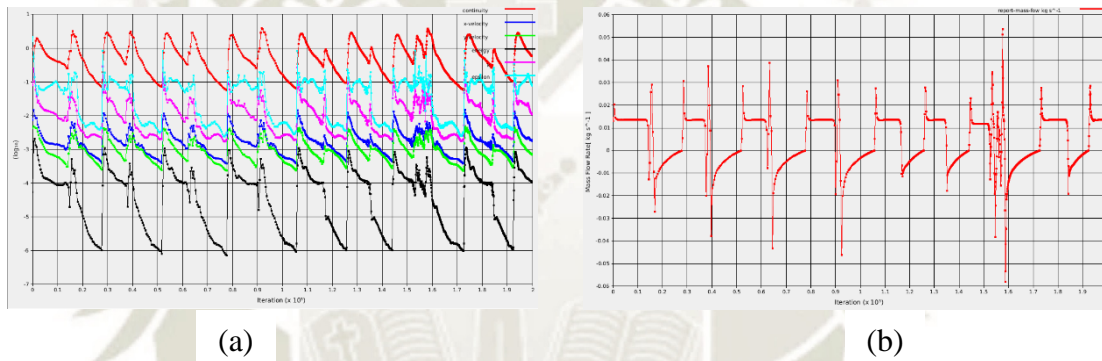


Figura 3.8 Problemas de convergencia durante el proceso de simulación

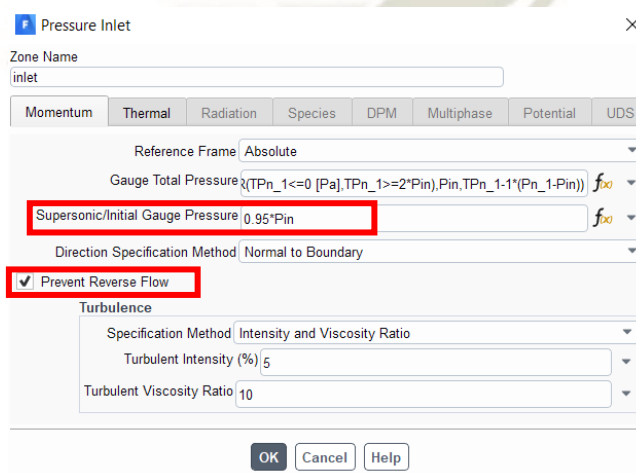


Figura 3.9 Reconfiguración de las condiciones de contorno en la entrada

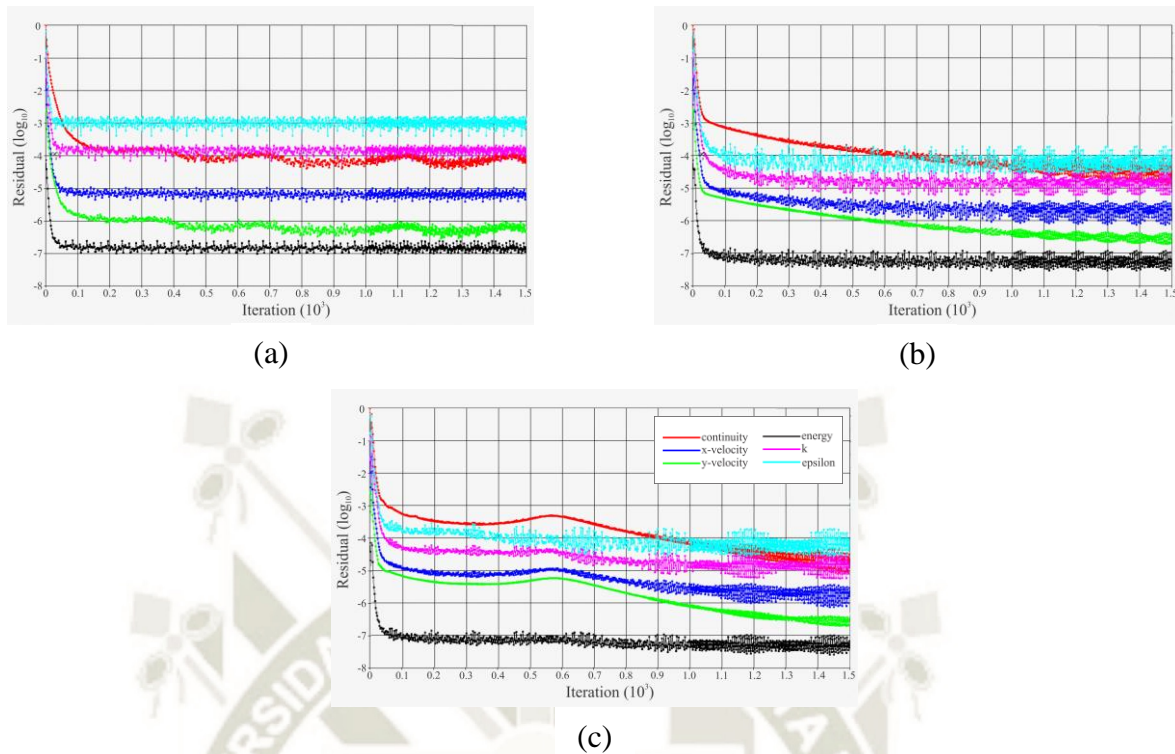


Figura 3.10 Convergencia de Residuales para cada una de las formas de sello de laberinto estudiadas

## 3.2 RESULTADOS

En esta sección se presentarán los resultados obtenidos después de realizar la simulación numérica y la optimización para las tres configuraciones estudiadas y además también se presentará la comparación con una configuración sin sellos de laberinto (pistón liso).

### 3.2.1 Sellos de laberinto Triangulares

#### a) Correlación de parámetros:

Este estudio fue realizado en función del flujo másico de fuga, el cual es el parámetro de salida luego de la simulación numérica. Se eligió el método de Spearman, con un rango de 50 muestras por forma de cavidad. Cada una de las muestras se determinó con base a los límites de cada parámetro geométrico, Tabla 3.1. Se obtuvo la sensibilidad de cada parámetro (longitud del pistón, la profundidad de la cavidad, el ángulo de la cavidad y la distancia entre cavidades), y sus valores se muestran en la Figura 4.1. El parámetro más sensible de la forma geométrica triangular es la longitud del pistón. El coeficiente de determinación de la regresión cuadrática R<sup>2</sup> del flujo másico de fuga obtenido fue 0.97.

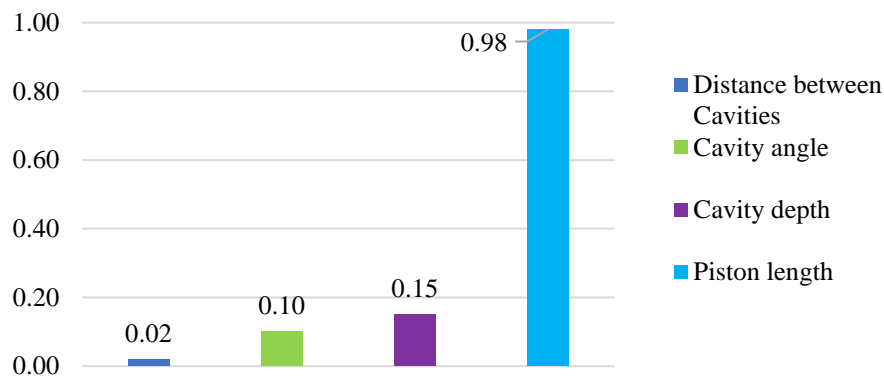


Figura 3.11 Sensibilidad de parámetros forma triangular

## b) Superficie de Respuesta:

Para determinar un modelo matemático de flujo másico de fuga aproximado, con los parámetros geométricos como variables de entrada, se realizó un ajuste de superficie (Surface fitting). Se utilizó el método de Agregación Genética (Genetic Agregation) dentro de Response Surface de ANSYS, como parte de los datos de entrada, se tomaron las 50 muestras anteriores, utilizadas en la correlación de parámetros, adicionalmente se agregaron puntos de refinamiento principalmente con los valores límite de los parámetros, para mejorar la superficie. En la Figura 4.2, también se observa de forma gráfica lo determinado en la sección anterior de la sensibilidad, siendo el segundo más sensible, la profundidad de cavidad; cabe resaltar que las superficies mostradas, son parte de familias de superficies que se obtienen luego de Response Surface, ya que se tienen 4 parámetros independientes en la forma triangular (a) distancia entre cavidades, (b) profundidad de la cavidad, (c) ángulo de cavidad y la longitud del pistón. El Coeficiente de Determinación  $R^2$  de Puntos de Aprendizaje (calidad de la interpolación) y Validación Cruzada en Puntos de Aprendizaje (estabilidad o confiabilidad de la superficie de respuesta) en Puntos de Aprendizaje es 1-1.

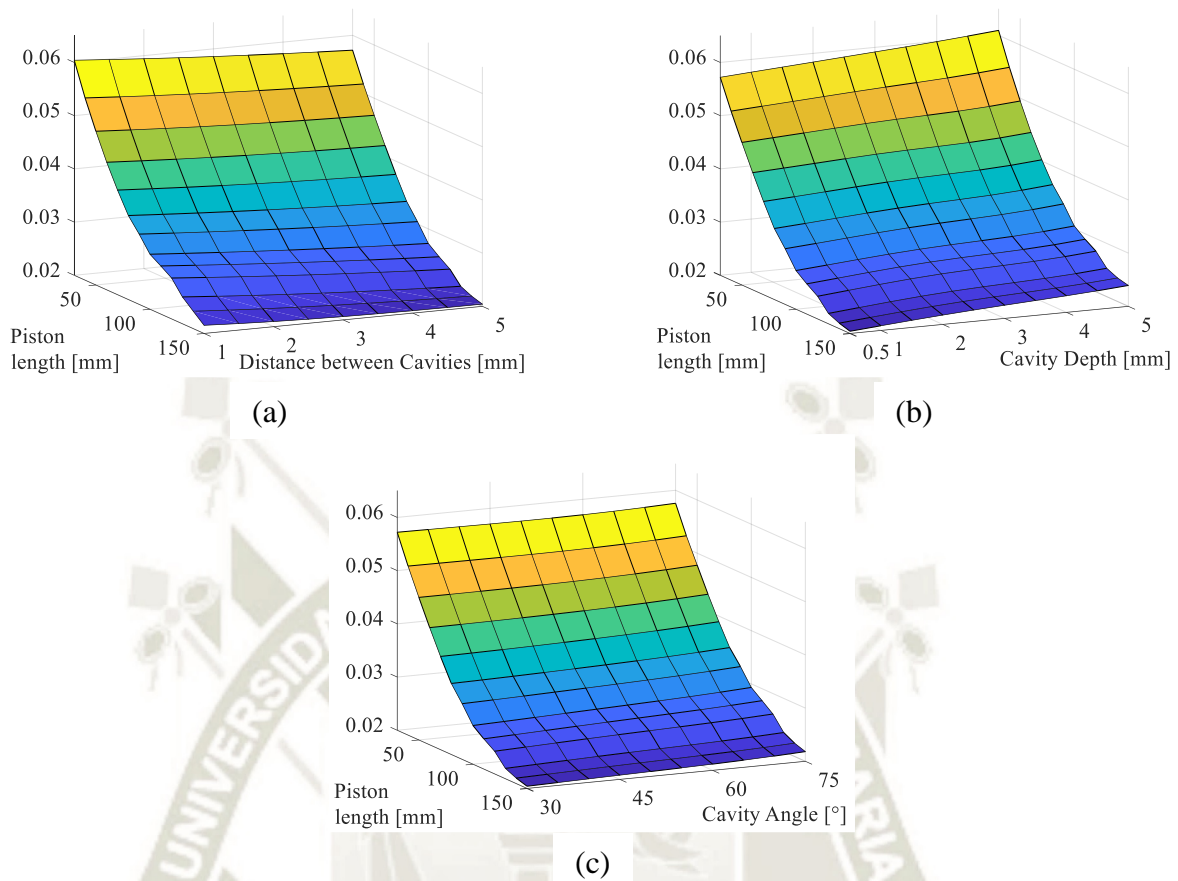


Figura 3.12 Flujo másico de fuga en función de los parámetros geométricos de la forma triangular

#### c) Optimización:

Para la optimización de los parámetros geométricos minimizando la fuga de gas se utilizó el método del Algoritmo Genético Multiobjetivo o MOGA, por sus siglas en inglés. Las Condiciones Máximas Permisibles de Porcentaje de Pareto MAPP y el Porcentaje de Estabilidad Convergente CSP se establecieron en 70% y 2%, respectivamente. La optimización se llevó a cabo basándose en el ajuste de superficie realizado anteriormente, utilizando la herramienta ANSYS DesignXplorer. Se consideraron tres candidatos de optimización, seguidamente se realizó una verificación, simulando cada uno de los tres candidatos.

Tabla 3.5 Candidatos resultantes de la optimización para la forma triangular

Nombre	Profundidad de la cavidad $H$ [mm]	Angulo de la cavidad $\alpha$ [°]	Distancia entre cavidades $e$ [mm]	Longitud del pistón $L$ [mm]	Flujo masico de fuga $\dot{m}$ [kg/s]
Candidato 1	0.5	30	5.0	150	0.02041
Candidato 1 (verificado)					0.02045
Candidato 2	0.5	30	4.0	150	0.02046
Candidato 2 (verificado)					0.02071
Candidato 3	0.5	35	5.0	150	0.02054
Candidato 3 (verificado)					0.02065

d) Análisis:

En la Figura 3.13 se muestra los vectores de velocidad para la forma triangular, se observó que en (a) la primera cavidad se desarrolla un único vórtice, este comportamiento se observa hasta aproximadamente la mitad de la longitud del pistón, en donde a partir de ahí se empieza a formar aparte del vórtice primario otros vórtices secundarios menores generados por el vórtice principal debajo de este, en (b) la última cavidad se puede visualizar este fenómeno. Algo que se presenta en todos los vórtices es que estos tienen su centro desplazado ligeramente a la derecha (en la dirección del flujo). Además, se observa que en estado estacionario el fluido dentro de la cavidad se mantiene aprisionado por el fluido que pasa por el gap, esto indica que el fluido que se encuentra dentro de las cavidades ingresa a ella cuando se está en el periodo transitorio. La turbulencia se genera en la entrada y salida de la cavidad, causada por la interacción entre el gas que se encuentra dentro de la cavidad y el gas del gap, respectivamente.

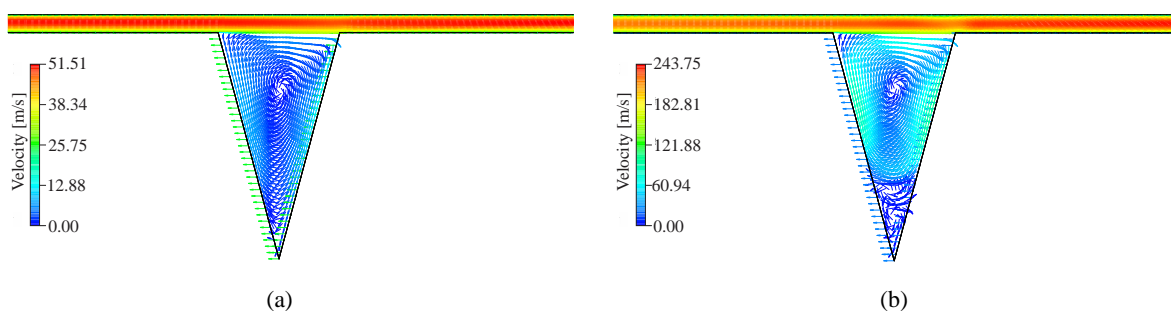


Figura 3.13 Vectores de velocidad en la primera y última cavidad de forma triangular

En la Figura 3.14 se muestra los perfiles de velocidad que se forma dentro del gap, estos perfiles de velocidad se encuentran un poco deformados debido al pistón, la velocidad es cero en la pared del cilindro (que permanece estática) y negativa en la pared del pistón (que se mueve en sentido opuesto al flujo). Además, se observa que la velocidad del fluido se va incrementando a lo largo del gap. La curva de color rojo representa el perfil de velocidad a una distancia axial de 1 mm desde la entrada, la curva verde representa el perfil de velocidad a la mitad de la longitud del pistón, la curva azul es a la salida de la última cavidad y finalmente la curva negra es a un milímetro de la salida.

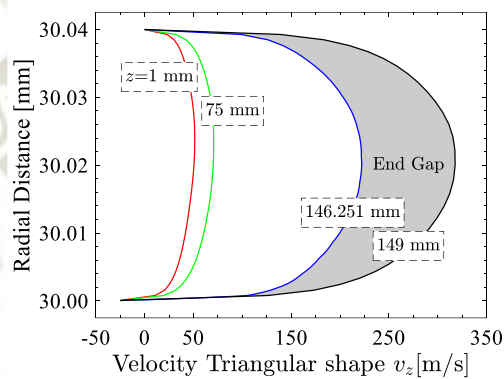


Figura 3.14 Perfil de Velocidad de la forma triangular

La Figura 3.15 muestra la (a) caída de presión a lo largo del pistón, así como (b) el aumento de la energía cinética de turbulencia. La caída de presión en una primera parte presenta un comportamiento casi lineal, en donde no se muestran grandes caídas de presión, a partir de los 90 mm y representa aproximadamente el 59,86% de la caída de presión total. A lo largo de la curva de energía cinética de la turbulencia hay algunos picos para cada caso, estos picos representan el efecto que tiene sobre el fluido a la entrada de cada cavidad. De la misma forma, se pueden observar picos de menor tamaño sobre la curva de presión, que hace notar la influencia las cavidades en el gap.

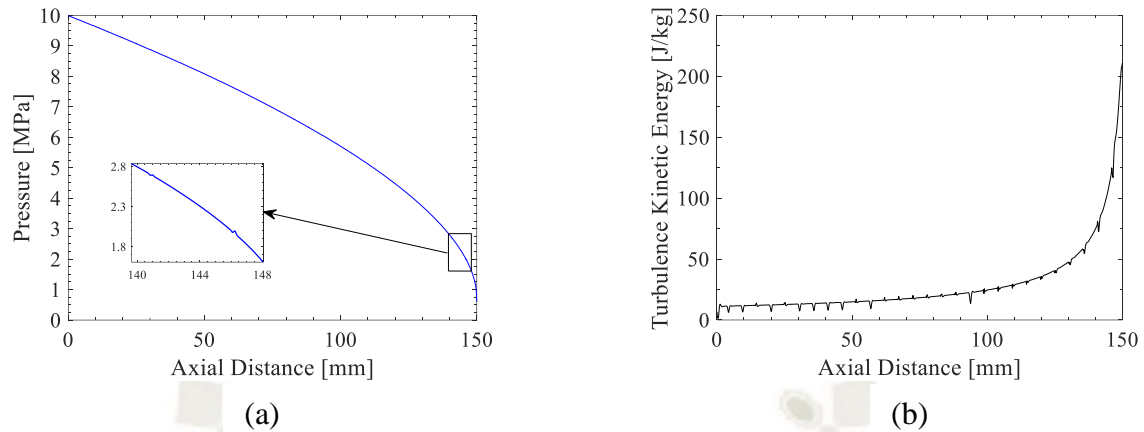


Figura 3.15 Caída de presión e incremento de la energía cinética de turbulencia forma triangular

### 3.2.2 Sellos de laberinto Rectangulares

a) Correlación de parámetros:

De igual forma, como se especificó en el caso triangular, la cantidad de muestras fue de 50, los parámetros de la forma rectangular son (la longitud del pistón, la profundidad de la cavidad, la longitud de la cavidad y la distancia entre cavidades), sus valores se muestran en la Figura 4.6. El parámetro más sensible de la forma geométrica rectangular es la longitud del pistón con un valor de 0.83, seguido por la distancia entre cavidades con 0.20. El coeficiente de determinación de la regresión cuadrática  $R^2$  del flujo másico de fuga obtenido fue de 0.78.

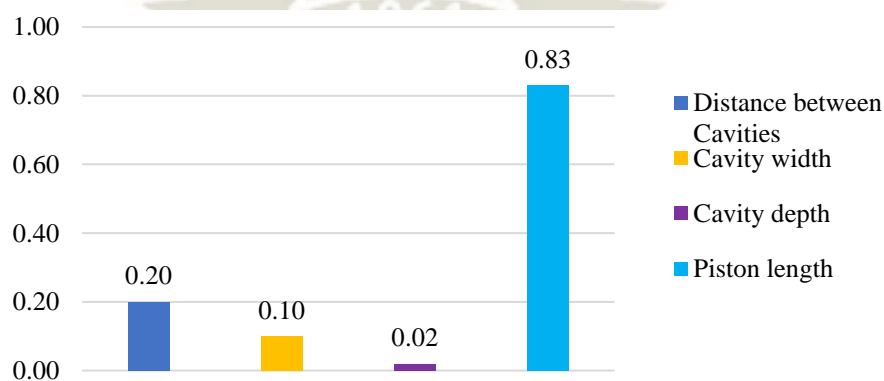


Figura 3.16 Sensibilidad de parámetros forma rectangular

b) Superficie de Respuesta:

Se realizó el ajuste de superficie empleando como parte de los datos de entrada, se tomaron las 50 muestras anteriores, utilizadas en la correlación de parámetros,

adicionalmente se agregaron puntos de refinamiento, principalmente con los valores límite de los parámetros, para mejorar la superficie. En la Figura 4.7 se observa de forma gráfica lo determinado en la sección anterior de la sensibilidad, siendo el segundo más sensible el ancho de cavidad; de igual forma cabe resaltar que las superficies mostradas, son parte de familias de superficies que se obtienen luego de Response Surface, ya que se tienen 4 parámetros independientes en la forma rectangular (a) distancia entre cavidades, (b) profundidad de la cavidad, (c) ancho de cavidad y la longitud del pistón. El Coeficiente de Determinación  $R^2$  de Puntos de Aprendizaje y Validación Cruzada en Puntos de Aprendizaje es 1-0,98 en la forma rectangular.

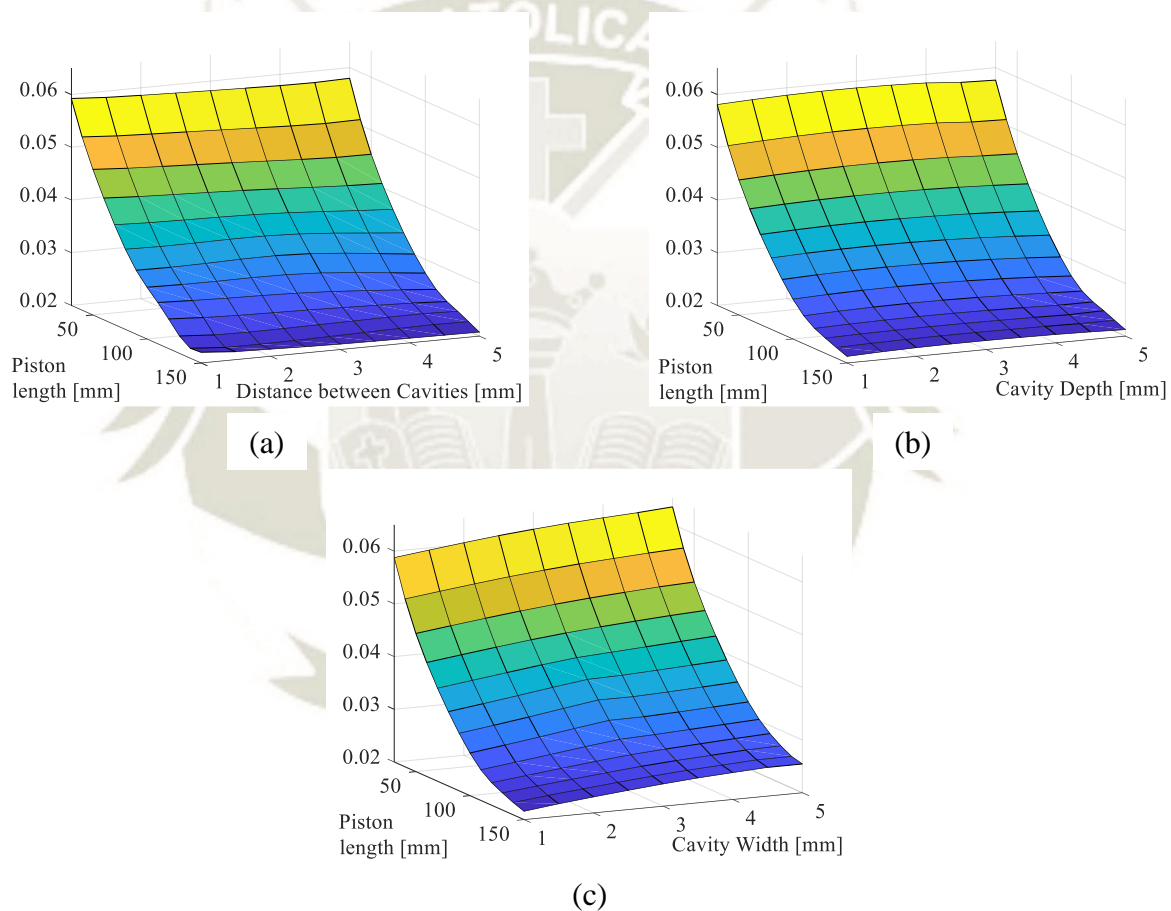


Figura 3.17 Flujo masico de fuga en función de los parámetros geométricos de la forma rectangular

c) Optimización:

Para la optimización de los parámetros geométricos minimizando la fuga de gas se utilizó el método MOGA. Las Condiciones Máximas Permisibles de Porcentaje de Pareto MAPP y el Porcentaje de Estabilidad Convergente CSP se establecieron en 70% y 2%,

respectivamente. Los candidatos de optimización y su verificación se muestran en la Tabla 3.6.

Tabla 3.6 Candidatos resultantes de la optimización para la forma rectangular

Nombre	Profundidad de la cavidad $H$ [mm]	Ancho de la cavidad $W$ [mm]	Distancia entre cavidades $e$ [mm]	Longitud del pistón $L$ [mm]	Flujo masico de fuga $\dot{m}$ [kg/s]
Candidato 1	0.5	0.5	5.0	150	0.02076
Candidato 1 (verificado)					0.02076
Candidato 2	0.5	0.5	4.5	150	0.02081
Candidato 2 (verificado)					0.02081
Candidato 3	0.5	0.5	4.0	150	0.02088
Candidato 3 (verificado)					0.02088

d) Análisis:

En la Figura 3.18 se muestra los vectores de velocidad para la forma rectangular, se observó la forma de los vórtices en la (a) primera y (b) última cavidad. Estas mantienen la misma estructura, no se presencia el fenómeno que se presentó en el caso de la cavidad de forma triangular. Las otras características y/o fenómenos que se describieron en el caso de la forma triangular si las comparten con la forma rectangular, como el centro del vórtice principal se encuentra ligeramente desplazado hacia la derecha, también que el gas dentro de la cavidad es encuentra aprisionado por el gas que pasa por el gap y que la turbulencia se genera en la entrada y salida de la cavidad.

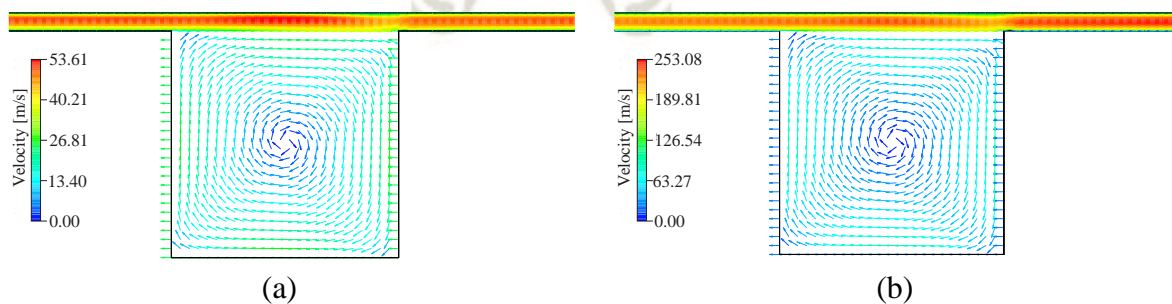


Figura 3.18 Vectores de velocidad en la primera y última cavidad de forma rectangular

En la Figura 3.19 se muestra los perfiles de velocidad que se forman dentro del gap en la forma rectangular, estos perfiles mantienen una similitud con los perfiles mostrados en la

Sección 4.1.4 en la cual se analiza el fluido en la cavidad de forma triangular. Se nota una pequeña diferencia entre el perfil de velocidad rectangular y triangular a la altura de la última cavidad, en donde en el caso rectangular se encuentra un poco más deformado.

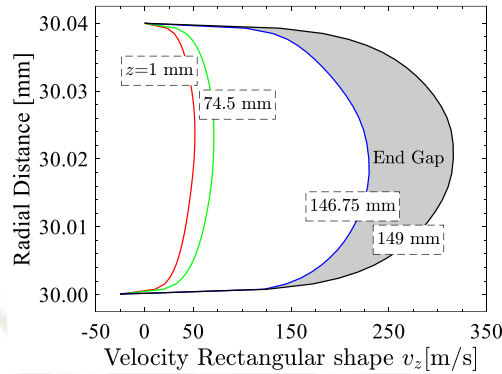


Figura 3.19 Perfil de Velocidad de la forma rectangular

En la Figura 4.10 se muestra (a) la caída de presión a lo largo del pistón, así como (b) el aumento de la energía cinética de turbulencia dentro de los sellos de laberinto rectangulares. En este caso la caída de presión muestra un comportamiento similar a la cavidad triangular, solo que presenta un conjunto de picos más notorios. En el caso de la curva de TKE se nota más claramente que en la forma rectangular se tienen picos y valles, estos últimos siendo los más notorios (mayor amplitud) que los picos.

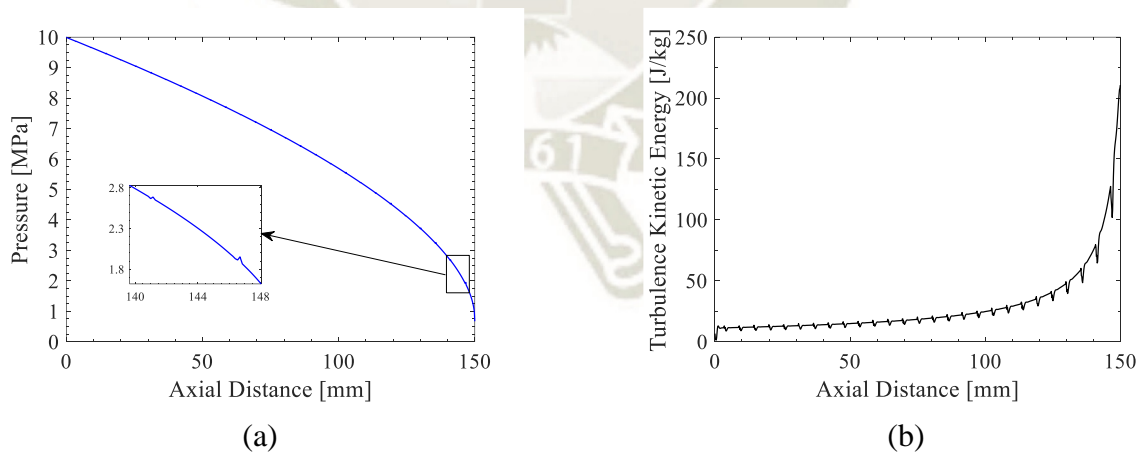


Figura 3.20 Caída de presión e incremento de la energía cinética de turbulencia forma triangular

### 3.2.3 Sellos de laberinto Trapezoidales

a) Correlación de parámetros:

Continuando con la forma trapezoidal, la cantidad de muestras fue de 50, los parámetros de la forma rectangular son (la longitud del pistón, la profundidad de la cavidad, el ángulo de cavidad, la longitud de la cavidad y la distancia entre cavidades), sus valores se muestran en la Figura 3.21. El parámetro más sensible de la forma geométrica trapezoidal también resulto ser la longitud del pistón con un valor de 0.93, seguido por la distancia entre cavidades con 0.48. El coeficiente de determinación de la regresión cuadrática  $R^2$  del flujo másico de fuga obtenido fue de 0.79.

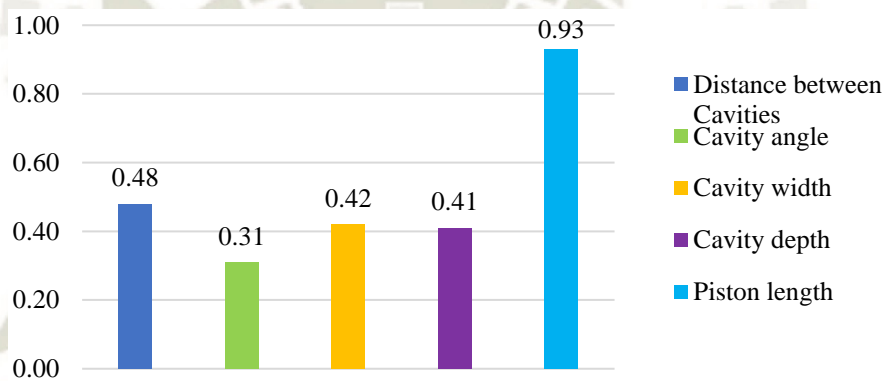


Figura 3.21 Sensibilidad de parámetros forma trapezoidal

b) Superficie de Respuesta:

Continuando con la superficie de respuesta, el procedimiento de muestras es el mismo, también se agregaron puntos de refinamiento principalmente con los valores límite de los parámetros. En la Figura 3.22 se observa de forma gráfica lo determinado en la sección anterior de la sensibilidad, siendo el segundo más sensible la distancia entre cavidades, para la configuración trapezoidal se tienen 5 parámetros independientes (a) distancia entre cavidades, (b) profundidad de la cavidad, (c) ancho de cavidad, (d) ángulo de cavidad y la longitud del pistón. El Coeficiente de Determinación  $R^2$  de Puntos de Aprendizaje y Validación Cruzada en Puntos de Aprendizaje es 1-0.99 en la forma trapezoidal.

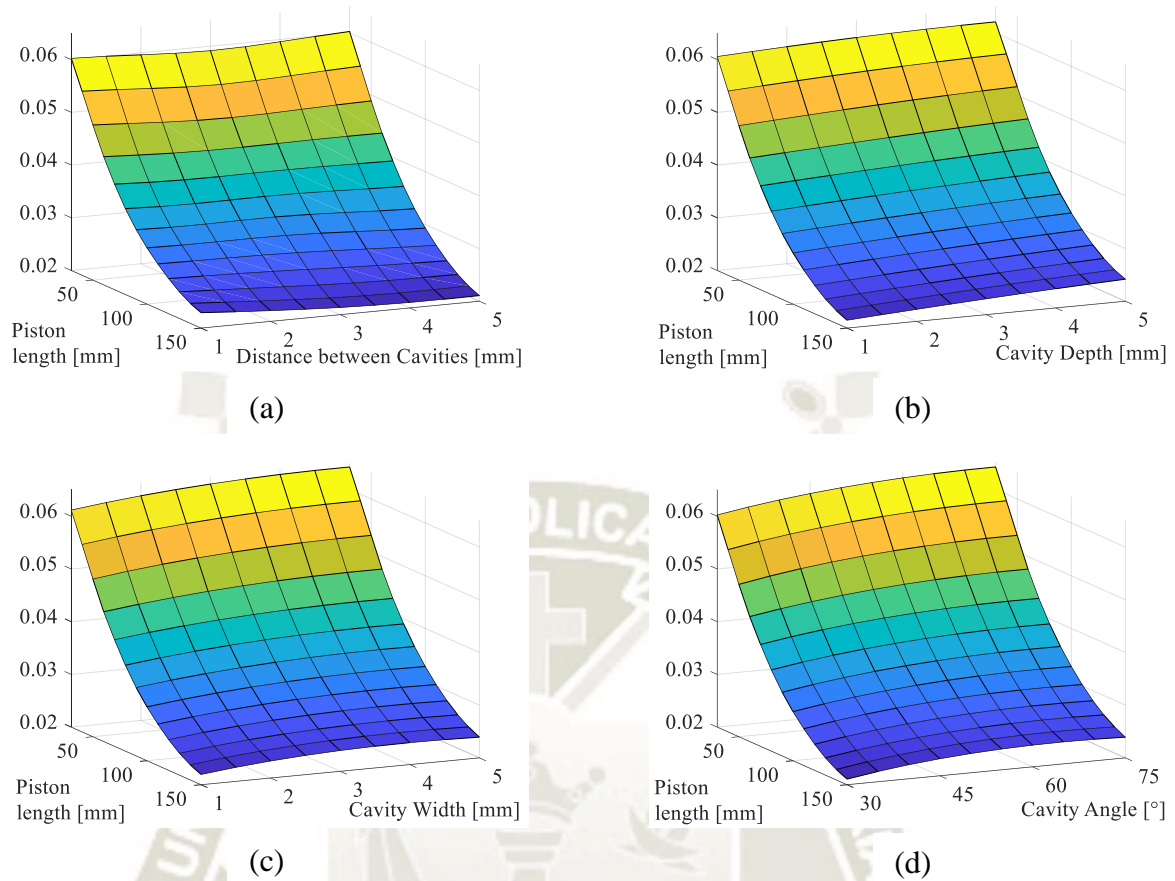


Figura 3.22 Flujo masico de fuga en función de los parámetros geométricos de la forma trapezoidal

c) Optimización:

En este caso, las Condiciones Máximas Permisibles de Porcentaje de Pareto MAPP y el Porcentaje de Estabilidad Convergente CSP también fueron establecidas en 70% y 2%, respectivamente. Los candidatos de optimización y su verificación se muestran en la Tabla 3.7.

Tabla 3.7 Candidatos resultantes de la optimización para la forma trapezoidal

Nombre	Profundidad de la cavidad	Angulo de la cavidad	Ancho de la cavidad	Distancia entre cavidades	Longitud del pistón	Flujo masico de fuga
	$H$ [mm]	$\alpha$ [°]	$W$ [mm]	$e$ [mm]	$L$ [mm]	$\dot{m}$ [kg/s]
Candidato 1						0.02062
Candidato 1 (verificado)	0.5	50	0.5	5.0	150	0.02138
Candidato 2						0.02104
Candidato 2 (verificado)	0.5	35	0.5	4.5	150	0.02012
Candidato 3						0.02086
Candidato 3 (verificado)	0.5	40	0.5	4.0	150	0.02132

d) Análisis:

En la Figura 3.23 se muestra los vectores de velocidad para la forma trapezoidal, se observó la forma de los vórtices en la (a) primera y (b) última cavidad. Estas mantienen la misma estructura, similar al caso rectangular. Algo notorio respecto a los otros dos casos anteriores es que la velocidad máxima en el mismo espacio que alberga la primera cavidad es la mayor con un valor de 56.88 m/s, algo similar pasa en la última cavidad, pero ahora la máxima velocidad del espacio en el cual se encuentra la última cavidad es la mínima respecto a las otras dos configuraciones con un valor de 217.14 m/s.

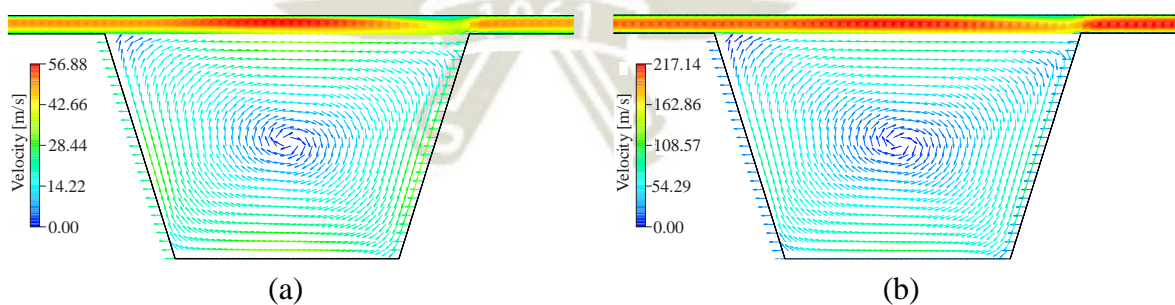


Figura 3.23 Vectores de velocidad en la primera y última cavidad de forma trapezoidal

El perfil de velocidades en el gap en la configuración trapezoidal a distintas distancias se muestra en la Figura 3.24. Al igual que las otras dos configuraciones anteriores, estos perfiles de velocidades tiene cierta similitud, la diferencia más notoria es en el perfil de

velocidades de color azul, el cual muestra una mayor deformación comparada a las otras dos configuraciones.

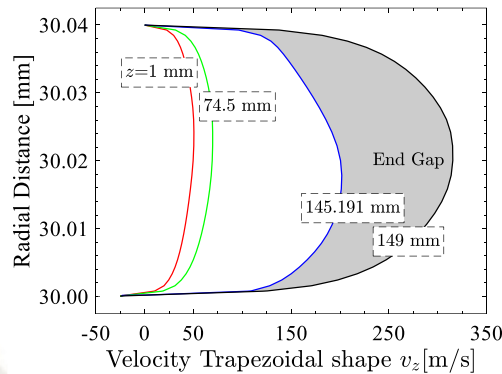


Figura 3.24 Perfil de Velocidad de la forma trapezoidal

En la Figura 3.25 se muestra (a) la caída de presión a lo largo del pistón, así como (b) el aumento de la energía cinética de turbulencia dentro de los sellos de laberinto rectangulares. En este caso la caída de presión muestra un comportamiento similar a las cavidades triangulares y rectangulares, los picos que se generan en el caso trapezoidal son los que tienen mayor amplitud respecto a los demás. En el caso de la curva de TKE se nota más claramente que en la forma trapezoidal se tienen picos y valles, estos picos generados son los más notorios (mayor amplitud) que los valles.

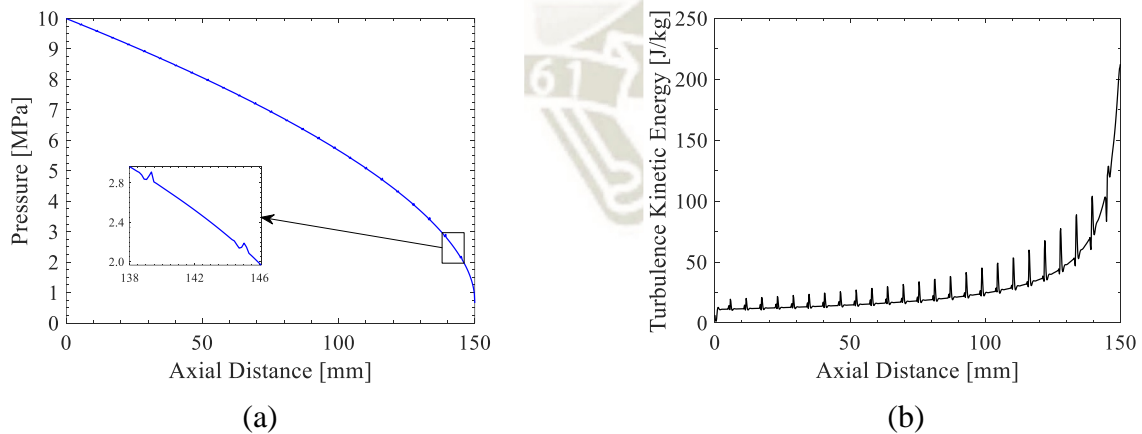


Figura 3.25 Caída de presión e incremento de la energía cinética de turbulencia forma triangular

Para un mejor análisis se realizó la simulación numérica dentro de un dominio del fluido en el cual no se tenga la presencia de ningún tipo de sellos de laberinto, un caso en el cual el

pistón y el cilindro son lisos. Entonces los parámetros que definieron este dominio geoméricamente fueron la longitud del pistón y el espacio entre el pistón y el cilindro “gap”, formando así un dominio rectangular para el estudio axisimétrico, los valores de estos parámetros fueron 150 mm y 40  $\mu\text{m}$  respectivamente.

### 3.2.4 Sin sellos de laberinto (pistón liso)

El análisis que se realiza de la configuración con pistón liso es respecto a la caída de presión en el gap y el aumento de la energía cinética de turbulencia a lo largo del pistón, como se muestra en la Figura 4.16. Para (a) la caída de presión se presenta una curva como se esperaba, sin la presencia de picos o valles, ya que la presencia de estos es debido a la influencia que tienen las cavidades en el gap. Seguidamente, para (b) la energía cinética de turbulencia pasa lo mismo que para el caso (a) no existen ningún tipo de protuberancias en la curva como se esperaba.

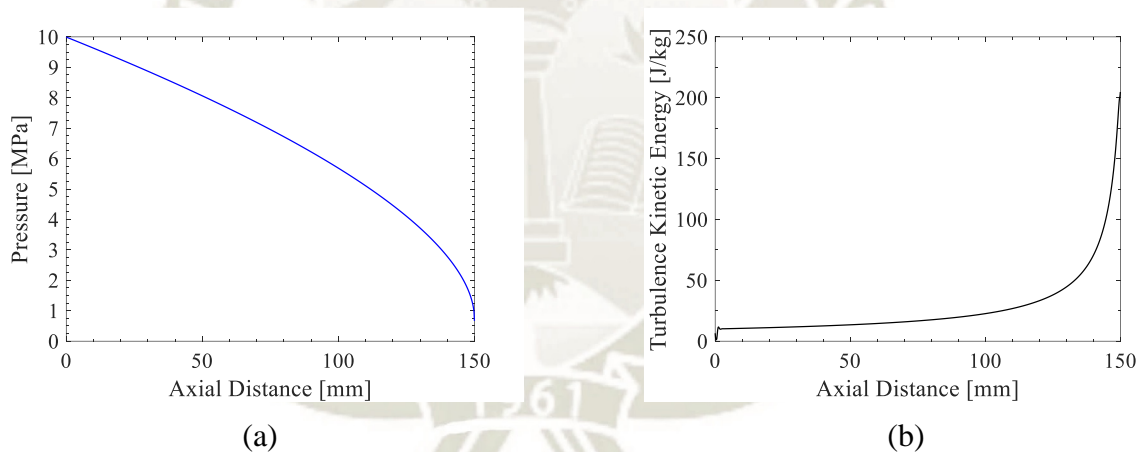


Figura 3.26 Caída de presión e incremento de la energía cinética de turbulencia en un pistón liso

Para explicar el comportamiento de la cavidad, se calculó el perfil de distribución de temperatura (DT), presión (DP), energía total (DET) y energía cinética turbulenta (DECT) y entropía (DE). Lo que ocurre en DET es una disminución de la energía en la cavidad en relación con la energía en la cavidad, siendo menor en el centro y aumentada hacia los extremos. Esto quiere decir que hay un consumo de energía, que es lo que busca, que será el responsable de la rotación del fluido dentro de la cavidad. Para explicar esto, vemos que el DP y el DT siguen aproximadamente la misma distribución. Una disminución de la temperatura y la presión conduce a un aumento y una disminución de la entropía,

respectivamente. A medida que la variación de presión es mayor, entonces hay un aumento de entropía líquido que se transforma en irreversibilidad (calor), que es precisamente lo que se ve en el DE.

La reducción del caudal másico de fuga es de 0,02007 kg/s (1% respecto al pistón liso) cuando se analiza la forma trapezoidal, que representa la mejor opción frente a las otras dos, Tabla 3.8. Las formas triangulares y rectangulares muestran más fugas que la configuración de pistón liso. En la investigación realizada por (Schaller et al., 2018), determinaron que la forma rectangular presento mejores resultados para diferencias de presión de hasta 1 MPa y un espacio de 50  $\mu\text{m}$ , implementado para compresores de hidrógeno, llegando a una reducción del 38% respecto a un con pistón liso. Una cosa para destacar, en este estudio, es la dependencia del comportamiento del sistema con el valor de la distancia radial entre el pistón y el cilindro (gap), donde muestra que existe un punto de intersección entre las fugas empleando un pistón liso y otro con forma rectangular, dando a conocer que para valores superiores a ese punto la forma rectangular es mejor y para valores menores al punto de intersección el caso liso presenta menos fugas.

Tabla 3.8 Valores óptimos de los parámetros para una de las configuraciones

Parámetros	Pistón liso	Triangular	Rectangular	Trapezoidal
Profundidad de la cavidad $H$ [mm]	-	0.5	0.5	0.5
Angulo de la cavidad $\alpha$ [°]	-	30	-	35
Ancho de la cavidad $W$ [mm]	-	-	0.5	0.5
Distancia entre cavidades $e$ [mm]	-	5.0	5.0	5.0
Longitud del pistón $L$ [mm]	150	150	150	150
Flujo masico de fuga $\dot{m}$ [kg/s]	0.02027	0.02049	0.02050	0.02007

## Capítulo 4

# OPTIMIZACIÓN NUMÉRICA DE SELLOS DE LABERINTO

## TRAPEZOIDAL

En el capítulo anterior, se presentó un análisis numérico del comportamiento de los sellos de laberinto para un PCR con formas triangulares, rectangulares y trapezoidales. Cuando se realizó la comparación entre ellos concluyó que los sellos con cavidades trapezoidales tienen menos fugas. El ángulo de la cavidad de  $35^\circ$  es el que produce la mayor pérdida de energía, debido a la formación de vórtices en la entrada y salida de las cavidades.

En el presente capítulo se realiza la optimización de un sello de laberinto trapezoidal tomando en cuenta algunos parámetros adicionales.

### 4.1 METODOLOGÍA

#### 4.1.1 Geometría

Los parámetros geométricos necesarios para definir completamente una forma trapezoidal se indican en la Figura 4.1. Estos parámetros son el diámetro del pistón, la longitud ( $d$ ,  $L$ ), el espacio entre el pistón y el cilindro ( $G$ ), la longitud libre inicial y final ( $J_{in}$ ,  $J_{out}$ ), longitud de la cavidad, profundidad, ángulo ( $W$ ,  $H$ ,  $\alpha$ ) y distancia entre cavidades ( $e$ ).

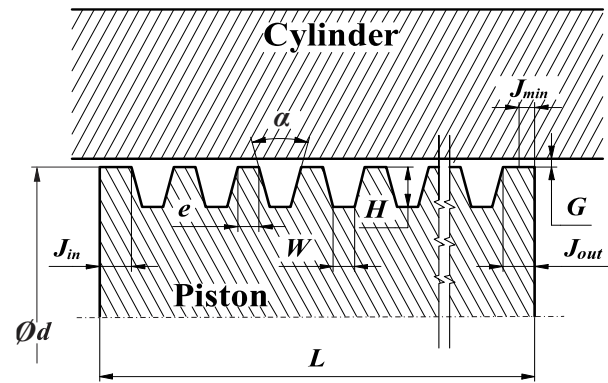


Figura 4.1 Definición de geometría para forma trapezoidal

Para este estudio, se fijaron algunos parámetros. El diámetro del pistón, la longitud del pistón, el ángulo de la cavidad, la longitud libre inicial y la longitud libre final mínima se indican como parámetros constantes, Tabla 4.1. Los parámetros variables deben optimizarse para minimizar las fugas de gas. El espacio entre el pistón y el cilindro, la longitud de la cavidad, la profundidad de la cavidad y la distancia entre las cavidades son los cuatro parámetros variables, Tabla 4.2. Los valores límite se seleccionaron de acuerdo con las consideraciones de fabricación.

Tabla 4.1 Parámetros constantes para una geometría trapezoidal

Diámetro del pistón	Longitud del pistón	Angulo de Cavidad	Longitud inicial libre	Longitud mínima libre final
$\varnothing d$ [mm]	$L$ [mm]	$\alpha$ [°]	$J_{in}$ [mm]	$J_{min}$ [mm]
60	150	35	10	10

Tabla 4.2 Parámetros variables para una geometría trapezoidal

Espacio radial entre el cilindro y el pistón (gap)	Ancho de la cavidad	Profundidad de la cavidad	Distancia entre cavidades	Longitud libre final
$G$ [ $\mu$ m]	$W$ [mm]	$H$ [mm]	$e$ [mm]	$J_{out}$ [mm]
30.0 - 250.0	0.5 - 10.0	0.5-10.0	0.5 - 10.0	$J_{out} \geq J_{min}$

Se espera que la temperatura del gas después de la compresión aumente significativamente. Algunos estudios estiman la temperatura de reacción en 1000 K. Debido a la transferencia de calor radiante y convectivo, por ejemplo, si se realiza un símil del reactor con motores de combustión interna, en estos últimos la temperatura del pistón aumenta aproximadamente un 30% de la temperatura de combustión. En este caso se espera un

cambio de temperatura máximo del pistón de 300 K. Para realizar este análisis se considera un cilindro macizo con un diámetro de pistón de 60 mm, considerando dos materiales de pistón, uno de aluminio y otro de acero, además se considera un calentamiento uniforme en el cilindro.

Al contar ya con toda la información necesaria se emplea la fórmula de la dilatación lineal (4.1), extrapolándolo a un cuerpo axisimétrico en el cual queremos saber el incremento de radio que se presenta al estar sometido a distintos cambios de temperatura homogéneos de hasta 300 K. da como resultado un aumento de radio de 200  $\mu\text{m}$  para un pistón de acero, Figura 4.2. Para pistones de aluminio, la variación del radio prácticamente se duplica.

$$\Delta R = R_0 \times \beta \times \Delta T \quad (4.1)$$

La temperatura del pistón depende del tiempo y la longitud. Inicialmente, la temperatura del pistón será uniforme, cercana a la temperatura. Después de un tiempo de trabajo, el lado del pistón en la cámara de reacción estará cerca de 300 K, mientras que el otro lado permanecerá frío. Esto significa que el espacio entre el pistón y el cilindro se reducirá en 200  $\mu\text{m}$  durante el tiempo de trabajo. Por esta razón, se realiza un estudio de sensibilidad para un espacio desde un mínimo de 30  $\mu\text{m}$  hasta un máximo de 250  $\mu\text{m}$ , Tabla 4.2.

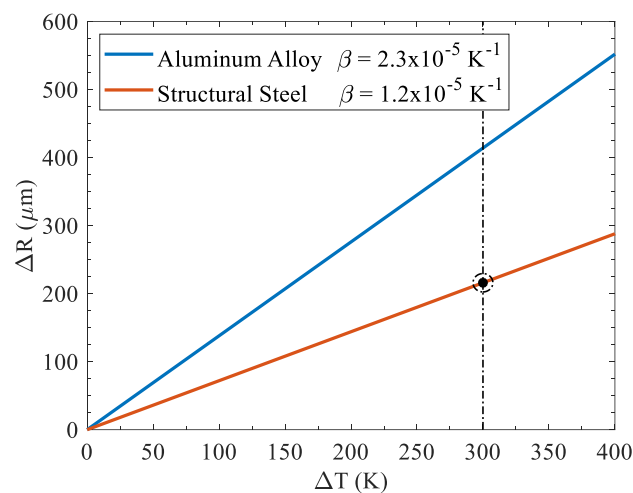


Figura 4.2 Aumento radial del pistón debido al cambio de temperatura

#### 4.1.2 Mallado

Como se mencionó en el capítulo anterior el mallado representa un aspecto importante dentro del estudio, para realizar los análisis correspondientes en este capítulo se mantienen los valores de mallado establecidos en el capítulo anterior, los cuales son Calidad Ortogonal (Orthogonal Quality)  $OQ \approx 1$ , y la distancia adimensional a la pared  $y^+ \approx 30-300$ , un dimensionamiento de borde (Edge sizing) con un número de divisiones de 30 con un sesgo (bias) con un factor de 3. El mallado se puede observar en la Figura 4.3.

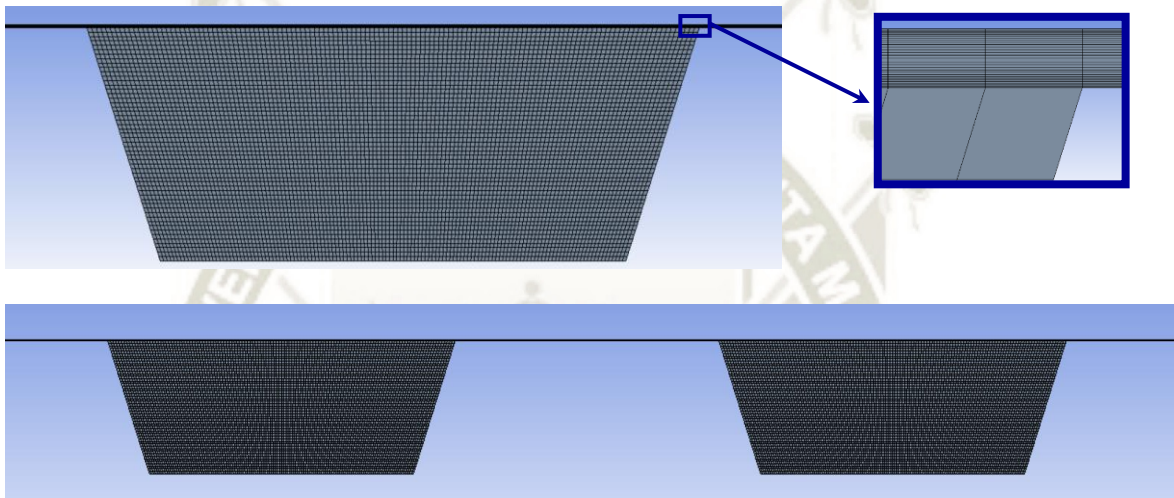


Figura 4.3 Mallado del dominio del fluido para cada la cavidad trapezoidal

#### 4.1.3 Simulación Numérica

Las consideraciones que se utilizaron para realizar la simulación numérica de fluidos en estado estacionario son las mismas que se emplearon en el capítulo anterior, la configuración del comportamiento del fluido se empleó el modelo de viscosidad k-épsilon Realizable. La definición de las Condiciones de Contorno del modelo fue: gas compresible, presión estática manométrica de entrada de 10 MPa (lado de la cámara de compresión), una presión manométrica de salida de 0 MPa (atmosférica) y una velocidad del pistón de 25 m/s (ascendente).

El número de iteraciones para cada simulación se estableció en 2000, Figura 4.4. En el capítulo anterior se realizó las simulaciones estableciendo el límite de iteraciones en 1500. Este cambio se debe a que se estudió un rango mayor para los parámetros y hubo configuraciones en las que no se alcanzó la convergencia con 1500 iteraciones, por eso se incrementó la cantidad.

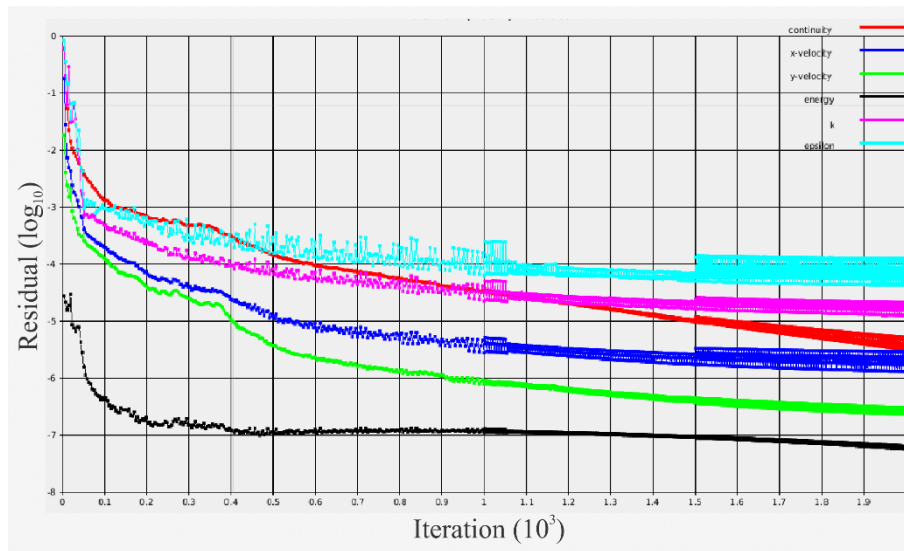


Figura 4.4 Convergencia de Residuales cavidad trapezoidal

#### 4.1.4 Correlación y optimización de parámetros

El diagrama de bloques de optimización y correlación de parámetros se muestra en la Figura 4.5. Esto incluye la búsqueda de la sensibilidad de los parámetros y luego continúa con la búsqueda de un modelo de regresión adecuado para los datos generados por la correlación de parámetros. A continuación, se lleva a cabo la optimización de los parámetros geométricos basándose en el modelo matemático creado. Se estableció que existen tres candidatos óptimos, los cuales fueron llevados a verificación. Es decir, se realizó una simulación numérica para cada candidato. Si la diferencia entre el valor del caudal másico de fuga proporcionado por el modelo matemático y la simulación numérica es inferior al 5%, el proceso de optimización finaliza; de lo contrario, el proceso de optimización continúa. Por el contrario, si no se cumple este criterio, se agrega el valor candidato a los datos y se vuelve a encontrar un nuevo modelo de regresión. Y la optimización se completa de nuevo.

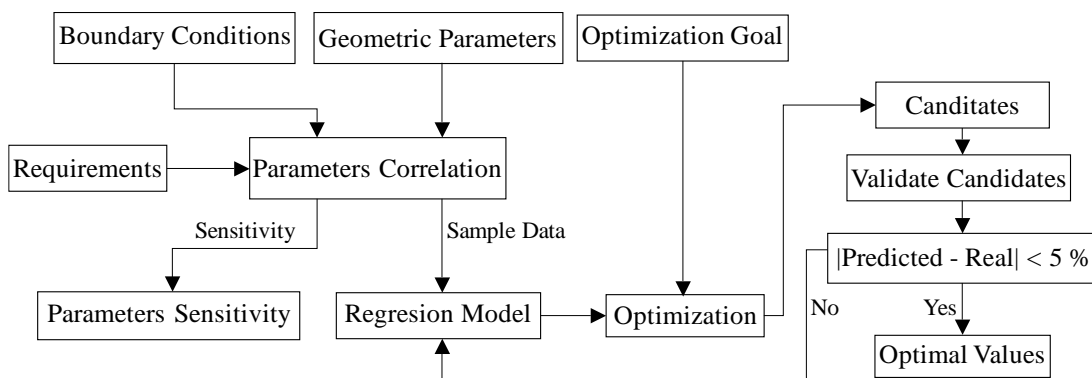


Figura 4.5 Diagrama de bloques de optimización y correlación de parámetros

El análisis de correlación de parámetros se realizó para encontrar la sensibilidad de los parámetros geométricos, que define la influencia de los parámetros de diseño en el flujo másico de fuga. Cuanto mayor sea el factor de sensibilidad, mayor será el impacto. Para la generación de las muestras se utilizó el método de Spearman. El requisito para realizar el análisis se definió por el número de muestras, con un valor de 400. Estas muestras se restringieron siguiendo los valores límite definidos en la Tabla 4.2. El procedimiento para obtener la sensibilidad de los parámetros se muestra en la figura 6.

Para determinar un modelo matemático del flujo másico de fuga basado en los parámetros geométricos seleccionados, se utilizó el método de Agregación Genética. Este método automatiza el proceso de selección, configuración y generación del tipo de superficie de respuesta que mejor se adapta a cada parámetro de salida del problema. A partir de los diferentes tipos de superficies de respuesta disponibles en ANSYS (polinomios completos de segundo orden, regresión no paramétrica, Kriging o mínimos cuadrados móviles), la agregación genética crea automáticamente el tipo de superficie de respuesta que es el enfoque más apropiado para cada resultado (ANSYS Inc, 2020b).

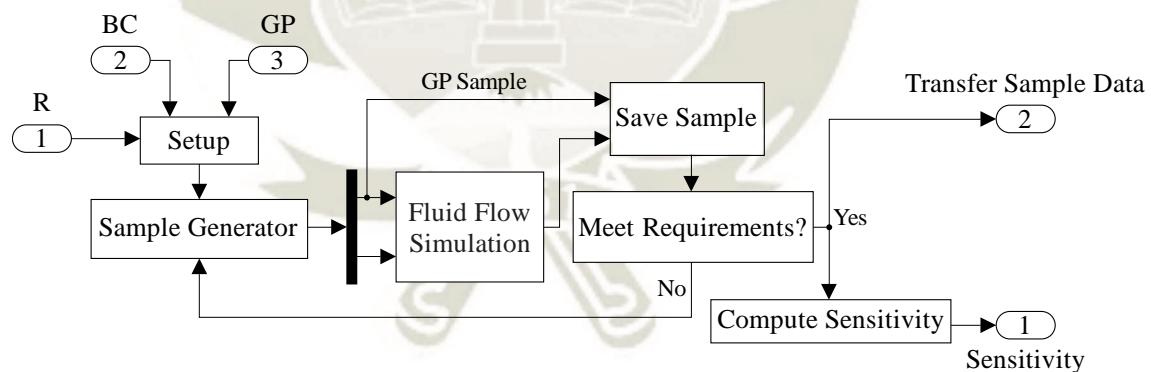


Figura 4.6 Diagrama de bloques de optimización y correlación de parámetros

La optimización de los parámetros geométricos, teniendo como función de costo la minimización del caudal másico de fuga, se realizó mediante el Algoritmo Genético Multiobjetivo (MOGA). Este algoritmo es una variante híbrida del popular NSGA-II (algoritmo genético ordenado no dominado-II) basado en conceptos de control del elitismo. Admite todo tipo de parámetros de entrada. El esquema de clasificación de Pareto se realiza utilizando un método de clasificación rápido, no dominado, que es un orden de magnitud más rápido que los métodos tradicionales de clasificación de Pareto (ANSYS Inc, 2020b).

Se definieron 800 muestras por iteración y un máximo de 20 iteraciones. Las condiciones máximas permitidas del porcentaje de MAPP de Pareto y el porcentaje de estabilidad convergente de CSP se establecieron en 70% y 2%, respectivamente.

## 4.2 RESULTADOS

Después de realizar el análisis de correlación de parámetros, los resultados obtenidos de la sensibilidad de los parámetros en función del flujo másico de fuga se sintetizan en la Fig. 7. Se puede ver que el espacio entre pistón y cilindro es el más sensible, con un valor sensible. de 0,96 sobre 1,00. La sensibilidad para la distancia entre cavidades, el ancho de la cavidad y la profundidad de la cavidad son 0.14, 0.31 y 0.23, respectivamente. Esto indica que, en importancia, la distancia entre cavidades tiene un tercio del espacio, pero duplica la profundidad. El ancho es un 60% más sensible que la distancia entre cavidades. El coeficiente de determinación de la regresión cuadrática  $R^2$  del caudal másico de fuga obtenido fue de 0,97.

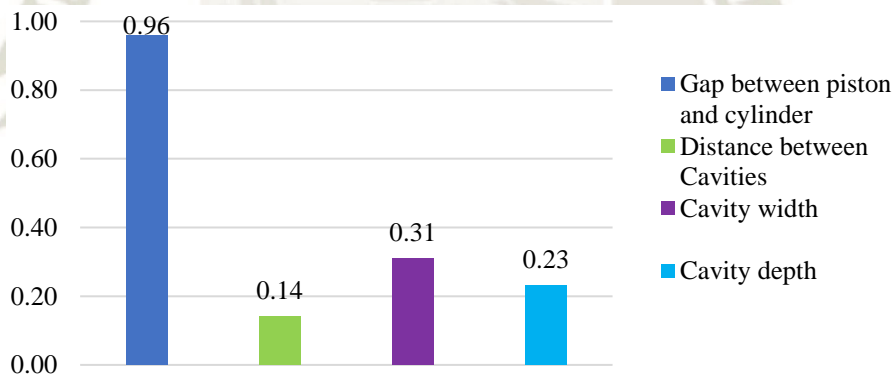


Figura 4.7 Sensibilidad de parámetros para la forma trapezoidal

Para todo el dominio, la fuga másica mínima es de 0,01024 kg/s, Tabla 4.3. Como se esperaba de la alta dependencia del espacio, este valor mínimo se obtiene del valor mínimo del espacio de 30  $\mu\text{m}$ .

Tabla 4.3 Fugas mínimas de flujo masico

Espacio radial entre el cilindro y el pistón (gap) $G$ [ $\mu\text{m}$ ]	Ancho de la cavidad $W$ [mm]	Profundidad de la cavidad $H$ [mm]	Distancia entre cavidades $e$ [mm]	Flujo masico de fuga $\dot{m}$ [kg/s]
30.0	0.5	0.5	10.0	0.01024

Para los valores dados en Tabla 4.3, se realiza una evaluación del flujo másico de fuga variando el espacio y uno de los otros tres parámetros, profundidad, longitud y distancia entre cavidades. Manteniendo constantes dos de los parámetros de la cavidad, para los valores dados en Tabla 4.3, se obtuvo un ajuste de superficie. Este modelo matemático aproximado se obtuvo utilizando el método de agregación genética del tipo de superficie de respuesta de Ansys. El valor de la confiabilidad o estabilidad de la respuesta de la superficie se estableció entre 1 y 0,99, y la calidad de la interpolación fue de 0,79.

#### 4.2.1 Variación de la distancia entre cavidades

La superficie de flujo másico de fuga se obtiene variando el espacio entre pistón-cilindro y la distancia entre cavidades, manteniendo constantes los valores mínimos de la profundidad en 0.5 mm, y la longitud en 0.5 mm, Figura 4.8. Como se ve, el gap es altamente sensible.

En la parte a) de la Figura 4.8, se observa que sobre la superficie ajustada también se ha trazado la superficie para un pistón liso, es decir, cuando el pistón no tiene cavidades. La superficie lisa del pistón está trazada en rojo y solo en el caso de que la fuga sea mayor que con los sellos laberínticos. Indica que es mejor el uso de sellos laberínticos para valores por encima de la línea de umbral. La parte b) es una vista superior de la parte a) en la cual se muestra la curva que delimita las dos zonas, para las condiciones dadas.

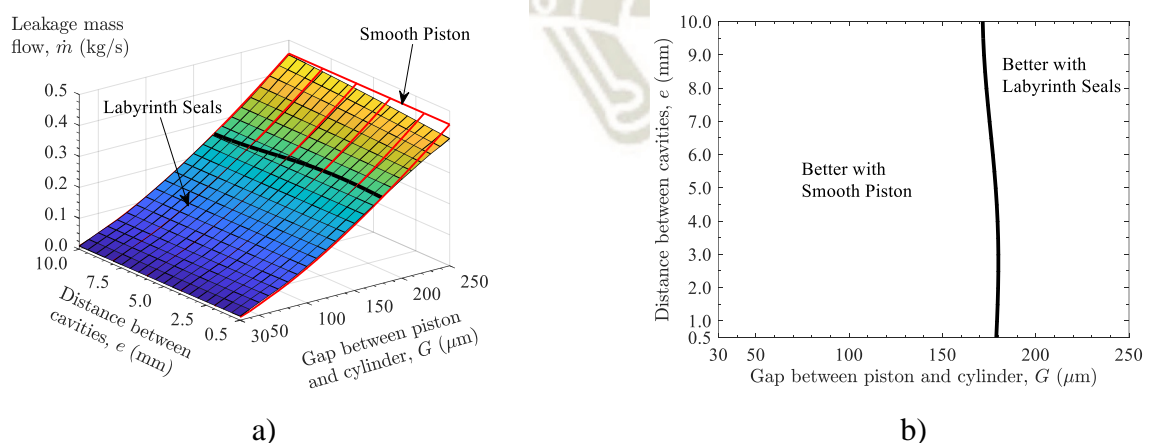


Figura 4.8 Fugas vs gap y distancia entre cavidades, para valores mínimos

#### 4.2.2 Variación del ancho

De manera similar a la Figura 4.8, en la Figura 4.9 se obtiene la superficie de flujo másico de fuga variando el espacio y la anchura de la cavidad. Los otros dos parámetros se mantienen constantes a los valores mínimos de la profundidad en 0,5 mm y la distancia entre cavidades en 10 mm.

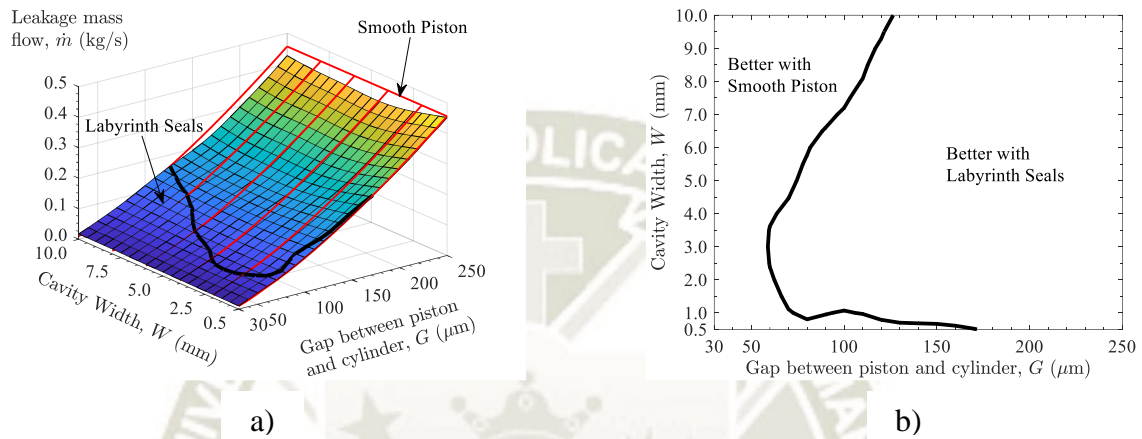


Figura 4.9 Fugas vs gap y ancho de la cavidad, para valores mínimos

#### 4.2.3 Variación de la profundidad

De manera similar a la Figura 4.8 y la Figura 4.9, en la Figura 4.10, la superficie de flujo másico de fuga se obtiene variando el espacio y la profundidad de la cavidad. Los otros dos parámetros se mantienen constantes a los valores mínimos de la anchura en 0,5 mm y la distancia entre cavidades en 10 mm.

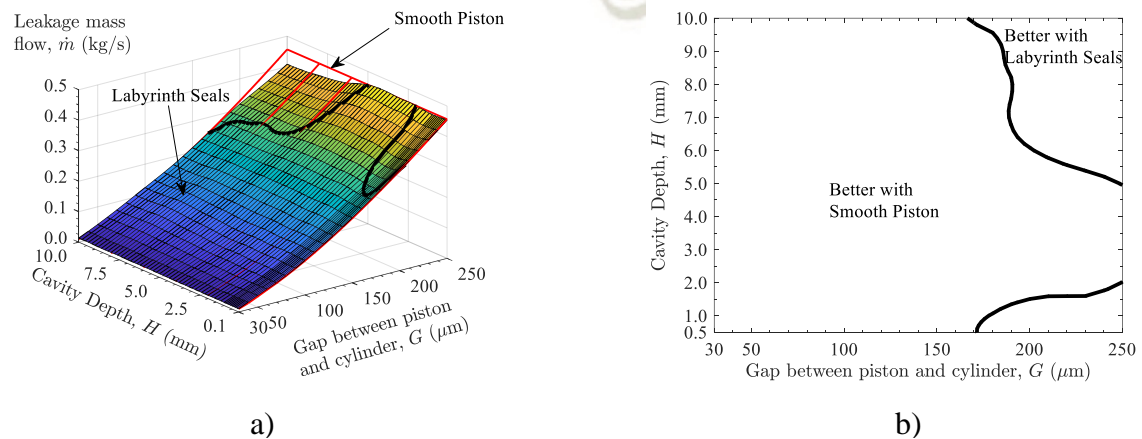


Figura 4.10 Fugas vs gap y profundidad de la cavidad, para valores mínimos

#### 4.2.4 Comparación de ancho, profundidad y distancia entre cavidades

La existencia de un límite de umbral se indica en la Figura 4.11 para el ancho, la profundidad y la distancia entre las cavidades. Este umbral separa las dos regiones, donde es mejor el uso de un pistón liso o un pistón con juntas laberínticas. El caudal másico de fuga es el valor objetivo que indica cuál es mejor, cuanto menor es el valor, mejor opción. Estas dos zonas también fueron estudiadas y evidenciadas por (Schaller et al., 2018) y (Zhou et al., 2011).

El parámetro principal que establece el uso de un pistón liso o ranurado es el espacio entre el pistón y el cilindro. Para el parámetro de distancia entre cavidades, el umbral tiene un valor de espacio de 180  $\mu\text{m}$ , en todo el dominio de la distancia.

Para valores pequeños de ancho o profundidad de la cavidad, este umbral se disipa para un pistón suave como el mejor mecanismo de sellado. Para valores superiores a 8 mm, el valor de la brecha de umbral es de alrededor de 150  $\mu\text{m}$ . En el medio, el valor de la brecha de umbral se reduce para el ancho y aumenta para la profundidad. Este comportamiento debe tenerse en cuenta para el diseño final de las cavidades del pistón.

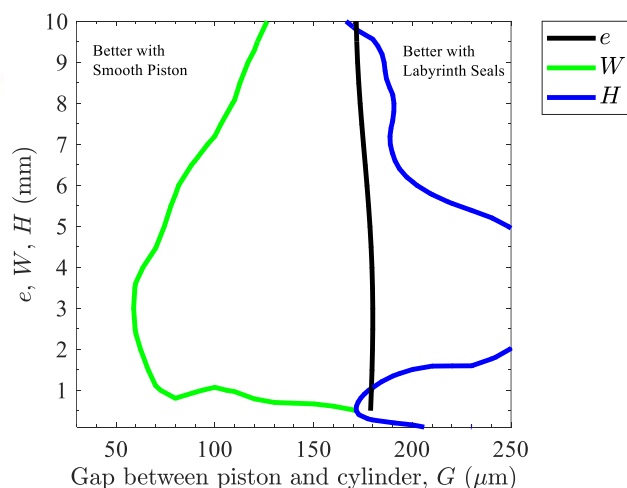


Figura 4.11 Umbral entre liso y pistón con juntas laberínticas

Para un espacio de pistón-cilindro de 250  $\mu\text{m}$ , se realizó un análisis de fugas de flujo másico, Tabla 4.4. Los parámetros óptimos se establecieron en 0,5 mm, 9,5 mm y 2,4 mm para la distancia, la longitud y la profundidad, respectivamente. Para estos parámetros, la fuga de flujo másico es 0.301391 kg/s, y para un pistón liso en 0.456771 kg/s. Se observa

una reducción del 34% en las fugas de gas cuando se utilizan sellos laberínticos, en comparación con un pistón liso.

Tabla 4.4 Valores óptimos de los parámetros para un gap de 250  $\mu\text{m}$

Parámetros	Trapezoidal	Pistón liso
Gap entre el pistón y el cilindro $G$ [mm]	250	250
Distancia entre cavidades $e$ [mm]	0.5	-
Ancho de la cavidad $W$ [mm]	9.5	-
Profundidad de la cavidad $H$ [mm]	2.4	-
Flujo masico de fuga $\dot{m}$ [kg/s]	0.301391	0.456771

La energía cinética de la turbulencia y la caída de presión a lo largo del pistón se evaluaron para un espacio entre pistón y cilindro de 250  $\mu\text{m}$ , Figura 4.12 y Figura 4.13, respectivamente. Los datos de los parámetros son los valores óptimos indicados en la Tabla 4.4. En ambas figuras, se muestra una comparación con un pistón liso.

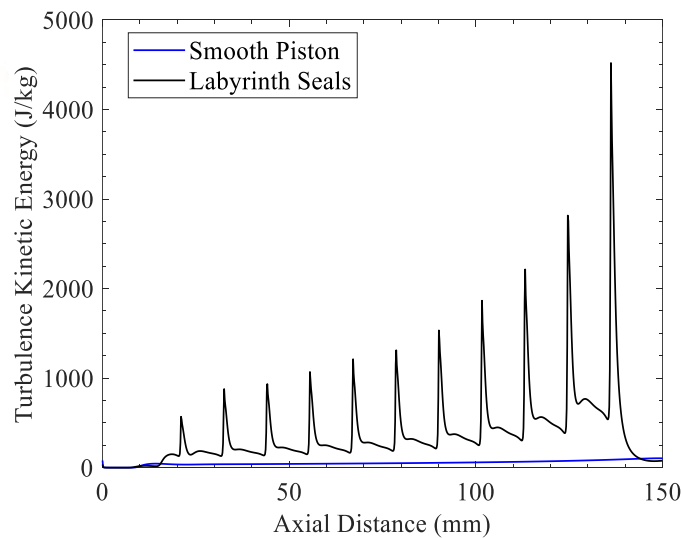


Figura 4.12 Energía cinética de turbulencia a lo largo del pistón, espacio de 250  $\mu\text{m}$

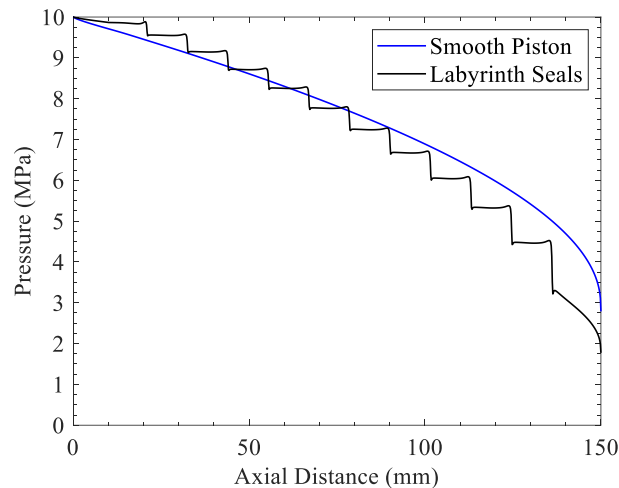


Figura 4.13 Caída de presión a lo largo del pistón, espacio de  $250\ \mu\text{m}$

La energía cinética de turbulencia para los sellos laberínticos tiene valores máximos en la salida de cada cavidad. Estos picos tienen una correspondencia directa con el aumento de velocidad indicado anteriormente. La longitud de los picos es menor que la distancia entre cavidades, lo que es un indicador de que esta distancia podría reducirse para mantener casi invariable la fuga. El pico más grande se desarrolla al final de la última cavidad y es 18 veces mayor que el valor máximo alcanzado por el pistón liso.

Se observa un aumento en la caída de presión a la salida de cada cavidad, comportamiento similar a la energía cinética de la turbulencia, como saltos escalonados. Para el pistón liso, la caída de presión aumenta linealmente en el primer 75% de la longitud del pistón, disminuyendo exponencialmente en el 25% final. De 0 a  $\sim 50$  mm de la longitud del pistón, la caída de presión suave del pistón es mayor que la del pistón con sellos laberínticos. A partir de este espacio de  $\sim 50$  mm, el comportamiento se invierte y aumenta la caída de presión en cada cavidad.

#### 4.2.5 Valores Óptimos

Finalmente, se realizó una optimización de parámetros para valores discretos de brecha de 50, 100, 150, 200 y  $250\ \mu\text{m}$ . En la Figura 4.14 se muestran los valores óptimos para cada parámetro, obtenidos después de minimizar el flujo de fuga másico. Se observa que en el caso de “e” existe un valor de 10 mm para los casos de 30 y  $50\ \mu\text{m}$  del gap y luego cae repentinamente a valores que oscilan entre 0.5 y 1 mm para los demás gaps evaluados. Esto se debe a la poca influencia que tiene “e” en estos valores de brecha. En el caso de “W”, se

observa que crece junto con los valores de gap, llegando a 9.5 para un gap de 250  $\mu\text{m}$ . En el caso de "H" para valores entre 30 y 100  $\mu\text{m}$  fluctúa entre 0.2 y 2 mm, luego de lo cual presenta un comportamiento creciente hasta alcanzar un valor de 2.4 mm.

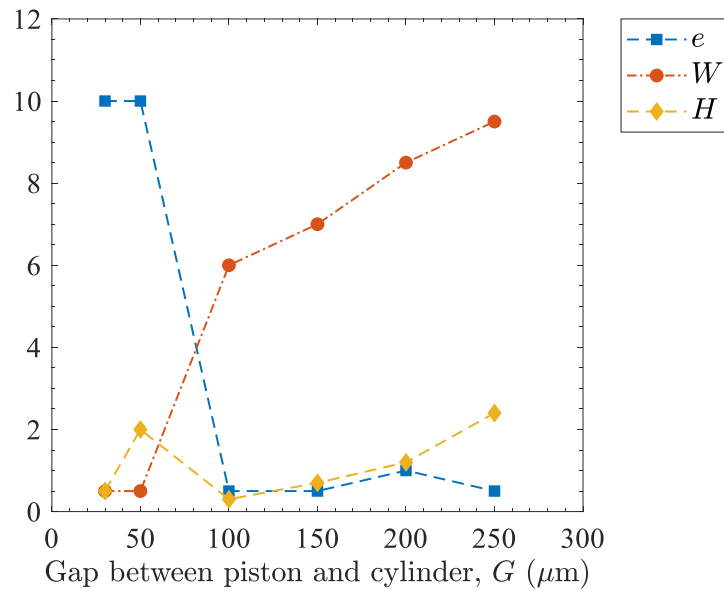


Figura 4.14 Valores óptimos de distancia entre cavidades, ancho de cavidad y profundidad de cavidad para diferentes valores de gap

## CONCLUSIONES

La simulación y optimización del sello laberíntico para PCR con formas triangulares, rectangulares y trapezoidales se llevó a cabo con éxito, para todos los casos se encontró un conjunto de valores óptimos de los parámetros geométricos para un pistón que se mueve a 25 m/s con 60 mm de diámetro y una presión de 10 MPa manométricos de metano. Las dimensiones de parámetros de las formas se optimizaron y la longitud del pistón resultó ser la más sensible. Debido a esto, otros parámetros de la cavidad como el ángulo, la profundidad, el ancho y el espaciado fueron menos importantes, por lo que los resultados para un pistón liso presentaron un rendimiento similar a los de un pistón con sellos de laberinto.

El análisis de la distribución de propiedades, como la velocidad, la temperatura y la presión, dentro de la cavidad de los sellos de laberinto, mostró un régimen laminar con una pérdida de energía debido al incremento de la entropía, una mayor variación (picos) de TKE y se observó un comportamiento turbulento en la entrada y la salida de las cavidades. Además, que la reducción de la energía cinética está muy influenciada por la velocidad del pistón. La forma trapezoidal presentó el mejor rendimiento para minimizar la fuga de flujo másico, con un ángulo de cavidad de  $35^\circ$ , profundidad de cavidad de 0,5 mm, distancia entre cavidades de 5 mm y una longitud de pistón de 150 mm, por otra parte, el que menor rendimiento presentó fue la forma rectangular.

Se realizó el estudio de sellos laberíntico trapezoidal manteniendo la velocidad del pistón, el diámetro del pistón y las condiciones de contorno establecidas en el análisis de los tres tipos de sellos de laberinto estudiados. Además, se mantuvo constante la longitud de pistón de 150, un ángulo de cavidad trapezoidal de  $35^\circ$ , los parámetros geométricos que se mantuvieron variables fueron el espacio entre el pistón y el cilindro (30 - 250  $\mu\text{m}$ ), la longitud de la cavidad (0,5 - 10,0 mm), la profundidad de la cavidad (0,5 - 10,0 mm) y la distancia entre las cavidades (0,5 - 10,0 mm) los mismos que fueron optimizados. El gap fue el parámetro más sensible con un valor de 0,96 y las sensibilidades para la distancia, el ancho y la profundidad fueron 0,31, 0,23 y 0,14, respectivamente. Se encontró umbrales que separan dos regiones, por un lado, donde es mejor el uso de un pistón liso y otro donde es

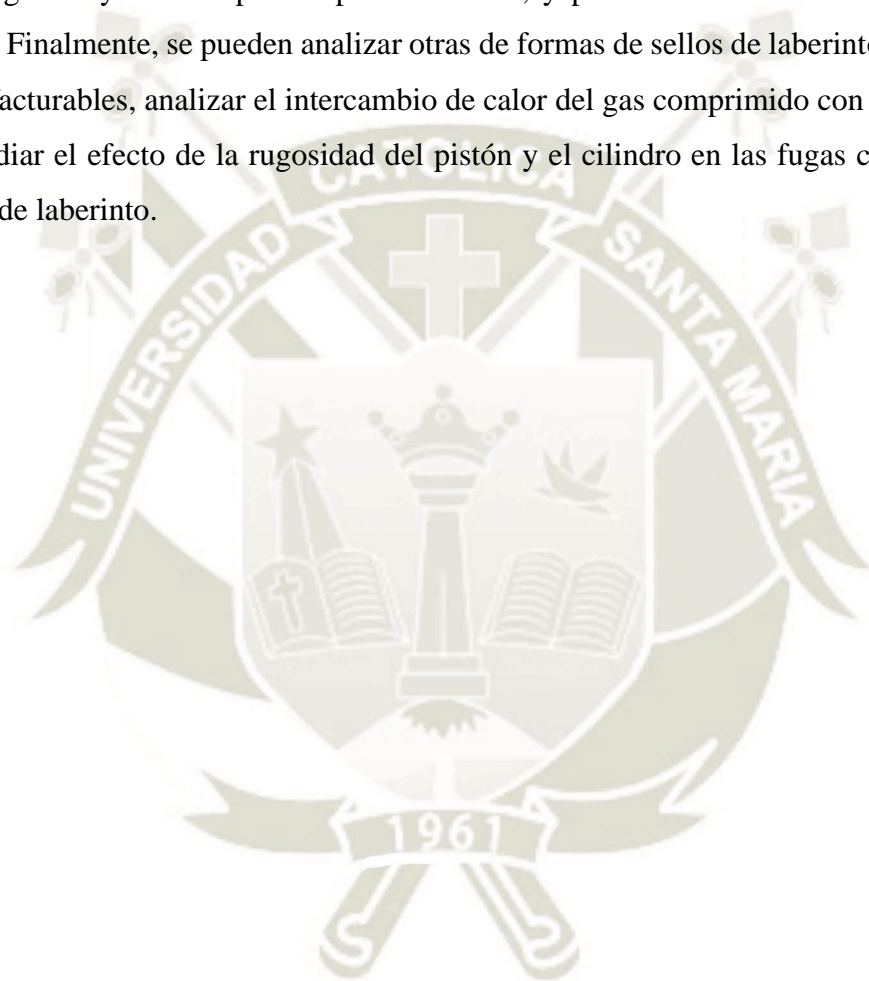
mejor el uso de un pistón con sellos de laberinto. En general, es mejor el uso de pistón con sellos de laberinto para valores de gap superiores a 150  $\mu\text{m}$ .

También se analizó el comportamiento del fluido en los sellos de laberinto trapezoidales. Un alto incremento en la velocidad del gas en la salida de la cavidad trapezoidal, sobre el espacio en la zona de distancia entre cavidades, tiene una correlación directa con un incremento máximo de la energía cinética de turbulencia y un incremento escalonado de la caída de presión. Para un gap de 250  $\mu\text{m}$ , se observa una reducción del 34% en la fuga de gas cuando se utilizan sellos laberínticos, en comparación con un pistón liso. Los parámetros óptimos para este análisis se establecieron en 0,5 mm, 9,5 mm y 2,4 mm para la distancia, la longitud y la profundidad, respectivamente.



## RECOMENDACIONES

Después de concluir con la investigación se brindan las siguientes recomendaciones, para comprender mejor el sistema de sellado se debería realizar un análisis transitorio de los sellos de laberinto, para altas presiones como la estudiada en la presente investigación. Otro trabajo futuro puede dedicarse a la utilización de otros métodos de mallado para mejorar la convergencia y los tiempos de procesamiento, y posterior a ello crear un modelo ROM mejor. Finalmente, se pueden analizar otras de formas de sellos de laberinto, que puedan ser manufacturables, analizar el intercambio de calor del gas comprimido con el pistón/cilindro y estudiar el efecto de la rugosidad del pistón y el cilindro en las fugas cuando se emplea sellos de laberinto.



## REFERENCIA

- Al-Saleh, M. H., & Sundararaj, U. (2011). Review of the mechanical properties of carbon nanofiber/polymer composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 42(12), 2126–2142. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2011.08.005>
- ANSYS Inc. (2020a). *About Ansys*. <https://www.ansys.com/about-ansys>
- ANSYS Inc. (2020b). *ANSYS DesignXplorer User's Guide* (2020 R1).
- ANSYS Inc. (2020c). ANSYS Fluent Theory Guide. In *Ansys© Fluent* (2020 R1).
- Braga, V. M., & Deschamps, C. J. (2017). Numerical analysis of gas leakage in the piston-cylinder clearance of reciprocating compressors considering compressibility effects. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 232(1), 012006. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/232/1/012006>
- Cangioli, F., Pennacchi, P., Vannini, G., & Ciuchicchi, L. (2018). Effect of energy equation in one control-volume bulk-flow model for the prediction of labyrinth seal dynamic coefficients. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 98, 594–612. <https://doi.org/10.1016/j.ymsp.2017.05.017>
- Cangioli, F., Pennacchi, P., Vannini, G., Ciuchicchi, L., Vania, A., Chatterton, S., & Dang, P. V. (2017, June 26). On the Thermodynamic Process in the Bulk-Flow Model for the Estimation of the Dynamic Coefficients of Labyrinth Seals. *Volume 7A: Structures and Dynamics*. <https://doi.org/10.1115/GT2017-63012>
- Crooks, R. M., Zhao, M., Sun, L., Chechik, V., & Yeung, L. K. (2001). Dendrimer-encapsulated metal nanoparticles: Synthesis, characterization, and applications to catalysis. *Accounts of Chemical Research*, 34(3), 181–190. <https://doi.org/10.1021/ar000110a>
- Dai, X., Ji, Y., & Ma, L. (2006). *Air cylinder labyrinth sealing of labyrinth compressor for industry* (Patent No. 201013558Y).
- De Volder, M. F. L., Tawfick, S. H., Baughman, R. H., & Hart, A. J. (2013). Carbon Nanotubes: Present and Future Commercial Applications. *Science*, 339(6119), 535–539. <https://doi.org/10.1126/science.1109128>
- Dolinskij, Y. L., Grunvald, V. R., Kolbanovskij, Y. A., Piskunov, S. E., Plate, N. A., & Tolchinkij, L. S. (1997). *Method of generating synthesis gas* (Patent No. 2096313).
- Fawole, O. G., Cai, X.-M., & MacKenzie, A. R. (2016). Gas flaring and resultant air pollution: A review focusing on black carbon. *Environmental Pollution*, 216, 182–197. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2016.05.075>
- Feng, J., Wang, L., Yang, H., & Peng, X. (2018). Numerical Investigation on the Effects of Structural Parameters of Labyrinth Cavity on Sealing Performance. *Mathematical Problems in Engineering*, 2018, 1–12. <https://doi.org/10.1155/2018/5273582>
- Glouchenkov, M. (1997). *Apparatus for pulse compression of gases* (Patent No. 2097121).
- Glouchenkov, M. (1998). *Pulsed gas compression device* (Patent No. 2115467).
- Glouchenkov, M. (1999). *Device for the pulsed compression of gases* (Patent No. 2142844).
- Glouchenkov, M., Kronberg, A., & Veringa, H. (2002). Free piston pulsed compression

- reactor. *Chemical Engineering Transactions*, 2, 983–988.
- Gogotsi, Y., & Presser, V. (2013). *Carbon Nanomaterials*. CRC press.
- Graunke, K., & Ronnert, J. (1984). Dynamic behaviour of labyrinth seals in oilfree labyrinth-piston compressors. *Proceedings of the Purdue Compressor Technology Conference*, 7–15.
- Heiligtag, F. J., & Niederberger, M. (2013). The fascinating world of nanoparticle research. *Materials Today*, 16(7–8), 262–271. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2013.07.004>
- Hodkinson, B. (1939). Estimation of the Leakage through a Labyrinth Gland. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, 141(1), 283–288. [https://doi.org/10.1243/PIME\\_PROC\\_1939\\_141\\_037\\_02](https://doi.org/10.1243/PIME_PROC_1939_141_037_02)
- Huang, X., Boey, F., & Zhang, H. (2010). A brief review on graphene-nanoparticle composites. *Cosmos*, 06(02), 159–166. <https://doi.org/10.1142/s0219607710000607>
- Jan, B. J., & Van Dijck, W. J. (1957). *Method and reciprocating compression reactor for short period, high temperature and high pressure chemical reactions* (Patent No. 2814551).
- Karim, G. A., & Moore, N. P. W. (1963). The production of synthesis gas and power in a compression ignition engine. *Journal of the Institute of Fuel*, 105.
- Karim, G. A., & Moore, N. P. W. (1990, August 1). The Production of Hydrogen by the Partial Oxidation of Methane in a Dual Fuel Engine. *SAE Technical Papers*. <https://doi.org/10.4271/901501>
- Khan, I., Saeed, K., & Khan, I. (2019). Nanoparticles: Properties, applications and toxicities. *Arabian Journal of Chemistry*, 12(7), 908–931. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2017.05.011>
- Kläy, H. R. (1975). Reciprocating compressors with labyrinth pistons for helium. *Cryogenics*, 15(10), 569–571. [https://doi.org/10.1016/0011-2275\(75\)90065-X](https://doi.org/10.1016/0011-2275(75)90065-X)
- Kolbanovskiy, Y. A., Shchipachev, V. S., & Chernyak, N. Y. (1982). *Pulse compression of gases in chemistry and technology*.
- Kronberg, A. (2008). Technology Report - Pulsed compression reactor. In *European Roadmap of Process Intensification*. [www.creative-energy.org](http://www.creative-energy.org)
- Kumar, N., & Kumbhat, S. (2016). Essentials in Nanoscience and Nanotechnology. In *Essentials in Nanoscience and Nanotechnology*. <https://doi.org/10.1002/9781119096122>
- Kumar, S., Rath, T., Mahaling, R. N., Reddy, C. S., Das, C. K., Pandey, K. N., Srivastava, R. B., & Yadaw, S. B. (2007). Study on mechanical, morphological and electrical properties of carbon nanofiber/polyetherimide composites. *Materials Science and Engineering: B*, 141(1–2), 61–70. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2007.06.002>
- Laad, M., & Jatti, V. K. S. (2018). Titanium oxide nanoparticles as additives in engine oil. *Journal of King Saud University - Engineering Sciences*, 30(2), 116–122. <https://doi.org/10.1016/j.jksues.2016.01.008>
- Larjola, J., Honkatukia, J., Sallinen, P., & Backman, J. (2010). Fluid dynamic modeling of a free piston engine with labyrinth seals. *Journal of Thermal Science*, 19(2), 141–147. <https://doi.org/10.1007/s11630-010-0141-2>

- Laurent, S., Forge, D., Port, M., Roch, A., Robic, C., Vander Elst, L., & Muller, R. N. (2008). Magnetic iron oxide nanoparticles: Synthesis, stabilization, vectorization, physicochemical characterizations and biological applications. *Chemical Reviews*, 108(6), 2064–2110. <https://doi.org/10.1021/cr068445e>
- Leer, C. (2010). *Carbon Nanofibers Thermoplastic Nanocomposites: Processing-Morphology-Properties Relationship*. University of Minho.
- Liu, W. T. (2006). Nanoparticles and their biological and environmental applications. *Journal of Bioscience and Bioengineering*, 102(1), 1–7. <https://doi.org/10.1263/jbb.102.1>
- Longwell, P. A., Reamer, H. H., Wilburn, N. P., & Sage, B. H. (1958). Ballistic Piston for Investigating Gas Phase Reactions. *Industrial & Engineering Chemistry*, 50(4), 603–610. <https://doi.org/10.1021/ie50580a027>
- Lowther, F. E., & Bohon, W. M. (1990). *Integrated product generation and catalytic product synthesis in an engine-reactor* (Patent No. 4965052).
- Lu, Y. C., Xu, Z., Gasteiger, H. A., Chen, S., Hamad-Schifferli, K., & Shao-Horn, Y. (2010). Platinum-gold nanoparticles: A highly active bifunctional electrocatalyst for rechargeable lithium-air batteries. *Journal of the American Chemical Society*, 132(35), 12170–12171. <https://doi.org/10.1021/ja1036572>
- Machado, S., Pacheco, J. G., Nouws, H. P. A., Albergaria, J. T., & Delerue-Matos, C. (2015). Characterization of green zero-valent iron nanoparticles produced with tree leaf extracts. *Science of the Total Environment*, 533, 76–81. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.06.091>
- Masala, O., & Seshadri, R. (2004). Synthesis routes for large volumes of nanoparticles. *Annual Review of Materials Research*, 34, 41–81. <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.34.052803.090949>
- Morrison, P. W., & Reimer, J. A. (1989). Silane pyrolysis in a piston reactor. *AIChE Journal*, 35(5), 793–802. <https://doi.org/10.1002/aic.690350510>
- Mudshinge, S. R., Deore, A. B., Patil, S., & Bhalgat, C. M. (2011). Nanoparticles: Emerging carriers for drug delivery. In *Saudi Pharmaceutical Journal* (Vol. 19, Issue 3, pp. 129–141). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/j.jsps.2011.04.001>
- Naito, M., Yokoyama, T., Hosokawa, K., & Nogi, K. (2018). Nanoparticle technology handbook. In *Nanoparticle technology handbook* (Third Edit). Elsevier.
- Nazari, A., & Riahi, S. (2011). The effects of SiO<sub>2</sub> nanoparticles on physical and mechanical properties of high strength compacting concrete. *Composites Part B: Engineering*, 42(3), 570–578. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2010.09.025>
- Oberdorfer, P. E., & Winch, R. F. (1961). Chemicals from Methane in a High Compression Engine. *Industrial & Engineering Chemistry*, 53(1), 41–44. <https://doi.org/10.1021/ie50613a029>
- Pang, Y.-C., Yu, X.-L., Wang, K., Lv, Q., Jin, L.-W., & Lu, Z. (2019). Research on dynamic leakage flow in the labyrinth seal of a labyrinth piston compressor. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 268(1), 012058. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/268/1/012058>
- Peng, B., Xu, L., & Zhang, X. (2011a). *Reciprocating compressor labyrinth seal structure*.
- Peng, B., Xu, L., & Zhang, X. (2011b). *Ultramicro spillage compressor labyrinth seal*

- structure* (Patent No. 102506179A).
- Peng, B., Yao, Y., Zhang, X., & Pakistan, P. (2013). *Parabola tooth axial direction labyrinth seal structure* (Patent No. 103410700A).
- Pulsed compression reactor for nanoparticles manufacturing*. (n.d.). Encontech B. V. [http://www.encontech.nl/papers/Nanoparticles manufacturing.pdf](http://www.encontech.nl/papers/Nanoparticles%20manufacturing.pdf)
- Rao, Chintamani Nagesa Ramachandra, Müller, A., & Cheetham, A. K. (2004). *The Chemistry of Nanomaterials* (C. N. R. Rao, A. Müller, & A. K. Cheetham (Eds.)). Wiley. <https://doi.org/10.1002/352760247X>
- Sajanlal, P. R., Sreeprasad, T. S., Samal, A. K., & Pradeep, T. (2011). Anisotropic nanomaterials: structure, growth, assembly, and functions. *Nano Reviews*, 2(1), 5883. <https://doi.org/10.3402/nano.v2i0.5883>
- Schaller, A., Darvishsefat, N., & Schlücker, E. (2018). Simulation and Experimental Investigation of Labyrinth Seals for Reciprocating Piston Compressors. *Chemical Engineering and Technology*, 41(5), 1043–1050. <https://doi.org/10.1002/ceat.201700698>
- Shinde, N. C., Keskar, N. J., & Argade, P. D. (2012). Nanoparticles: Advances in drug delivery systems. In *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences* (Vol. 3, Issue 1, pp. 922–929).
- Su, J., & Koo, J. (2017). *Reciprocating fluid compressing apparatus and method* (Patent No. 20180106713A).
- Tang, H., Yao, H., Wang, S., Meng, X., Qiao, H., & Qiao, J. (2017). Numerical simulation of leakage rates of labyrinth seal in reciprocating compressor. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 164(1), 012015. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/755/1/011001>
- Teng, W.-Y., Jeng, S.-C., Kuo, C.-W., Lin, Y.-R., Liao, C.-C., & Chin, W.-K. (2008). Nanoparticles-doped guest-host liquid crystal displays. *Optics Letters*, 33(15), 1663. <https://doi.org/10.1364/ol.33.001663>
- Tenne, R. (2002). Fullerene-like materials and nanotubes from inorganic compounds with a layered (2-D) structure. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 208(1–3), 83–92. [https://doi.org/10.1016/S0927-7757\(02\)00104-8](https://doi.org/10.1016/S0927-7757(02)00104-8)
- Tiwari, J. N., Tiwari, R. N., & Kim, K. S. (2012). Zero-dimensional, one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional nanostructured materials for advanced electrochemical energy devices. *Progress in Materials Science*, 57(4), 724–803. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2011.08.003>
- Tu, J., Yeoh, G. H., & Liu, C. (2018). Computational fluid dynamics: A practical approach. In *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach* (Third Edit). Butterworth-Heinemann.
- Van Dijck, W. J. (1957). *Reciprocating compression-Reactor for Short Period, High Temperature and High Pressure Chemical Reactions* (Patent No. 2814552).
- Vermes, G. (1961). A fluid mechanics approach to the labyrinth seal leakage problem. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 83(2), 161–169. <https://doi.org/10.1115/1.3673158>
- Versteeg, H. K., Malalasekera, W., Orsi, G., Ferziger, J. H., Date, A. W., & Anderson, J. D. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume*

- Method. In *Fluid flow handbook*. McGraw-Hil. Pearson Education.
- Von Szeszich, L. (1956). Herstellung von Synthesegas im Otto-Motor bei gleichzeitiger Arbeitsgewinnung. *Chemie Ingenieur Technik - CIT*, 28(3), 190–195. <https://doi.org/10.1002/cite.330280310>
- Wang, L., Feng, J., Wang, M., Ma, Z., & Peng, X. (2019). Leakage characteristic identification of labyrinth seals on reciprocating piston through transient simulations. *Mathematical Problems in Engineering*, 2019. <https://doi.org/10.1155/2019/3765732>
- Wang, Y., & Xia, Y. (2004). Bottom-Up and Top-Down Approaches to the Synthesis of Monodispersed Spherical Colloids of Low Melting-Point Metals. *Nano Letters*, 4(10), 2047–2050. <https://doi.org/10.1021/nl048689j>
- Wiechers, J. W., & Musee, N. (2010). Engineered inorganic nanoparticles and cosmetics: Facts, issues, knowledge gaps and challenges. In *Journal of Biomedical Nanotechnology* (Vol. 6, Issue 5, pp. 408–431). <https://doi.org/10.1166/jbn.2010.1143>
- Xu, X., Stevens, M., & Cortie, M. B. (2004). In situ precipitation of gold nanoparticles onto glass for potential architectural applications. *Chemistry of Materials*, 16(11), 2259–2266. <https://doi.org/10.1021/cm034744y>
- Yamamoto, I., Kaneko, K., Kuwae, K., & Hiratsuka, K. (1963). Production of Synthesis Gas by Internal Combustion Engine. *Sixth World Petroleum Congress*, 432(Sec IV), 429.
- Zhang, C., Wang, R., Yuan, J., Wang, L., Huang, C., & Zhao, D. (2013). *Novel seal of compressor* (Patent No. 103615370A).
- Zhang, X., Peng, B., Zhang, P., & Jingyu, S. (2017). *A kind of cycloid axial direction labyrinth seal toothing* (Patent No. 107654354B).
- Zhou, W., Gan, Z., Zhang, X., Qiu, L., & Wu, Y. (2011). Clearance Loss Analysis in Linear Compressor with CFD Method. *Cryocooler*.