Naturaleza y TECNOLOGÍA
Número Especial "Pasado, presente y futuro del PSE y sus aplicaciones"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

SIMULANDO LO INVISIBLE: LA DINÁMICA COMPUTACIONAL DE FLUIDOS COMO ALIADA EN EL DISEÑO DE PROCESOS DE SEPARACIÓN

Jazmín Cortez-González [a], Rodolfo Murrieta-Dueñas [a,*], Juan Gabriel Segovia-Hernández [b], Carlos E. Alvarado-Rodríguez [b, c], Roberto Gutiérrez-Guerra [d]

[a] Departamento de Ingeniería Química, Tecnológico Nacional de México / Campus Irapuato, Carretera Irapuato-Silao Km. 12.5, 36821 Irapuato, Guanajuato.

[b] Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guanajuato Noria Alta s/n, Guanajuato, Gto., 36050, México.

[c] Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI), Av. Insurgentes Sur 1582, Col. Crédito Constructor, Alcaldía Benito Juárez. CP 03940, Ciudad de México.

[d] Dirección de Tecnologías Emergentes Industriales e Informáticas, Universidad Tecnológica de León, Blvd. Universidad Tecnológica 225, Col. San Carlos, C.P. 37670, León, Guanajuato, México.

rodolfo.md@irapuato.tecnm.mx

Resumen

En el campo de la ingeniería química, la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD) se ha convertido en una herramienta que ofrece una ventana única para analizar cómo ocurren los fenómenos de transferencia de masa, calor y cantidad de movimiento en las distintas operaciones unitarias de un proceso de separación. Esta información resulta clave para el diseño, rediseño y optimización de procesos de separación, ya que permite identificar deficiencias en el equipo y oportunidades de mejora que serían difíciles de detectar experimentalmente. Sin embargo, su uso está condicionado por la capacidad computacional disponible, por lo que suele ser necesario simplificar el sistema real y analizar solo secciones representativas. Dado el enorme potencial de CFD como herramienta de diseño, este trabajo propone una guía práctica para aplicar CFD en el análisis y la intensificación de procesos de separación. Se describe la información mínima necesaria para modelar los fenómenos de hidrodinámica, transferencia

de masa y transferencia de calor, se presentan los métodos más empleados para la discretización de los dominios de cálculo, y finalmente se plantea una estrategia general para abordar un problema usando CFD, incluyendo recomendaciones para la ejecución e interpretación de las simulaciones numéricas. Con este enfoque, se busca acercar el uso de CFD a la comunidad de ingeniería química como una herramienta poderosa para innovar en el diseño de procesos de separación, impulsando soluciones más eficientes, sostenibles y seguras.

Palabras clave: CFD, Diseño de procesos separación, Simulación Numérica, SPH

SIMULATING THE INVISIBLE: USING COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS TO DESIGN SEPARATION PROCESSES

Abstract

In the field of chemical engineering, Computational Fluid Dynamics (CFD) has become a tool that offers a unique window into how mass, heat, and momentum transfer phenomena occur in the various unit operations of a separation process. This information is key to the design, redesign, and optimization of separation processes, as it allows for the identification of bottlenecks and opportunities for improvement that would be difficult to detect experimentally. However, its use is limited by available computational capacity, so it is often necessary to simplify the actual system and analyze only representative sections. Given the enormous potential of CFD as a design tool, this work proposes a practical guide for applying CFD to the analysis and intensification of separation processes. It describes the minimum information required to model hydrodynamic, mass transfer, and heat transfer phenomena; presents the most commonly used methods for discretizing computational domains; and finally proposes a general strategy for addressing a problem using CFD, including recommendations for running and interpreting numerical simulations. This approach aims to make CFD more accessible to the chemical engineering community as a powerful tool for innovating in the design of separation processes, driving more efficient solutions.

Keywords: CFD, Diseño de procesos separación, Simulación Numérica, SPH

1. Introducción

Para dar solución a un modelo matemático es necesario utilizar herramientas computacionales, que permitan resolver modelos matemáticos para describir el comportamiento de los fluidos involucrados en el sistema. Para ello se proponen análisis numéricos de fenómenos de transferencia de momento, calor y masa, a través de la Dinámica Computacional de Fluidos (CFD). La CFD es una rama de la física que suele estudiar el comportamiento de fluidos y en ingeniería química se utiliza como una herramienta para la solución numérica de las ecuaciones de transferencia de masa, cantidad de movimiento y calor en una geometría de flujo de interés (Kuipers y van Swaaij, 1998; Van der Hoef y col., 2004). Esta herramienta computacional se ha utilizado en diversos campos de la ingeniería química para describir la interacción líquido-gas (Ghaffarkhah y col., 2019), para describir el comportamiento del fluido dentro de lechos empacados (Wu y col., 2019), la distribución de especies dentro de un reactor biológico (Martínez-Herrera y col., 2022) o el equilibrio líquido-vapor en una columna de destilación (Canchola-López y col., 2023).

Desde hace unos años, se ha utilizado como una herramienta de análisis para el diseño de procesos de separación (Imran y col., 2025), cuyo objetivo es mejorar los fenómenos de transferencia de masa, calor y momento y ofrecer procesos intensificados (Mancera-Apolinar y col., 2025). CFD emplea los recursos computacionales como su principal herramienta para resolver los modelos matemáticos basados en leyes de conservación de masa, momento y calor. Esto permite hacer análisis hidrodinámicos, térmicos o de transferencia de masa dentro de un sistema. En el análisis hidrodinámico, se describen detalladamente los mecanismos de transferencia que ocurren para que un fluido se mezcle, interactúe u homogenice dentro de un equipo (Krishna y col., 2003). En el análisis térmico se identifican los patrones de flujo de calor y la distribución de temperatura. Finalmente, con los análisis de transferencia de masa es posible describir la difusión y distribución de especies en una operación unitaria.

De acuerdo con la literatura, se ha utilizado la CFD para simular diversos procesos de separación tales como columnas de destilación (Zarei y col., 2013; Cortez-González y col., 2024), columnas de absorción, empaques (Ferhath, 2025) y

equipos de transferencia de calor (Monge-Gapper y col., 2023). Cada uno de ellos, se ha simulado con diversos métodos numéricos como Método del volumen finito (MVF; Liu y col., 2023), método del elemento finito (MEF) y método de la hidrodinámica de partículas suavizadas (SPH; Domínguez y col., 2022; Monge-Gapper y Serrano-Pacheco, 2023) e incluso se han propuesto métodos híbridos. Debido a la diversidad de métodos numéricos implementados en la solución de las ecuaciones de transferencia de masa, calor y momento; es necesario desarrollar una guía que considere los elementos esenciales para simular numéricamente utilizando CFD. En este sentido, en este artículo se propone una metodología útil aplicable para aquellos estudiantes o profesionales que decidan analizar el comportamiento de los fluidos dentro de las operaciones unitarias habitualmente utilizadas en los procesos de separación.

2. Guía práctica para la simulación numérica en CFD

La simulación numérica en CFD de operaciones unitarias presentes en los procesos de separación, suele ser una tarea complicada y compleja. Aún no se cuenta con una metodología básica o una serie de recomendaciones que ayuden al estudiante o al investigador para realizar la simulación. En esta sección se presenta una propuesta metodológica cuyo propósito es guiar y orientar al investigador que realiza la simulación numérica. La metodología considera 7 pasos básicos desde la naturaleza del sistema (física predominante) hasta la interpretación de los resultados numéricos. A continuación, se explica de forma detallada cada uno de los pasos básicos para realizar una simulación en CFD.

2.1 Identificación de la Naturaleza del sistema a simular

Cada una de las operaciones unitarias o los procesos de separación consideran de forma explícita la naturaleza del sistema. La naturaleza del sistema se refiere a la caracterización de la operación unitaria y es aquella que describe la física predominante en ella. Es decir, las fases válidas, el tipo de flujo, la interacción entre las fases, los fenómenos de transferencia y el objetivo de la operación unitaria, los elementos presentes en el sistema real y las propiedades del sistema. En la Figura 1, se muestra

ejemplos de cada elemento de la naturaleza del sistema.



Figura 1. Elementos de la Naturaleza del sistema

2.2 Elección del enfoque matemático y método numérico

En la CFD, se han desarrollado dos enfoques que permiten realizar la simulación numérica a través de la solución de los modelos matemáticos que gobiernan los fenómenos de transferencia. Para describirlos de forma práctica se plantea la siguiente situación:

Imagine que una persona está en un cauce de un río y desea conocer la forma en la que se generan algunos remolinos (vórtices), la velocidad del agua (patrones de flujo) y la interacción que hay entre el agua - las piedras - el bote (interacción fluido-sólido). Para ello tienes las siguientes opciones:

a. Ser espectador:

Este escenario describe perfectamente el enfoque Euleriano. La persona está en la orilla del río y observa como el bote viaja en el río, convirtiéndolo en un espectador (Figura 2a). En el Enfoque Euleriano, el sistema de interés se divide en "n" cantidad

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

de celdas interrelacionadas (mallado); que pueden contener una sola fase o varias fases dentro de ellas. Esto complica la resolución matemática en especial si es necesario describir el comportamiento de la interfaz.

b. *Ser Participante:*

Este escenario se refiere a un Enfoque Lagrangiano. La persona viaja dentro del bote y es parte movimiento del río (Figura 2b). En el Enfoque Lagrangiano, el sistema de interés se llena de pequeñas partículas que interactúan entre sí, son capaces moverse libremente y adaptarse a la forma del flujo. Cada partícula permanece en la fase que se define inicialmente. Esto facilita la modelación matemática de la interfaz fluido– fluido, fluido – sólido.



a) Espectador Enfoque Euleriano b) Participante Enfoque Lagrangiano

Figura 2. Enfoques matemáticos utilizados en la CFD.

La elección entre un enfoque Euleriano o Lagrangiano en CFD no es una decisión trivial, sino que depende estrechamente del tipo de fenómeno que se desea estudiar y del nivel de detalle requerido en la simulación. El enfoque Euleriano, basado en la discretización del dominio mediante una malla fija, ha sido históricamente el más utilizado en ingeniería química debido a su robustez y a la amplia disponibilidad de modelos físicos implementados en software comerciales. Este enfoque resulta particularmente adecuado para sistemas donde el flujo es relativamente estable y las interfaces entre fases pueden describirse de manera promedio, como ocurre en flujos monofásicos, intercambiadores de calor o columnas empacadas bajo ciertas condiciones de operación (Jamali y col., 2025)

Por otro lado, cuando se analizan sistemas altamente dinámicos, con interfaces complejas y deformables —por ejemplo, la formación de gotas, el rompimiento de chorros líquidos o el comportamiento transitorio del contacto líquido-vapor en platos de destilación— el enfoque Euleriano puede enfrentar dificultades numéricas significativas. En ese sentido, se ha optado por aplicar el enfoque Lagrangiano, ya que

ofrece una alternativa atractiva para describir estos fenómenos, ya que sigue el movimiento de partículas individuales que representan el fluido (Domínguez y col., 2022). Esta característica permite capturar de forma natural la evolución de interfaces y el acoplamiento fluido–fluido o fluido–sólido, sin necesidad de reconstruir explícitamente la geometría de las fases, tal como se hace en el método Euleriano. No obstante, el enfoque Lagrangiano también presenta retos, como el elevado costo computacional y la necesidad de calibrar cuidadosamente los parámetros numéricos.

En la práctica, ambos enfoques deben verse como herramientas complementarias más que excluyentes. Comprender sus fortalezas y limitaciones permite al ingeniero seleccionar la estrategia de modelado más adecuada para cada problema, maximizando la información obtenida y optimizando el uso de recursos computacionales.

Cuando se ha elegido el enfoque sobre el que se desea realizar la simulación numérica con CFD, debe seleccionarse el método numérico que será empleado para resolver las ecuaciones diferenciales parciales en cada paso del tiempo. Cabe resaltar que no existe un método universal, ya que la elección depende de la física dominante del sistema de operación por ejemplo: interfaz, turbulencia, partículas o deformación. Para cada enfoque de CFD se han desarrollado diferentes métodos numéricos, tales como: volumen finito (MVF), elemento finito (MEF), dinámica de partículas suavizadas (SPH), por mencionar a algunos.

Recientemente, se han generado modelos híbridos que han resultado más eficaces en la simulación numérica de fluidos, tales como: VOF + modelos de dispersión y modelos acoplados (DEM/MEF/SPH; Wu et al., 2025). A pesar de estas contribuciones, muchas investigaciones se basan en un solo método numérico siendo el método MVF el estándar industrial y el de reciente aplicación en ingeniería química el método SPH.

En la Figura 3 se presentan los enfoques matemáticos y métodos numéricos utilizados en la simulación numérica y una guía de cuando utilizarlos. Debido a que los requerimientos computacionales son altamente demandantes se han generado alternativas para realizar las simulaciones numéricas de forma paralela en ambientes tanto de CPU como de GPU.

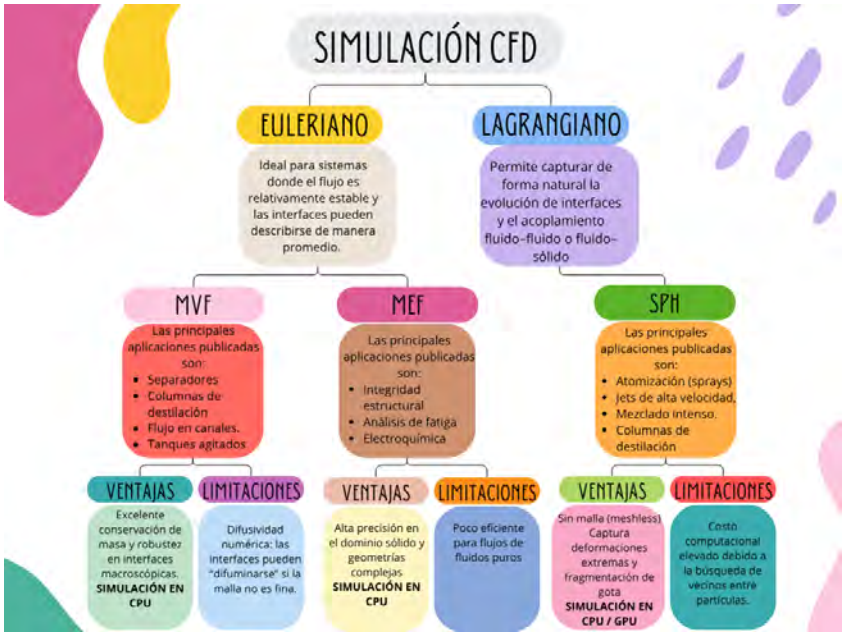


Figura 3. Enfoques matemáticos y métodos numéricos utilizados en la simulación numérica.

El procesamiento CPU corresponde a que las tareas son realizadas por la Unidad de Procesamiento Central que está limitada al número de núcleos presentes en el equipo de cómputo. Por otro lado, la GPU realiza las tareas por la Unidad de Procesamiento Gráfico y está diseñada para ejecutar la misma instrucción (paralelismo masivo) lo que hace más eficiente para casos o tareas más complejas. Cabe resaltar que en la simulación numérica de CFD, el mayor rendimiento no depende solo del hardware, sino de que el problema físico, el modelo matemático y el método numérico estén alineados con la arquitectura computacional de la cual se dispone.

2.3 Dimensionamiento y Diseño CAD del sistema

Esta fase es de suma importancia porque se define el tamaño o la escala del sistema que se desea simular. Para ello se cuenta con diferentes herramientas que permiten generar el diseño en 2D o 3D. Se debe elegir cuantas dimensiones considera el estudio numérico, ya que eso estará relacionado con el requerimiento computacional. Se recomienda que el dimensionamiento del

sistema se realice a partir de un caso de estudio bien definido o de un prototipo experimental. En caso de no contar con las opciones anteriores, se sugiere utilizar simuladores de procesos que permitan conocer la representación geométrica del sistema real. En la Figura 4, se muestran los programas más utilizados para generar la geometría de diseño en 2D y 3D.

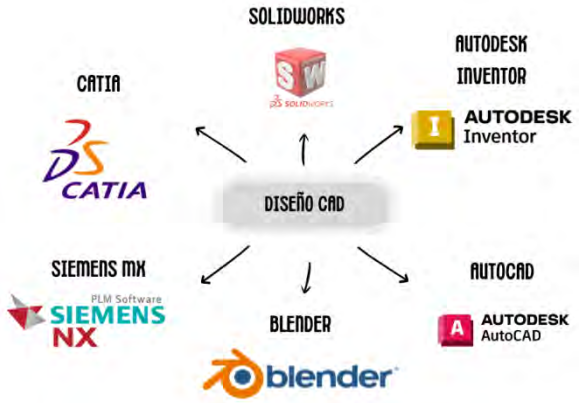


Figura 4. Software de diseño CAD para generar geometrías de diseño en 2D y 3D.

2.4 Métodos de discretización

Un punto importante a considerar es el método de discretización del método numérico seleccionado. La discretización es el proceso mediante el cual las ecuaciones diferenciales parciales (EDP) que describen los fenómenos de transporte (masa, cantidad de movimiento, energía y especies) se transforman en un sistema de ecuaciones algebraicas que posteriormente serán resueltas numéricamente. Una discretización adecuada determina la precisión, estabilidad y el costo computacional de la simulación numérica. En ingeniería química, la discretización debe garantizar la conservación de las propiedades físicas del sistema, debe ser capaz de manejar fenómenos acoplados (reacción-separación) y sobretodo capturar el comportamiento de la interfase. Cabe resaltar que todos los métodos numéricos utilizados en CFD se discretizan, sin embargo, no todos requieren malla para hacerlo (Figura 5). Por ejemplo, el método MVF y MEF son métodos que cuando discretizan las ecuaciones diferenciales requieren una malla para dar solución al método numérico. Es decir, que se generan nodos donde deben resolverse las ecuaciones diferenciales relacionadas entre sí, para cada paso en el tiempo, de manera que la solución encontrada es utilizada por los vecinos como condición inicial. Por otro lado, el método numérico SPH no requiere malla, ya que su discretización está basada en que el dominio se divide en un conjunto de partículas móviles que interaccionan entre sí.

ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato



Figura 5. Métodos de discretización utilizados en los métodos numéricos MVF (Liu et al., 2023), MEF (Ngo & Lim 2020) y SPH (Domínguez et al., 2022).

En la Figura 5 se muestra una comparación entre los métodos numéricos y la forma en la que cada uno ataca aspectos como: tipo de discretización espacial, representación del dominio, tratamiento de la interfase y aproximación a las derivadas espaciales.

Recientemente, los métodos MVF y MEF han implementado que la malla sea capaz de ajustarse a la física del sistema, dando prioridad a aquellas zonas de la geometría que requieran mayor atención para la descripción de los fenómenos de transferencia. En este punto, se suele realizar un análisis para definir la estabilidad de la solución numérica respecto a los recursos computacionales. Para generar esta gráfica, es necesario considerar elegir un caso de estudio (experimental o simulado numéricamente) y reproducirlo haciendo variaciones en el número de celdas o partículas utilizadas y compararlo con la solución obtenida. El objetivo es encontrar el mínimo de requerimientos computaciones (celdas o partículas) que generen estabilidad, consistencia y un valor cercano al esperado.

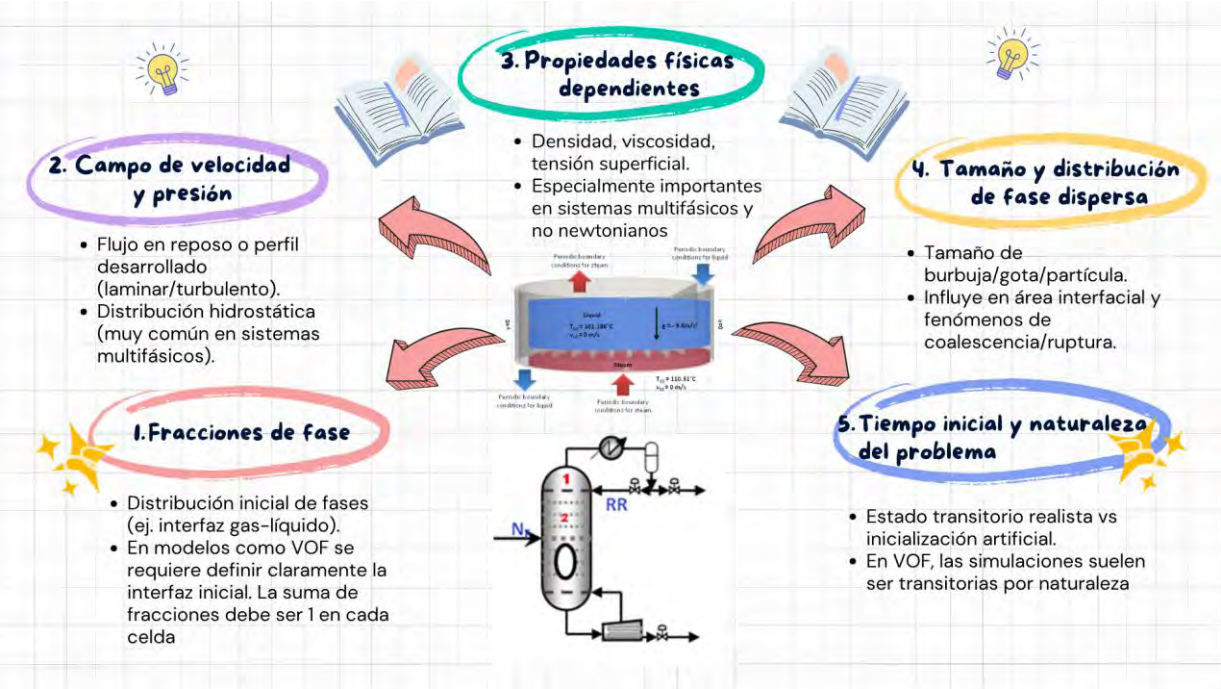


Figura 6. Condiciones iniciales utilizadas en la simulación numérica de procesos de separación.

2.5 Condiciones iniciales

Las condiciones iniciales definen el estado termodinámico, hidrodinámico y de distribución de fases desde el cual el método numérico resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales. Estas condiciones son cruciales en sistemas multifásicos (gas-líquido, líquido-líquido, sólido-fluido), ya que afecta la estabilidad numérica, convergencia y realismo físico del proceso simulado. Si las condiciones iniciales no son físicamente consistentes, pueden generar soluciones numéricamente incorrectas de los fenómenos estudiados en el sistema. Se recomienda que en este punto se utilicen: resultados experimentales o soluciones previas estacionarias. En la Figura 6 se muestran algunas condiciones iniciales que pueden ser utilizadas o ajustadas al problema en estudio, dentro de las que se consideran: fracciones en las fases, campos de velocidad y presión, propiedades físicas dependientes, tamaño y distribución de la fase dispersa y el tiempo inicial de la simulación numérica.

2.6 Simulación numérica

El diseño tradicional de procesos de separación se ha realizado considerado un análisis macroscópico de las operaciones

unitarias. Es decir, el análisis solo se enfoca en determinar las condiciones operación y el diseño conceptual de los equipos que permitan realizar la purificación de las sustancias de interés.

Algunos autores incorporan el análisis de CFD en el rediseño de equipos. Sin embargo, la mayoría centra el diseño de procesos de separación en los fenómenos macroscópicos modelados a través de los balances de materia y energía, considerando para ello algoritmos de optimización.

Estos algoritmos se enfocan en la determinación de las condiciones de operación y parámetros de diseño que minimicen la carga térmica, maximicen las ganancias o minimicen el impacto ambiental.

A pesar de los resultados que se han obtenido con estas técnicas, es posible mejorar el desempeño de los procesos de separación incluyendo el análisis microscópico del sistema, tal como lo han desarrollado algunos investigadores (Martínez-Herrera y col., 2022; Imran y col., 2025; Ghaffarkhah y col., 2019; Mancera-Apolinar y col., 2025). Es decir, incluir los fenómenos de transferencia de masa, calor y momento que permitan aumentar la eficiencia del proceso, considerando la interacción entre las fases y su efecto en la reducción del consumo de energía.

En este sentido CFD ofrece una descripción detallada de los fenómenos presentes en los procesos de separación a través de un análisis microscópico del sistema. Este análisis permite comprender y optimizar procesos a través de los estudios de los fluidos, el transporte de especies químicas y los fenómenos térmicos dentro de equipos industriales. De acuerdo al objetivo que se busque, los análisis mediante CFD suelen clasificarse en análisis hidrodinámico, de transferencia de masa y de transferencia de calor. En la Figura 7, se presenta la información que es posible obtener a partir de la aplicación de la simulación numérica en los procesos de separación. El análisis hidrodinámico se utiliza para estudiar el comportamiento del flujo de los fluidos dentro de un equipo o proceso de separación. Su propósito principal es conocer cómo se distribuyen la velocidad, presión, turbulencia y trayectorias del fluido en el sistema. Este tipo de análisis permite identificar zonas muertas, recirculaciones, regiones de alta turbulencia o problemas de mezclado que afectan directamente la eficiencia del proceso.

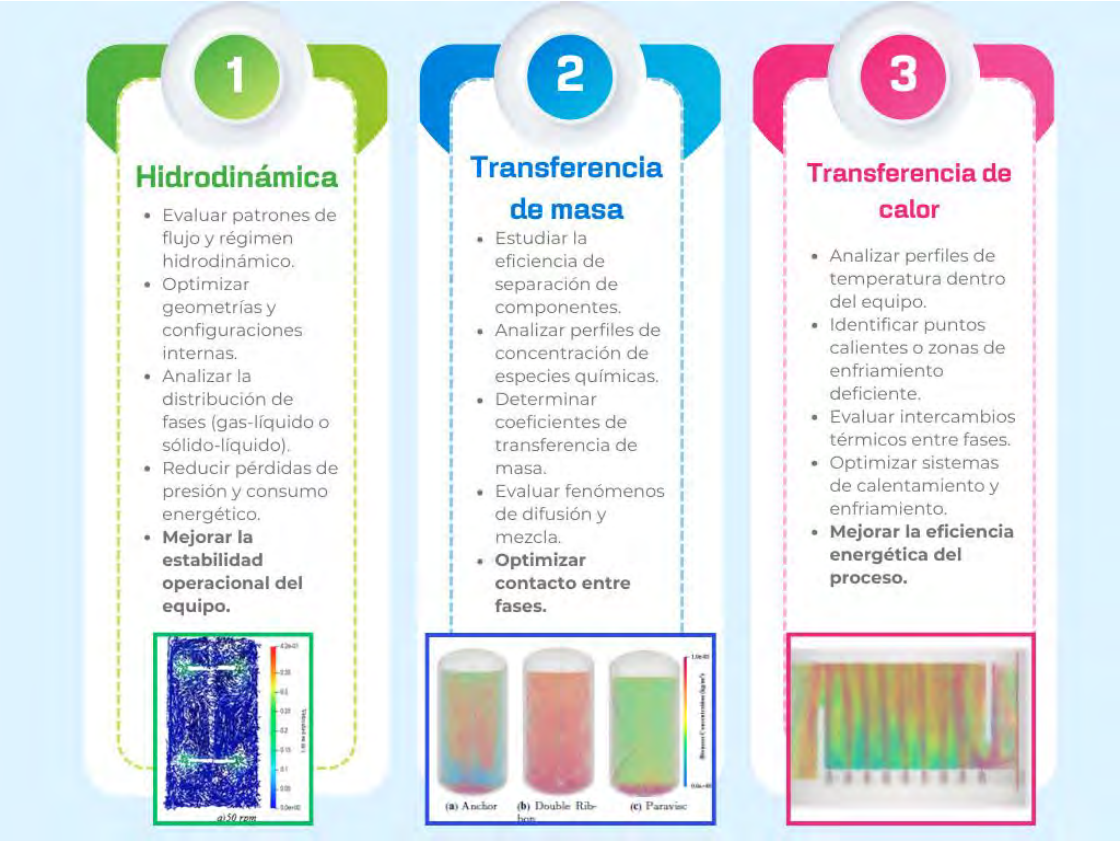


Figura 7. Análisis obtenidos con CFD y que pueden ser aplicados al diseño de procesos en ingeniería Química.

Por ejemplo, en una columna de absorción, el CFD puede utilizarse para verificar si el gas y el líquido se distribuyen uniformemente sobre el empaque, evitando canalizaciones que disminuyan la eficiencia de separación.

El análisis de transferencia de masa se emplea para estudiar el transporte y distribución de especies químicas entre fases o dentro de un fluido. En procesos de separación, este análisis es esencial porque permite evaluar la eficiencia con la que un componente se transfiere de una fase a otra.

Mediante CFD es posible simular fenómenos como difusión molecular, convección y transferencia interfacial, permitiendo determinar concentraciones locales y velocidades de transferencia de masa. Es ampliamente aplicado en operaciones como absorción, extracción líquido-líquido, destilación, secado, cristalización y procesos de membranas. Por ejemplo, en un proceso

Número Especial "Pasado, presente y futuro del PSE y sus aplicaciones"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

de absorción de CO_2, el CFD puede predecir cómo cambia la concentración del gas a lo largo de la columna y determinar si existe una adecuada interacción entre las fases para maximizar la captura del contaminante.

El análisis de transferencia de calor se utiliza para evaluar cómo se distribuye y transporta la energía térmica dentro de un sistema. En los procesos de separación, la temperatura influye directamente sobre propiedades físicas como densidad, viscosidad, volatilidad y solubilidad, por lo que el comportamiento térmico del sistema puede modificar significativamente la eficiencia del proceso. A través de CFD se pueden estudiar mecanismos de conducción, convección y, en algunos casos, radiación térmica. En operaciones como evaporación, destilación o secado, este análisis permite comprender cómo las variaciones de temperatura afectan el equilibrio entre fases y el desempeño global del equipo. Por ejemplo, en una columna de destilación, el CFD puede utilizarse para analizar la distribución térmica a lo largo de las etapas, permitiendo optimizar el suministro de calor en el rehervidor y mejorar la separación de componentes.

2.7 *Intensificación de procesos*

En la práctica industrial y académica, estos tres tipos de análisis suelen integrarse en una misma simulación CFD, ya que los fenómenos hidrodinámicos, térmicos y de transferencia de masa están fuertemente acoplados. La integración de CFD en el diseño de procesos de separación no busca reemplazar los métodos clásicos, sino enriquecerlos mediante una visión multiescala del sistema. Así, la combinación de estos análisis permite obtener una representación más realista del proceso y facilita el diseño, escalamiento y optimización de equipos de separación con menor costo experimental y mayor precisión.

A partir de estas simulaciones microscópicas, es posible identificar zonas de mal contacto entre fases, regiones con altos gradientes de velocidad o temperatura, y fenómenos indeseables como la canalización, por ejemplo cuando se utilizan empaques dentro del equipo. Esta información permite proponer modificaciones geométricas o ajustes operativos que difícilmente podrían deducirse a partir de modelos globales. Una vez implementadas estas mejoras a nivel microscópico, los resultados pueden ser

capaces de conducir a procesos más eficientes y compactos.

Esta metodología facilita la exploración de escenarios innovadores, uso de secuencias no convencionales o configuraciones intensificadas, reduciendo la necesidad de pruebas experimentales costosas y acelerando el desarrollo tecnológico. Retroalimentar el diseño macroscópico, ajustando parámetros como la eficiencia de etapa, el número real de etapas o la carga energética requerida. Este ciclo iterativo entre diseño clásico y simulación CFD constituye una poderosa metodología de diseño para los procesos de separación.

3. Ejemplo de aplicación

A continuación se presenta un ejemplo centrado en describir el comportamiento de los fluidos dentro de una etapa de equilibrio tipo sieve de una columna de destilación y que sigue la metodología propuesta. El caso de estudio describe detalladamente todas las fases a considerar en la simulación de un proceso de separación, desde la naturaleza del sistema hasta los resultados de la simulación numérica. Para posteriormente, proponer alternativas de intensificación de procesos. Esta metodología se presenta en la Figura 8 y se detalla cada uno de los puntos de la metodología propuesta.

Se considera como parte de los procesos de separación la columna de destilación. En esta operación unitaria, es de vital importancia garantizar el contacto íntimo entre la fase líquida y la fase vapor para favorecer la transferencia de masa y calor. Otro punto importante a considerar es la distribución adecuada del medio continuo (líquido) y la fase dispersa (vapor) en la etapa de equilibrio. Por lo tanto se ha elegido el método SPH con enfoque lagrangiano para describir el equilibrio térmico y la hidrodinámica de la columna. El método de discretización fue por medio de partículas.

El dimensionamiento y algunas condiciones iniciales del proceso se obtuvieron de AspenOne. De esta forma se complementa el diseño macroscópico (condiciones de operación y dimensionamiento de equipo) con el diseño microscópico (contacto íntimo entre las fases). De la simulación numérica se obtuvieron los regímenes de flujo, el perfil de velocidad, el perfil de temperatura y el análisis de la exudación del plato tipo sieve. Para este caso se realizaron variaciones de 85, 90 y 95% del área

efectiva del plato sieve, determinándose que el mejor contacto entre las fases líquido-vapor se obtiene cuando el área efectiva es del 90%. De igual manera, los perfiles de temperatura mostraron que si el área efectiva es del 90%, se favorece notablemente la transferencia de calor.

Esta metodología evidencia que cuando se emplea de manera integrada los métodos clásicos de diseño y la CFD no solo mejora la precisión del diseño, sino que impulsa una nueva forma de pensar los procesos, orientada a la intensificación, la reducción del consumo energético y la minimización del impacto ambiental.



Figura 8. Análisis numérico de hidrodinámica y transferencia de calor en una etapa de equilibrio tipo sieve, de una columna de destilación.

4. CONCLUSIONES

En este artículo se presenta una guía para el desarrollo de una simulación numérica de un proceso de separación considerando desde la naturaleza del sistema hasta alternativas para mejorarlo. Para ello, se combina la síntesis y el diseño de procesos tradicional con el

análisis numérico de CFD. Esta combinación puede ser un catalizador de un cambio en el diseño de procesos de la ingeniería química. Al permitir transitar de un diseño basado en suposiciones empíricas y modelos de "caja negra" hacia una comprensión profunda y visual de los fenómenos de transporte.

En este sentido, optimizar procesos de separación mediante estas herramientas no es únicamente una cuestión de eficiencia técnica, sino un imperativo ético y económico en la ruta hacia la sostenibilidad global. Al descifrar la complejidad del flujo en cada plato de una columna o en cada rincón de un reactor, se reduce la huella energética, se minimiza el desperdicio de recursos y se acelera la innovación.

El uso de CFD en el diseño tradicional de procesos representa, por tanto, la diferencia entre operar un proceso y dominarlo por completo, garantizando que la industria química del mañana sea más inteligente, limpia y eficiente que nunca.

Con esta herramienta es posible describir la realidad física que ocurre a escala microscópica dentro de los equipos, ofreciendo nuevas oportunidades para innovar en el diseño, mejorar la eficiencia energética y reducir el impacto ambiental de los procesos de separación. Sin embargo, es necesario validar de forma experimental los resultados obtenidos con las herramientas de CFD. Con esta información y la integración de la inteligencia artificial será posible determinar modelos matemáticos subrogados más confiables, capaces de predecir perfiles de velocidad, concentración o temperatura, interactuando con la simulación numérica rigurosa. Con esta metodología, simular lo invisible deja de ser un ejercicio académico para convertirse en una estrategia tangible de innovación tecnológica en la ingeniería química del siglo XXI.

Declaratoria de derechos de autor sobre las figuras y tablas realizadas

Todas las tablas incluidas en el manuscrito son trabajos originales creados por los autores específicamente para este artículo de divulgación. Las figuras representan una síntesis, clasificación y presentación original de la información elaboradas por los autores. Por consiguiente, las figuras no constituyen reproducciones ni adaptaciones de material protegido por derechos de autor y, por lo tanto, no requieren autorizaciones de derechos de autor. Según el saber y entender de los autores, ninguna tabla, figura o

elemento gráfico incluido en el manuscrito reproduce ni adapta material protegido por derechos de autor publicado anteriormente; todos esos elementos han sido desarrollados de forma independiente por los autores

Referencias bibliográficas

Canchola-López, P. G., Vázquez-Hernández, A. E., Cortez-González, J., Murrieta-Dueñas, R., Gutiérrez-Guerra, R., & Alvarado-Rodríguez, C. E. (2023). Numerical simulation of the LV equilibrium within a stage in a distillation column using CFD. *Computer Aided Chemical Engineering*, 52, 1347-1352. https://doi.org/10.1016/B978-0-443-15274-0.50214-6

Cortez-González, J., Murrieta-Dueñas, R., Alvarado-Rodríguez, C. E., Segovia-Hernández, J. G., Hernández, S., & Gutiérrez-Guerra, R. (2024). New Approach Lagrangian for Numerical Analysis Within LV One Equilibrium Stage of a Distillation Column Using the SPH Method. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 63(50), 21974-21990. https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c03313

Domínguez, J. M., Fourtakas, G., Altomare, C., Canelas, R. B., Tafuni, A., García-Feal, O & Gómez-Gesteira, M. (2022). DualSPHysics: from fluid dynamics to multiphysics problems. *Computational Particle Mechanics*, 9(5), 867-89. https://doi.org/10.1007/s40571-021-00404-2

Ferhath, A. A. (2025). A comprehensive study on the role of CFD in modern suspension engineering. *Discover Vehicles*, 1(1), 1-42. https://doi.org/10.1007/s44465-025-00001-0

Ghaffarkhah, A., Dijvejin, Z. A., Shahrabi, M. A., Moraveji, M. K., & Mostofi, M. (2019). Coupling of CFD and semiempirical methods for designing three-phase condensate separator: case study and experimental validation. *Journal of petroleum exploration and production technology*, 9(1), 353-382. https://doi.org/10.1007/s13202-018-0460-5

Imran, M., Lau, K. K., Ahmad, F., & Laziz, A. M. (2025). A comprehensive review of Computational Fluid Dynamics (CFD) modelling of membrane gas separation process. *Results in Engineering*, 26, 105531. https://doi.org/10.1016/j.rineng.2025.105531

Jamali, M., Azari, A., & Rashidi, M. M. (2026). CFD modeling of CO_2 capture in a packed column using amine-based

nanofluids: Effects of $Al2O_3$, SiO_2 and TiO_2 nanoparticles. *Journal of CO_2 Utilization*, 107, 103400. https://doi.org/10.1016/j.jcou.2026.103400

Krishna, R. V. J. M., & Van Baten, J. M. (2003). Modelling sieve tray hydraulics using computational fluid dynamics. *Chemical Engineering Research and Design*, 81(1), 27-38. https://doi.org/10.1205/026387603321158168

Kuipers, J. A. M., & van Swaaij, W. P. M. (1998). Computational fluid dynamics applied to chemical reaction engineering. *Advances in chemical engineering*, 24, 227-328. https://doi.org/10.1016/S0065-2377(08)60094-0

Mancera-Apolinar, J. A., Mendoza, D. F., Andersson, R., & Riascos, C. A. M. (2025). Heat and MassTransfer Study of Top-Heat-Integrated Distillation Column (T-HIDiC) using CFD. *Chemical Engineering Transactions*, 117, 871–876. https://doi.org/10.3303/CET25117146

Martínez-Herrera, G., Cortez-González, J., Murrieta-Dueñas, R., Uribe-Ramírez, A. R., Pérez-Segura, T., & Alvarado-Rodríguez, C. E. (2022). Smoothed particles hydrodynamics simulations of microbial kinetic in a stirred bioreactor whit proximity impeller. *Computational Particle Mechanics*, 9(5), 1017-1029. https://doi.org/10.1007/s40571-022-00462-0

Monge-Gapper, J. G., & Serrano-Pacheco, A. (2023) An implementation of the SPH method and its application to two-dimensional dam break cases". Ingeniería, investigación y tecnología, 24(1). https://doi.org/10.22201/fi.25940732e.2023.24.1.005

Ngo, S. I., & Lim, Y. I. (2020). Multiscale Eulerian CFD of chemical processes: A review. Chemical Engineering, 4(2), 23. https://doi.org/10.3390/chemengineering4020023

Van der Hoef, M. A., van Sint Annaland, M., & Kuipers, J. A. M. (2004). Computational fluid dynamics for dense gas–solid fluidized beds: a multi-scale modeling strategy. Chemical Engineering Science, 59 (22-23), 5157-5165. https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.07.013

Wu, Y., Zheng, Q., Yang, L., & Yu, A. (2025). Coupled CFD-FEM approach for dense particle-fluid flows. International Journal of Mechanical Sciences, 110985.

https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2025.110985

Zarei, A.; Hosseini, S. H.; Rahimi, R. (2013). CFD and experimental studies of liquid weeping in the circular sieve tray columns". Chemical Engineering Research and Design 91(12), 2333-2345. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.03.006

Zarei, A.; Hosseini, S. H.; Rahimi, R. (2013). CFD study of weeping rate in the rectangular sieve trays. *J. Taiwan Inst. Chem. Eng*., 44(1), 27-33. https://doi.org/10.1016/j.jtice.2012.10.004