



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

**“SIMULACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA DENTRO DE
UN REACTOR BIOLÓGICO TUBULAR EN DINÁMICA
COMPUTACIONAL DE FLUIDOS”**

T E S I S

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERA QUÍMICA**

PRESENTA

REYES SÁNCHEZ ANTONIA



CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX

2022



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: DR. SERGIO ADRIÁN GARCÍA GONZALEZ

VOCAL: DRA. GEMA LUZ ANDRACA AYALA

SECRETARIO: IQ. DAVID FRAGOSO OSORIO

1er. SUPLENTE: IQ. ÚRSULA MANRÍQUEZ TOLSÁ

2° SUPLENTE: DR. ALFONSO DURÁN MORENO

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

UNIDAD DE PROYECTOS Y DE INVESTIGACIÓN EN INGENIERÍA AMBIENTAL, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM, LABORATORIOS 301 A 303, CONJUNTO E

ASESOR DEL TEMA:

DR. SERGIO ADRIÁN GARCÍA GONZALEZ

SUPERVISOR TÉCNICO:

DR. ALFONSO DURAN MORENO

SUSTENTANTE:

ANTONIA REYES SÁNCHEZ



AGRADECIMIENTOS

Este trabajo está dedicado a mi familia, iniciando por mi padre, quien gracias a sus esfuerzos contribuyó a mi desarrollo profesional y la conclusión de mis estudios. A mis hermanos, quienes creyeron en mí y me apoyaron incondicionalmente hasta el último momento. Principalmente a mi madre que, aunque no se encuentre más en este plano terrenal, sigue haciéndome falta hoy más que nunca: *Todo esto fue por ti y para ti.*

Agradezco a mis amigos Fernanda Beltrán, Kiara Nava, Elizabet Julián, Samantha Vivian, Angel Alvarez y Eduardo Solis con quienes compartí vivencias divertidas e inigualables, momentos de frustración, pero sobre todo de risas, superación y mutua motivación.

A mi pareja Roberto Avilez, motor que impulsa cada aspecto de mi vida a mejorar como persona y quien me incita e influye a seguir mis objetivos hasta alcanzarlos. Gracias por todo lo que haces por mí, por todo lo feliz que soy, por tu inmenso cariño, atención y apoyo.

También quiero agradecer a mis compañeros del laboratorio 301 de la UPPIA por hacer amena mi estancia. A los doctores Sergio Adrián García González y Alfonso Durán Moreno por brindarme las herramientas necesarias y guiarme durante cada una de las etapas de este proyecto para lograr los resultados esperados.

Agradezco a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA, PAPIIT-IT/102118) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) por el apoyo financiero proporcionado sin el cual no hubiera sido posible realizar este proyecto

Finalmente estoy eternamente agradecida con mi alma máter la Universidad Nacional Autónoma de México quien me brindó los mejores años de mi vida y donde coseché recuerdos en cada rincón de sus instalaciones. Me enorgullezco enormemente de decir que recorrí los pasillos y edificios de la Facultad de Química y aprendí más allá de lo que se enseña en sus aulas.



CONTENIDO

| | |
|---|----------|
| AGRADECIMIENTOS..... | i |
| ÍNDICE DE TABLAS | iv |
| ÍNDICE DE FIGURAS..... | v |
| LISTA DE ACRÓNIMOS | vii |
| RESUMEN..... | viii |
| ABSTRACT | ix |
| CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN | 1 |
| 1. Problemática | 1 |
| 2. Justificación..... | 3 |
| 3. Objetivo General..... | 3 |
| CAPÍTULO II MARCO TEÓRICO | 4 |
| 1. Reactor Biológico Tubular | 4 |
| 1.1. Descripción del proceso..... | 4 |
| 1.2. Tratamiento de aguas residuales | 5 |
| 1.2.1. Procesos biológicos | 5 |
| 1.2.2. Tratamiento aerobio | 6 |
| 1.3. Reactor de Biopelícula | 6 |
| 1.3.1. Soporte de biopelícula | 7 |
| 1.3.2. Ventajas de soporte de fibra no tejida..... | 7 |
| 1.3.3. Método de aireación..... | 8 |
| 2. Dinámica de Fluidos Computacional (DCF)..... | 9 |
| 2.1. ¿Qué es DCF? | 10 |
| 2.2. Historia de la DCF | 10 |
| 2.3. Ventajas y desventajas de la DCF | 10 |
| 2.4. Proceso de código de trabajo | 11 |
| 2.5. Matemáticas de la DCF | 12 |
| 2.5.1. Ecuaciones de conservación del fluido..... | 13 |
| 2.5.2. Método de Volumen Finito | 19 |
| 2.5.3. Mallado..... | 21 |
| 2.6. Fluidos multifásicos | 28 |
| 2.6.1. Enfoques para cálculos numéricos multifásicos..... | 30 |
| 2.6.2. Enfoque Euleriano- Euleriano..... | 30 |
| 2.7. Modelado de turbulencia | 31 |



| | |
|--|----|
| CAPÍTULO III METODOLOGÍA..... | 33 |
| 1. Pre- procesamiento..... | 34 |
| 1.1. Geometría..... | 34 |
| 1.1.1. Módulo del reactor..... | 36 |
| 1.1.2. Soporte interno..... | 37 |
| 1.1.3. Codos y reductores..... | 38 |
| 1.1.4. Preparación de la geometría..... | 39 |
| 1.2. Mallado..... | 39 |
| 1.2.1. Métodos..... | 41 |
| 1.2.2. Calidad de la malla final..... | 42 |
| 1.3 Selección de nombres (<i>Name Selection</i>)..... | 45 |
| 2. Procesamiento Ansys Fluent..... | 46 |
| 2.1. General..... | 46 |
| 2.2. Modelos (<i>Models</i>)..... | 47 |
| 2.2.1. Materiales (<i>Materials</i>)..... | 47 |
| 2.2.2. Fases (<i>Phases</i>)..... | 47 |
| 2.2.3. Condiciones de Frontera (<i>Boundary conditions</i>)..... | 48 |
| 2.3. Solución (<i>Solution</i>)..... | 50 |
| 2.3.1. Métodos (<i>Methods</i>)..... | 50 |
| 2.3.2. Controles (<i>Controls</i>)..... | 51 |
| 2.3.3. Definición de reportes (<i>Report definitions</i>)..... | 51 |
| 2.3.4. Inicialización (<i>Initialization</i>)..... | 51 |
| 2.3.5. Iniciar cálculos (<i>Run Calculation</i>)..... | 52 |
| 3. Post- Proceso (Solving)..... | 52 |
| CAPÍTULO IV ANÁLISIS Y RESULTADOS..... | 54 |
| 1. Variación del flujo de entrada de aire..... | 55 |
| 2. Variación del flujo de entrada de agua..... | 61 |
| 3. Turbulencia..... | 67 |
| 4. Caída de Presión..... | 69 |
| 5. Resumen de Resultados..... | 75 |
| CAPÍTULO V CONCLUSIONES..... | 76 |
| RECOMENDACIONES..... | 78 |
| REFERENCIAS..... | 79 |



ÍNDICE DE TABLAS

| | |
|---|-----------|
| <i>Tabla 1. Comparación de las tres técnicas de solución</i> | <i>9</i> |
| <i>Tabla 2. Expresiones empíricas para las leyes de conservación</i> | <i>14</i> |
| <i>Tabla 3. Orthogonal Quality y Skewness y sus criterios de calidad</i> | <i>28</i> |
| <i>Tabla 4. Resumen de regímenes de flujo multifásicos</i> | <i>29</i> |
| <i>Tabla 5. Modelos de turbulencia</i> | <i>32</i> |
| <i>Tabla 6. Características del módulo del reactor.....</i> | <i>36</i> |
| <i>Tabla 7. Características del soporte interno.....</i> | <i>37</i> |
| <i>Tabla 8. Características de codos.</i> | <i>38</i> |
| <i>Tabla 9. Características reducción.....</i> | <i>38</i> |
| <i>Tabla 10. Resultados de número de nodos y elementos</i> | <i>42</i> |
| <i>Tabla 11. Criterios de calidad para el mallado.....</i> | <i>43</i> |
| <i>Tabla 12. Modelos</i> | <i>47</i> |
| <i>Tabla 13. Propiedades físicas de los materiales en la zona del fluido.....</i> | <i>48</i> |
| <i>Tabla 14. Velocidades de aire</i> | <i>49</i> |
| <i>Tabla 15. Velocidades de agua</i> | <i>50</i> |
| <i>Tabla 16. Pruebas y contornos utilizados para cada simulación</i> | <i>54</i> |
| <i>Tabla 17. Caída de presión.....</i> | <i>74</i> |
| <i>Tabla 18. Resumen de resultados</i> | <i>75</i> |



ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 1. Trazas de partículas coloreadas por la magnitud de la velocidad de la partícula usando ley de arrastre no esférica, a velocidad de flujo de aire de 0.5 m/s. (Olatunde & Fasina, 2019)..... | 2 |
| Figura 2. Reactor Biológico Tubular | 4 |
| Figura 3. Resumen general de DCF..... | 12 |
| Figura 4. Esquema general de solución en DCF (Bhaskaran, 2016)..... | 13 |
| Figura 5. Elemento de fluido (Mata Cárdenas, 2017)..... | 15 |
| Figura 6. Conservación de la masa en un volumen control. (Tu, Yeoh, & Liu, 2018) | 16 |
| Figura 7. Volumen control de esquemas Cell- center (a) y Cell- vertex (b) (volumen control dual) (Blazek, 2015)..... | 20 |
| Figura 8. Volúmenes Control típicos para una malla cartesiana en 2D (a) y en una malla cartesiana 3D (b) (Ferziger & Peric, 2002). | 21 |
| Figura 9. Malla estructurada no ortogonal (Ferziger & Peric, 2002)..... | 22 |
| Figura 10. Malla estructurada en bloques (Ferziger & Peric, 2002) | 23 |
| Figura 11. Malla no estructurada (Ferziger & Peric, 2002)..... | 23 |
| Figura 12. Elementos para modelos 3D y 2D de una malla (Garzón Sánchez, Santiago Humberto, 2014) | 24 |
| Figura 13. Tipos de celdas (Córdoba Fernández, 2016)..... | 25 |
| Figura 14. Tetrahedrons (Córdoba Fernández, 2016) (Ozen Engineering, Inc., 2014)..... | 26 |
| Figura 15. Sweep (Córdoba Fernández, 2016) (Ozen Engineering, Inc., 2014)..... | 27 |
| Figura 16. Multizone (Córdoba Fernández, 2016) (Ozen Engineering, Inc., 2014) | 27 |
| Figura 17. Patrones de flujo (Denn & Russell, 1980) (Bakker & Marshall, Computational Fluid Dynamics. Encyclopedia of Chemical Processing, 2004) | 29 |
| Figura 18. Desarrollo de la metodología | 33 |
| Figura 19. Geometría del RBT versión 1 | 34 |
| Figura 20. (a) Reducciones cuerpo cónico (b) Reducciones geometría sencilla | 35 |
| Figura 21. Geometría del RBT versión 2 | 35 |
| Figura 22. Geometría del RBT Versión Final | 36 |
| Figura 23. Modulo del reactor | 36 |
| Figura 24. (a) Vista frontal del soporte (b) Acercamiento a canales de flujo (c) Boceto para canales de flujo y fibra (d) largo del soporte | 37 |
| Figura 25. (a) Codo salida vista posterior (b) Codo salida vista frontal (c) Codo entrada vista isométrica. | 38 |
| Figura 26. Dominio del fluido | 39 |
| Figura 27. Malla preliminar para la primera versión de la geometría del reactor en el módulo 1..... | 40 |
| Figura 28. Cuerpos seleccionados para Multizone 1 y Body sizing 1 | 41 |
| Figura 29. Reductores seleccionados para Patch Conforming..... | 41 |
| Figura 30. Tetraedros en reductor y hexaedros en cuerpo y codos del reactor. | 42 |
| Figura 31. Calidad de la malla y estadísticas para Skewness y Orthogonal Quality | 42 |
| Figura 32. Gráfica de las métricas de la malla - Orthogonal Quality | 43 |
| Figura 33. Gráfica de las métricas de malla-Skewness..... | 44 |
| Figura 34. Element Quality, vista isométrica del reactor..... | 44 |
| Figura 35. Element Quality, corte transversal sobre eje yz..... | 45 |
| Figura 36. Element Quality, vista ejes XY | 45 |
| Figura 37. Name Selection..... | 45 |
| Figura 38. Mallado poliédrico en reductor de salida con la herramienta Make Polyhedra de ANSYS Fluent. | 46 |
| Figura 39. Métodos utilizados para la solución. | 50 |
| Figura 40. Factores de relajación | 51 |
| Figura 41. Residuales vs iteraciones | 52 |
| Figura 42. Reporte para el Flujo Másico de salida de agua..... | 53 |
| Figura 43. Reporte para Flujo Volumétrico de salida de agua | 53 |



| | |
|---|----|
| Figura 44. Contornos de velocidades del aire (Fila izquierda) Contornos de velocidades del agua (Fila derecha)..... | 56 |
| Figura 45. Gráfica de Velocidad del aire vs distancia radial..... | 56 |
| Figura 46. Velocidad del agua vs distancia radial | 57 |
| Figura 47. Contornos de velocidad del aire (izquierda) y del agua (derecha) sobre el eje YZ..... | 58 |
| Figura 48. Contornos de fracción de volumen de aire (izquierda) y de agua (derecha) | 59 |
| Figura 49. Contornos de fracción de volumen de aire (Izquierda) y de agua (derecha) sobre el eje YZ | 60 |
| Figura 50. Acercamiento a reductores de entrada para la fracción de volumen de aire | 61 |
| Figura 51. Acercamiento a reductores de entrada para la fracción de volumen de agua..... | 61 |
| Figura 52. Contornos de velocidades para la Prueba 2. Velocidad de aire (izquierda). Velocidad del agua (Derecha)..... | 62 |
| Figura 53. Gráficas de velocidad del aire (izquierda) y velocidad del agua (derecha) vs distancia radial.. | 63 |
| Figura 54. Contornos de velocidad de aire (izquierda) y agua (derecha) para la Prueba 2 en el plano YZ. | 64 |
| Figura 55. Contornos de fracción de volumen de aire (izquierda) y de fracción de volumen de agua (derecha) para la Prueba 2. | 65 |
| Figura 56. Contornos de Fracción de volumen de aire en el plano YZ | 66 |
| Figura 57. Contornos de fracción de volumen de agua en el eje YZ | 66 |
| Figura 58. Contornos de turbulencia para la Prueba 1 (izquierda) y para la Prueba 2 (derecha). | 68 |
| Figura 59. Gráfico de Turbulencia vs Distancia radial para Prueba 1 y Prueba 2, respectivamente. | 68 |
| Figura 60. Contornos de Presión para Prueba 1 (izquierda) y Prueba 2 (derecha). | 70 |
| Figura 61. Gráfico Presión vs Distancia radial para la Prueba 1..... | 71 |
| Figura 62. Gráfico Presión vs Distancia radial para la Prueba 2..... | 71 |
| Figura 63. Contornos de presión en el plano YZ para la Prueba 1 y Prueba 2, respectivamente. | 72 |
| Figura 64. Localización de la presión de entrada | 73 |
| Figura 65. Localización de la presión de salida..... | 73 |



LISTA DE ACRÓNIMOS

| | |
|------|-----------------------------------|
| RBT | Reactor Biológico Tubular |
| DCF | Dinámica Computacional de Fluidos |
| FAD | Flotación por Aire Disuelto |
| PEC | Polisacáridos Extracelulares |
| MDF | Método de Diferencias Finitas |
| MEF | Método de Elementos Finitos |
| MVF | Método de Volúmenes Finitos |
| EDP | Ecuación Diferencial Parcial |
| MVF | Método de Volumen de Fluido |
| PRNS | Promedio Reynolds -Navier-Stokes |
| SLE | Simulación Lager- Eddy |
| SND | Simulación Numérica Directa |



RESUMEN

El presente tema de investigación se basa en la simulación en la Dinámica Computacional de Fluidos (DCF) de la hidrodinámica de un sistema de flujo bifásico con régimen tipo burbuja que tiene como funcionalidad el tratamiento de un influente de aguas residuales, conocido como Reactor Biológico Tubular (RBT). Dicho reactor consta de cinco módulos tubulares, de los cuales cuatro están dirigidos al tratamiento biológico teniendo una configuración de tubos concéntricos de soportes no tejidos para la fijación de la biomasa y para el crecimiento de microorganismos. Esta tecnología actualmente cuenta con solicitud de patente con clave MX/a/2017/014623.

Existen tres maneras en las que se estudian los modelos multifásicos: (1) experimentalmente a través de modelos a escala de laboratorio equipados con instrumentación apropiada, (2) teóricamente, usando ecuaciones matemáticas y modelos para el flujo y (3) computacionalmente, usando la potencia y el poder computacional de un equipo de cómputo moderno para abordar la complejidad del flujo. Claramente, hay algunas aplicaciones en las que son posibles modelos de laboratorio a gran escala. Pero en muchos casos, el modelo de laboratorio podría tener una escala muy diferente a la del prototipo y para ello un modelo teórico o computacional confiable es esencial para una extrapolación efectiva a escala del prototipo. (Brennen, 2005)

“La Dinámica Computacional de Fluidos (DCF) es el análisis de sistemas que involucran flujo de fluidos, transferencia de calor y fenómenos asociados tal como reacciones químicas, obteniendo la solución por medio de una computadora” (Versteeg & Malalasekera, 2007). La DCF servirá de herramienta principal para desarrollar la simulación de los fenómenos dentro del Reactor Biológico Tubular.

El uso de la DCF permitirá obtener un modelo que describa la hidrodinámica, en un flujo bifásico de contaminantes, los resultados permitirán obtener una herramienta predictiva para definir la operación de la tecnología y así realizar su escalamiento.



ABSTRACT

This research topic is based on the simulation in Computational Fluid Dynamics (CFD) of the hydrodynamics of a biphasic flow system with bubble type system whose functionality is the treatment of a wastewater influent, known as a Tubular Biological Reactor (TBR). Which reactor consists of five tubular modules, where four are directed to the biological treatment having a configuration of concentric tubes of nonwoven supports for the fixation of the biomass and for the growth of microorganisms. This technology currently has a patent application with key MX/a/2017/014623.

There are three ways in which multiphasic models are studied: (1) experimentally through laboratory-scale models equipped with appropriate instrumentation, (2) theoretically, using mathematical equations and models for flow and (3) computationally, using power and computational power of a modern computer equipment to address the complexity of the flow. Clearly, there are some applications in which large-scale laboratory models are possible. But in many cases, the laboratory model could have a very different scale than the prototype and for this a reliable theoretical or computational model is essential for an effective extrapolation at the prototype scale. (Brennen, 2005)

“Computational Fluid Dynamics is the analysis of systems that involve fluid flow, heat transfer and associated phenomena such as chemical reactions, obtaining the solution through a computer” (Versteeg & Malalasekera, 2007). CFD will serve as the main tool to develop the simulation of the phenomena within the Tubular Biological Reactor.

The use of CFD will allow obtaining a model that describes hydrodynamics, in a biphasic flow of pollutants, the results will allow obtaining a predictive tool to define the operation of the technology and thus perform its scaling.



CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN

1. Problemática

“Los flujos bifásicos gas-líquido están presentes en procesos industriales y naturales de diferente naturaleza como reactores químicos y nucleares, flujo en ductos petroleros o intercambiadores de calor” (Peña-Monferrer, Passalacqua, Chiva, & Muñoz-Cobo, 2016). La finalidad de este trabajo consiste en estudiar un reactor de flujo bifásico con régimen tipo burbuja, el cual dará marcha al tratamiento de un influente de aguas residuales. Durante los últimos años, en la Unidad de Proyectos y de Investigación e Ingeniería Ambiental de la Facultad de Química, los doctores Durán-Moreno y García-González han implementado un prototipo del Reactor Biológico Tubular (RBT) y se ha corroborado su buen funcionamiento; sin embargo, el estudio de la hidrodinámica no ha sido estudiado ampliamente, por lo que este tipo de estudio es una parte fundamental para la mejora del dispositivo experimental.

Para poseer un mejor entendimiento del flujo a dos fases dentro del RBT, se busca analizar su hidrodinámica y comportamiento dentro de los módulos destinados al tratamiento biológico. Parafraseando al autor Brennen (Brennen, 2005), la complejidad de un flujo bifásico presenta un gran obstáculo para la comprensión de los fenómenos de flujo dentro del reactor pues el codificar las ecuaciones de transporte para cada una de las fases y calcular cada detalle del flujo bifásico, el movimiento del fluido de cada partícula, así como la existencia de un flujo turbulento vuelven al problema un reto astronómico (Brennen, 2005). Dicho de otro modo, este modelo es difícil de predecir con métodos convencionales, como un modelo de laboratorio, debido a la complejidad de eventos que ocurren en un reactor.

Olatunde y Fascina (2019) estudiaron la influencia de las ecuaciones de arrastre en el comportamiento de fluidización de la madera de pino *loblolly*, usada como biomasa para lograr una mezcla de combustibles renovables con combustibles fósiles. Como resultado, demostraron que las ecuaciones de arrastre no



esféricas predijeron la velocidad mínima de fluidización mejor que otras ecuaciones de arrastre (Olatunde & Fasina, 2019). En otras palabras, y para fines de sustento de esta tesis, fueron capaces de modelar el comportamiento de fluidización en una simulación en estado transitorio hasta alcanzar el comportamiento experimental, como se puede observar en la Figura 1.

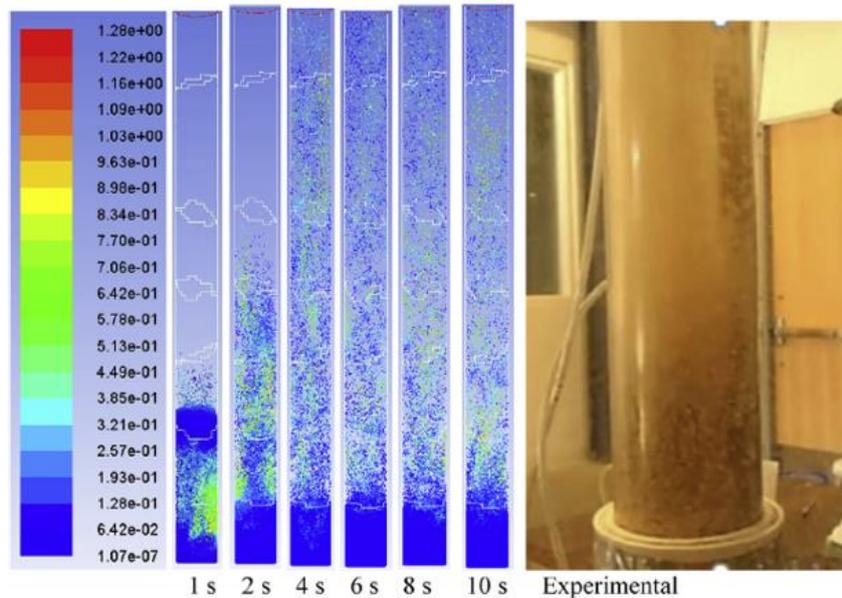


Figura 1. Trazas de partículas coloreadas por la magnitud de la velocidad de la partícula usando ley de arrastre no esférica, a velocidad de flujo de aire de 0.5 m/s. (Olatunde & Fasina, 2019).

Otros autores, como Lee et al., utilizaron DCF para la optimización de un sistema de Flotación por Aire Disuelto (DAF) que, al igual que el RBT a estudiar, es un proceso de tratamiento de aguas para purificar contaminantes. La diferencia estriba en que utilizan un efecto de flotabilidad para unir microburbujas en la superficie libre. Encontraron que el modelo estándar $k - \varepsilon$, a pesar de ser utilizado convencionalmente en la mayoría de los estudios, no es el apropiado para el proceso DAF y examinaron diversas condiciones de la microburbuja, como la fracción de volumen, el tamaño de la burbuja y la velocidad de entrada (Lee, y otros, 2019).

Diversos estudios han detallado la dinámica de fluidos del flujo a dos fases en DCF, evaluando diferentes enfoques en los modelos de turbulencia, arrastre y multifase y su comportamiento de acuerdo con sus condiciones de frontera iniciales. Cada una de las investigaciones realizadas representaron con muy buena aproximación el comportamiento bifásico de interés, al ser comparados experimentalmente.



Es por ello por lo que se puede asegurar que la Dinámica Computacional de Fluidos es de gran ayuda para poder predecir el comportamiento con un alto grado de precisión, así como la incertidumbre de fallo que tendría un modelo real, minimizando implicaciones de un modelo a escala como son el costo, desarrollo, diseño y producción. Además, DCF enfoca su análisis tomando en cuenta la geometría del reactor y es capaz de simular el mezclado y distribución de las fases con la intención de crear aplicaciones u optimizar el proceso, lo cual lo vuelve ideal para la resolución de este proyecto.

2. Justificación

El análisis de la hidrodinámica dentro del RBT, ayudará a demostrar los patrones de flujo dentro del reactor, así como localizar zonas muertas generadas por medio de la configuración de la geometría del reactor propuesta. La importancia del estudio de la hidrodinámica radica en la complejidad que implica la simulación del flujo bifásico, pues las condiciones fenomenológicas que intervienen en el RBT podrían afectar su desempeño. Con esto no solo sería posible analizar los patrones de flujo, sino que, además, permitiría encontrar una relación entre las velocidades de flujo adecuados para garantizar el mezclado de las fases y obtener así, un régimen de tipo burbuja.

3. Objetivo General

Desarrollar la simulación de la hidrodinámica del flujo bifásico de un Reactor Tubular Biológico de biopelícula con ayuda de la Dinámica Computacional de Fluidos para poder describir la operación del RTB y llevar a cabo su escalamiento.

Objetivos particulares

- Modelar el patrón de flujo turbulento utilizando el software Fluent de ANSYS® en un módulo del Reactor Biológico Tubular con tubos concéntricos para simular la caída de presión del sistema
- Describir el patrón de flujo simulado valiéndose de los contornos de velocidad, presión, fracción de volumen y turbulencia para modelar el comportamiento hidrodinámico del Reactor.



CAPÍTULO II

MARCO TEÓRICO

1. Reactor Biológico Tubular

1.1. Descripción del proceso

El caso de estudio se centra en un Reactor Biológico Tubular (RTB) desarrollado por los doctores A. Durán Moreno y S.A García González, la cual tiene solicitud de patente con clave NM/a/2017/014623 y se encuentra en proceso de construcción con materiales más robustos que garanticen su eficiencia al ser operado de manera comercial.

El reactor biológico consiste en un sistema aerobio de flujo ascendente, el cual cuenta con 5 módulos tubulares con 2 m de longitud, 16 cm de diámetro y una altura de 2.20 m; cada sección del reactor está compuesta de soportes de biopelícula, conformados por tubos de fibra no tejida (Aymerich Martínez, 2016)

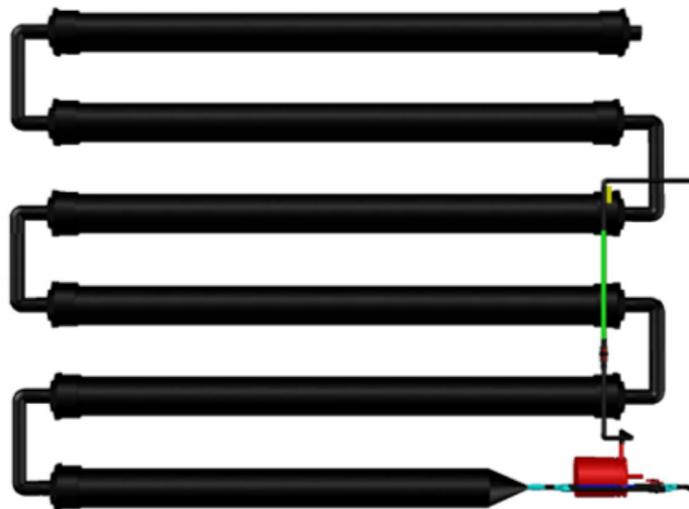


Figura 2. Reactor Biológico Tubular

Dentro de la fibra, se produce el crecimiento de los microorganismos, adhiriéndose desde el interior y acumulándose hasta formar cierto espesor. El exceso de biomasa se desprenderá por acción del flujo de agua, y circulará junto con la misma a lo largo del reactor, hasta llegar al sedimentador, donde esta biomasa será retenida (Durán Moreno & García González, 2017).



El difusor que se utilizó en este reactor se trata de un difusor tubular de burbuja fina *SSI Aeration*, de 2 pulgadas de diámetro. Este difusor contiene orificios de 1 mm de diámetro por el cual se distribuye el agua y forma burbujas dentro del reactor. El aire se introduce con ayuda de un soplador *Hailea*

La función del RTB es dar tratamiento a aguas residuales urbanas a pequeña y gran escala, el cual permita masificar el reuso del agua residual a bajo costo y que permita a un mayor número de usuarios tener acceso. (Durán Moreno & García González, 2017)

Tal funcionamiento se basa en la degradación biológica aerobia de los contaminantes disueltos en el agua residual por una gran cantidad de microorganismos para llevar a cabo sus funciones metabólicas, de manera que se pueden incrementar las cargas orgánicas en los módulos sin que se vea afectado su funcionamiento. Permite el saneamiento de 5 L/min y cargas orgánicas de 30 a 50 g DQO/m²d (Durán Moreno & García González, 2017)

1.2. Tratamiento de aguas residuales

Un aumento de la demanda del agua está asociado con el crecimiento de la población mundial. Se pueden tener dos consecuencias importantes: por un lado, un desequilibrio hídrico del ecosistema y, por otro lado, el incremento del volumen de aguas residuales. Frente a este escenario, las autoridades se encuentran obligadas a monitorear y mejorar los procesos de tratamiento de aguas residuales para reducir el impacto ambiental y asegurar el equilibrio ecológico de los cuerpos de agua. (Hernández Chover, Bellver Domingo, & Hernández Sancho, 2018)

1.2.1. Procesos biológicos

Entre las tecnologías existentes para la recuperación del agua residual doméstica se encuentra el tratamiento biológico, el cual se basa en la capacidad que tienen los microorganismos para metabolizar y convertir la materia orgánica en suspensión y disuelta, en tejido celular nuevo y en diferentes gases. Debido a que el tejido celular es más denso que el agua, éste puede eliminarse fácilmente por decantación (Metcalf&Eddy, 1995). Los sistemas de tratamiento biológico se pueden clasificar según (a) la forma en la que se encuentren los microorganismos, es decir, cultivos en suspensión o cultivos fijos y (b) el



metabolismo microbiano, o sea, en sistemas aerobios, anaerobios, facultativos o sistemas anóxicos

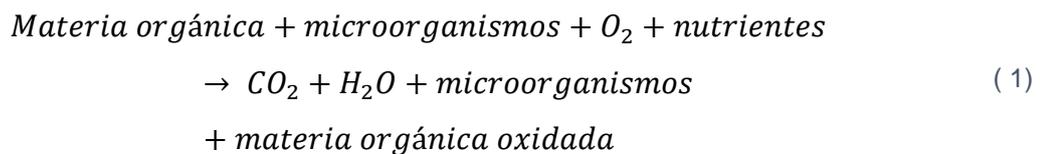
Los objetivos del tratamiento biológico son tres: (a) Reducir el contenido en materia orgánica de las aguas, (b), reducir su contenido en nutrientes y (c) Eliminar los patógenos y parásitos (Marsilli, 2005).

1.2.2. Tratamiento aerobio

El proceso básico de tratamiento aeróbico es el proporcionar un medio de alto contenido de oxígeno para los organismos puedan degradar la porción orgánica de los desechos a dióxido de carbono y agua en presencia del oxígeno. Las unidades de tratamiento aeróbico usan un mecanismo de inyección y circulación de aire dentro del tanque de tratamiento. (EPA, 2000)

Para un sistema de biomasa adherida, los microorganismos se encuentran pegados a un medio de soporte que puede ser de plástico, piedra o cualquier otro material inerte.

Las bacterias, en presencia de oxígeno rompen y convierten el contaminante en formas más simples. Las colonias de microorganismos aerobios utilizan el carbono orgánico presente en los efluentes como fuente de carbono y energía. La degradación aerobia puede expresarse como (Aymerich Martínez, 2016) (Chan, Chong, Law, & Hassell, 2009):



1.3. Reactor de Biopelícula

Los reactores de biopelícula pueden alcanzar objetivos similares a los sistemas de lodos activados, tales como eliminación de materia orgánica, nitrificación, desnitrificación y eliminación química o biológica de fósforo. Sin embargo, el proceso de conversión en los reactores de biopelícula, se encuentran limitados típicamente por el transporte de masa, de tal manera que, únicamente las bacterias que se encuentran en la capa superficial de la biopelícula contribuyen a la eliminación global del sustrato.



1.3.1. Soporte de biopelícula

En los sistemas de tratamiento basados en biopelícula, la mayoría de los microorganismos tienden a unirse entre sí, a adherirse a diversas superficies sólidas, a reproducirse y a crecer mediante la producción de polisacáridos extracelulares (PEC). Las biopelículas pueden formarse en superficies vivas o no vivas y pueden prevalecer en medios naturales, industriales u hospitalarios. Las bacterias se agrupan en colonias con el objeto de buscar protección ante posibles condiciones adversas del medio

El empleo de estos medios especialmente fabricados es debido, principalmente, al criterio de conseguir la mayor área específica de contacto entre el medio soporte y el agua residual. De esta forma, los medios fabricados permiten el crecimiento de la película dentro de la estructura porosa interna llegándose a porosidades comprendidas entre el 92 y el 97% (Eguia Lopez, 1991).

Los soportes para la biopelícula dentro del sistema se realizaron utilizando un material de fibra no tejida; se seleccionó este material debido a pruebas realizadas anteriormente, que demostraron que este material es de alta eficiencia para el desarrollo de la biopelícula en su interior debido a su estructura y a su alta resistencia (Durán Moreno & García González, 2017).

1.3.2. Ventajas de soporte de fibra no tejida

La ventaja principal de utilizar fibras no tejidas como soporte, se encuentra en que, al ser de manera flexible y porosa, la biomasa se adhiere desde el interior, donde inicia su crecimiento y expansión; lo que proporciona una mayor estabilidad a la biomasa, evitando que se desprenda en su totalidad al pasar por un alto flujo de agua a través del soporte; a diferencia de los sistemas de soporte convencionales, donde la biomasa se adhiere a la superficie y es desprendida con facilidad al recibir un alto flujo de agua. (Durán Moreno & García González, 2017)

Debido a esto, la utilización de este tipo de material proporciona una mayor duración de la biopelícula en el soporte, reduciendo los tiempos de espera para el desarrollo de esta (cuando es desprendida, es necesario esperar a que se desarrolle de nuevo en el soporte para continuar el tratamiento); así como,



aumentará la eficiencia del sistema, debido a la alta cantidad de biomasa que puede acumular en su interior (García Gonzalez, 2018)

1.3.3. Método de aireación

El oxígeno es transferido a la corriente de desechos mediante difusión de aire, turbinas de agitación (*sparged turbina*), o dispositivos de atrape superficial. Cuando se utilizan sistemas de difusión de aire, los sopladores de baja presión o compresores fuerzan el aire a través de difusores ubicados en el fondo del tanque. El aire es atrapado y luego circulado por el licor mezclado por agitación violenta debida a la mezcla o al bombeo. (EPA, 2000)

Los sistemas de aireación transfieren el oxígeno de la atmósfera a las aguas residuales en los tanques de tratamiento biológico mediante (i) la agitación de la superficie del líquido con un mezclador o una turbina, (ii) la liberación de aire a través de orificios macroscópicos o materiales porosos, o (iii) a través del contacto directo del aire con el agua residual. Los sistemas de aireación de burbujas gruesas o de mayor tamaño crean gradientes de velocidad de relativamente mayor magnitud debido a las interfases gas-líquidos mayores por lo que son conocidos como interfases de régimen de flujo rápido. Mientras que cuando los sistemas de aireación crean o hacen uso de burbujas pequeñas o finas se generan gradientes de velocidad que tienen interfases gas-líquido bajas conocidas como interfases de régimen de flujo lento (López Vázquez, Buitrón Méndez, Garcia, & Cervantes Carrillo, 2017).



2. Dinámica de Fluidos Computacional (DCF)

El flujo de fluidos es comúnmente estudiado de tres diferentes formas (Patel, 2010):

- Dinámica experimental de fluidos
- Dinámica teórica de fluidos
- Numéricamente: Dinámica Computacional de Fluidos (DCF)

La principal diferencia entre las tres técnicas comúnmente usadas está asociada con la manera en la cual las variables de flujo son aproximadas y el proceso de discretización. Cada método tiene sus ventajas dependiendo de la naturaleza del problema físico a resolver, pero no hay un mejor método para resolver todos los problemas. (Xamán & Gijón Rivera, 2016)

A continuación, se muestran las ventajas y desventajas que tienen las tres formas de resolver problemas de mecánica de fluidos (Pletcher, Tannehill, & Anderson, 2012):

Tabla 1.
Comparación de las tres técnicas de solución

| Técnica | Ventajas | Desventajas |
|--------------|--|---|
| Experimental | <ul style="list-style-type: none">• Fenómeno más realista | <ul style="list-style-type: none">• Equipo requerido• Problemas de escala• Dificultad de mediciones• Costo operacional |
| Teórica | <ul style="list-style-type: none">• Fenómeno más general• Resultado en formato de una fórmula | <ul style="list-style-type: none">• Restricción de geometría y procesos físicos simples• Generalmente se restringe a fenómenos lineales |
| Numérica | <ul style="list-style-type: none">• Geometría y procesos físicos complicados• Fenómenos no-lineales• Evolución temporal del fenómeno | <ul style="list-style-type: none">• Errores de truncamiento• Información de condiciones de frontera• Costo computacional |

Nota: Recuperado de (Pletcher, Tannehill, & Anderson, 2012)



2.1. ¿Qué es DCF?

La Dinámica Computacional de Fluidos o, por sus siglas en inglés, CFD es:

“El análisis de sistemas que involucran flujo de fluidos, transferencia de calor y fenómenos asociados, como reacciones químicas descritas mediante simulaciones basadas a computadora. La técnica es muy poderosa y abarca una amplia gama de áreas de aplicación industrial y no industrial” (Versteeg & Malalasekera, 2007).

2.2. Historia de la DCF

A principios de los años cincuenta inició el desarrollo de la Dinámica de Fluidos Computacional (DCF) junto al surgimiento de las computadoras digitales. Las herramientas básicas utilizadas en la solución de ecuaciones diferenciales parciales, como lo son los Métodos de Diferencias Finitas (MDF) y los Métodos de Elementos Finitos (MEF), tienen su origen en diferentes fuentes.

Richardson presentó la evidencia de la primera solución MDF en 1910 en la Royal Society de Londres sobre el análisis de estrés de una presa de mampostería. Por otro lado, el primer trabajo MEF fue publicada en el Aeronáutico Science Journal relacionado al análisis de estrés de aeronaves por Turner, Clough, Marlin y Topp en 1956.

Estos primeros estudios dieron paso al desarrollo de ambos métodos en la Dinámica Computacional de Fluidos, la transferencia de calor y áreas similares (Chung, 2002).

2.3. Ventajas y desventajas de la DCF

En contraste con otros métodos experimentales para el diseño de fluidos, DCF muestra las siguientes ventajas: (Mata Cárdenas, 2017):

- Se evitan costos elevados de instalaciones para desarrollar prácticas experimentales, debido a que el costo de inversión para licencias que requiere DCF no son superiores a estas.
- Se reducen tiempos de diseño y experimentación
- Es posible estudiar sistemas con dificultad de llevar a cabo experimentos controlados
- Es posible estudiar sistemas en situaciones de riesgo



- Alto grado de detalle en los resultados

Algunas desventajas se enlistan a continuación (Xamán & Gijón Rivera, 2016) (Mata Cárdenas, 2017) :

- Los usuarios del software deben tener amplia experiencia en el sistema de solución, así como una formación especializada.
- Las inversiones iniciales sobre el uso de hardware y software son significativas
- Se requiere un alto rendimiento computacional en estudios de elevada complejidad
- Los simuladores exigen licencias costosas
- Análisis complejo del flujo multifásico
- Es necesario verificar los resultados de flujos complejos

2.4. Proceso de código de trabajo

La simulación en DCF consta de una secuencia de tres pasos fundamentales:

1. Pre- proceso: Es la etapa de preparación de datos de entrada consiste en: (1) definir una geometría o dominio computacional, (2) generar una malla numérica adecuada, (3) especificar los fenómenos físicos que se pretenden modelar, (4) especificar las propiedades físicas de medio y (5) establecer las condiciones iniciales y de frontera.
2. Solución (procesamiento): Esta etapa está asociada con la solución del problema, se resuelve el modelo matemático usando una computadora, intervienen conceptos de otras disciplinas como el análisis numérico, fundamentos de matemáticas discretas, desarrollo de algoritmos y software. El usuario del software manda la instrucción de ejecución y espera los resultados. El tiempo de obtención de resultados depende del modelo a resolver.
3. Post- proceso: Esta etapa de DCF es el elemento (visualizador) que permite aglomerar la multitud de datos de resultados en gráficos. Esta etapa es de vital importancia para el análisis de resultados y dependiendo de la capacidad de resolución del visualizador, ayuda a un mejor entendimiento del fenómeno y llevará a colusiones exitosas. En un visualizador se debe poder representar la malla numérica, mapas de



contornos de isolíneas, campos de velocidad, etc. (Xamán & Gijón Rivera, 2016)

Estos pasos pueden verse resumidos como lo muestra la Figura 3:

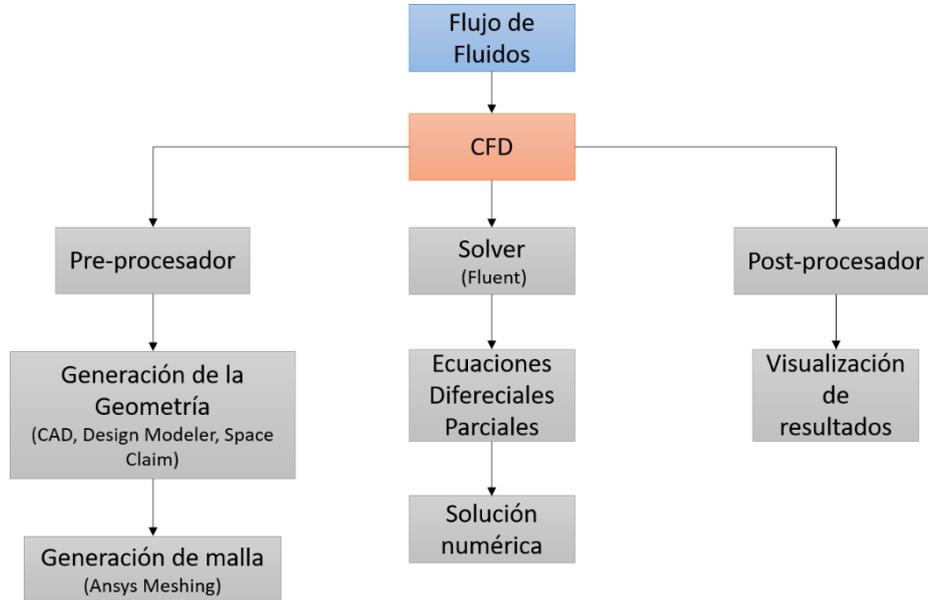


Figura 3. Resumen general de DCF

Se considera que los resultados generados por un código DCF dependen en gran parte del operador debido a que es muy importante la identificación y la formulación del problema de flujo a resolver en términos de los fenómenos físicos y químicos. Además, en todos los problemas se deben hacer suposiciones para reducir su complejidad a un nivel manejable, mientras se conserven las características esenciales del fenómeno, ya que de estas suposiciones depende la calidad de los resultados del DCF (Mata Cárdenas, 2017)

2.5. Matemáticas de la DCF

El modelo matemático es el principio básico de los métodos numéricos, en el cual se requiere elementalmente de un conjunto de ecuaciones parciales y condiciones de frontera. Es fundamental seleccionar el modelo idóneo, de acuerdo con el fenómeno a estudiar: el flujo incomprensible, turbulento, dos o tres dimensiones, etc.. (Mata Cárdenas, 2017)

Una vez elegido el modelo matemático, se debe escoger un método de discretización que se aproxime a las ecuaciones diferenciales a través de un sistema algebraico de ecuaciones para las variables discretas ubicadas en el espacio y en el tiempo (Mata Cárdenas, 2017)



A continuación, se explica la forma en que los solucionadores de ANSYS Fluent funcionan (Córdoba Fernández, 2016):

- “El dominio se discretiza en un conjunto finito de volumen control”. Un volumen control se refiere a una región fija en el espacio donde atraviesa el flujo de fluido en cada una de sus fronteras.
- La ecuación de continuidad, la ecuación de momentum, la primera y segunda ley de la termodinámica que conforman las ecuaciones de conservación de la materia, son resueltas en el conjunto determinado de volúmenes control.
- En un sistema de ecuaciones algebraicas se discretizan las ecuaciones diferenciales parciales para ser solucionadas numéricamente mediante un método iterativo que representa el campo de solución.

Las ecuaciones de transporte se analizan a través de un gran y disperso conjunto de ecuaciones algebraicas, a través de una aproximación realizada por un software. La resolución de problemas con DCF se presenta generalmente (Enriquez González, 2016):

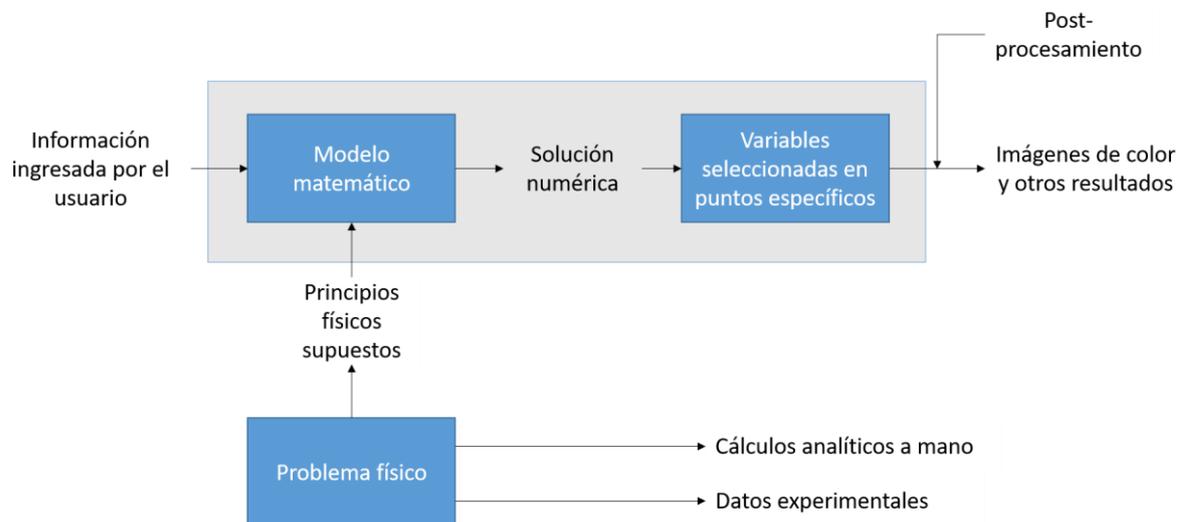


Figura 4. Esquema general de solución en DCF (Bhaskaran, 2016)

2.5.1. Ecuaciones de conservación del fluido

El término “dinámica de fluidos” es el estudio del movimiento interactivo de una gran cantidad de partículas individuales, como lo son moléculas o átomos. Para poder aproximar como un continuo se debe suponer que la densidad del fluido es elevada, significa que aun considerándose un elemento “infinitesimalmente



pequeño” contiene una cantidad suficiente de partículas, para la cual se especifica una velocidad y energía cinética media. En cada punto del fluido se puede delimitar la velocidad, la presión, la temperatura, la densidad y otras variables importantes. (Blazek, 2015).

DCF se basa fundamentalmente en las ecuaciones que rigen la dinámica de fluidos. Representan declaraciones de las leyes de conservación de la física (Tu, Yeoh, & Liu, 2018):

1. La masa del fluido se conserva
2. El cambio de momentum es igual a la suma de fuerzas sobre una partícula del fluido
3. El cambio de energía es igual a la suma del calor adicionado y el trabajo realizado en una partícula de fluido.

Adicionalmente las ecuaciones resultantes se relacionan con las expresiones empíricas, vistas en la Tabla 2 (Xamán & Gijón Rivera, 2016):

Tabla 2.
Expresiones empíricas para las leyes de conservación

| | |
|-----------------------------|--|
| Ley de Fourier | Relaciona calor y temperatura |
| Ley de Fick | Relaciona el transporte de masa con la especie química o concentración |
| Ley de viscosidad de Newton | Relaciona los esfuerzos con las velocidades |
| Ecuaciones de estado | Relacionan la densidad con presión y temperatura |

Nota: Recuperado de (Xamán & Gijón Rivera, 2016)

Tabla 2.
Expresiones empíricas para las leyes de conservación

| | |
|-----------------------------|--|
| Ley de Fourier | Relaciona calor y temperatura |
| Ley de Fick | Relaciona el transporte de masa con la especie química o concentración |
| Ley de viscosidad de Newton | Relaciona los esfuerzos con las velocidades |
| Ecuaciones de estado | Relacionan la densidad con presión y temperatura |

Nota: Recuperado de (Xamán & Gijón Rivera, 2016)



El comportamiento del fluido se describe de acuerdo con sus propiedades microscópicas como lo son: velocidad, presión, densidad y temperatura, y sus derivadas en términos del espacio y el tiempo. El elemento más pequeño del fluido es un punto o una partícula en el fluido (ver Figura 5) (Mata Cárdenas, 2017)

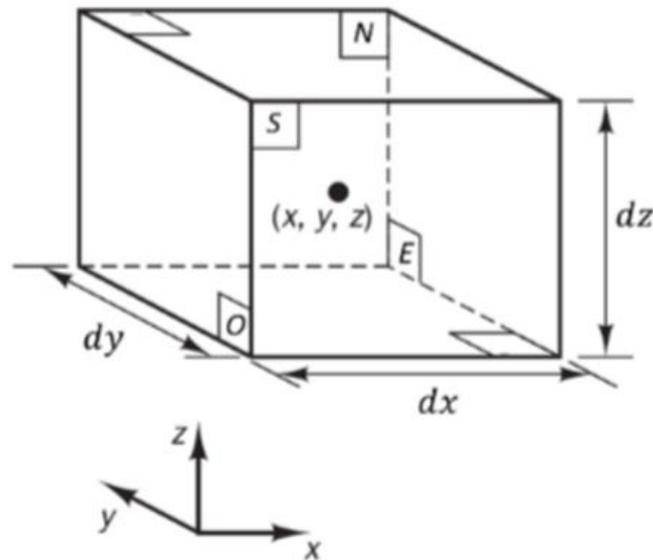


Figura 5. Elemento de fluido (Mata Cárdenas, 2017)

En función del espacio y el tiempo, las propiedades del fluido se describen: $\rho(x, y, z, \theta)$, $p(x, y, z, \theta)$, $T(x, y, z, \theta)$ y $u(x, y, z, \theta)$.

Donde:

ρ = Densidad

p = Presión

T = Temperatura

u = Vector velocidad

ANSYS Fluent sirve como herramienta para resolver las ecuaciones de conservación de masa y momentum. Además, se puede considerar una ecuación adicional de conservación de energía para aquellos fluidos que involucran la transferencia de calor o compresión. En casos donde los flujos requieren mezclas o reacciones química se echa mano de ecuaciones de conservación de especies (ANSYS, 2013)



Conservación de la masa en tres dimensiones

El incremento de masa en un elemento es igual al flujo de masa dentro del elemento, según el balance de masa.

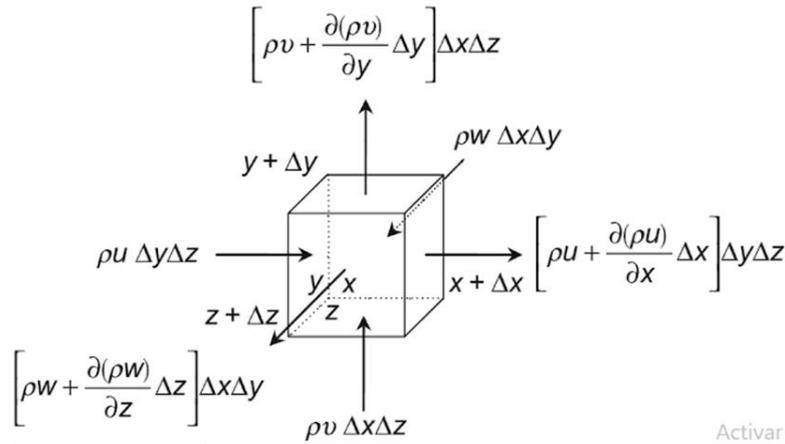


Figura 6. Conservación de la masa en un volumen control. (Tu, Yeoh, & Liu, 2018)

El balance de masa se determina por el gasto másico que fluye a través de una cara del volumen control, que es producto de la densidad (ρ), el área ($dydz, dx dz, dx dy$) y la componente de velocidad normal a la cara (u, v, w).

El flujo dentro del elemento control proporciona un incremento de masa, anteponiéndose un signo positivo, por otro lado, el flujo a la salida del elemento antepone un signo negativo. De acuerdo con lo anterior, el flujo de masa se describe como: (Mata Cárdenas, 2017):

$$\begin{aligned} & \left(\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} \frac{1}{2} dx \right) dydz - \left(\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} dx \right) dydz + \\ & \left(\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} dy \right) dx dz - \left(\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial y} \frac{1}{2} dy \right) dx dz + \\ & \left(\rho w - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} dz \right) dx dy - \left(\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial z} \frac{1}{2} dz \right) dx dy \end{aligned} \quad (2)$$

La tasa de incremento de masa dentro del elemento está dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz \quad (3)$$

Igualando ambas ecuaciones, agrupando los términos de lado derecho y dividiendo entre ($dx dy dz$):



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

Reescribiendo la ecuación anterior en notación vectorial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (5)$$

Esta ecuación es conocida como la ecuación de continuidad para un flujo compresible. El cambio de la densidad en el tiempo (masa por unidad de volumen) se encuentra en el primer término, siendo el segundo término el flujo másico fuera del elemento a través de sus fronteras, llamado convección (Mata Cárdenas, 2017).

Para las ecuaciones de resolución de ANSYS se adiciona un término fuente S_m que hace alusión a la masa agregada a la fase continua de la segunda fase dispersa (por ejemplo, debido a la vaporización de gotas de líquido), tal como se muestra a continuación (ANSYS, 2013):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (6)$$

Ecuación de conservación de momentum en tres dimensiones

La ecuación de conservación de momentum es definida sobre marco de referencia inercial (no se acelera):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (7)$$

Donde $\bar{\tau}$ es el tensor de esfuerzos, $\rho \vec{g}$ es la fuerza gravitacional y \vec{F} las fuerzas externas, las cuales aparecen en caso de trabajar con medios porosos (ANSYS, 2013)

El tensor de esfuerzos está definido para fluidos newtonianos por:

$$\bar{\tau} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \vec{v} I \right] \quad (8)$$

Ecuación de conservación de energía

ANSYS Fluent resuelve la ecuación de energía de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v} (\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{j}_j + (\bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v})) + S_h \quad (9)$$



Donde k_{eff} es la conductividad efectiva (definida como la conductividad térmica más los efectos de la turbulencia) y \vec{J}_j es el flux de difusión de la especie j , S_h el termino fuente, que incluye calor generado por reacción química o cualquier otra fuente de calor y h_j , que es la entalpía de la especie j (ANSYS, 2013). De la ecuación (8), se obtiene que:

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{\vec{v} \cdot \vec{v}}{2} \quad (10)$$

Ecuación de conservación de concentración de especies químicas

ANSYS Fluent predice la fracción masa local de cada especie, Y_i , a través de la solución de la ecuación de convección-difusión para la i -ésima especie. La ecuación de conservación toma la siguiente forma general:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (11)$$

Donde R_i es la tasa neta de producción de la especie i por reacción química y S_i es el cambio de creación por adición desde la fase dispersa más cualquier fuente definida por el usuario. Se resuelve una ecuación para $N-1$ especies, donde N es el número total de especies químicas en la fase fluida presente en el sistema. Dado que la fracción masa de la especie debe sumar la unidad el N -ésimo fracción masa es determinada como uno menos la suma de las fracciones masas resultas de $N-1$ (ANSYS, 2013).

\vec{J}_i es la transferencia de masa por difusión molecular de la especie i , que surge debido a los gradientes de concentración y temperatura. De forma predeterminada, ANSYS Fluent utiliza la aproximación diluida (llamada ley de Fick) para modelar la difusión de masa debido a los gradientes de concentración (ANSYS, 2013):

$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (12)$$

Aquí, $D_{i,m}$ es el coeficiente de difusión de masa para la especie i en la mezcla, y $D_{T,i}$ es el coeficiente de difusión térmica (Soret).



2.5.2. Método de Volumen Finito

La discretización es el proceso de transformación de problemas de flujos de fluidos continuos en datos numéricos discretos y que son resueltos por medio de una computadora (Patel, 2010)

Como ya se ha mencionado, las ecuaciones de gobierno se fundamentan en ecuaciones diferenciales parciales. La traducción de estas ecuaciones de manera numérica es conocida como discretización. La ecuación discretizada en DCF se resuelve usualmente utilizando el Método de Diferencias Finitas (MDF), el Método de Elemento Finito (MEF) o el Método de Volumen Finito (MVF). (Patel, 2010)

- MDF aplica el concepto de la expansión de Taylor para resolver las Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) de segundo orden en las ecuaciones de gobierno del flujo de fluido. Una importante ventaja de MDF es su simplicidad además de que obtiene fácilmente aproximaciones de orden alto (Blazek, 2015). Sin embargo, MDF sólo aplica para geometrías simples porque emplea mallas estructuradas.
- Se tiene inclinación hacia MEF debido a su formulación integral y el uso de mallas desestructuradas (Blazek, 2015). El dominio computacional es subdividido en un número finito de elementos. Dentro de cada elemento, cierto número de nodos son definidos donde los valores numéricos de los nodos desconocidos son determinados usando funciones de interpolación. MEF numéricamente requiere un alto poder computacional comparado con MDF (Patel, 2010).
- MVF utiliza directamente la formulación integral de las leyes de conservación. MVF discretiza las ecuaciones de gobierno dividiendo el espacio físico en un número arbitrarios de volúmenes control poliédricos (Blazek, 2015).

Dado que es el método numérico que utiliza por defecto ANSYS Fluent, se centra especial atención al Método de Volumen Finito. Este es el método que utilizan la mayoría de los softwares comerciales para DCF (Enriquez González, 2016).

La finalidad de este método consiste en dividir el dominio de flujo en un determinado número de volúmenes y poder concretar el modelado del



comportamiento del fluido en cada una de las regiones finitas (Blazek, 2015). Las ecuaciones de gobierno son integradas y resueltas iterativamente en cada volumen control.

La precisión de la discretización espacial depende del esquema particular con el que se evalúan los flujos:

- Esquema *Cell-centred* (Figura 7a): Las cantidades de flujo se almacenan en los centroides de las celdas de la cuadrícula. Por lo tanto, los volúmenes control son idénticos a las celdas de la cuadrícula.
- Esquema *Cell-vertex* (Figura 7b): Las variables de flujo se almacenan en los puntos de la malla. El volumen de control puede ser la unión de todas las celdas que se encuentran en el punto de la cuadrícula, o un volumen centrado en el punto de la cuadrícula. En el primer caso podemos hablar de volúmenes de control *superpuestos*, en el segundo caso de volúmenes de control *dual*.

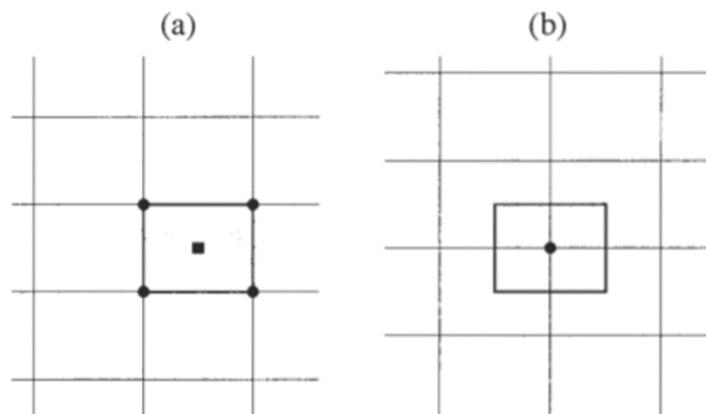


Figura 7. Volumen control de esquemas *Cell- center* (a) y *Cell- vertex* (b) (volumen control dual) (Blazek, 2015)

En la Figura 8 se muestran volúmenes control típicos en 2D y 3D. La superficie del volumen control consiste en cuatro (en 2D) o seis (en 3D) caras planas, con su respectivo nodo central (P) (Ferziger & Peric, 2002).

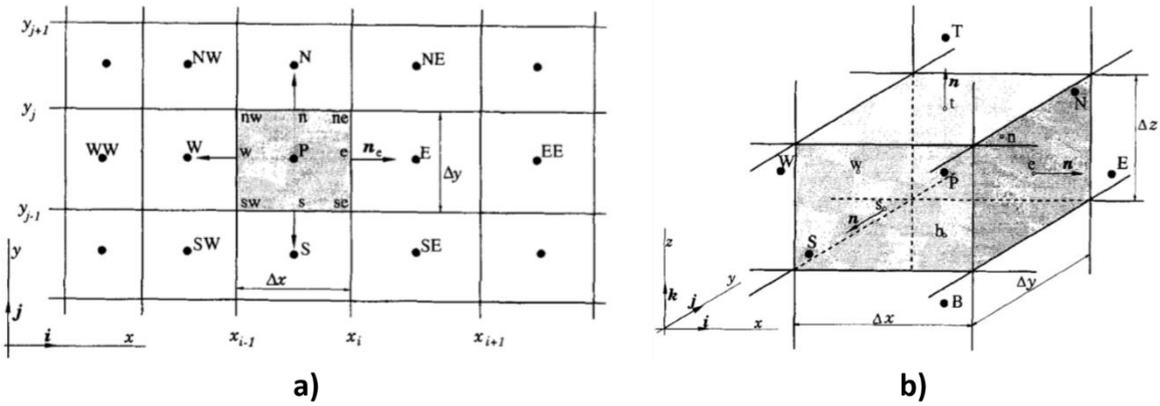


Figura 8. Volúmenes Control típicos para una malla cartesiana en 2D (a) y en una malla cartesiana 3D (b) (Ferziger & Peric, 2002).

Se tiene preferencia hacia el Método de Volumen Finito sobre los otros métodos debido a que ofrece la gran ventaja de aplicar las leyes de conservación directamente. Esto es aplicar las leyes de conservación a cada volumen control y consolidar las cantidades en un sentido discreto (Bhaskaran, 2016). A comparación con MDF es que resulta ser muy flexible: puede implementarse con bastante facilidad en redes estructuradas y en no estructuradas (Blazek, 2015). Así mismo, este método numérico requiere menor esfuerzo computacional que MEF.

2.5.3. Mallado

La representación discreta de la geometría que se encuentra involucrada con el problema se define como malla. Se asignan celdas o regiones más pequeñas en las cuales las ecuaciones que gobiernan el flujo serán solucionadas. La calidad de la malla se determina de acuerdo con los siguientes factores (Garzón Sánchez, Santiago Humberto, 2014):

- Precisión de la solución: Una mejor calidad de la malla garantiza una solución más precisa. Para mejorar la calidad de la malla es posible que se deba refinar en ciertas áreas de la geometría donde los resultados de los gradientes se presenten como valores altos. Esto también significa que, en caso de que la malla no esté suficientemente refinada, la precisión de la solución es más limitada, así, la precisión requerida va en función de la calidad de la malla.
- Tiempo de cálculo: Es un factor necesario, pero a su vez no es deseable. Para una malla ampliamente refinada, el tiempo de cálculo será



relativamente alto. Un tiempo de cálculo elevado indica que la solución será de buena precisión, sin embargo, mayor tiempo de cálculo requerido indica una calidad de malla inferior.

- Tasa de convergencia: A una mayor tasa de convergencia se incrementa la calidad de la malla, esto quiere decir que la solución correcta se ha alcanzado más rápido.

Las mallas se clasifican de acuerdo con la configuración de su geometría (Mata Cárdenas, 2017):

- Malla estructurada o regular: Esta es la estructura de malla más simple. Es equivalente a un mallado cartesiano donde cada elemento tiene cuatro nodos en 2D y seis nodos para 3D. La posición de cualquier elemento de la malla dentro del espacio geométrico es identificada individualmente por un conjunto de dos (i, j) o tres índices (i, j, k) . La desventaja de la malla estructurada es que sólo puede ser ocupada en dominios geométricos simples. Además, en regiones que contienen una mayor cantidad de puntos en un espacio específico, la precisión produce pequeños espacios innecesarios que generan un desperdicio de recursos en otras zonas del dominio geométrico y que se agravan en problemas en 3D, afectando negativamente la convergencia. (Ferziger & Peric, 2002)

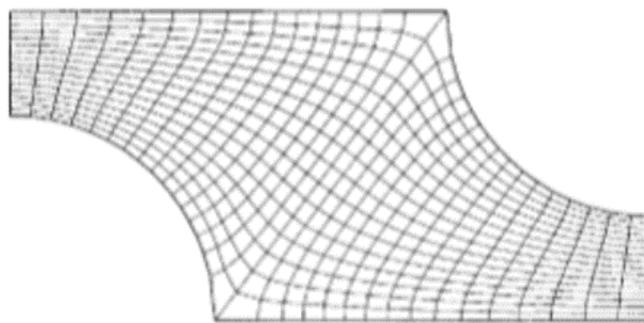


Figura 9. Malla estructurada no ortogonal (Ferziger & Peric, 2002)

- Malla estructurada en bloques: También llamadas mallas compuestas se subdividen en dos o más niveles, habiendo bloques con segmentos relativamente grandes con estructura irregular y que pueden superponerse, así como un nivel fino con malla estructurada, en regiones que requieren mayor precisión. La ventaja de este enfoque es que los dominios complejos se pueden tratar fácilmente para cuerpos en



movimiento. La desventaja de esta malla es que resulta difícil la conservación en los límites de frontera (Ferziger & Peric, 2002).

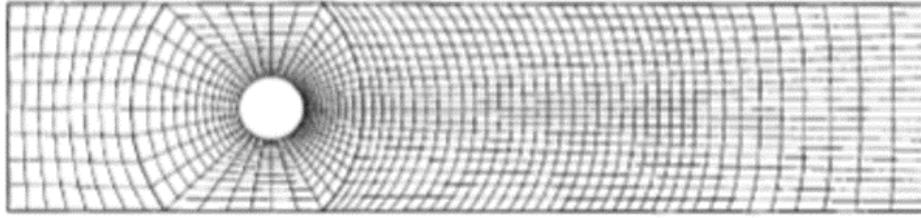


Figura 10. Malla estructurada en bloques (Ferziger & Peric, 2002)

- Malla no estructurada: Es una malla muy flexible en cuanto geometrías complejas, que, aunque puede usarse en cualquier esquema de discretización funcionan mejor con los métodos de Volumen Finito y Elementos Finitos. Los elementos se adaptan a cualquier forma, por lo regular para mallas 2D se consideran triángulos y cuadriláteros, en su defecto, tetraedros y hexaedros en 3D. Los solucionadores de los sistemas de ecuaciones algebraicas son más lentos que las de las cuadrículas regulares debido a la dificultad del procesamiento de la red, sin embargo, el código informático de estas mallas es más flexible (Ferziger & Peric, 2002).

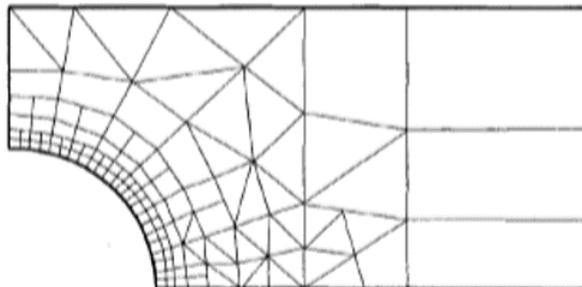


Figura 11. Malla no estructurada (Ferziger & Peric, 2002)

Una vez identificados los tipos de malla, se distinguen los elementos que las componen y sus respectivas diferencias para mallas bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D). Como se puede observar en la Figura 12 una celda para un modelo 2D no es lo mismo que para un modelo 3D. (Garzón Sánchez, Santiago Humberto, 2014)

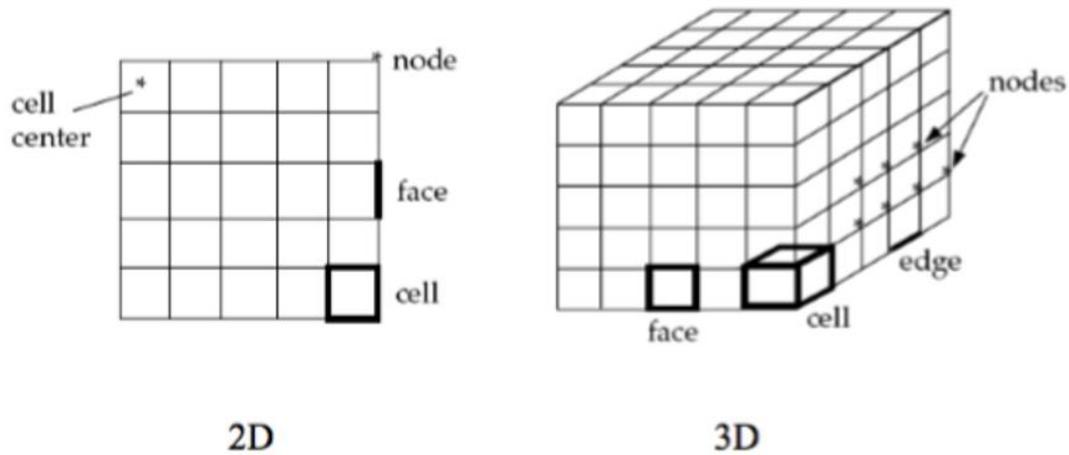


Figura 12. Elementos para modelos 3D y 2D de una malla (Garzón Sánchez, Santiago Humberto, 2014)

“Una celda se define como el volumen control en el que se divide el dominio computacional. Una cara es igual a un contorno de una celda y un borde es el contorno de una cara (aplica para geometrías 3D). Un nodo es un punto de la malla y una zona es un grupo de nodos, caras y/o celdas” (Garzón Sánchez, Santiago Humberto, 2014).

Para determinar el tipo de celda a utilizar existen dos clasificaciones, como se comentó en la definición de malla no estructurada: si la geometría es en 2D se utilizan triángulos y rectángulos (o la combinación de ambos), en geometrías 3D son tetraedros, hexaedros, prismas, pirámides y poliedros (o la combinación de éstos) (Córdoba Fernández, 2016). Ver Figura 13.

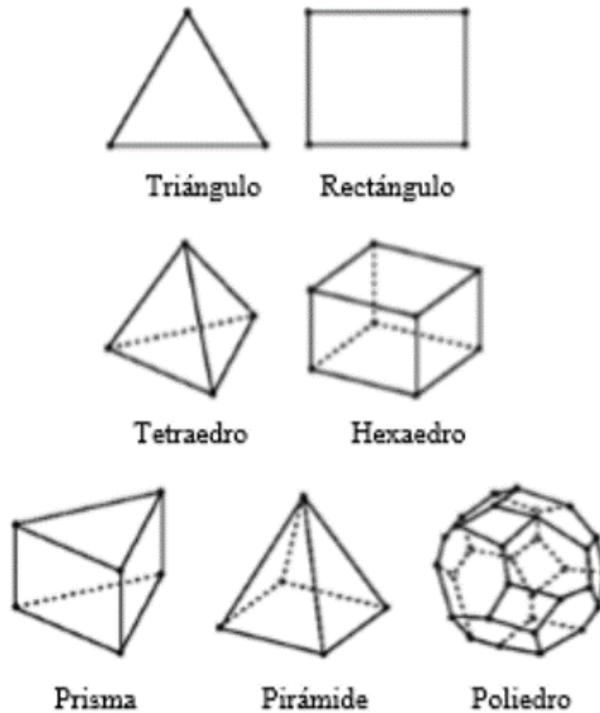


Figura 13. Tipos de celdas (Córdoba Fernández, 2016)

Por default se generan celdas tetraédricas cuando se ordena una malla no estructurada, de manera que sus caras tienen forma triangular que por lo general generan problemas de convergencia. Las hexaédricas tienen mayor precisión entre los diferentes tipos de celdas que se observan en la Figura 13. Las celdas piramidales funcionan como transición entre varios tipos de elementos que componen una malla híbrida y finalmente las celdas prismáticas con base triangular se usan para solucionar de manera más eficiente la capa límite. (Garzón Sánchez, Santiago Humberto, 2014)

De manera concisa, se puede decir que el tipo de mallado, así como su método (de los que hablaremos a continuación) en ANSYS se determina de acuerdo con la complejidad de la geometría.

Los cinco diferentes métodos se describen a continuación (Córdoba Fernández, 2016):

- **Automática (Automatic):** Es la combinación de los métodos *Patch Conforming* y *Sweep*, se genera cuando no se especifica de manera explícita el método a utilizar.



- **Dominante Hexadecimal** (*Hex Dominant*): Los elementos están alineados en dirección al flujo, se generan celdas tipo triangulares y rectangulares y como requerimiento inicial puede requerir de una descomposición de la geometría.
- **Tetraedros** (*Tetrahedrons*): Sólo genera celdas en forma de tetraedros. Se puede resolver mediante dos algoritmos *Patch Conforming* y *Patch Independent* dependiendo de la geometría y de la calidad de la malla a la que se quiera llegar. El primero es utilizado generalmente para geometrías sencillas y cualquier detalle geométrico es capturado para el mallado; por otro lado, el segundo es utilizado para geometrías complejas o bien en casos con un gran número de bordes pequeños o muchas esquinas, además de que no se respetan los detalles en el mallado (Figura 14) (Córdoba Fernández, 2016).

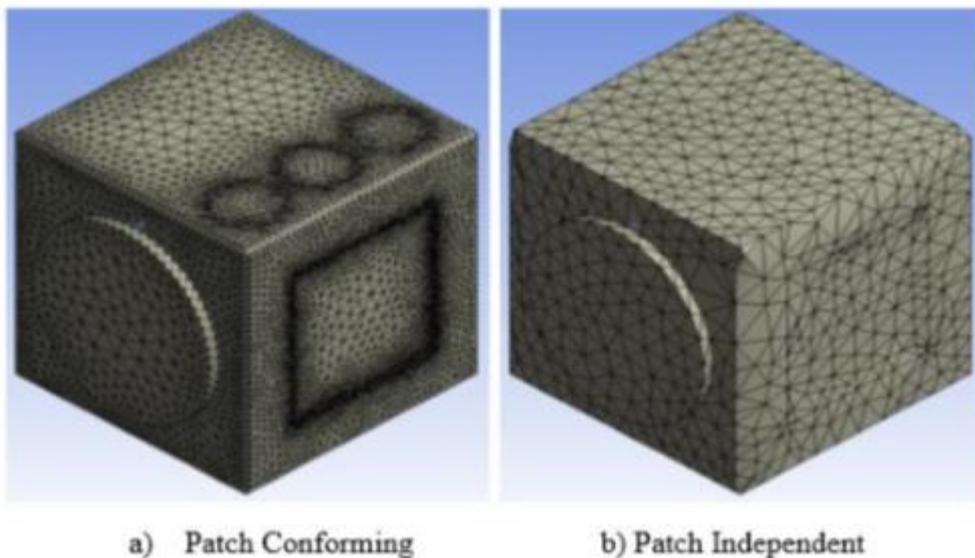


Figura 14. Tetrahedrons (Córdoba Fernández, 2016) (Ozen Engineering, Inc., 2014)

- **Barrer** (*Sweep*): Este método de mallado genera celdas en forma de prismas y/o hexaedros. Las caras de la geometría deben ser idénticas en los extremos que actúan como origen y destino. En caso de que la geometría no tenga esta característica se debe descomponer en la aplicación *Design Modeler* o *Space Claim* en una serie de cuerpos más sencillos. A manera de ejemplo, en la Figura 15, se puede notar una diferencia en los colores del mallado, que indican la descomposición de la geometría en diferentes cuerpos para poder utilizar el método (Córdoba Fernández, 2016).

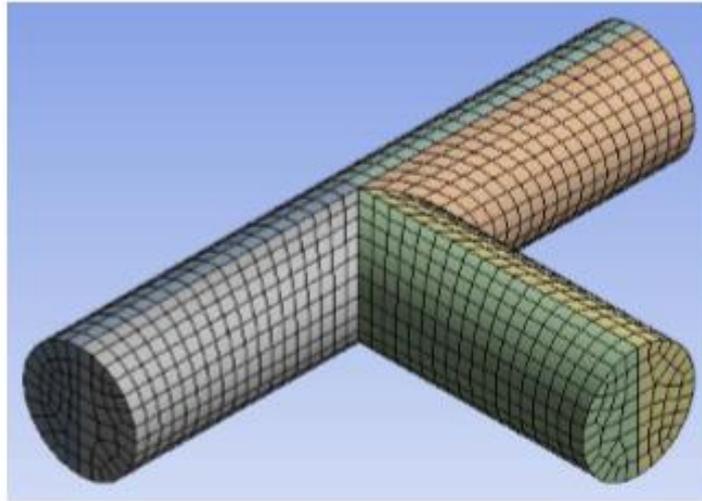


Figura 15. Sweep (Córdoba Fernández, 2016) (Ozen Engineering, Inc., 2014)

- **Multizona (Multizone):** Se crean celdas en forma de hexaedros que también pueden contener primas, tetraedros y pirámides. A diferencia de *Sweep* la geometría se descompone automáticamente en bloques en la misma geometría, como se observa en la Figura 16 (Córdoba Fernández, 2016).

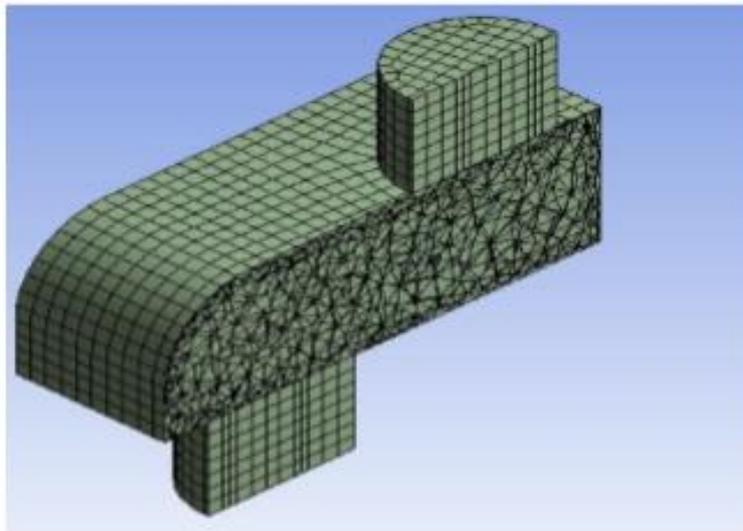


Figura 16. Multizone (Córdoba Fernández, 2016) (Ozen Engineering, Inc., 2014)

Como se mencionó anteriormente, la celda tetraédrica se genera por defecto cuando se establece que es para una malla no estructurada, de manera automática. Es deber del usuario de ANSYS obtener una malla que cumpla con las mejores características para resolver el problema. Esto es posible controlando el tamaño de los elementos, el tipo de malla y las partes donde debe ser refinada (Córdoba Fernández, 2016).



Para asegurar la calidad de la malla, el programa consta de criterios cuantitativos como *Orthogonal Quality* y *Skewness*, con rango de 0 a 1 y sus valores de aceptación se detallan en la Tabla 3.

Tabla 3.
Orthogonal Quality y Skewness y sus criterios de calidad

| Skewness (Oblicuidad) | | | | | |
|---|------------|-----------|-----------|-----------|-------------|
| Excelente | Muy buena | Buena | Aceptable | Mala | Inaceptable |
| 0-0.25 | 0.25-0.50 | 0.50-0.80 | 0.80-0.94 | 0.95-0.97 | 0.98-1.00 |
| | | | | | |
| Orthogonal Quality (Calidad Ortogonal) | | | | | |
| Inaceptable | Mala | Aceptable | Buena | Muy Buena | Excelente |
| 0-0.001 | 0.001-0.14 | 0.15-0.20 | 0.20-0.69 | 0.70-0.95 | 0.95-1.00 |
| | | | | | |

Nota: Recuperado de (Ozen Engineering, Inc., 2014) (Córdoba Fernández, 2016)

No son recomendados los valores bajos en *Orthogonal Quality* o altos en *Skewness*, Estos valores pueden ser diferentes dependiendo de la física y la localización de las celdas.

Una mala calidad de la malla se ve reflejada en dificultades de convergencia, una descripción inadecuada de la física y una difusa solución del problema.

2.6. Fluidos multifásicos

Cuando más de un material se encuentra presente en un espacio de flujo y cada uno muestra diferentes estados físicos de la materia y, además, presentan propiedades químicas diferentes estamos hablando de un flujo multifásico. En un fluido donde se reconocen dos fases, identificamos como la fase primaria al flujo continuo o envolvente de la secundaria, la fase secundaria es el material que se encuentra disperso a lo largo de la primaria. Las diferentes fases involucradas en los flujos multifásicos pueden presentar un régimen laminar o turbulento, que deriva en una diversa serie de regímenes de flujo, algunos de estos regímenes se pueden observar en la Figura 17 (Denn & Russell, 1980) (Duscha, Hesler, & Sparrel, 2012) (Bakker, 2008).

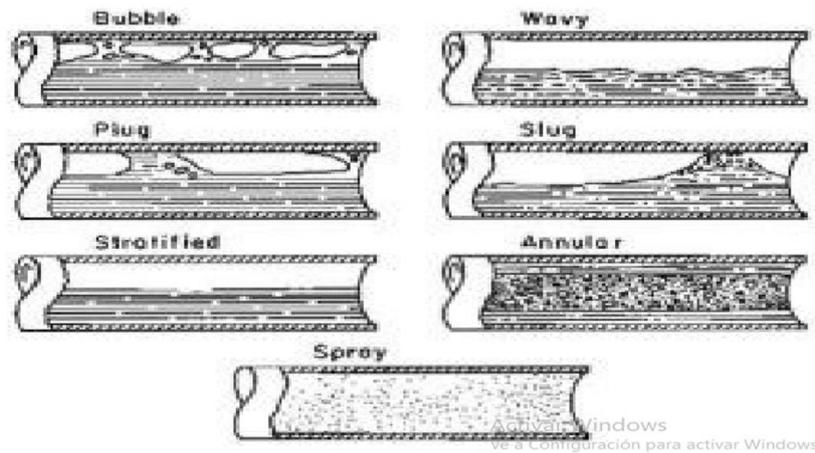


Figura 17. Patrones de flujo (Denn & Russell, 1980) (Bakker & Marshall, *Computational Fluid Dynamics. Encyclopedia of Chemical Processing*, 2004)

La combinación de las fases primaria y secundaria resultan en los diferentes regímenes que se muestran dibujados en la Figura 17. Cada régimen de flujo con respecto a la fase primaria o secundaria se describen de manera resumida en la Tabla 4 (Denn & Russell, 1980) (Duscha, Hesler, & Sparrel, 2012) (Bakker, 2008):

Tabla 4.
Resumen de regímenes de flujo multifásicos

| Tipo de régimen de flujo | Fase primaria/Fase secundaria |
|---|---|
| Burbuja/ Flujo tapón | Líquido/ Burbujas discretas de gas |
| Gota/ Dispersada/ Flujo tipo Aerosol | Gas/ Gotas de fluido (líquido o gas) |
| Flujo cargado de partículas | Fluido (líquido o gas) / Discretas partículas de sólido |
| Flujo tipo lodo | Líquido/ Burbujas largas de gas |
| Flujo Anular | Líquido a lo largo de las paredes con núcleo de flujo gaseoso |
| Estratificado/ Flujo ondulado y de superficie libre | Fluidos inmiscibles, fluidos menos densos fluyen encima de fluido denso con interfaz definitiva entre fluidos |

Nota: Recuperado de (Duscha, Hesler, & Sparrel, 2012)

Esta tesis estudiará la hidrodinámica de un sistema gas- líquido, donde el líquido será la fase continua y el gas será la fase dispersa, pues en observaciones experimentales para el sistema piloto del RBT, el flujo dentro del reactor presenta un régimen tipo burbuja.



2.6.1. Enfoques para cálculos numéricos multifásicos

El enfoque que normalmente se utiliza para el sistema multifásico es el Modelo de Volumen de Fluido (MVF) tipo Euleriano- Euleriano o Euleriano- Lagrange.

En general MVF se emplea en el seguimiento de superficies. Para procesos en los que se desea observar el movimiento del fluido en ubicaciones específicas a través del espacio y el tiempo Euler – Euler es especialmente bueno. Sin embargo, el modelo Euler-Lagrange se centra en el movimiento de partículas dentro del movimiento del fluido a medida que se mueve a través del espacio y el tiempo y cómo interactúa con otras partículas (Bakker & Marshall, 2004).

Si hay más partículas para rastrear en el sistema que las células computacionales (por ejemplo, mayores alimentaciones de gas en escala industrial), la especificación de Lagrangiano requiere más esfuerzo computacional (Zhang & Chen, 2007). Por lo tanto, solo se analizará la especificación Euleriano para sistemas de gas-líquido (Heikkinen, 2017).

2.6.2. Enfoque Euleriano- Euleriano

Para propósitos de solución de flujos multifásicos este enfoque se utiliza de manera general. Se basa en el principio de continuos interpenetrantes, donde se refiere que fase está gobernada por las ecuaciones de Navier-Stokes (Patel, 2010). Las fases interactúan entre sí, comparten volumen en el espacio e intercambian masa, momentum y energía. Existen tres modelos distintos para la solución de flujos multifásicos:

- Volumen de Fluido (MVF)
- Modelo de mezcla (*Mixture Model*)
- Modelo Euleriano (*Eulerian Model*)

Los modelos recomendados según el manual de ANSYS para flujos con gotas, burbujas y partículas, donde las fases se mezclan y/o la fracción de volumen no excede una cantidad del 10%, son el modelo Euleriano o el Modelo de Mezcla (ANSYS, 2013)



Una versión simplificada del modelo Euler – Euler es el Modelo de mezcla. Al igual que en los modelos Euler-Euler, ambas fases se tratan como continuos interpenetrantes, pero en el modelo de mezcla las ecuaciones de transporte se basan en las propiedades de la mezcla, como la velocidad de la mezcla, la viscosidad de la mezcla, etc. (Sternmark, 2013). El modelo de mezcla resuelve un número menor de variables que el modelo multifásico completo. (ANSYS Inc., 2013). Aunque el modelo de mezcla es un buen sustituto del modelo multifásico Euleriano en varios casos, el modelo Euler-Euler ha demostrado mejores aproximaciones al modelar fluidos multifásicos en recientes investigaciones.

2.7. Modelado de turbulencia

Es importante incluir los efectos de turbulencia en los estudios de flujo multifásico para poder resolver y describir de manera correcta las fluctuaciones en las velocidades y cantidades escalares que describen el flujo. Existen diferentes modelos de turbulencia (Enriquez González, 2016)

La diferencia principal de los flujos turbulentos en contraste con los flujos laminares el movimiento caótico de las moléculas en caminos irregulares que intervine en la incorporación de las diversas capaz de flujo entre sí (Enriquez González, 2016)

Los modelos para flujos turbulentos se subdividen en diferentes categorías de familias principales que se enlistan a continuación (Córdoba Fernández, 2016):

- a) La aproximación del conjunto de ecuaciones parciales de Navier Stocks promediadas de Reynolds (PRNS, Promedio Reynolds-Navier- Stokes) se produce de la media de las ecuaciones de movimiento en el tiempo sobre una coordenada donde el flujo no varía.
- b) La simulación de grandes vórtices (SLE, Simulación Lager-Eddy), reduce la complejidad de las ecuaciones de gobierno al considerar únicamente los efectos turbulentos del flujo. Las denominadas “fluctuaciones de gran escala” es el intercambio energético que simula el efecto de pequeñas escalas de turbulencia
- c) El método de la simulación numérica directa (SND, Simulación Numérica Directa), no utiliza ningún modelo de turbulencia, sino que se centra en



realizar discretizaciones temporales y espaciales para producir una simulación del flujo en un determinado problema.

Para poder elegir el modelo de turbulencia a utilizar en el problema de flujo se deben considerar aspectos como lo son la física del flujo, la especificación nivel de precisión requerido, los recursos computacionales disponibles y la cantidad de tiempo disponible durante la simulación (ANSYS Inc., 2013).

En la Tabla 5 se muestran los modelos de turbulencia más comunes clasificados con base al número adicional de ecuaciones de transporte que son necesarias para resolver las ecuaciones PRNS (Córdoba Fernández, 2016).

Tabla 5.
Modelos de turbulencia

| Numero de ecuaciones adicionales | Nombre del método |
|----------------------------------|---------------------------|
| Una | <i>Spalart – Allmaras</i> |
| Dos | <i>k-ε</i> <i>k-ω</i> |
| Tres | <i>Transition k-kl- ω</i> |
| Cuatro | <i>Transition SST</i> |
| Siete | <i>Reynolds Stress</i> |

Nota: Recuperado de (Córdoba Fernández, 2016)

La energía cinética turbulenta (k) y la disipación de energía cinética turbulenta (ϵ) son usadas en la mayoría de los modelos de la familia del PRNS como base para la simulación de las incógnitas discutidas anteriormente. Con ambas ecuaciones, en este modelo se puede determinar la longitud de la turbulencia y la escala de tiempo cuando se solucionan por separado dos ecuaciones de transporte. Para el modelo $k-\epsilon$ se asume que el flujo es completamente turbulento y son insignificantes los efectos de la viscosidad molecular (Córdoba Fernández, 2016).

Autores como Kyon Ho Lee han comprobado que el modelo $k-\epsilon$ realizable y el modelo $k-\omega$ SST predijeren distribuciones similares a las microburbujas entre los diferentes modelos de turbulencia estudiados (Lee, y otros, 2019). El modelo $k-\epsilon$ estándar tiene una tendencia a una baja precisión en el caso de un flujo con bajos números de Reynolds. (Anderson, 1995).



CAPÍTULO III METODOLOGÍA

Como se describió en el capítulo anterior, el código de trabajo que sigue ANSYS Fluent se lleva a cabo de acuerdo con los siguientes tres pasos fundamentales:

1. Pre- proceso
2. Solver
3. Post- proceso

La metodología de esta tesis abarcará los primeros dos pasos: el primero enfocado a la construcción de la geometría del reactor y de la elaboración de la malla y el segundo a la configuración de la hidrodinámica del RTB y la resolución de las ecuaciones que realizará el software. El tercer paso, que comprende la visualización de los resultados, se desarrollará en el Capítulo IV.

La Figura 18 resume el procedimiento de la metodología:

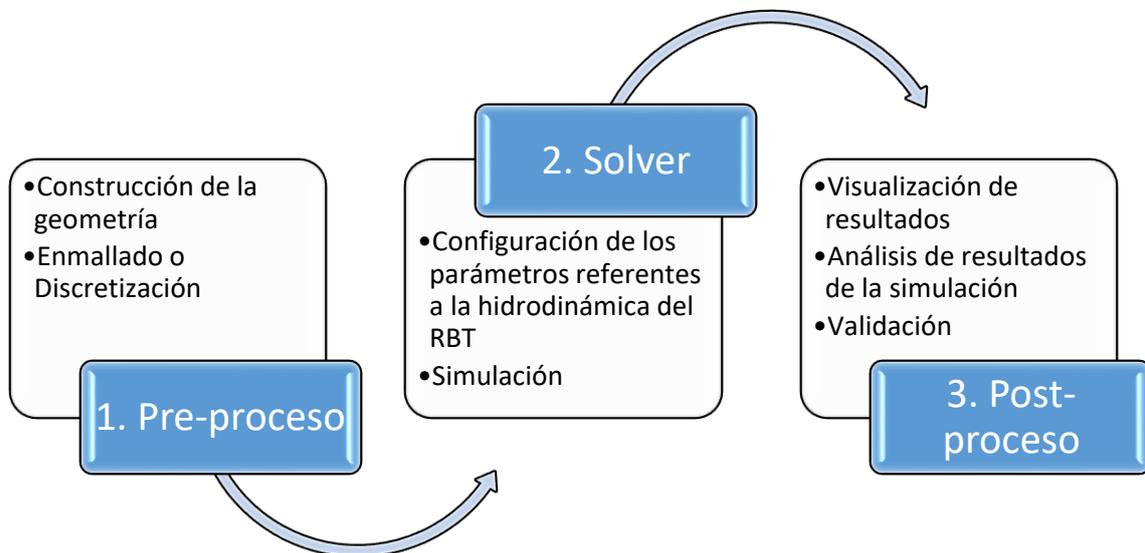


Figura 18. Desarrollo de la metodología

El desarrollo de construcción de la geometría se llevó a cabo en las instalaciones del edificio F de la Facultad de Química, utilizando una licencia de tipo investigador, ya que la licencia gratuita de estudiante no es suficiente para los



requerimientos de la simulación. La computadora utilizada consta de un procesador Intel Core™ i7 y una memoria de 8GB de RAM.

1. Pre- procesamiento

1.1. Geometría

La edición de la geometría para el RBT se realizó en el complemento *Space Clean* del software de ANSYS, de acuerdo con las medidas reales de cada módulo del reactor. Durante la construcción de la geometría se realizaron cambios pertinentes a lo largo del desarrollo de esta tesis. En la Figura 19 se puede apreciar la primera versión de la construcción del reactor, donde se muestran dos módulos de 2 m de largo, unidos por codos de menor diámetro y sus respectivas reducciones cónicas.

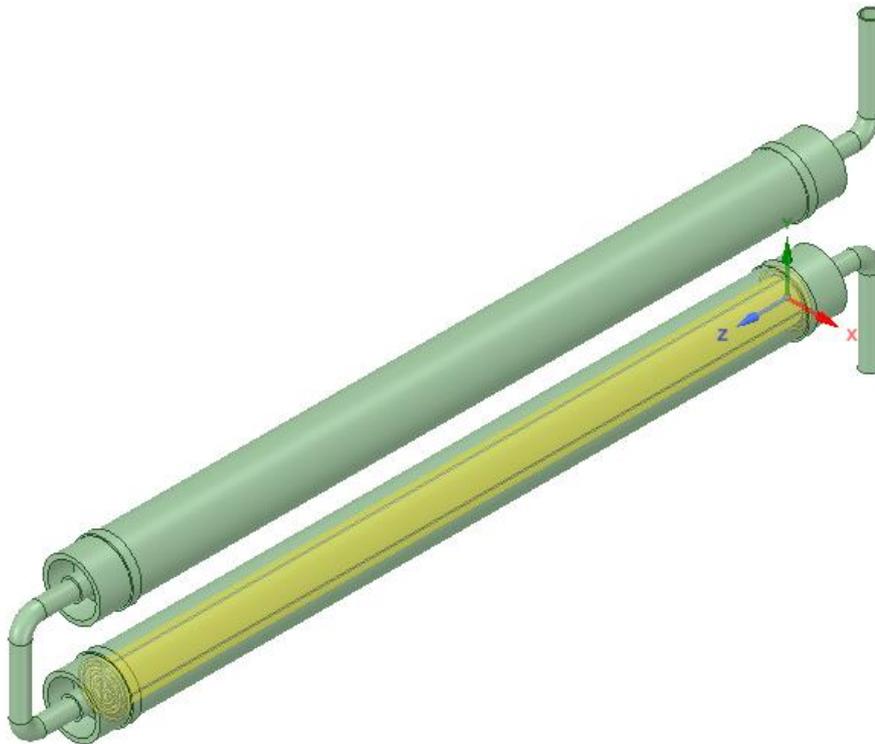


Figura 19. Geometría del RBT versión 1

La existencia de las reducciones cónicas formó parte de la principal problemática que se presentó al generar la malla, pues la complejidad de un sistema con flujo a dos fases requiere de una muy buena calidad de malla. Debido a esto, fue necesario realizar una segunda versión donde se cambió el estilo cónico de la reducción a una forma sencilla cilíndrica (Figura 20). La Figura 21 muestra la versión 2 de la geometría del reactor.

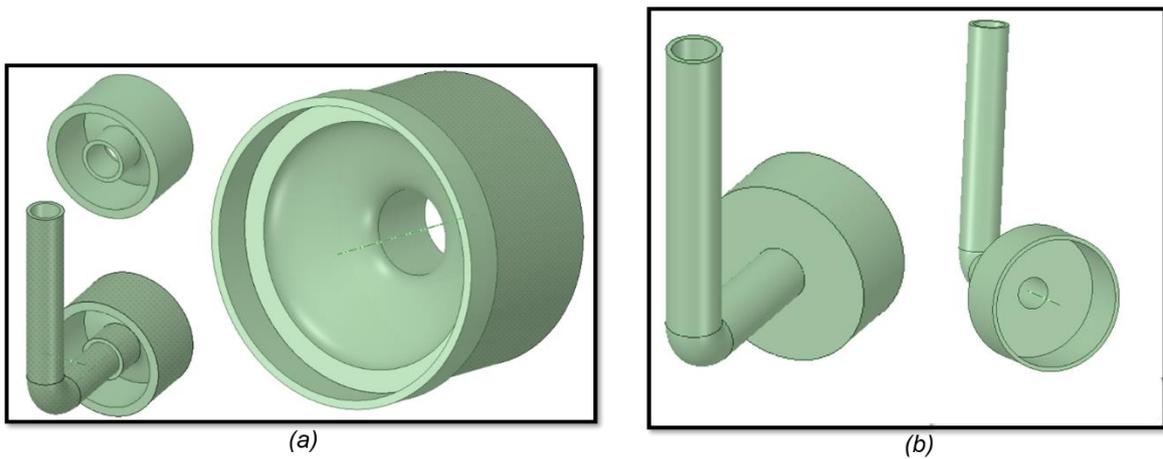


Figura 20. (a) Reducciones cuerpo cónico (b) Reducciones geometría sencilla

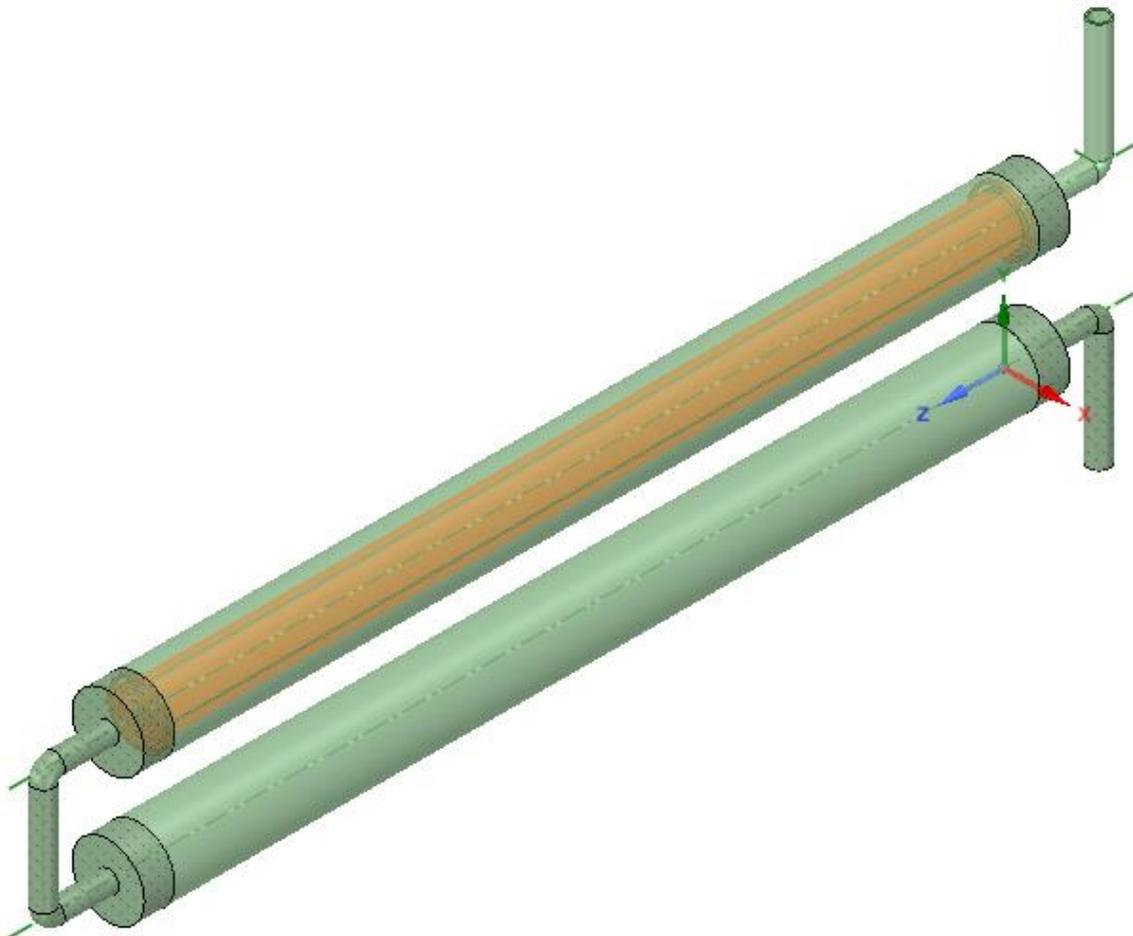


Figura 21. Geometría del RBT versión 2

Finalmente se construyó un último diseño del reactor (Figura 22), donde se disminuyó a uno el número de módulos, debido a la enorme cantidad de nodos y elementos que sugerían las versiones anteriores y que ralentizaba el tiempo de cálculo.



Figura 22. Geometría del RBT Versión Final

A continuación, se describen las características de cada parte que integra a la geometría de la versión final del RBT.

1.1.1. Módulo del reactor

Tabla 6.

Características del módulo del reactor

| Características | Valor | Unidad |
|---------------------------|----------|--------|
| Material tubo | Plástico | |
| Longitud tubo | 200 | cm |
| Diámetro Externo del tubo | 16.7 | cm |
| Diámetro Interno del tubo | 14.5 | cm |
| Grosor tubo | 1.1 | cm |

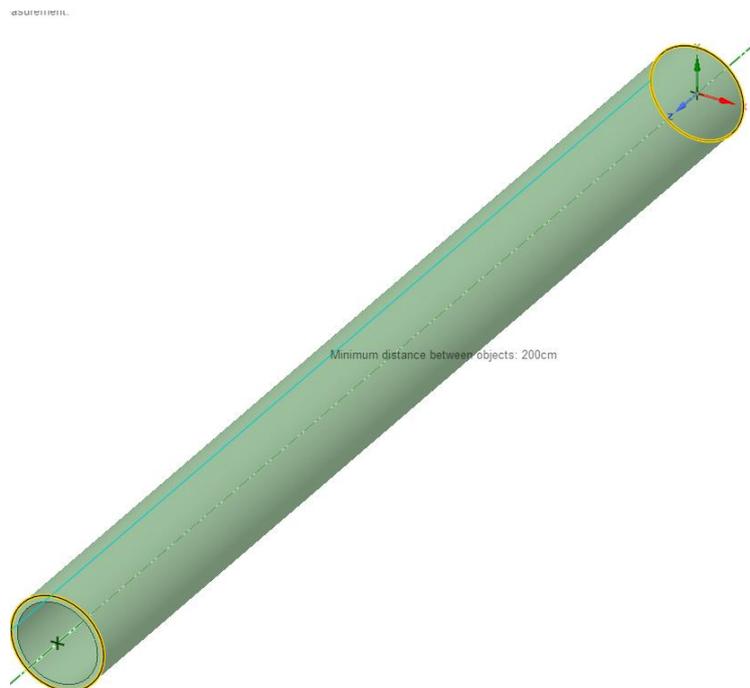


Figura 23. Modulo del reactor



1.1.2. Soporte interno

Tabla 7.
Características del soporte interno.

| Características | Valor | Unidad |
|---|-------|--------|
| Grosor fibra no tejida | 0.5 | cm |
| Separación de soporte entre fibra | 0.5 | cm |
| Longitud largo soporte fibra | 200 | cm |
| Separación entre fibra (canal de flujo) | 1.0 | cm |

A continuación, se muestran figuras a detalle de la construcción del soporte interno:

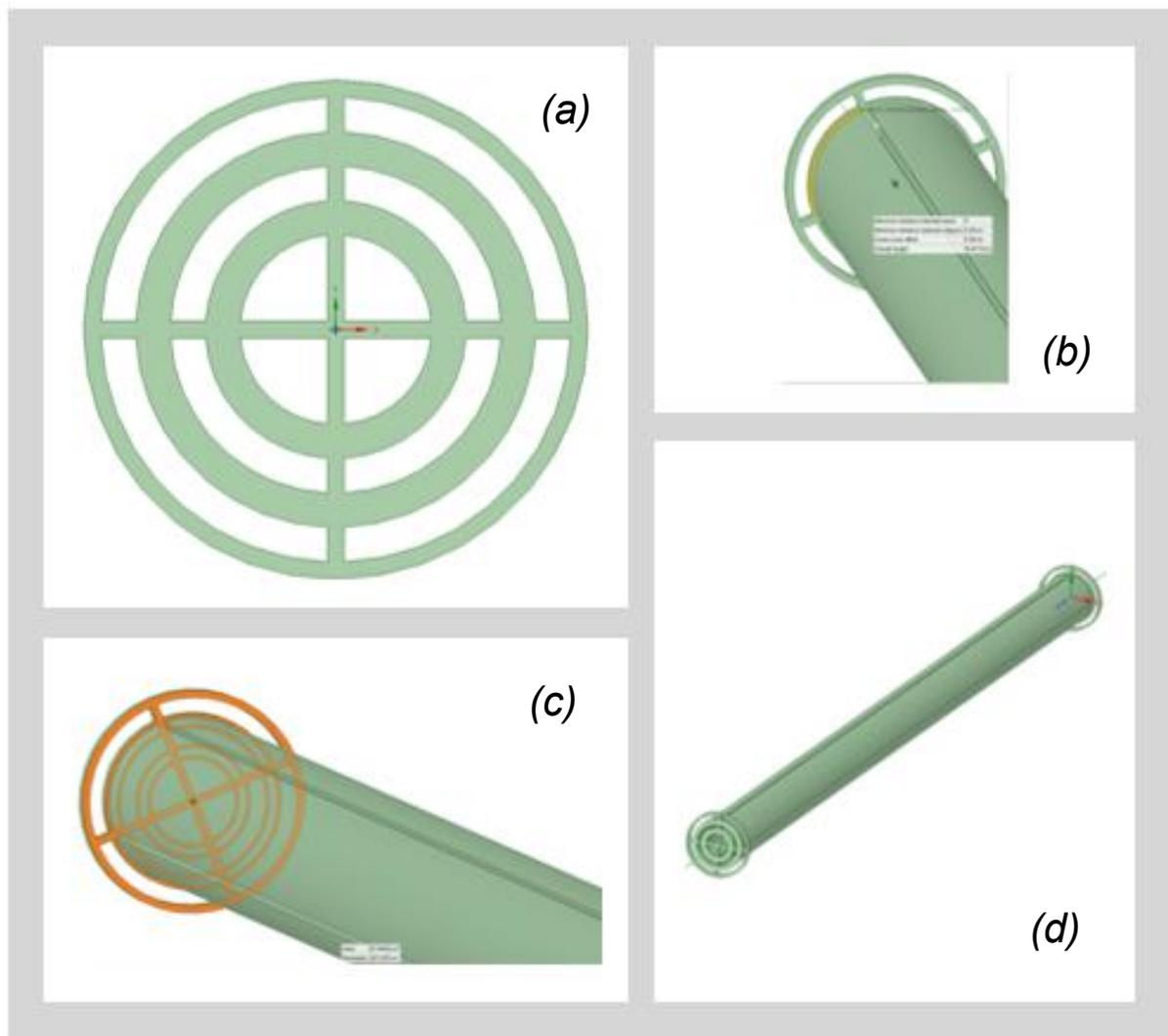


Figura 24. (a) Vista frontal del soporte (b) Acercamiento a canales de flujo (c) Boceto para canales de flujo y fibra (d) largo del soporte



1.1.3. Codos y reductores

Tabla 8.
Características de codos.

| Características | Valor | Unidad |
|--------------------------------------|-------|--------|
| Longitud ancho codo entrada/salida | 12.5 | cm |
| Longitud largo codo entrada/salida | 27.5 | cm |
| Diámetro externo codo entrada/salida | 7.1 | cm |
| Diámetro interno codo entrada/salida | 6.1 | cm |

En la Figura 25 se muestran imágenes representativas de los codos de entrada y salida con sus respectivos reductores.

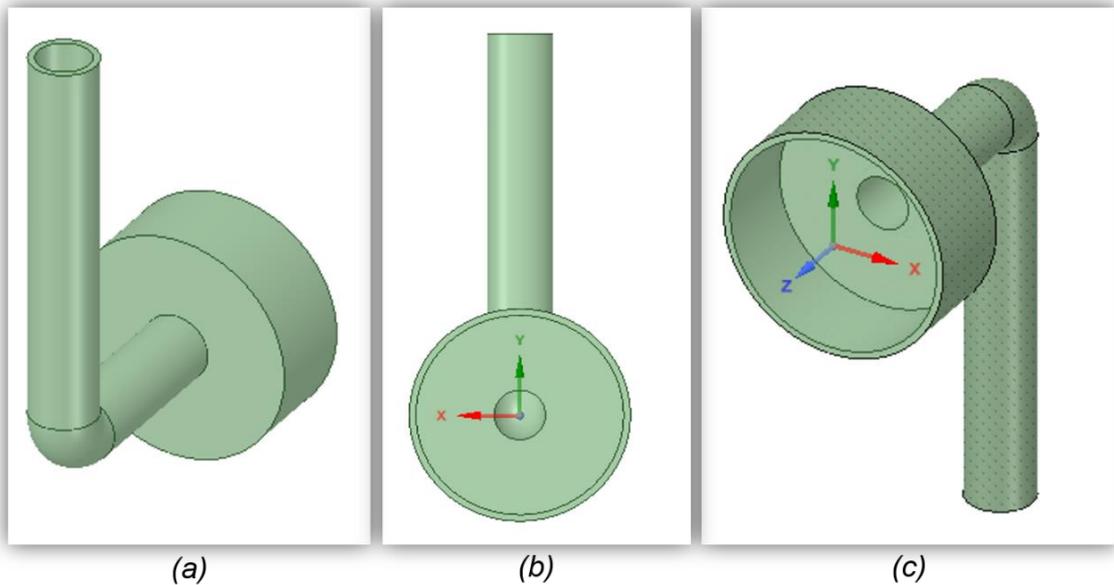


Figura 25. (a) Codo salida vista posterior (b) Codo salida vista frontal (c) Codo entrada vista isométrica.

Tabla 9.
Características reducción

| Características | Valor | Unidad |
|----------------------------------|-------|--------|
| Profundidad reducción | 4.5 | cm |
| Diámetro mayor externo reducción | 16.7 | cm |
| Diámetro mayor interno reducción | 15.7 | cm |
| Diámetro menor interno reducción | 6.1 | cm |



1.1.4. Preparación de la geometría

Al obtener la geometría física del módulo del RBT se prosiguió a crear el dominio del fluido, Figura 26, antes de pasar a la creación del mallado.

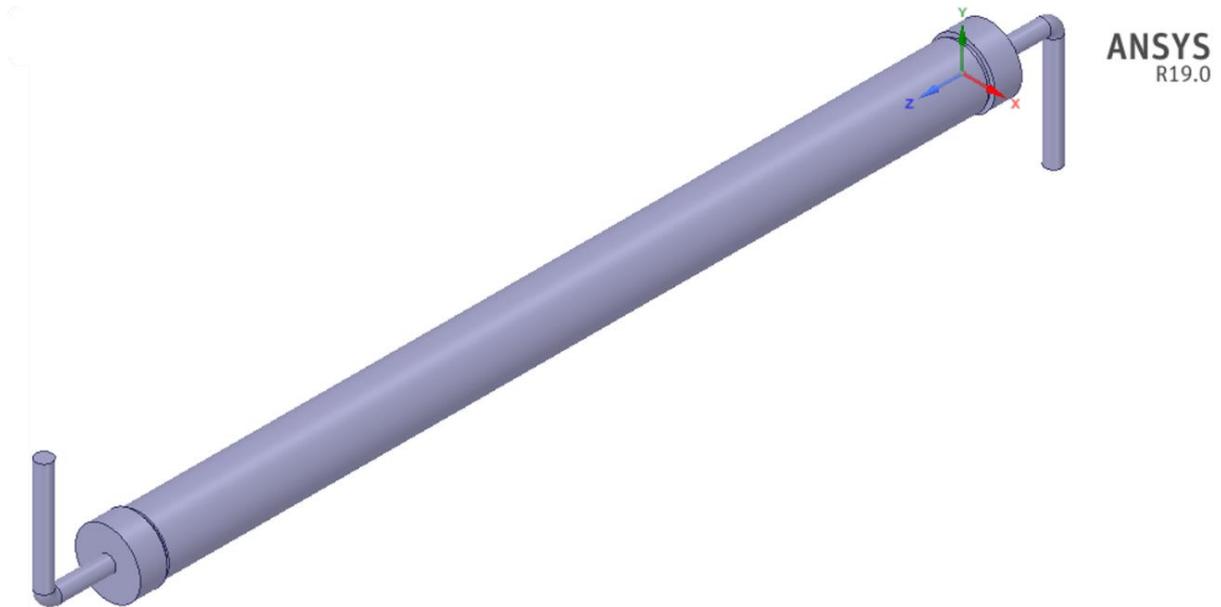


Figura 26. Dominio del fluido

Durante el estudio de la hidrodinámica del reactor no es necesario aplicar fenómenos de carácter estructural o de transferencia de calor, la coraza del reactor se elimina a manera de simplificar la resolución de los cálculos en ANSYS. De manera en que el material del reactor no es de importancia ya que sólo se efectuará la solución sobre el dominio de fluido.

1.2. Mallado

Al determinar la geometría del dominio del fluido, se prosiguió con el diseño de la malla utilizando el complemento *Meshing* de ANSYS. Al inicio del mallado se tomó en cuenta la primera versión de la geometría del reactor, donde se consideraban la forma cónica de los reductores

Una vez dentro de *Meshing*, se procedió a generar una malla preliminar. Ésta se compuso por una malla estructurada formada de tetraedros desproporcionados, la cual era necesario refinar para conseguir una mejor calidad de la malla. Figura 27.

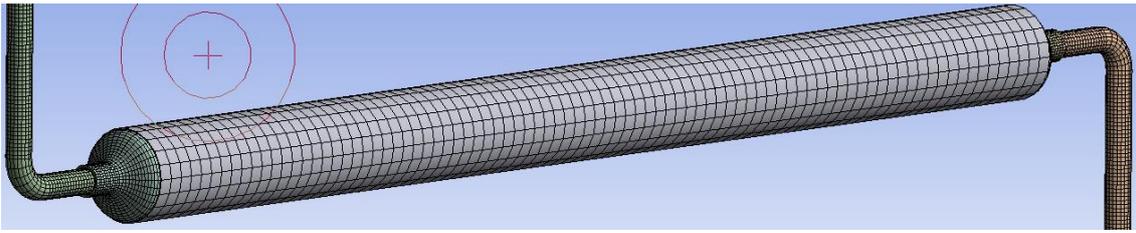


Figura 27. Malla preliminar para la primera versión de la geometría del reactor en el módulo 1.

El refinado de la malla fue dado por el cambio del tipo de método, luego se modificó el tamaño de los elementos y finalmente se pretendía añadir una inflación, dado que es un controlador necesario para el cálculo del flujo sobre las paredes del reactor. Sin embargo, debido a la complejidad de la geometría del soporte interno del reactor, la aplicación de la inflación sobre las paredes no fue posible.

Al generar la malla de acuerdo con los nuevos controladores añadidos fue posible verificar que el problema estribaba sobre el cuerpo cónico de los reductores, porque, aunque aparentemente contenía una buena calidad de malla, al ejecutar la herramienta de calidad en ANSYS Fluent, arrojó un mensaje comunicando la existencia de un volumen mínimo negativo. El tener un volumen mínimo negativo es una señal alarmante, pues indica que los elementos de la malla tienen una estructura deformada incapaz de ser observada a simple vista e inaceptable para las exigencias del estudio de un flujo a dos fases.

Diversos autores han estudiado y demostrado que los problemas multifásicos que usan celdas hexaédricas como método arroja buenos resultados y alcanzan la convergencia en menores tiempos de cálculo, como lo argumentó Garzón Sanchez en su trabajo de grado (Garzón Sánchez, Santiago Humberto, 2014). El uso de una malla hexaédrica es conveniente dado que el comportamiento de un flujo bifásico requiere de una buena calidad de malla y mayor orden entre los elementos. Características que cumplen las celdas hexaédricas por su uniformidad.

Debido a las razones anteriores, se prosiguió a rediseñar la geometría del reactor. A continuación, se presenta la configuración con la versión final del RBT.



1.2.1. Métodos

De acuerdo con lo anterior se añadió el método *Multizone* y dentro de la opción *Mapped Mesh Type* se seleccionó *Hexa*, confirmando una configuración hexaédrica para los cuerpos seleccionados con color morado como se puede apreciar en la Figura 28. A estos mismos cuerpos se les asignó un tamaño de elemento de 5×10^{-3} m.

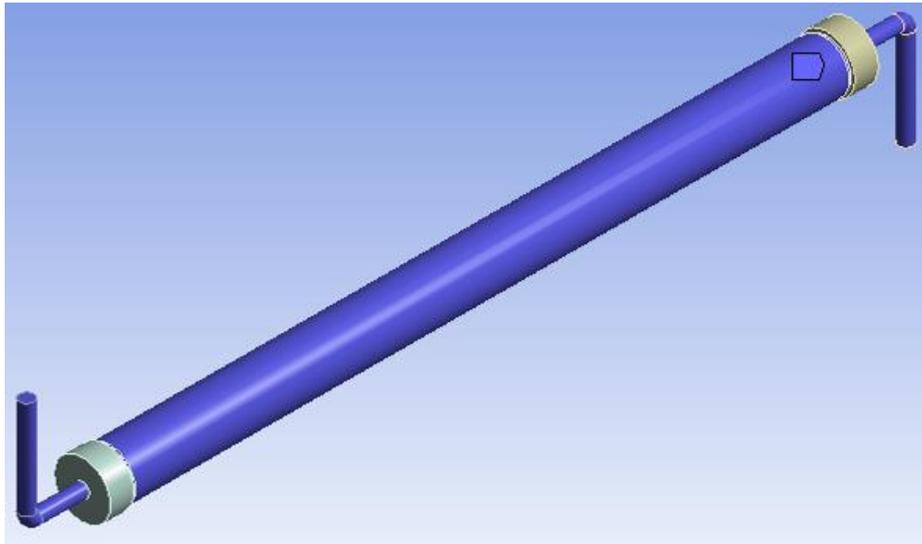


Figura 28. Cuerpos seleccionados para *Multizone 1* y *Body sizing 1*

Como la zona de conflicto correspondía a los reductores, se configuraron los métodos independientemente de las zonas ya seleccionadas (Figura 29). Se añadió el método *Patch Conforming* para que las celdas tuvieran una estructura tetraédrica (Figura 30).

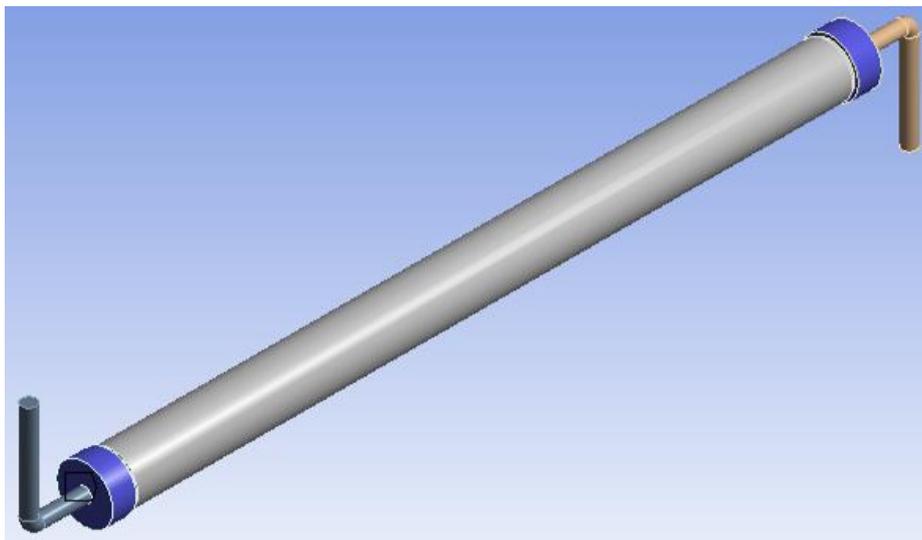


Figura 29. Reductores seleccionados para *Patch Conforming*

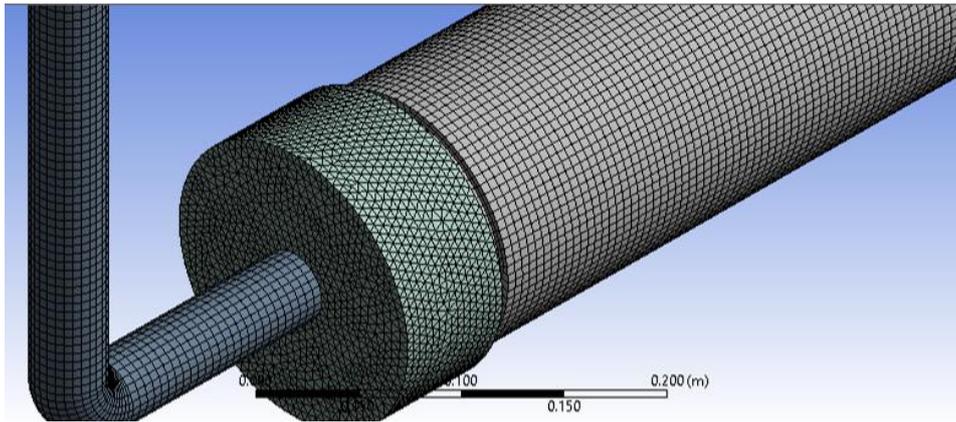


Figura 30. Tetraedros en reductor y hexaedros en cuerpo y codos del reactor.

1.2.2. Calidad de la malla final

La malla, antes de la transformación de la malla tetraédrica a poliédrica, obtuvo la siguiente cantidad de nodos y elementos, de acuerdo con *Meshing*.

Tabla 10.

Resultados de número de nodos y elementos

| Número de nodos | Número de elementos |
|-----------------|---------------------|
| 479 482 | 564 002 |

Este resultado favoreció a la velocidad de las iteraciones necesarias para el cálculo de las ecuaciones de conservación del fluido en cada uno de los nodos de la malla.

Para asegurar que la calidad de la malla obtenida era la correcta, se procedió a utilizar tanto el indicador de *Skewness* como de *Orthogonal Quality*, con los resultados siguientes:

| Details of "Mesh" | |
|--------------------|-------------------|
| Check Mesh Quality | Yes, Errors |
| Target Skewness | Default (0.90...) |
| Smoothing | Medium |
| Mesh Metric | Skewness |
| Min | 1.3057e-010 |
| Max | 0.84939 |
| Average | 0.19743 |
| Standard Deviation | 0.16429 |
| Inflation | |
| Assembly Meshing | |
| Advanced | |
| Statistics | |
| Nodes | 479482 |
| Elements | 564002 |

| Details of "Mesh" | |
|--------------------|-------------------|
| Check Mesh Quality | Yes, Errors |
| Target Skewness | Default (0.90...) |
| Smoothing | Medium |
| Mesh Metric | Orthogonal ... |
| Min | 0.15061 |
| Max | 1. |
| Average | 0.86873 |
| Standard Deviation | 0.14323 |
| Inflation | |
| Assembly Meshing | |
| Advanced | |
| Statistics | |
| Nodes | 479482 |
| Elements | 564002 |

Figura 31. Calidad de la malla y estadísticas para *Skewness* y *Orthogonal Quality*



La Figura 31 nos muestra que la calidad de la malla resultante es buena pues tanto en *Skewness* como en *Orthogonal Quality* se verifica de acuerdo con la especificación de los criterios mencionados con anterioridad en la Tabla 3.

De manera resumida, en la Tabla 11 se obtuvo una calidad de malla satisfactoria para ambos indicadores.

Tabla 11.
Criterios de calidad para el mallado

| Criterio | Valor | Calidad de la malla |
|--------------------|---------|---------------------|
| Skewness | 0.19743 | Excelente |
| Orthogonal Quality | 0.86873 | Muy Buena |

A continuación, se muestra con ayuda de gráficas de barras la cantidad de elementos que hay para cada estructura de la malla (hexaédrica, tetraédrica y piramidal) para ambos indicadores de calidad.

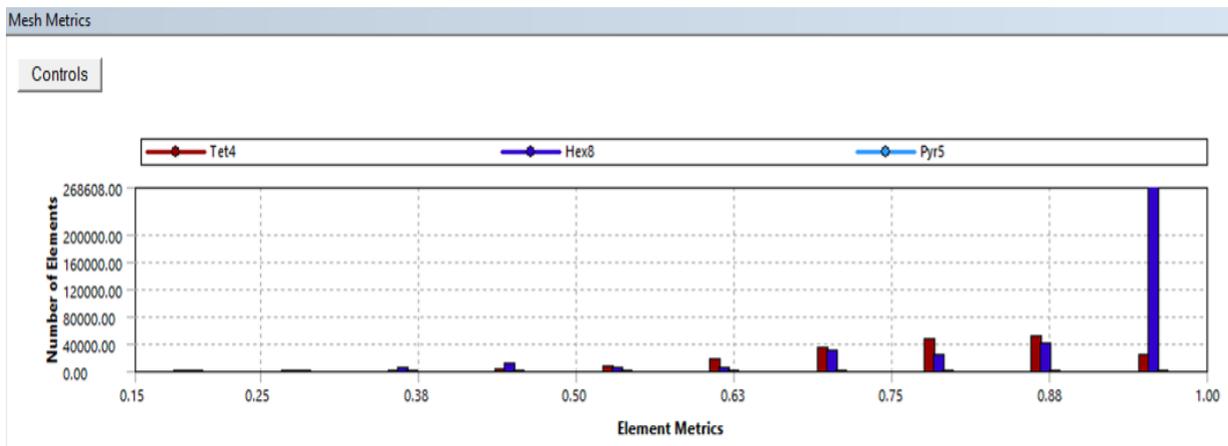


Figura 32. Gráfica de las métricas de la malla - *Orthogonal Quality*

La Figura 32 correspondiente a la métrica *Orthogonal Quality* muestra mayor cantidad de elementos cerca del valor 1 en el eje x, debido a que el rango de aceptación de calidad de malla para esta métrica se encuentra en ese valor (como se observó en la Tabla 3).



Controls

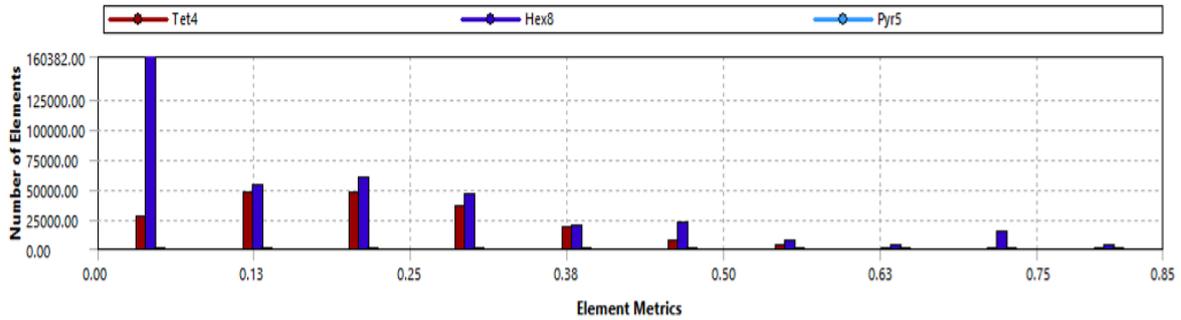


Figura 33. Gráfica de las métricas de malla-Skewness

La Figura 33, en cambio, al corresponder al indicador *Skewness*, tiene el comportamiento contrario.

También se puede asegurar la calidad de la malla de acuerdo con un método gráfico llamado *Element Quality* que, de manera amigable, señala con diferentes colores la calidad en cada sección de la geometría.

A continuación, se presenta la vista isométrica del módulo del reactor, así como de un corte de manera transversal y longitudinal.

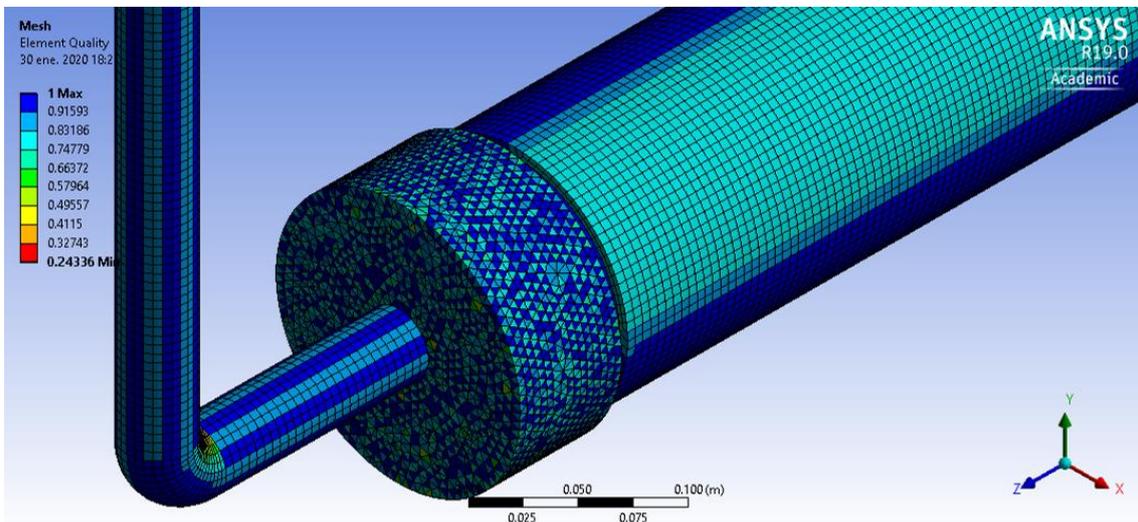


Figura 34. Element Quality, vista isométrica del reactor

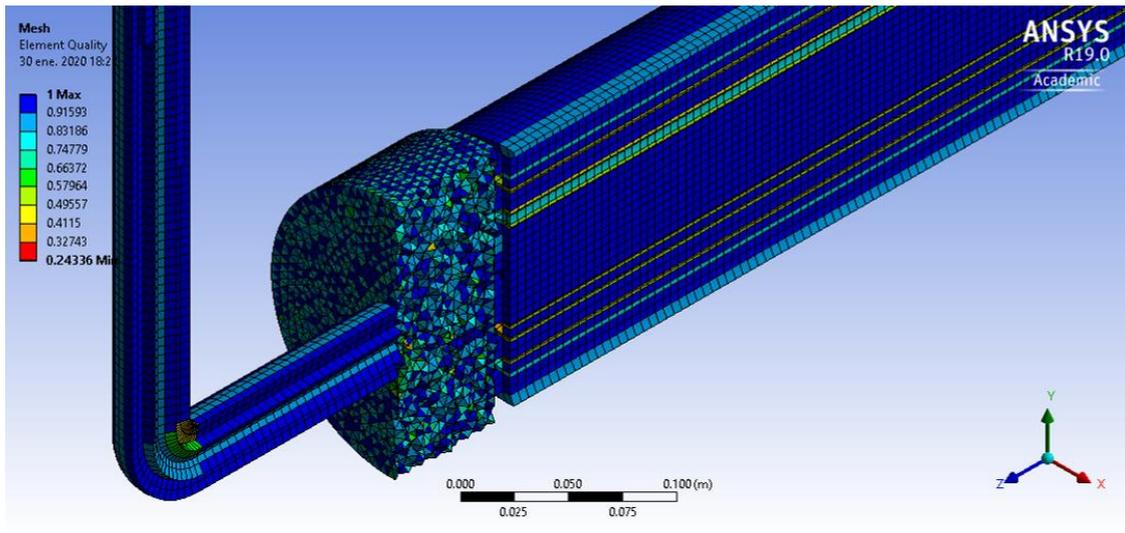


Figura 35. Element Quality, corte transversal sobre eje yz

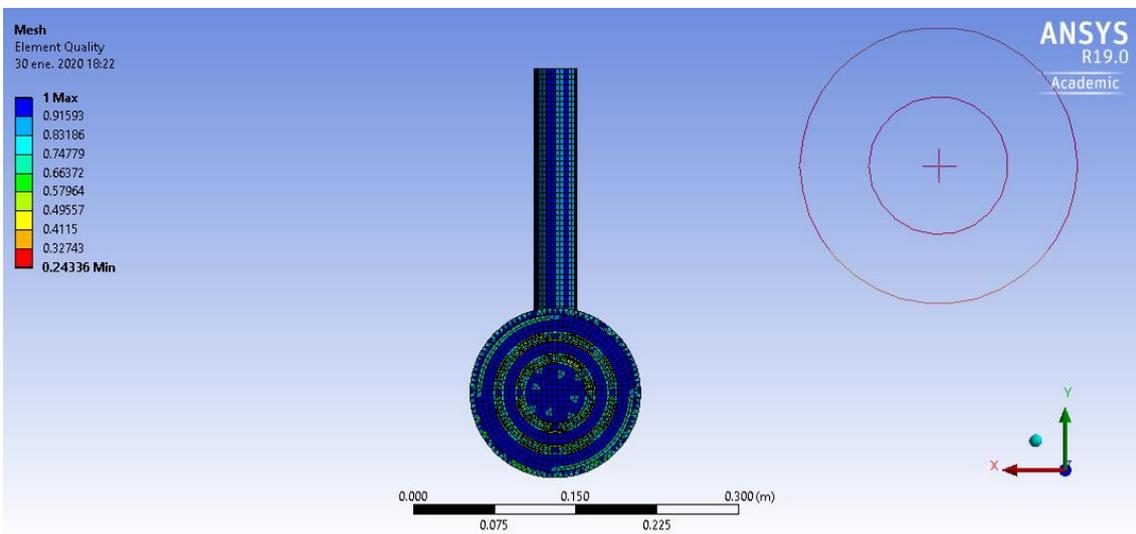


Figura 36. Element Quality, vista ejes XY

De acuerdo con las Figuras 34, 35 y 36, la calidad de malla disminuye considerablemente en zonas donde la geometría tiene curvaturas pronunciadas.

1.3 Selección de nombres (*Name Selection*)

Una vez que se ha confirmado una buena calidad de la malla, se generan los *Name Selection* para indicarle a ANSYS las condiciones de frontera en Fluent.

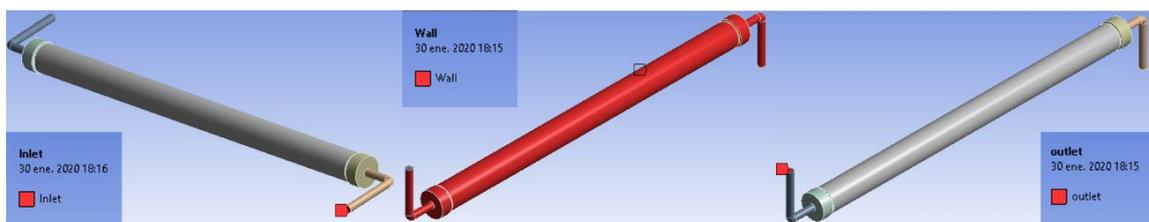


Figura 37. Name Selection



En este caso, las condiciones de frontera corresponden a la entrada del fluido, a su salida y a la pared de la envolvente de la geometría, como se encuentran ubicados y señaladas en color rojo en la Figura 38.

2. Procesamiento Ansys Fluent

Antes de comenzar con la configuración, debe verificarse la buena calidad de la malla y asegurarse de que se tenga un valor de volumen mínimo negativo, como se mencionó anteriormente en el cambio de geometría.

Cuando se tuvo la certeza de no tener problemas en la calidad de la malla, se procedió a cambiar los tetraedros a poliedros (Figura 31).

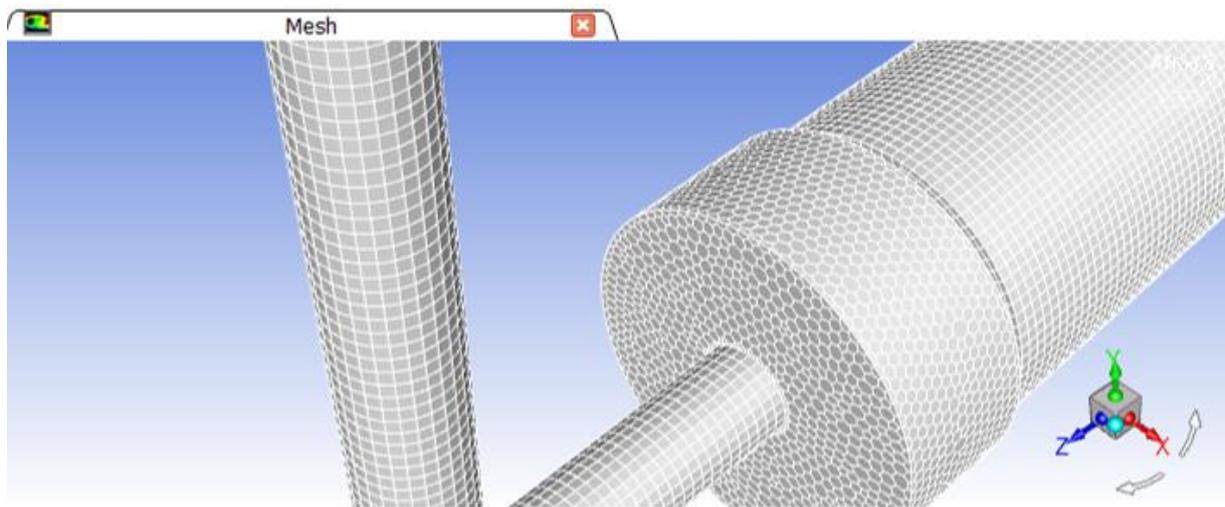


Figura 38. Mallado poliédrico en reductor de salida con la herramienta Make Polyhedra de ANSYS Fluent.

Una vez finalizado el pre-procesamiento, se accede al siguiente paso que consta de la configuración de parámetros en Fluent.

2.1. General

Existen dos tipos de solucionadores numéricos: *Pressure-Based* y *Density-Based*. Se seleccionó el tipo de *solver* a *Pressure-Based* ya que es utilizado para flujos compresibles a alta velocidad. También se señaló la velocidad de formulación a Absoluta y un tiempo en régimen permanente (estado Estacionario). Además, se activó la casilla *Gravity* y se le otorga un valor de -9.81 al eje Y.



2.2. Modelos (*Models*)

Ya que es de interés simular un flujo bifásico turbulento, se seleccionaron los modelos de turbulencia y de multifase, de acuerdo con la siguiente tabla:

Tabla 12.

Modelos

| | |
|------------------|---------------------------------|
| Modelo viscoso | k- ϵ (2eqn) realizable |
| Modelo multifase | <i>Eulerian</i> |

Esto es debido a que el modelo k- ϵ realizable funciona mejor con sistemas de alta turbulencia. Además, este modelo se ha convertido en uno de los modelos clásicos para trabajos de ingeniería: es robusto, económicamente computacional y tiene una precisión razonable para resolver sistemas con fluidos turbulentos (Vazquez Raymundo, 2019).

Para el modelo de multifase se selecciona Euleriano, ya que este observa el movimiento del fluido en ubicaciones específicas y requiere menor esfuerzo computacional a comparación de modelo de Lagrange, que sigue la trayectoria de las partículas del fluido. Al ser un problema en el que intervienen dos fases, la solución de las ecuaciones complica la resolución y se incrementa la cantidad de tiempo de convergencia.

2.2.1. Materiales (*Materials*)

Se añade agua en fase líquida desde la base de datos de Fluent pues ya se encuentra seleccionado el aire por default. En cuanto a la coraza del reactor, como se había mencionado en la creación de la geometría, que originalmente es de plástico PVC, se omite debido a que sólo se trabajó sobre el dominio del fluido.

2.2.2. Fases (*Phases*)

Las propiedades físicas de las fases que se muestran a continuación fueron tomadas de la base de datos de Fluent.



Tabla 13.
Propiedades físicas de los materiales en la zona del fluido

| Material | Densidad (kg/m ³) | Viscosidad (Pas) | Fase |
|----------|-------------------------------|-----------------------|----------|
| Agua | 998.2 | 1x10 ⁻³ | Continua |
| Aire | 1.255 | 1.78x10 ⁻⁵ | Dispersa |

Nota: Recuperado de ANSYS Fluent 15.0 database

Como fuerzas interfaciales se seleccionó la ley de Schiller- Naumann en la lista despegable correspondiente a la fuerza de arrastre y la ley de Legendre-Magnaudet para la fuerza de elevación. La ley de Schiller- Naumann describe el arrastre entre la partícula esférica y el líquido circundante para una amplia gama de condiciones, siempre que las burbujas permanezcan aproximadamente esféricas. En este caso, las burbujas tienen un diámetro de 1 mm que se encuentra dentro del régimen esférico (ANSYS Inc., 2013). Mientras que la ley de Legendre-Magnaudet se aplica a partículas de fluido esférico de pequeño diámetro, donde existe la transferencia de momentum entre el fluido alrededor de la partícula y el flujo de recirculación interna dentro de la partícula (ANSYS Inc., 2013).

Aunque estas fuerzas interfaciales generan un acercamiento al comportamiento real del fluido dentro del reactor, es necesario tomar en cuenta al menos la fuerza de arrastre, ya que la ausencia de esta fuerza puede impactar a la velocidad con la que se mueve la fase dispersa (Vazquez Raymundo, 2019).

2.2.3. Condiciones de Frontera (*Boundary conditions*)

Se establecen los valores de las condiciones de frontera para la entrada y salida del reactor: *velocity inlet* y *pressure outlet*. La velocidad de entrada se asignó tanto para la fase primaria, como para la fase secundaria y la presión de salida se dejó en el valor que tiene ANSYS por default, debido a que es un dato desconocido al momento de realizar las simulaciones.

A cada simulación se le asignó una fracción de volumen con valor constante de 0.3, en la pestaña *Multiphase*, contenida en la ventana de *velocity inlet* para la fase aire.



Se tomó en cuenta el diámetro del codo de entrada, para hacer los cálculos pertinentes para transformar el flujo volumétrico a la velocidad de cada fase, como lo requiere ANSYS.

$$D = 0.061 \text{ m} \quad (2)$$

$$A = \pi \left(\frac{D}{2} \right)^2 = 2.9 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2 \quad (3)$$

Flujo de agua

$$60 \frac{\text{L}}{\text{min}} \left(\frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ L}} \right) \left(\frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}} \right) = 0.001 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} \quad (4)$$

Velocidad de entrada de agua

$$V_{\text{agua,in}} = \frac{0.001 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{2.9 \times 10^{-3} \text{ m}^2} = 0.342 \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad (5)$$

Los valores de este apartado fueron cambiados de acuerdo con los valores que se requerían en cada simulación. Para esta tesis se consideraron dos pruebas a analizar, a las cuales se le realizaron tres simulaciones a cada prueba dando como resultado cinco simulaciones en total, debido a que S1 se utilizó en ambas pruebas.

Para la Prueba 1, el flujo de agua se mantuvo con un valor constante de 60 L/min, mientras que los valores seleccionados para el flujo de aire fueron los que se muestran en la Tabla 14, mostrada a continuación.

Tabla 14.
Velocidades de aire

| Simulación | Flujo volumétrico de aire (L/min) | Velocidad del aire (m/s) |
|------------|-----------------------------------|--------------------------|
| S1 | 5 | 0.028 |
| S3 | 20 | 0.114 |
| S5 | 70 | 0.399 |

Para la Prueba 2, el aire mantuvo un flujo volumétrico constante de 5 L/min, mientras que los valores variables para el flujo volumétrico de agua variaron de acuerdo con lo siguiente:



Tabla 15.
Velocidades de agua

| Simulación | Flujo volumétrico de agua (L/min) | Velocidad del agua (m/s) |
|------------|-----------------------------------|--------------------------|
| S1 | 60 | 0.342 |
| S6 | 90 | 0.513 |
| S7 | 120 | 0.684 |

2.3. Solución (*Solution*)

2.3.1. Métodos (*Methods*)

Cuando el campo de flujo se aproxima como incomprensible no existe una ecuación explícita para el cálculo del campo de presiones. Por ello, se requiere de un algoritmo de acoplamiento presión-velocidad. La solución se logra luego de una serie de iteraciones cuando el campo de velocidades, mediante una ecuación de corrección de presión, satisface la ecuación continuidad. (Jodeck Osses, 2018). El uso del algoritmo *Coupled* genera un mayor tiempo de iteración, sin embargo, ayuda a una mejor convergencia (Vazquez Raymundo, 2019).

Los métodos de discretización espacial dependen de acuerdo con el tipo de malla y del tipo de problema a estudiar. Se seleccionaron los métodos recomendados conforme a la guía de Mejores Prácticas para el Modelado de Columnas de Burbujas (ANSYS Inc., Modeling Bubble Columns-Best Practices, 2015).

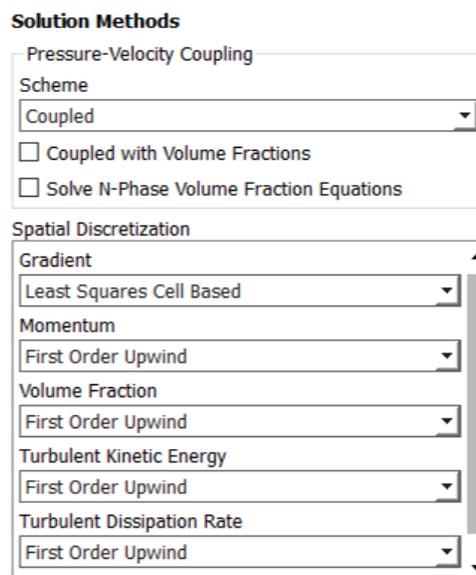


Figura 39. Métodos utilizados para la solución.



Además, se activaron las casillas de *Pseudo Transient*, *Warped-Face Gradient Correction* y *High Order Term Relaxation* para lograr llegar la convergencia.

2.3.2. Controles (*Controls*)

Los factores de relajación se mantuvieron con el valor dado por defecto en un principio. Al ver que los residuales tenían valores fluctuantes y no disminuían, se cambiaron los factores de relajación hasta 0.3 y 0.7 para las ecuaciones de presión y momentum.

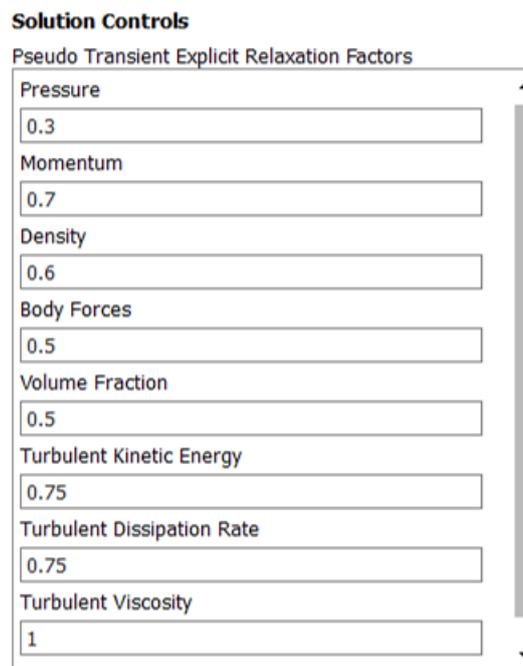


Figura 40. Factores de relajación

2.3.3. Definición de reportes (*Report definitions*)

En esta sección, se añadieron dos reportes más (Flujo másico y Flujo volumétrico del agua a la salida) para tener un seguimiento (además de los residuales) del cambio de esas variables con respecto a las iteraciones que se iban realizando. Como se verá más adelante, las gráficas de ambos reportes son similares debido a que trata de los cambios de flujo másico y volumétrico del agua a la salida del reactor.

2.3.4. Inicialización (*Initialization*)

En este apartado, se selecciona el momento donde las ANSYS comenzará a hacer cálculos. Se escoge el método de inicialización *Standard* con los valores calculados a la entrada del reactor.



2.3.5. Iniciar cálculos (*Run Calculation*)

Una vez que la inicialización terminó, se procede a indicar el número de iteraciones durante las cuales ANSYS deberá converger y dar por finalizada la solución.

3. Post- Proceso (Solving)

En esta parte del proceso, Fluent realiza el cálculo de cada una de las ecuaciones de conservación sobre cada nodo de la malla. El cálculo de los residuales, flujo másico y flujo volumétrico se ve reflejado con la iteración de los valores establecidos previamente hasta alcanzar la convergencia.

Los siguientes gráficos son el reflejo del seguimiento de las iteraciones necesarias para alcanzar la solución de las ecuaciones.

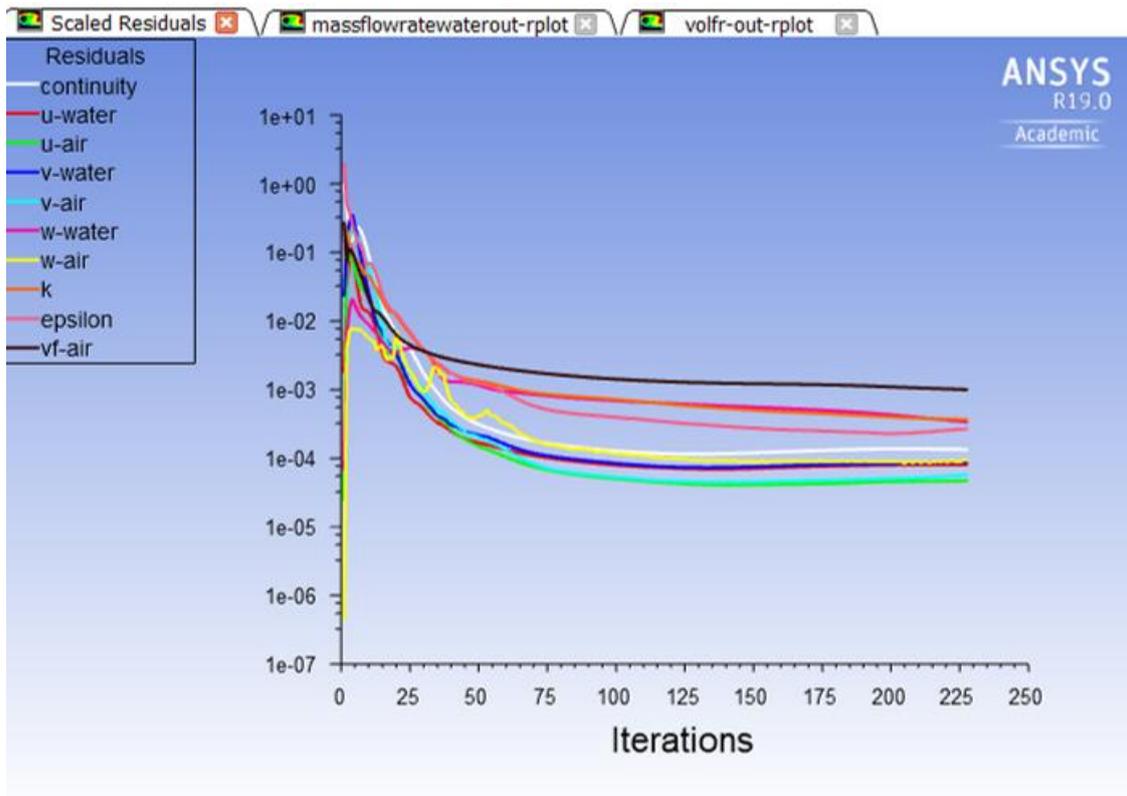


Figura 41. Residuales vs iteraciones

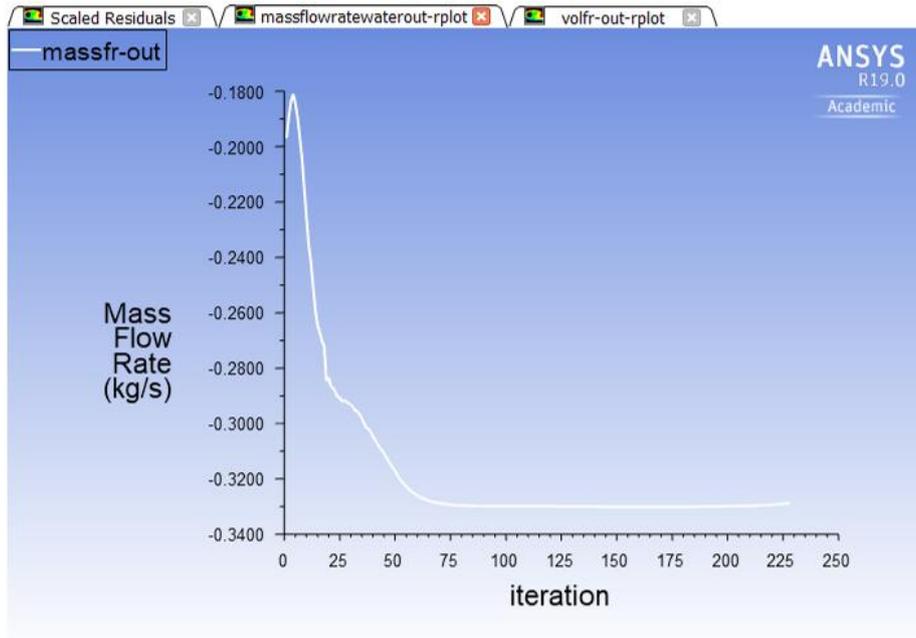


Figura 42. Reporte para el Flujo Másico de salida de agua

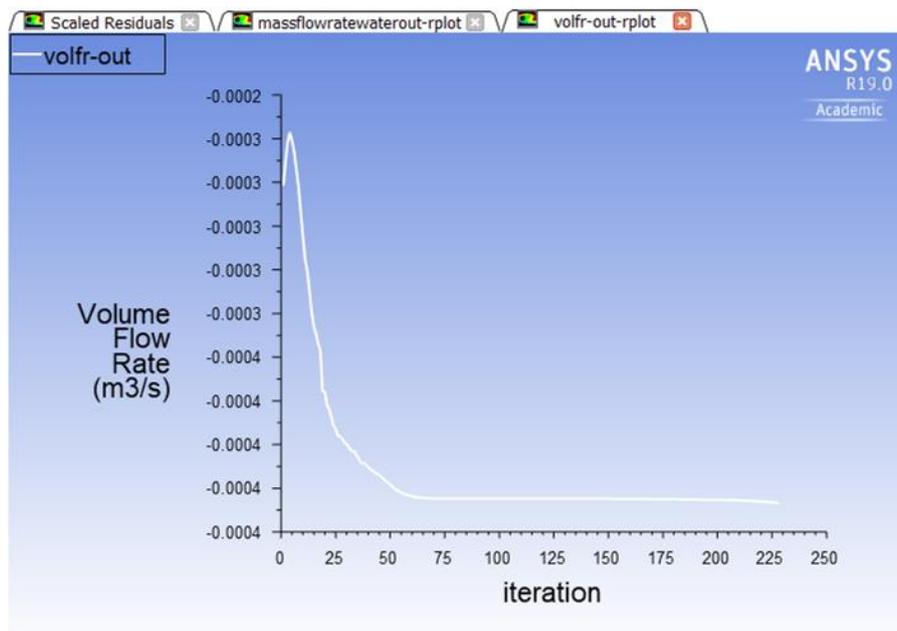


Figura 43. Reporte para Flujo Volumétrico de salida de agua

Se realizaron 234 iteraciones para un tiempo aproximado de hora y media de cálculo. El software arrojó un mensaje informando que se había alcanzado la convergencia y detuvo las iteraciones.

Para las demás simulaciones se obtuvieron resultados semejantes, el número de iteraciones aumentó conforme se iba aumentando el flujo de aire y de agua hasta alcanzar 608 iteraciones en aproximadamente 3 horas.



CAPÍTULO IV

ANÁLISIS Y RESULTADOS

Una vez que la solución alcanzó la convergencia, se prosiguió con la obtención de resultados visuales. Los resultados que se obtuvieron están conformados principalmente por:

- a) Contornos de presión
- b) Contornos de velocidad del agua
- c) Contornos de velocidad del aire
- d) Contornos de fracción de volumen de agua
- e) Contornos de fracción de volumen de aire
- f) Contornos de turbulencia

Cada uno de los contornos se realizaron para cada una de las 5 simulaciones obtenidas, comparando tres variaciones para el flujo de entrada de aire y tres simulaciones para el flujo de entrada de agua. Los resultados se dividieron en las siguientes partes:

Tabla 16.

Pruebas y contornos utilizados para cada simulación

| Prueba | Contornos | Simulación |
|--|--------------------------------|-----------------------|
| 1. Variación de flujo de entrada de aire | Velocidad de aire vs agua | S1 |
| | Fracción de volumen de aire vs | S3 |
| | agua | S5 |
| 2. Variación de flujo de entrada de agua | Velocidad de aire vs agua | S1 |
| | Fracción de volumen de aire vs | S6 |
| | agua | S7 |
| 3. Turbulencia | | S1, S3, S5, S6, S7 |
| 4. Caída de presión | | S1, S3, S5, S6, S7 |

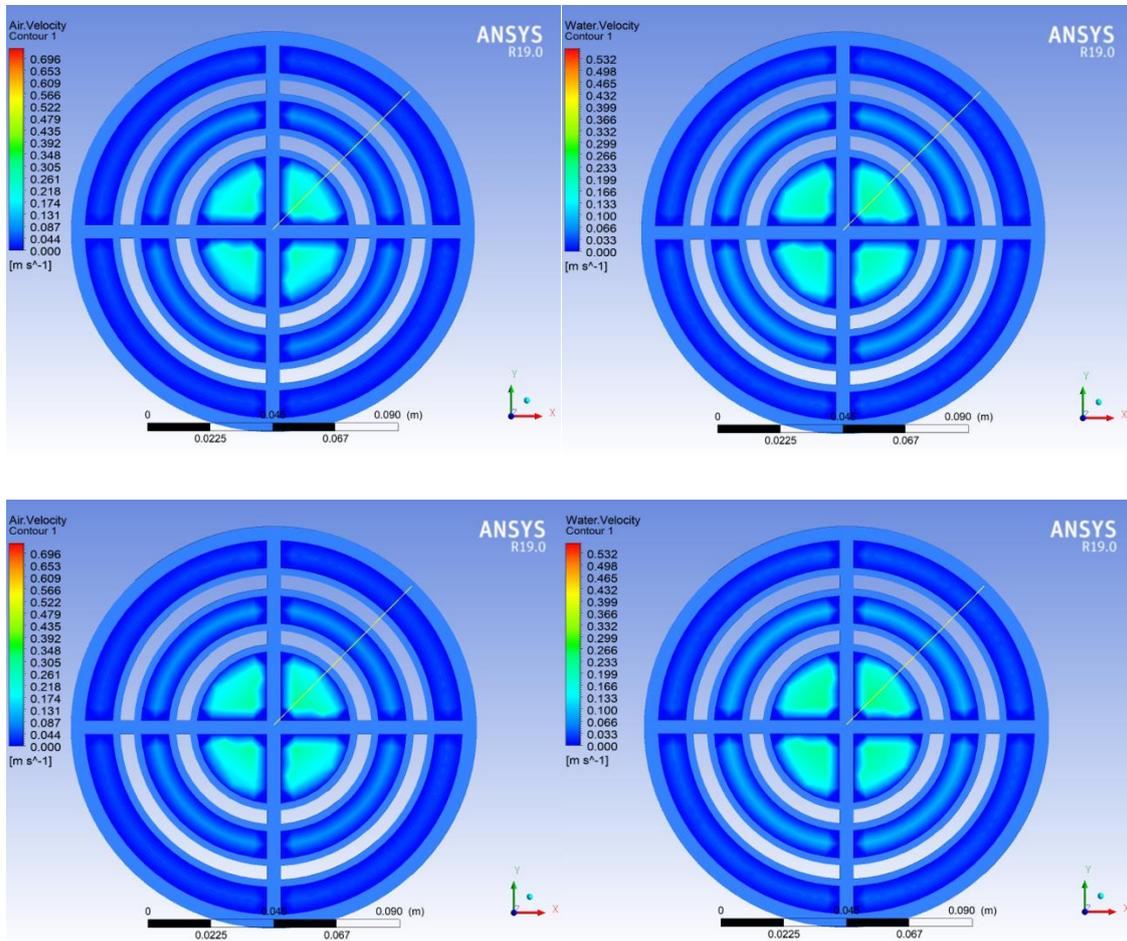


1. Variación del flujo de entrada de aire.

Como se explicó en la Tabla 14 los flujos de entrada de aire tuvieron valores de 5 L/min, 20 L/min y 70 L/min manteniendo un flujo constante de entrada de agua de 60 L/min. A continuación, se presentan los contornos obtenidos.

a) Contornos de velocidades

Los contornos de velocidad que se muestran a continuación es una comparativa entre los tres flujos de entrada de aire variados, mostrando un corte sobre el plano XY. De lado izquierdo, se encuentran acomodadas las velocidades del aire y de lado derecho las velocidades del agua.



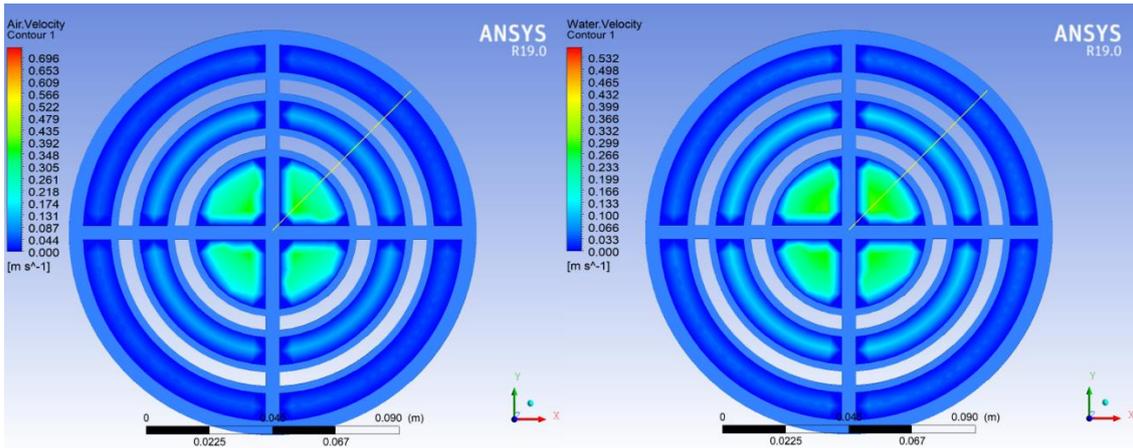


Figura 44. Contornos de velocidades del aire (Fila izquierda) Contornos de velocidades del agua (Fila derecha)

Como se puede observar, tanto para la velocidad de aire como para la del agua, a medida que incrementa el valor del flujo de entrada de aire, la velocidad de éste aumenta considerablemente en la parte central del módulo y se distribuye de manera radial del centro del módulo hacia las zonas aledañas. Sin embargo, los valores de la velocidad del aire son mayores a los de la velocidad del agua.

Para obtener una mejor visualización de lo descrito, se dibujó una línea del centro del módulo hacia afuera para poder hacer una gráfica XY que muestre la velocidad del aire.

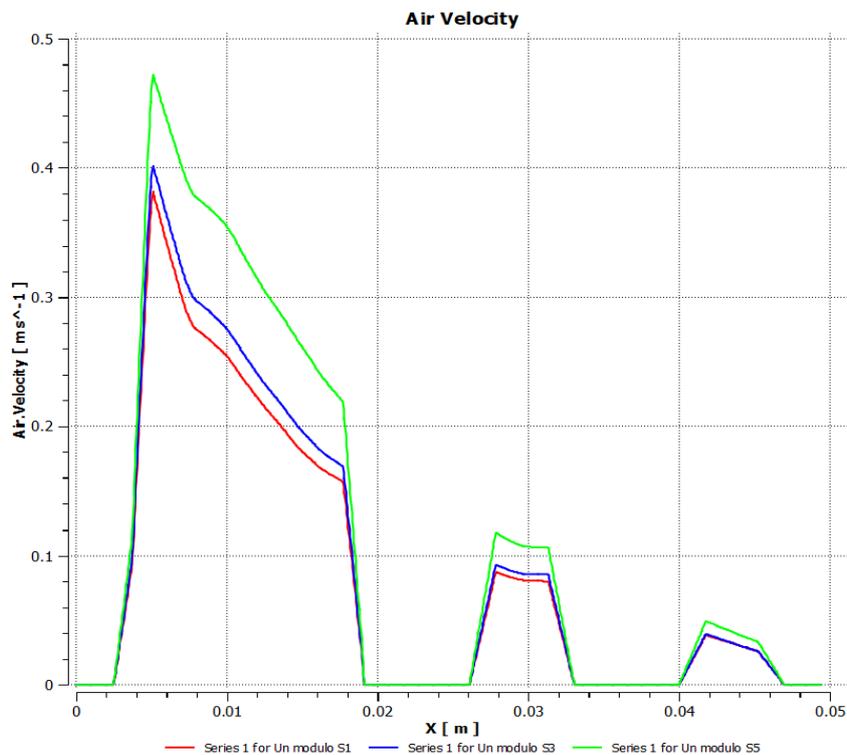


Figura 45. Gráfica de Velocidad del aire vs distancia radial



La Figura 45 verifica que, a los primeros dos centímetros de la línea dibujada, la velocidad del aire alcanza valores de hasta 0.48 m/s, disminuyendo a 0 en las zonas donde se ubica la construcción de la geometría de la fibra. También se comprueba que la serie verde S5, que corresponde al flujo de 70 L/min de entrada de aire, es la que contiene una mayor velocidad a comparación de la serie roja S1, que corresponde a un flujo de 5 L/min de entrada de aire.

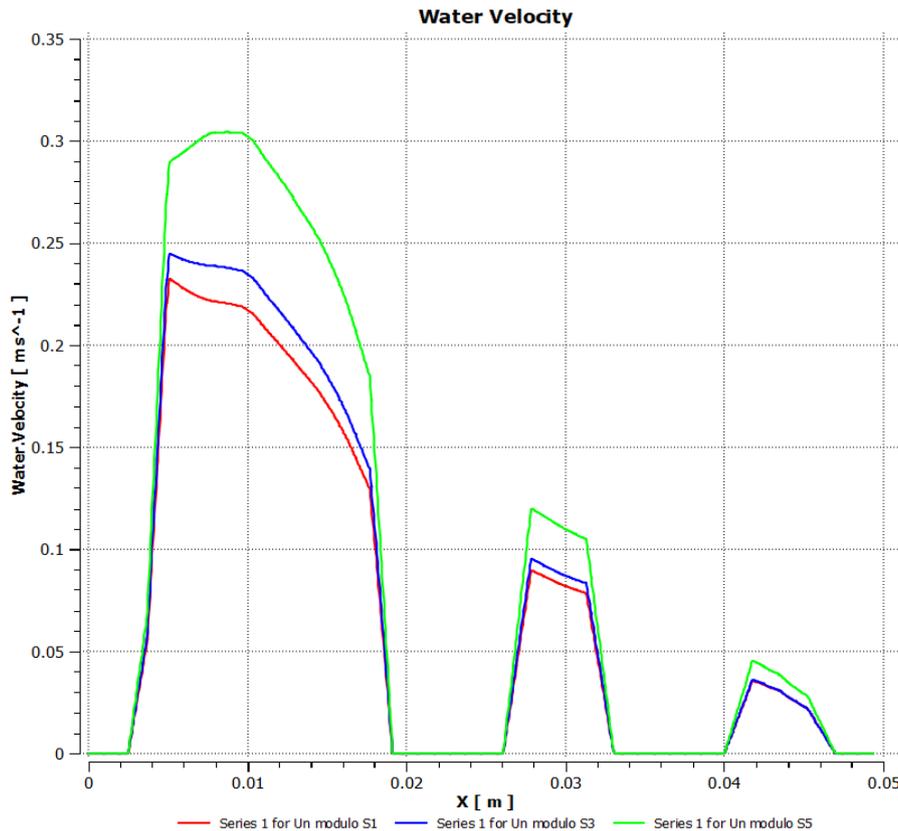


Figura 46. Velocidad del agua vs distancia radial

A comparación de las velocidades calculadas para el flujo de aire con una velocidad máxima aproximada de 0.48 m/s, la velocidad máxima alcanzada para la simulación S5 del flujo de agua, apenas consiguió un valor de 0.31 m/s en el centro del reactor.

Para una vista sobre el plano XZ, se observó el mismo comportamiento, distribuyendo la velocidad al centro y a lo largo del módulo, indicando posibles zonas muertas en las paredes del módulo debido a la baja velocidad que reportan los resultados de ANSYS.

De igual manera, una mayor velocidad se concentra en los codos de entrada y salida puesto que el diámetro es menor que el módulo del reactor.

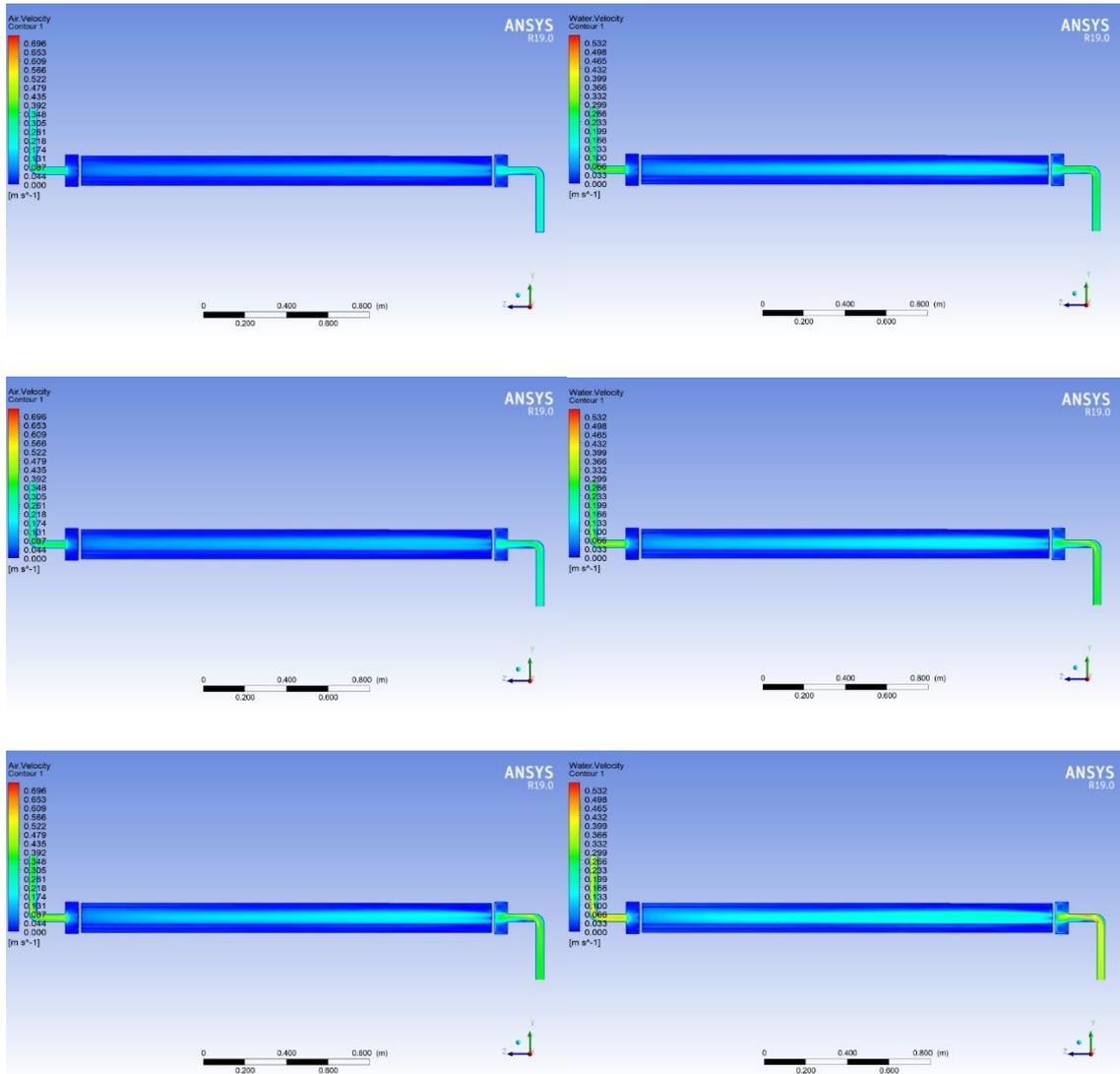


Figura 47. Contornos de velocidad del aire (izquierda) y del agua (derecha) sobre el eje YZ

No obstante, al obtener una vista en el plano YZ se logra visualizar un mayor alcance de la velocidad del agua a lo largo del reactor y con mayor intensidad en los codos de entrada y salida a comparación de los contornos obtenidos de la velocidad del aire.

b) Contornos de fracción de volumen

A continuación, se muestran los planos XY de fracción de volumen para ambas fases, concentrada dentro del módulo del reactor. Ya que el fluido se compone de dos fases, las zonas señaladas con baja cantidad de fracción de volumen de aire ocupan un valor mayor en los contornos de fracción de volumen de agua y de manera inversa, las regiones con mayor fracción de volumen de aire tienen una menor fracción de volumen de agua.

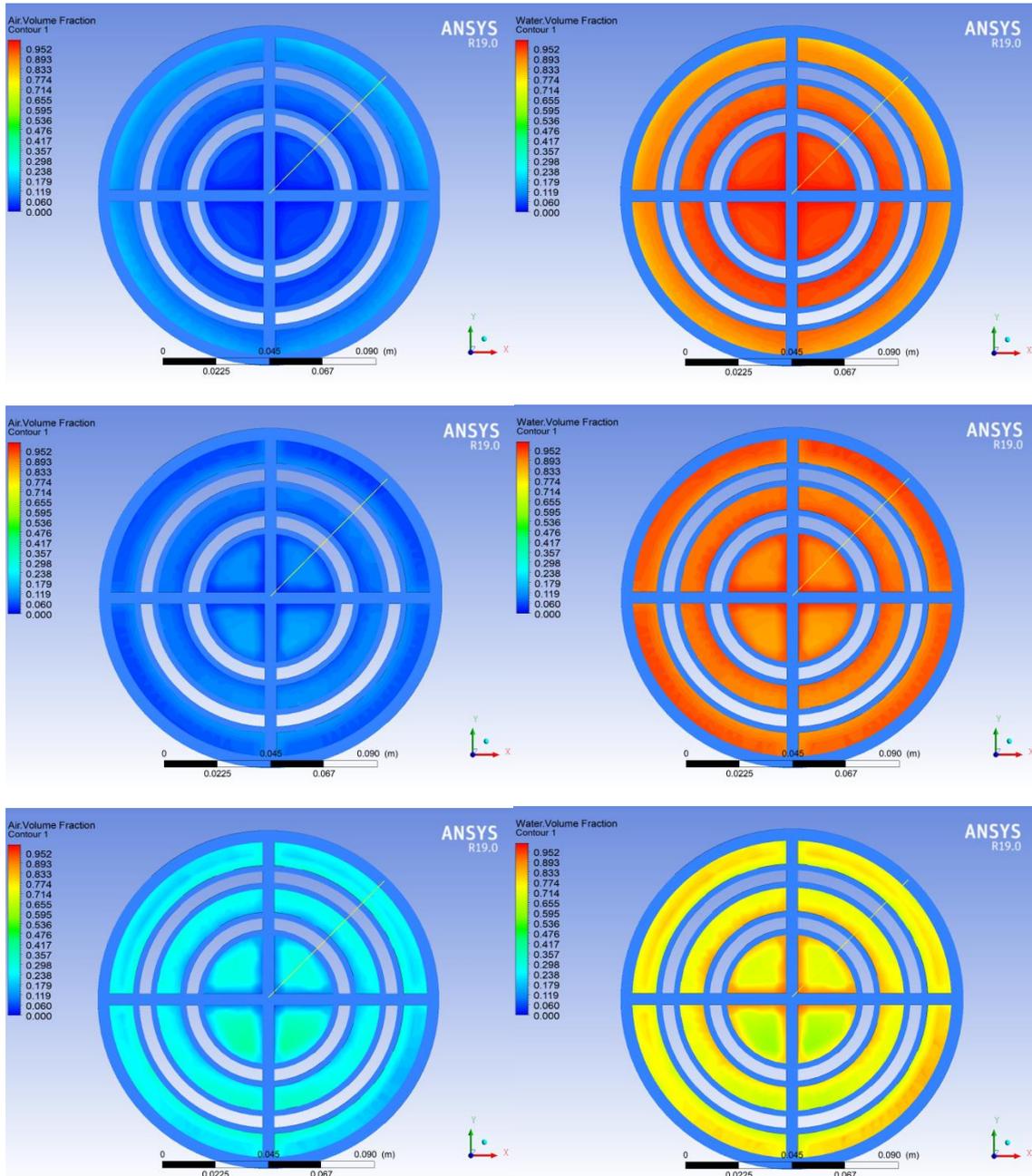


Figura 48. Contornos de fracción de volumen de aire (izquierda) y de agua (derecha)

En la Figura 48, se puede observar que, a una menor velocidad del flujo de entrada de aire, las burbujas o la fracción de volumen de aire dentro del módulo se concentra en las paredes de la coraza del reactor, mientras que en la zona central la fracción de volumen de aire es casi nula. A una velocidad de 0.11 m/s de aire, las burbujas se distribuyen uniformemente en el centro del reactor, pero con menor concentración.



A una mayor velocidad, la fracción de volumen de aire se encuentra distribuida homogéneamente, con un mayor valor de fracción de volumen de aire, y ligeramente con mayor concentración en la zona central del módulo.

Los contornos de la fracción de volumen de aire en el plano YZ muestran que la distribución de burbujas aumenta al incrementar la velocidad a lo largo del módulo y se concentran en mayor cantidad en el reductor de entrada, antes de repartirse en los tubos concéntricos internos.

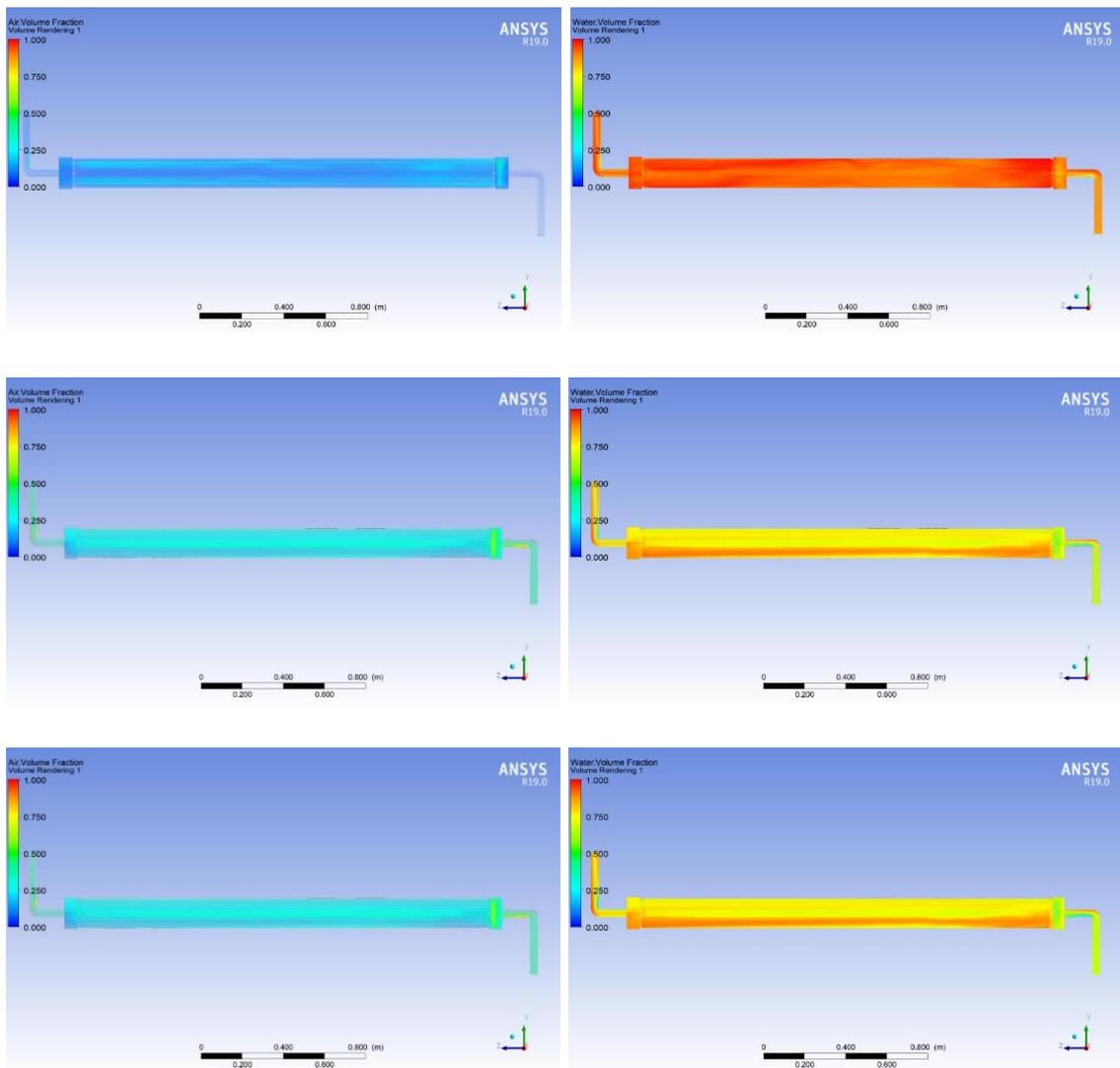


Figura 49. Contornos de fracción de volumen de aire (Izquierda) y de agua (derecha) sobre el eje YZ

A pesar de que en los contornos de velocidad se indicaron zonas muertas debido a la baja velocidad señalada, en los contornos de fracción de volumen de aire es posible apreciar la distribución de burbujas a lo largo y ancho del reactor cuando se incrementó el flujo de aire de entrada.

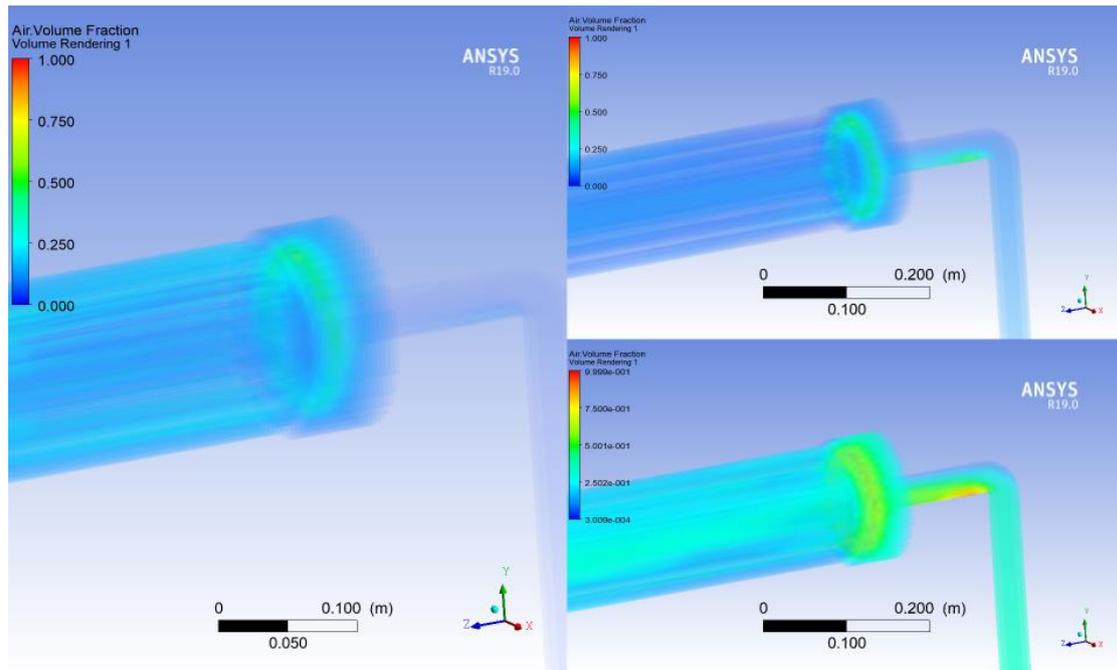


Figura 50. Acercamiento a reductores de entrada para la fracción de volumen de aire

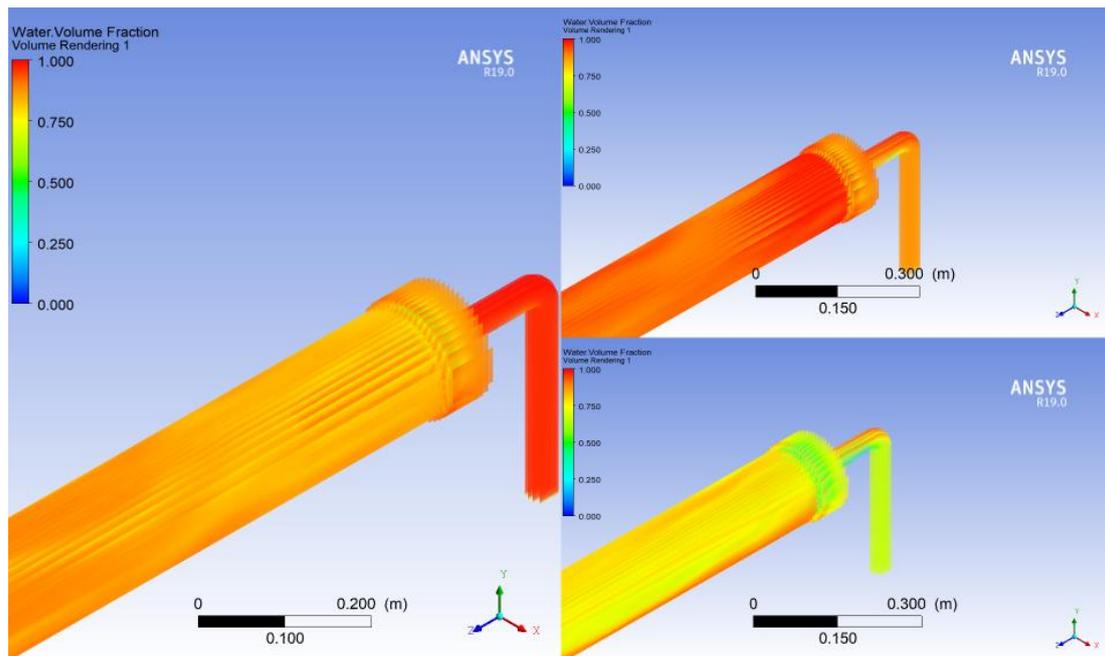


Figura 51. Acercamiento a reductores de entrada para la fracción de volumen de agua.

2. Variación del flujo de entrada de agua

Para esta prueba, se realizaron dos simulaciones más (S6 y S7), incrementando el flujo de agua partiendo de la S1. El flujo de aire mantuvo su valor constante de 5 L/min mientras que el agua aumentó de 60 L/min a 90 L/min y finalmente a 120 L/min, de acuerdo con la Tabla 15. Teniendo en cuenta lo anterior, se presentan los contornos obtenidos.



a) Contornos de velocidades

La Figura 52 muestra el comportamiento de las velocidades del agua y las velocidades del aire para cada simulación. Tanto para la velocidad del agua, como para la del aire se puede observar un aumento de la velocidad de forma radial concentrándose con mayor intensidad en el centro del módulo.

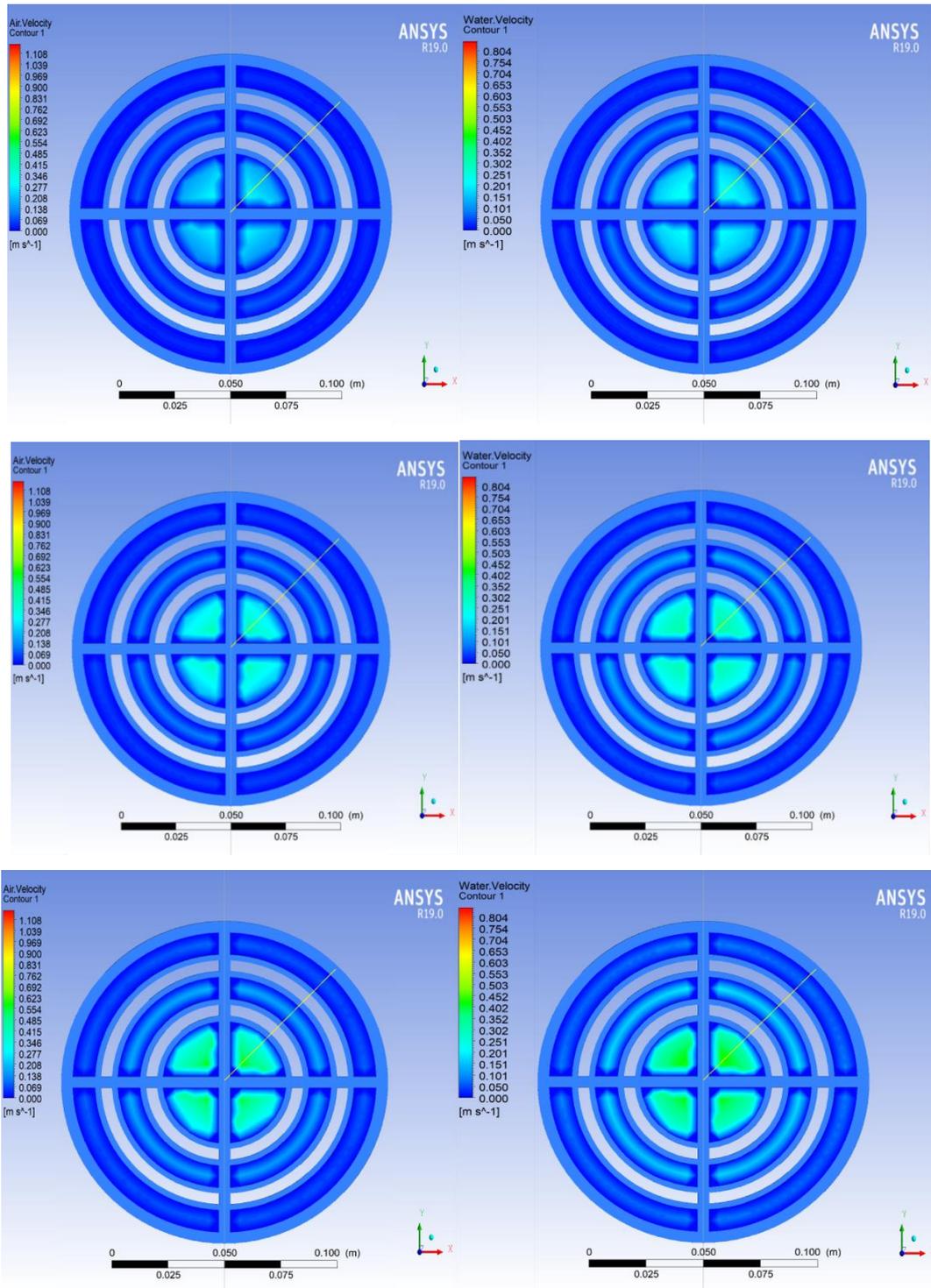


Figura 52. Contornos de velocidades para la Prueba 2. Velocidad de aire (izquierda). Velocidad del agua (Derecha)



Debido a que no se encuentran en la misma escala los contornos de velocidad de aire y los de agua, se pueden deducir a simple vista una mayor velocidad en el agua. Sin embargo, no es posible determinar con exactitud los valores de manera visual en esos contornos. Dibujando una línea del centro del módulo hacia la pared se pudieron obtener los valores de la velocidad sobre esa línea y los resultados se presentan en los siguientes gráficos.

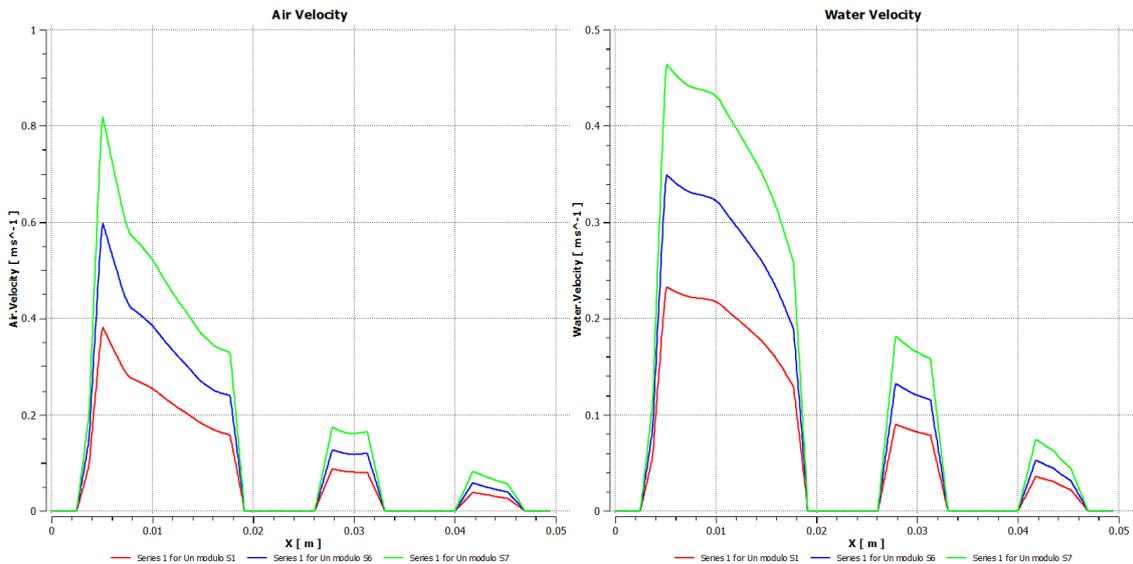


Figura 53. Gráficas de velocidad del aire (izquierda) y velocidad del agua (derecha) vs distancia radial

Aunque las gráficas no se encuentran en la misma escala, es más cómodo comparar las velocidades del aire y del agua. Inesperadamente, la velocidad del aire es mayor que la velocidad del agua, ya que las condiciones de frontera iniciales para cada simulación tuvieron aumento sobre la velocidad del agua, por lo que se esperaba que fuera mayor. Esto se explica debido a que la fase secundaria tiene una menor densidad a comparación de la del agua, por lo que las burbujas son desplazadas por el flujo de agua aumentando su velocidad.

Los contornos de velocidad en los ejes YZ sólo nos indican la disposición del fluido en la parte central del módulo. Una vez más, las bajas velocidades cerca de las paredes del reactor insinúan la presencia de zonas muertas.

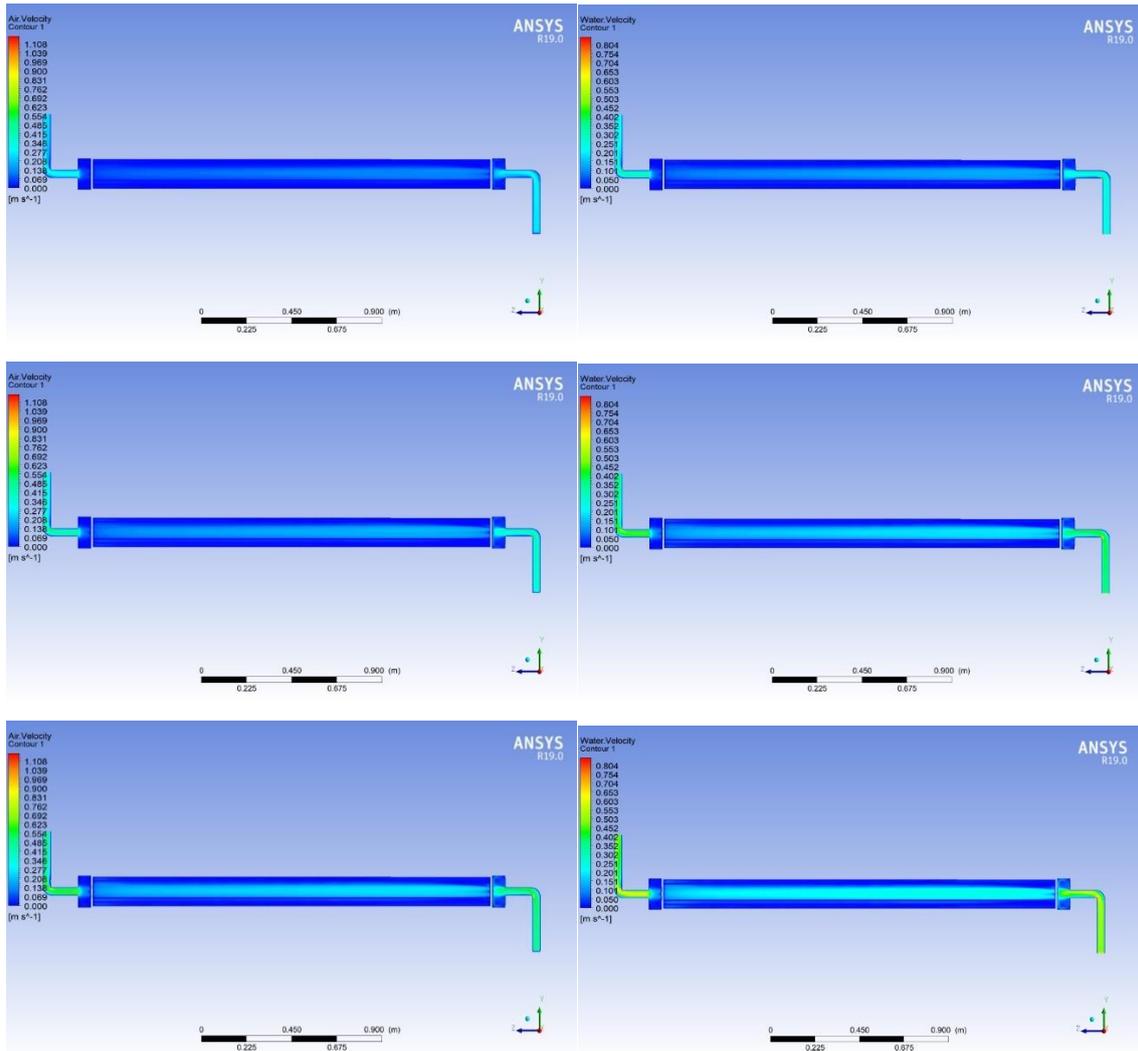


Figura 54. Contornos de velocidad de aire (izquierda) y agua (derecha) para la Prueba 2 en el plano YZ

b) Contornos de fracción de volumen

Los contornos de fracción de volumen representados en la Figura 55 se compararon para ambas fases y en cada simulación. A pesar de que no es notable el cambio de las fracciones de volumen de aire y de agua en las simulaciones S1 y S6, es posible advertir que la fracción de volumen de aire disminuye al ir incrementando el flujo de agua. También se puede constatar que la fracción de volumen de agua sostiene el comportamiento inverso a la fracción de volumen de aire, incrementando su valor al ir aumentando el flujo de agua.

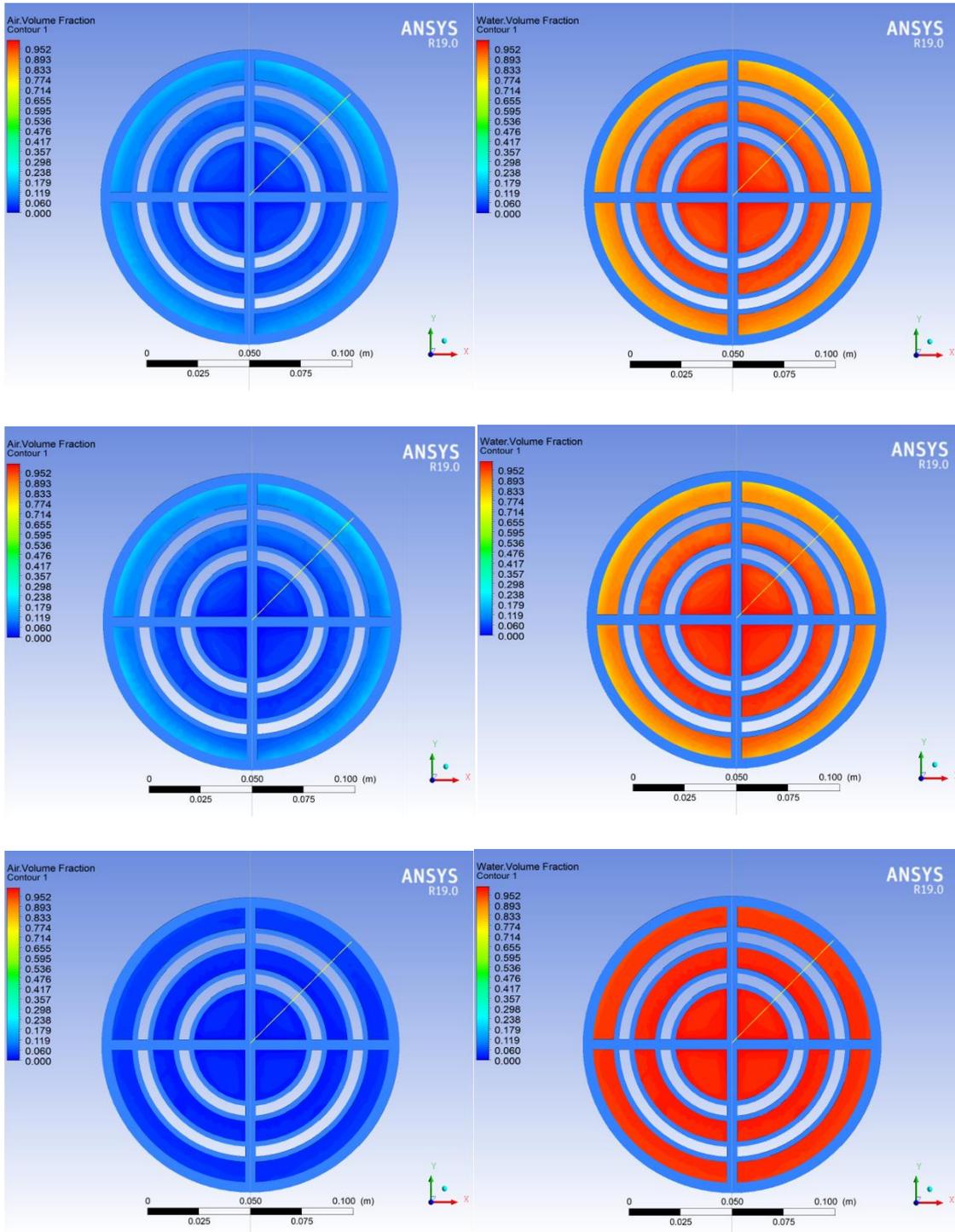


Figura 55. Contornos de fracción de volumen de aire (izquierda) y de fracción de volumen de agua (derecha) para la Prueba 2.

Es posible que no se aprecien cambios en las primeras dos simulaciones debido a la gran cantidad de agua en el flujo de entrada. De esa manera, la fracción de volumen de aire es mínima hasta casi desaparecer y la fracción de volumen de agua aumenta hasta ser la fase predominante dentro del reactor.

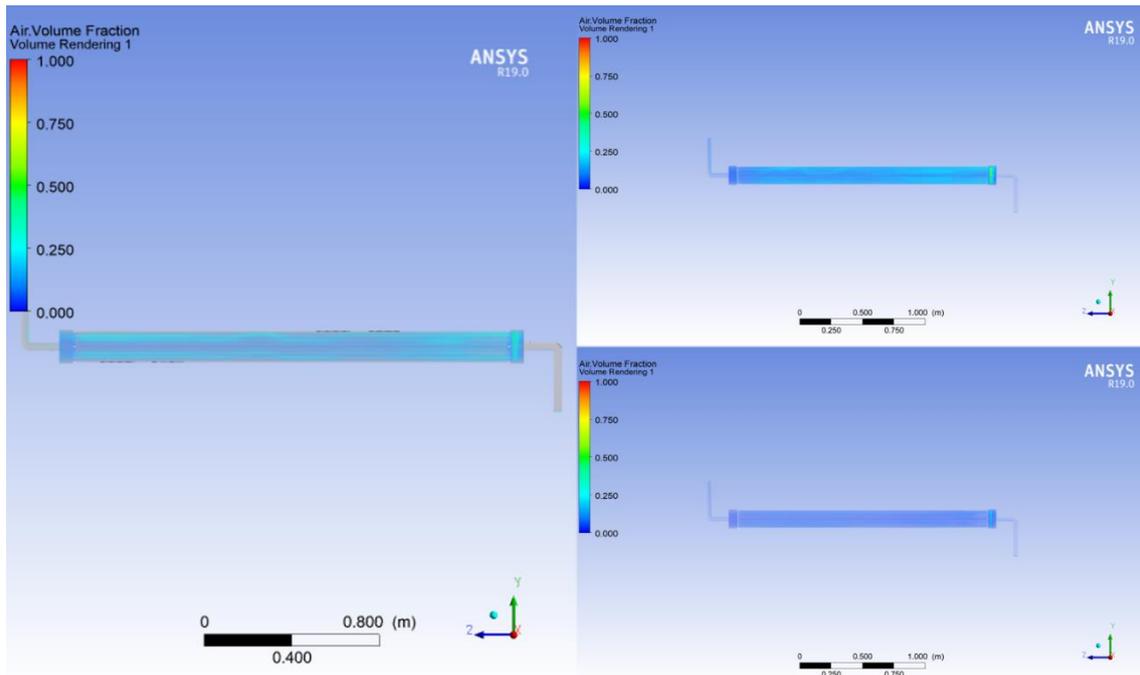


Figura 56. Contornos de Fracción de volumen de aire en el plano YZ

Los contornos en el plano YZ de la Figura 56 muestran la disminución de la fracción de volumen de aire al incrementar el flujo entrada de agua. Al igual que la Prueba 1, se observa mayor concentración de burbujas en los reductores de entrada.

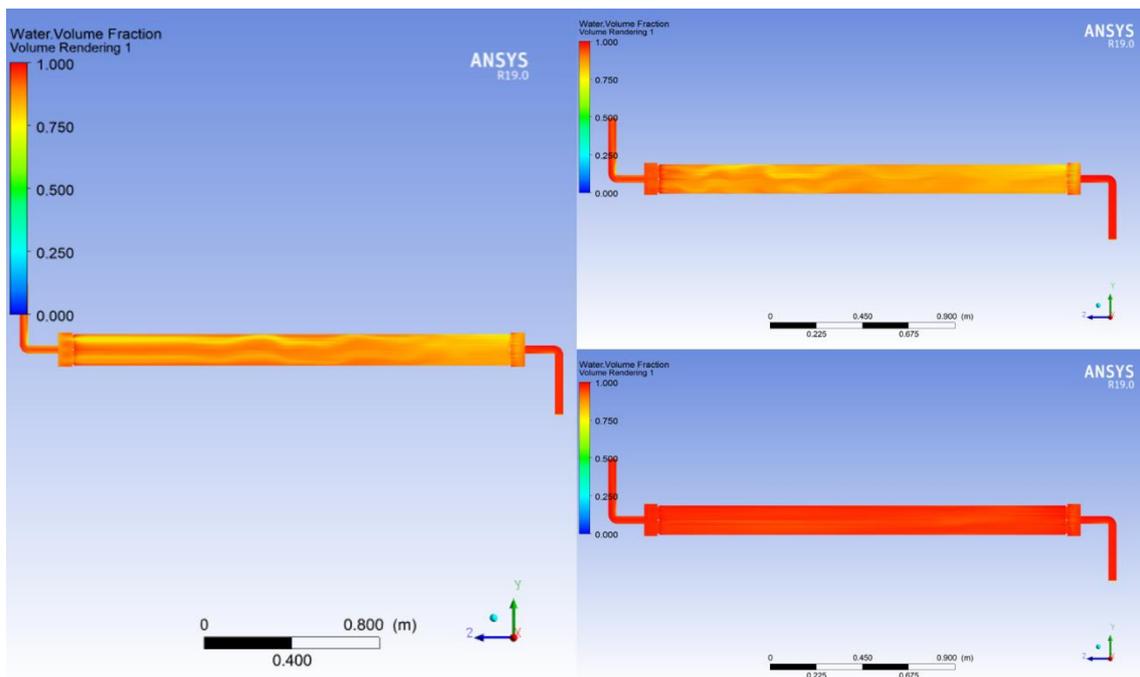


Figura 57. Contornos de fracción de volumen de agua en el eje YZ

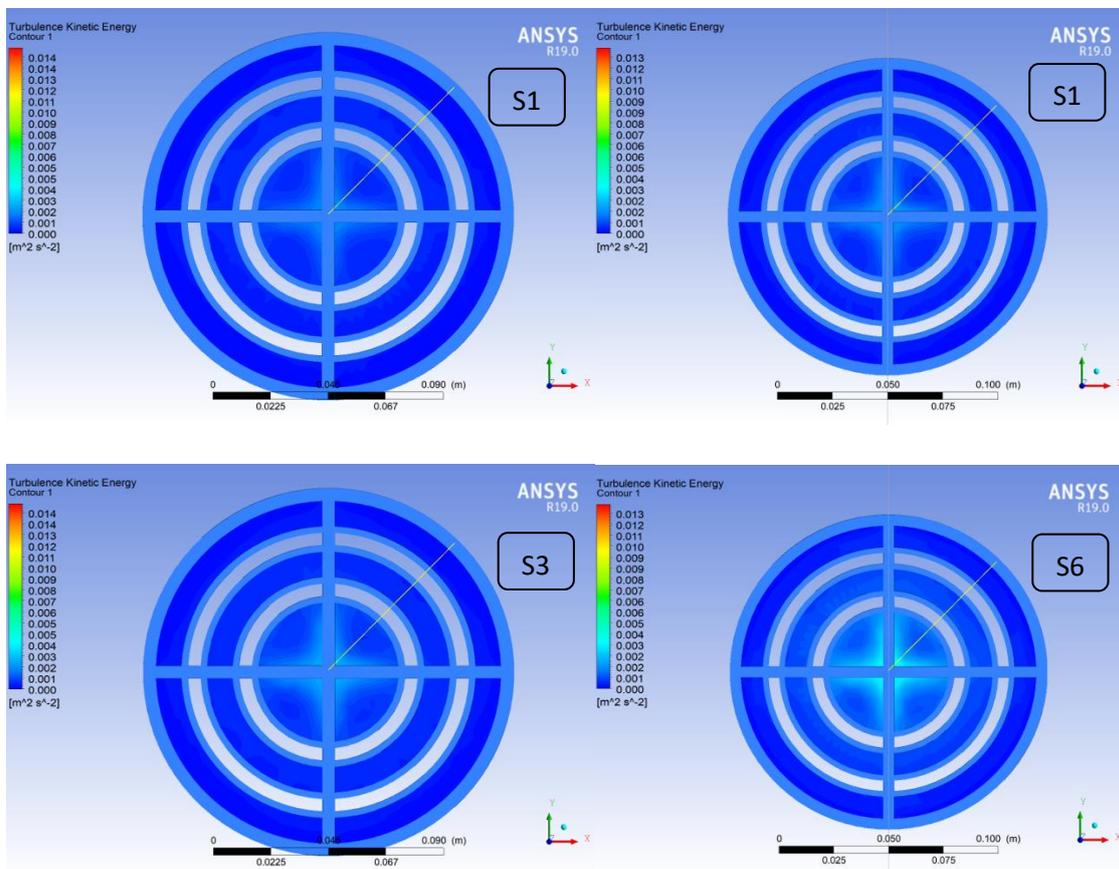


Para la fracción de volumen de agua, los contornos en el eje YZ revelan semejanza en S1 y S6, mientras que en S7 el reactor se encuentra completamente dominado por la fase primaria.

3. Turbulencia

La presencia de flujos turbulentos es de gran importancia debido a que la turbulencia es la característica principal que nos habla de la homogeneidad de ambas fases dentro del reactor. Recordando que el reactor biológico cuenta con microorganismos aeróbicos, es relevante asegurarse que exista el oxígeno disuelto necesario para la alimentación de la biomasa.

De acuerdo con la Figura 58, la turbulencia cinética se presenta solo hasta el aumento del flujo de aire de entrada (S5) para la Prueba 1 y al aumentar el flujo de entrada de agua para la Prueba 2 (S6). Mientras que, para ambas pruebas la turbulencia, se concentra en la parte central del reactor. Esto puede explicarse debido a la consideración de efectos viscosos, los cuales afectan el movimiento en la proximidad de las paredes (Lopez-Zamora & Muñoz-Cobo, 2004).



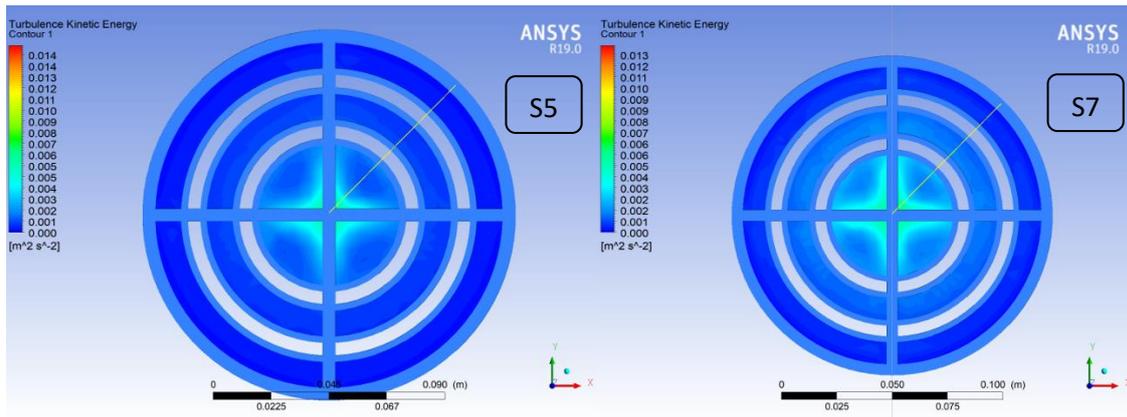


Figura 58. Contornos de turbulencia para la Prueba 1 (izquierda) y para la Prueba 2 (derecha).

Al compararse ambas pruebas, es evidente recalcar que la turbulencia se distribuye mejor en al incrementar el flujo de agua en la Prueba 2 y, además, es más intensa que al incrementar el flujo de entrada de aire. Para una mejor visualización de los resultados, se presentan los gráficos XY de turbulencia sobre la línea dibujada para ambas pruebas.

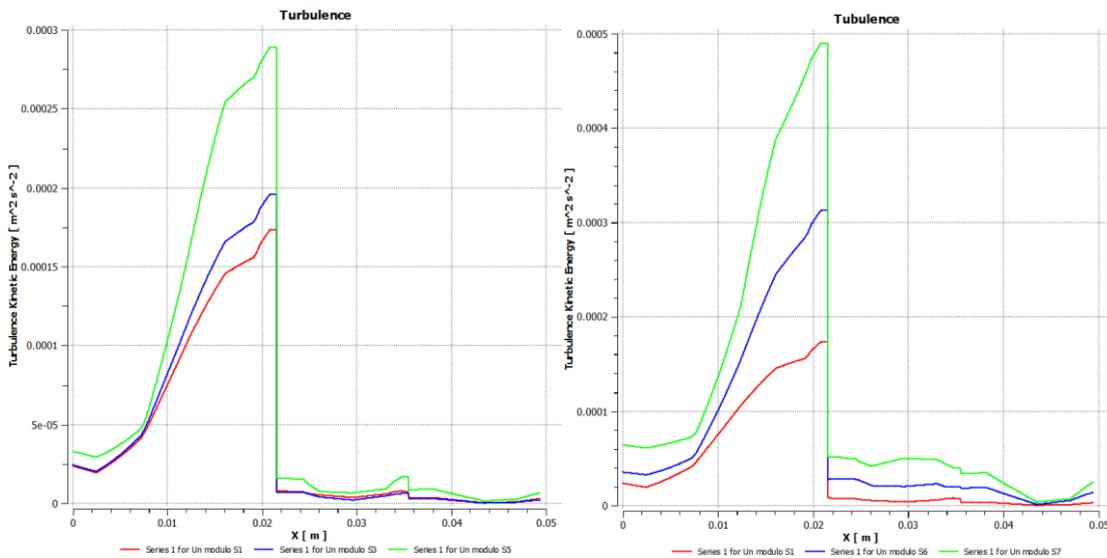


Figura 59. Gráfico de Turbulencia vs Distancia radial para Prueba 1 y Prueba 2, respectivamente.

El valor de la turbulencia cinética es considerable en la parte central del módulo del reactor, mientras que al acercarse a las paredes del reactor el valor se vuelve casi nulo. El valor de la turbulencia aumenta al aumentar el flujo de entrada de aire y de agua; además, se puede corroborar que el valor de la turbulencia es mayor al incrementar el flujo de entrada de agua.



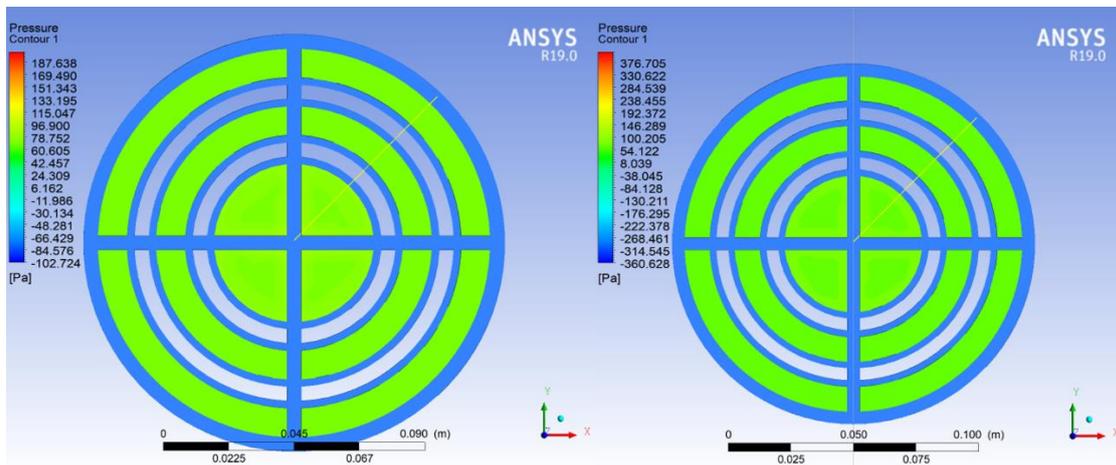
Estos resultados podrían explicar el aumento de la velocidad de aire para la Prueba 2, debido que la alta turbulencia en el flujo de agua proporcionaría impulso sobre las burbujas generando una velocidad extra a la velocidad de entrada de aire.

4. Caída de Presión

La pérdida de carga en tuberías es la pérdida de presión de un fluido al producirse entre las partículas del fluido y las paredes del conductor, y por los obstáculos en la conducción. La modificación del estado inicial de energía de un flujo por la tubería es una pérdida de energía

Al dimensionar y calcular instalaciones hidráulicas es necesario considerar la resistencia mecánica, las pérdidas de carga y el presupuesto. Al reducir las pérdidas de carga, se disminuye la pérdida de energía y por ende el costo energético.

Los contornos de las pruebas 1 y 2 para el plano XY nos indican el aumento de la presión al incrementar tanto el flujo de agua como el del aire; mientras que en la Prueba 2, cuando se varía el flujo de agua, la presión es aún mayor que en la Prueba 1.



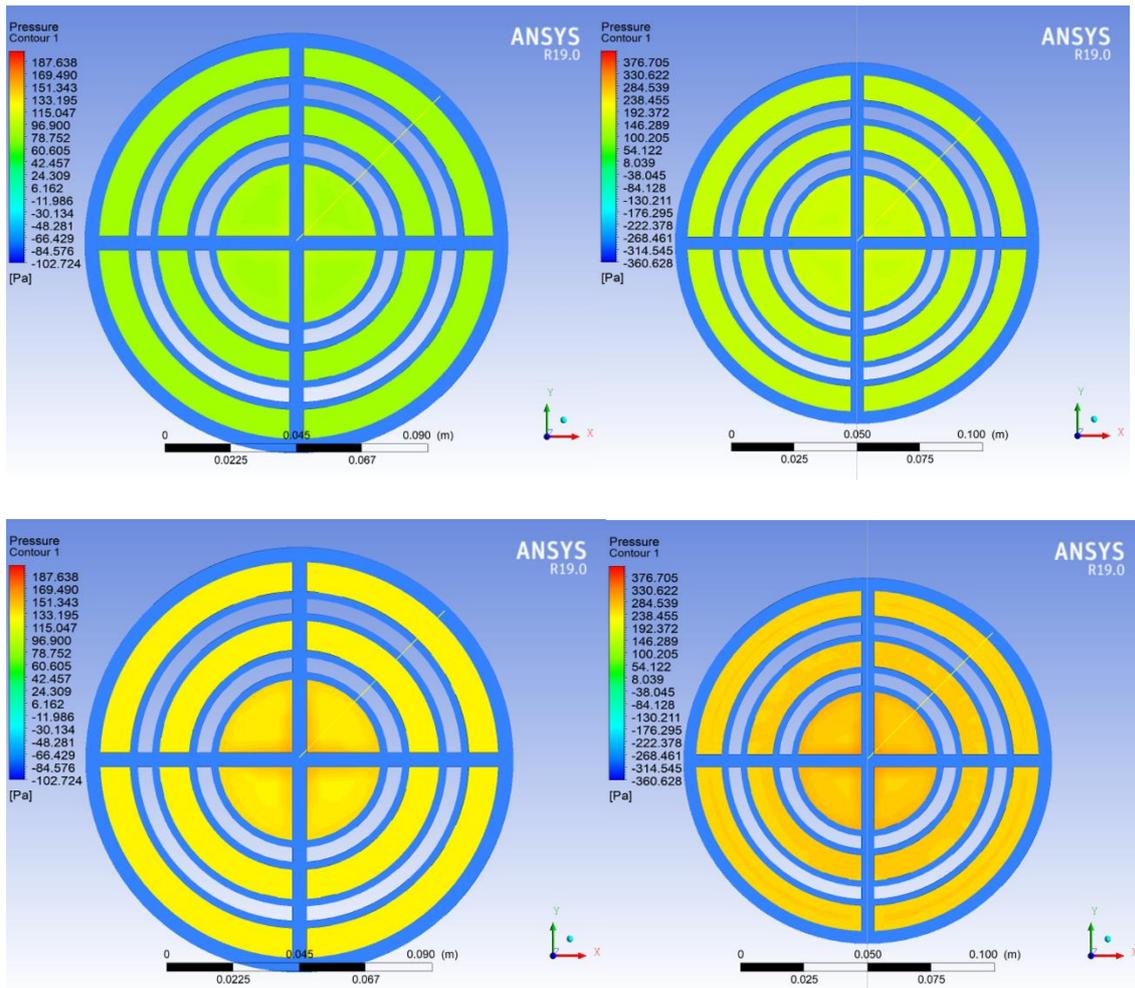


Figura 60. Contornos de Presión para Prueba 1 (izquierda) y Prueba 2 (derecha).

De manera gráfica se puede comparar el valor de la presión radial del centro del módulo hacia la pared del reactor, con los datos obtenidos de la línea dibujada.

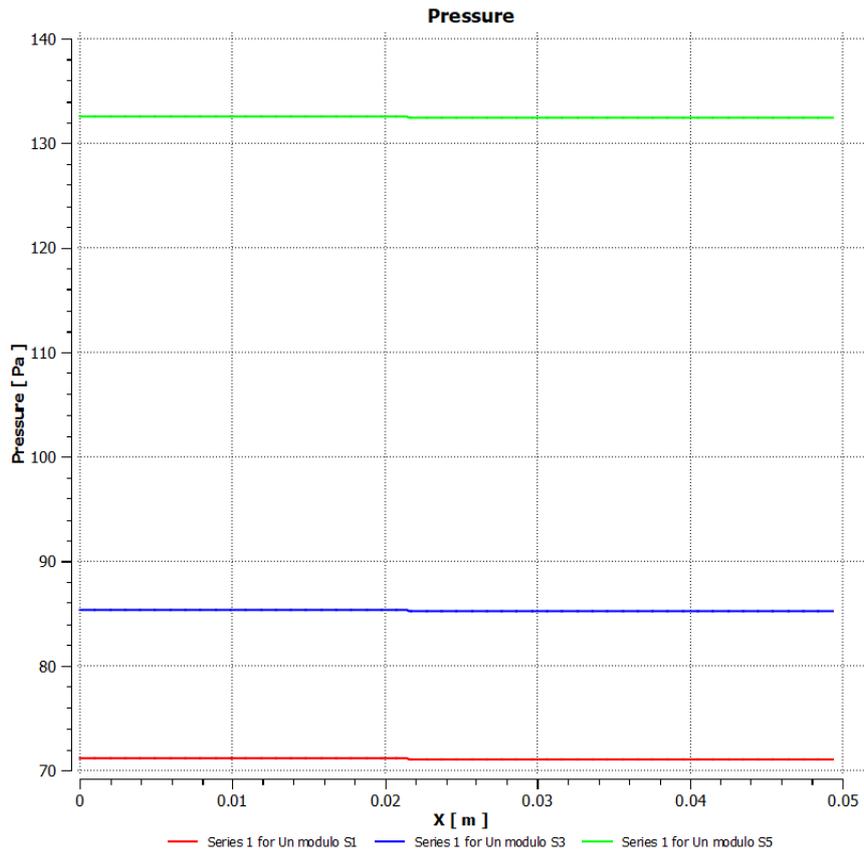


Figura 61. Gráfico Presión vs Distancia radial para la Prueba 1

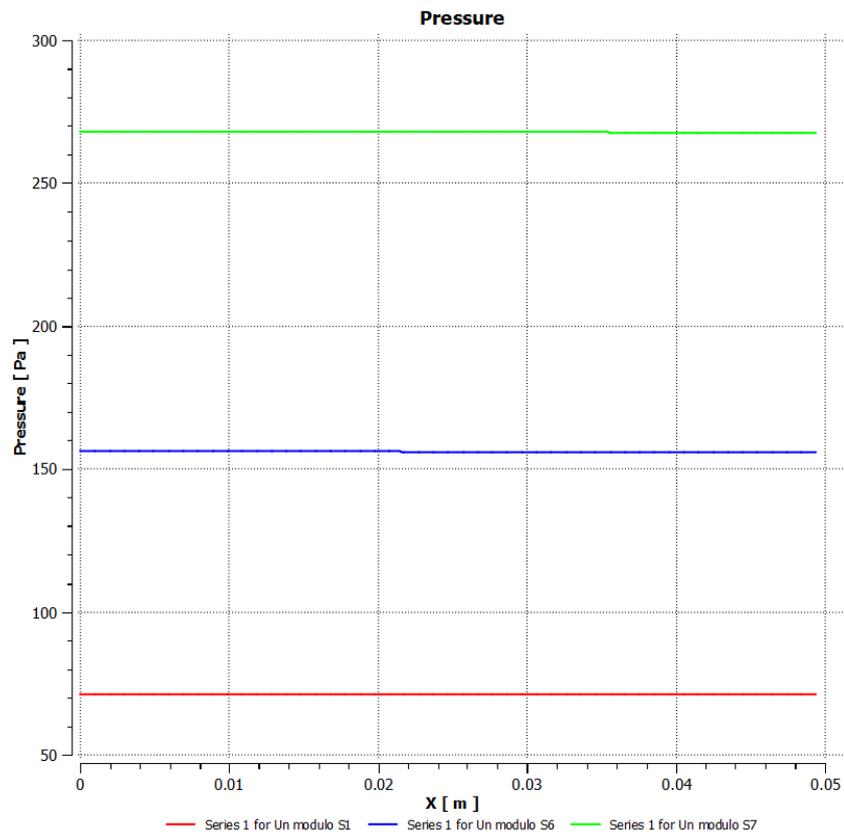


Figura 62. Gráfico Presión vs Distancia radial para la Prueba 2.



De acuerdo con las gráficas de las Figuras 61 y 62, el valor de la presión parece permanecer constante a lo largo de la línea dibujada. No obstante, es posible afirmar que las presiones de cada simulación de la Prueba 1 son menores a las presiones de la Prueba 2, donde la presión máxima alcanzó una cantidad de 275 Pa aproximadamente.

La Figura 63 muestra los contornos observados desde el plano YZ, donde se percibe un comportamiento similar a los contornos del plano XY: la presión aumenta al incrementar los flujos de entrada de aire y agua. También se distingue una mayor presión en el codo de entrada y una disminución de la presión en el codo a la salida.

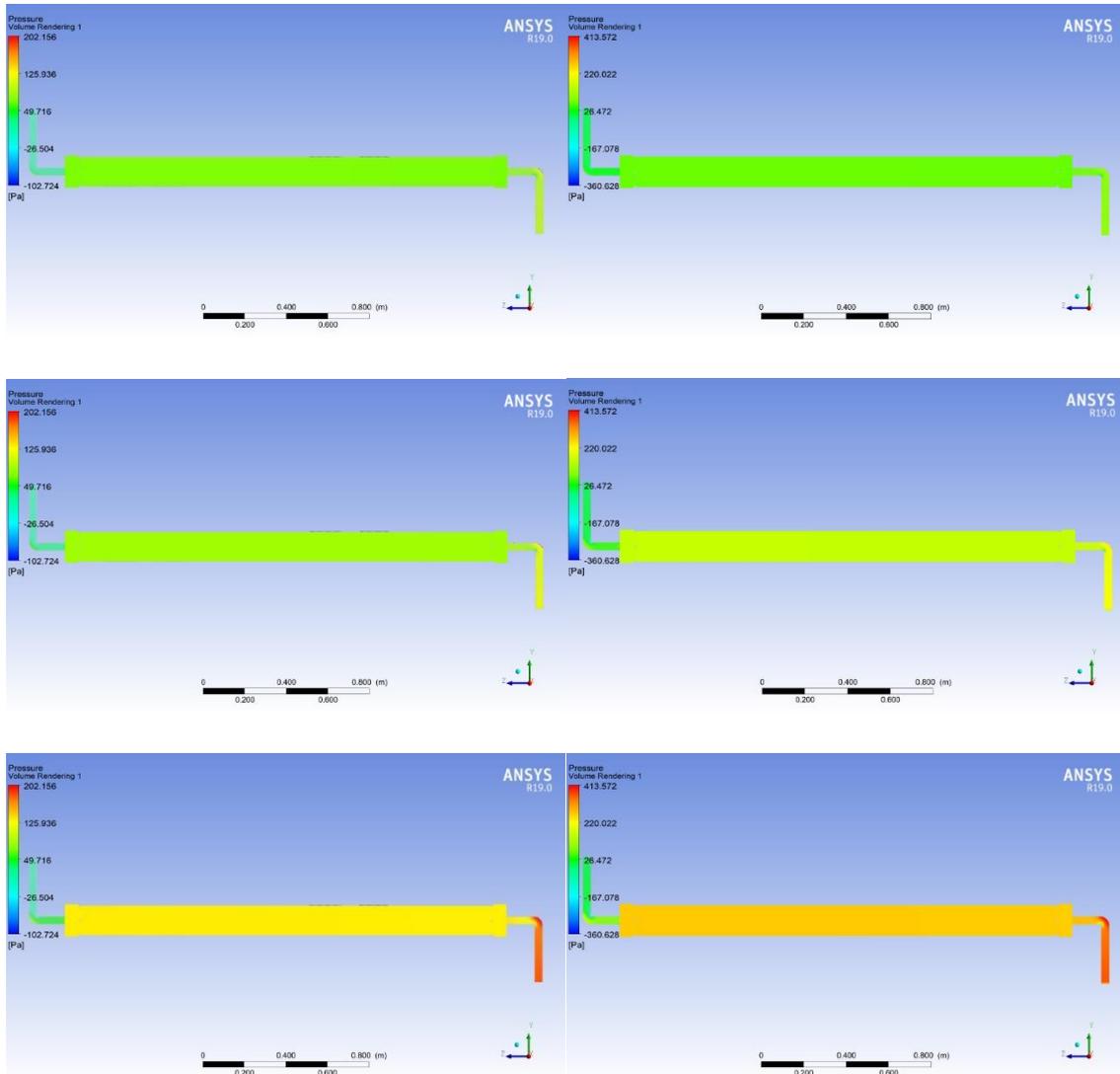


Figura 63. Contornos de presión en el plano YZ para la Prueba 1 y Prueba 2, respectivamente.



Una vez que se obtuvieron los contornos de presión en el plano YZ para cada una de las simulaciones obtenidas y con ayuda de la herramienta *Probe* de ANSYS DCF Post, fue posible calcular la caída de presión valorando un punto a la entrada y a la salida del reactor. Al tener estos valores se calculó la diferencia y para así conseguir el valor de la caída de presión.

Un ejemplo de esto se presenta a continuación:

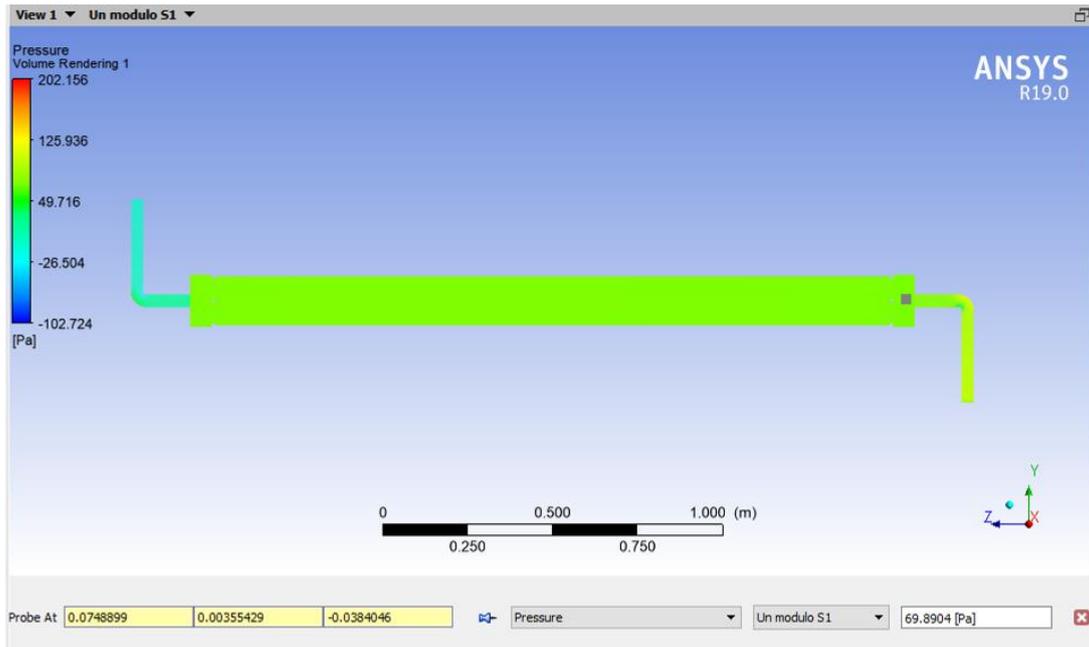


Figura 64. Localización de la presión de entrada

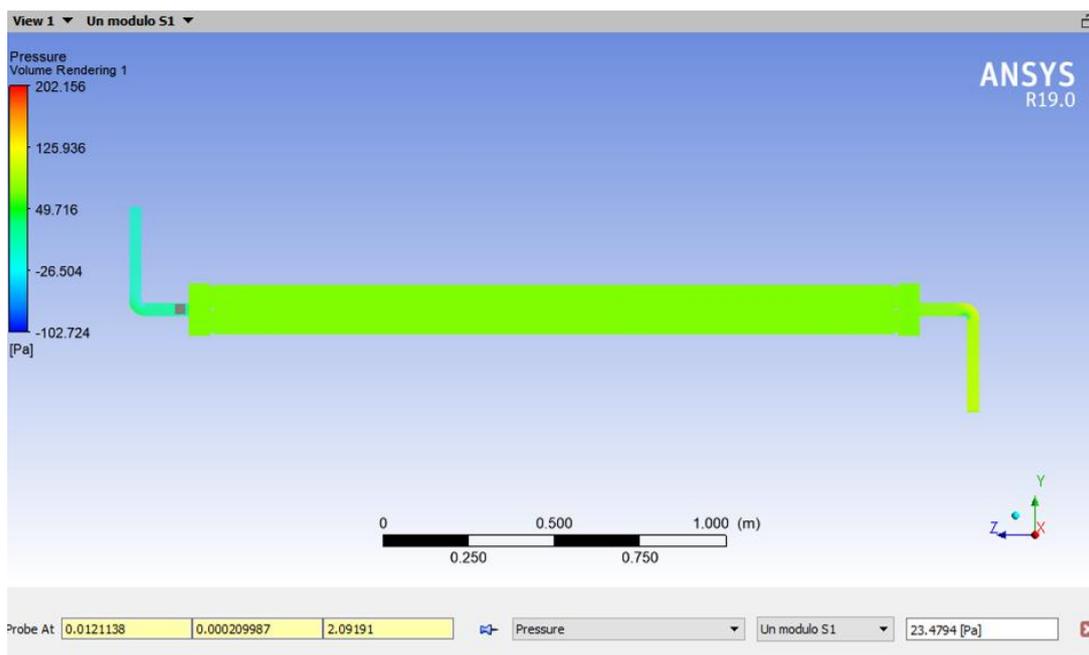


Figura 65. Localización de la presión de salida



El punto donde se tomó la presión está representado por el cuadro gris, la ubicación exacta se puede apreciar en la esquina inferior izquierda para los ejes x, y, y z. El valor de la presión se localiza en la esquina inferior derecha.

Recapitulando los valores de la presión para cada simulación, las caídas de presión están dadas de acuerdo con la Tabla 16.

Tabla 17.
Caída de presión

| Prueba | Simulación | Presión | | ΔP |
|--------|------------|------------|------------|------------|
| | | P_0 [Pa] | P_1 [Pa] | [Pa] |
| 1 | S1 | 69.8904 | 23.4794 | 46.411 |
| | S3 | 83.9477 | 28.2605 | 55.687 |
| | S5 | 130.697 | 46.8331 | 83.864 |
| 2 | S1 | 69.8904 | 23.4794 | 46.411 |
| | S6 | 154.721 | 47.1403 | 107.581 |
| | S7 | 265.961 | 84.4128 | 181.548 |

Tal como se esperaba, la caída de presión aumenta al tener un mayor flujo volumétrico por lo que es recomendable trabajar manteniendo constante el flujo de entrada de agua y variar los flujos de entrada de aire, como se demostró en la Prueba 1. De esa manera, las pérdidas de carga serán menores.



5. Resumen de Resultados

Tabla 18.
Resumen de resultados

| Prueba | Resultado |
|---|---|
| 1. Variación en el flujo de entrada de aire | <p>Contornos de Velocidad: Se observa un aumento en la velocidad del aire (0.48m/s máx.) comparada con la velocidad del agua (0.31 m/s máx.). La velocidad incrementa de manera proporcional al aumentar el flujo de entrada.</p> <p>Los contornos de velocidad a lo largo del reactor indican zonas muertas en las paredes del módulo</p> <p>Contornos de Fracción de Volumen: Se muestra una mejor distribución de burbujas al incrementar la velocidad tanto para la vista en XY como en YZ. La S5 presenta homogeneidad en el centro del reactor.</p> |
| 2. Variación en el flujo de entrada de agua | <p>Contornos de Velocidad: Al igual que la Prueba 1, la velocidad aumenta de manera proporcional, pero favoreciendo a la fase secundaria. La velocidad máxima para la velocidad del aire es 0.81m/s en contraste con la velocidad máxima del agua (0.48m/s)</p> <p>Contornos de Fracción de Volumen: Al incrementar el flujo de entrada de agua también incrementa su fracción de volumen, pero afecta negativamente al disminuir la fracción de aire hasta desaparecer.</p> |
| 3. Turbulencia | Al comparar los contornos de turbulencia para las 5 simulaciones se observa una mejor distribución e intensidad en las simulaciones que incluían la variación del flujo de entrada de agua. Para la Prueba 1 la turbulencia se hizo presente en la S5 mientras que para la P2 se observó desde la S6. |
| 4. Caída de presión | De manera proporcional aumenta la presión al aumentar el flujo de entrada, siendo predominante la fase primaria. Se realizó el cálculo de la caída de presión teniendo valores favorables en las simulaciones de la Prueba 1 al tener menores valores de pérdidas de carga. |



CAPÍTULO V

CONCLUSIONES

La evidencia presentada a lo largo de esta tesis, mediante la simulación en Dinámica Computacional de Fluidos aplicada desde el software ANSYS Fluent, demuestra que fue posible cumplir con el objetivo de desarrollar el comportamiento hidrodinámico de un Reactor Biológico Tubular y describir su funcionamiento para cumplir con su propósito de tratar aguas residuales.

A pesar de que la geometría del reactor no fue completamente similar al modelo real, fue necesario realizar los cambios pertinentes para proporcionar una buena calidad de la malla, pues el mallado es parte fundamental de la resolución de un problema de flujo bifásico.

Sin embargo, la disposición del soporte interno del reactor, así como del acomodo de la fibra, fue considerada para su aplicación en el Reactor Biológico Tubular en su proceso de construcción y será desarrollado a futuro en un proyecto de investigación de Tesis.

Se obtuvieron los contornos necesarios para describir el comportamiento del flujo bifásico al variar el flujo de entrada de aire y el flujo de entrada de agua, cumpliendo con los objetivos particulares establecidos:

- Al variar el flujo de entrada de aire fue posible observar una mayor homogenización de las fases al ir incrementando la velocidad
- Al variar el flujo de entrada de agua la fase primaria dominó la mayor parte del fluido.
- El aumento de la velocidad del agua originó un incremento de velocidad de la fase secundaria.

La disposición de la fracción de volumen para ambas fases se concentra con mayor intensidad en el centro del módulo del reactor distribuyéndose de manera radial hacia las paredes del reactor e incrementa, naturalmente, al aumentar el flujo de aire. También fue posible visualizar las posibles zonas muertas generadas en las cercanías de las paredes del reactor.



Al igual que los contornos de velocidad y de fracción de volumen, la turbulencia presentó el mismo comportamiento al generarse en mayor cantidad en las zonas centrales del reactor. Se podría deducir un régimen similar al flujo tipo anular, donde la fase gaseosa se localiza en el centro de la tubería y la fase líquida a lo largo de las paredes, aunque la diferencia estriba en la presencia de ambas fases en menor o mayor volumen dependiendo de su ubicación.

Por otra parte, la turbulencia permitió inferir sobre el incremento de la velocidad del aire al aumentar el flujo de agua.

En cuanto a los datos generados para la caída de presión, se concluye que las simulaciones con menor caída de presión pertenecían a la Prueba 1, donde se mantuvo constante el flujo volumétrico de agua de entrada. Aunado a esto, la homogenización de las fases representadas para esta prueba sugiere la aplicación de estas velocidades en el Reactor Biológico Tubular.

Finalmente, aunque DCF es una gran herramienta para estudiar específicamente problemas aplicados al flujo de fluidos, como se realizó en el estudio de esta tesis, los resultados son tan sólo una aproximación cualitativa de lo que ocurre dentro del sistema estudiado. Aunque numerosos estudios han logrado documentar la veracidad de la resolución de problemas en Dinámica Computacional de Fluidos, existe una posibilidad de fallo con respecto a las variables que intervienen en la precisión de la simulación; como lo son: la geometría, la calidad de la malla, la elección de modelos de viscosidad y multifásico, así como de los métodos de resolución seleccionados. Sin embargo, las simulaciones generadas en ANSYS Fluent servirán de guía para la futura operación del Reactor Biológico Tubular.



RECOMENDACIONES

En trabajos posteriores se desarrollará la construcción y operación del Reactor Biológico Tubular escalado, así como la adaptación de los soportes internos de la fibra dentro de los módulos. Será necesario comparar los datos generados mediante DCF en la realización de esta tesis contra los datos experimentados producidos en la operación del RBT.

Para evaluar la fidelidad de los resultados obtenidos, se recomienda hacer un estudio de independencia de malla para relacionar el número de nodos y la calidad de la malla generada con respecto a los resultados adquiridos en la que los residuales alcanzan la convergencia. También se sugiere comprobar si al añadir fuerzas interfaciales al flujo bifásico influyen de manera simbólica a la solución. Hay que recordar que para ello es sumamente importante la posesión de una computadora con alto rendimiento de procesamiento y con una gran capacidad de memoria RAM debido a la alta exigencia que advierte ANSYS para su correcto funcionamiento.



REFERENCIAS

1. Anderson, J. D. (1995). *Computational Fluid Dynamics: basics with applications*. Singapore: McGraw-Hill.
2. ANSYS Inc. (2013). *ANSYS Fluent User's Guide Release 15.0*. U.S.A: SAS IP, Inc.
3. ANSYS Inc. (2015). *Modeling Bubble Columns-Best Practices*. ANSYS.
4. ANSYS, I. (November de 2013). *ANSYS Fluent Theory Guide*. Obtenido de ANSYS: <http://www.ansys.com>
5. Aymerich Martínez, A. D. (2016). *Construcción de un sistema piloto para el tratamiento de aguas residuales mediante un proceso aerobio de biopelícula*. Ciudad de México: Universidad Nacional Autónoma de México.
6. Bakker, A. (2008). *Lecture 14 - Multifase Flows Applied Computational Fluid Dynamics*. Recuperado el 14 de Mayo de 2019, de Bakker.org: <http://www.bakker.org/dartmouth06/engs150/14-multi.pdf>
7. Bakker, A., & Marshall, E. (2004). *Computational Fluid Dynamics. Encyclopedia of Chemical Processing*. (S. Lee, Ed.) New York: Marcel Dekker Inc.
8. Bhaskaran, R. (11 de Julio de 2016). *A hand on Introduction to Engineering Simulations*. Obtenido de Cornell University: <https://courses.edx.org/courses/course-v1:CornellX+ENGR2000X+1T2018/course/>
9. Blazek, J. (2015). *Computational Fluid Dynamics: Principles and applications* (Tercera ed.). Oxford UK: Butterworth-Heinemann.
10. Brennen, C. E. (2005). *Fundamentals of Multifase Flows*. California: Pasadena: Cambridge University Press.
11. Chan, Y., Chong, M., Law, C., & Hassell, D. (2009). A review on anaerobic-aerobic treatment of industrial and municipal wastewater. *Chemical Engineering Journal*, 155, 1-18. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894709004902>
12. Chung, T. J. (2002). *Computational fluid dynamics*. Cambridge University Press.
13. Córdoba Fernández, N. (2016). *Simulación CFD en Ansys Fluent para analizar el patrón de flujo de los gases de combustión dentro de una chimenea y así determinar la ubicación del puerto de muestreo*. México, D.F: Universidad Nacional Autónoma de México.
14. Costerton, J., Stewart, P., & Greenberg, E. (1999). Bacterial Biofilms: A Common Cause of Persistent Infections. *Science*, 284.
15. Denn, M., & Russell, T. (1980). *Process Fluid Mechanics*. Englewood Cliffs, London: Prentice-Hall .
16. Durán Moreno, A., & García González, S. A. (2017). *Biological tubular reactor, new technology for small wastewater treatment plants*. Nantes, Francia: International IWA conference on sustainable solutions for small water and wastewater treatment systems (S2small2017).



17. Duscha, H., Hesler, M., & Sparrel, C. (2012). *Computational Fluid Dynamics Analysis of Two-Phase Flow in a Packed Bed Reactor*. A Major Qualifying Project Report of Bachelor of Science, Worcester Polytechnic Institute (WPI), Worcester, EEUU. Obtenido de https://web.wpi.edu/Pubs/E-project/Available/E-project-042512-152923/unrestricted/Computational_Fluid_Dynamics_Analysis_of_Two-Phase_Flow_in_a_Packed_Bed_Reactor.pdf
18. Eguia Lopez, E. (1991). *Desarrollo de la biopelícula en medio soporte permeable*. Santander: Universidad de Cantabria. Tesis Doctoral.
19. Enriquez González, E. (2016). *Simulación de la hidrodinámica de la operación de un reactor bifásico de biopelícula a flujo bifásico usando técnicas de CFD*. Reporte Estancia Académica, Universidad Nacional Autónoma de México, Unidad de Proyectos y de Investigación en Ingeniería Ambiental (UPIIA), México DF.
20. EPA. (2000). Folleto informativo de sistemas descentralizados. Tratamiento aeróbico. *National service center for environmental publications (NSCEP). United States environmental protection agency*.
21. Ferziger, J. H., & Peric, M. (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics* (Tercera ed.). Germany: Springer.
22. G. Mendez, C., Nigro, N., & Cardona, A. (2005). Drag and non-drag force influences in numerical simulations of metallurgical ladles. *Journal of Material Processing Technology*, 296-305.
23. García Gonzalez, S. A. (2018). *Estudio de un reactor biológico de biopelícula fija a escala laboratorio con el uso de materiales plásticos fibrosos no tejidos para la fijación de la biomasa*. Ciudad de México: UNAM Facultad de Química. Tesis de Doctorado.
24. Garzón Sánchez, Santiago Humberto. (2014). *Modelación en CFD de un tramo del río Arzobispo (Bogotá D.C)*. Bogotá, Colombia: Pontificia Universidad Javeriana.
25. Heikkinen, R. (2017). *Multiphase Flow in Industrial Scale Draft Tube Reactor*. Lappeenranta, Finlandia: Lappeenranta University of Technology LUT Master's Thesis.
26. Hernández Chover, V., Bellver Domingo, Á., & Hernández Sancho, F. (2018). Efficiency of wastewater treatment facilities: The influence of scale economies. *Journal of Environmental Management*, 77-89.
27. Jodeck Osses, Y. A. (2018). *Modelación computacional de la distribución de temperaturas al interior de un horno túnel*. Chile: Universidad Tecnica Federico Santa Maria TESIS. Obtenido de <https://repositorio.usm.cl/bitstream/handle/11673/40827/3560900257677UTFSM.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
28. Kilonzo, P., Margaritis, A., & Bergougou, M. (January de 2010). Hydrodynamic characteristics in an inverse internal-loop airlift-driven fibrous-bed bioreactor. *Chemical Engineering Science*.
29. Lapo, B., Muñoz, M., Romero, H., Pozo, M., & Ayala, H. (2014). PET y PP usados como medios de crecimiento de biopelícula fija aplicada al tratamiento aerobio de aguas residuales domésticas. *XX Congreso Brasileiro de Engenharia Química (COBEQ)*.



30. Lee, K., Kim, H., KuK, J., Chung, J., Park, S., & Kwon, E. (9 de Enero de 2019). Micro-bubble flow simulation of the dissolved air flotation process for water treatment using Computational Fluid Dynamics. *Environmental Pollution*. Obtenido de <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2019.01.011>
31. López Vázquez, C., Buitrón Méndez, G., Garcia, H., & Cervantes Carrillo, F. (2017). *Tratamiento biológico de aguas residuales: principios, modelación y diseño*. London: IWA Publishing.
32. Lopez-Zamora , L., & Muñoz-Cobo, J. (2004). Estudio de la turbulencia a través del modelo k-épsilon, mediante un código tridimensional con esquemas de alto orden. *Información Tecnológica*, 15(2), 25-28. Obtenido de <https://dx.doi.org/10.4067/S0718-07642004000200005>
33. Marsilli, A. (Diciembre de 2005). *Tratamiento de aguas residuales*. Recuperado el Abril de 2019, de Tierramor.org: <http://www.tierramor.org/Articulos/tratagua.htm>
34. Mata Cárdenas, G. F. (2017). *Aplicación de la dinámica de fluidos computacional (CFD) y el modelado mecánico en el estudio del sistema de bombeo electrocentrífugo sumergido (BEC)*. Ciudad de México: Universidad Nacional Autónoma de México.
35. Metcalf&Eddy. (1995). *Ingeniería de las aguas residuales: tratamiento, vertido y reutilización* (Tercera ed., Vol. I). Aravaca, Madrid: McGrawHill.
36. Olatunde, G., & Fasina, O. (Agosto de 2019). Influence of drag equations on computational fluid dynamic modeling of fluidization behavior of loblolly pine wood grinds. *Renewable Energy*, 139, 651-660. Obtenido de <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0960148119302381#!>
37. Ozen Engineering, Inc. (13 de November de 2014). *Meshing Workshop*. Obtenido de Ozen Engineering: https://www.ozeninc.com/wp-content/uploads/2014/11/MESHING_WORKSHOP_2014.pdf
38. Patel, G. (2010). *CFD Simulation of two-phase and three phase flows in internal-loop airlift reactors*. Lappeenranta, Finlandia: Lappeenranta University of Technology.
39. Peña-Monferrer, C., Passalacqua, A., Chiva, S., & Muñoz-Cobo, J. (2016). CFD modelling and validation of upward bubbly flow in an adiabatic vertical pipe using the quadrature method of moments. *Nuclear Engineering and Design*(301), 320-332.
40. Pletcher, R. H., Tannehill, J. C., & Anderson, D. (2012). *Computational fluid mechanics and heat transfer* (Tercera ed.). USA: CRC Press.
41. Riera-Ortiz, J., Gutiérrez, M., Castañeda, P., De Abreu, S., Zepperieri, S., & Derjani-Bayeh, S. (Diciembre de 2015). Estudio de la influencia de las fuerzas interfaciales en la hidrodinámica de un lecho borboteo aire-agua usando CFD. *Revista de la Facultad de Ingeniería U.C.V*, 30(1). Obtenido de <https://www.researchgate.net/publication/283723437>
42. Sternmark, E. (2013). *On multiphase flow models in ANSYS CFD software. Master's thesis in applied mechanics*. Göteborg, Sweden: Chalmers University of Technology.
43. Tu, J., Yeoh, G. H., & Liu, C. (2018). *Computational fluid dynamics: A practical approach* (Tercera ed.). Oxford UK: Butterworth-Heinemann.



-
44. Vazquez Raymundo, M. D. (2019). *Modelado computacional de un fotobiorreactor en modo continuo mediante elemento finito para el crecimiento de una alga usada para generar biobombustible*. Huajuapán de León, Oaxaca: Tesis: Universidad Tecnológica de la Mixteca.
 45. Versteeg, H., & Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*. New York: Pearson Education Limited.
 46. Xamán, J., & Gijón Rivera, M. (2016). *Dinámica de fluidos computacional para ingenieros*. Palibrio.
 47. Xiao, H., Peng, H., & Yang, P. (2011). Performance of a new-type integrated biofilm reactor in treating high concentration organic wastewater. *Procedia Environmental Sciences* , 674-679.
 48. Zhang, Z., & Chen, Q. (August de 2007). Comparison of the eulerian and lagrangian methods for predicting particle transport in enclosed spaces. *Atmospheric Environment*, 41, 5236-5248.