

VALIDACIÓN DE ENSAYO DE TRAZADORES A PARTIR DE UN MODELO CFD
PARA UN REACTOR ASTBR A ESCALA LABORATORIO

SOFIA GONZÁLEZ ARGOTY
JUAN NICOLÁS RUIZ ESPINOSA

Proyecto integral de grado para optar el título de:

INGENIERO QUÍMICO

Director:

Héctor Javier Luna Wandurraga

Codirector:

Luis Alberto Figueroa

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA

FACULTAD DE INGENIERÍAS

PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA

BOGOTÁ, D.C.

2021

Nota de aceptación.

Presidente del jurado.

Jurado.

Jurado.

Bogotá, Junio de 2021.

DIRECTIVOS DE LA UNIVERSIDAD

Presidente Institucional y Rector del Claustro.

Dr. Mario Posada García-Peña.

Consejero Institucional.

Dr. Luis Jaime Posada García-Peña.

Vicerrectora Académica y de Investigaciones.

Dra. Alexandra Mejía Guzmán.

Vicerrector Administrativo y Financiero.

Dr. Ricardo Alfonso Peñaranda Castro.

Secretario General.

Dr. José Luis Macías Rodríguez.

Decano de la Facultad de Ingenierías.

Ing. Julio Cesar Fuentes Arismendi.

Director del Programa de Ingeniería Química.

M. Sc. Nubia Liliana Becerra Ospina.

Dedicado a nuestras familias y a todos aquellos que creyeron en nosotros desde el primer momento.

AGRADECIMIENTOS.

Agradezco principalmente a quienes permitieron que este proyecto se realizará, en primer lugar a mi amiga y compañera de tesis Sofía , con quien adquirimos conjuntamente la fortaleza, perseverancia y disciplina para alcanzar la correcta ejecución de este trabajo de grado, agradezco también a mis tutores Marco Guevara, Héctor Luna y demás personas que nos orientaron durante la realización del mismo, agradezco inmensamente a mis papás, a mi hermana y a mi mejor amiga por todo el amor, apoyo y confianza otorgada durante este ciclo y por estar siempre impulsándome a creer en mí y en mis capacidades, a mis amigos y colegas, Albani, Andrea, Alejandra, Daniela, Daniel, Luis y Fernando, quienes hicieron de mi experiencia universitaria, una de las mejores etapas de mi vida.

A todos los anteriormente mencionados, gracias por estar conmigo y por ayudar a construir a la persona íntegra que soy hoy en día.

Juan Nicolás Ruiz Espinosa.

Agradezco a Dios y la Virgen de las Lajas por brindarme calma y sabiduría durante la elaboración del trabajo, también agradezco a nuestro director Héctor Luna quien siempre nos orientó y apoyo, al igual que Marco Guevara quien nos compartió su amplio conocimiento.

Agradezco inmensamente a mi increíble amigo y compañero de tesis Nicolás, un ser brillante, con quien compartí alegrías y tristezas durante la elaboración de este proyecto, también quiero agradecer a mi familia, especialmente a mis papas, hermanos y Gus por siempre creer en mí y acompañarme en todo lo que me propongo.

Finalmente quiero agradecer a Albani, Andrea, Camila y Daniela quienes fueron mis cómplices universitarias y me llenaron de bonitos recuerdos, también a mis amigas Karen, Natalia y Rodri las cuales me han apoyado y acompañado una vida entera.

Sofía González Argoty.

Las directivas de la Universidad de América, los jurados calificadores y los docentes no son responsables por las ideas y conceptos emitidos en el presente documento. Estos corresponden únicamente a los autores.

TABLA DE CONTENIDO

	pág.
RESUMEN	14
INTRODUCCIÓN	15
OBJETIVOS	17
1. MARCO CONCEPTUAL	18
1.1. Dinámica de fluidos	18
1.2. Fluido	18
1.2.1. <i>Clasificación fluido</i>	18
1.2.2. <i>Clasificación flujo</i>	19
1.3. Hidrodinámica de un reactor	21
1.4. Propiedades del campo de velocidades	22
1.5. Campo de velocidades	22
1.6. Tiempo de residencia (RTD)	22
1.6.1. <i>Ensayo de trazadores</i>	22
1.7. Dinámica de fluidos computacional	24
1.7.1. <i>Geometría</i>	26
1.7.2. <i>Generación de la malla</i>	27
1.7.3. <i>Selección de la física y propiedades de los fluidos</i>	27
1.7.4. <i>Especificación de las condiciones límite</i>	28
1.7.5. <i>Solución numérica – CFD solver</i>	28
1.7.6. <i>Informe de resultados y visualización.</i>	30
1.8. Ecuaciones de gobierno para CFD.	30
1.9. Discretización de las ecuaciones	31
1.9.1. <i>Método de volúmenes finitos (VFM)</i>	31

1.9.2. <i>Pasos para discretizar las ecuaciones mediante VFM</i>	31
1.9.3. <i>Método de elementos finitos</i>	32
1.10. Ubuntu	32
1.10.1. <i>Bash en Ubuntu</i>	33
1.11. OpenFOAM	33
1.11.1. <i>Aplicaciones importantes de OpenFOAM</i>	33
1.11.2. <i>Operación y manipulación de OpenFOAM</i>	34
1.11.3. <i>ParaView / interfaz gráfica del usuario (GUI)</i>	35
1.12. Salomé Meca	36
2. METODOLOGÍA	38
2.1. Definición del modelo CFD para el reactor ASTBR a escala laboratorio	38
2.1.1. <i>Revisión bibliográfica de validación de test de trazadores mediante la metodología CFD</i>	38
2.1.2. <i>Revisión bibliográfica de trabajos desarrollados por la UAN con reactores ASTBR</i>	38
2.1.3. <i>Selección del modelo de flujo y fluido</i>	38
2.2. Desarrollar el modelo hidrodinámico por medio de la metodología CFD del reactor ASTBR	39
2.2.1. <i>Proyectar la geometría del reactor ASTBR mediante un software de código abierto</i>	39
2.2.2. <i>Realizar mallado del reactor ASTBR mediante un software previamente seleccionado</i>	39
2.2.3. <i>Establecer el método numérico (solucionador)</i>	40
2.2.4. <i>Solución del método CFD mediante el software OpenFoam</i>	40
2.3. Validar de forma estadística el modelo CFD con respecto a los datos experimentales	41

2.3.1. <i>Exportar datos de openFoam a Excel</i>	41
2.3.2. <i>Calcular los valores de $E(t)$, \dot{t}, σ^2 y el porcentaje de zonas muertas, mezcla pistón y mezcla no pistón del modelo CFD</i>	41
2.3.3. <i>Criterio estadístico del modelo</i>	42
3. ANÁLISIS Y RESULTADOS	43
3.1. Definición del modelo CFD para el reactor ASTBR a escala laboratorio	43
3.1.1. <i>Resultado revisión bibliográfica de validación de test de trazadores mediante la metodología CFD</i>	43
3.1.2. <i>Resultados revisión bibliográfica de trabajos desarrollados por la UAN con reactores ASTBR</i>	46
3.1.3. <i>Selección del modelo de flujo y fluido</i>	49
3.1.4. <i>Tipo de flujo</i>	50
3.2. Desarrollo del modelo hidrodinámico por medio de la metodología CFD del reactor ASTBR	53
3.2.1. <i>Fase I: Carcasa reactor</i>	56
3.2.2. <i>Fase II: Reactor con lecho</i>	70
3.2.3. <i>Fase III: Ensayo de trazadores.</i>	84
3.3. Validar de forma estadística el modelo CFD con respecto a los datos experimentales	101
3.3.1. <i>Exportar datos de openFoam a Excel</i>	101
3.3.2. <i>Calcular los valores de $E(t)$, \dot{t}, σ^2 y el porcentaje de zonas muertas, mezcla pistón y mezcla no pistón</i>	102
3.3.3. <i>Criterio estadístico del modelo</i>	108
4. CONCLUSIONES	113
BIBLIOGRAFIA	114
ANEXOS	122

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Fluido newtoniano y no newtoniano	19
Figura 2. Ensayo de trazadores pulso-respuesta	24
Figura 3. Funciones de interconexión de los tres elementos principales dentro de un análisis de CFD	26
Figura 4. Interfaz gráfica de Ubuntu	32
Figura 5. Estructura general de OpenFOAM	34
Figura 6. Ventana de paraView	36
Figura 7. Entorno Salomé Meca	37
Figura 8. Reactor ASTBR seleccionado	49
Figura 9. Perfil de velocidades en un flujo newtoniano	50
Figura 10. Módulo de geometría Salomé Meca	54
Figura 11. Dimensiones reactor	55
Figura 12. Plano reactor	56
Figura 13. Metodología construcción reactor	57
Figura 14. Múltiples aristas y creación de grupos	58
Figura 15. Módulo malla	59
Figura 16. Módulo sub-mallas	60
Figura 17. Malla generada	60
Figura 18. Ventana emergente: mesh computed succeed	61
Figura 19. Hoja de cálculo velocidad caso reactor	66
Figura 20. Hoja de cálculo de presión cinemática caso reactor	67
Figura 21. Hoja de cálculo de propiedades de transporte	68
Figura 22. Hoja de cálculo controlDict	68
Figura 23. Perfil de velocidad del reactor fase I	69
Figura 24. Perfil de velocidad cinemática del reactor fase I	70
Figura 25. Diagrama de flujo: algoritmo SIMPLE	72
Figura 26. Lecho elaborado en el laboratorio	73
Figura 27. Hoja de cálculo topoSet	74
Figura 28. Hoja de cálculo fvOptions	76

Figura 29. Fase II: reactor con medio poroso	77
Figura 30. Hoja de cálculo de velocidad, fase II	78
Figura 31. Hoja de cálculo de presión, fase II	79
Figura 32. Hoja de cálculo de momentumTransport, fase II	80
Figura 33. Hoja de cálculo de controlDict, fase II	80
Figura 34. Perfil de velocidad fase II	81
Figura 35. Herramienta plotOverLine	82
Figura 36. Gráfica: velocidad vs longitud de poro	83
Figura 37. Perfil de presión fase II	84
Figura 38. Incorporación de la frontera tracer	85
Figura 39. Velocidad y presión simulación I, simpleFoam	87
Figura 40. Hoja de cálculo controlDict, simpleFoam I	89
Figura 41. Hojas de cálculo U y Phi scalarTransportFoam I	90
Figura 42. Hoja de cálculo T, scalarTransportFoam I	91
Figura 43. Hoja de cálculo transportProperties, scalarTransportFoam I	93
Figura 44. Hoja de cálculo controlDict, scalarTransportFoam I	94
Figura 45. Hoja de cálculo velocidad, simpleFoam II	95
Figura 46. Hoja de cálculo U y Phi, scalarTransportFoam II	96
Figura 47. Hoja de cálculo T, scalarTransportFoam II	97
Figura 48. Hoja de cálculo controlDict, scalarTransportFoam II	98
Figura 49. Perfil de T, scalarTransportFoam I	99
Figura 50. Perfil de Y, scalarTransportFoam II	100
Figura 51. Coordenadas de salida del reactor	101
Figura 52. Herramienta spreadSheetView	102
Figura 53. Valores de E (t)	105
Figura 54. Gráfica de distribución del tiempo de residencia	106
Figura 55. Gráfica: comparación de distribución de tiempo de residencia	110
Figura 56. Hoja de cálculo de velocidad	123
Figura 57. Hoja de cálculo de presión cinemática	124
Figura 58. Hoja de cálculo de propiedades de transporte	125
Figura 59. Hoja de cálculo de controlDict	126

Figura 60. Hoja de cálculo de blockMeshDict	127
Figura 61. Comportamiento de presión cinemática y velocidad caso Cavity	128
Figura 62. Hoja de cálculo topoSetDict	129
Figura 63. Hoja de cálculo fvOptions	130
Figura 64. Medio poroso de caso porousBlockage	131
Figura 65. Velocidad y presión cinemática de caso porousBlockage	131

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Unidades base para SI y USCS	35
Tabla 2. Revisión bibliográfica validación de test de trazadores mediante CFD	43
Tabla 3. Información de relevancia en artículos	45
Tabla 4. Revisión bibliográfica estudios UAN	46
Tabla 5. Aspectos destacados revisión bibliográfica estudios UAN	47
Tabla 6. Dimensiones reactor ASTBR	48
Tabla 7. Resultados velocidad y Reynolds	52
Tabla 8. Solucionadores para flujo incompresible	62
Tabla 9. Parámetros y resultados velocidad del trazador	88
Tabla 10. Datos para hallar coeficiente de difusión	93
Tabla 11. Resultado Wolf-Resnick	107
Tabla 12. Parámetros ensayo de trazadores experimental y CFD	111

RESUMEN

El presente trabajo se centra en la simulación de un ensayo de trazadores ya realizado de manera experimental en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) y en su respectiva validación por medio del software de código abierto OpenFoam.

En primera instancia, se hizo una revisión bibliográfica de artículos relacionados con el diseño experimental del reactor y de la metodología CFD, obteniendo como resultado, las dimensiones, capacidad del reactor y los aspectos más importantes para el desarrollo de la metodología CFD (campo de velocidad). Adicionalmente, se realizó un acercamiento a los solucionadores simpleFoam y pisoFoam disponibles en OpenFoam.

Posteriormente, se proyectó la geometría del reactor teniendo en cuenta únicamente la zona donde el fluido fluye y se realizó un mallado en dos dimensiones y de tipo tetraédrico uniforme. En la etapa de ejecución, se dividió la simulación en tres fases, con el fin de avanzar de lo más simple a lo más complejo, se realizó en primer lugar la simulación de la carcasa del reactor con el solucionador icoFoam, posteriormente la fase del reactor con el lecho poroso se solucionó con simpleFoam, y finalmente el ensayo de trazadores utilizó dos solucionadores de manera simultánea, simpleFoam y scalarTransportFoam.

Finalmente, se realizó la validación estadística por medio de los errores RMSE ($1,63E^{-03}$) y MAE ($8,97E^{-04}$), los cuales proporcionaron errores bajos debido a que presentan una media similar a pesar de la diferente distribución de los datos, además se comparó los parámetros del ensayo de trazadores, tales como TRH (1,86 h) y el comportamiento de la mezcla (64,6% flujo pistón).

Palabras claves: CFD, openFoam, ensayo de trazadores, reactor ASTBR.

INTRODUCCIÓN

La técnica dinámica de fluidos (CFD) ha sido utilizada ampliamente para solucionar problemas de ingeniería desde la década de los años 40 [1], en aquellas industrias donde se encuentran involucrados fluidos en estado líquido y gaseoso, con el fin de obtener mejores productos y servicios [2], en el campo de la investigación también se destaca el uso de esta metodología, principalmente porque los resultados obtenidos a partir de esta herramienta numérica son análogos a datos experimentales reales [3], además, proporciona una serie de ventajas en las que se destaca una reducción sustancial de tiempo y costos de diseño y la posibilidad de analizar sistemas y condiciones muy difíciles de simular experimentalmente [4].

El CFD permite un análisis hidrodinámico más profundo que incluye la evaluación tanto cuantitativa como cualitativa de las zonas muertas, los perfiles de velocidad, los patrones de flujo, el rendimiento de la mezcla o el cortocircuito [5] en tuberías, canales, accesorios de tuberías, aspas, tanques, entre otros. En el campo de la ingeniería química es utilizado para la simulación en reactores anulares [6], de lecho fluidizado [7] y de tanque agitado [8].

En los últimos años, ha habido un aumento constante de la modelización CFD en el campo del tratamiento de aguas residuales, tanto en el ámbito académico (universidades e institutos de investigación) como en el industrial (consultores y fabricantes) [9]. Como bien se sabe muchos de los tratamientos de aguas residuales incluye el uso de digestores anaerobios, los cuales en un contexto de aguas residuales son de sólidos relativamente altos (en el reactor 1-3%), con un rendimiento altamente dependiente de la hidráulica [1], de allí la importancia de conocer su comportamiento hidrodinámico.

Con base a lo anterior, la Universidad Antonio Nariño (UAN) con su grupo de investigación incursiona en el uso de técnicas como el CFD para predecir el comportamiento hidrodinámico de los reactores a diferentes escalas y de esta manera reducir los costos y el tiempo de diseño, adicionalmente permite validar los datos obtenidos experimentalmente, siendo este último el propósito del trabajo desarrollado.

Teniendo en cuenta lo anterior, se validaron los datos experimentales obtenidos mediante un ensayo de trazadores para un reactor ASTBR de 3L construido en la

Universidad Antonio Nariño, para así corroborarlos y permitir el uso de esta herramienta para su posterior escalado e implementación, con el fin de suministrar biogás a partir de las aguas residuales producidas en el restaurante y baños del colegio El Prado, ubicado en la vereda Calderón del municipio de Puerto Boyacá, Boyacá, en donde hay una población de 600 estudiantes, 38 profesores y directivos, cabe mencionar que se cuenta con el apoyo y financiamiento de la empresa Transportadora de Gas Internacional (TGI), la cual labora en la zona y busca una solución ante la carencia de este servicio.

Mediante el uso del software de código abierto OpenFOAM, el cual proporciona una alternativa a los paquetes CFD de código cerrado [10], se realizaron todas las etapas incluidas de esta metodología, entre las cuales se encuentran la proyección de la geometría del biorreactor ASTBR construido, el mallado estructurado en 2D mediante el uso del software SALOME [11] y la resolución del método numérico previamente establecido.

Finalmente, se compararon de manera estadística los datos a escala laboratorio con los obtenidos mediante la técnica CFD.

OBJETIVOS

Objetivo general

Validar un ensayo de trazadores a partir de un modelo CFD para un reactor ASTBR a escala laboratorio.

Objetivos específicos

- Definir el modelo CFD más apropiado para un reactor ASTBR con base en la revisión de la literatura.
- Desarrollar el modelo hidrodinámico por medio de la metodología CFD del reactor ASTBR.
- Validar de forma estadística el modelo CFD con respecto a los datos experimentales.

1.MARCO CONCEPTUAL

1.1. Dinámica de fluidos

La rama de la mecánica que se ocupa de los cuerpos en movimiento se llama dinámica. La subcategoría de mecánica de los fluidos se define como la ciencia que se ocupa del comportamiento de los fluidos en reposo (estática de los fluidos) o en movimiento (dinámica de los fluidos), y de la interacción de los fluidos con los sólidos u otros fluidos en los límites [12].

1.2. Fluido

Un fluido es una sustancia que puede fluir o deformarse continuamente bajo un esfuerzo cortante aplicado. Un estado de esfuerzo cortante es donde el esfuerzo es paralelo a la superficie del material [13]. Por tanto, es una sustancia en fase líquida o gaseosa [12].

1.2.1. Clasificación fluido

1.2.1.a. Fluido newtoniano y no newtoniano. Un fluido newtoniano es aquel cuya viscosidad puede considerarse constante con el tiempo cuando se le aplica un esfuerzo cortante. Un ejemplo característico de este tipo de fluidos es el agua.

Por el contrario, un fluido no newtoniano es aquel cuya viscosidad varía con el tiempo cuando se le aplica un esfuerzo cortante, por lo que no podemos obtener un valor de viscosidad específico. Un conocido ejemplo de fluido no newtoniano sería una disolución de maicena en agua.

Los fluidos newtonianos se caracterizan por cumplir la Ley de la viscosidad de Newton.

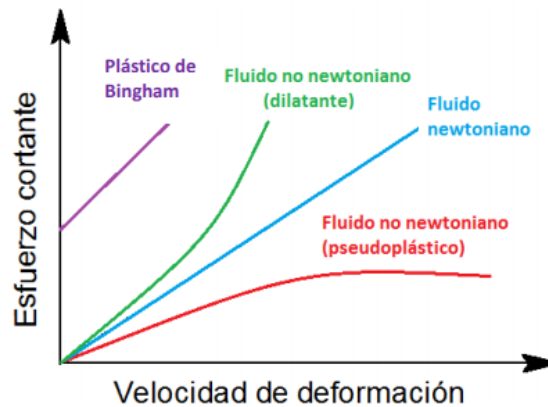
$$\tau = \mu \frac{du}{dy} \quad \text{Ec.1}$$

Donde, τ es el esfuerzo cortante (mPa), μ la viscosidad dinámica del fluido (Pa·s) y $\frac{du}{dy}$ la velocidad de deformación del fluido (s^{-1}).

El esfuerzo cortante es la medida del efecto que produce una fuerza paralela al área a la que se aplica dicho esfuerzo. La constante de proporcionalidad entre el esfuerzo cortante y la velocidad de deformación del fluido es la viscosidad. Ésta se define como la resistencia a la deformación de un fluido [14].

Figura 1

Fluido newtoniano y no newtoniano.



Nota. La figura representa la clasificación de los fluidos con respecto a su velocidad de deformación y esfuerzo cortante. Tomado de A. Carrillo Parra, “Desarrollo de nuevos nanofluidos. Caracterización y comportamiento reológico,” Universidad Politécnica de Cartagena, 2016, [en línea]. Disponible en: <http://hdl.handle.net/10317/6659>

1.2.2. Clasificación flujo

1.2.2.a. Flujos compresibles e incompresibles. Un flujo incompresible es un flujo en el que la variación de la densidad dentro del flujo se considera constante. En general, todos los líquidos se tratan como los fluidos incompresibles. Por el contrario, se dice que los flujos que se caracterizan por una densidad variable son comprimibles. Los gases se utilizan normalmente como los fluidos compresibles. Sin embargo, todos los fluidos en realidad son comprimibles porque cualquier cambio en la temperatura o la presión provocan cambios en la densidad. Sin embargo, en muchas situaciones, los cambios en la temperatura y la presión son tan pequeños que los cambios resultantes en la densidad son insignificantes [15].

La ecuación matemática que describe la propiedad de incompresibilidad del fluido está dada por:

$$\frac{dp}{dt} = 0 \quad \text{Ec. 2}$$

Donde $\frac{d}{dt}$ está definido por

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{V} \cdot \nabla \quad \text{Ec. 3}$$

\bar{V} representa la velocidad del flujo y ∇ es el operador vectorial diferencial.

1.2.2.b. Flujo laminar y turbulento. El flujo laminar se define como aquel tipo de flujo en el que las partículas de fluido se mueven a lo largo de trayectorias o líneas de corriente bien definidas y todas las líneas de corriente son rectas y paralelas. Por lo tanto, las partículas se mueven en láminas o capas que se deslizan suavemente sobre la capa adyacente. Este tipo de flujo también se llama flujo en línea de corriente o flujo viscoso. El flujo turbulento es aquel tipo de flujo en el que las partículas de fluido se mueven en forma de zig-zag. Debido al movimiento de las partículas de fluido en zig-zag, se forman remolinos que son responsables de una gran pérdida de energía. Para un flujo de tubería, el tipo de flujo está determinado por un número no dimensional denominado Reynolds.

Si el número de Reynold es inferior a 2000, el flujo se llama laminar. Si el número de Reynold es más de 4000, se llama flujo turbulento. Si el número de Reynold está entre 2000 y 4000, el flujo puede ser laminar o turbulento (transitorio) [16].

1.2.2.c. Flujo unidimensional, bidimensional y tridimensional. El flujo unidimensional es el tipo de flujo en el que el parámetro de flujo como la velocidad es una función del tiempo y una coordenada espacial solamente, por ejemplo, x , como se muestra en la Ec. 4. Para un flujo unidimensional constante, la velocidad es una función de una coordenada espacial solamente. La variación de las velocidades en otras dos direcciones mutuamente perpendiculares se supone insignificante.

$$u = f(x), v = 0 \text{ y } w = 0 \quad \text{Ec.4}$$

El flujo bidimensional es ese tipo de flujo en el que la velocidad es una función del tiempo y de dos coordenadas espaciales rectangulares, por ejemplo, x e y . Para un flujo bidimensional constante, la velocidad es una función de dos coordenadas espaciales solamente. La variación de la velocidad en la tercera dirección es insignificante.

$$u = f_1(x, y), v = f_2(x, y) \text{ y } w = 0 \text{ Ec.5}$$

El flujo tridimensional es el tipo de flujo en el que la velocidad es una función del tiempo y de las direcciones tridimensionales perpendiculares. Pero para un flujo tridimensional constante los parámetros del fluido son funciones de tres coordenadas espaciales (x, y y z) solamente [16].

$$u = f_1(x, y, z), v = f_2(x, y, z) \text{ y } w = f_3(x, y, z) \text{ Ec.6}$$

1.3.Hidrodinámica de un reactor

La integración de la hidrodinámica en el análisis del rendimiento de los reactores se ha hecho más común en el estudio inicial de las opciones de diseño de los reactores y en la determinación de las preguntas clave que deben formularse cuando se realizan experimentos a escala piloto, ya que la hidrodinámica afecta a la transferencia de calor y masa e influye en el rendimiento del reactor [17].

Disponer de una representación completa de la distribución de velocidades del fluido permitiría predecir el comportamiento del reactor, pero esta técnica es tan compleja que resulta impracticable. Por tanto, hay que definir lo mínimo que se necesita conocer sobre el flujo, que permita disponer de información suficiente sobre su comportamiento hidrodinámico. En general, es suficiente conocer la distribución de tiempos de residencia de la corriente del fluido. Esta información puede determinarse de manera fácil y directa por el método experimental estímulo-respuesta con trazadores [18].

Existen tres factores interrelacionados que configuran el contacto o patrón de flujo en un reactor:

- La distribución de tiempos de residencia o RTD (por sus siglas en inglés) de las partículas que fluyen a través del reactor.
- El estado de agregación del material que fluye, su tendencia a formar grupos de moléculas que se mueven juntas.
- El mezclado inmediato o tardío del material en el reactor [19].

1.4. Propiedades del campo de velocidades

En un flujo dado, la determinación experimental o teórica de las propiedades del fluido en función de la posición y del tiempo se considera la solución del problema. En casi todos los casos, el énfasis se hace sobre la distribución espacio-temporal de las propiedades fluidas [20].

1.5. Campo de velocidades

La más importante de todas las propiedades del flujo es el campo de velocidades $V(x, y, z, t)$. De hecho, determinar la velocidad es a menudo equivalente a resolver el problema, ya que otras propiedades se obtienen directamente de aquella.

En general, la velocidad es un vector, función de la posición y del tiempo, que tiene tres componentes escalares u , v y w :

$$V(x, y, z, t) = iu(x, y, z, t) + jv(x, y, z, t) + kw(x, y, z, t) \quad \text{Ec.7}$$

Se usa u , v y w en lugar de V_x , V_y y V_z [20].

1.6. Tiempo de residencia (RTD)

La distribución del tiempo de residencia del reactor se define como el tiempo transcurrido desde que el fluido ingresa al sistema hasta que lo abandona, se determina comúnmente a través de pruebas experimentales mediante el empleo de trazadores o ensayos en líneas de flujo. El movimiento de la materia puede presentar diferentes tiempos de residencia, debido a configuraciones geométricas de las estructuras, velocidades de flujo, homogeneidad, comportamientos anormales, entre otros [21].

1.6.1. Ensayo de trazadores

Se determina experimentalmente inyectando una sustancia, molécula o átomo inerte, llamado trazador, al reactor en cierto tiempo $t = 0$ y después midiendo la concentración del trazador, e , en la corriente del efluente en función del tiempo. Además de ser una especie no reactiva que se detecte con facilidad, el trazador debe tener propiedades físicas similares a las de la mezcla de reacción y ser completamente soluble en esa mezcla. Adicionalmente, no debe adsorberse sobre las paredes u otras superficies del reactor. Estos últimos requisitos son necesarios para que el comportamiento del trazador refleje en realidad el comportamiento del fluido que fluye por el reactor. Los tipos de

trazadores más comunes son materiales coloridos y radiactivos junto con gases inertes. Los dos métodos de inyección más empleados son el de alimentación por pulso y el de alimentación por escalón [22].

1.6.1.a. Alimentación por pulso (método pulso – respuesta). En una alimentación por pulso, se inyecta una cantidad de trazador (N_o) de manera repentina como carga a la corriente de alimentación que entra al reactor en un tiempo tan breve como sea posible. Después se mide la concentración a la salida en función del tiempo.

Para determinar el RTD a partir de la alimentación por pulso, se elige un incremento de tiempo (Δt) suficientemente pequeño para que la concentración del trazador ($C(t)$) que sale entre el tiempo t y $t+\Delta t$, sea en esencia la misma. La cantidad de material de marcador ΔN , que sale del reactor entre el tiempo t y $t+\Delta t$ es, por lo tanto,

$$N = C(t) v \Delta t \quad \text{Ec.8}$$

Donde, v es el flujo volumétrico del efluente. En otras palabras, ΔN es la cantidad de material que sale del reactor y ha pasado una cantidad de tiempo entre t y $t+\Delta t$ dentro del reactor. Si ahora dividimos entre la cantidad total de material inyectado al reactor, N_o , obtenemos,

$$\frac{\Delta N}{N_o} = \frac{C(t) v}{N_o} \Delta t \quad \text{Ec.9}$$

Que representa la fracción del material que tiene un tiempo de residencia en el reactor entre t y $t+\Delta t$.

Para la inyección por pulso, se define,

$$E(t) = \frac{C(t) v}{N_o} \quad \text{Ec.10}$$

De modo que,

$$\frac{\Delta N}{N_o} = E(t) \cdot \Delta t \quad \text{Ec.11}$$

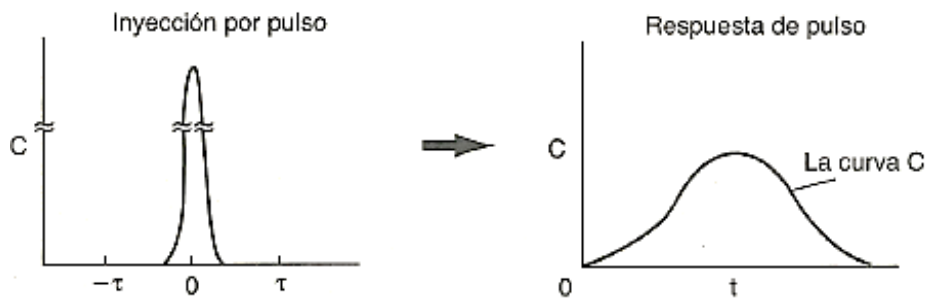
La cantidad $E(t)$ se conoce como función de la distribución de tiempos de residencia.

Es la función que describe de manera cuantitativa cuánto tiempo han pasado diferentes elementos del fluido dentro del reactor. La cantidad $E(t) dt$ es la fracción del fluido que sale del reactor, tras haber pasado un tiempo intermedio entre t y $t+dt$ dentro de él [22].

1.6.1.b. Curva C. La curva de concentración del efluente contra tiempo se conoce como curva C en el análisis de la RTD, básicamente muestran curvas típicas de concentración contra tiempo en la entrada y la salida de un reactor arbitrario [22].

Figura 2

Ensayo de trazadores pulso- respuesta.



Nota. La figura representa las curvas típicas de concentración contra tiempo en la entrada y la salida de un reactor arbitrario utilizando el ensayo pulso- respuesta. Tomado de H. S. Fogler, Elementos de ingeniería de las reacciones químicas, Cuarta edi. México: Person Educación, 2008, [en línea]. Disponible en: <https://doku.pub/documents/elementos-de-ingenieria-de-las-reacciones-quimicas-s-fogler-4ta-edicion-yl4wj97dv9qr>

1.7. Dinámica de fluidos computacional

La dinámica de fluidos computacional (o CFD, acrónimo de las palabras inglesas "Computational Fluid Dynamics") estudia los fluidos en movimiento y el comportamiento del flujo de fluidos, ya que influye en los procesos que pueden incluir transferencia de masa, calor y posiblemente las reacciones químicas en los flujos de combustión. Esto se aplica directamente a la descripción de "dinámica de fluidos". Además, las características físicas del movimiento de los fluidos pueden describirse normalmente a través de ecuaciones matemáticas fundamentales, normalmente en forma diferencial parcial, que gobiernan un proceso de interés y que a menudo se denominan ecuaciones gobernantes

en CFD. Para resolver estas ecuaciones matemáticas, se integran ciencias como el cálculo numérico y la informática que utilizan lenguajes de programación de alto nivel los cuales convierten las ecuaciones en programas informáticos o paquetes de software. La parte "computacional" significa el estudio del comportamiento de los fluidos utilizando simulaciones numéricas, lo que implica el empleo de programas informáticos o paquetes de software realizados en computadoras digitales de alta velocidad para obtener las soluciones numéricas [23].

Las ventajas que proporciona el análisis con técnicas CFD se exponen a continuación:

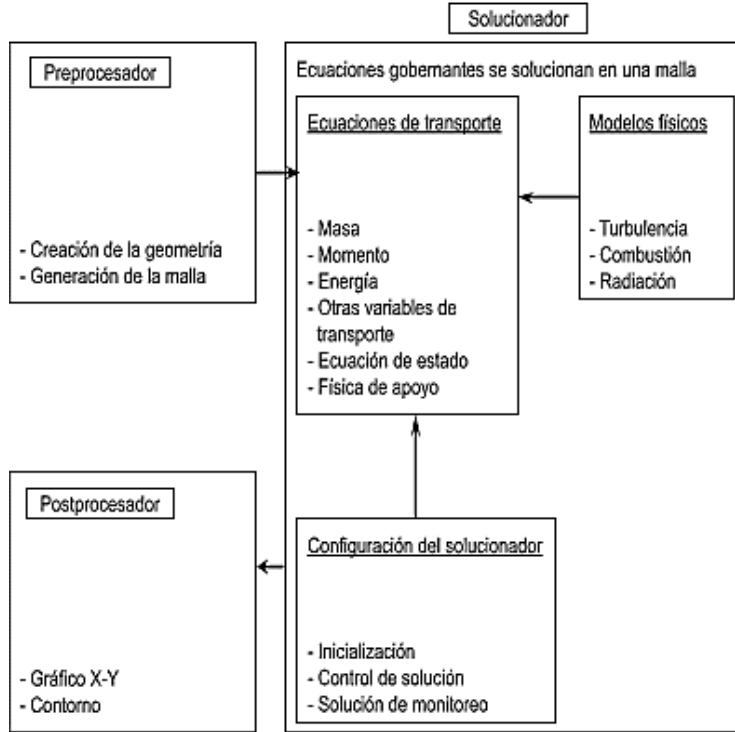
- Reducción sustancial de tiempos y de costes en los nuevos diseños.
- Posibilidad de analizar sistemas y condiciones muy difíciles de simular experimentalmente: velocidades supersónicas, temperaturas extremas y elementos en movimiento relativo.
- Capacidad de estudiar sistemas bajo condiciones peligrosas o más allá de sus condiciones límite de funcionamiento, por ejemplo, accidentes con sustancias tóxicas.
- Nivel de detalle prácticamente ilimitado. Los métodos experimentales son tanto más caros cuanto mayor es el número de puntos de medida, mientras que los programas CFD pueden generar un gran volumen de resultados sin coste añadido, y con posibilidad de hacer estudios paramétricos.
- Un valor añadido es poder poner en el producto la etiqueta de "Diseñado con ayuda del ordenador", y la facilidad para generar gráficos fácilmente interpretables, que estimulan la "compra" del producto [4].

Casi todos los actuales paquetes de CFD comerciales (y posiblemente los de código abierto) incluyen aplicaciones y entornos de interfaz gráfica de usuario (GUI) de fácil manejo para introducir los parámetros del problema y examinar los resultados calculados. Por lo tanto, los códigos proporcionan un análisis completo de CFD, que consta de tres elementos principales:

- Preprocesador.
- Solucionador.
- Post procesador.

Figura 3

Funciones de interconexión de los tres elementos principales dentro de un análisis de CFD.



Nota. La figura representa los componentes de cada una de las tres fases principales de la técnica de dinámica computacional de fluido. Tomado y modificado de: J. Tu, G.-H. Yeoh, and C. Liu, Computational fluid dynamics, 2da ed. Elsevier, 2013. [en línea]. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/book/9780080982434/computational-fluid-dynamics?via=ihub=>

De acuerdo a la figura 3, los pasos que implican el desarrollo de la metodología CFD se describen a continuación:

1.7.1. Geometría

El primer paso en cualquier análisis de CFD es la definición y creación de la geometría de la región de flujo, es decir, el dominio computacional para los cálculos de CFD, un

aspecto importante es permitir que la dinámica del flujo se desarrolle suficientemente a lo largo de la longitud L de los dominios computacionales [23].

1.7.2. Generación de la malla

La generación de la malla, es uno de los pasos más importantes en la etapa de pre procesamiento después de la definición de la geometría del dominio. El CFD requiere la subdivisión del dominio en una serie de subdominios más pequeños, no superpuestos, para resolver la física del flujo dentro de la geometría del dominio que se ha creado; esto da lugar a la generación de una malla (o rejilla) de celdas (elementos o volúmenes de control) que superponen toda la geometría del dominio. Los flujos de fluidos esenciales que se describen en cada una de estas celdas se resuelven numéricamente, de manera que se determinan los valores discretos de las propiedades del flujo, como la velocidad, la presión, la temperatura y otros parámetros de transporte de interés. Esto da lugar a la solución de CFD al problema de flujo que se está resolviendo. La precisión de una solución de CFD está fuertemente influenciada por el número de celdas en la malla dentro del dominio computacional. Si bien, en general, el aumento del número de celdas mejorará la precisión de la solución, la solución también está influenciada por muchos otros factores, como el tipo de malla, el orden de precisión del método numérico y la adecuación de las técnicas elegidas a la física del problema [23].

1.7.3. Selección de la física y propiedades de los fluidos

Es imperativo que se identifique cuidadosamente la física de flujo subyacente exclusiva del sistema de flujo de fluidos en particular. Inicialmente se debe plantear si las simulaciones del sistema de flujo de fluidos representan soluciones transitorias, inestables o estables. Posteriormente se define a qué clase de fluidos pertenecen los flujos: no viscosos o viscosos. Los flujos de fluidos no viscosos son generalmente compresibles. Por otro lado, los flujos de fluidos viscosos pueden existir en un estado laminar o turbulento, en estas dos condiciones de flujo, se requiere un conocimiento previo acerca de la compresibilidad del fluido. La clasificación de los flujos internos y externos para los fluidos viscosos permite al usuario tratar estos problemas de flujo de manera apropiada [23].

Además, el transporte de calor puede contribuir significativamente al proceso de flujo de los fluidos. Existen tres modos de transferencia de calor: conducción, convección y radiación. En el caso de la convección, el modo de transferencia de calor dominante será probablemente impulsado por el flujo de fluido por convección más que por la conducción y la radiación. No obstante, hay circunstancias en las que la radiación y la convección pueden coexistir y pueden dominar la transferencia de calor, especialmente en la expansión de los incendios [23].

1.7.4. Especificación de las condiciones límite

La compleja naturaleza de muchos comportamientos de diferentes fluidos tiene importantes implicaciones para las que se identifican condiciones límite para el problema de flujo. Se necesita definir condiciones apropiadas que imiten la representación física real del flujo en un problema de CFD solucionable [23].

Cuando existen límites de entrada y salida dentro del dominio del flujo, se requieren condiciones de límite de flujo de fluido adecuadas para acomodar el comportamiento del fluido al entrar y salir del dominio del flujo. El dominio del flujo también puede tener límites abiertos. Aunque las complejidades de las condiciones de límites abiertos todavía están sujetas a mucho debate teórico, esta condición de límite sigue siendo la forma más simple y barata de prescribir cuando se compara con otras selecciones teóricamente más satisfactorias en CFD. También es necesario asignar condiciones de límite apropiadas para los límites de los muros sólidos estacionarios externos que limitan la geometría del flujo y los muros circundantes de posibles obstáculos internos dentro del dominio del flujo [23].

1.7.5. Solución numérica – CFD solver

Un solucionador de CFD normalmente puede describirse y preverse mediante los siguientes pasos: inicialización, control de solución, solución de supervisión, cálculo de CFD y comprobación de la convergencia [23].

1.7.5.a. Inicialización y control de solución. En primer lugar, los fenómenos físicos subyacentes en los fluidos reales, que por lo general son complejos y no lineales dentro de estos flujos, suelen requerir el tratamiento de los fenómenos clave para resolverlos mediante un enfoque de solución iterativo. De esta manera el solucionador realiza un

procedimiento iterativo que requiere generalmente todas las ecuaciones que describen el comportamiento del fluido estén discretizadas, parámetros, como la velocidad, la presión, la temperatura y otras variables de transporte de transporte deben estar definidas antes de iniciar el solucionador. En teoría, las condiciones iniciales pueden ser puramente arbitrarias. Sin embargo, en la práctica, la imposición inteligente de las condiciones iniciales tiene ciertas ventajas. Unas buenas condiciones iniciales son cruciales para el procedimiento iterativo [23].

En segundo lugar, el establecimiento de parámetros adecuados en el control de la solución suele entrañar la especificación de esquemas apropiados de discretización y la selección de solucionadores iterativos adecuados. Casi todos los códigos comerciales de uso general bien establecidos y plenamente validados adoptan el método de volumen finito como su técnica de solución numérica estándar. Las formas algebraicas de las ecuaciones que rigen el flujo de fluidos dentro de estos códigos suelen aproximarse mediante la aplicación de aproximaciones de tipo de diferencia finita a una celda de volumen finito en el espacio. En cada cara del volumen de la celda, los flujos superficiales de las variables de transporte que se requieren pueden determinarse mediante diferentes esquemas de interpolación [23].

Para resolver las ecuaciones algebraicas se utilizan solucionadores iterativos, los llamados motores de cálculo numérico. Hoy en día, los solucionadores robustos, como el algoritmo Algebraico de Múltiples Redes (AMG) y los métodos de gradiente conjugado, son características estándar en muchos códigos comerciales [23].

1.7.5.b. Monitoreo de convergencia. Esta etapa implica la interconexión de las operaciones de tres procesos previos: la solución de supervisión, el cálculo de CFD y la comprobación de la convergencia. Dos aspectos que caracterizan una solución computacional de CFD exitosa son la convergencia del proceso iterativo y la independencia de la red [23].

La convergencia puede evaluarse normalmente siguiendo progresivamente los desequilibrios que se acentúan por el avance de los cálculos numéricos de las ecuaciones algebraicas a través de cada paso de la iteración. Estos desequilibrios miden la conservación general de las propiedades del flujo; también se conocen comúnmente

como los residuos. Una solución convergente se logra cuando los residuos caen por debajo de algún criterio de convergencia o tolerancia que está preestablecido dentro de los parámetros de control del solucionador de los solucionadores iterativos [23].

1.7.6. Informe de resultados y visualización.

El CFD tiene la capacidad de generar imágenes gráficas nítidas y, si bien algunas de las imágenes son de carácter promocional y suelen mostrarse con una salida de color, la capacidad de presentar los resultados computacionales de manera eficaz es una herramienta de diseño de valor incalculable [23].

1.8. Ecuaciones de gobierno para CFD.

Las ecuaciones de gobierno representan declaraciones matemáticas de las leyes de conservación de la física.

La masa se conserva para el fluido, es decir la materia no puede ser creada ni destruida.

Ecuación de continuidad: En términos del sistema de coordenadas cartesianas la ecuación es expresada como [24]:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(pu)}{\partial x} + \frac{\partial(pv)}{\partial y} + \frac{\partial(pw)}{\partial z} = 0 \quad \text{Ec.12}$$

Donde la velocidad del fluido V en cualquier punto del campo del flujo se describe por las componentes de velocidad local u , v , y w , que son, en general, funciones de localización (x, y, z) y de tiempo (t) .

La segunda ley de Newton: La tasa de cambio de impulso es igual a la suma de las fuerzas que actúan en el fluido.

Ecuación de momentum [24]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{V}) + \nabla(\rho\bar{V}\bar{V}) &= -\nabla P + \nabla(\tau) + \rho g + F \cdot \left(\rho_{(t)} \frac{\partial V_y}{\partial t} + \rho_x V_x \frac{\partial V_x}{\partial x} + \rho_y V_y \frac{\partial V_y}{\partial y} + \rho_z V_z \frac{\partial V_z}{\partial z} \right) \dots \\ \dots &= -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial t_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial t_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial t_{xz}}{\partial z} + \rho g_x + F_x [\text{Para X, Y y Z}] \quad \text{Ec.13} \end{aligned}$$

Primera ley de la termodinámica: La tasa de cambio de energía es igual a la suma de la tasa de adición de calor al fluido y la tasa de trabajo realizado en el fluido.

Ecuación de energía [24]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla(\bar{V}(\rho E + P)) = \nabla(K_{eff}VT - \sum_j h_j J_j + \tau_{eff}) + S_h \quad \text{Ec.14}$$

1.9. Discretización de las ecuaciones

1.9.1. Método de volúmenes finitos (VFM)

Emplea directamente las ecuaciones de conservación en su forma integral. El método de los volúmenes finitos se basa en la discretización directa de las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento y la energía.

La principal ventaja del método de los volúmenes finitos es que la discretización espacial se lleva a cabo directamente en el espacio físico del problema. Por lo tanto, no hay problemas con la transformación entre sistemas de coordenadas, como ocurre en el método de las diferencias finitas y puede implementarse en mallas estructuradas y no estructuradas; por estos motivos, el método de los volúmenes finitos es el más empleado para la resolución de flujos con geometrías complejas [25].

1.9.2. Pasos para discretizar las ecuaciones mediante VFM

1.9.2.a. Descomposición del dominio en pequeños volúmenes de control donde las variables son almacenadas en los nodos [26].

- Los volúmenes de control y los nodos son definidos con una grilla numérica, llamada malla.
- Los nodos, donde se guardan las variables a resolver, se ubican en los vértices de esta malla o en los centros de los volúmenes, y es la referencia con la que se cuenta para aproximar la solución en el resto del dominio.

1.9.2.b. Las ecuaciones de conservación son descritas en su forma integral para cada volumen [26].

El teorema de la divergencia de Gauss es usado para convertir integrales de volumen sobre operadores de divergencia y gradiente a integrales de superficie.

1.9.2.c. Finalmente, el sistema de ecuaciones es resuelto a través de métodos segregados o acoplados [26].

1.9.3. Método de elementos finitos

El método de los elementos finitos, como método general para la resolución de las ecuaciones de Euler/Navier-Stokes, comienza con una división del dominio en elementos triangulares (en 2-D) o tetraédricos (en 3-D), generando una malla no estructurada. Dependiendo del tipo de elemento y de la precisión que se quiera, se tendrá que definir una malla más o menos fina de elementos. El número total de nodos multiplicado por el número de variables del problema es el número de grados de libertad del problema [25].

Este método resulta muy atractivo por el uso de mallas no estructuradas y es ampliamente utilizado en simulaciones numéricas CAE para análisis estructural.

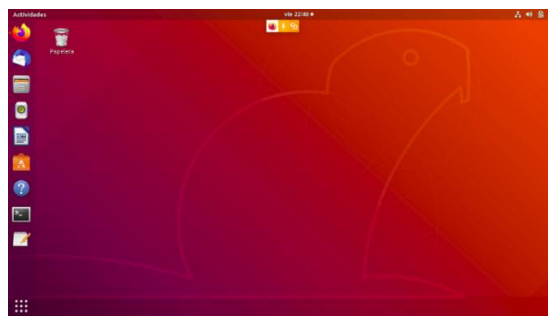
1.10. Ubuntu

Es una distribución GNU/Linux distribuido por una empresa llamada Canonical que ofrece un interesante sistema operativo para equipos de escritorio y servidores en el ámbito educativo. Es una distribución basada en Debian cuyas principales características son [27]:

- Facilidad de manejo
- Actualizaciones frecuentes
- Facilidad de instalación del sistema
- Búsqueda e instalación de programas robusta y fácil al basarse en paquetes.
- Libertad de uso y distribución.

Figura 4

Interfaz gráfica de Ubuntu.



Nota. Esta figura representa la pantalla de inicio de la interfaz gráfica de Ubuntu.

1.10.1. Bash en Ubuntu

Bash es un intérprete de lenguaje de comandos compatible con -sh para el sistema operativo GNU que ejecuta comandos leídos desde la entrada estándar o desde un archivo. Bash también incorpora funciones útiles de los shells Korn y C (ksh y csh) [28]. El nombre es un acrónimo de "Bourne-Again Shell".

En la actualidad se ejecuta en prácticamente todas las versiones de Unix y otros sistemas operativos; existen puertos compatibles de forma independiente para las plataformas MS-DOS, OS/2 y Windows.

1.11. OpenFOAM

Es el software líder de código abierto gratuito para dinámica de fluidos computacional (CFD), propiedad de OpenFOAM Foundation y distribuido exclusivamente bajo la Licencia Pública General (GPL). La GPL brinda a los usuarios la libertad de modificar y redistribuir el software y una garantía de uso gratuito continuo, dentro de los términos de la licencia [29].

OpenFOAM es un marco para desarrollar aplicaciones ejecutables que utilizan la funcionalidad empaquetada contenida en una colección de aproximadamente 100 bibliotecas de C ++ [30].

OpenFOAM se distribuye con un gran conjunto de aplicaciones precompiladas, pero los usuarios también tienen la libertad de crear las suyas propias o modificar las existentes [30].

1.11.1. Aplicaciones importantes de OpenFOAM

OpenFOAM se envía con aproximadamente 250 aplicaciones prediseñadas que se dividen en dos categorías [30]:

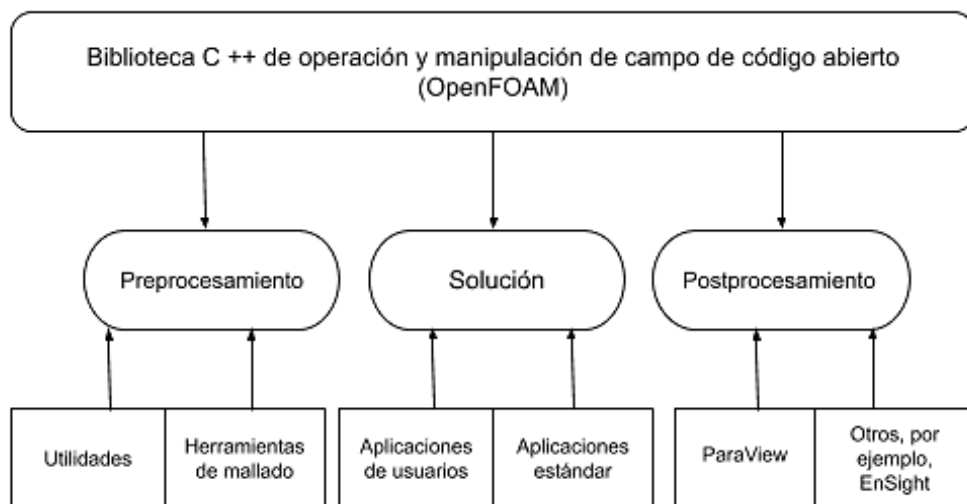
- Solucionadores, están diseñados para resolver un problema específico en mecánica continua computacional.
- Utilidades, realizan tareas sencillas de pre procesamiento y post procesamiento, que incluyen principalmente la manipulación de datos y cálculos algebraicos.

1.11.2. Operación y manipulación de OpenFOAM

OpenFOAM se suministra con entornos de procesamiento previo y posterior. La interfaz para el procesamiento previo y posterior son en sí mismas utilidades de OpenFOAM, lo que garantiza un manejo de datos consistente en todos los entornos como se muestra en la siguiente figura.

Figura 5

Estructura general de OpenFOAM



Nota. La figura 5 representa los componentes de cada una de las fases de la técnica de CFD en el software de código abierto OpenFOAM. Tomado y modificado de: OpenFOAM foundation, “User guide.” p. 17, 2020, [En línea]. Disponible en: <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/OpenFOAMUserGuide-A4.pdf>

En cuanto a las dimensiones establecidas por OpenFOAM, para el manejo de las variables de respuesta, se muestran a continuación:

Tabla 1

Unidades base para SI y USCS

Nº	Propiedad	Unidad SI	Unidad USCS
1	Masa	Kilogramo (kg)	Libra-masa (lbm)
2	Longitud	Metro (m)	Pie (ft)
3	Tiempo	Segundo (s)	Segundo (s)
4	Temperatura	Kelvin (K)	Rankine (°R)
5	Cantidad	Mol (mol)	Mol (mol)
6	Corriente	Amperio (A)	Amperio (A)
7	Intensidad lumínica	Candela (cd)	Candela (cd)

Nota. La tabla contiene las variables de trabajo del software CFD con sus respectivas unidades en el SI y USCS. Tomado y modificado de: CFD direct, The Architects of OpenFOAM, "OpenFOAM v6 User Guide: 4.2 Basic input/output file format", 2020, [En línea]. Disponible en: <https://cfdirect.com/openfoam/user-guide/v6-basic-file-format/>

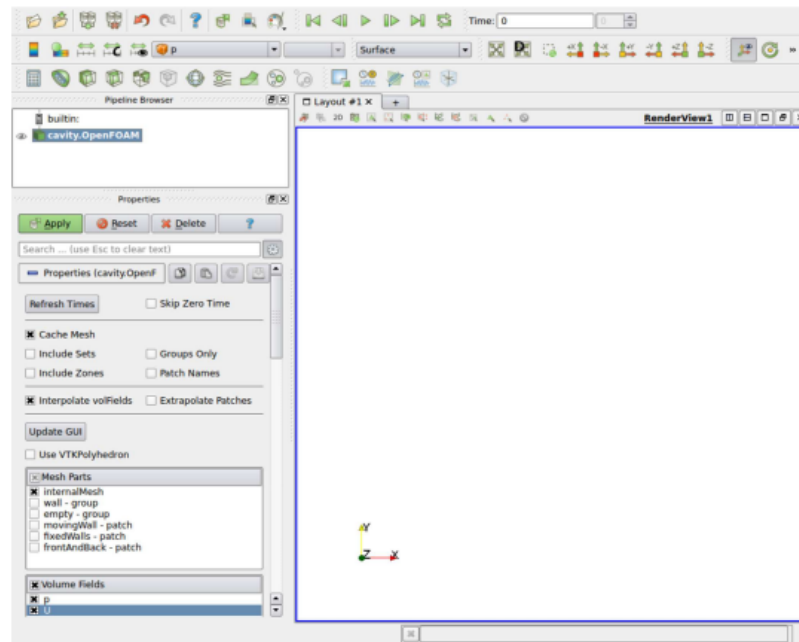
1.11.3. ParaView / interfaz gráfica del usuario (GUI)

Es una aplicación de visualización y análisis de datos multiplataforma de código abierto. Los usuarios de ParaView pueden crear visualizaciones rápidamente para analizar sus datos utilizando técnicas cualitativas y cuantitativas [31].

ParaView utiliza Visualization Toolkit (VTK) como su motor de procesamiento y representación de datos y, por lo tanto, puede leer cualquier dato en formato VTK. OpenFOAM incluye la utilidad foamToVTK para convertir datos de su formato nativo al formato VTK, lo que significa que cualquier herramienta gráfica basada en VTK se puede utilizar para posprocesar casos OpenFOAM. Esto proporciona un medio alternativo para utilizar ParaView con OpenFOAM [32].

Figura 6

Ventana de ParaView



Nota. La figura representa la ventana principal del software paraView con sus respectivas barras de herramientas y propiedades más importantes. Tomado de: C. Greenshields, "User Guide version 8," *OpenFoam Foundation Ltd*, 2020. [En línea]. Disponible en: <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/OpenFOAMUserGuide-A4.pdf>.

1.12. Salomé Meca

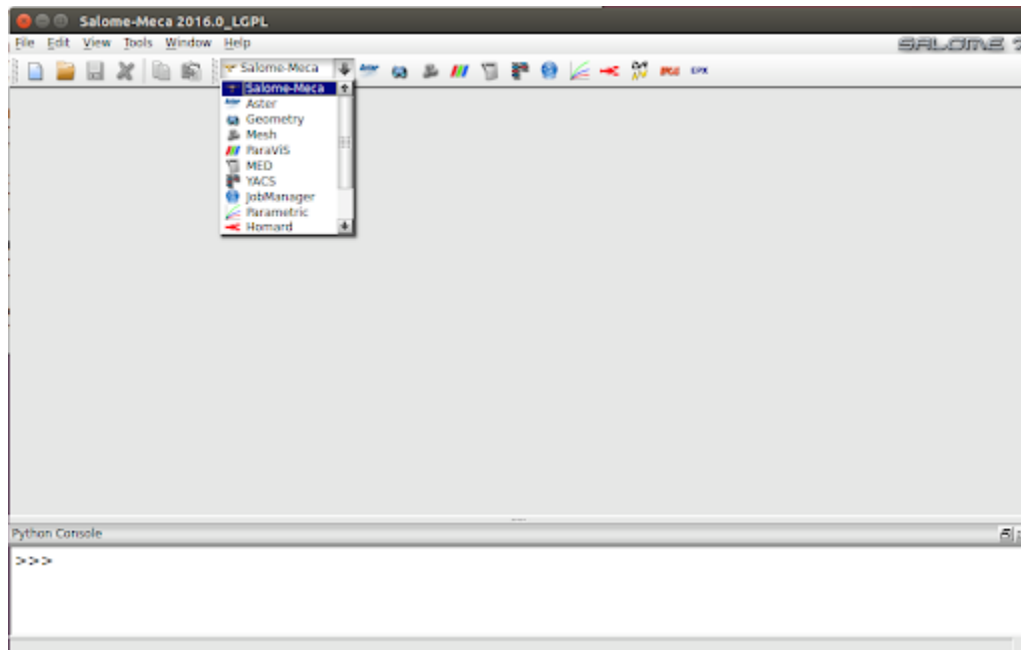
Es una plataforma genérica de preprocesamiento y post procesamiento para simulaciones numéricas. Es un programa de código abierto (licencia LGPL) el cual se basa en una arquitectura abierta y flexible hecha de herramientas propias e integrando otras herramientas del mundo del software de código abierto, así como otras herramientas comerciales con licencias de código cerrado.

Se puede conectar fácilmente el núcleo de un código numérico en la plataforma, definir la geometría del problema, mallarla con los malladores incluidos, libres o de código cerrado (así como conectar otros), definir las condiciones de contorno, ejecutar el programa de solución o solver en un superordenador, visualizar el resultado y analizar

los datos; todas estas acciones se llevan a cabo en un entorno integrado y coherente [33].

Figura 7

Entorno Salome Meca.



Nota. La figura representa la ventana principal del software Salome-MECA y sus diferentes herramientas. Tomado de A.A, “A spanish introduction to MFront and Salome-MECA,” -. [En línea]. Disponible en: <http://tfel.sourceforge.net/tutorial-spanish.html>.

2. METODOLOGÍA

En este capítulo, se describe la metodología utilizada para realizar cada una de las actividades propuestas, con el fin de dar cumplimiento a los objetivos planteados.

2.1. Definición del modelo CFD para el reactor ASTBR a escala laboratorio

Se realizó una revisión bibliográfica de la metodología CFD, en conjunto con una revisión de los trabajos desarrollados por la universidad Antonio Nariño, con el fin de establecer los parámetros de mayor relevancia tanto para el modelo CFD como para la operación del biorreactor, además se determinó el modelo que rige al fluido.

2.1.1. Revisión bibliográfica de validación de test de trazadores mediante la metodología CFD

Se estableció una ecuación de búsqueda que permitiera relacionar el test de trazadores con la metodología CFD y una vez establecida se procedió a usar las bases referenciales Scopus y Web Of Science que permitieron hallar información fundamental de parámetros y selección de modelos, además por medio del programa Mendeley se almacenó la información proporcionada por las bases referenciales.

2.1.2. Revisión bibliográfica de trabajos desarrollados por la UAN con reactores ASTBR

Para esta actividad se revisaron los trabajos de grado y proyectos de la UAN y aquellos realizados en conjunto entre la UAN y la Universidad Federal de Ouro Preto sobre el reactor ASTBR, con el fin de obtener más conocimientos técnicos de diseño y funcionamiento del reactor. Uno de estos documentos se revisó de manera individual, debido a que no se encontraba en ninguna base de datos referencial, los demás documentos fueron consultados en los repositorios correspondientes.

2.1.3. Selección del modelo de flujo y fluido

Seleccionada y analizada la información descrita en las dos actividades anteriores y con el fin de simplificar los términos en la ecuación gobernante, se realiza la clasificación del flujo a través del reactor realizando ciertas suposiciones con su respectiva justificación, esto con el fin de explicar el modelo de flujo que se va a simular dentro del biorreactor.

2.2. Desarrollar el modelo hidrodinámico por medio de la metodología CFD del reactor ASTBR

Para generar la simulación se propuso una serie de actividades, siendo la primera, proyectar la geometría del reactor previamente seleccionada, posteriormente se realizó el mallado del reactor mediante el software Salome Meca, el cual también se usó en la proyección de la geometría. Finalmente, se seleccionó el solucionador acorde a lo definido en el primer objetivo y se llevó a cabo la simulación en el software OpenFOAM, en un equipo portátil con un procesador Intel(R) Core(TM) i5-4210U CPU y una memoria RAM de 6,00 GB.

Con base a las actividades anteriormente mencionadas, se establecieron tres fases de simulación, las cuales se definieron según un orden de dificultad, carcasa (fase I), reactor con lecho (fase II) y ensayo de trazadores (fase III), esto con el fin de poder tener control sobre cada uno de los parámetros de la simulación y así entender de una mejor manera el modelo.

2.2.1. Proyectar la geometría del reactor ASTBR mediante un software de código abierto

En primera instancia, se definió la zona de la geometría a proyectar, dado que el fluido no asciende por todo el equipo, además se definió un software de código abierto que permitiera realizar tanto la geometría como el mallado del reactor, una vez definido se realizó un estudio sobre el entorno, el cual permitió identificar las diferentes herramientas que posee, también se realizó una serie de tutoriales con el fin de emplear correctamente el software.

Posteriormente, se empezó la construcción de la geometría del reactor con base al tipo de mallado definido, las dimensiones de la tabla 6 y de acuerdo a las fases establecidas.

2.2.2. Realizar mallado del reactor ASTBR mediante un software previamente seleccionado

A partir del software seleccionado en la actividad previa, se procedió a ingresar al módulo de mallado, en donde se creó dicho elemento con base a la geometría. La malla se estableció de tipo estructurado 2D con una precisión de $1e^{-7}$, además se establecieron unas sub mallas, con el fin de otorgar mayor uniformidad al mallado,

finalmente se crearon los grupos referentes a las fronteras que toma en cuenta el software OpenFOAM.

2.2.3. Establecer el método numérico (solucionador)

Debido a que se hizo un análisis del modelo del biorreactor desde lo más sencillo a lo más complejo (fases), se establecieron diferentes solucionadores para cada uno de los casos.

Para definir el solucionador más apropiado para cada una de las simulaciones se tuvieron en cuenta aspectos como, las condiciones de frontera, el tipo de flujo y fluido, el estado de flujo, y los elementos presentes en el reactor, es por esto que una vez seleccionado el solucionador se realizó un estudio sobre este, con el fin de comprender correctamente el funcionamiento, además para otorga una mejor comprensión se hace una descripción del solucionador en donde se menciona el algoritmo que usa y las ecuaciones de Navier Stockes de continuidad y momento que lo rigen.

2.2.4. Solución del método CFD mediante el software OpenFoam

Antes de realizar las simulaciones pertinentes, para cada fase se seleccionó un tutorial de la biblioteca de openFoam, el cual debía presentar similitud con cada fase, esto se realizó con el fin de generar mayor facilidad en las simulaciones y se denominó como “caso base”, ya que estos tutoriales se acoplaron a las necesidades que presentábamos, así que una vez simulado el “caso base” se modificaron las hojas de cálculos y se asignaron las condiciones de contorno de acuerdo a cada fase.

Una vez corroborado la información de cada hoja de cálculo se procedió a ejecutar cada una de las simulaciones, mientras el solucionador iteraba se observó que no hubiera errores y que el número de iteraciones fuera menor a 5 dado que esto nos demostraba que el modelo converge de manera correcta. Al finalizar la simulación se ejecutaba el comando del visualizador (paraView), el cual nos permitió observar los resultados en cada variable de estudio, finalmente se realizó el análisis de los resultados obtenidos en cada fase.

2.3. Validar de forma estadística el modelo CFD con respecto a los datos experimentales

En este caso se tuvo en cuenta la última simulación realizada de la fase III, ya que esta aportó los resultados del ensayo de trazadores realizado por medio del programa openFoam, a partir de esta simulación y por medio del visualizador se exportaron los datos a una hoja de cálculo de Excel, en el cual se calculó la distribución del tiempo de residencia del reactor, $E(t)$, el tiempo de residencia (\bar{t}), varianza (σ^2) y el porcentaje de zonas muertas, mezcla pistón y mezcla no pistón. Posteriormente, se realizó la validación de forma estadística en la cual se comparó los resultados obtenidos en la simulación y los datos a nivel laboratorio, para finalizar se analizó resultados obtenidos.

2.3.1. Exportar datos de openFoam a Excel

Para obtener los resultados numéricos de la simulación se utilizó la herramienta plotOverLine del visualizador paraView, después se seleccionó que se tuviera en cuenta la concentración/campo de transporte escalar (T) a la salida del reactor y el tiempo, finalmente se creó una carpeta en el solucionador denominada post processing, en la que se exportó la concentración a la salida del reactor cada 2 minutos durante 36 horas, para esto openFoam creó 1080 hojas de cálculo correspondientes a las 36 horas y en cada hoja creada se tenía 100 datos por cada punto o intervalo de tiempo, por lo que fue necesario promediar la concentración y así obtener un valor, finalmente se organizaron todos los datos en hoja de cálculo de Excel.

2.3.2. Calcular los valores de $E(t)$, \bar{t} , σ^2 y el porcentaje de zonas muertas, mezcla pistón y mezcla no pistón del modelo CFD

Por medio de la metodología establecida en “Desarrollo de una propuesta para la producción de biogás en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) para la vereda Calderón, Puerto Boyacá” [42] y Levenspiel [19], fue posible realizar los cálculos de la distribución del tiempo de residencia del reactor, $E(t)$, el tiempo de residencia (\bar{t}), varianza (σ^2) y el porcentaje de zonas muertas, mezcla pistón y mezcla no pistón, los cuales se realizaron a partir de los resultados obtenidos del modelo CFD propuesto.

2.3.3. Criterio estadístico del modelo

Se seleccionó dos criterios de validación estadística, el error cuadrático medio y el error absoluto medio, lo cuales evaluaron los datos de la distribución del tiempo de residencia del ensayo de trazadores del modelo CFD y el realizado experimentalmente, adicionalmente se comparó los siguientes parámetros: tiempo de retención, número de tanques en serie, porcentaje de flujo pistón, porcentaje de mezcla completa y zonas muertas, con el fin de comprobar si hay o no similitud.

3. ANÁLISIS Y RESULTADOS

3.1. Definición del modelo CFD para el reactor ASTBR a escala laboratorio

3.1.1. Resultado revisión bibliográfica de validación de test de trazadores mediante la metodología CFD

Para ello se estableció una ecuación de búsqueda la cual se definió como “test tracing” AND “CFD” AND “anaerobic digester”, que involucra y relaciona la validación del test de trazadores mediante el uso de la metodología CFD, en la Tabla 2 se encuentran los documentos seleccionados.

Tabla 2

Revisión bibliográfica validación de test trazadores mediante CFD.

#Referencia	Año de publicación en línea	Título
1	2020	Optimización hidrodinámica de reactores multiambiente para la eliminación de nutrientes biológicos: una metodología que combina dinámica de fluidos computacional e índices adimensionales.
2	2020	Simulación CFD de un nuevo reactor anaeróbico-anóxico para la eliminación biológica de nutrientes: construcción de modelos, validación y análisis hidrodinámico basado en OpenFOAM.
3	2018	Evaluación comparativa de OpenFOAM y ANSYS Fluent para el modelado de reactores anulares.
4	2012	Modelo Euleriano-Lagrangiano con método de elementos discretos para un flujo líquido-sólido de baja velocidad ascendente.
5	2011	Modelado de flujo dentro de un digestor anaeróbico mediante técnicas CFD.
6	2004	Integración del rastreo con dinámica de fluidos computacional para la investigación de procesos industriales.

Nota. La tabla contiene los artículos seleccionados a partir de la ecuación de búsqueda “test tracing” AND “CFD” AND “anaerobic digester”, con su respectivo año de publicación y nombre.

Entre los aspectos fundamentales del diseño de un reactor anaerobio se destaca la hidrodinámica del reactor, en donde el campo de velocidad se considera el parámetro más representativo para comprender el comportamiento del flujo [34].

Con base en la tabla 2, en los artículos 1 y 2 se realizó una serie de pruebas experimentales con un trazador de cloruro de sodio en agua limpia para evaluar la influencia de diferentes parámetros geométricos en el rendimiento hidrodinámico de un reactor anaerobio-anóxico [35]. Además, se construyó un modelo CFD 3D para lo cual usaron el software de código abierto OpenFOAM y selecciono el modelo k- ϵ que representa un flujo turbulento e incompresible, esto con el fin de validar los datos experimentales obtenidos.

La metodología numérica de la simulación se basó en dos etapas diferentes, la primera resolvió las ecuaciones de continuidad y de momento (sin trazador) alcanzando una solución de estado estacionario mediante el algoritmo SIMPLE, mientras que en la segunda etapa se introdujo la concentración del trazador experimental y se resolvió bajo un flujo transitorio mediante el algoritmo PIMPLE [36].

En el artículo 3 se utilizó un modelo tridimensional para un flujo constante incompresible turbulento en dos software, los cuales son OpenFOAM y ANSYS fluent en un reactor tubular idealizado y un reactor anular real, también se realizó la modelización del test de trazadores, en donde se utiliza agua con azul de metileno como trazador, se asumió que los fluidos son newtonianos, incompresibles e isotérmicos, con propiedades físicas constantes (agua a 25°C), en el caso de OpenFOAM, el solucionador utilizado es simpleFoam, el cual es usado para flujos turbulentos incompresibles, sin embargo el tipo de turbulencia puede desactivarse para permitir un modelado de flujo laminar.

También se realizó la modelización del transporte de especies, en donde se busca reproducir el comportamiento del transporte del trazador utilizando como solucionador ScalarTransportFoam del paquete OpenFOAM [37].

En la referencia número 4, se estudió la hidrodinámica de reactores de flujos multifásicos mediante el uso de una aproximación Euleriana-Lagrangiana, en donde se encuentra una fase continua y una fase dispersa, la fase continua, se estableció como agua residual con comportamiento de fluido newtoniano, con régimen laminar a temperatura constante, constituyéndose como la fase Euleriana del sistema, la cual se modeló mediante el método CFD, y cuyo algoritmo de solución fue SIMPLE para la resolución de las ecuaciones [38].

Por otra parte, en el artículo 5 se realizó una simulación tridimensional CFD en estado estacionario para un digester anaerobio, con el propósito de visualizar los perfiles de flujo y velocidad dentro del digester e identificar las posibles zonas muertas [39]. El modelo se desarrolló en el software comercial Star CCM+ y se empleó el modelo k- ϵ , el cual se basa en las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta (k) y el rango de disipación (ϵ).

Finalmente, la referencia 6 menciona la importancia de validar los modelos CFD para la predicción del comportamiento del flujo de los sistemas, con el fin de proporcionar resultados precisos y fiables, esta es la razón por la que el modelo de CFD debe ser validado con el RTD obtenido por el experimento del trazador [40] y viceversa.

Los aspectos más relevantes de los artículos anteriormente mencionados se resumen en la siguiente tabla:

Tabla 3

Información de relevancia en artículos.

# Referencia	Fluido	Clasificación del fluido	Régimen	Trazador	Solucionador
1	Agua limpia	Newtoniano, incompresible	Turbulento	Cloruro de sodio	SIMPLE Y PIMPLE
2	Agua limpia	Newtoniano, incompresible	Turbulento	Cloruro de sodio	SIMPLE Y PIMPLE
3	Agua	Newtoniano, incompresible e isotérmico	Laminar	Azul de metileno	SIMPLE
4	Agua residual	Newtoniano, incompresible	Laminar	NA	SIMPLE
5	Agua residual	Newtoniano, incompresible	Turbulento	NA	ND
6	Agua	Newtoniano, incompresible	Turbulento	NA	ND

ND: No definido

NA: No aplica

Nota. La tabla contiene la información correspondiente al tipo de fluido, su clasificación, el tipo de régimen, el trazador y el solucionador utilizado en cada uno de los experimentos realizados en los artículos seleccionados.

La información consignada en la tabla 3, se utilizó para facilitar la selección del modelo a utilizar y del solucionador, en donde la clasificación del tipo de fluido es uno de los

aspectos más importantes a tener en cuenta, la cual se hace de acuerdo a la velocidad del flujo, sus cambios de densidad respecto al tiempo, el comportamiento de la viscosidad con respecto al gradiente de velocidad, la magnitud y la dirección de la velocidad del fluido.

También se tuvo en cuenta el trazador utilizado en cada uno de los experimentos de los casos anteriormente mencionados.

3.1.2. Resultados revisión bibliográfica de trabajos desarrollados por la UAN con reactores ASTBR

Por medio de la UAN fue posible recopilar una serie de tesis que permitieron definir aspectos, parámetros y dimensiones del reactor, como se representa en la tabla 4.

Tabla 4

Revisión bibliográfica estudios UAN.

#Referencia	Año de publicación en línea	Título
1	2020	Desarrollo de una propuesta para la producción de biogás en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) para la vereda Calderón, Puerto Boyacá.
2	2020	Evaluación de la producción de biogás en un reactor metanogénico escalonado (RME) usando cenizas de cascarilla de arroz como material adsorbente para diferentes cargas orgánicas (OLR).
3	2018	Evaluación de la producción de biogás en sistemas de dos etapas usando un reactor anaerobio de lecho fijo estructurado (ASTBR) y reactor metanogénico escalonado (RME) alimentado con licor de pentosas.
4	2018	Evaluación de la producción de metano en un reactor escalonado con carbón activado en polvo y en un reactor de lecho fijo estructurado utilizando el hidrolizado de bagazo de caña como sustrato.

Nota. La tabla contiene los trabajos de grado realizados en conjunto con la UAN, además se organizó según el año de publicación.

A partir de la revisión de los estudios realizados por la UAN (tabla 4), se seleccionó el reactor a escala laboratorio más reciente (referencia 1), con el fin de poder validar el comportamiento hidrodinámico, ya que al tener los resultados del ensayo de trazadores, se puede establecer un estudio comparativo entre ambos métodos, además con base a este reactor la UAN junto a la empresa TGI planean hacer el escalado y posteriormente una implementación del sistema en la vereda Calderón, Puerto Boyacá.

Cabe mencionar que el ensayo de trazadores en el laboratorio se hizo de acuerdo al método pulso - respuesta, que consiste en la inyección de una sustancia inerte dentro del reactor (pulso) para que realice el recorrido dentro del mismo y en cuanto este sale del reactor pueda ser detectado con ayuda de algún sensor o equipo capaz de reconocer la presencia del trazador (respuesta) [41].

De igual forma, en la tabla 5 se expone los aspectos que se tomaron en cuenta para la elaboración del trabajo.

Tabla 5

Aspectos destacados revisión bibliográfica estudios UAN.

# Referencia	Reactor	Volumen	Aspecto
1	ASTBR	3 L	Dimensiones, geometría del reactor y datos hidrodinámica del reactor.
2	UASB (RME: reactor metanogénico)	4,12 L	Metodología ensayo de trazadores.
3	ASTBR	2,3 L	Geometría y metodología ensayo de trazadores.
4	ASTBR	3 L	Metodología ensayo de trazadores.

Nota. La tabla contiene el tipo de reactor, la capacidad y la información relevante que se tomó de la revisión bibliográfica de los estudios de la UAN.

Como se mencionó anteriormente las dimensiones del reactor se definen a partir de la referencia 1, pero en dicho estudio se construyeron dos reactores ASTBR [42], así que con base a los datos obtenidos en el ensayo de trazadores se define que las dimensiones a proyectar corresponden al reactor 1, ya que se presentó una menor variabilidad en los

datos obtenidos en el ensayo, además con dichas dimensiones se realizó el estudio de escalado del reactor que se planea posteriormente implementar.

A continuación, se proporciona la información acerca de las dimensiones (tabla 6) y geometría del reactor (figura 4) [43].

Tabla 6

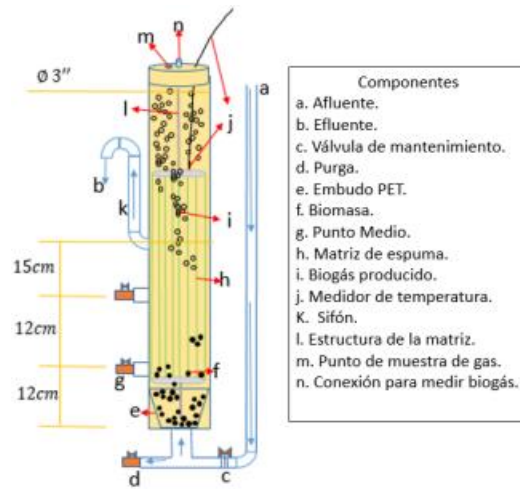
Dimensiones reactor ASTBR.

Dimensiones	Reactor ASTBR
Diámetro nominal (in)	3
Volumen total (L)	3,36
Volumen efectivo (L)	2,67
Área externa (cm ²)	53,52
Diámetro externo (cm)	8,26
Diámetro interno (cm)	7,9
Altura (cm)	68,5
Lecho estructurado	
Espumas (No)	9
Altura (cm)	55,12
Diámetro (cm)	7,19

Nota. La tabla contiene los valores de las dimensiones del reactor y de su lecho estructurado construido a escala laboratorio. Tomado y adaptado de J. E. Navas Salas y J. F. Peña Amaya, “Desarrollo de una propuesta para la producción de biogás en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) para la vereda Calderón, Puerto Boyacá,” Fundación Universidad de América, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://hdl.handle.net/20.500.11839/8125>

Figura 8

Reactor ASTBR seleccionado.



Nota. Esta figura representa el diseño del reactor ASTBR a construir con sus respectivas partes. Tomada de F. Otálora, “Evaluación de la producción de Biogás en sistemas de dos etapas usando un reactor anaerobio de lecho fijo estructurado (ASTBR) y reactor metanogénico escalonado (RME) alimentado con licor de pentosas.,” Universidad Federal De Ouro Preto, 2018. [En línea]. Disponible en: <http://www.monografias.ufop.br/handle/35400000/1536>

3.1.3. Selección del modelo de flujo y fluido

A partir de las revisiones previas y teniendo en cuenta que el fluido, se asumió las siguientes características que lo definen y nos permiten seleccionar un adecuado modelo.

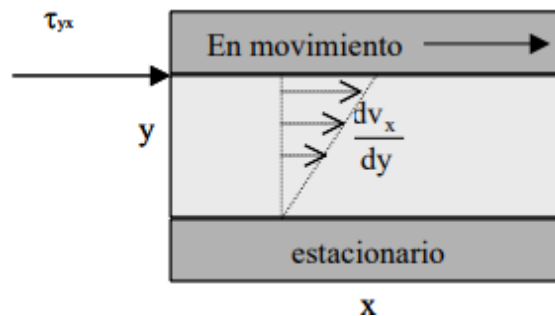
Tipo de fluido. Se definió el tipo de fluido de la siguiente manera:

3.1.3.a. Newtoniano. Se definió flujo newtoniano, porque el ensayo original se hizo con agua limpia, este fluido se caracteriza por tener viscosidad constante a temperatura y presión constantes y por la independencia de la viscosidad en el tiempo.

Por lo tanto, la viscosidad de un fluido newtoniano es igual al esfuerzo cortante dividido por la velocidad de deformación y dicha relación entre el esfuerzo y la velocidad de deformación es una línea recta (figura 9) [44] y se expresa mediante la ley de Newton de viscosidad.

Figura 9

Perfil de velocidades en un flujo newtoniano.



Nota. La figura representa el comportamiento de un fluido newtoniano con respecto a un esfuerzo cortante. Tomado de Martin, R. Salcedo, y R. Font, MECÁNICA DE FLUIDOS: Tema1, Flujo interno de fluidos incompresibles y compresibles. Universidad de Alicante. p.13, [en línea]. Disponible en: https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/20299/1/tema1_Flujo%20interno.pdf

3.1.4. Tipo de flujo

Se definió el tipo del flujo de la siguiente manera:

3.1.4.a. Laminar. Se asumió flujo laminar, porque de esta manera se permite el estudio de la hidrodinámica del biorreactor como si este fuera una tubería, adicionalmente se

conoce que el funcionamiento de reactores tubulares a velocidades de flujo elevadas puede requerir el uso de recipientes largos para garantizar que se proporciona suficiente tiempo de retención para la mezcla de reacción. De lo contrario, se obtienen valores de conversión bajos [45]. Para evitar esto, la operación se realiza frecuentemente a velocidades de flujo bajas, que se representan en un número de Reynolds ≤ 2000 .

Las ecuaciones de Reynolds tienen la misma forma que las ecuaciones de Navier-Stokes, pero aquí Reynolds incluye unos esfuerzos aparentes determinados por los valores medios de los productos triples de las fluctuaciones de velocidad [46].

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} \bar{v}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{v}_i \bar{v}_j) \right) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{P} + \rho \nu \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \bar{v}_i - \rho \frac{\partial}{\partial x_j} (\delta v_i \delta v_j) \quad \text{Ec.15}$$

En donde \bar{v}_i y v_j corresponden al valor medio de la velocidad y $\delta v_i \delta v_j$ corresponden a las desviaciones de la velocidad.

Por otro lado, Evangelina González en su estudio “Formación y desarrollo de Biofilms: su impacto en los sistemas de abastecimiento y distribución de agua potable” establece que se puede considerar, que, en la red de distribución, las zonas de bajas velocidades de flujo son más propensas a la formación de biopelícula [48]. Debido a que el biorreactor tiene un lecho estructurado en donde se quiere almacenar biomasa, si el flujo se establece como turbulento puede haber un desprendimiento de la biopelícula por parte del cizallamiento generado por las turbulencias, impidiendo de esta manera también el crecimiento de esta.

Finalmente, se realizó el cálculo del número de Reynolds mediante la Ec. 17, para corroborar que el valor estuviera dentro de los límites del rango del flujo laminar, a previo esto se realizó el cálculo de la velocidad (Ec.16) y se obtuvo el siguiente resultado:

$$v = \frac{Q}{A} \quad \text{Ec.16}$$

$$Re = \frac{\rho \cdot D \cdot v}{\mu} \quad \text{Ec.17}$$

Tabla 7

Resultados velocidad y Reynolds.

Parámetro	Valor
Caudal (m ³ /s)	6x10 ⁻⁸
Área (m ²)	1.88x10 ⁻⁴
Densidad (kg/m ³)	1000
Diámetro (m)	0,0155
Viscosidad (kg/m s)	0,001003
Velocidad (m/s)	0,000318
Reynolds	4,91

Nota. La tabla contiene los valores obtenidos a partir de los datos experimentales para cada uno de los parámetros de estudio.

3.1.4.b. Incompresible. El agua al ser un fluido en estado líquido, donde sus cambios de densidad son poco importantes es un fluido incompresible, es decir, la cantidad de volumen y la cantidad de masa permanecerán iguales, aún bajo presión.

Las ecuaciones de Navier Stokes para un flujo incompresible en coordenadas cartesianas son las siguientes:

Ecuación de conservación de masa o de continuidad:

$$(m) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial y} = 0 \quad \text{Ec.18}$$

Ecuaciones de momento:

$$(M_x) = \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w u)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} [(\mu + \mu_T) \frac{\partial u}{\partial x}] + \frac{\partial}{\partial y} [(\mu + \mu_T) \frac{\partial u}{\partial y}] + \frac{\partial}{\partial z} [(\mu + \mu_T) \frac{\partial u}{\partial z}] + S_u = -\frac{\partial p}{\partial x} + S'_u ; \{\text{para } x, y\} \quad \text{Ec.19}$$

3.1.4.c. Unidireccional. El flujo en una tubería y por lo tanto en el biorreactor, se considera unidimensional cuando se producen variaciones de presión y velocidad a lo largo de la longitud de la tubería, pero se supone que cualquier variación a lo largo de la sección transversal es insignificante, por consiguiente, se asume flujo unidireccional, ya que de esta manera, se define que la velocidad tiene únicamente un componente, el cual puede ser X, Y o Z.

Definiendo la velocidad en el componente Y, en la cual se desarrolla el perfil de velocidad en un modelo bidimensional de flujo ascendente, la ecuación de continuidad queda de la siguiente forma:

$$\frac{\partial y}{\partial y} = 0 \quad \text{Ec.20}$$

A pesar de que los cambios de velocidad en u y w son iguales a 0, la velocidad (v) no cambia con respecto a la dirección Y, es por esta razón que v sólo puede ser función de X y Z, es decir w (X, Z).

En cuanto a las ecuaciones de momento se tiene:

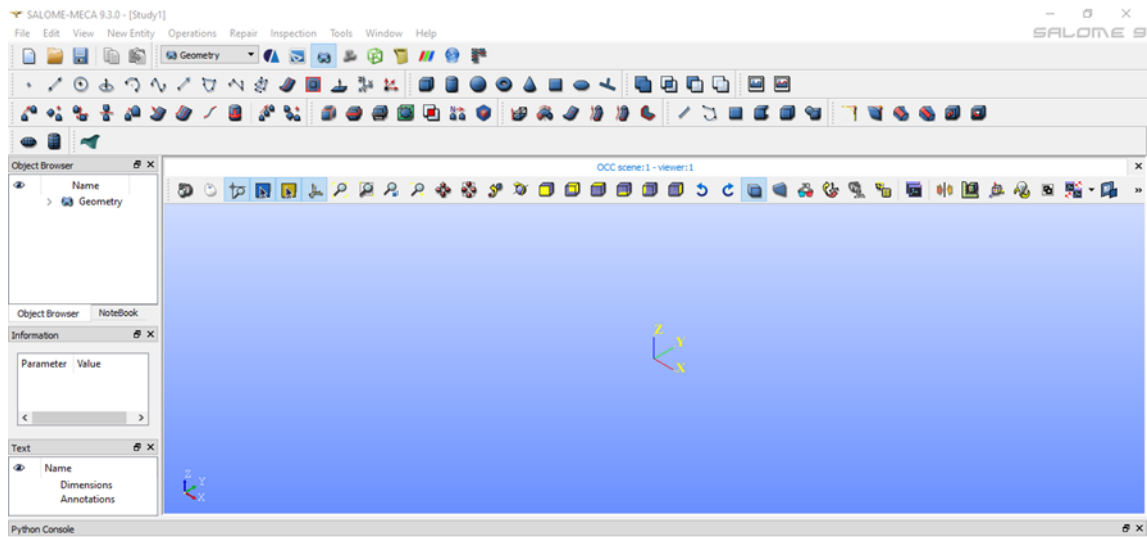
$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} \quad \text{Ec.21}$$

3.2. Desarrollo del modelo hidrodinámico por medio de la metodología CFD del reactor ASTBR

En primera instancia se seleccionó el software Salome Meca, el cual pertenece al dominio público y está orientado a la realización del pre proceso (geometría y mallado) y post proceso de cálculos numéricos. Al ser una aplicación libre se implementa en ella diferentes módulos, en este caso se destaca el módulo de geometría (figura 10) que está construido para poder realizar la definición geométrica de casos de estudio, además incluye diferentes herramientas para la creación y edición de elementos básicos y complejos de modelos de CAD (diseño asistido por computador) [49]. Una vez seleccionado el software se realizó un estudio sobre el entorno y una serie de tutoriales que permitieron emplearlo de manera correcta.

Figura 10

Módulo geometría Salomé Meca.

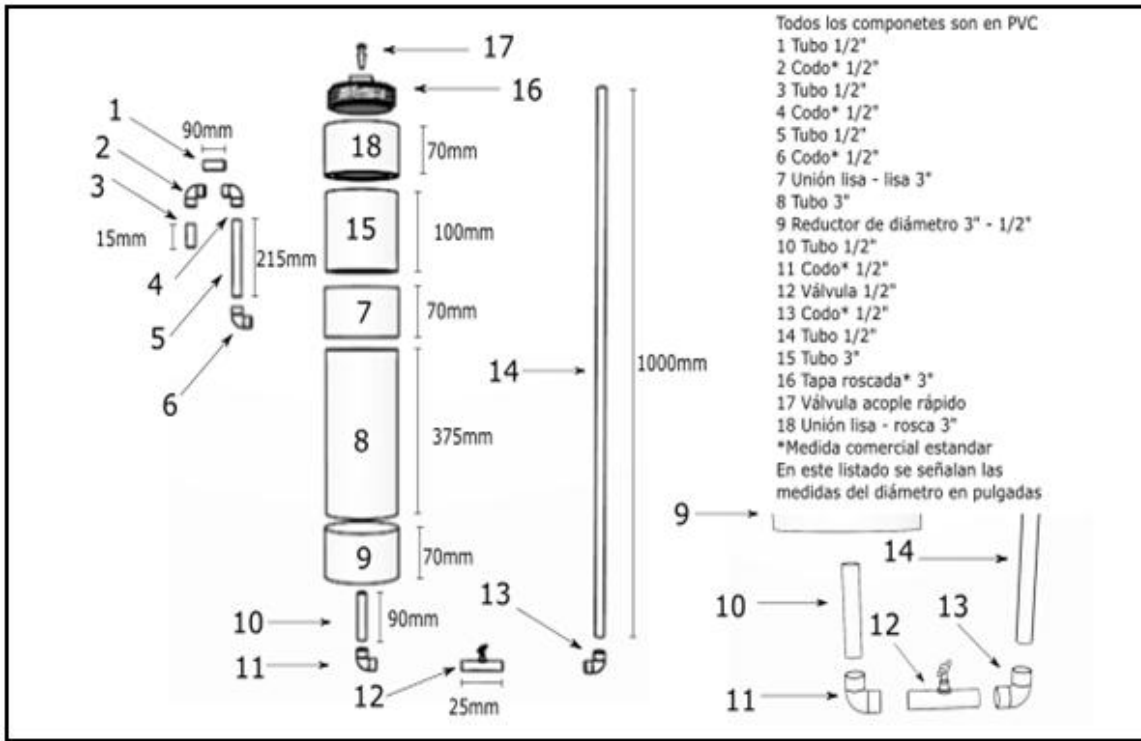


Nota. La figura representa el módulo de geometría de Salomé Meca y sus respectivas herramientas.

Para realizar una correcta proyección se tuvo en cuenta el plano (figura 11) con el cual se elaboró el reactor a nivel laboratorio, cabe mencionar que no se incluyeron todos los detalles de los planos, ya que muchos de estos no intervienen en el estudio hidrodinámico y por ende son irrelevantes en la simulación, además su incorporación únicamente aumentaría los costos computacionales.

Figura 11

Dimensiones reactor.



Nota. La figura representa el plano del reactor con sus respectivas dimensiones. Tomado de J. E. Navas Salas y J. F. Peña Amaya, "Desarrollo de una propuesta para la producción de biogás en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) para la vereda Calderón, Puerto Boyacá," Fundación Universidad de América, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://hdl.handle.net/20.500.11839/8125>

Antes de construir el reactor se definió el tipo de mallado, ya que de esto depende la geometría, así que se optó por un tipo 2D uniforme, dado que este tipo de mallado permite una iteración y convergencia más rápida, teniendo en cuenta lo anterior, la geometría migra de un cilindro a un cubo y a pesar de que solo se tiene en cuenta dos dimensiones, OpenFOAM asimila este tipo de mallado en una geometría 3D.

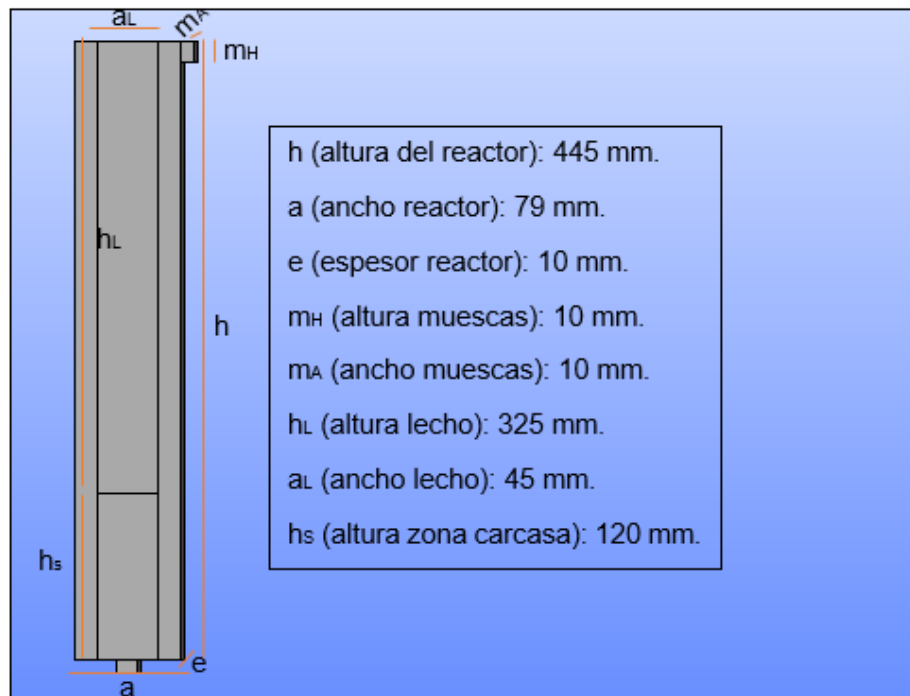
Cabe mencionar, que solo se tuvo en cuenta la zona donde el fluido (agua) transita, por lo que se estableció la longitud del reactor en 445 mm, que involucra la entrada y salida del reactor, para estos últimos se realizaron unas muescas de 10 mm.

3.2.1. Fase I: Carcasa reactor

3.2.1.a. Proyección geometría. Antes de iniciar la construcción de la geometría, se realizó un plano (Figura 12), el cual facilitó la proyección.

Figura 12

Plano reactor.

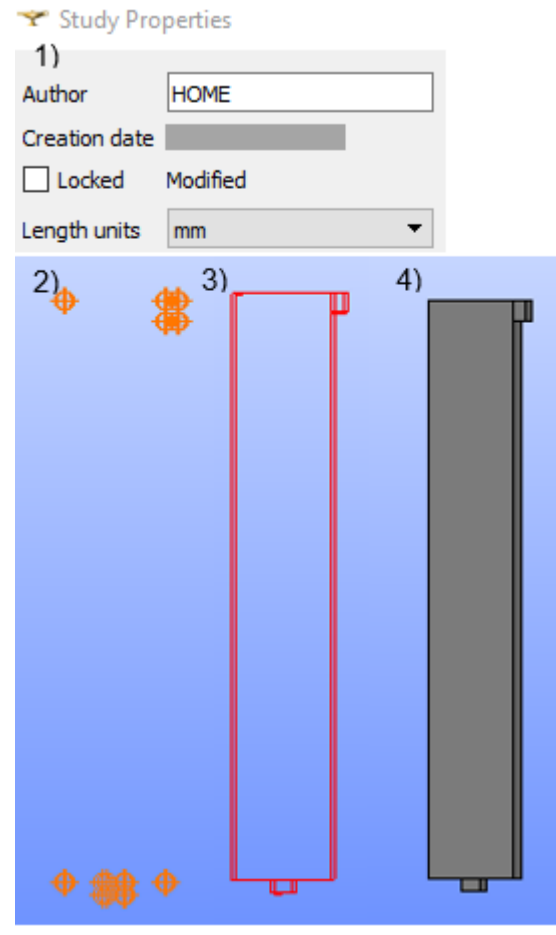


Nota. La figura representa el plano del reactor a proyectar, además contiene las dimensiones y adaptaciones asumidas.

Como se observa en la figura 12, se tomó las dimensiones correspondientes al diámetro interno, ya que por ahí fluye el fluido, además se fijó unidades de longitud en mm, las cuales se especificaron en el programa Salome Meca. Posteriormente, se empezó con la proyección de los vértices de la figura en New Entity>Basic, luego estos se unieron y se generaron líneas, y a partir de un conjunto de 4 líneas se crearon caras, las cuales se ensamblaron creando una carcasa, que posteriormente se definió como un sólido. Para ser más claros en la metodología de la construcción del reactor, se elaboró la Figura 13 que describe lo anteriormente mencionado.

Figura 13

Metodología construcción reactor.



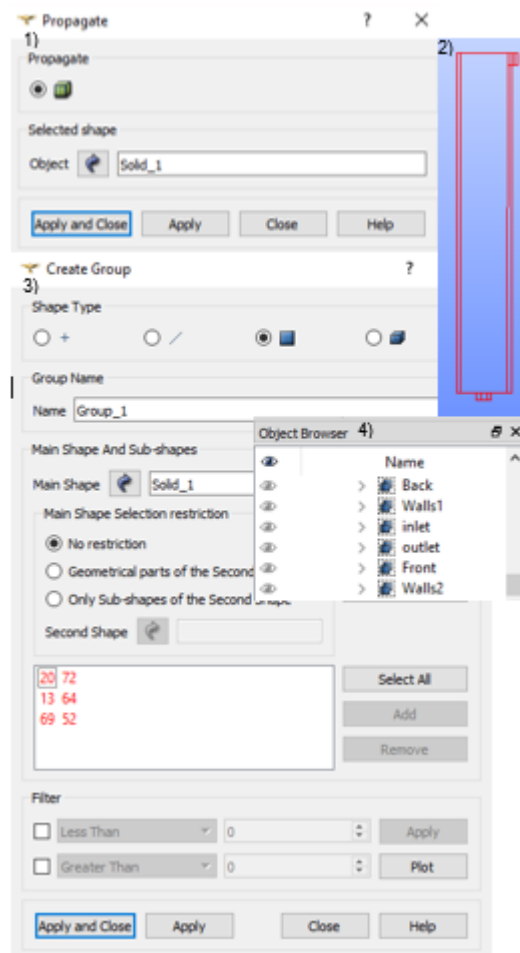
Nota. La figura se expone los pasos que requirió la construcción del reactor en Salomé Meca, siendo 1) Fijar las dimensiones del reactor, 2) Las coordenadas o vértices del reactor, 3) Segmentos del reactor y 4) Construcción del sólido (reactor).

Antes de elaborar el mallado, se definieron las zonas correspondientes a las sub mallas, esto se realizó por medio de Operation>Blocks>Propagate, el cual permite romper un sólido en conjuntos de múltiples aristas, esto con el propósito de crear una malla uniforme y fina en todas las secciones de la figura, adicionalmente se definieron los grupos de las

fronteras (Inlet, Outlet, Walls1, Walls2, Front y Back), que se toman en cuenta en el mallado y posteriormente en OpenFOAM. Al igual que en la sección anterior, se agrega la Figura 14, la cual muestra la metodología utilizada.

Figura 14

Múltiples aristas y creación de grupos.

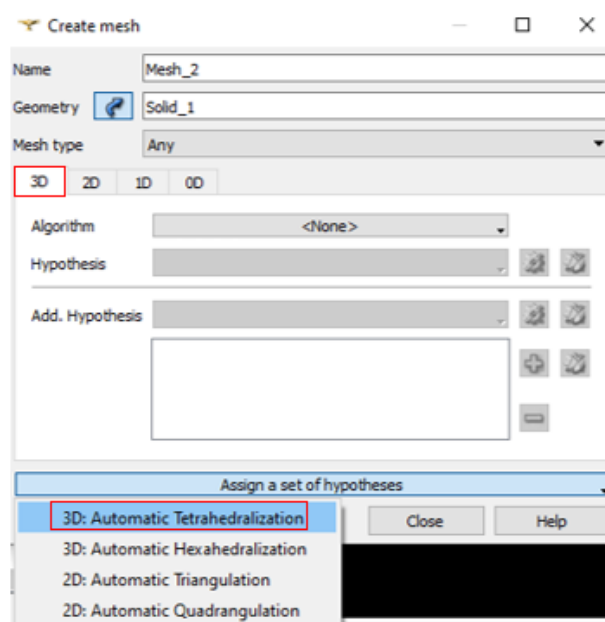


Nota. La figura representa las herramientas usadas en Salomé Meca, además incorporación de los grupos. 1) y 2) representan la herramienta Propagate, la cual genera múltiples aristas, mientras que 3) y 4) permite visualizar la creación de los grupos.

3.2.1.b. Mallado. Para el mallado se ingresó al módulo mesh, en donde a partir del sólido previamente construido se genera la malla, de este se desprenden opciones en 3D, 2D y 1D, y como se mencionó anteriormente, a pesar de que el estudio se definió como 2D, este debe ser desarrollado en Salomé como 3D para que OpenFOAM lo reconozca, así que se asigna la hipótesis de 3D Automatic: Tetrahedralization (Figura 15).

Figura 15

Módulo malla.

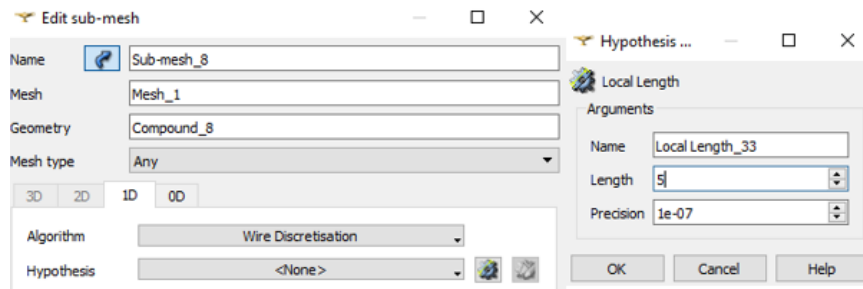


Nota. La figura representa la selección de la hipótesis de la malla y su respectiva geometría.

Posteriormente, se crean las sub mallas a partir de los conjuntos de aristas de la geometría, por tal motivo es necesario migrar dicha información al módulo de mesh con la herramienta Mesh>Create Group from Geometry, generando así 10 sub mallas, en las que definió un algoritmo de Wire Discretization, el cual divide una arista en un número de segmentos de malla, con base a esto se asignó la hipótesis Local Length, la cual establece la longitud de los segmentos, esta longitud se estableció en 5 mm en cada una de las sub mallas con una precisión de $1e^{-7}$. A continuación, se presenta la Figura 16 que ilustra el módulo de las sub mallas.

Figura 16

Módulo sub mallas.

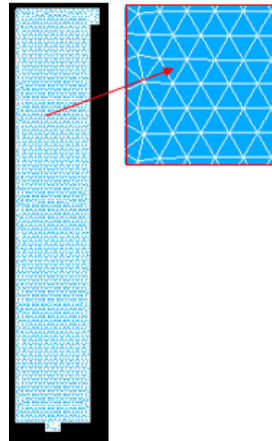


Nota. La figura representa la creación de las sub mallas y la precisión con la cual se generan.

Antes de generar la malla, se debe pasar los grupos de la geometría al mallado (Inlet, Outlet, Walls1, Walls2, Front y Back), esto se realizó con la misma opción antes mencionada, y después de esto en Mesh>Compute se creó la malla, a continuación, se proporciona la Figura 17 con la malla generada.

Figura 17

Malla generada.



Nota. La figura representa la malla tetraédrica creada.

Una vez creada la malla, se presentó una ventana emergente que proporciona el nombre, tipo, número total de nodos y elementos por separado de cada tipo (Figura 18).

Finalmente, se comprueba que no se hayan presentado errores y se exporta el archivo en File>Export en formato UNV al programa OpenFOAM.

Figura 18

Ventana emergente: Mesh computed succed.

Name		
Mesh_1		
Mesh Infos		
	Total	Linear
Nodes :	6672	
0D Elements :	0	
Balls :	0	
Edges :	480	480
Faces :	9628	9628
Triangles :	9628	9628
Quadrangles :	0	0
Polygons :	0	0
Volumes :	24490	24490
Tetrahedrons :	24490	24490

Nota. La figura representa el número total de nodos, segmentos, caras y volúmenes de la malla.

3.2.1.c. Selección del solucionador. Debido a que se tenía únicamente en cuenta la carcasa del reactor, para la selección del solucionador se tomaron en cuenta los siguientes parámetros:

- Sistema isotérmico.
- Flujo laminar.
- Flujo newtoniano.
- Flujo incompresible.
- Sistema no reactivo.
- Sistema unicomponente.
- Sistema con una sola fase.

Con base en los anteriores criterios se realizó la búsqueda en el manual de usuario de OpenFoam del solucionador que mejor se ajustara al caso de estudio.

El primer filtro realizado fue el tipo de flujo, por lo cual al elegir flujo incompresible se obtuvo como resultado los solucionadores presentados en la Tabla 8.

Tabla 8

Solucionadores para flujo incompresible.

Nombre de solucionador	Descripción
adjointOptimisationFoam	Un ciclo de optimización automatizado basado en adjuntos. Admite múltiples tipos de optimización (forma, topología, etc.)
adjointShapeOptimizationFoam	Solucionador de estado estacionario para flujo turbulento e incompresible de fluidos no newtonianos con optimización de la forma del conducto mediante la aplicación de "bloqueo" en las regiones que causan pérdida de presión según se estima utilizando una formulación adjunta.
boundaryFoam	Solucionador de estado estacionario para flujo turbulento 1D incompresible, generalmente para generar condiciones de capa límite en una entrada
icoFoam	Solucionador de estado transitorio para flujo laminar e incompresible de fluidos newtonianos.
nonNewtonianIcoFoam	Solucionador de estado transitorio para flujo transitorio para flujo laminar e incompresible de fluidos no newtonianos.
pimpleFoam	Solucionador de estado transitorio para flujo turbulento e incompresible de fluidos newtonianos en una malla en
overPimpleDyMFoam	Solucionador de estado transitorio para el flujo incompresible de fluidos newtonianos en una malla en movimiento usando el algoritmo PIMPLE (fusionado PISO-SIMPLE).
SRFPimpleFoam	Solucionador de flujo transitorio de paso de tiempo grande para flujo incompresible en un solo marco giratorio
pisoFoam	Solucionador de estado transitorio para flujo turbulento e incompresible, utilizando el algoritmo PISO.
shallowWaterFoam	Solucionador de estado transitorio para ecuaciones de aguas poco profundas no viscosas con rotación.
simpleFoam	Solucionador de estado estacionario para flujos turbulentos incompresibles.
overSimpleFoam	Solucionador de estado estacionario para flujos incompresibles con modelado de turbulencia.
porousSimpleFoam	Solucionador de estado estacionario para flujo turbulento incompresible con tratamiento de porosidad implícito o explícito y soporte para múltiples marcos de referencia (MRF).
SRFSimpleFoam	Solucionador de estado estacionario para flujo turbulento e incompresible de fluidos no newtonianos en un solo marco

Nota. La tabla contiene el nombre de los solucionadores de flujo incompresible en OpenFOAM y su respectiva descripción y usos. Tomado y modificado de: OpenFOAM, "The open source CFD toolbox: A.1 Standard solvers" 2018. [En línea]. Disponible en: <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide/standard-solvers.php>

A partir de la Tabla 8 se realizó un análisis de los solucionadores disponibles según su descripción, por lo cual se optó por el solucionador icoFoam con el fin de obtener el mejor resultado para el caso de estudio.

3.2.1.d. Descripción de icoFoam. Como se mencionó anteriormente, icoFoam es un solucionador de estado transitorio, lo que quiere decir que inicialmente el tanque está vacío, además se desarrolló para fluidos newtonianos, para flujo incompresible y laminar, el cual utiliza el algoritmo PISO, para solucionar las ecuaciones de continuidad y de momento, las cuales se describen a continuación:

Ecuación de continuidad. $\nabla \cdot u = 0$ Ec.22

Ecuación de momento. $\frac{\partial}{\partial t}(u) + \nabla(u \cdot u) - \nabla(v \cdot \nabla u) = -\nabla p$ Ec.23

u: velocidad (m/s).

p: presión cinemática (m²/s).

Dentro de las restricciones de este solucionador, se encuentra aquella definida por la condición del número de Courant, la cual significa que el dominio de dependencia de un punto en un esquema en diferencias explícitas (que está formado por los puntos del espacio que intervienen en el esquema) debe comprender al dominio de dependencia para la ecuación diferencial, y está dada por la siguiente ecuación [50]:

$$C = \frac{|u \pm c| \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \text{ Ec.24}$$

Donde.

C: número de Courant.

$|u \pm c|$: es la velocidad de propagación de una onda, o velocidad de transmisión de la información.

Δt : es el intervalo de tiempo asignado.

Δx : es el intervalo de longitud de cada una de las celdas dentro del dominio de control.

Este solucionador consta de tres subdirectorios, los cuales son:

- Subdirectorio 0: allí se encuentran todas las condiciones iniciales de las variables a analizar en el modelo, junto a las condiciones de frontera del volumen de control.
- Subdirectorio constant: Al ser un solucionador que no incluye transporte de energía ni calor, se ubican únicamente las propiedades de transporte establecidas, en donde se relaciona la viscosidad con la velocidad de deformación [51].
- Subdirectorio system: Sirve para configurar los parámetros asociados con el propio procedimiento de solución. Contiene al menos los 3 archivos siguientes: controlDict donde se establecen los parámetros de control de ejecución, incluida la hora de inicio / finalización, el paso de tiempo y los parámetros para la salida de datos; fvSchemes donde se estipulan los esquemas de discretización usados en la solución pueden seleccionarse en tiempo de ejecución; y fvSolution donde se establecen los solucionadores de ecuaciones, las tolerancias y otros controles de algoritmo para la ejecución [52].

3.2.1.e. Revisión y ejecución de caso ejemplo-base. Con el fin de facilitar la simulación del caso particular, en OpenFoam se usa frecuentemente la modificación de casos existentes para evitar la creación y formulación de nuevas hojas de cálculo, lo cual requiere de un alto grado de conocimiento en programación y no es considerado esencial para obtener un resultado satisfactorio.

Por esta razón se realizó una revisión de los tutoriales ubicados en el solucionador icoFoam y se escogió el que presentaba mayor similitud al caso de estudio propio. El caso base seleccionado fue “cavity”, en el cual se involucra un flujo isotérmico e incompresible en un dominio cuadrado bidimensional [53], como se muestra en el anexo 1.

3.2.1.f. Ejecución caso de estudio. A partir del caso anterior (Anexo A), se realizaron los ajustes necesarios para el reactor ASTBR, dentro de los cuales se destacan las siguientes modificaciones:

- Importación malla desde Salomé Meca. Como se mencionó anteriormente, la importación se realizó utilizando el formato .UNV y el comando ideasUnvToFoam Mesh_13.unv, que incluye el archivo correspondiente a la malla creada en Salomé

```
$ ideasUnvToFoam Mesh_13.unv
```


Debido a que la malla se elaboró en unidades de milímetros y openFoam trabaja en unidades del sistema internacional, se realizó el cambio de escala mediante el comando transformPoints.

```
$ transformPoints -scale '(0.001 0.001 0.001)'
```

Por último, se utilizó el comando checkMesh para comprobar que no hubiera errores en el mallado y se crearán los grupos definidos como condiciones de fronteras de forma correcta.

- Definición de condiciones de contorno y hojas de cálculo. Una vez importado el archivo de la malla, se creó automáticamente la carpeta polyMesh en el subdirectorío constant, allí se ubicaron todas las hojas de cálculo correspondientes a la discretización manteniendo los nombres de las condiciones de frontera asignados en Salome (Inlet, Outlet, Walls1, Walls2, Front y Back). La única modificación realizada en esta carpeta se hizo en la hoja de cálculo “boundary”, con el fin de asignar el tipo de frontera adecuado para cada uno de los grupos, en el caso de las paredes (Walls1 y Walls2) se definió como “wall”, ya que en estas zonas se debe restringir el paso del fluido, mientras que entrada y salida (inlet y outlet) permanecieron como “patch” la cual es la condición básica de frontera, por último se establecieron la parte trasera y frontal del reactor (Front y Back) como “empty” ya que son zonas no necesarias para la simulación.

Para la carpeta 0, se hicieron modificaciones en las hojas de cálculo correspondientes a la presión y a la velocidad, como se muestra en la siguiente figura.

Figura 19

Hoja de cálculo de velocidad caso reactor.

```
boundaryField
{
    inlet
    {
        type            fixedValue;
        value            uniform (0 0.0023113 0);
    }
    outlet
    {
        type            zeroGradient;
    }
    Walls1
    {
        type            noSlip;
    }
    Walls2
    {
        type            noSlip;
    }
    Front
    {
        type            empty;
    }
    Back
    {
        type            empty;
    }
}
```

Nota. La figura contiene la hoja de cálculo de velocidad, en donde se asigna el tipo de parche a cada una de las condiciones de frontera establecidas.

En la figura 19, se estableció la velocidad en unidades de m/s según la tabla 1; con un valor uniforme de 0 para el campo interno inicial, en cuanto a la entrada se modificó el valor de la velocidad en el eje Y, siendo este $2.311 \text{ E-}04 \text{ m/s}$ (Ec 16), la salida se definió como zeroGradient, con el fin de obtener un valor a medida que el modelo converge, por último la parte frontal y trasera se establecieron como empty al ser una simulación en dos dimensiones.

Figura 20

Hoja de cálculo de presión cinemática caso reactor.

```
boundaryField
{
  inlet
  {
    type      zeroGradient;
  }

  outlet
  {
    type      fixedValue;
    value     uniform 0;
  }

  Walls1
  {
    type      zeroGradient;
  }
  Walls2
  {
    type      zeroGradient;
  }

  Front
  {
    type      empty;
  }
  Back
  {
    type      empty;
  }
}
```

Nota. La figura contiene la hoja de cálculo de presión cinemática, en donde se asigna el tipo de parche y valor a cada una de las condiciones de frontera establecidas.

En cuanto a la presión cinemática (Figura 20), según la tabla 1 con unidades de m^2/s^2 , se evidenciaron modificaciones en las condiciones de frontera, se estableció zeroGradient, para las paredes y la entrada (Walls 1, Walls 2 e inlet) con el fin de extrapolar la cantidad al parche desde el valor de celda más cercano [54], la condición de salida tiene un valor fijo de 0 (m^2/s^2), ya que el modelo matemático toma este valor como referencia para calcular la presión a la entrada y las fronteras trasera y delantera, se establecen como “empty” por el tipo de parche.

En la carpeta constant se realizó el cambio en la hoja de cálculo transportProperties (Figura 21), ajustando el valor de la viscosidad cinemática correspondiente al agua a temperatura de 20°C, como se muestra a continuación:

Figura 21

Hoja de cálculo de propiedades de transporte.

```
FoamFile
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        dictionary;
  location     "constant";
  object       transportProperties;
}
// ***** //
nu             [0 2 -1 0 0 0] 1.004e-06;
```

Nota. La figura contiene el valor asignado de viscosidad cinemática en la hoja de cálculo de propiedades de transporte.

Como se muestra en la figura 21, se asignó un valor de $1,004e^{-6}$ m²/s para la viscosidad cinemática del agua en el modelo. Posteriormente, se procedió a realizar las modificaciones en la carpeta system, que contiene la hoja de cálculo controlDict (Figura 22), en la cual se modificó el tiempo inicial y final, también se realizaron cambios en los saltos temporales y los intervalos de escritura. A continuación, se observa los cambios realizados.

Figura 22

Hoja de cálculo controlDict.

```
startFrom      startTime;
startTime      0;
stopAt         endTime;
endTime        10;
deltaT         0.005;
writeControl   timeStep;
writeInterval  10;
purgeWrite     0;
writeFormat    ascii;
writePrecision 6;
writeCompression off;
timeFormat     general;
timePrecision  6;
runTimeModifiable true;
```

Nota. La figura contiene la hoja de cálculo de controlDict para la fase I, en donde se asignan los valores que proporcionan el control de la simulación.

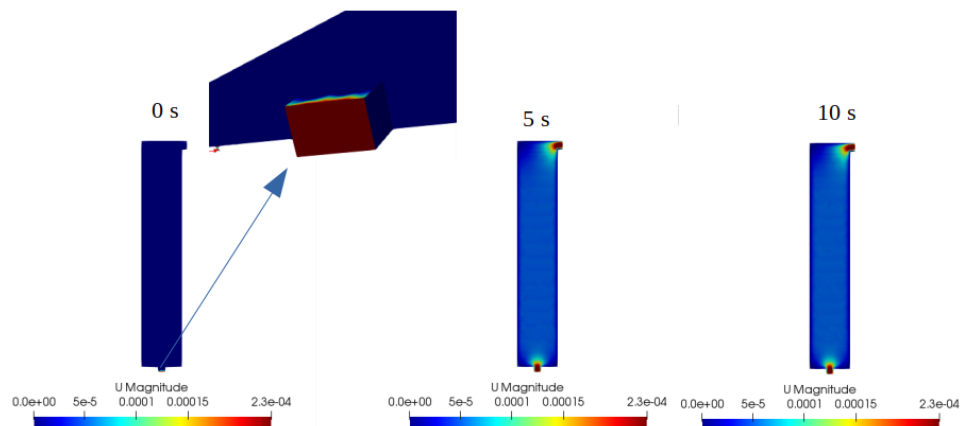
- Post procesamiento. Se corroboró la información de todas las hojas que componen la carpeta del caso y se ejecutó la simulación con el comando icoFoam, la cual duro aproximadamente 2 minutos.

Una vez finalizada la simulación, se hizo uso del comando paraFoam, el cual despliega la ventana del visualizador paraView que permite observar los resultados de manera gráfica (Figura 23 y 24), a continuación, se presentan los resultados obtenidos en las variables de velocidad y presión cinemática.

En la Figura 22, se estableció como tiempo de inicio y final 0s y 10s, respectivamente, dado que se deseaba observar el comportamiento del flujo hasta alcanzar la estabilidad, además se tomó un deltaT de 0.005 que corresponde a la longitud de los segmentos de la malla y una escritura de intervalo de 10, con el fin de obtener información de las variables en lapsos cercanos.

Figura 23

Perfil de velocidad del reactor fase I.



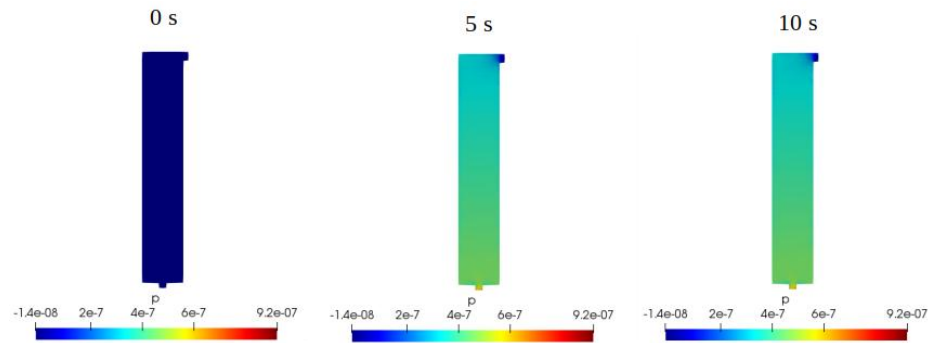
Nota. La figura representa el perfil de velocidad obtenido para el reactor ASTBR sin lecho estructurado en un lapso de 10 segundos.

A partir de la figura 23, el análisis de la velocidad se hizo teniendo en cuenta tres intervalos de tiempo, los cuales son 0, 5 y 10 segundos. En el tiempo 0, se observa una zona roja, correspondiente a la velocidad de entrada asignada en el subdirectorio 0; también se determinó que las zonas de las esquinas y las paredes tenían un valor de velocidad de 0 m/s confirmando un perfil de campo de velocidad parabólico, por último,

se pudo observar que en la entrada y salida se encuentra el máximo valor de velocidad, ya que son las zonas con menor área. En cuanto a los intervalos de 5 y 10 segundos se evidenció estabilidad en el flujo y un perfil de velocidad constante e invariable.

Figura 24

Perfil de presión cinemática del reactor fase I.



Nota. La figura representa el perfil de presión obtenido para el reactor ASTBR sin lecho estructurado en un lapso de 10 segundos

En la figura 24, se observa los resultados obtenidos para un intervalo de 10 segundos, se puede evidenciar que a partir de 5 segundos la presión presenta un comportamiento constante. En el tiempo 0 se observa que el reactor tiene un valor uniforme igual a 0, asignado en la hoja de cálculo “p”, sin embargo durante la ejecución de la simulación este valor es diferente debido al proceso iterativo, cuyo fin es obtener la presión a la entrada partiendo desde un valor fijo de presión a la salida de $0 \text{ m}^2/\text{s}^2$, y creando el perfil de presión del reactor; se observó también que la presión disminuye a medida que el líquido entra al tanque y cuando el tanque está completamente lleno, se mantiene el perfil obtenido en la Figura 30 en el tiempo de 10s.

3.2.2.Fase II: Reactor con lecho

3.2.2.a. Geometría y mallado. A pesar de la incorporación del lecho en esta fase, la geometría y el mallado se mantienen de acuerdo a la figura 12 y 17, ya que openFoam permite agregar esta condición bajo una hoja de cálculo llamada topoSetDict, la cual será explicada posteriormente.

3.2.2.b. Selección del solucionador. Para la selección del solucionador se tomaron en cuenta los siguientes parámetros:

- Sistema isotérmico.
- Flujo laminar.
- Flujo newtoniano.
- Flujo incompresible.
- Sistema no reactivo.
- Sistema unicomponente.
- Medio poroso. Como puede observarse, a diferencia de la fase 1, se agregó un medio poroso, manteniéndose así las demás condiciones del sistema, la selección del solucionador se hizo a partir de la tabla 8.

Posteriormente al análisis de las descripciones en la tabla anteriormente mencionada, y en busca de un solucionador en estado estable (debido a que el test de trazadores se realizó cuando el agua se encontraba fluyendo por todo el reactor a una velocidad constante), que permitiera la implementación del lecho fijo, se optó por el solucionador simpleFoam.

3.2.2.c. Descripción de simpleFoam. Este solucionador de flujo estacionario y utilizado para régimen tanto laminar como turbulento utiliza el algoritmo SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations) cuyo objetivo es resolver la Ec.18 y la siguiente ecuación de momento que se representa a continuación [55]:

$$\nabla \cdot (u \otimes u) - \nabla \cdot R = -\nabla p + S_i \quad \text{Ec.25}$$

Donde.

- u = velocidad.
- p = presión cinemática.
- R = tensor de estrés.
- S_i = recurso de momento.

Los dos puntos claves de este algoritmo son:

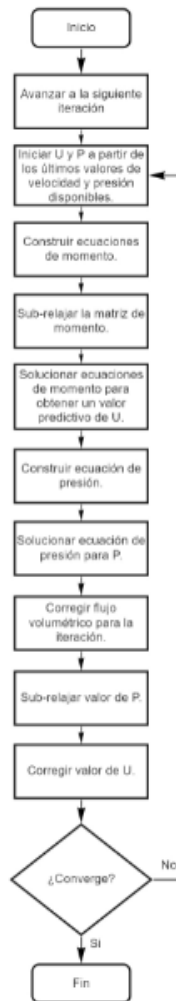
- Derivar una ecuación para la presión desde las ecuaciones de continuidad y momento, correspondientes a la Ec.18 y Ec.25, respectivamente.
- Derivar un corrector para el campo de velocidad para satisfacer la ecuación de continuidad, correspondiente a la Ec. 18.

Con respecto al primer punto clave y debido a que el término de convección en las ecuaciones de momento no es lineal no se puede utilizar una ecuación de estado para computar la presión [56].

A continuación, se definió la secuencia de este algoritmo de la siguiente manera [57].

Figura 25

Diagrama de flujo: algoritmo simple.



Nota. La figura representa en manera de diagrama del flujo el algoritmo SIMPLE, utilizado en el solver simpleFoam.

3.2.2.d. Revisión y ejecución de caso ejemplo – base. De la misma manera que en la fase I, se seleccionó el ejemplo con mayor similitud al caso de estudio, el cual fue porousBlockage, que al igual que en el caso de estudio, presenta una superficie porosa, la cual se define por las hojas de cálculo adicionales, que son: topoSetDict en el subdirectorio system y fvOptions en la carpeta constant, que se ilustran en el Anexo 2.

3.2.2.e. Ejecución caso de estudio. Cabe mencionar que el lecho del reactor está constituido por 9 espumas de polietileno de alta densidad, el cual permite que se adhiera la biomasa y se lleve a cabo la correcta digestión anaerobia, a continuación se proporciona la figura del lecho elaborado a nivel laboratorio.

Figura 26

Lecho elaborado en el laboratorio.



Nota. La figura representa el lecho estructurado real utilizado en el ensayo experimental a nivel laboratorio. Tomado de J. E. Navas Salas y J. F. Peña Amaya, “Desarrollo de una propuesta para la producción de biogás en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) para la vereda Calderón, Puerto Boyacá,” Fundación Universidad de América, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://hdl.handle.net/20.500.11839/8125>

La incorporación del lecho se realizó por medio de las hojas de cálculo topoSetDict en la carpeta system y fvOptions en la carpeta constant, la primera hoja permite la creación de un conjunto de celdas (poro), las cuales hacen parte del modelo poroso porousBlockage, para el cual se empleó dos recursos de topoSet, siendo el primero boxToCell el cual selecciona un conjunto de celdas (cellSet) cuyo centro de celda esté dentro de la caja delimitadora, la cual hace referencia a las coordenadas (sourceInfo) en donde el poro fue ubicado (figura 12), por otro lado, el segundo recurso que se usó fue setToCellZone el cual convierte un conjunto (cellSet) en una zona de celdas (cellZone), creando así el poro como se observa en la siguiente figura.

Figura 27

Hoja de cálculo topoSet.

```

version      2.0;
format       ascii;
class        dictionary;
object       topoSetDict;
}

// *****

actions
(
  // porousBlockage
  {
    name      porousBlockageCellSet;
    type      cellSet;
    action    new;
    source    boxToCell;
    sourceInfo
    {
      box (0.010 0.120 -0.010) (0.070 0.445 0);
    }
  }
  {
    name      porousBlockage;
    type      cellZoneSet;
    action    new;
    source    setToCellZone;
    sourceInfo
    {
      set porousBlockageCellSet;
    }
  }
);

// *****

```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo toposet, la cual permite la incorporación del lecho poroso al modelo simulado.

Por otra parte, fvOptions añade la zona de porosidad en el dominio del flujo con el modelo Darcy – Forchheimer, el cual relaciona la pérdida de presión debido a la fricción a través de un medio poroso, con respecto a la velocidad del flujo dentro del medio [58], la ecuación que surge del modelo se muestra a continuación.

$$S_i = \Delta P = - \left(\mu \cdot D + \frac{1}{2} \rho (u_{xx}) \cdot F \right) u_y \quad \text{Ec.26}$$

Donde.

- S_i : recurso de momento o pérdida de presión.
- μ : viscosidad del fluido.
- D : coeficiente de Darcy.
- ρ : densidad del fluido.
- u_{xx} : velocidad en el eje no predominante.
- F : coeficiente de Forchheimer
- u_y : velocidad del flujo.

La Ec.26 modifica la ecuación de momento de Navier-Stockes, ya que agrega el termino S_i , tal como se mostró en la Ec.25, principalmente la Ec.26 se compone de dos términos importantes, Darcy y Forchheimer, en donde se relaciona la perdida viscosa e inercial que crea la caída de presión (ΔP) [59], en este caso se despreció la perdida inercial dado que el termino u_{xx} se asume como 0, ya que la velocidad del fluido únicamente se tomó en el eje Y, además el valor del número de Reynolds (tabla 7) indica un flujo laminar, por lo que las fuerzas viscosas predominan sobre las inerciales.

Teniendo en cuenta lo anterior, se propuso una serie de metodologías para hallar el factor de Darcy, pero ante a la gran incertidumbre que esto generó se decidió realizar una ardua búsqueda bibliográfica que permitió obtener el valor del factor de Darcy mediante la siguiente ecuación.

$$D = \frac{1}{k} \quad \text{Ec.27}$$

Donde.

- D : factor de Darcy (m^{-2})
- k : permeabilidad intrínseca (m^2)

Así que, teniendo en cuenta la Ec.27 y la naturaleza de la espuma o lecho poroso (polietileno de alta densidad) se determinó que las espumas poliméricas tienen permeabilidades del orden de 10^{-10} a $10^{-8} m^2$ [60], e incluso se registran valores del orden

de 10^{-5} m^2 [61], con base a lo anterior se decidió realizar un promedio entre los valores de permeabilidad hallados y se tomó que el valor de Darcy corresponde a $1 \times 10^{-7} \text{ m}^2$, posteriormente este valor se introduce en la hoja fvOptions como se muestra a continuación.

Figura 28

Hoja de cálculo fvOptions.

```

porosity1
{
  type          explicitPorositySource;
  active        yes;

  explicitPorositySourceCoeffs
  {
    selectionMode  cellZone;
    cellZone       porousBlockage;
    type           DarcyForchheimer;

    // D 100; // Very little blockage
    // D 200; // Some blockage but steady flow
    // D 500; // Slight waviness in the far wake
    D 1e7;

    d ($D $D $D);
    F (0 0 0);

    coordinateSystem
    {
      type          cartesian;
      origin        (0 0 0);
      coordinateRotation
      {
        type          axesRotation;
        e1            (0.998 0.061 0);
        e2            (0.016 -1.000 0);
      }
    }
  }
}

```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo fvOptions, en donde se asignan los valores de las propiedades del poro.

Como se observa en la figura 28, se asigna el modelo Darcy – Forchheimer en la zona de celdas (cellZone) del poro creado en la hoja de topoSetDict (figura 27), adicionalmente la hoja contiene el recurso coordinateSystem que contiene la función coordinateRotation, la cual indica que el modelo del poro es aleatorio, o sea, que los poros no están alineados en un empaque estructurado, sino que es un sólido con una porosidad irregular, es por esto que los ejes de rotación (axesRotation), e1 y e2, presentan diferentes valores y no incluye ningún valor en el eje z dado a que se modela bidimensionalmente, por último cabe mencionar que se tomaron los valores de e1 y e2 que sugiere el tutorial previamente realizado (Anexo B).

Finalmente, se requería visualizar la construcción correcta del lecho poroso, por lo que se dio inicio a la simulación, esto comenzó con la importación de la malla creada para la fase I, posteriormente se usó el comando topoSet, el cual valida la presencia de un medio poroso y luego mediante la función checkMesh fue posible verificar la correcta construcción del volumen de control, por último, a través de paraFoam fue posible visualizar el reactor con el poro. A continuación, se proporciona la figura visualizada en paraFoam.

Figura 29

Fase II: Reactor con medio poroso.



Nota. La figura representa el lecho poroso incorporado en la proyección del reactor a simular.

A partir de la figura 29, se puede observar que el lecho poroso no tiene contacto con las paredes laterales del reactor, tal cual como se estableció en el plano del reactor (figura 12), además fue factible observar como en los bordes del lecho se distinguió un contorno que se asemeja a un medio poroso.

- Definición de condiciones de contorno y hojas de cálculo. Se modificaron las condiciones de frontera para algunos parches en las hojas de cálculo correspondientes a las variables de velocidad y presión, con el fin de obtener una mejora en la visualización del modelo en la etapa de post procesamiento, y así mismo realizar un análisis más detallado.

En la hoja de cálculo de velocidad (figura 30), a diferencia de la fase 1, se asignaron a las fronteras “Back” y “Front”, la condición de zeroGradient, la cual permite obtener valores para las celdas asignadas a estos parches y visualizar el comportamiento del fluido sobre ellos; por otro lado, a los parches asignados como paredes se asignó un valor fijo de 0 a través del tiempo, asumiendo de esta manera que la fuerza de rozamiento del fluido con las paredes generan una velocidad nula y por esta razón se establece un perfil parabólico.

Figura 30

*Hoja de cálculo de velocidad,
fase II.*

```

boundaryField
{
  inlet
  {
    type    fixedValue;
    value   uniform (0 0.00023113 0);
  }

  outlet
  {
    type    zeroGradient;
  }
  Front
  {
    type    zeroGradient;
  }
  Back
  {
    type    zeroGradient;
  }
  Walls1
  {
    type    fixedValue;
    value   uniform (0 0 0);
  }
  Walls2
  {
    type    fixedValue;
    value   uniform (0 0 0);
  }
}

```

Nota. La figura contiene la hoja de cálculo de velocidad para el reactor ASTBR con lecho estructurado y sus respectivos valores y tipos de parche para cada una de las condiciones de frontera.

Con respecto a las condiciones iniciales para la variable de presión (figura 30), en la salida se asignó un valor fijo de 0, asumiendo que en este punto el valor de presión corresponde a la presión atmosférica y omitiendo la presión estática del sistema; con el fin de obtener valores en todos los demás puntos para la presión y así definir su perfil, se asignaron los demás parches como zeroGradient.

Figura 31

Hoja de cálculo de presión, fase II.

```
boundaryField
{
    inlet
    {
        type            zeroGradient;
    }
    outlet
    {
        type            fixedValue;
        value           uniform 0;
    }
    Front
    {
        type            zeroGradient;
    }
    Back
    {
        type            zeroGradient;
    }
    Walls1
    {
        type            zeroGradient;
    }
    Walls2
    {
        type            zeroGradient;
    }
}
```

Nota. La figura contiene la hoja de cálculo de presión cinemática para el reactor ASTBR con lecho y sus respectivos valores y tipos de parche para cada una de las condiciones de frontera.

Por otra parte, en la carpeta Constant se modificó la hoja de cálculo momentumTransport (figura 32) como se muestra a continuación.

Figura 32

Hoja de cálculo momentumTransport, fase II.

```
location    "constant";
object      momentumTransport;
}
// *****
simulationType laminar;
RAS
{
  model      laminar;
  turbulence off;
  printCoeffs off;
}
```

Nota. La figura contiene la hoja de cálculo de propiedades de momento, en donde se asigna el régimen del flujo.

Debido a que el solucionador simpleFoam puede trabajar tanto para flujos turbulentos como para laminares, en la figura 32, que representa la hoja de cálculo de momentumTransport se seleccionó el tipo de simulación para flujos laminares, tal cual como se había definido anteriormente en la selección del modelo de flujo y fluido en el reactor. Adicionalmente, en la carpeta System se realizó la modificación de la carpeta controlDict, como se muestra en la siguiente figura.

Figura 33

Hoja de cálculo controlDict, fase II.

```
application    simpleFoam;
startFrom      startTime;
startTime      0;
stopAt         endTime;
endTime        30;
deltaT         1;
writeControl   timeStep;
writeInterval  1;
purgeWrite     0;
writeFormat    ascii;
writePrecision 6;
writeCompression off;
timeFormat     general;
timePrecision  6;
runTimeModifiable false;
```

Nota. La figura contiene la hoja de cálculo de controlDict para la fase 2

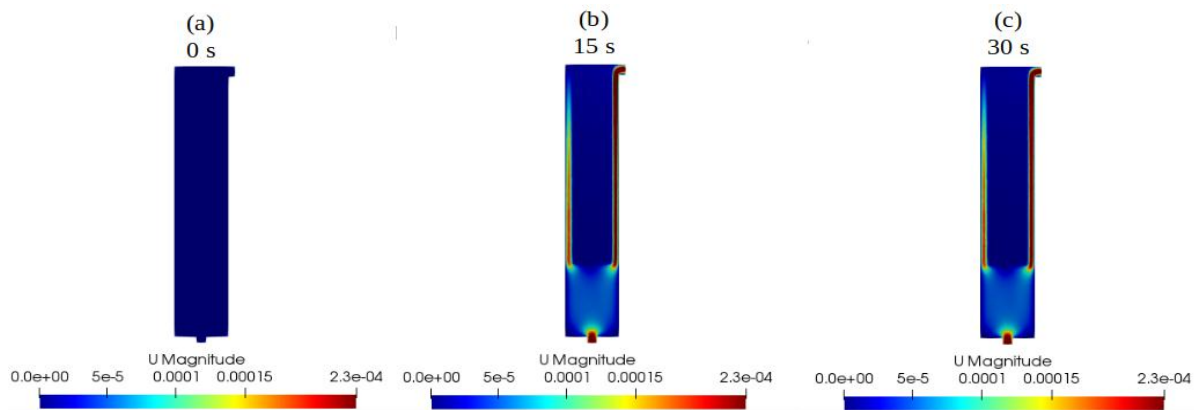
Como se observa en la figura 33, se modificó el tiempo final de la simulación, el valor asignado fue de 30 segundos, en donde se asegura la obtención del perfil y comportamiento del modelo haciendo un gasto computacional mínimo.

- Post procesamiento. Teniendo en cuenta las modificaciones e implementaciones en las hojas de cálculo del solucionador, se ejecutó la simulación con el comando simpleFoam, la cual tardo alrededor de 5 minutos.

Tal cual como se realizó en la fase I, al concluir la simulación, se hizo uso del comando paraFoam, el cual permitió visualizar los resultados (figura 34 y 37), a continuación, se presentan los resultados obtenidos en las variables de velocidad y presión cinemática.

Figura 34

Perfil de velocidad fase II.



Nota. La figura representa el perfil de velocidad para el reactor ASTBR con lecho estructurado, en donde (a) corresponde al perfil de velocidad en un tiempo de 0 segundos, (b) en un tiempo de 15 segundos y (c) en un tiempo de 30 segundos.

En la figura 34 se pudo observar un cambio evidente del perfil de velocidad en la zona porosa, en (a) se observa que en el tiempo 0 no hay movimiento del fluido, y en (b) y (c), se evidencia como el fluido aumenta su velocidad en las paredes del biorreactor a medida que asciende ya que el área se ve abruptamente reducida, también, se observa la disminución de velocidad en la parte superior izquierda del reactor como consecuencia de la acumulación de fluido que se produce por la presencia del medio poroso. También

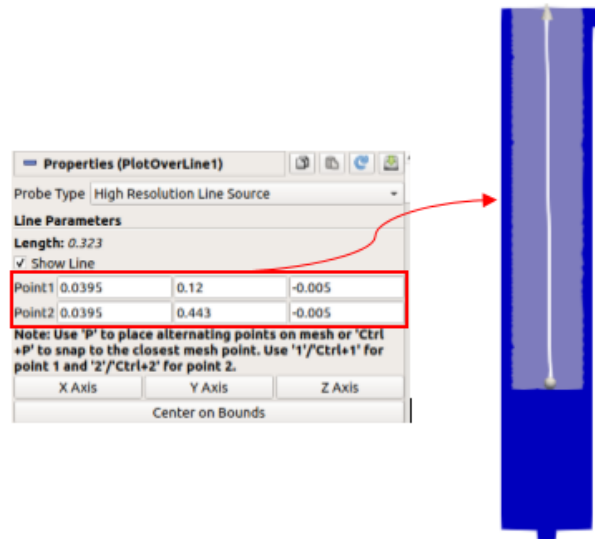
se observó la presencia de zonas de acumulación en las esquinas inferiores del reactor, dejando en evidencia el movimiento ascendente del fluido por el volumen de control.

Con el fin de observar el desarrollo de un perfil de velocidad dentro de la zona porosa se utilizó la herramienta “plot over line” en el visualizador paraView, la cual traza una línea en un segmento específico del volumen y muestrea el conjunto de datos sobre ella [62]. En primer lugar, se definieron las coordenadas de los puntos iniciales y finales de la línea de muestreo, como se muestra a continuación.

Vale aclarar que el concepto de velocidad de fluido a través de los poros se refiere siempre al valor medio, ya que hay un gradiente de cantidad de movimiento (velocidad máxima en los centros de los poros, y velocidad nula en las capas adheridas a los sólidos) [63].

Figura 35

Herramienta PlotOverLine

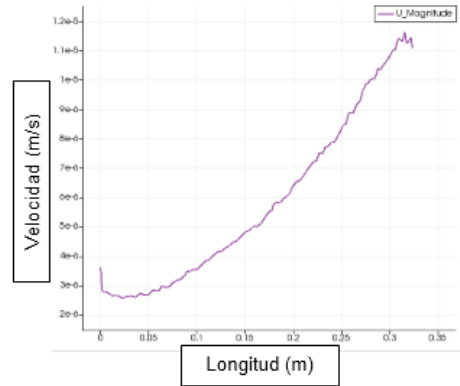


Nota. La figura representa el uso e implementación de la herramienta plotOverLine sobre la longitud correspondiente al lecho poroso del reactor.

Después de validar la posición de la línea sobre la zona porosa, se graficó el conjunto de datos en un tiempo de 30 segundos y se observó el siguiente comportamiento, que se presenta en la siguiente figura.

Figura 36

Grafica velocidad vs longitud del poro.



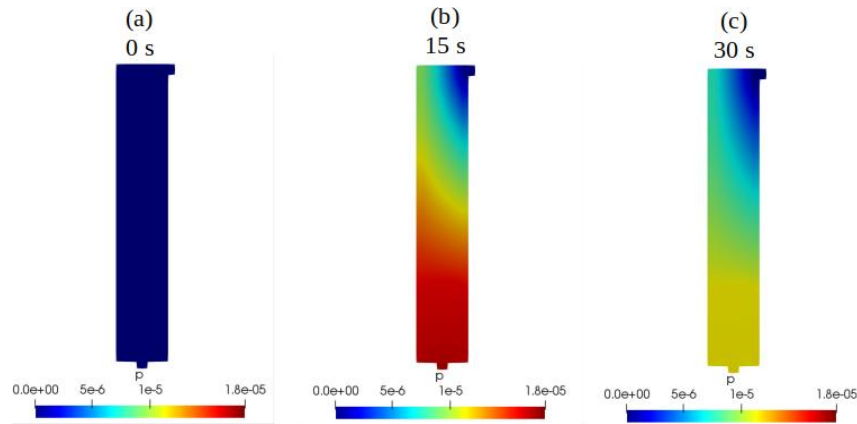
Nota. La figura representa de manera gráfica el cambio de velocidad del agua con respecto a la longitud del poro como consecuencia de la naturaleza del mismo.

Se observó que la presencia de la zona porosa genera un aumento de la velocidad media, esto puede explicarse debido a la aleatoriedad del tamaño y posición de los poros dentro del empaque, ya que su estructura es irregular, lo cual se evidencia y menciona en la figura 29.

En cuanto a la variable de presión, se obtuvieron los siguientes resultados que se presentan a continuación.

Figura 37

Perfil de presión fase II.



Nota. La figura representa el perfil de presión en la fase 2, en donde (a) corresponde al perfil de presión en el tiempo 0 segundos, (b) en el tiempo de 15 segundos y (c) en el tiempo de 30 segundos.

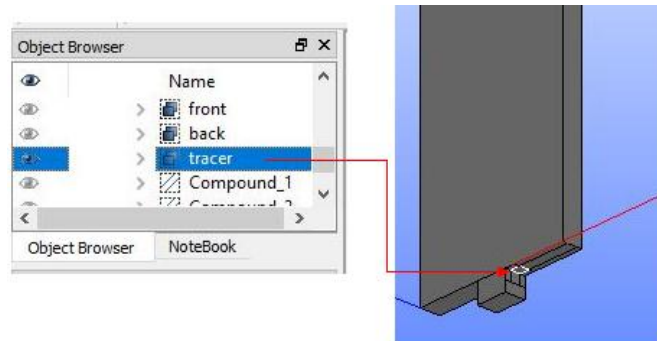
En la figura 37, se observó el perfil de presión el cual se desarrolla de manera descendente con respecto a la longitud, esto debido a que en la parte de la salida se asigna un valor de 0 asumiendo presión atmosférica y en la parte inferior se encuentra la presión generada por el agua que asciende, también se evidencio que en la zona donde se presentaba el poro, el perfil de presión se contrastaba más que en la zona donde no había zona porosa.

3.2.3. Fase III: Ensayo de trazadores.

3.2.3.a. Proyección geometría y mallado. La geometría y el mallado se mantienen de acuerdo a la fase I (figura 12 y 17), lo único que se agrega tanto en la geometría como el mallado es el grupo correspondiente a trazar el cual simula entrada de la manguera transparente (diámetro:0.5 cm) que transporta el trazador de la jeringa hacia el reactor, tal cual como lo describen en la tesis “Desarrollo de una propuesta para la producción de biogás en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) para la vereda Calderón, Puerto Boyacá” [42], a continuación se proporciona las figura que representa los cambios que realizaron en la geometría para incorporar la nueva frontera.

Figura 38

Incorporación de la frontera tracer.



Nota. La figura representa la incorporación de una nueva condición de frontera denominada tracer, cuyo fin es simular la inyección del trazador.

Además, al igual que en la fase II, se integró las hojas de cálculo correspondientes para la creación del poro (topoSetDict y fvOptions).

3.2.3.b. Selección del solucionador. Para la selección del solucionador se tomaron en cuenta los siguientes parámetros:

- Sistema isotérmico.
- Flujo laminar.
- Flujo newtoniano.
- Flujo incompresible.
- Sistema no reactivo.
- Sistema multicomponente.
- Medio poroso.

En estos parámetros se incluye un sistema multicomponente, dado que se requiere integrar el trazador, el cual es una sustancia miscible en el agua que ingresa al reactor, y al igual que en la fase I y II se hace uso de la tabla 8 para seleccionar el solucionador.

Para visualizar la distribución del trazador a lo largo del reactor durante 36 horas, se realizaron simulaciones con dos solucionadores, simpleFoam y scalarTransportFoam, ya que el ensayo de trazadores consiste en primero realizar una inyección y observar la

distribución inicial del trazador, y posteriormente observar los mismos efectos, pero a la salida del reactor.

La descripción del solucionador simpleFoam se encuentra en la fase II y se mantiene tal cual para esta fase.

3.2.3.c. Descripción del solucionador scalarTransportFoam. Es un solucionador básico que resuelve una ecuación de transporte para un escalar pasivo, utilizando un campo de velocidad estacionario especificado por el usuario [64], el cual se utiliza normalmente para problemas escalares de difusión o convección en un campo de velocidades dado.

Este solucionador utiliza una ecuación de convección-difusión completa, en la forma incompresible (la ecuación se divide por la densidad), la cual se muestra a continuación.

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (UT) - \nabla^2 \cdot (D_T T) = 0 \quad \text{Ec.28}$$

Donde.

- U: Velocidad del fluido.
- D_T : coeficiente de difusión dividido por la densidad del fluido.
- T: Escalar transportado.

Para resolver la ecuación de transporte escalar, se debe definir el campo escalar para T y el campo vectorial para U, así como declarar el coeficiente de difusión y leer su valor [6].

3.2.3.d. Revisión y ejecución de caso ejemplo – base. A diferencia de la fase I y II, en este caso no se realizó un tutorial de la librería de openFoam, sino se optó por la tesis titulada “Modelización de una inyección de trazador y de un sensor múltiple” [65], dado que coincidió con la temática que abarca la investigación desarrollada.

3.2.3.e. Ejecución caso de estudio. En esta fase fue necesario realizar cuatro simulaciones, dos de ellas con simpleFoam y otras dos en scalarTransportFoam, el solucionador simpleFoam permitió calcular los campos de presión y velocidad en el momento en que se inyectaba y se detenía la inyección del trazador, mientras que el otro solucionador analizó la distribución inicial y final de la concentración del trazador en el

interior del reactor, además utilizó el caudal y los campos de velocidad obtenidos en la primera y segunda simulación de simpleFoam.

Cabe mencionar que el orden en que se ejecutaron las simulaciones fue primero las de la inyección (simpleFoam I y scalarTransportFoam I), posteriormente se realizaron las correspondientes a la difusión del trazador por el volumen de control hasta su salida (simpleFoam II y scalarTransportFoam II).

- Definición de condiciones de contorno y hojas de cálculo.

Simulación I: simpleFoam I, inyección del trazador.

La gran mayoría de las hojas de cálculo del solucionador simpleFoam, permanecieron igual a la fase II, a excepción de las hojas correspondientes a la velocidad y presión ya que fue necesario incorporar la frontera tracer, como a continuación se muestra.

Figura 39

Velocidad y presión simulación I, simpleFoam

Velocidad	Presión
<code>InternalField uniform (0 0 0);</code>	<code>InternalField uniform 0;</code>
<code>boundaryField</code>	<code>boundaryField</code>
<code>{</code>	<code>{</code>
<code> inlet</code>	<code> inlet</code>
<code> {</code>	<code> {</code>
<code> type</code>	<code> type</code>
<code> value</code>	<code> zeroGradient;</code>
<code> fixedValue;</code>	<code> }</code>
<code> uniform (0 0.00023113 0);</code>	<code> outlet</code>
<code> }</code>	<code> {</code>
<code> outlet</code>	<code> type</code>
<code> {</code>	<code> value</code>
<code> type</code>	<code> fixedValue;</code>
<code> zeroGradient;</code>	<code> uniform 0;</code>
<code> }</code>	<code> }</code>
<code> front</code>	<code> front</code>
<code> {</code>	<code> {</code>
<code> type</code>	<code> type</code>
<code> empty;</code>	<code> empty;</code>
<code> }</code>	<code> }</code>
<code> back</code>	<code> back</code>
<code> {</code>	<code> {</code>
<code> type</code>	<code> type</code>
<code> empty;</code>	<code> empty;</code>
<code> }</code>	<code> }</code>
<code> walls1</code>	<code> walls1</code>
<code> {</code>	<code> {</code>
<code> type</code>	<code> type</code>
<code> value</code>	<code> zeroGradient;</code>
<code> fixedValue;</code>	<code> }</code>
<code> uniform (0 0 0);</code>	<code> walls2</code>
<code> }</code>	<code> {</code>
<code> walls2</code>	<code> type</code>
<code> {</code>	<code> zeroGradient;</code>
<code> type</code>	<code> }</code>
<code> value</code>	<code> tracer</code>
<code> fixedValue;</code>	<code> {</code>
<code> uniform (0 0 0);</code>	<code> type</code>
<code> }</code>	<code> zeroGradient;</code>
<code> tracer</code>	<code> }</code>
<code> {</code>	<code> }</code>
<code> type</code>	<code> }</code>
<code> value</code>	<code> }</code>
<code> fixedValue;</code>	<code> }</code>
<code> uniform (0 0.2546 0);</code>	<code> }</code>
<code> }</code>	<code> }</code>
<code>}</code>	<code>}</code>

Nota. La figura representa las hojas de cálculo correspondientes a la Velocidad y presión de la simulación I de la fase 3, en simpleFoam.

En la figura 39, se observa que en la condición de frontera correspondiente a la entrada del trazador (tracer), se asigna la condición de fixedValue a la variable de velocidad con un valor de $2.546E^{-01}$ m/s en el eje Y, simulando de esta manera la inyección del trazador de forma ascendente. El valor de la velocidad del trazador se calculó a través de la siguiente ecuación.

$$v = \frac{Q}{A} \quad \text{Ec.29}$$

Donde.

- v: velocidad (m/s)
- Q: caudal volumétrico (m^3/s)
- Área (m^2)

Para resolver la anterior ecuación y obtener la velocidad del trazador, fue necesario hallar el área a partir del diámetro de la manguera (0.5 cm), además se asumió un caudal dado que este no se especifica, pero teniendo en cuenta que se inyecta 5 mL de trazador [42] y que la inyección dura 1 s, se tomó un caudal de 5 mL/s. Con base a lo anterior, se expone la siguiente tabla en forma de resumen.

Tabla 9

Parámetros y resultado velocidad del trazador.

Parámetro	Valor
Diámetro (m)	0.005
Área (m^2)	1,96E-01
Caudal (m^3/s)	5,00E-06
Velocidad (m/s)	2,55E+02

Nota. La tabla contiene los parámetros usados y el resultado de la velocidad del trazador que fue empleado en la simulación.

En la figura 39, se observa también que el tipo de parche asignado en la hoja de cálculo de presión a la entrada del trazador es “zeroGradient”, esto con el fin de tener en cuenta la presencia del trazador en el proceso iterativo en la variable de presión.

Adicionalmente, en el directorio system se hizo la modificación en la hoja de cálculo controlDict, como se muestra a continuación.

Figura 40

*Hoja de cálculo controlDict,
simpleFoam I.*

```
application    simpleFoam;
startFrom      startTime;
startTime      0;
stopAt         endTime;
endTime        129600;
deltaT         120;
writeControl   timeStep;
writeInterval  1;
purgeWrite     0;
writeFormat    ascii;
writePrecision 6;
writeCompression off;
timeFormat     general;
timePrecision  6;
runTimeModifiable false;
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de controlDict de la simulación I de la fase 3, en donde se asignan los valores que proporcionan el control de la simulación.

En la figura 40, se realizó la modificación del tiempo de simulación (endTime), definiéndolo como 129600 segundos, el cual corresponde al tiempo en segundos en el que se realizó el ensayo experimentalmente [42]. Los saltos se hicieron cada 120 segundos ya que en el ensayo experimental se tomaron datos de señal cada dos minutos, y se buscaba hacer una comparación más precisa.

Simulación II: scalarTransportFoam, inyección del trazador.

En este solucionador se copiaron las hojas de cálculo de Phi (flujo volumétrico) y U (velocidad) en el directorio "0" del último intervalo de tiempo ejecutado en la simulación de simpleFoam, esto con el fin de conocer previamente el compartimiento de los fluidos durante toda la simulación y permitiendo al simulador scalarTransportFoam solucionar únicamente la variable de interés la cual es la concentración de trazador.

Es por esta razón que las hojas de cálculo de Phi y U tienen valores definidos para cada una de las celdas del volumen de control en el tiempo de 129600 segundos como se muestra a continuación.

Figura 41

Hojas de cálculo U y Phi, scalarTransportFoam I.

```
U
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        volVectorField;
  location     "129600";
  object       U;
}
// *****

dimensions    [0 1 -1 0 0 0];

InternalField nonuniform List<vector>
25497
(
  (-0.00481006 0.00094043 -0.00504061)
  (0.00527484 0.000319083 0.000104794)
  (0.000952583 0.00188166 0.00154829)
  (0.00377387 -0.000041301 0.000500621)
  (-0.0139999 -0.00533254 0.0013996)
  (0.0149666 0.0514221 -0.00348061)
  (-0.0034636 0.009596 0.519339)
  (-0.0169117 -0.00910178 0.0018697)
  (0.000653864 0.0429153 -0.00107347)
  (0.0239534 -0.0117746 -0.00071486)
  (-0.00214461 0.0037262 -0.000366658)
  (-0.00767961 0.000735816 -0.00301382)
  (-1.86179e-05 0.0241738 0.00561491)
  (2.70325e-05 0.00381392 0.00620804)
  (0.0323211 0.0033467 -0.00257516)
  (0.0143876 -0.00220797 -0.00092179)
  (0.00622713 0.00231327 -0.00460847)
  (-0.00237817 -0.000768549 0.000577937)
  (0.0075254 0.00251865 0.00534049)
  (0.0224323 0.103637 -0.000753536)
  (0.0154382 -0.00263894 0.0027284)
  (0.00479141 0.00128207 0.00490653)
)

phi
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        surfaceScalarField;
  location     "129600";
  object       phi;
}
// *****

dimensions    [0 3 -1 0 0 0];

InternalField nonuniform List<scalar>
46670
(
  2.12976e-08
  7.86208e-09
  -2.92277e-08
  2.67787e-08
  -1.69412e-08
  -3.71181e-09
  -6.1109e-09
  2.55173e-08
  -2.38123e-09
  3.64939e-09
  -9.59868e-10
  -7.34967e-10
  1.64054e-08
  1.47846e-09
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de velocidad y flujo volumétrico de la simulación II de la fase 3, obtenidos de la simulación I de esta misma fase.

En la figura 41, se observó en la velocidad (U) cómo se asignan valores fijos en cada dirección para cada celda dentro del campo interno, dando solución previa de esta manera a la variable de velocidad en las ecuaciones de estado, mientras que en la variable Phi, se obtuvo un valor de caudal para cada celda.

Por otro lado, con el fin de desarrollar un perfil de fracción de concentración, se añadió la hoja de cálculo “T” también llamada concentración o campo de transporte escalar [65] en el subdirectorio “0”, la cual indica la fracción del trazador en cada uno de los parches asignados, como se muestra a continuación.

Figura 42

Hoja de cálculo T, scalarTransportFoam I.

```

    object      T;
}
// *****
dimensions    [0 0 0 0 0 0];
internalField uniform 0;
boundaryField
{
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 0;
    }

    outlet
    {
        type      zeroGradient;
    }

    walls1
    {
        type      zeroGradient;
    }

    walls2
    {
        type      zeroGradient;
    }

    tracer
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 1;
    }
}

```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de T, correspondiente a la concentración de trazador en cada una de las condiciones de frontera.

En la figura 42, se estableció el valor de 0 para el parche de entrada (inlet), con el fin de evitar la presencia inicial de trazador, y se asignó el valor uniforme de 1 para el parche “tracer”, ya que es por allí donde se hace la inyección y donde se encuentra toda la cantidad de trazador presente inicialmente.

Con respecto al subdirectorio Constant, se realizó la modificación del coeficiente de difusión, el cual cumple un papel fundamental en el proceso de dispersión del trazador en el medio, así que con base al trazador utilizado en el trabajo experimental [42], el cual fue colorante vegetal verde, se tomó como colorante la clorofilina, la cual viene en

presentación sólida y se diluye en agua previamente para ser inyectada, la relación peso-volumen establecida fue 1:10 [42], posteriormente se realizó el cálculo del coeficiente de difusión.

Para la solución de esta variable se propone el modelo de Stokes–Einstein, sin embargo, en esta ecuación se necesita el diámetro de la molécula del soluto, la cual no se tiene [66], adicionalmente, por el tipo de sustancias, las cuales son no electrolitos, se propone la correlación de Wilke y Chang [67], la cual tiene la siguiente forma.

$$D_{AB} = \frac{(117,3 \times 10^{-18})(\varphi M_b)^{0,5} T}{\mu v_A} \quad \text{Ec.30}$$

Donde.

- D_{AB} : difusividad de A en una solución diluida en el solvente B, m^2/s .
- φ : factor de asociación para el disolvente, 2,26 para el agua como disolvente.
- v_A : volumen molar del soluto en el punto de ebullición normal, m^3/kmol .
- μ : viscosidad de la solución, $\text{kg}/\text{m} \cdot \text{s}$.
- M_B : peso molecular del solvente, kg/mol .
- T : temperatura, K .

Para el cálculo del volumen molar se utilizó la siguiente ecuación.

$$v_A = \frac{M}{D} \quad \text{Ec.31}$$

Donde.

- M : masa expresada en moles o kmol .
- D : densidad expresada en kg/m^3 .

Teniendo en cuenta la Ec. 31 y la clorofilina como soluto, se realizó una búsqueda del peso molecular el cual es $724,15 \text{ kg}/\text{kmol}$ [68], adicionalmente al no encontrarse valores de densidad para el compuesto, se asume la densidad del agua en su punto de ebullición (Bogotá: 92°C) $963,70 \text{ kg}/\text{m}^3$ [69], a partir de los valores anteriores fue posible estimar un volumen molar para el soluto (dilución de clorofilina- agua) de $0,7514 \text{ m}^3/\text{kmol}$.

Los valores obtenidos para las variables restantes, se exponen en la siguiente tabla.

Tabla 10

Datos para hallar coeficiente de difusión.

Variable	Valor
Factor de asociación para el disolvente	2,26
Volumen molar (m ³ /kmol)	0,7514
Viscosidad de la solución (kg/m.s)	0.00105
Temperatura (K)	293,15
Peso molecular (kg/mol)	18,02

Nota. La tabla contiene los valores utilizados para cada una de las variables dentro de la correlación de Wilke y Chang para hallar el coeficiente de difusividad.

De esta manera, se obtuvo el coeficiente de difusión con el valor que se muestra en la siguiente figura.

Figura 43

Hoja de cálculo transportProperties, scalarTransportFoam I.

```
FoamFile
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        dictionary;
  location     "constant";
  object       transportProperties;
}
// ***** //

DT          DT [0 2 -1 0 0 0] 2,339e-10;

// ***** //
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de propiedades de transporte, en donde se asigna el valor del coeficiente de difusión del caso de estudio.

Al tratarse de una biomolécula, se esperaba que el valor del coeficiente de difusión se encontrara entre un rango de $10E^{-10}$ y $10E^{-11}$ [70], obteniendo un valor de $2,339E^{-10}$ m²/s.

Adicionalmente, con el fin de determinar el tiempo de inyección, se modificó la carpeta controlDict en el subdirectorio system, como se muestra en la siguiente figura.

Figura 44

Hoja de cálculo controlDict, scalarTransportFoam I.

```
application    scalarTransportFoam;
startFrom      startTime;
startTime      0;
stopAt         endTime;
endTime        1;
deltaT         0.1;
writeControl   timeStep;
writeInterval  10;
purgeWrite     0;
writeFormat    ascii;
writePrecision 6;
writeCompression off;
timeFormat     general;
timePrecision  6;
runTimeModifiable true;
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de controlDict de la simulación II en scalarTransportFoam de la fase 3, en donde se asignan los valores que proporcionan el control de la simulación.

Se realizó la modificación del tiempo de simulación, ya que la inyección del trazador de manera experimental se hizo instantáneamente, debido a esto, se seleccionó un tiempo de inyección para la simulación de 1 segundo, como se muestra en la figura 44.

Simulación III: simpleFoam II, difusión del trazador.

En este caso, las hojas de cálculo permanecieron igual a las descritas en la simulación I, a excepción de la hoja de cálculo de velocidad en la cual se modificó la velocidad de la frontera “tracer” a 0 m/s, debido a que no se agrega más trazador, a continuación, se muestra la modificación.

Figura 45

Hoja calculo velocidad, simpleFoam II.

```
inlet
{
  type      fixedValue;
  value     uniform (0 0.00023113 0);
}

outlet
{
  type      zeroGradient;
}
front
{
  type      empty;
}
back
{
  type      empty;
}
walls1
{
  type      fixedValue;
  value     uniform (0 0 0);
}
walls2
{
  type      fixedValue;
  value     uniform (0 0 0);
}
tracer
{
  type      fixedValue;
  value     uniform (0 0 0);
}
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de velocidad de la simulación III de la fase 3, en donde se deja de inyectar trazador e inicia el proceso de dilución.

Para esta simulación también se tomó el rango total del tiempo (0 a 129600 s), al igual que en la simulación I.

Simulación IV: scalarTransportFoam II, difusión del trazador.

Para esta simulación, la carpeta 0 toma el valor de 1, porque se detiene la etapa de la inyección del trazador y empieza la de difusión de este. Al igual que en la simulación II, se tomaron y copiaron los valores de U y Phi (figura 46), pero en este caso los correspondientes a la simulación de simpleFoam III, como se muestra a continuación.

Figura 46

Hojas de cálculo U y Phi, scalarTransportFoam II.

```
} object U; } object phi;
// .....
dimensions [0 1 -1 8 8 8]; dimensions [0 3 -1 0 0 0];
internalField nonuniform List<vector> internalField nonuniform List<scalar>
25497 46078
{ {
(1.50408e-05 6.82733e-05 -1.59757e-05) 1.20794e-10
(1.87820e-05 -5.8544e-07 2.00573e-07) -1.38438e-11
(9.57567e-06 9.88396e-07 2.15894e-06) -1.08951e-10
(1.81508e-05 6.18819e-07 4.66622e-07) 7.06693e-11
(-9.17715e-06 -5.29336e-06 8.78684e-05) -4.25229e-11
(4.58649e-06 8.088278789 -1.86862e-05) -4.26772e-13
(-0.090388121 0.08818867 8.80332589) -3.67197e-11
(-1.58156e-05 -9.26194e-06 9.44122e-05) 4.30295e-13
(-2.98084e-07 0.088195655 2.40149e-06) 6.36469e-11
(-0.080478865 0.088212699 -0.080193881) 1.55921e-11
(-1.75175e-06 5.18878e-06 -7.63741e-07) 1.88878e-13
(-1.24586e-05 9.24485e-06 -5.88119e-06) 8.8428e-13
(-2.15181e-05 2.96593e-05 2.26491e-06) 4.39582e-11
(3.28835e-07 3.13318e-06 6.28630e-06) -4.49765e-11
(-0.090388844 0.088178211 3.52898e-05) -4.68964e-11
(-6.13974e-05 0.088214479 -6.05056e-06) 9.79449e-12
(1.55567e-05 1.77448e-06 -2.83522e-06) 3.63819e-11
(-7.83689e-08 2.79533e-06 1.83482e-07) 1.25988e-09
(3.18175e-06 5.88915e-06 6.25742e-06) -2.56734e-09
(8.46849e-05 -3.91218e-05 0.898e-05) 3.74589e-09
(5.43888e-05 1.19132e-05 0.090116023) -2.43683e-09
(8.909182158 2.56124e-05 3.37825e-05) 5.78874e-10
(-3.29381e-06 -3.71727e-06 2.38229e-07) -1.81557e-10
(3.20115e-06 4.94278e-06 -7.21856e-06) -3.97317e-10
(-1.9577e-05 5.93823e-05 -2.88437e-05) -4.47814e-11
(-3.886e-07 1.74259e-06 -2.4326e-07)
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de velocidad y flujo volumétrico de la simulación IV de la fase 3, obtenidos de la simulación III de esta misma fase.

Adicionalmente, en la hoja de cálculo T se copia los resultados de la simulación scalarTransportFoam I correspondientes a T, esto con el fin de tener los valores obtenidos en todo el volumen de control hasta el tiempo de 1 segundo (tiempo de inyección), tal como se muestra en la siguiente figura.

Figura 47

Hoja de cálculo T ,
scalarTransportFoam II.

```
class      volScalarField;
location  "1";
object    T;
}
// *****

dimensions  [0 0 0 0 0 0];

internalField nonuniform List<scalar>
25497
(
8.22519e-29
6.31847e-36
1.35949e-35
2.13561e-35
8.21647e-34
2.28164e-08
5.4758e-08
1.18914e-21
1.4561e-07
2.66122e-07
1.05507e-19
0.0688435
2.80489e-30
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de concentración del trazador de la simulación IV de la fase 3, obtenidos de la simulación II .

Para finalizar, se modificó la hoja de controlDict ya que el tiempo de inicio se cambió a 1 s porque la distribución del trazador se da después del segundo en el que este es inyectado y como en esta última simulación se buscó observar dicho efecto, es necesario modificar el tiempo de inicio como se muestra a continuación.

Figura 48

Hoja de cálculo controlDict, scalarTransportFoam II.

```
application      scalarTransportFoam;
startFrom        startTime;
startTime        1;
stopAt           endTime;
endTime          129600;
deltaT           120;
writeControl     timeStep;
writeInterval    1;
purgeWrite       0;
writeFormat      ascii;
writePrecision   6;
writeCompression off;
timeFormat       general;
timePrecision    6;
runTimeModifiable true;
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de controlDict de la simulación IV en scalarTransportFoam, en donde se asignan los valores que proporcionan el control de la simulación.

- Post procesamiento. Como se mencionó anteriormente, la primera simulación que se ejecuta es simpleFoam I, la cual calculó los campos de presión y velocidad en el momento de la inyección del trazador, además los resultados correspondientes a la velocidad y caudal fueron necesarios para ejecutar la segunda simulación.

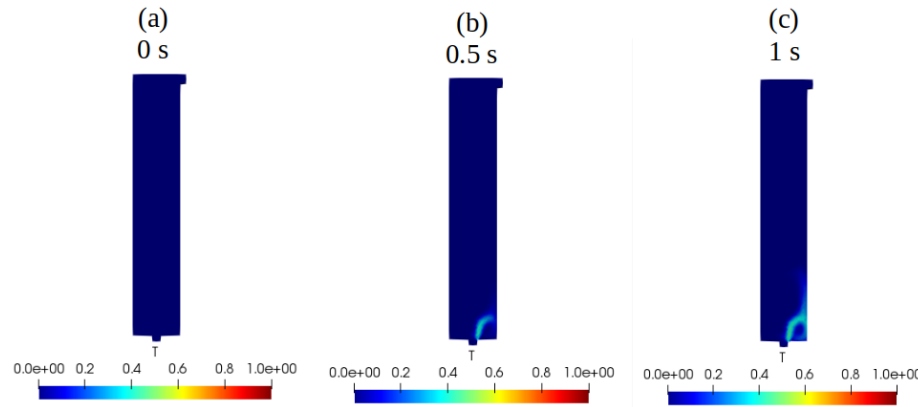
Los perfiles de velocidad y presión que se obtienen son similares a los presentados en la figura 33 y 36, la diferencia es que se observa la presencia del trazador con el agua, sin embargo, en donde se evidencia mayor este efecto es en las simulaciones de scalarTransportFoam que se presentan a continuación.

Posteriormente, se copiaron las hojas de velocidad (U) y caudal (Phi) de la primera simulación en el directorio 0 y se dio inicio a la simulación scalarTransportFoam I, en la cual la variable de interés era la fracción del trazador, a continuación, se muestra los

resultados obtenidos para la fase de inyección de scalarTransportFoam I, cabe mencionar que la iteración de la simulación duro 20 minutos aproximadamente.

Figura 49

Perfil de T, scalarTransportFoam I.



Nota. La figura representa el perfil de concentración del trazador durante su inyección, en donde (a) representa el perfil en el tiempo igual a 0 segundos, (b) en el tiempo de 0.5 segundos y (c) en el tiempo final de inyección igual a 1 segundo.

En la figura 49, se evidenció que el medio (agua) ya se encontraba en estado estacionario, y que el estado transitorio corresponde al trazador, con el fin de simular una inyección instantánea en (b) y (c) se observa el comportamiento del trazador pasado 1 segundo de inyección, también se observa como el trazador asciende a una velocidad diferente a la del agua, y establece su propio perfil de flujo, generando pequeñas perturbaciones.

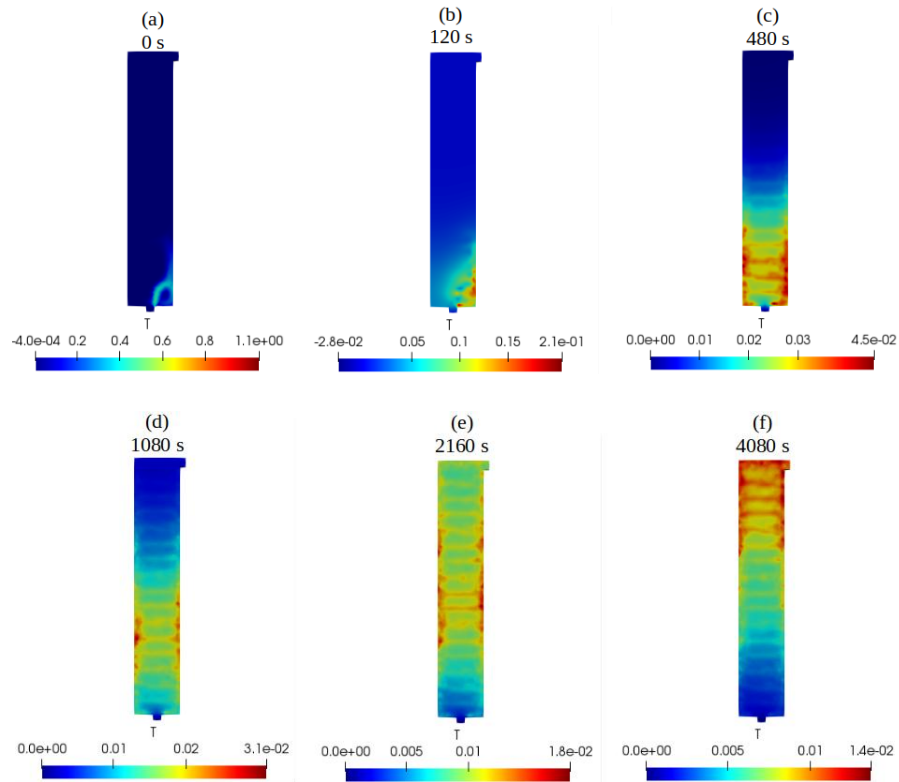
Continuando con la simulación III, se ejecutó la segunda simulación de simpleFoam, que a diferencia de la primera calculó los campos de presión y velocidad en el momento en el que se detiene la inyección y empieza la distribución del trazador en el reactor, al igual que en la primera simulación ocurrió una convergencia antes del tiempo final estimado, esto sucedió a los 81240 s por lo que se asume estado estable a partir de este tiempo.

Una vez finalizada la simulación, se copió las hojas de cálculo de velocidad (U) y caudal (Phi) de simpleFoam II en el directorio 0 de scalarTransportFoam II, además se copió la

carpeta T de scalarTransportFoam I, la cual presenta los valores de fracción obtenidos de la inyección del trazador, finalizado lo anterior se ejecutó la última simulación en la cual se obtuvo los siguientes resultados en un tiempo de 25 minutos.

Figura 50

Perfil de T, scalarTransportFoam II.



Nota. La figura representa el perfil de concentración del trazador durante su dilución, en donde (a) representa el perfil en el tiempo igual a 0 segundos, (b) en el tiempo de 120 segundos, (c) en el tiempo de 480 segundos, (d) en el tiempo de 1080 segundos, (e) en el tiempo de 2160 segundos y (f) en el tiempo de 4080 segundos.

En la figura 50, se observa la manera en la que el trazador se esparce o diluye por todo el volumen de control, generando un fenómeno dispersivo en todas las direcciones, también, se puede observar el efecto de la espuma sobre la concentración del trazador, generando un perfil de concentración en la dirección perpendicular a X, en donde se

evidencia mayor concentración hacia las paredes del reactor, espacios donde no se encuentra el medio poroso.

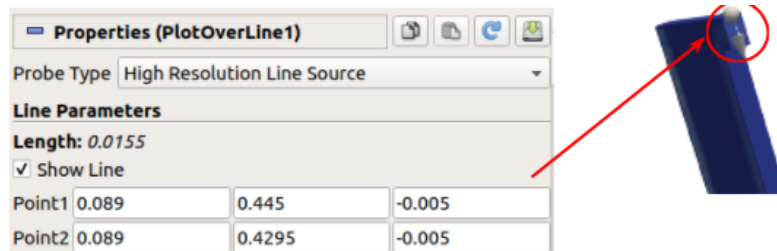
3.3. Validar de forma estadística el modelo CFD con respecto a los datos experimentales

3.3.1. Exportar datos de openFoam a Excel

A partir de la última simulación de scalarTransportFoam por medio de openFoam y el visualizador paraView fue posible exportar los resultados a una hoja de cálculo de Excel, para lo anterior se seleccionó la función de plotOverLine del visualizador en donde se traza una línea en el reactor, la cual proporciona los valores de fracción de trazador (T) obtenidos, por lo que se fijaron las coordenadas en la salida del reactor, tal como se muestra en la siguiente figura.

Figura 51

Coordenadas salida del reactor.

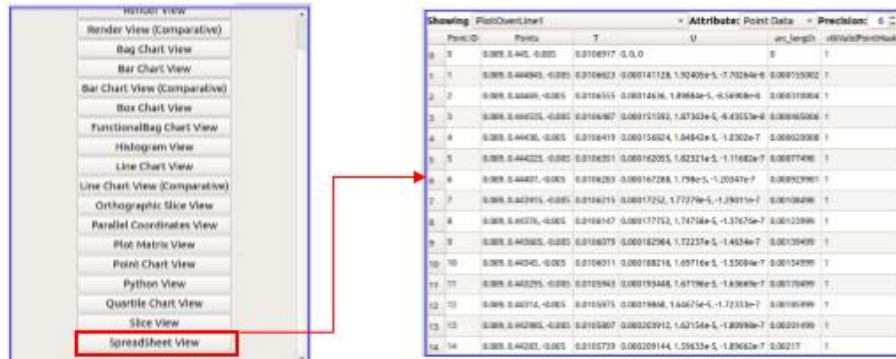


Nota. La figura representa el uso e implementación de la herramienta de plotOverLine en el visualizador paraView, para la obtención de una línea de lectura en toda la longitud de la frontera de salida del reactor.

A partir de lo anterior, se seleccionó la opción de SpreadSheet view, en la cual se eligió una resolución de 100, con el fin de que arrojara 100 datos por intervalo de tiempo, tal cual como se observa a continuación, además se aclara que el único valor necesario para este estudio es el de la fracción del trazador (T).

Figura 52

Herramienta Spreadsheet view.



Nota. La figura representa el uso e implementación de la herramienta de spreadsheetView en el visualizador paraView, para la obtención de una hoja de cálculo con los datos de la frontera de salida del reactor.

Una vez finalizado lo anterior se exportan los datos a una carpeta que se creó, la cual se denominó post processing y se encuentra en el solucionador, en esta se generaron hojas de cálculo con la extensión .CSV.

Cada hoja de cálculo correspondió a un intervalo de tiempo (punto), dando como resultado un total de 1080 puntos, como se mencionó anteriormente la resolución para cada punto es de 100, por lo cual se obtuvieron 100 valores de T para cada tiempo en la línea de muestreo designada en las coordenadas de la figura 50, y por lo cual se hizo necesario calcular un valor promedio de cada conjunto de 100 datos obtenidos por intervalo de tiempo, cabe aclarar que lo previamente explicado se realizó en una hoja de cálculo del programa de Excel. Finalmente, se organizaron los datos y se continuó con la siguiente actividad del objetivo.

3.3.2. Calcular los valores de $E(t)$, \dot{t} , σ^2 y el porcentaje de zonas muertas, mezcla pistón y mezcla no pistón

Para el cálculo de $E(t)$, \dot{t} y σ^2 se siguió la metodología propuesta por Levenspiel en Tecnología de trazadores: Modelización del flujo de fluidos [71], mientras que, para el cálculo del porcentaje de zonas muertas, mezcla pistón y mezcla no pistón se optó por

lo expuesto en Tratamiento De Agua Para Consumo Humano Plantas De Filtración Rápida Manual III: Evaluación De Plantas De Tecnología Apropiaada [72].

Uno de los principales parámetros para describir las curvas de trazadores, es \bar{t} e indica cuando una curva de trazador pasa por un punto de medición, localizando así su "centro de gravedad" en el tiempo [71], o en otras palabras es igual al tiempo de retención hidráulico del sistema, Levenspiel utiliza la siguiente ecuación para el caso de intervalos de tiempo iguales.

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot C \, dt}{\int_0^{\infty} C \, dt} = \frac{\sum t \cdot C}{\sum C} \quad \text{Ec.32}$$

Donde:

- \bar{t} : tiempo de retención.
- t: tiempo.
- C: concentración.

A partir de la Ec. 32 se calculó el tiempo de retención hidráulico del reactor, el cual fue 112,11 min o 1,86 h, lo cual indica que es el tiempo promedio en que el volumen de trazador permanece en el reactor, desde la entrada hasta la salida.

Posteriormente, se calculó σ^2 , conocida como la varianza, la cual indica el grado de dispersión en el tiempo [71], o lo amplia que es la curva, en este caso también se tomó una ecuación que tuviera en cuenta intervalos de tiempo iguales.

$$\sigma^2 = \frac{\int_0^{\infty} t^2 \cdot C \, dt}{\int_0^{\infty} C \, dt} - \bar{t}^2 = \frac{\sum t^2 \cdot C}{\sum C} - \bar{t}^2 \quad \text{Ec.33}$$

Con la Ec.33, se obtuvo un valor de varianza de 6447,18 min² o 107,45 h², el cual posteriormente permitió calcular el modelo de tanques en serie y determinar la simetría de la curva de E (t), además indicó la tendencia de la mezcla a la que el modelo se acopla, a continuación, se presenta la ecuación del modelo de tanques en serie.

$$\sigma^2 = \frac{\bar{t}^2}{N} \quad \text{Ec.34}$$

Donde

- σ^2 : varianza
- \bar{t} : tiempo de retención.
- N: número de tanques en serie.

Con base a la Ec.34, se determinó 2 tanques en serie, este valor indica que se tiene mezcla perfecta, pero como N es mayor 1, también hay presencia de flujo pistón, además como N es cercano 1, se espera una curva con asimetría acentuada o con una gran cola, para comprobar lo anterior es necesario calcular la función E (t), la cual indica la distribución del tiempo de residencia, este cálculo se realizó mediante las siguientes ecuaciones.

$$A = \int_0^{\infty} C dt \cong \sum_i C_i \cdot \Delta t_i \quad \text{Ec. 35}$$

$$E = \frac{C}{A} \quad \text{Ec.36}$$

Donde.

- A: área total bajo la curva de concentración.
- Δt_i : intervalo de tiempo i.
- C_i : concentración en tiempo i.
- E: distribución del tiempo de residencia

En primera instancia se calculó el área bajo la curva según la Ec. 35, la cual dio un valor de 1,373 kg·min/m³, posteriormente se halló el valor de E para cada punto o intervalo de tiempo según la Ec.36, tal como se muestra a continuación.

Figura 53

Valores de $E(t)$.

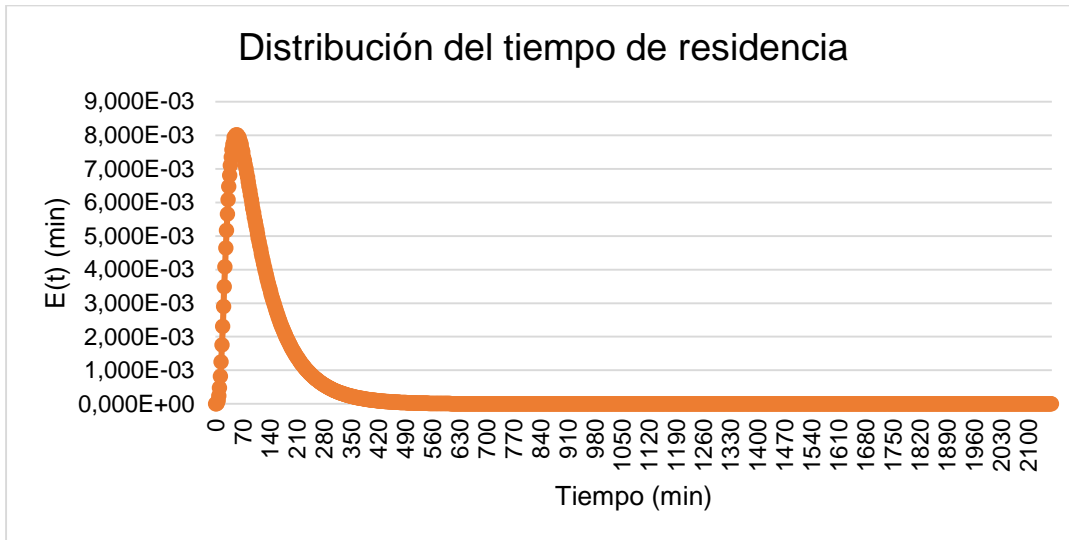
Punto	t (s)	t (min)	T	E(t)
0	0	0	2,580E-21	1,878E-21
1	120	2	2,690E-06	1,959E-06
2	240	4	3,520E-05	2,563E-05
3	360	6	1,320E-04	9,611E-05
4	480	8	3,340E-04	2,432E-04
5	600	10	6,640E-04	4,834E-04
6	720	12	1,130E-03	8,227E-04
7	840	14	1,720E-03	1,252E-03
8	960	16	2,410E-03	1,755E-03
9	1080	18	3,170E-03	2,308E-03
10	1200	20	3,980E-03	2,898E-03
11	1320	22	4,800E-03	3,495E-03
12	1440	24	5,610E-03	4,085E-03
13	1560	26	6,380E-03	4,645E-03
14	1680	28	7,100E-03	5,169E-03
15	1800	30	7,760E-03	5,650E-03
16	1920	32	8,360E-03	6,087E-03
17	2040	34	8,890E-03	6,473E-03
18	2160	36	9,350E-03	6,808E-03
19	2280	38	9,750E-03	7,099E-03
20	2400	40	1,010E-02	7,354E-03
21	2520	42	1,040E-02	7,572E-03
22	2640	44	1,060E-02	7,718E-03
23	2760	46	1,070E-02	7,791E-03
24	2880	48	1,090E-02	7,936E-03
25	3000	50	1,090E-02	7,936E-03
26	3120	52	1,100E-02	8,009E-03
27	3240	54	1,100E-02	8,009E-03
28	3360	56	1,100E-02	8,009E-03

Nota. La figura representa los valores obtenidos para la variable de la curva de distribución del tiempo de residencia para el caso de estudio.

Finalmente, se realizó la gráfica de la distribución del tiempo de retención, la cual consistió en graficar el tiempo (min) vs $E(t)$, como se muestra en la siguiente figura.

Figura 54

Grafica de distribución del tiempo de residencia.



Nota. La figura representa la gráfica obtenida a partir del estudio de la variable de la distribución del tiempo de residencia con respecto al tiempo.

Como se observa en la figura 54, la curva se genera de manera temprana, lo que indica que hay estancamiento del fluido, además hay presencia de una cola muy larga lo que indica que no hay simetría y según Levenspiel [71] el comportamiento de la curva es semejante a una mezcla perfecta, para corroborar lo anterior fue necesario calcular el porcentaje de mezcla del flujo pistón y no pistón (mezcla perfecta), por lo que se usó el modelo simplificado de la teoría de Wolf-Resnick que se muestra a continuación.

$$\text{Log}[1 - F(t)] = \frac{-\log e}{(1-p)(1-m)} \left[\frac{t}{t_0} - p(1-m) \right] \quad \text{Ec.37}$$

Donde.

- F (t): fracción de la totalidad del trazador que ha salido del reactor.
- p: flujo pistón.
- m: espacios muertos.
- t: tiempo
- t₀: tiempo de retención hidráulico.

La Ec. 37 corresponde a la ecuación de una línea recta, cuyo valor de x corresponde a Θ cuando la función vale 0 y donde Θ es el retraso en el flujo por la fracción de flujo pistón (t/t_0), mientras que la pendiente de la línea recta se expresa en la siguiente ecuación.

$$\tan(\alpha) = \frac{1}{\frac{t_1 - t_2}{t_0 - t_0}} \text{ Ec.38}$$

De las expresiones anteriores, se deduce las siguientes ecuaciones.

$$p = \frac{\theta \tan(\alpha)}{0,435 + \theta \tan(\alpha)} \text{ Ec.39}$$

$$m = 1 - \frac{\theta}{p} \text{ Ec.40}$$

$$M = 1 - p \text{ Ec.41}$$

Donde la Ec.39 corresponde al flujo pistón, la Ec.40 es el cálculo de la zona muerta y la Ec.41 corresponde al flujo mezclado. A partir de lo anterior, se obtuvieron los siguientes resultados.

Tabla 11

Resultado Wolf-Resnick

Parámetro	Valor
Porcentaje flujo pistón	35,33%
Porcentaje flujo mezclado	64,67%
Porcentaje zona muerta	-8,39%

Nota. La tabla contiene los valores obtenidos para los parámetros de porcentaje de flujo pistón, porcentaje de flujo mezclado y porcentaje de zonas muertas en el modelo CFD.

Como se observa en la tabla 11, el comportamiento de la mezcla del reactor tiende a ser de flujo mezclado, lo cual indica una operación ineficiente y por lo cual se debe revisar las condiciones hidráulicas del equipo, además el porcentaje zona de la zona muerta presenta un valor negativo, lo cual indica que el promedio de las partículas del trazador permanece más tiempo que el estimado teórico.

3.3.3. Criterio estadístico del modelo

Teniendo en cuenta los datos hallados por la metodología CFD y los suministrados por parte del trabajo de grado “Desarrollo de una propuesta para la producción de biogás en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) para la vereda Calderón, Puerto Boyacá” [42] se planteó realizar una comparación de los datos por medio de un modelo estadístico, para esta validación se tomó en cuenta los valores de E (T) o la distribución del tiempo de retención hallados, ya que es la función de distribución más utilizada en el análisis de los reactores [73].

Para comenzar, se utilizó el error cuadrático medio (RMSE), el cual mide la cantidad de error que hay entre dos conjuntos de datos, o sea, compara un valor predicho y un valor observado o conocido [74], en este caso el valor predicho corresponde al obtenido por medio de la metodología CFD (E (t) CFD), mientras que el conocido fue el proporcionado por el trabajo de grado o en otras palabras el realizado en el laboratorio (E (t) exp). A continuación, se proporciona la ecuación del modelo RMSE.

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (P_i - O_i)^2}{N}} \quad \text{Ec.42}$$

Donde.

- P_i: valor predicho.
- O_i: valor conocido.
- N: número de datos.

A partir de la Ec.42, se obtuvo un valor RMSE de 1,63E⁻³, lo que nos indica que los datos no están dispersos sino hay una similitud entre ellos, cabe aclarar que el modelo sólo está teniendo en cuenta el eje Y o sea los valores de E (T), por lo cual el tiempo no interviene en este estudio, además se analizó que las magnitudes de E (T) son muy

similares entre ellas, por eso es de esperarse que el error sea mínimo, para corroborar dicha información se suministra el anexo 3.

Por otro lado, se utilizó otro modelo estadístico, correspondiente al error absoluto medio (MAE), el cual es la diferencia absoluta entre el valor objetivo y el valor predicho por el modelo [75].

$$MAE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^N |x_i - \hat{x}_i| \quad \text{Ec.43}$$

Donde.

- x_i : observaciones actuales de la serie.
- \hat{x} : serie estimada.
- N: número de datos.

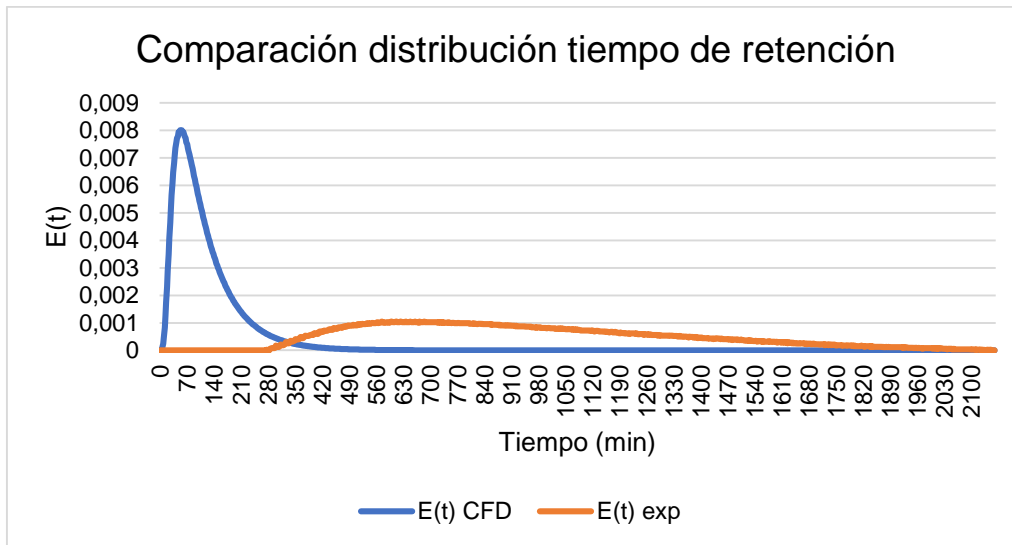
Con base a la Ec.43, se obtuvo un valor de MAE de $8,97E^{-4}$, el cual es un puntaje lineal, que toma todas las diferencias individuales y las pondera por igual en el promedio el error, es por esto que no se presenta un error alto.

Vale aclarar que en estos dos modelos (RMSE y MAE) se encuentran algunas limitaciones, ya que no tiene en cuenta el comportamiento de la variable de estudio, E (t), durante el tiempo, por ende, el error es una variable aleatoria en donde no se puede captar todo el comportamiento de la variable de estudio.

Por otro lado, en búsqueda de realizar una mejor comparación entre los datos de E (t) y teniendo en cuenta el tiempo, se realizó la siguiente gráfica.

Figura 55

Grafica comparación distribución tiempo de retención.



Nota. La figura representa la gráfica comparativa entre la distribución de tiempos de residencia para el modelo CFD y el ensayo experimental.

Como se observa en la figura 55, las curvas presentan una gran diferencia, ya que como anteriormente se ha explicado la curva del modelo CFD se forma rápidamente, lo que indicó un comportamiento de mezcla completa, sin embargo, la curva del laboratorio tiende a ser simétrica y gaussiana con un comportamiento de flujo pistón, cabe mencionar que en ambos casos visualmente se puede decir que efectivamente predomina un tipo de flujo, pero hay presencia tanto de flujo pistón como de mezcla completa, además se puede observar que a los 56 minutos del modelo CFD sale la mayor concentración de trazador o señal $E(t)$, mientras que a nivel laboratorio la mayor concentración o señal $E(t)$ es a los 574 minutos.

Con base a lo anterior, se compara los parámetros cuantitativos que se encuentran en la siguiente tabla.

Tabla 12

Parámetros ensayo de trazadores experimental y CFD.

Parámetro	Reactor laboratorio	Reactor CFD
TRH experimental (h)	12,34	1,868
No. Tanques en serie (N)	5,863	1,949
% Flujo pistón	89,37%	35,33%
% Mezcla completa	10,63%	64,67%
% Zonas muertas	9,97%	-8,39%

Nota. La tabla contiene los valores obtenidos para los parámetros de tiempo de residencia hidráulico, número de tanques en serie porcentaje de flujo pistón, porcentaje de flujo mezclado y porcentaje de zonas muertas tanto en el modelo CFD como en el ensayo experimental.

A partir de la tabla 12, se evidencia la diferencia de los valores de TRH experimental hallados por medio de la técnica CFD y los del reactor del laboratorio, por esto se decidió realizar el cálculo del tiempo de retención teórico (τ) del modelo CFD, para dicho cálculo se utilizó la siguiente ecuación.

$$\tau = \frac{V}{v} \text{ Ec. 43}$$

Donde.

- V: volumen del equipo (m³).
- v: flujo volumétrico (m³/s).

Con la Ec.43, el valor de caudal registrado en la tabla 7 (3,6E^{-0,6} m³/min) y las dimensiones de la figura 12 (3.96E-04 m³), se obtuvo un tiempo de retención teórico de 110,01 min o 1,83 h, el cual es muy similar al TRH experimental del modelo CFD que se encuentra en la tabla 12, a partir de lo anterior se concluye que la baja similitud de los

resultados se debe al volumen, es decir que asumir un modelo bidimensional interfiere directamente con los resultados de los parámetros del ensayo de trazadores.

Por otro lado, al analizar el número de tanque en serie se evidencio un número mayor en el ensayo del laboratorio, esto debido a que la curva de $E(t)$ y el porcentaje del comportamiento de la mezcla, tiende a alejarse de un modelo ideal (mezcla completa), mientras que en el modelo CFD se obtuvo un valor menor de número de tanque es en serie, debido a que el comportamiento es ideal y se asemeja más a una mezcla completa.

Con respecto a los porcentajes de flujo pistón y mezcla completa se utilizó el mismo modelo de Wolf-Resnick, el cual indica que a mayor porcentaje de flujo pistón más eficiente es el equipo, por lo cual el modelo experimental con un valor de 89,37% es más eficiente que el modelo CFD (35,33%). Si se desea mejorar la eficiencia del modelo CFD se debe hacer una revisión de las condiciones hidráulicas e hidrodinámicas del reactor.

Con respecto al cálculo de las zonas muertas se observó un valor negativo para el modelo CFD, lo cual indica que no se presentan zonas muertas, además Levenspiel [69] afirma que si el tiempo de retención experimental (tabla 12) es mayor al tiempo de retención teórico (1,83 h) entonces algo en el recipiente está reteniendo el flujo del trazador, evidenciando así el lecho poroso.

Finalmente, la variabilidad que se presenta en los resultados también pudo ser ocasionada por el factor de Darcy y el valor de difusividad, ya que estos se supusieron, claramente se tuvo en cuenta lo realizado a nivel laboratorio, pero varios parámetros no fueron medidos y por tal motivo se incrementa el grado de incertidumbre.

4. CONCLUSIONES

A partir de la búsqueda bibliográfica sobre la metodología CFD se pudo determinar que la técnica CFD permite la modelización del ensayo de trazadores utilizando diferentes algoritmos como simple y pimple, en donde se determinó que dentro de los parámetros más importantes se destacó la clasificación del flujo y fluido.

En la búsqueda bibliográfica de los estudios previos realizados en la UAN se obtuvo los parámetros del ensayo de trazadores a comparar, tales como la distribución del tiempo de retención, el tiempo de retención, el porcentaje de flujo pistón y mezcla completa, el tiempo que duro el ensayo de trazadores, el trazador que se usó, entre otros. Además, se seleccionaron las dimensiones y el reactor que se iba a proyectar,

La geometría y el mallado del equipo se realizó por medio del programa Salome MECA en donde se optó por proyectar una geometría que únicamente incluyera la zona en donde transitaba el fluido, por otro lado, se optó por un mallado bidimensional, uniforme y tetraédrico, el cual generó 24490 volúmenes de tetraedros.

Se evidencio que, al dividir el modelo en tres fases, yendo desde la más sencilla a la más compleja, se obtuvo un mejor control de las variables críticas de la simulación, las cuales fueron el factor de Darcy ($1E^{-07}$) y el coeficiente de difusión ($2,33E^{-10}$), además se definieron las condiciones de la frontera según las necesidades de cada fase.

Para la validación estadística se utilizó las ecuaciones de error RMSE y MAE, obteniendo valores de $1,63E^{-03}$ y $8,97E^{-04}$, respectivamente, los cuales únicamente tienen en cuenta la variable de distribución del tiempo de retención, $E(t)$, más no tiene en cuenta los intervalos de tiempo en los que hay una mayor o menor salida de trazador.

El ensayo de trazadores del laboratorio obtuvo un porcentaje de mezcla pistón de 89,37%, mientras que el modelo CFD obtuvo un 35,33%, demostrando que el modelo del laboratorio es más eficaz. Adicionalmente, el ensayo del laboratorio presenta zonas muertas con un porcentaje de 9,97% y el modelo CFD no presentó dichas zonas.

Asumir un volumen diferente al evaluado a nivel laboratorio, influye en el comportamiento hidrodinámico del reactor, ya que el tiempo de retención depende del volumen del equipo, por ende, asumir que es bidimensional afecta los resultados obtenidos a partir del ensayo de trazadores.

BIBLIOGRAFIA

- [1] R. W. Samstag et al., "CFD for wastewater treatment: An overview," *Water Sci. Technol.*, vol. 74, no. 3, pp. 549–563, 2016, doi: 10.2166/wst.2016.249.
- [2] S. Jayanti and M. Saenz, "Computational Fluid Dynamics for Engineers and Scientists," *Ingeniería, Investigación y Tecnología*, 2018. [En línea]. Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/326410814_Computational_Fluid_Dynamics_for_Engineers_and_Scientists_An_Introduction_with_Applications.
- [3] J. Wendt, *Computational Fluid Dynamics*, 3rd ed. 2009.
- [4] R. Ballesteros, J. González, J. M. Fernandez, and K. M. Argüelles, *Técnicas numéricas en Mecánica de Fluidos*. 2003.
- [5] R. Blanco-Aguilera, J. L. Lara, G. Barajas, I. Tejero, and R. Díez-Montero, "Hydrodynamic optimization of multi-environment reactors for biological nutrient removal: A methodology combining computational fluid dynamics and dimensionless indexes," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 224, p. 115766, 2020, doi: 10.1016/j.ces.2020.115766.
- [6] J. E. Duran, F. Taghipour, and M. Mohseni, "CFD modeling of mass transfer in annular reactors," *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 52, no. 23–24, pp. 5390–5401, 2009, doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2009.07.004>.
- [7] S. Wang, H. Lu, F. Zhao, and G. Liu, "CFD studies of dual circulating fluidized bed reactors for chemical looping combustion processes," *Chem. Eng. J.*, vol. 236, pp. 121–130, 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2013.09.033>.
- [8] L. Shu et al., "Process optimization in a stirred tank bioreactor based on CFD-Taguchi method: A case study," *J. Clean. Prod.*, vol. 230, pp. 1074–1084, 2019, doi: 10.1016/j.jclepro.2019.05.083.
- [9] E. Wicklein et al., "Good modelling practice in applying computational fluid dynamics for WWTP modelling," *Water Sci. Technol.*, vol. 73, no. 5, pp. 969–982, 2016, doi: 10.2166/wst.2015.565.
- [10] C. Ariza, C. Casado, R. Q. Wang, E. Adams, and J. Marugán, "Comparative Evaluation of OpenFOAM® and ANSYS® Fluent for the Modeling of Annular

- Reactors,” Chem. Eng. Technol., vol. 41, no. 7, pp. 1473–1483, 2018, doi: 10.1002/ceat.201700455.
- [11] Salome, “What is Salome?,” Salome ORG, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://www.salome-platform.org/>.
- [12] Y. A. Cengel and J. M. Cimbala, Fluid Mechanics: Fundamentals and Applications, 1era Edición. New York: McGraw-Hill, 2006.
- [13] EDinformatics, “What are Fluids?,” 1999. [En línea]. Disponible en: https://www.edinformatics.com/math_science/what_are_fluids.htm.
- [14] A. Carrillo Parra, “Desarrollo de nuevos nanofluidos. Caracterización y comportamiento reológico,” Universidad Politécnica de Cartagena, 2016. [En línea]. Disponible en: <https://repositorio.upct.es/bitstream/handle/10317/6659/tfg-car-des.pdf?sequence=1>
- [15] A.A, “Introduction to Fluid Mechanics,”. [En línea]. Disponible en: https://shodhganga.inflibnet.ac.in/bitstream/10603/37515/6/06_chapter%201.pdf
- [16] R. Bansal, A Textbook of Fluid Mechanics and Hydraulic Machines, Novena Ed. Delhi, 2017.
- [17] S. Sundaresan, “Role of hydrodynamics on chemical reactor performance,” Curr. Opin. Chem. Eng., vol. 2, no. 3, pp. 325–330, 2013, doi: <https://doi.org/10.1016/j.coche.2013.06.003>.
- [18] M. A. Diaz, J. Duenas, and A. Cabrera, “Estudio hidrodinámico de reactores empacados de flujo ascendente (REFA).,” RIHA, vol. 35, no. 3, pp. 101–108, 2014, [En línea]. Disponible en: http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1680-
- [19] O. Levenspiel, Ingeniería de las reacciones químicas, Tercera Ed. México: Limusa S.A, 2004.
- [20] F. M. White, Mecánica de Fluidos, 5ta ed. Madrid: McGraw-Hill, 2003.

- [21] J. Guayazán, F. Herrera, J. Montero, and J. Gracia, “Metodología para calcular el tiempo de residencia en sistema digestor-prensa en plantas de beneficio,” *Rev. Palmas*, vol. 34, no. 2, pp. 9–13, 2013.
- [22] H. S. Fogler, *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*, Cuarta edi. México: Person Educación, 2008.
- [23] J. Tu, G.-H. Yeoh, and C. Liu, *Computational fluid dynamics*, 2da ed. Elsevier, 2013.
- [24] M. Guevara, “Congreso Semana Técnica Ingeniería Química FUA 2020,” in *On-Board pollution in public transportation systems, and possible alternatives-Colombia (Contaminación a bordo de los sistemas de transporte público y posibles alternativas-Colombia)*, 2020.
- [25] A.A, “Dinámica Computacional de Fluidos,” pp. 1–8. [En línea]. Disponible en: <http://bibing.us.es/proyectos/abreproy/3718/fichero/Parte+I%252FCapitulo+3.pdf>
- [26] J. Osses, “El método de volúmenes finitos,” ESSS, 2016. [En línea]. Disponible en: <https://www.esss.co/es/blog/el-metodo-de-volumenes-finitos/>.
- [27] Gobierno de Canarias, “Ubuntu Linux,” Gobierno de Canarias. [En línea]. Disponible en: <http://www3.gobiernodecanarias.org/medusa/ecoescuela/seguridad/ciudadania-y-seguridad-tic/principios-legales/software-libre/ubuntu-linux/>.
- [28] A.A, “Ubuntu Manuals,” Ubuntu and Canonical Ltd, 2019. [En línea]. Disponible en: [http://manpages.ubuntu.com/manpages/xenial/man1/bash.1.html#:~:text=Bash is an sh-compatible,shells \(ksh and csh\)](http://manpages.ubuntu.com/manpages/xenial/man1/bash.1.html#:~:text=Bash is an sh-compatible,shells (ksh and csh).).
- [29] The OpenFOAM Foundation, “OpenFOAM,” OpenFoam, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://openfoam.org/>.
- [30] OpenFOAM foundation, “User guide.” p. 243, 2020, [En línea]. Disponible en: <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/OpenFOAMUserGuide-A4.pdf>
- [31] Kitware, “Welcome to Paraview,” Paraview org, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://www.paraview.org/>.

- [32] C. Greenshields, "User Guide version 8," OpenFoam Foundation Ltd, 2020. [En línea]. Disponible en: <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/OpenFOAMUserGuide-A4.pdf>.
- [33] E. León and K. Pérez, "ANÁLISIS DE UN SISTEMA DE TUBERÍAS CON FUGA UTILIZANDO DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD) MEDIANTE EL SOFTWARE OPENFOAM.," Universidad Francisco de Paula Santander Ocaña, 2012.
- [34] P. A. López-Jiménez, J. Escudero-González, T. Montoya Martínez, V. Fajardo Montañana, and C. Gualtieri, "Application of CFD methods to an anaerobic digester: The case of Ontinyent WWTP, Valencia, Spain," *J. Water Process Eng.*, vol. 7, pp. 131–140, 2015, doi: 10.1016/j.jwpe.2015.05.006.
- [35] R. Blanco-Aguilera, J. L. Lara, G. Barajas, I. Tejero, and R. Díez-Montero, "CFD simulation of a novel anaerobic-anoxic reactor for biological nutrient removal: Model construction, validation and hydrodynamic analysis based on OpenFOAM®," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 215, p. 115390, 2020, doi: 10.1016/j.ces.2019.115390.
- [36] R. Blanco-Aguilera, J. L. Lara, G. Barajas, I. Tejero, and R. Díez-Montero, "Hydrodynamic optimization of multi-environment reactors for biological nutrient removal: A methodology combining computational fluid dynamics and dimensionless indexes," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 224, p. 115766, 2020, doi: 10.1016/j.ces.2020.115766.
- [37] C. Ariza, C. Casado, R. Q. Wang, E. Adams, and J. Marugán, "Comparative Evaluation of OpenFOAM® and ANSYS® Fluent for the Modeling of Annular Reactors," *Chem. Eng. Technol.*, vol. 41, no. 7, pp. 1473–1483, 2018, doi: 10.1002/ceat.201700455.
- [38] E. J. Muñoz Suarez, "Modelo Euleriano-Lagrangiano con método de elementos discretos para un flujo líquido-sólido de baja velocidad ascendente," *Ion*, vol. 25, no. 2, pp. 73–84, 2012, [En línea]. Disponible en: http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0120-100X2012000200009&lng=es&nrm=iso.

- [39] A. Martínez, T. Montoya, V. Fajardo, and A. López, "Modeling flow inside an anaerobic digester by CFD techniques," *Int. J. Energy Environment*, vol. 2, no. 6, pp. 963–974, 2011.
- [40] IAEA International Atomic Energy Agency, *Integration of tracing with computational fluid dynamics for industrial process investigation*. Viena, 2004
- [41] S. Pérez and D. Velandia, "Evaluación de la producción de biogás en un reactor metanogénico escalonado (RME) usando cenizas de cascarilla de arroz como material adsorbente para diferentes cargas orgánicas (OLR)," *Fundación Universidad América*, 2020.
- [42] J. E. Navas Salas y J. F. Peña Amaya, "Desarrollo de una propuesta para la producción de biogás en un reactor anaerobio de lecho estructurado (ASTBR) para la vereda Calderón, Puerto Boyacá," *Fundación Universidad de América*, 2020.
- [43] F. Otálora, "Evaluación de la producción de Biogás en sistemas de dos etapas usando un reactor anaerobio de lecho fijo estructurado (ASTBR) y reactor metanogénico escalonado (RME) alimentado con licor de pentosas.," *Universidad Federal De Ouro Preto*, 2018.
- [44] I. Martin, R. Salcedo, y R. Font, *MECÁNICA DE FLUIDOS: Tema1, Flujo interno de fluidos incompresibles y compresibles*. Universidad de Alicante. p.13, [en línea]. Disponible en: https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/20299/1/tema1_Flujo%20interno.pdf
- [45] L. Madeira, A. Mendes, y F. Magalhaes, "Teaching Laminar-Flow Reactors: From Experimentation to CFD Simulation," *Int. J. Eng.*, vol. 22, no. 1, pp. 188–196, 2006.
- [47] J. C. Monje, "Estudio matemático del comportamiento de un fluido incompresible en flujo laminar," *Universidad Politécnica de Madrid*, 2015. [en línea]. Disponible en : http://oa.upm.es/38373/7/TFG_JUAN_CARLOS_MONJE_BRUGUERA.pdf.
- [48] E. Gonzalez, "FORMACIÓN Y DESARROLLO DE BIOFILMS: SU IMPACTO EN LOS SISTEMAS DE ABASTECIMIENTO Y DISTRIBUCIÓN DE AGUA POTABLE," *La Plata*, 2016. [en línea]. Disponible en:

http://sedici.unlp.edu.ar/bitstream/handle/10915/66667/Documento_completo____Lic.Evangelina_Gonzalez..pdf?sequence=1&isAllowed=y.

- [49] C. Rodríguez and J. Moreiras, “Salome-Meca, para preproceso y postproceso de cálculos numéricos,” Norplan Engineering, 2015. [en línea]. Disponible en: http://www.technicalcourses.net/portal/es/blog/blog_entrada.php?entrada_id=94.
- [50] A.A, “Capítulo 3. Consideraciones sobre métodos numéricos.” [En línea]. Disponible en: <https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2117/93706/05Ebc05de12.pdf?sequence=5&isAllowed=y>.
- [51] C. Greenshields, “OpenFOAM v6 User Guide: 7.3 Transport/rheology models.” 2018, [En línea]. Disponible en : <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v6-transport-rheology/>.
- [52] C. Greenshields, “File structure of OpenFOAM cases,” OpenFoam Foundation, 2018. [En línea]. Disponible en: <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v6-case-file-structure/>.
- [53] C. Greenshields, “OpenFOAM v6 User Guide: 2.1 Lid-driven cavity flow,” 2018. En línea]. Disponible en: <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v6-cavity/>.
- [54] A.A, “zeroGradient Boundary Condition,” CFD support. [En línea]. Disponible en: <https://www.cfdsupport.com/openfoam-training.html>.
- [55] OpenFOAM, “simpleFoam,” OpenCFD Ltd, 2018. [En línea]. Disponible en: <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-applications-solvers-incompressible-simpleFoam.html>
- [56] Fluid Mechanics 101, [CFD] The SIMPLE Algorithm (to solve incompressible Navier-Stokes): (sep.25,2018). Consultado: marzo 26 de 2021 [Video en línea]. Disponible en: <https://www.youtube.com/watch?v=OOILoJ1zuiw&t=4s>
- [57] OpenFOAM, “SIMPLE algorithm,” OpenCFD Ltd, 2018. [En línea]. Disponible en: <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-applications-solvers-simple.html>

- [58] M. Oezcan, "How to Predict Darcy and Forchheimer Coefficients for Perforated Plates Using Analytical Approach?," Simscale, 2020. [En línea]. Disponible en: <https://www.simscale.com/knowledge-base/predict-darcy-and-forchheimer-coefficients-for-perforated-plates-using-analytical-approach/>
- [59] H. Hafsteinsson, "Porous Media in OpenFOAM," Chalmers, 2009. [En línea]. Disponible en: http://www.tfd.chalmers.se/~hani/kurser/OS_CFD_2008/HaukurElvarHafsteinsson/haukurReport.pdf
- [60] D. V. W. de Vries, "Characterization of polymeric foams," Universidad tecnologica de Eindhoven, 2009. [En línea]. Disponible en: http://www.mate.tue.nl/mate/pdfs/10702_sec.pdf
- [61] PAGEoTechnical Ltd, "PAG 25 Geocomposite – Single Wrap," PAGEo, 2018.
- [62] Universidad de Cornell, "Paraview - Advanced: Plot Over Line," Virtual Workshop, 2021. [En línea]. Disponible en: <https://cvw.cac.cornell.edu/ParaViewAdv/plotoverline>
- [63] I. Martin, R. Salcedo, and F. Font, "Transporte cantidad movimiento sólido-fluido," in Mecanica de fluidos, Universidad de Alicante, 2011, p. 50.
- [64] A.A, "ScalarTransportFoam," OpenFoam wiki, 2010. [En línea]. Disponible en: <https://openfoamwiki.net/index.php/ScalarTransportFoam>
- [65] A. Mekonnen, "Modelling a tracer injection and sensor manifold," Universidad de ciencia y tecnología de Noruega, 2016.
- [66] C. Mantell, M. Rodriguez, and E. Martinez de la Ossa, "Estimation of the diffusion coefficient of a model food dye (malvidin 3,5-diglucoside) in a high pressure CO₂ + methanol system," Supercritical Fluids, vol. 29, no. 1–2, pp. 165–173, 2004, doi: [https://doi.org/10.1016/S0896-8446\(03\)00030-5](https://doi.org/10.1016/S0896-8446(03)00030-5).
- [67] R. Treybal, Operaciones de transferencia de masa, II. McGraw – Hil, " 2da Edición. New York. McGraw-Hill, s.f.

- [68] Chemsr, "Chlorophyllin", [en línea]. Disponible en: https://www.chemsrc.com/en/cas/11006-34-1_895192.html
- [69] A.A, "Densidad del agua líquida entre 0 °C y 100 °C", [en línea]. Disponible en: https://www.ugr.es/~elenasb/teaching/densidadtemperatura_agua_tabla.pdf
- [70] A.A, "Difusión y osmosis." [En línea]. Disponible en: https://www2.ulpgc.es/descargadirecta.php?codigo_archivo=5206.
- [71] O. Levenspiel, "Tracer Technology," in FLUID MECHANICS AND ITS APPLICATIONS, 96th ed., R. Moreau, Ed. Nueva York: Springer, 2012, p. 150.
- [72] Centro Panamericano de Ingeniería Sanitaria y Ciencia del ambiente, *Tratamiento de agua para consumo humano Plantas de filtración rápida Manual III: Evaluación de plantas de tecnología apropiada*. Lima: CEPIS/OPS, 2005.
- [73] H. Fogler, "Distributions of Residence Times for Chemical Reactors," en ELEMENTOS DE INGENIERIA DE LAS REACCIONES QUIMICAS, 4th ed., Pearson Education, 2006, p. 78
- [74] Gabri, "¿Qué es el error cuadrático medio RMSE?," *ArcGreek*, 2018. [En línea]. Disponible en: <https://acolita.com/que-es-el-error-cuadratico-medio-rmse/>

ANEXOS

ANEXO 1

CASO BASE “CAVITY” DEL SOLUCIONADOR ICOFOAM (FASE I)

Se involucra un flujo isotérmico e incompresible en un dominio cuadrado bidimensional [53].

Subdirectorio 0: en este subdirectorio se encontraron los archivos u y p, como se muestra a continuación.

Figura 56

Hoja de cálculo de velocidad.

```
FoamFile
{
  version      2.0;
  format       ascii;
  class        volVectorField;
  object       U;
}
// *****
dimensions    [0 1 -1 0 0 0];
internalField uniform (0 0 0);
boundaryField
{
  movingWall
  {
    type          fixedValue;
    value         uniform (1 0 0);
  }

  fixedWalls
  {
    type          noSlip;
  }

  frontAndBack
  {
    type          empty;
  }
}
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de velocidad del caso base “cavity”, con sus respectivos valores y condiciones de frontera.

En la figura anterior, se pudo evidenciar que según la Tabla 1 las dimensiones de la velocidad son m/s, también se corroboró que el campo interno de velocidad al inicio de la simulación tiene un valor uniforme de 0.

Con respecto a las condiciones de frontera, se encontraron tres parches, los cuales fueron: movingWall, representando la parte superior móvil de la caja y en donde se estableció un valor del vector de velocidad en el eje x de 1.000 m/s, fixedWalls haciendo referencia a las paredes fijas y a la base de la cavidad, se estableció de tipo “noSlip” lo que implicaba una condición de valor límite de 0 para la velocidad y frontAndBack

constituido por la parte frontal y trasera de la figura en dos dimensiones que se estableció como “empty” o vacío.

Figura 57

Hoja de cálculo de presión cinemática.

```
-----  
FoamFile  
{  
  version      2.0;  
  format       ascii;  
  class        volScalarField;  
  object       p;  
}  
// -----  
dimensions     [0 2 -2 0 0 0 0];  
internalField  uniform 0;  
boundaryField  
{  
  movingWall  
  {  
    type      zeroGradient;  
  }  
  fixedWalls  
  {  
    type      zeroGradient;  
  }  
  frontAndBack  
  {  
    type      empty;  
  }  
}
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de presión del caso base “cavity”, con sus respectivos valores y condiciones de frontera.

En la figura previa, se pudo observar que las dimensiones de la presión cinemática según la tabla 1 son m^2/s^2 , cuyo campo interno inicial presentó un valor de 0 al ser un fluido incompresible.

En cuanto a las condiciones de frontera se definieron como zeroGradient para movingWall y fixedWalls, lo cual significa que el gradiente normal de presión es cero, en cuanto a frontAndBack se definió una condición de vacío al ser una figura en 2D.

- Subdirectorio constant: En esta carpeta se encontraba el archivo transportProperties, que para este caso solamente necesitaba la especificación del valor de la viscosidad cinemática, como se muestra en la siguiente figura.

Figura 58

Hoja de cálculo de propiedades de transporte.

```
 FoamFile
 {
   version      2.0;
   format       ascii;
   class        dictionary;
   location     "constant";
   object       transportProperties;
 }
 // *****
 nu             [0 2 -1 0 0 0] 0.01;
 // *****
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de propiedades de transporte, en donde se asigna el valor de la viscosidad cinemática del fluido de trabajo.

En la figura anterior, se observó que la viscosidad cinemática es denominada “nu” y tiene unidades según la tabla 1 de m^2/s . Con el fin de obtener un valor de Reynolds igual a 10, la viscosidad cinemática es de $0.010 m^2/s$.

- Subdirectorio system: En este subdirectorio se encontraban los archivos llamados blockMeshDict, controlDict, fvSchemes y fvSolution.

Se revisaron las hojas correspondientes al blockMeshDict y controlDict, que se muestran a continuación.

Figura 59

Hoja de cálculo de controlDict.

```
location      "system";
object        controlDict;
}
// *****
application   icoFoam;
startFrom     startTime;
startTime     0;
stopAt        endTime;
endTime       0.5;
deltaT        0.005;
writeControl  timeStep;
writeInterval 20;
purgeWrite    0;
writeFormat   ascii;
writePrecision 6;
writeCompression off;
timeFormat    general;
timePrecision 6;
runTimeModifiable true;
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo de controlDict deñ caso base “cavity”, en donde se asignan los valores que proporcionan el control de la simulación.

De lo previo, se consideraron dentro de los parámetros más importantes a tener en cuenta para la simulación: el tiempo de inicio o `startTime`, el intervalo de escritura o `writeInterval`, el `deltaT` o saltos de tiempo y el tiempo final o `endTime`.

Para empezar, se observó que al tiempo inicial se le asignó un valor de 0 s, debido a que el software interpreta que en el tiempo 0 los valores iniciales para empezar a simular se encontraban ubicados en el subdirectorio 0, sin embargo, esto no es siempre necesario, ya que hay sistemas en donde los intervalos de solución de interés se encuentran después de transcurrido un tiempo inicial.

El tiempo final se asignó con un valor de 0.5 s, debido a que se trata de un flujo laminar y este tiempo era suficiente para que el flujo se desarrollará completamente.

Los intervalos o saltos de tiempo, se calcularon mediante el número de Courant (Ec. 23), para asegurar que esta restricción se cumpliera, el valor de deltaT se definió como 0.005 s.

Por último, para asignar el valor del número de intervalos, se tuvo en cuenta la longitud total del dominio en la dirección X y Y, y la división que se hizo teniendo en cuenta esta longitud, la cual fue de 20, valor que se escribe también en la hoja de cálculo de blockMeshDict la cual se explicará en breve.

Figura 60

Hoja de cálculo de blockMeshDict.

```

FoamFile
{
  version 2.0;
  format ascii;
  class dictionary;
  object blockMeshDict;
}
// .....
convertToMeters 0.1;

vertices
(
  (0 0 0)
  (1 0 0)
  (1 1 0)
  (0 1 0)
  (0 0 0.1)
  (1 0 0.1)
  (1 1 0.1)
  (0 1 0.1)
);

blocks
(
  hex (0 1 2 3 4 5 6 7) (20 20 1) simpleGrading (1 1 1)
);

edges
(
);

boundary
(
  movingWall
  {
    type wall;
    faces
    {
      (3 7 6 2)
    };
  }
  fixedWalls
  {
    type wall;
    faces
    {
      (0 4 7 3)
      (2 6 5 1)
      (1 5 4 0)
    };
  }
  frontAndBack
  {
    type empty;
    faces
    {
      (0 3 2 1)
      (4 5 6 7)
    };
  }
);

```

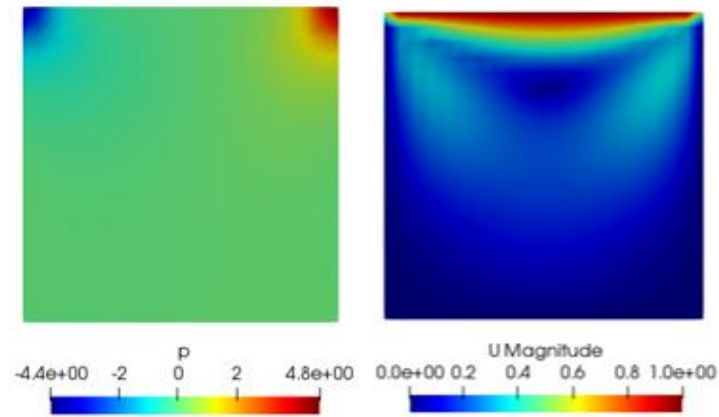
Nota. La figura representa la hoja de cálculo blockMeshDict del caso base “cavity”.

En Hoja de cálculo de blockMeshDict, se hizo la construcción de la geometría y del mallado por ser un volumen de control sencillo, en esta hoja se ubicaron los vértices que corresponden a los puntos que delimitan el volumen; los bloques, en donde se asignaron los vértices que constituyen los cubos que generan la figura y las condiciones de frontera, las cuales siempre deben tener los mismos nombres a las asignadas en los archivos ubicados en el subdirectorio 0.

Los resultados obtenidos se visualizaron en paraView, obteniendo los siguientes perfiles que se presentan.

Figura 61

Comportamiento de presión cinemática y velocidad caso Cavity.



Nota. La figura representa el perfil de presión y velocidad para el caso base “cavity”.

El comportamiento evidenciado en la figura se refiere a la velocidad y presión en el tiempo 0.5s de la simulación, allí se evidencio que la mayoría de perturbaciones se encontraban en la parte superior de la cavidad, ya que era en donde había movimiento de fluido.

ANEXO 2

CASO BASE “POROUSBLOCKAGE” DE POROUSSIMPLEFOAM (FASE II)

Este caso presenta una superficie porosa, la cual se define por topoSetDict en el subdirectorio system y fvOptions en la carpeta constant, que se ilustran a continuación, respectivamente.

Figura 62

Hoja de cálculo topoSetDict.

```
actions
(
  // porousBlockage
  {
    name    porousBlockageCellSet;
    type    cellSet;
    action  new;
    source  boxToCell;
    sourceInfo
    {
      box (-0.5 -0.5 -1) (0.5 0.5 1);
    }
  }
  {
    name    porousBlockage;
    type    cellZoneSet;
    action  new;
    source  setToCellZone;
    sourceInfo
    {
      set porousBlockageCellSet;
    }
  }
);
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo topoSetDict, donde se define la zona porosa del caso base “porousblockage”.

Como se observa en la hoja de cálculo topoSetDict, allí se define la zona porosa, por medio del recurso boxtoCell para designar el volumen y el recurso setToCellZone el cual agrupa un conjunto de celdas con el propósito de crear una zona sin paredes físicas, también se encuentran las coordenadas que delimitan el volumen de control de la superficie porosa definidas a partir de la geometría.

Figura 63

Hoja de cálculo fvOptions.

```
porosity1
{
    type            explicitPorositySource;
    active          yes;
    selectionMode   cellZone;
    cellZone        porousBlockage;

    explicitPorositySourceCoeffs
    {
        selectionMode   cellZone;
        cellZone        porousBlockage;
        type            DarcyForchheimer;

        // D 100; // Very little blockage
        // D 200; // Some blockage but steady flow
        // D 500; // Slight waviness in the far wake
        D 1000; // Fully shedding behavior

        d ($D $D $D);
        f (0 0 0);

        coordinateSystem
        {
            type        cartesian;
            origin      (0 0 0);
            coordinateRotation
            {
                type        axesRotation;
                e1          (0.998 0.061 0);
                e2          (0.016 -1.000 0);
            }
        }
    }
}
```

Nota. La figura representa la hoja de cálculo fvOptions, donde se asigna los valores del coeficiente Darcy Forcheimer del caso base “porousblockage”.

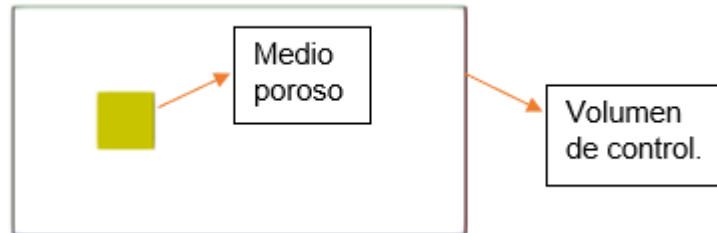
En la figura anterior, se observan las propiedades de porosidad, entre las se resalta el coeficiente de Darcy Forchheimer que permite añadir una zona de porosidad en el dominio, en este caso la relación parabólica velocidad-presión se desprecia ($f=0$), por lo tanto solo se tuvo en cuenta la contribución de Darcy, la cual tiene en cuenta la relación lineal velocidad-caída de presión que define que tan poroso o sólido es el lecho y la resistencia viscosa de este.

En coordinateSystem se definió en type axesRotation, los componentes del sentido de flujo del lecho.

A partir de estas dos carpetas se construye el medio poroso, el cual se muestra a continuación.

Figura 64

Medio poroso de caso porousBlockage.

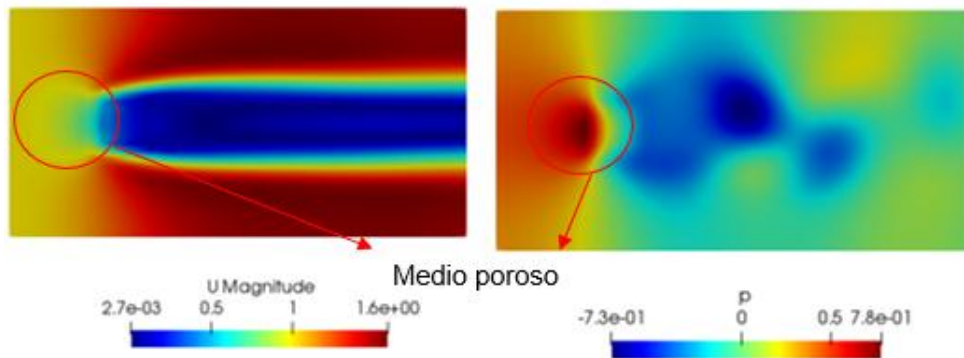


Nota. La figura representa la zona porosa dentro del volumen de control del caso base "porousblockage".

Se observó la presencia de una zona porosa, la cual no se definió como frontera, ya que es de tipo cellZone, ésta se encontraba ubicada en la parte izquierda del volumen de control, produciendo una perturbación en el sentido del flujo, como se muestra en la siguiente figura.

Figura 65

Velocidad y presión cinemática de caso porousBlockage.



Nota. La figura representa el perfil de velocidad y presión cinemática del caso base "porousblockage".

A partir de la figura, es posible observar las alteraciones que se produjeron en el flujo por la presencia de un medio poroso en las variables de velocidad y presión.

En la velocidad se observa una disminución de magnitud debido al contacto con el medio, por otro lado, en la presión se observa un fenómeno similar, pero en este la magnitud aumenta, es debido a esto la importancia de realizar un estudio hidrodinámico que incorpore el medio poroso.

ANEXO 3

RECOMENDACIONES

Se recomienda realizar la simulación en un software licenciado con interfaz gráfica para facilitar la adjudicación de datos y así realizar de una manera más cómoda la proyección de la geometría y malla.

Realizar un modelo CFD en tres dimensiones y realizar el ensayo de trazadores para comparar los resultados con los obtenidos a nivel experimental.

Disminuir el número de datos asumidos por medio de fichas técnicas y de información que proporcione el laboratorio.

Realizar el medio poroso por medio de la función snappyHexMesh de openFoam.

Acoplar el tubo donde se transporta el trazador a la entrada del reactor, para esto se sugiere utilizar otro programa para la proyección de la geometría.

Normalizar los modelos estadísticos con el fin de poder obtener valores más acordes a los obtenidos actualmente.

Realizar el análisis de sensibilidad correspondiente a las variables de coeficiente de difusión y coeficiente de Darcy, con el fin de observar la variabilidad e incidencia de estos en los resultados obtenidos.