

UNIVERSIDAD
AUTÓNOMA
METROPOLITANA



Casa abierta al tiempo **Azcapotzalco**

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

DEPARTAMENTO DE ENERGÍA

**SIMULACIÓN CFD DE LA HIDRODINÁMICA DE UN
REACTOR ANAEROBIO DE LECHO FLUIDIZADO INVERSO**

POR

HUGO RODRÍGUEZ PÉREZ

PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN INGENIERÍA DE PROCESOS

DIRECTOR

DR. JORGE RAMÍREZ MUÑOZ

CO-DIRECTOR

DR. VALAUR E. MÁRQUEZ BAÑOS



Dedico este trabajo a mi amada esposa, por su apoyo, comprensión, paciencia y el ánimo que me brinda día con día para alcanzar nuevas metas, tanto profesionales como personales.

A mis padres por ser el pilar fundamental en todo lo que soy.

AGRADECIMIENTOS

Dr. Jorge Ramírez Muñoz

Por la orientación y ayuda que me brindó para la realización de este proyecto, por su apoyo y amistad que me permitieron aprender mucho más que lo estudiado.

Dr. Valaur E. Márquez Baños

Por su apoyo, paciencia, críticas, orientación y sobre todo por su amistad.

Dr. Alejandro Alvarado Lassman

Por su apoyo y orientación de los datos experimentales.

Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología

Por el apoyo financiero otorgado para la realización del posgrado.

RESUMEN

En la presente tesis se estudió la hidrodinámica no estacionaria de un reactor de lecho fluidizado inverso (RLFI) operando en el régimen laminar empleado para el tratamiento anaerobio de aguas residuales de la industria cervecera, mediante técnicas de dinámica fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés). El reactor analizado fue caracterizado experimentalmente previamente por Alvarado-Lassman *et al.* en 2008, trabajo del cual se tomaron los datos experimentales de expansión del lecho de sólidos para la validación de las simulaciones a las condiciones de operación reportadas.

Se construyeron dos modelos computacionales en 2 y 3 dimensiones (i.e. 2D y 3D), con sus respectivos análisis de independencia de malla, en donde para el modelo 2D se realizó un estudio del efecto del paso de tiempo en los resultados numéricos. Para modelo 2D, se realizaron pruebas empleando los modelos de arrastre de Syamlal y O'Brien (1989) y de Gidaspow (1994). Se encontró que el modelo de arrastre de Syamlal y O'Brien (1989) exhibe una mejor aproximación de la expansión de lecho a las distintas condiciones de operación reportadas por Alvarado-Lassman y colaboradores en 2008. Usando estas simulaciones 2D, fue posible obtener una descripción de los patrones de flujo, perfiles de tasa de corte y fracción volumen de sólidos, además de la caída de presión en el reactor.

Se encontró que ambos modelos (i.e., 2D y 3D) producen resultados muy similares de expansión final del lecho y de la porosidad de la cama; sin embargo, los valores de la velocidad promedio en ambas fases presentan diferencias significativas a velocidades de alimentación superiores a 8 m/h.

Los modelos computacionales propuestos pueden ser de gran utilidad para el análisis de este tipo de reactores, dando que se tiene la posibilidad de estudiar su comportamiento a cualquier escala, permitiendo con esto una mejor comprensión de su hidrodinámica y del efecto de las condiciones de operación evaluadas sobre su desempeño hidrodinámico.

INDICE

| | |
|---|----|
| AGRADECIMIENTOS | 3 |
| RESUMEN | 4 |
| INDICE | 5 |
| ÍNDICE DE FIGURAS | 7 |
| ÍNDICE DE TABLAS | 9 |
| NOMENCLATURA | 10 |
| CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN | 12 |
| 1.1 Justificación | 14 |
| 1.3 Objetivos | 16 |
| 1.3.1 Objetivo general | 16 |
| 1.3.2 Objetivos particulares | 16 |
| CAPÍTULO 2. MARCO TEÓRICO | 17 |
| 2.1 Reactores de Lecho Fluidizado..... | 17 |
| 2.2 Estudios hidrodinámicos en RLFI. | 19 |
| 2.3 Modelos computacionales desarrollados para RFLI. | 22 |
| 2.4 Modelo de flujo granular Euler-Euler | 26 |
| 2.4.1 El modelo Euleriano fluido-sólido. | 26 |
| 2.4.2 Ecuaciones gobernantes..... | 27 |
| CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA. | 32 |
| 3.1 Sistema experimental estudiado por Alvarado-Lassman <i>et al.</i> (2008)..... | 32 |
| 3.2 Características del material de soporte | 33 |
| 3.3 Definición de geometrías del dominio computacional para el RLFI..... | 35 |
| 3.5 Configuración de las simulaciones. | 36 |
| 3.5.1 Especificación del algoritmo de solución..... | 36 |

| | |
|---|-----------|
| 3.5.2 Modelo de flujo. | 36 |
| 3.5.3 Especificación de los materiales..... | 37 |
| 3.5.4 Interacción liquido-solido..... | 37 |
| 3.5.5 Condiciones iniciales y de frontera | 37 |
| 3.5.6 Métodos de solución..... | 38 |
| 3.5.7 Criterios de convergencia | 38 |
| 3.6 Calculo de la expansión relativa mediante datos de simulación. | 39 |
| CAPÍTULO 4. RESULTADOS..... | 40 |
| 4.1 Modelo bidimensional | 40 |
| 4.1.1 Análisis de independencia de malla y paso del tiempo. | 40 |
| 4.1.2 Comparación con datos experimentales | 43 |
| 4.1.3 Perfiles de fracción volumen de partículas..... | 46 |
| 4.1.3 Caídas de presión en el RLF1. | 49 |
| 4.1.4 Perfiles de velocidad y tasa de corte..... | 50 |
| 4.2 Modelo tridimensional..... | 55 |
| 4.2.1 Análisis de independencia de malla y paso del tiempo. | 55 |
| 4.2.2 Comparación con el modelo 2D | 57 |
| CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES | 61 |
| REFERENCIAS | 63 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 2.1 Soporte. Diagrama de un reactor de lecho fluidizado de flujo ascendente, RLFA (a) y un reactor de lecho fluidizado inverso, RLFI (b)..... | 18 |
| Figura 3.1 a) Dispositivo experimental reactor LFI (Sandoval-Ramos, 2007), b) Esquema del reactor LFI a nivel laboratorio (Alvarado-Lassman <i>et al.</i> 2008)..... | 32 |
| Figura 3.2 Soporte (extendsphere TM) sin colonizar visto con el microscopio..... | 34 |
| Figura 3.3 Dominios generados y sus mallas computacionales iniciales para el RLFI..... | 35 |
| Figura 3.4 Perfil axial de la fracción volumen de la fase sólida..... | 39 |
| Figura 4.1 Mallas 2D estudiadas en el análisis de independencia de malla. | 41 |
| Figura 4.2 Efecto del tamaño de paso y la de la malla sobre la altura del lecho expandido (a), la velocidad promedio del y líquido (b) de los sólidos (c). | 42 |
| Figura 4.3 Comparación con datos experimentales de Alvarado-Lassman <i>et al.</i> (2008)..... | 44 |
| Figura 4.4 Comparación de la porosidad del lecho experimental contra la simulación CFD y correlaciones empíricas. | 45 |
| Figura 4.5 Perfiles de la fracción volumen de partículas para el RLFI operando con una velocidad de líquido de 3 m/h con $H_0=0.12$ m (a), 0.24 m (b), 0.36 m (c), 0.48 m (d)..... | 46 |
| Figura 4.6 Contornos de fracción volumen de partículas para el RLFI operando con $H_0=0.12$ m y 0.24 m. | 47 |
| Figura 4.7 Contornos de fracción volumen de partículas para el RLFI operando con $H_0=0.36$ m y 0.48 m. | 48 |
| Figura 4.8 Caídas de presión en el RLFI a distintas alturas iniciales del lecho. | 49 |
| Figura 4.9 Patrones de flujo en forma de vectores con tono de velocidad (m/h) para el RLFI operando con $H_0=0.12$ m y 0.24 m. | 51 |
| Figura 4.10 Patrones de flujo en forma de vectores con tono de velocidad (m/h) para el RLFI operando con $H_0=0.36$ m y 0.48 m. | 52 |
| Figura 4.11 Perfiles de la tasa de corte (s^{-1}) para el RLFI operando con $H_0=0.12$ m y 0.24 m. | 53 |
| Figura 4.12 Perfiles de la tasa de corte (s^{-1}) para el RLFI operando con $H_0=0.36$ m y 0.48 m. | 54 |
| Figura 4.13 Mallas 3D estudiadas en el análisis de independencia de malla. | 56 |

| | |
|---|----|
| Figura 4.14 Análisis de independencia de malla sobre la altura del lecho expandido (a), la velocidad promedio del líquido y de los sólidos (b)..... | 57 |
| Figura 4.15 Comparación de la altura final del lecho obtenida mediante el modelo 3D y el 2D con los datos de Alvarado-Lassman <i>et al.</i> (2008)..... | 58 |
| Figura 4.16 Comparación de la porosidad del mediante el modelo 3D y el 2D..... | 58 |
| Figura 4.17 Comparación de la porosidad del lecho experimental contra la simulación..... | 59 |
| Figura 4.18 Contornos de fracción volumen de partículas y patrones de flujo en forma de vectores con tono de velocidad (m/h) para el RLFÍ operando con $H_0=0.12$ m. | 60 |

ÍNDICE DE TABLAS

| | |
|---|----|
| Tabla 2.1 Correlaciones para calcular la expansión de lecho o la porosidad de la cama, desarrolladas para RLFI..... | 21 |
| Tabla 3.1 Condiciones de operación del RLFI..... | 33 |
| Tabla 3.2 Especificación del algoritmo de solución..... | 36 |
| Tabla 3.3 Especificación de los modelos de flujo | 36 |
| Tabla 3.4 Especificación de los materiales..... | 37 |
| Tabla 3.5 Interacción líquido-sólido..... | 37 |
| Tabla 3.6 Especificación de los métodos de solución | 38 |
| Tabla 3.7 Especificación del criterio de convergencia..... | 38 |
| Tabla 4.1 Configuración de las mallas 2D | 40 |
| Tabla 4.2 Configuración de las mallas 3D | 56 |

NOMENCLATURA

A_L : altura del lecho

Ar : número de Arquímedes

C_D : coeficiente de arrastre

d_p : diámetro de la partícula

e_{ss} : coeficiente de restitución

g : gravedad

$g_{0,ss}$: función de distribución radial de los
solidos

H : altura de lecho

H_0 : altura inicial del lecho

H/H_0 : expansión del lecho

$\bar{\bar{I}}$: tensor unitario

$k_{\Theta s}$: coeficiente de difusión energía granular

K_{ls} : intercambio de momento entre solido-
liquido

L : altura de la columna

p : presión

P_s : presión de solido

Re : número de Reynolds

Re_s : número de Reynolds del solido

U_l : velocidad del liquido

U_R : velocidad relativa del fluido

V : volumen

$V_{\text{Agua añadida}}$: volumen de agua añadida

$V_{\text{Agua libre}}$: volumen de agua libre

$V_{\text{lecho en reposo}}$: volumen del lecho en reposo

V_q : volumen de la fase q

α_q : fracción de volumen de la fase q

$\bar{\bar{\tau}}_l$: tensor de tensión de la fase líquida

α_s : fracción volumen del sólido

$\bar{\bar{\tau}}_s$: tensor de tensión de la fase sólida

α_l : fracción volumen del líquido

$\bar{\bar{\tau}}$: tensor de tensión

$\alpha_{s,max}$: fracción volumen máxima del sólido
en la cama

ϕ : Angulo de fricción interna

ϕ : fracción de sólidos

γ_{Θ_s} : energía de disipación por colisiones

ε : porosidad de la cama

ε_0 : porosidad inicial

η : viscosidad dinámica

Θ_s : temperatura granular de la fase sólida

μ_l : viscosidad de corte del líquido

μ_s : viscosidad de corte del sólido

$\mu_{s,col}$: viscosidad de colisión de sólidos

$\mu_{s,kin}$: viscosidad cinética de los sólidos

$\mu_{s,fr}$: viscosidad de fricción de los sólidos

v_l velocidad del líquido

v_s velocidad del sólido

$\hat{\rho}$ densidad efectiva

ρ_l densidad del líquido

ρ_s densidad del sólido

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

El tratamiento anaerobio de aguas residuales (TAAR) con elevado contenido de materia orgánica biodegradable (MOB) es ampliamente utilizado para el tratamiento de efluentes municipales e industriales. Con el TAAR se puede alcanzar altas eficiencias de remoción con bajos requerimientos energéticos, esto si se compara con un sistema aerobio de tratamiento. Uno de los problemas que comúnmente se presenta en la operación de sistemas de TAAR con alta carga hidráulica, es la pérdida de biomasa del reactor (Houbron *et al.*, 2016). Con el fin de solucionarlo, se desarrollaron los reactores anaerobios de lecho fluidizado, los cuales permiten además aumentar el área de contacto entre la MOB y los microorganismos incrementando el área por unidad de volumen (Kato *et al.*, 1994). Otras ventajas adicionales de estos sistemas es la fácil separación del agua tratada de la biomasa, son equipos compactos, y son capaces de tratar grandes volúmenes de efluentes debido a los cortos tiempos de residencia hidráulico que manejan (Houbron *et al.*, 2012).

Los reactores anaerobios fluidizados que se han diseñado hasta ahora utilizan como soporte ya sea materiales más densos que el agua (Reactor Anaerobio de Flujo Ascendente, RAFA) o materiales menos densos que el agua (Reactor Anaerobio de Lecho Fluidizado Inverso, LFI). Para el caso de tratamiento anaerobio de aguas residuales en reactores de lecho fluidizado inverso, se ha demostrado que este reactor es más eficiente que el de flujo ascendente (Karamanev y Nikolov, 1996). Otra ventaja que representó la introducción del reactor LFI fue la innovación de usar un soporte menos denso que el agua, por lo que no se requieren altas velocidades de fluidización, y con ello se alcanza una reducción en los costos de operación (Fan *et al.*, 1982). Los reactores LFI han sido probados con éxito a escala laboratorio para el TAAR urbanas y de la industria vinícola (Karamanev y Nikolov, 1996), aguas residuales de la industria cervecera (Alvarado-Lassman *et al.*, 2008) y vinazas de efluentes de producción de etanol (Houbron *et al.*, 2016).

En estudios pioneros sobre la hidrodinámica existente en la fluidización líquido-sólido, e.g., caracterización hidrodinámica de fluidización inversa líquido-sólido (Karamanev y Nikolov, 1996), expansión del lecho en fluidización inversa líquido-sólido (Karamanev y Nikolov, 1992a) segunda ley de Newton aplicada al ascenso libre de partículas (Karamanev y Nikolov, 1992b), se encontró que la hidrodinámica de la fluidización líquido-sólido inversa difiere significativamente de la ascendente.

La interacción hidrodinámica en un dispositivo de contacto multifásico, de un reactor LFI, es gobernada por el número de partículas y la separación entre partículas, la posición relativa de las partículas, la presencia de la pared del recipiente y el régimen de flujo (Ramírez-Muñoz, 2007). Estudiar estos efectos de manera rigurosa a partir de los principios fundamentales requiere describir la dinámica individual de cada partícula (sólida y burbujas de gas) y sus respectivas interacciones a través del flujo perturbado por cada partícula individual. Sin embargo, una comprensión total de todos estos efectos en su conjunto no ha sido alcanzado en la actualidad.

A partir del análisis teórico de los flujos multifásicos, se han desarrollado modelos capaces de ser implementados en computadores personales de mediana capacidad y costos moderados, los cuales permiten modelar el flujo usando herramientas CFD, e.g., el modelo Euleriano-Euleriano (Pfleger *et al.*, 1999). Algunas variables consideradas claves en el desempeño de reactores LFI que están directamente relacionadas con el macromezclado y el micromezclado existente en el interior del reactor son la estructura del flujo (perfiles de velocidad y presión, líneas de corriente) y la disipación local de energía cinética turbulenta y viscosa. Éstas y otras variables hidrodinámicas de interés pueden ser extraídas de las simulaciones y usadas para detectar y en su momento corregir condiciones de operación no deseadas. Por lo cual, el uso de CFD en reactores LFI puede servir ya sea para obtener información fundamental útil para el escalamiento y diseño de estos equipos o para mejorar el desempeño de dispositivos en operación.

1.1 Justificación

En México se recolectan 212 m³/s de aguas residuales municipales y se tratan 120.9 m³/s, mientras que, para el caso de las aguas residuales industriales, se estima que se generan 214.6 m³/s y se tratan 70.5 m³/s (Conagua, 2016). En total sólo se trata alrededor del 45% de los 426.6 m³/s de aguas residuales recolectadas. Un gran número de las plantas de tratamiento aguas residuales (PTAR) instaladas en México basadas en sistemas aerobios han dejado de ser utilizadas por sus altos costos de operación. En ese contexto, los sistemas anaerobios de tratamiento han jugado un papel muy importante, no sólo por contribuir significativamente a incrementar el volumen total tratado; sino también, al disminuir los costos operativos de las PTAR (Cervantes, 2010).

En nuestro país, desde la década de los 90's se desarrollaron sistemas de tratamiento anaerobios para la industria de lácteos y del café (Monroy-Hermosillo *et al.*, 1998). Diferentes instituciones mexicanas cuentan con programas de posgrado en temas relacionados con el diseño de sistemas anaerobios, lo cual es muy importante, si se considera la carencia de personal capacitado en este tipo de sistemas. Existe evidencia documentada que los primeros digestores anaerobios instalados en México tuvieron problemas operativos por falta de personal capacitado (Cervantes, 2010).

El tratamiento anaerobio de efluentes mediante reactores LFI presenta diversas ventajas, por ejemplo, se pueden alcanzar alta eficiencia de remoción a altas cargas de MOB, genera pequeñas cantidades de lodos y produce un biogás combustible. Esto último permite al proceso no sólo ahorrar energía, sino también generarla, lo cual reduce significativamente los costos de operación (Houbron *et al.*, 2016).

Uno de los inconvenientes de los reactores LFI es el largo período de arranque para alcanzar un estado estacionario en términos de la biomasa adherida al soporte. Durante esta etapa, la hidrodinámica es crítica, y se sugiere manipular la carga del reactor para alcanzar una gran cantidad de biomasa adherida y adaptada a altas cargas. Sin embargo, existen estudios en reactores LFI que prefieren iniciar en modo por lotes para acortar los tiempos de

estabilización. Se ha realizado mucho menos trabajo con el arranque en modo continuo para la configuración de los reactores. (Alvarado-Lassman *et al.*, 2010).

En cuanto a la determinación de las condiciones óptimas de operación del reactor, i.e., el flujo mínimo de líquido para expandir el lecho y la concentración a usar de partículas de soporte, éstas comúnmente se determinan con el soporte sin biopelícula (Alvarado-Lassman *et al.*, 2008). Sin embargo, durante el crecimiento de la biopelícula, el diámetro efectivo del soporte se incrementa, esto modifica el espaciamiento entre partículas y la interacción hidrodinámica entre ellas (Ramírez-Muñoz, 2007), y por consiguiente el mezclado en el interior del reactor. Adicionalmente, la producción de biogás también contribuye a la expansión del lecho, fenómeno llamado pseudofluidización (Amaiz *et al.*, 2005), lo cual a su vez afecta también la distancia entre partículas. Por lo cual, las condiciones hidrodinámicas óptimas, determinadas inicialmente con el soporte sin colonizar deberían variar a medida que crece la biopelícula y se produce biogás, lo cual no ha sido estudiado a la fecha en reactores LFI porque implicaría realizar pruebas invasivas al sistema que podrían afectar la estabilidad de la biomasa adherida al soporte. En este sentido, el modelado CFD del reactor resulta útil.

Los trabajos previos en reactores LFI son relativamente escasos y han usado un enfoque experimental. Por lo cual, el conocimiento de la hidrodinámica de este tipo de reactores es aún limitado y se requieren estudios adicionales como el que se desarrollará en este proyecto. Por ello en la presente tesis se pretende obtener por simulación una descripción detallada de la hidrodinámica de un reactor anaerobio de lecho fluidizado inverso empleado para el tratamiento de agua residuales de la industria cervecera evaluado anteriormente por Alvarado-Lassman *et al.* en 2008.

1.2 Hipótesis

Es posible utilizar herramientas de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) para reproducir mediciones experimentales de expansión del lecho en un reactor de lecho fluidizado inverso (LFI) operando en régimen laminar.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo general

Caracterizar la hidrodinámica de un reactor anaerobio de lecho fluidizado inverso usando herramientas de Dinámica de Fluidos Computacional.

1.3.2 Objetivos particulares

- Crear modelos CFD bidimensionales y tridimensionales para un reactor LFI.
- Estudiar la estructura del flujo y la tasa de corte en el interior del reactor considerando dos fases en el modelo CFD (líquido-sólido) y variando las condiciones de operación del reactor, i.e. el flujo de líquido y la concentración de partículas sólidas de soporte.
- Validar los resultados numéricos con mediciones experimentales de los perfiles de expansión de las partículas de soporte.
- Analizar el impacto de distintos modelos de arrastre sobre la predicción de la expansión del lecho en los modelos.

CAPÍTULO 2.

MARCO TEÓRICO

2.1 Reactores de Lecho Fluidizado

El concepto básico de fluidización consiste en hacer pasar un fluido a través de un lecho estático de partículas sólidas con una velocidad superficial suficiente para suspender las partículas y hacer que se comporten como si fuesen fluidos. Cuando el fluido se introduce en el lecho estático a baja velocidad, simplemente pasa a través de los huecos de las partículas sólidas y el lecho permanece fijo. A medida que aumenta la velocidad, el lecho se expande hasta que las partículas se suspenden cuando la fuerza de flotación equilibra las fuerzas gravitacionales y de arrastre. A una velocidad específica, conocida como la velocidad de fluidización mínima (VMF), la caída de presión en el lecho iguala el peso de las partículas y el lecho se suspende completamente (Khan *et al.*, 2014). La fluidización tiene excelentes características para los sistemas de reacción, como un adecuado mezclado de partículas, una distribución uniforme de la temperatura y una alta tasa de transferencia de masa (Tisa *et al.*, 2014). Dependiendo de la velocidad de fluidización, se pueden obtener diversos regímenes de flujo como la fluidización suave, la fluidización por burbujeo, la fluidización por borboteo, la fluidización turbulenta y los regímenes de transporte neumático (Yang, 2003).

El principio de fluidización ha sido ampliamente utilizado, particularmente en procesos químicos o biológicos donde es esencial mantener un mezclado eficiente y tasas elevadas de transferencia de calor y masa. Un reactor de lecho fluidizado (RLF) es un dispositivo de contacto que utiliza el principio de fluidización en su operación. En muchos aspectos es similar a los reactores de lecho empaquetado que se utilizan comúnmente, excepto que el material de empaque se expande por el movimiento ascendente o descendente del fluido (Burghate y Ingole, 2013). El grado de expansión del lecho depende del tamaño y la densidad de las partículas, la velocidad de flujo del fluido y su viscosidad. Un RLF implica un sistema de flujo multifásico (gas-sólido, líquido-sólido o gas-sólido-líquido) que puede incluir intercambio de momento, intercambio de calor y transferencia de masa.

Debido a sus excelentes características, los RLF son uno de los sistemas de reactor más importantes utilizados en aplicaciones químicas y de biotecnológicas (Si *et al.*, 2011). Inicialmente, las aplicaciones de RLF se habían limitado a craqueo catalítico, combustión, recubrimiento, granulación, secado y otras aplicaciones químicas. Sin embargo, se implementaron más tarde para tratamientos de aguas residuales.

Los RLF se pueden clasificar según la dirección del flujo de fluido. Un RLF convencional utiliza partículas sólidas que son más densas que la fase fluida y la fluidización se logra mediante el flujo de fluido ascendente desde la parte inferior del reactor. Por otro lado, el reactor de lecho fluidizado inverso (RLFI) se introdujo más tarde para superar algunos desafíos intrínsecos al RLF convencional, como el crecimiento incontrolado de biomasa que puede afectar la hidrodinámica de las biopartículas (Lakshmi *et al.*, 2000). En un RLFI, la densidad de las partículas sólidas es menor que la fase fluida y la fluidización se logra mediante el flujo de fluido descendente opuesto a la flotabilidad neta de las partículas (Nikolov *et al.*, 2000). La Figura 2.1 muestra el concepto básico de RLF en el tratamiento de aguas residuales. Las aguas residuales se introducen en el lecho del reactor a una velocidad superficial suficiente para suspender los elementos de soporte. Generalmente se emplea un distribuidor (*spager*, si es aire) para distribuir uniformemente el efluente a través del lecho del reactor. Dependiendo del diseño del sistema se pueden implantar recirculaciones en el efluente.

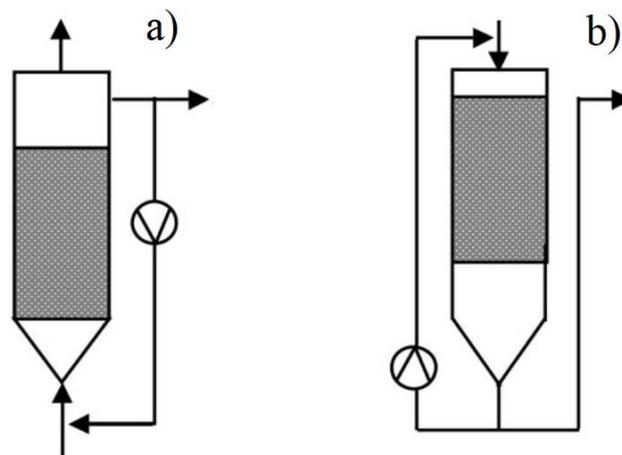


Figura 2.1 Soporte. Diagrama de un reactor de lecho fluidizado de flujo ascendente, RLFA (a) y un reactor de lecho fluidizado inverso, RLFI (b).

Se ha reportado que el RLFI posee características hidrodinámicas superiores a las del RLF convencional. Sin embargo, la desventaja de RLFI es que generalmente requiere una mayor velocidad del fluido superficial (García-Calderon *et al.*, 1998). Este tipo de reactor es fácil de operar y tiene un bajo costo de proceso, también tiene los beneficios adicionales de bajo consumo de energía y alta eficiencia en comparación con la técnica de fluidización normal y otros métodos. Debido a muchas ventajas únicas tales como alta eficiencia de contacto entre diferentes fases, alto índice de transferencia de calor y masa, baja caída de presión y un esquema conveniente para la operación continua, las camas fluidizadas trifásicas (gas-líquido-sólido) han sido ampliamente adoptadas como eficaces reactores multifásicos y contactores en los campos de ingeniería bioquímica, bioprocesos, alimentos, medio ambiente y petroquímica e industrias. Esos tipos de medio con sustrato absorbente o poroso, cuya densidad es inferior a la del medio líquido, se han fluidizado razonablemente con una velocidad superficial del fluido baja. Esto conduce a un mayor coeficiente de transferencia de masa debido a la alta retención de gas y al largo tiempo de residencia (Sánchez *et al.*, 2005; Sabarunisha Begum y Radha, 2014).

2.2 Estudios hidrodinámicos en RLFI.

Hasta la fecha, se han investigado experimentalmente las características hidrodinámicas de los lechos fluidizados inversos, tal como la expansión de lecho y la caída de presión, en general, se observa que la expansión del lecho aumenta con el incremento de la velocidad superficial del fluido, la altura inicial del lecho y la densidad de las partículas y disminuye con el aumento del tamaño de las partículas (Fan *et al.*, 1982; Karamanev y Nikolov, 1992a; Ulaganathan y Krishnaiah, 1996; Femin Benedict *et al.*, 1998; García-Calderón *et al.*, 1998; Alvarado-Lassman *et al.*, 2008).

Estos cambios en la inercia de las partículas generan que la fuerza de flotación aumente y, para contrarrestar esta fuerza, se requiere una mayor energía para mantener las partículas en estado fluidizado en comparación con partículas más densas o de menor tamaño (Ulaganathan y Krishnaiah, 1996; Femin Benedict *et al.*, 1998). Aunque, la caída de presión aumenta con el incremento de las fuerzas de flotación, la capacidad de transferencia de calor y masa se ve mejorada (Nikov y Karamanev, 1991; Sivasubramanian, 2010).

Por otro lado, la velocidad de fluidización mínima aumenta con el incremento del diámetro de partícula y la disminución de la densidad del sólido (Lakshmi *et al.*, 2000), la dependencia de la altura inicial del lecho y el diámetro de la columna es pequeña (Comte *et al.*, 1997). Además, disminuye con el aumento en la concentración de Carboxi-Metil-Celulosa (CMC) (Femin Bendict *et al.*, 1998; Lakshmi *et al.*, 2000; Das *et al.*, 2010).

Para estas variables se han desarrollado algunas correlaciones basadas en distintas teorías o datos empíricos. Los diferentes modelos de correlación para la expansión del lecho basados en la velocidad superficial del fluido pueden clasificarse en tres grupos principales (Fan *et al.*, 1982): el primer grupo se basa en correlaciones que dan la dependencia entre velocidad relativa del fluido (U_R) y la porosidad de la cama (ϵ), siendo el modelo de Richardson y Zaki (1954) es el más popular en este grupo; en el segundo grupo de modelos se usa la función de arrastre para el sistema de multipartícula. Por lo general se da en función del número de Reynolds ($Re = d_p U_i \rho_i / \mu_i$) y el número de Archimedes ($Ar = d_p^3 (\rho_l - \rho_s) \rho_l g / \mu_l^2$). Los modelos de Ramamurthy y Subbaraju (1973) y Riba y Couderc (1977) son típicos de este grupo; el tercer grupo de modelos se basa en la dependencia entre ϵ y las principales variables del lecho fluidizado como en la correlación de Wen y Yu (1966).

Con base en este tipo de modelos se han desarrollado ecuaciones para calcular la magnitud de la expansión de lecho (H/H_0) o la porosidad de la cama de los reactores de lecho fluidizado inverso. En la Tabla 2.1 se presentan algunas correlaciones desarrolladas para RLFI. Una revisión detallada de correlaciones para otros parámetros hidrodinámicos y de transporte en este tipo de reactores (VMF, caídas de presión, coeficientes de transferencia de masa y calor, distribución de tiempos de residencia), puede ser consultada en Arun y colaboradores en 2013.

Tabla 2.1 Correlaciones para calcular la expansión de lecho o la porosidad de la cama, desarrolladas para RLFI.

| Autor | Ecuación | Rango |
|------------------------------------|---|--|
| Fan <i>et al.</i> , 1982 | $U_R = \varepsilon^n$ $n = 15Re_t^{-0.35} e^{3.9d_p/D} \text{ para } 350 < Re_t < 1250$ $n = 8.6Re_t^{-0.2} e^{-0.75d_p/D} \text{ para } Re_t < 1250$ | $12.2 < Re_t < 6350$ $1.1 \cdot 10^5 < Ar < 7.65 \cdot 10^6$ $0.062 < d_p/D < 0.250$ |
| Ulaganathan y Krishnaiah (1996) | $\frac{H}{H_0} = 0.572Re^{0.92} Ar^{-0.345} \left[(\rho_l - \rho_s) / \rho_l \right]^{0.21}$ | $10^6 < Ar < 7.0 \cdot 10^7$ $0.4 < (\rho_l - \rho_s) / \rho_l < 0.9$ |
| Femin Bendict <i>et al.</i> , 1998 | $\frac{H}{H_0} = 2.65Re^{1.258} Ar^{-0.88}$ | Sin datos |
| Campos-Díaz <i>et al.</i> , 2012 | $1.753\varepsilon^{-3.807} = Ar/0.75(24Re + C_1Re^2)$ $C_1 = 2.25(5.5/Re)^{0.34}$ | $5.5 \leq Re \leq 200$ $0.375 \leq \varepsilon \leq 0.928$ |
| Das <i>et al.</i> , 2015 | $\frac{H}{H_0} = 0.988Ar^{-0.2124} Re^{0.4049} \phi_s^{-1.804} (d_i/d_M)^{0.4613}$ | $1.012 \leq H/H_0 \leq 5.212$ $0.0341 \leq Ar_m \leq 985.742$ $0.00594 \leq Re \leq 15.542$ $0.777 \leq \phi_s \leq 1.00$ $8.33 \leq d_i/d_M \leq 23.00$ |

2.3 Modelos computacionales desarrollados para RFLI.

Como se mencionó anteriormente los reactores de lecho fluidizados son ampliamente utilizados en la industria química y de biotecnológica para una gran variedad de procesos. Por ello, con el fin de mejorar el diseño y los procedimientos de escalamiento de este tipo de sistemas, es vital una sólida comprensión de los fenómenos de transporte en estos sistemas. Existe una gran cantidad de literatura sobre diversas investigaciones experimentales de fenómenos de transporte en lechos fluidizados tradicionales e inversos. A menudo, se utilizan lechos fluidizados pseudodimensionales planos para estudiar el comportamiento de fluidización con la ayuda de técnicas de video o mediciones de sonda porque las camas fluidizadas tridimensionales no son accesibles visualmente. Aunque este último sistema puede utilizarse sondas o sensores especiales, en general, al menos localmente, perturban el comportamiento de la fluidización y, por lo tanto, influyen en el resultado de la medición (Pan *et al.*, 2016). Para superar estas limitaciones prácticas, los modelos computacionales detallados han ganado considerable atención desde principios de los años noventa. Con el uso de modelos de computadora uno puede predecir que pasa dentro del lecho fluidizado sin perturbar el campo de flujo.

En la actualidad, el diseño y escalamiento de los reactores de lecho fluidizado son en su mayoría procesos totalmente empíricos, debido a la limitada información sobre los fundamentos del flujo partícula-fluido, en los cuales los fenómenos relacionados con las interacciones partícula-fluido (fuerzas de arrastre) y las interacciones partícula-partícula (fuerzas de colisión) aún se encuentra en desarrollo constante (Kuipers y van Swaij, 1998). Si bien los métodos empíricos y experimentales pueden generar resultados confiables con factores de influencia variados, todavía tienen sus propias restricciones: los análisis teóricos tradicionales donde los objetos de cálculo siempre se simplifican están restringidos por las no linealidades de la hidrodinámica de flujo para obtener soluciones analíticas para sistemas multifásicos; los experimentos están restringidos por un reactor específico, alteración de fluidos, seguridad humana y precisión de medición (Jun, 2004). Por esta razón, se deben realizar numerosas pruebas preliminares en reactores modelo a escala piloto, lo que es una actividad tardada y, por lo tanto, costosa.

Además de estos esfuerzos teóricos y experimentales, la dinámica de fluidos computacional (CFD) ha sido una herramienta poderosa y aumenta en popularidad como un método para modelar la hidrodinámica de flujo en reactores multifásicos con el rápido avance en hardware de computadoras y comprensión física durante las últimas décadas. Por ello en el proceso de diseño de reactores de lecho fluidizado las simulaciones por computadora pueden ser una herramienta útil. Sin embargo, la principal dificultad para modelar lechos fluidizados, es la gran separación de las escalas de longitud y tiempo ya que las estructuras de flujo pueden verse directamente influenciadas por las colisiones partícula-partícula y las interacciones partícula-fluido.

Claramente, no es posible tener un solo método de simulación que pueda cubrir todas las escalas de longitud y tiempo; en su lugar, se necesita una jerarquía de métodos para el modelado de los fenómenos fluido-partícula en diferentes escalas de tiempo y longitud, y por lo tanto también con diferentes niveles de detalle (Ranade, 2001). Existen dos formas de modelar estos fenómenos mediante simulación CFD, los métodos de Lagrangianos y los Eulerianos dependiendo del marco de referencia empleado para cada una de las fases. Un modelo de Lagrangiano resuelve las ecuaciones de movimiento (segunda ley de Newton) para cada partícula en el sistema en el que se toman en cuenta las colisiones partícula-partícula y las fuerzas que actúan sobre la partícula. El enfoque de Euleriano-Lagrangiano, que también se reconoce como modelo de partículas discretas (DPM) o método de elementos discretos (DEM), considera el fluido como un continuo mientras que los sólidos se consideran como la fase dispersa. El DPM utiliza el marco de Euleriano para modelar la fase continua y las trayectorias de las partículas se simulan en el marco Lagrangiano, a pesar de las ventajas de tener una descripción detallada del movimiento de las partículas, los modelos lagrangianos requieren un recursos de cómputo elevados y tiempos de simulación largos para poder obtener valores promedio del campo de flujo, por lo cual son poco empleados en simulaciones de equipos de proceso a escala real o simulaciones tridimensionales. Una alternativa esto son los modelos con un enfoque Euleriano-Euleriano, donde ambas fases (sólidos y fluido) se cuentan como un continuo totalmente interpenetrante (Roy *et al.*, 2006; Ahuja y Patwardhan, 2008).

Este tipo de modelos han sido implementados con éxito en reactores de lecho fluidizado de flujo ascendente para distintos procesos y aplicaciones, una revisión detallada de varios casos de simulación en lecho fluidizados convencionales puede ser consultada en Deen *et al.* (2007), Hoef *et al.* (2008), Khan *et al.* (2014) y Pan *et al.* (2016).

Sin embargo, para reactores de lecho fluidizado inverso a la fecha únicamente se han realizado dos trabajos de simulación CFD que se describen a continuación.

Wang y colaboradores en 2014, simularon el comportamiento del flujo de partículas en un RLFI mediante un modelo bidimensional Euler-Euler que incluye la teoría cinética de flujo granular, empleando el modelo de arrastre de Huilin-Gidaspow (Huilin *et al.*, 2004) y fuerza de masa virtual para obtener la interacción entre fase líquida y sólida. Compararon las predicciones con datos experimentales del perfil de concentración axial de la fase sólida reportado por Renganathan y Krishnaiah (2005), mostrando que el modelo puede capturar el comportamiento de flujo de las fases líquida y sólida en un lecho fluidizado inverso. Las simulaciones indicaron que la velocidad axial de las partículas y la expansión del lecho se incrementan con un aumento de la velocidad del líquido. También se encontraron que la altura y la velocidad del lecho aumentan con el aumento de la viscosidad del fluido que afecta al comportamiento del flujo de las partículas en el lecho.

Recientemente, mediante simulación con un enfoque de Euleriano-Lagrangiano Wang y colaboradores en 2018 propusieron un modelo bidimensional CFD-DEM para el mismo RLFI analizado por Renganathan y Krishnaiah (2005). En este modelo se empleó el modelo de arrastre de Huilin-Gidaspow y las fuerzas de lubricación, encontrando que el comportamiento de las partículas se divide en tres etapas: las partículas fluyen hacia abajo; las partículas fluyen hacia arriba y se alcanza un equilibrio dinámico en el lecho. La calidad de la fluidización se puede mejorar aumentando la velocidad del líquido, la viscosidad del líquido, el coeficiente de restitución de partículas y la densidad de partículas.

Estos trabajos de simulación muestran la capacidad de ambos enfoques de modelado de predecir adecuadamente los parámetros hidrodinámicos de interés en un RLFI, sin embargo, estos estudios son realizados sobre un sistema modelo que opera a una velocidad de líquido mayor y un diámetro y densidad de partícula mayores a la del reactor de interés en el presente trabajo (Alvarado-Lassman *et al.*, 2008). Por ello en el presente trabajo se toma como base el enfoque Euler-Euler, con diversos modelos de arrastre, el cual permite realizar una mayor número de simulaciones en dos y tres dimensiones.

2.4 Modelo de flujo granular Euler-Euler

En el planteamiento Euler-Euler las diferentes fases son tratadas matemáticamente como continuas. Dado que el volumen ocupado por una de las fases no puede ser ocupado por las otras fases, se utiliza el concepto de fracción de volumen y se asume que las fracciones de cada una de las fases presentes son funciones continuas del espacio y tiempo y que su suma es igual a la unidad. Las ecuaciones de conservación para cada fase se derivan para obtener un conjunto de ecuaciones, que tienen una estructura similar para todas las fases. Este conjunto de ecuaciones es resuelto mediante el uso de relaciones constitutivas obtenidas a partir de datos empíricos o en el caso de flujos granulares mediante la teoría cinética.

2.4.1 El modelo Euleriano fluido-sólido.

El modelo Euleriano soluciona un conjunto de n ecuaciones de momento y continuidad para cada fase. El acoplamiento se logra a través de los coeficientes de intercambio de presión e interfase. La forma en que se maneja este acoplamiento depende del tipo de fases involucradas; los flujos granulares (fluido-sólido) se manejan de forma diferente a los flujos no granulares (fluido-fluido). Para flujos granulares, las propiedades se obtienen de la aplicación cinética. El modelo consta de las siguientes consideraciones:

- El campo de presión es compartido por todas las fases.
- Las ecuaciones de movimiento y continuidad se resuelven para cada fase.
- La temperatura granular (energía fluctuante de sólidos) se puede calcular para cada fase sólida.
- El corte y las viscosidades en fase sólida se obtienen aplicando la teoría cinética a los flujos granulares.

2.4.2 Ecuaciones gobernantes

2.4.2.1 Fracción volumétrica

La descripción del flujo multifásico como continuos interpenetrados incorpora el concepto de fracciones de volumen, indicado aquí por α_q . Las fracciones de volumen representan el espacio ocupado por cada fase, y las leyes de conservación de masa y de momento se satisfacen en cada fase individualmente. La derivación de las ecuaciones de conservación se puede realizar promediando el equilibrio instantáneo local para cada una de las fases o utilizando el enfoque de la teoría de mezclas.

Para el caso de la fase q , su volumen (V_q) está dado por:

$$V_q = \int_V \alpha_q dV \quad (2.1)$$

y la condición que se debe cumplir es:

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (2.2)$$

En el caso de un lecho fluidizado, la fracción volumétrica carente de material sólido es denominada fracción porosa o simplemente porosidad (comúnmente denotada como ϵ).

La densidad efectiva de la fase ($\hat{\rho}$) depende de la densidad de esta ρ_q :

$$\hat{\rho} = \alpha_q \rho_q \quad (2.3)$$

2.4.2.2 Ecuaciones de conservación

Las ecuaciones que rigen para la fase líquido y fase sólida son las siguientes:

Las ecuaciones de continuidad son:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_l \rho_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l) = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) = 0 \quad (2.5)$$

Para la ecuación de momento son:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_1 \rho_1 \vec{v}_1) + \nabla \cdot (\alpha_1 \rho_1 \vec{v}_1 \vec{v}_1) = -\alpha_1 \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_1 + \alpha_1 \rho_1 \vec{g} - K_{ls} \cdot (\vec{v}_1 - \vec{v}_s) \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s \vec{v}_s) = -\alpha_s \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_s + \alpha_s \rho_s \vec{g} - K_{sl} \cdot (\vec{v}_s - \vec{v}_1) \quad (2.7)$$

Ecuación de la conservación de la fluctuación de la energía de las partículas sólidas:

$$\begin{aligned} & \frac{3}{2} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial t} \cdot (\rho_s \cdot \alpha_s \cdot \Theta_s) + \nabla \cdot (\rho_s \cdot \alpha_s \cdot \vec{v}_s \cdot \Theta_s) \right] = \\ & \left(-p_s \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_s \right) : \nabla \cdot v_s + \nabla \cdot (k_{\Theta_s} \cdot \nabla \cdot \Theta_s) - \gamma_{\Theta_s} - 3K_{ls} \Theta_s \end{aligned} \quad (2.8)$$

Existen varias leyes de arrastre como Gidaspow (1992), Syamlal-O'Brien (1989), que pueden explicar el intercambio de cantidad de momento entre la fase sólida y líquida. Todas las leyes de arrastre son empíricas y, por lo tanto, deben verificarse su idoneidad para cada sistema en particular.

2.4.2.3 Coeficientes de intercambio fluido-sólido.

Modelo de arrastre Gidaspow (1992):

$$K_{ls} = \frac{3}{4} \cdot C_D \cdot \frac{\alpha_s \cdot \alpha_1 \cdot \rho_1 \cdot |\vec{v}_s - \vec{v}_1|}{d_s} \cdot \alpha_1^{-2.65} \quad \text{para } \alpha_1 > 0.8 \quad (2.9)$$

$$K_{ls} = 150 \cdot \frac{\alpha_s^2 \cdot \mu_1}{\alpha_s \cdot d_s^2} + 1.75 \cdot \frac{\alpha_s \cdot \alpha_1 \cdot \rho_1 \cdot |\vec{v}_s - \vec{v}_1|}{d_s} \quad \text{para } \alpha_1 \leq 0.8 \quad (2.10)$$

donde

$$C_D = \frac{24}{\alpha_1 \cdot Re_s} \cdot \left[1 + 0.15 \cdot (\alpha_1 \cdot Re_s)^{0.687} \right] \quad (2.11)$$

con

$$Re_s = \frac{\rho_1 \cdot d_1 \cdot |\vec{v}_s - \vec{v}_1|}{\mu_1} \quad (2.12)$$

Modelo de arrastre de Syamlal-O'Brien (1989):

$$K_{ls} = \frac{3}{4} \cdot \frac{\alpha_s \cdot \alpha_1 \cdot \rho_g}{v_{r,s}^2 \cdot d_s} \cdot C_D \cdot \left(\frac{Re_s}{v_{r,s}} \right) \cdot |v_s - v_l| \quad (2.13)$$

donde

$$C_D = \left(0.63 + \frac{4.8}{\sqrt{Re_s / v_{r,s}}} \right)^2 \quad (2.14)$$

y

$$v_{r,s} = 0.5 \left(A - 0.06 \cdot Re_s + \sqrt{(0.06 \cdot Re_s)^2 + 0.12 \cdot Re_s \cdot (2 \cdot B - A) + A^2} \right) \quad (2.15)$$

con

$$A = \alpha_1^{4.14}, \quad B = 0.8 \alpha_1^{1.28} \quad \text{para } \alpha_1 \leq 0.85$$

o

$$A = \alpha_1^{4.14}, \quad B = 0.8 \alpha_1^{2.65} \quad \text{para } \alpha_1 > 0.85$$

Se han propuesto varios modelos de cierre, basados en la teoría cinética de flujo granular, para definir las ecuaciones constitutivas apropiadas para el flujo multifásico.

2.4.2.4 Ecuaciones constitutivas

Las ecuaciones constitutivas proporcionan relaciones para el tensor de tensión ($\bar{\tau}$) de las diferentes fases, presión del sólido (P_s), los parámetros para la ecuación de la energía cinética y el intercambio de momento entre solido-liquido (K_{ls}). Las siguientes son las relaciones constitutivas usadas en el estudio actual:

$$P_s = \alpha_s \cdot \rho_s \cdot \Theta_s + 2\rho_s (1 + e_{ss}) \alpha_s^2 g_{0,ss} \Theta_s \quad (2.16)$$

Función de distribución radial

$$\mathbf{g}_{0,ss} = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (2.17)$$

Tensor de tensiones de la fase solida:

$$\bar{\bar{\tau}}_s = \alpha_s \mu_s (\nabla \bar{\mathbf{v}}_s + \nabla \bar{\mathbf{v}}_s^T) + \alpha_s \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \bar{\mathbf{v}}_s \bar{\mathbf{I}} \quad (2.18)$$

Viscosidad tangencial de los sólidos:

$$\mu_s = \mu_{s,col} + \mu_{s,kin} + \mu_{s,fr} \quad (2.19)$$

Viscosidad de colisión de los sólidos:

$$\mu_{s,col} = \frac{4}{5} \cdot \alpha_s \cdot \rho_s \cdot d_s \cdot \mathbf{g}_{0,ss} \cdot (1 + e_{ss}) \cdot \left(\frac{\Theta_s}{\pi} \right)^{1/2} \quad (2.20)$$

Viscosidad de fricción de los sólidos:

$$\mu_{s,fr} = \frac{p_s \cdot \sin \phi}{2 \cdot \sqrt{I_{2D}}} \quad (2.21)$$

donde ϕ es el ángulo de fricción interna y I_{2D} es la segunda invariante de la desviadora del tensor de tensiones.

Viscosidad cinética Gidaspow:

$$\mu_{s,kin} = \frac{10 \cdot \rho_s \cdot d_s \cdot \sqrt{\Theta_s \pi}}{96 \cdot \alpha_s \cdot (1 + e_{ss}) \cdot \mathbf{g}_{0,ss}} \left[1 + \frac{4}{5} \cdot \mathbf{g}_{0,ss} \cdot \alpha_s \cdot (1 + e_{ss}) \right]^2 \quad (2.22)$$

Viscosidad cinética Syamlal-O'Brien:

$$\mu_{s,kin} = \frac{\alpha_s \cdot d_s \cdot \rho_s \cdot \sqrt{\Theta_s \cdot \pi}}{6(3 - e_{ss})} \cdot \left[1 + \frac{2}{5} \cdot (1 + e_{ss}) \cdot (3e_{ss} - 1) \cdot \alpha_s \cdot \mathbf{g}_{0,ss} \right] \quad (2.23)$$

Coeficiente de difusión de temperatura granular Gidaspow:

$$k_{\Theta_s} = \frac{150 \cdot d_s \cdot \rho_s \cdot \alpha_s \cdot \sqrt{\Theta_s \cdot \pi}}{384 \cdot (1 + e_{ss}) \cdot g_{0,ss}} \left[1 + \frac{6}{5} \cdot \alpha_s \cdot g_{0,ss} \cdot (1 + e_{ss}) \right]^2 + 2 \cdot \rho_s \cdot d_s \cdot \alpha_s^2 \cdot g_{0,ss} \cdot (1 + e_{ss}) \cdot \sqrt{\frac{\Theta_s}{\pi}} \quad (2.24)$$

Coeficiente de difusión de temperatura granular Syamlal-O'Brien:

$$k_{\Theta_s} = \frac{15 \cdot d_d \cdot \rho_s \cdot \alpha \sqrt{\Theta_s \cdot \pi}}{4 \cdot (41 - 33 \cdot \eta)} \left[1 + \frac{12}{5} \cdot \eta^2 \cdot (4 \cdot \eta - 3) \cdot \alpha_s \cdot g_{0,ss} + \frac{16}{15 \cdot \pi} (41 - 33 \cdot \eta) \cdot \eta \cdot \alpha_s \cdot g_{0,ss} \right] \quad (2.25)$$

con

$$\eta = \frac{1}{2} \cdot (1 + e_{ss}) \quad (2.26)$$

Energía de disipación de colisiones:

$$\gamma_{\Theta_s} = \frac{12 \cdot (1 - e_{ss}^2) \cdot g_{0,ss}}{d_s \cdot \sqrt{\pi} \cdot \rho_s \cdot \alpha_s^2 \cdot \Theta_s^{3/2}}$$

CAPÍTULO 3.

METODOLOGÍA.

3.1 Sistema experimental estudiado por Alvarado-Lassman *et al.* (2008).

El reactor LFI que se aborda en el presente trabajo es una columna de acrílico con una altura de 1.37 m, diámetro interno de 0.0448 m y un volumen útil de trabajo de 1.9L. El sistema tiene una trampa de sólidos en la parte inferior de la columna, por encima del punto de recirculación y la salida de las aguas residuales tratadas para evitar la pérdida del soporte. La alimentación y la recirculación de líquidos se aseguraron utilizando bombas peristálticas. El dispositivo experimental y el esquema del reactor se muestran en la Figura 3.1. Su desempeño hidrodinámico y eficiencia de remoción son reportadas por Alvarado-Lassman y colaboradores en 2008, cuyos datos se emplean para validar los modelos desarrollados.

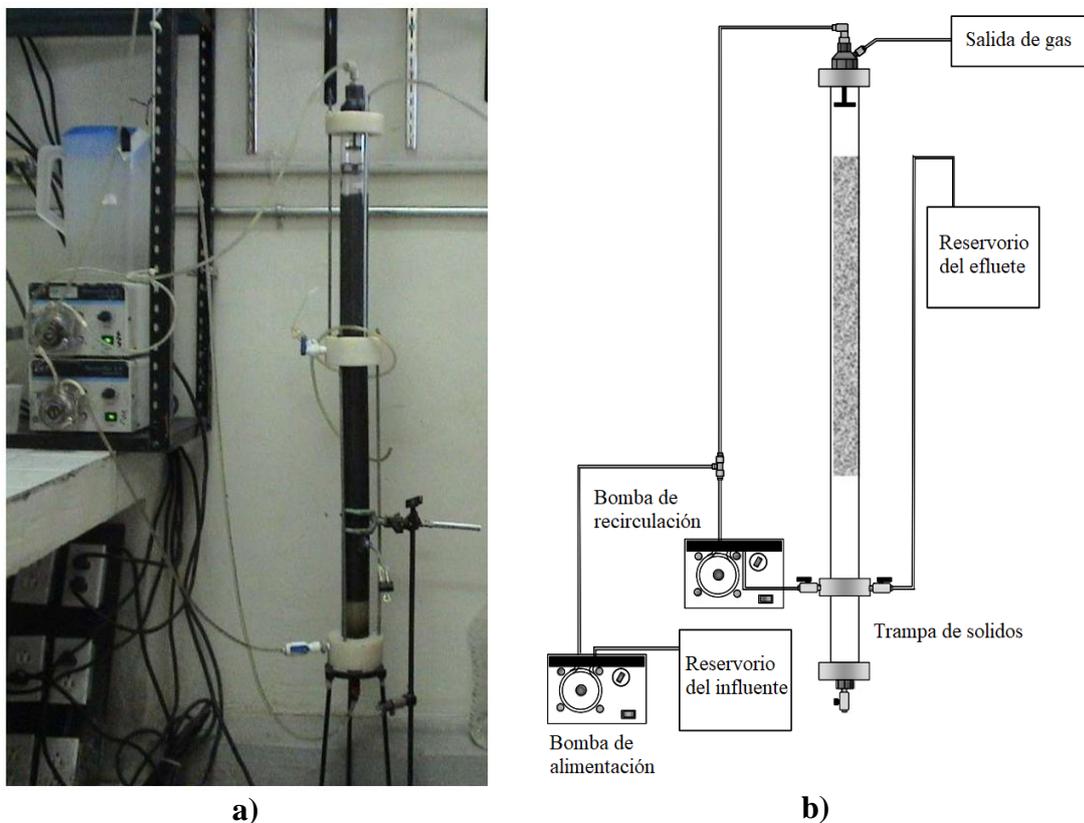


Figura 3.1 a) Dispositivo experimental reactor LFI (Sandoval-Ramos, 2007), b) Esquema del reactor LFI a nivel laboratorio (Alvarado-Lassman *et al.* 2008).

En pruebas hidrodinámicas de expansión de lecho realizadas en este reactor, se empleó agua corriente como fase líquida a 35° C, alimentada continuamente con una bomba peristáltica calibrada, sin utilizar la bomba de recirculación. Se agregó a la columna una cantidad medida de soporte, expresada como un porcentaje del volumen disponible del reactor. El agua se proporcionó desde la parte superior de la columna a una velocidad medida, lo que permitió la expansión del soporte hasta alcanzar el equilibrio.

Las condiciones de operación a analizar por simulación se presentan en la Tabla 3.1, en donde muestra barrido de alturas iniciales del lecho (H_0) y las velocidades del líquido a evaluar. Cabe mencionar que no todas las alturas iniciales del lecho pueden ser evaluadas debido que la expansión del lecho experimentalmente mostró que llega a ser superior a la altura de la columna, es decir, los sólidos abandonan el reactor.

Tabla 3.1 Condiciones de operación del RLFI.

| Altura inicial del lecho (m) | 0.12 | 0.24 | 0.36 | 0.48 | |
|------------------------------|------|------|------|------|---|
| Velocidad del líquido (m/h) | 0.9 | × | × | × | × |
| | 3.0 | × | × | × | × |
| | 5.3 | × | × | × | |
| | 8.0 | × | × | | |
| | 10.3 | × | | | |
| | 12.5 | × | | | |

3.2 Características del material de soporte

Otro aspecto crucial en el diseño de los reactores LFI es el tipo de soporte a utilizar. La selección de material adecuado para el soporte considera varios aspectos como lo son su tamaño, forma, densidad de partícula, dureza, rugosidad y área superficial, ya que todos ellos se encuentran relacionados con la eficiencia de fluidización y por ende el desempeño del reactor.

En el trabajo experimenta desarrollado por Alvarado-Lassman y colaboradores en 2008, se emplearon dos tipos de soporte con diferentes características, Polietileno de baja densidad triturado y Extendsphere™, la cual son de pequeñas partículas de sílice, con una burbuja de aire en su interior. En este estudio se demostró que la extendsphere tiene mejores propiedades hidrodinámicas y actúa mejor como soporte para los microorganismos. Por ello, en este trabajo solo se realizarán simulaciones con este tipo de partículas, la Figura 3.2, muestra una imagen de este material observado al microscopio.

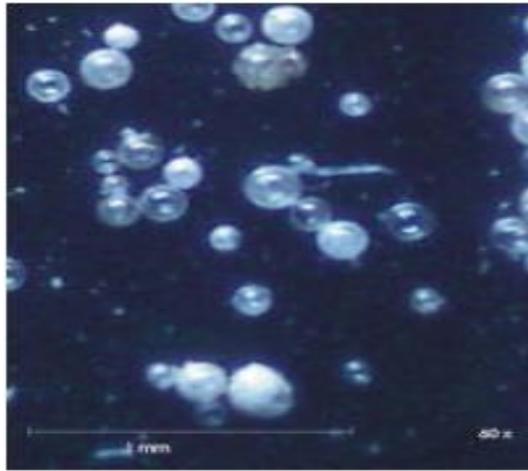


Figura 3.2 Soporte (extendsphere™) sin colonizar visto con el microscopio

Estas partículas de soporte tienen un diámetro y una densidad promedio de 169 μm y 700.0 kg/m^3 , respectivamente. Las propiedades de la partícula generan que la columna tenga un número de Archimedes de 26.7 y las velocidades de operación de la columna mantienen al reactor operando en el régimen laminar, con números de Reynolds para partícula y para la columna en el rango de 0.06-0.81 y 15.5-214.8, respectivamente. La fracción de sólidos (ϕ) en la cama de soporte en reposo fue determinada añadiendo una cantidad conocida de agua a un volumen de soporte dentro de una probeta y aplicando la siguiente ecuación:

$$\phi = 1 - \varepsilon = 1 - \frac{V_{\text{Agua añadida}} - V_{\text{Agua libre}}}{V_{\text{lecho en reposo}}} \quad (3.1)$$

Este procedimiento se realizó para varias relaciones de líquido y soporte obteniendo una fracción de sólidos de 0.58 ± 0.2 para una cama en reposo de extendsphere.

3.3 Definición de geometrías del dominio computacional para el RLFI.

El modelado del reactor LFI se realizó usando el software comercial de simulación CFD Ansys-Fluent 17.1. Para ello la geometría del reactor de Alvarado-Lassaman y colaboradores en 2008 se simplificó seleccionando como dominio de análisis la región de la columna comprendida entre el distribuidor de flujo de la alimentación y la trampa de sólidos, tal como se muestra en la zona azul marcada en la Figura 3.3. Esta sección cilíndrica correspondiente al volumen útil de trabajo (1.9 L) consta con una altura de 1.2 m y un diámetro de 0.0448 m, la cual es analizada con modelos bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D), con dichas dimensiones. Las mallas computacionales de estos dominios se realizaron en ANSYS-Meshing, en la Figura 3.3 también se muestran estos dominios de flujo extraídos para las simulaciones 2D y 3D junto con sus mallas computacionales iniciales, un análisis de independencia de malla de ellas se presenta más adelante.

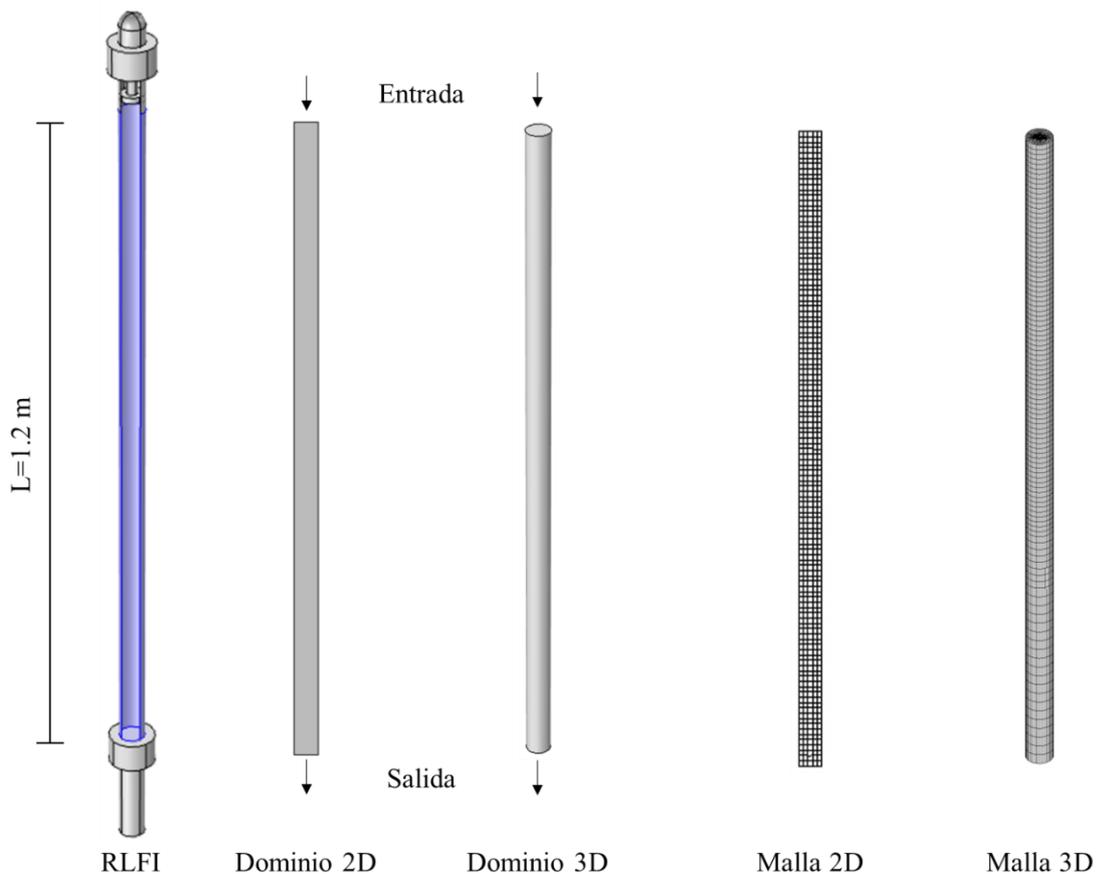


Figura 3.3 Dominios generados y sus mallas computacionales iniciales para el RLFI.

3.5 Configuración de las simulaciones.

Las ecuaciones gobernantes correspondientes al modelo Euleriano-Euleriano granular presentadas en la sección 2.4.2, son resueltas mediante el Método de Volumen Finito disponible en Ansys-Fluent. La configuración empleada para la solución del modelo se describe a detalle en esta sección.

3.5.1 Especificación del algoritmo de solución.

En la Tabla 3.2 se muestran las especificaciones para el algoritmo de solución, seleccionando el algoritmo basado en la presión con una formulación de velocidad absoluta, esto principalmente a que el flujo a resolver es incompresible. Las simulaciones se realizan en 2D o 3D dependiendo el caso realizando estudios transitorios, debido a que la hidrodinámica de los lechos fluidizados es dependiente del tiempo, llegando solamente a un estado pseudo-estacionario.

Tabla 3.2 Especificación del algoritmo de solución

| | |
|-----------------------------|--|
| Algoritmo de solución | Basado en presión |
| Formulación de la velocidad | Absoluta |
| Espacio | 2D, 3D |
| Tiempo | Transitorio |
| Presión de operación | Atmosférica |
| Gravedad | -9.81 m/s ² sobre el eje <i>y</i> |

3.5.2 Modelo de flujo.

Debido a los altos de tiempos de residencia en la columna y las bajas velocidades de líquido, se considera el modelo flujo laminar para modelar el flujo tanto de las partículas como del líquido, despreciando alguna presencia de turbulencia. Como modelo multifase se seleccionó el modelo Euleriano implícito tal como se muestra en la Tabla 3.3.

Tabla 3.3 Especificación de los modelos de flujo

| | |
|--------------------|-----------|
| Modelo | Laminar |
| Modelo multifásico | Euleriano |
| Formulación | Implícito |

3.5.3 Especificación de los materiales

En la Tabla 3.4 se muestra la especificación de los materiales utilizados (Alvarado-Lassman *et al.*, 2008).

Tabla 3.4 Especificación de los materiales

| Material | Agua | Extendosfera |
|--------------|--------------------------|-----------------------|
| Propiedades | | |
| Densidad | 994.08 kg/m ³ | 700 kg/m ³ |
| Viscosidad | 0.000720 Pa·s | - |
| Diámetro | - | 169 μm |
| Tipo de fase | Primaria | Secundaria |

3.5.4 Interacción liquido-sólido

En la Tabla 3.5 se muestran los modelos de arrastre y valor del Coeficiente de restitución y de masa virtual en la interacción en el sistema liquido-sólido.

Tabla 3.5 Interacción liquido-sólido

| Fase de interacción | Coeficiente de restitución | Coeficiente de Masa virtual |
|---------------------|----------------------------|-----------------------------|
| Modelo de arrastre | Colisión | |
| Gidaspow | 0.9 | 0.5 |
| Syamlal-O'Brien | 0.9 | 0.5 |

3.5.5 Condiciones iniciales y de frontera

Como condición inicial se considera que, no hay movimiento tanto en la fase líquida como en las partículas en el lecho, las partículas son parchadas a la altura inicial requerida con una fracción de volumen de sólidos de 0.58. En la entrada, se especifican todas las velocidades.

Como condición de frontera, en la entrada, la velocidad del líquido es constante con una fracción de volumen de líquido de 1, mientras que la velocidad de la fase sólida y la temperatura granular son cero para las partículas. En la salida, se especificó la condición de frontera de presión con un valor de cero.

En la pared, las velocidades tangencial y normal de la fase líquida se establecen con un valor de cero (condición de no deslizamiento). La velocidad normal de las partículas también se estableció en cero. La condición límite de Johnson y Jackson (2006) se implementó para la fase granular con un coeficiente de especularidad de 0.5

3.5.6 Métodos de solución

Como se muestra en la Tabla 3.6, como método de solución se implementó el esquema SIMPLE phase coupled y el esquema QUICK para la discretización espacial de todas las ecuaciones restantes (Leonard, 1979). Se utilizó la discretización temporal implícita de primer orden para garantizar soluciones estables y precisas. Se ha demostrado que es necesaria una discretización de segundo orden en el tiempo para una solución precisa de flujos ascendentes de movimiento rápido (Cloete *et al.*, 2011), pero no es el caso de los lechos con una densidad de partículas alta, donde la gran mayoría del lecho se mueve muy lentamente.

Tabla 3.6 Especificación de los métodos de solución

| Discretización espacial | |
|-------------------------|------------------------------------|
| Gradiente | Base de celda de mínimos cuadrados |
| Momentum | QUICK |
| Fracción volumen | QUICK |
| Formulación transitoria | Primer orden implícito |

3.5.7 Criterios de convergencia

Debido a que la solución se obtiene por procesos interactivos, es necesario definir un criterio de convergencia para dar por terminado cada proceso de interacción. En la Tabla 3.7 se muestran los criterios de convergencia

Tabla 3.7 Especificación del criterio de convergencia

| Residual | Criterio de convergencia |
|---------------------------|--------------------------|
| Continuidad | 10^{-3} |
| Velocidad de la partícula | 10^{-3} |
| Velocidad del agua | 10^{-3} |
| Fracción volumen | 10^{-3} |

3.6 Cálculo de la expansión relativa mediante datos de simulación.

Para obtener la altura de la cama de lecho fluidizada a partir de los resultados de las simulaciones se extrae el perfil axial de la fracción volumen de la fase sólida, tal como se muestra en la Figura 3.4. Tomándose la posición del primer punto en donde hay presencia de partículas (H_1), siendo $H_f=L-H_1$, donde L es la altura la columna.

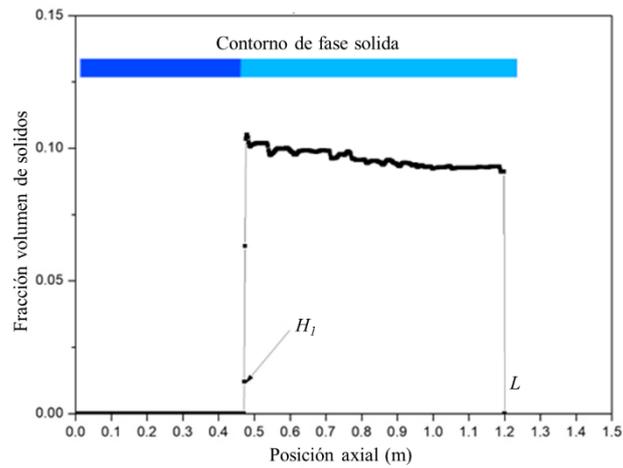


Figura 3.4 Perfil axial de la fracción volumen de la fase sólida

CAPÍTULO 4.

RESULTADOS.

4.1 Modelo bidimensional

4.1.1 Análisis de independencia de malla y paso del tiempo.

Es de gran importancia garantizar que la solución obtenida de las simulaciones sea independiente de la densidad de la malla. El método más común para alcanzar la independencia de malla consiste en incrementar su densidad (por lo general duplicando el número de elementos), si los resultados no cambian de manera considerable es posible que escoger la malla de menor número. Si, por otro lado, surgen diferencias importantes entre las diferentes soluciones se debe probar una malla más fina hasta que se cumpla el criterio establecido.

Con este fin se construyeron 5 mallas de tamaños de elemento cada vez menor, desde 5 mm hasta 1 mm, el número de elementos de cada malla y su tamaño de elemento promedio se muestra en la Tabla 4.1, mientras que un acercamiento a estas mallas en una sección de la columna se presenta en la Figura 4.1.

Tabla 4.1 Configuración de las mallas 2D

| Malla | Número de elementos | TPE (mm) |
|-------|---------------------|----------|
| 1 | 2160 | 5 |
| 2 | 3300 | 4 |
| 3 | 6000 | 3 |
| 4 | 13200 | 2 |
| 5 | 54000 | 1 |

Nota: TPE =Tamaño promedio de elemento

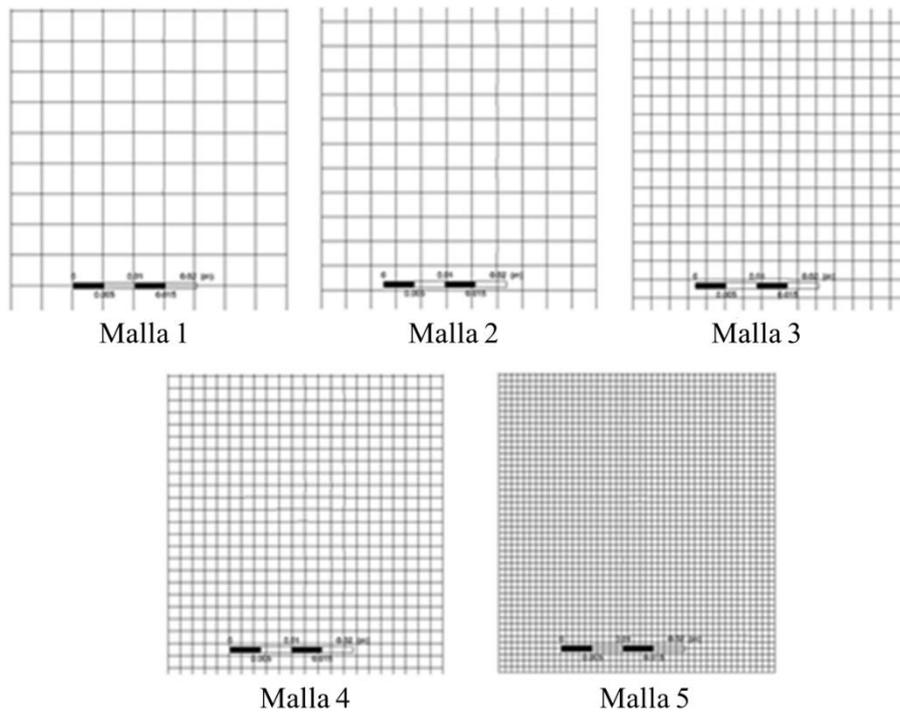


Figura 4.1 Mallas 2D estudiadas en el análisis de independencia de malla.

Este análisis se realizó siguiendo lo marcado en la sección de metodología empleando el modelo de arrastre de Syamlal y O'Brien (1989) para una altura de lecho de 0.12 m y una velocidad de líquido de 12.5 m/h. Las simulaciones se realizaron hasta completar cuatro tiempos de residencia para que el sistema alcance el estado estacionario, en este análisis se eligieron tres pasos de tiempo de 0.05s, 0.1s y 0.15s para establecer independencia a este parámetro.

En la Figura 4.2 se muestra el resultado de este análisis tanto la expansión relativa, como para la velocidad promedio del líquido y las partículas. Podemos observar en la Figura 4.2a que para la malla 3, 4 y 5 los cambios la expansión relativa son solo del 1%, también se puede observar es que los pasos de tiempo analizados no influyen en esta variable.

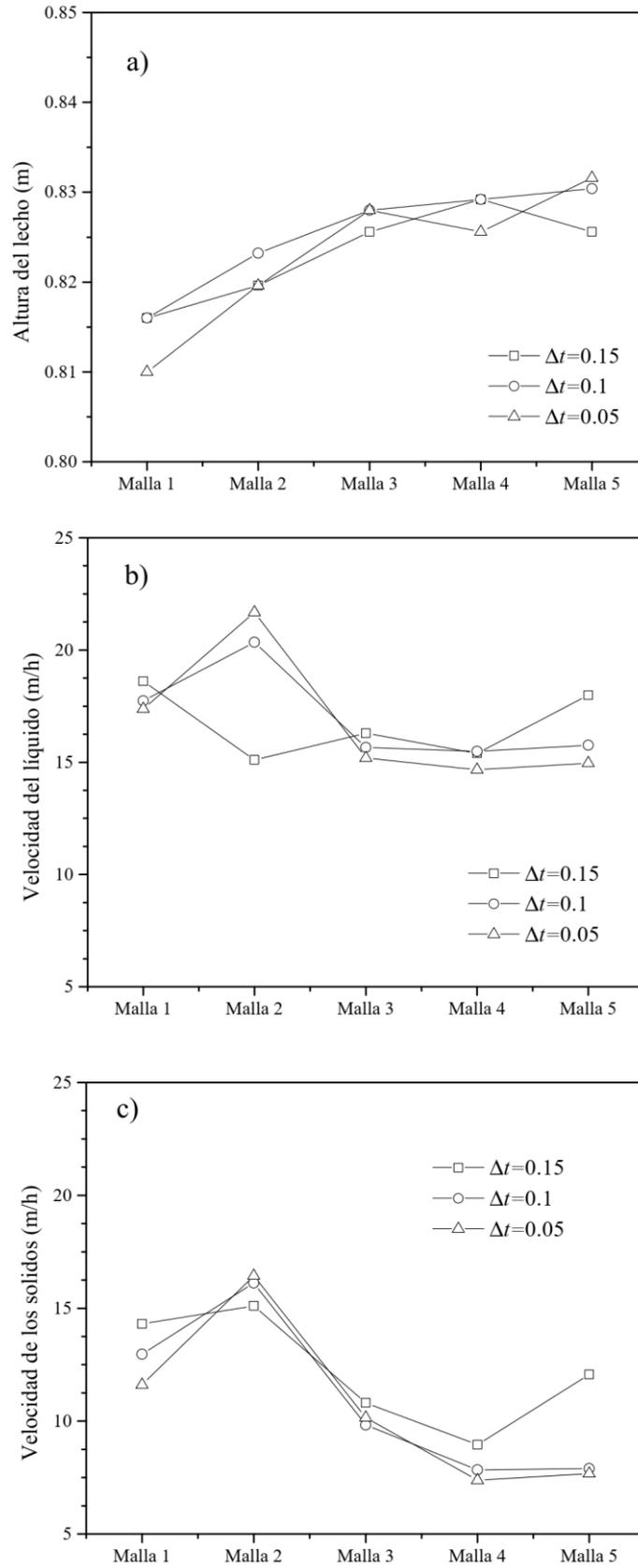


Figura 4.2 Efecto del tamaño de paso y la de la malla sobre la altura del lecho expandido (a), la velocidad promedio del y líquido (b) de los sólidos (c).

En cuanto a la velocidad promedio del líquido y las partículas (Fig. 4.2b y 4.2c) se puede notar que para el caso del paso de tiempo de 0.15 la velocidad del líquido presenta diferencias importantes respecto a los pasos de tiempo más pequeñas, mientras que la diferencia entre los pasos de 0.1 y 0.05 es solo del 3% en promedio para todas las mallas, en cuanto a la densidad de la malla se puede distinguir que para estos pasos de tiempo la velocidad promedio de los sólidos alcanza su independencia hasta la malla 4, la cual tiene una diferencia del 4%, respecto a la malla 5.

Por lo tanto, de este análisis se puede concluir que la malla 4 con 13200 elementos y un paso de tiempo 0.1 son suficientes para obtener resultados independientes tanto de del tamaño de elemento como del paso de tiempo, cabe resaltar que esta condición nos lleva a número de Courant de 0.0083 a 0.116, lo cual es un indicativo de que el paso de tiempo permite una estabilidad numérica adecuada.

4.1.2 Comparación con datos experimentales

Como se mencionó anteriormente, el modelo fue validado con datos reportados de expansión de lecho reportados por Alvarado-Lassman y colaboradores en 2008. En la Figura 4.3 se presenta la altura de lecho en estado fluidizado, para el reactor operando a distintas velocidades de líquido y alturas iniciales de lecho, en esta figura se muestran los datos experimentales contra la altura del lecho calculado mediante simulación CFD, empleando los modelos de arrastre de Gidaspow *et al.* (1992) y Syamlal y O'Brien (1989). Se puede distinguir que a bajas velocidades de líquido ($< 3\text{m/h}$) ambos modelos predicen adecuadamente la altura final del lecho, sin embargo, para velocidades superiores el error puede llegar a hasta del 34% y el 19% para el modelo de Gidaspow *et al.* (1992) y Syamlal y O'Brien (1989), respectivamente. Este error se ve disminuido para ambos modelos cuando la altura inicial de sólidos es baja como en el caso de la $H_0=0.12\text{m}$. Debido a la capacidad del modelo de Syamlal y O'Brien (1989) de mantener un error más bajo, los resultados presentados en secciones posteriores corresponden a simulaciones realizadas con este modelo.

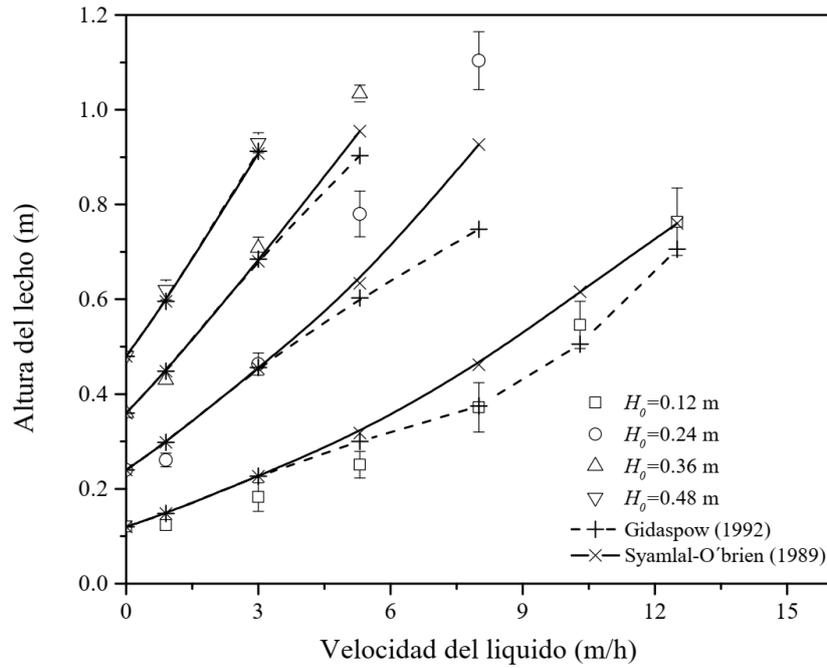


Figura 4.3 Comparación con datos experimentales de Alvarado-Lassman *et al.* (2008).

Las características de expansión del lecho es un parámetro importante que ayuda en el escalamiento y el diseño de reactores de lecho fluidizado para una aplicación específica, debido principalmente a que la porosidad final del lecho está directamente relacionada a la expansión del lecho, y por tanto el área interfacial y otros parámetros de transferencia dependen de ello. Estas modificaciones en la porosidad del lecho debido a su expansión afectan el correcto funcionamiento y control del reactor, por esta razón, es de importancia tener un modelo confiable para estimar la porosidad del lecho en expansión. La porosidad en el reactor analizado puede ser calculada a partir de la altura inicial y la altura final del lecho a cada velocidad de líquido estudiada, mediante la siguiente ecuación (Femin Bendict *et al.*, 1998):

$$\varepsilon = 1 - \left(H_0 \frac{(1 - \varepsilon_0)}{H} \right) \quad (4.1)$$

Por otro lado, la porosidad se puede calcular directamente mediante las simulaciones mediante el promedio de la fracción volumen de la fase líquida en la región del lecho:

$$\varepsilon = \frac{1}{A_L} \iint_{A_L} \alpha_l dA_L \quad (4.2)$$

En la Figura 4.4 se muestran los valores de la porosidad del lecho calculados a partir de los datos experimentales de Alvarado-Lassman y colaboradores en 2008 en función del número de Reynolds de partícula, haciendo una comparación contra los datos obtenidos mediante simulación CFD empleando el modelo de Syamlal y O'Brien (1989). También se incorporan los valores calculados mediante las correlaciones empíricas de Campos-Díaz *et al.* (2012) y Das *et al.* (2015), las cuales son de las ecuaciones más recientes desarrolladas para lechos fluidizados inversos y pueden ser consultadas en las Tabla 2.1.

Es notorio en esta figura, que las simulaciones CFD empleando el modelo de Syamlal y O'Brien (1989), muestran una tendencia muy parecida a los datos experimentales. Por otro lado, las correlaciones empíricas no logran mantener una correlación adecuada a todas las condiciones de operación del reactor, esto se debe principalmente a las condiciones experimentales a las que fueron ajustadas, no obstante, se distingue que a bajos números de Reynolds de partícula (<0.4), la correlación de Campos-Díaz *et al.* (2012) predice de manera adecuada la porosidad del lecho, mientras que la correlación de Das *et al.* (2015), ajusta estos datos a números de Reynolds mayores.

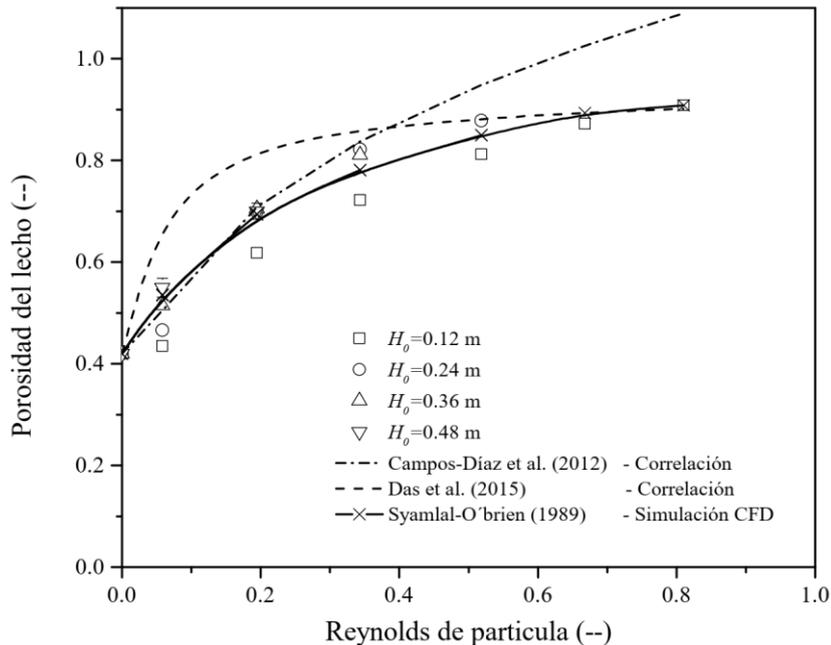


Figura 4.4 Comparación de la porosidad del lecho experimental contra la simulación CFD y correlaciones empíricas.

4.1.3 Perfiles de fracción volumen de partículas.

En las Figura 4.5 se presentan los perfiles de la fracción volumen de partículas en una línea axial que pasa por el centro del reactor a distintos tiempos de operación. En esta figura se puede distinguir que, a diferencia de los reactores de lecho inverso en régimen turbulento, el tiempo requerido para alcanzar el estado estacionario es mucho mayor para RLFÍ en régimen laminar. Por otro lado, las Figuras 4.6 y 4.7 muestran los contornos de fracción volumen de partículas en el reactor a todas las velocidades de líquido analizadas, notándose que el lecho de partículas se distribuye uniformemente, con una porosidad prácticamente constante, sin presencia de burbujes o zonas huecas, lo cual favorece la homogeneidad del soporte en el reactor.

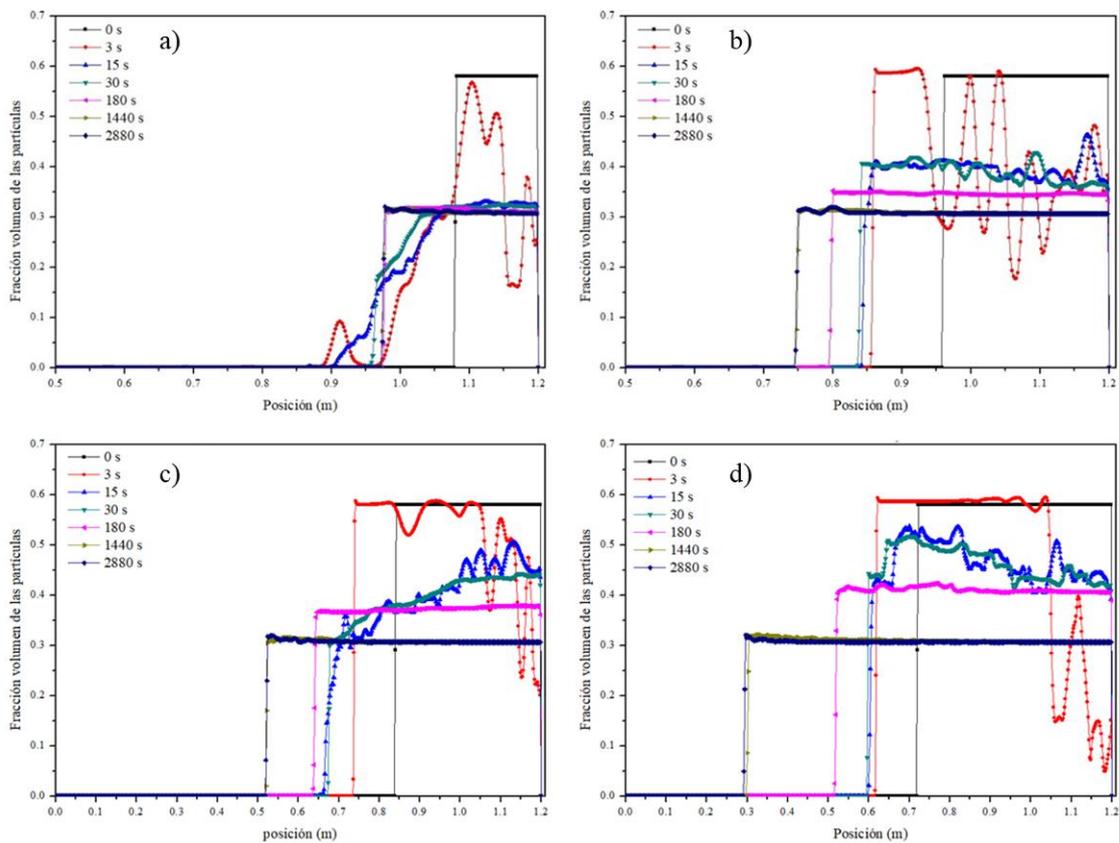


Figura 4.5 Perfiles de la fracción volumen de partículas para el RLFÍ operando con una velocidad de líquido de 3 m/h con $H_0=0.12$ m (a), 0.24 m (b), 0.36 m (c), 0.48 m (d).

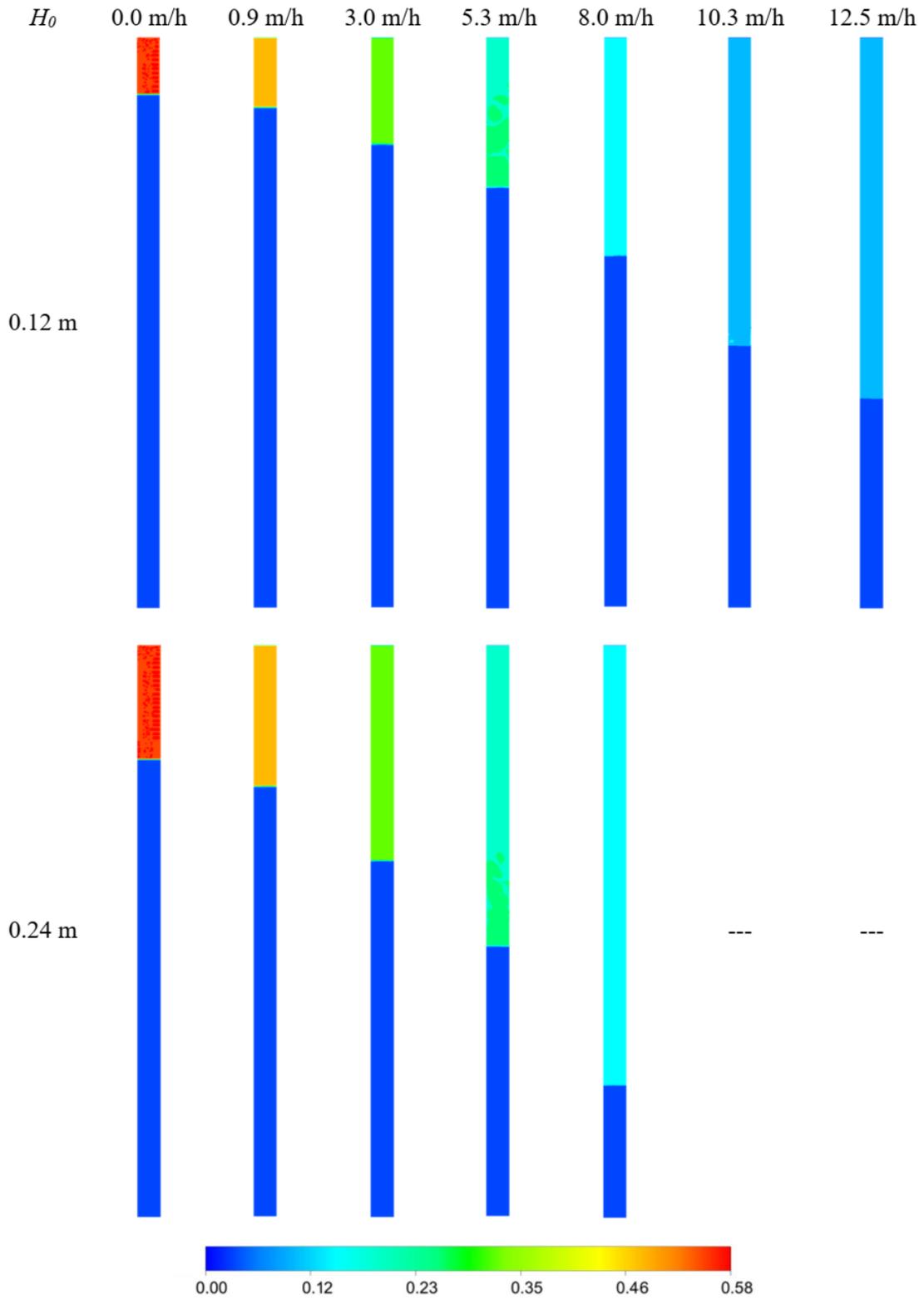


Figura 4.6 Contornos de fracción volumen de partículas para el RLFÍ operando con $H_0=0.12$ m y 0.24 m.

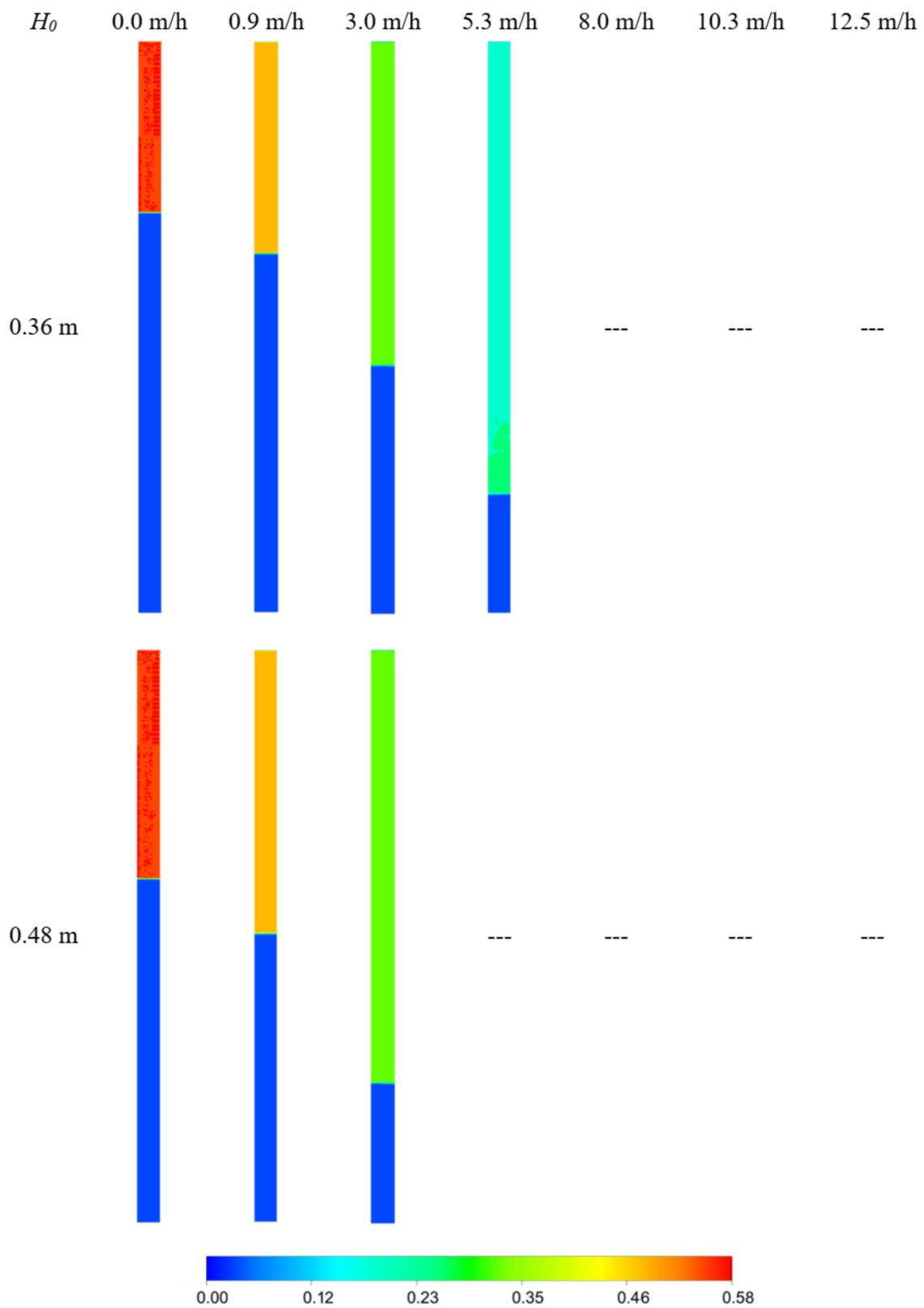


Figura 4.7 Contornos de fracción volumen de partículas para el RLF1 operando con $H_0=0.36$ m y 0.48 m.

4.1.3 Caídas de presión en el RLFI.

La determinación de la caída de presión en los lechos fluidizados es un parámetro muy importante para el funcionamiento eficiente y económico del reactor, ya que nos permite determinar el factor de fricción, es decir, la pérdida de energía y las condiciones de los regímenes de flujo estable para una condición de operación dada.

En la Figura 4.8 se presenta la variación de la caída de presión respecto a la velocidad del líquido para diferentes alturas iniciales del lecho. Al igual que en la fluidización clásica, la caída de presión aumenta con el aumento de la velocidad de entrada del fluido hasta que se alcanza la condición fluidización mínima. Después de este punto, la caída de presión permanece casi constante. En esta figura también se puede notar que la caída de presión aumenta con el aumento de la altura inicial del lecho, tal como ha sido observado por Femin Bendict *et al.* (1998).

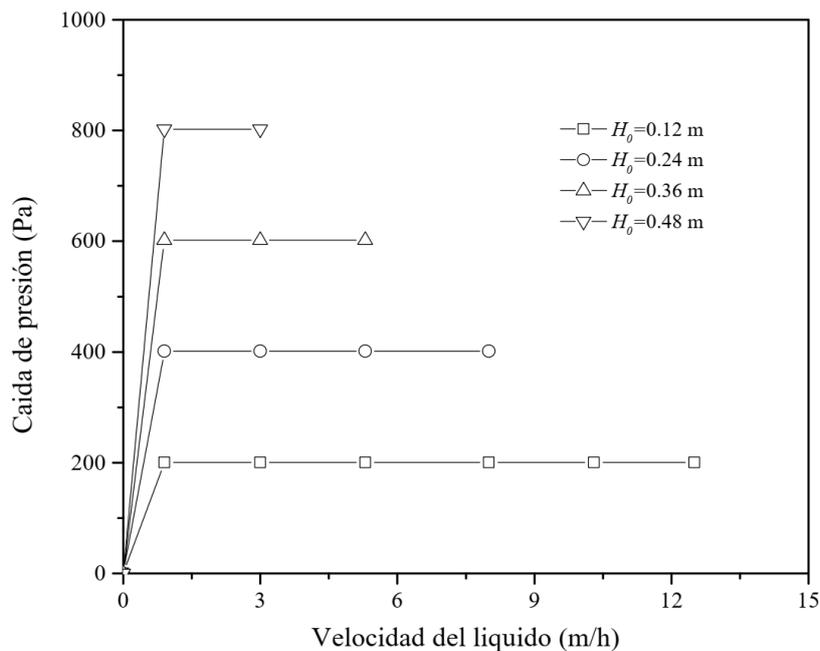


Figura 4.8 Caídas de presión en el RLFI a distintas alturas iniciales del lecho.

4.1.4 Perfiles de velocidad y tasa de corte

Las Figuras 4.9 y 4.10, muestran los patrones de flujo en el RLFI empleando vectores con tono de velocidad, tanto para la fase líquida como para las partículas. En estas figuras se puede distinguir el efecto que tiene el incremento en la altura inicial de la cama y del incremento en la velocidad del líquido. Se puede notar que en todos los casos existen numerosas recirculaciones en la zona de la cama sólidos y una vez abandonando el lecho, el flujo en la fase líquida se vuelve ordenado, retomando el perfil característico de una tubería. Estas numerosas recirculaciones pueden mejorar el mezclado en el sistema, reduciendo la presencia de canalizaciones o zonas muertas en el lecho de sólidos.

También se puede distinguir que los patrones de flujo para ambas zonas del lecho son complementarios. Además, que las corrientes de partículas aceleran el fluido en esta región, presentándose este fenómeno con mayor intensidad en la zona final del lecho, esto se puede atribuir a la fuerza de flotación y el empuje del fluido tienen una interacción más fuerte que en esta región.

Por otro lado, en las Figuras 4.11 y 4.12, se presentan los perfiles de la tasa de corte correspondientes los patrones de flujo de las Figuras 4.9 y 4.10, en donde se puede ver que para todos los casos las zonas de máximo corte se encuentran las paredes del reactor, en la zona final de la cama de sólidos. Además, las recirculaciones de esta región también generan la presencia de regiones con un corte elevado, lo cual puede provocar desprendimientos de biopelícula en las partículas de esta región.

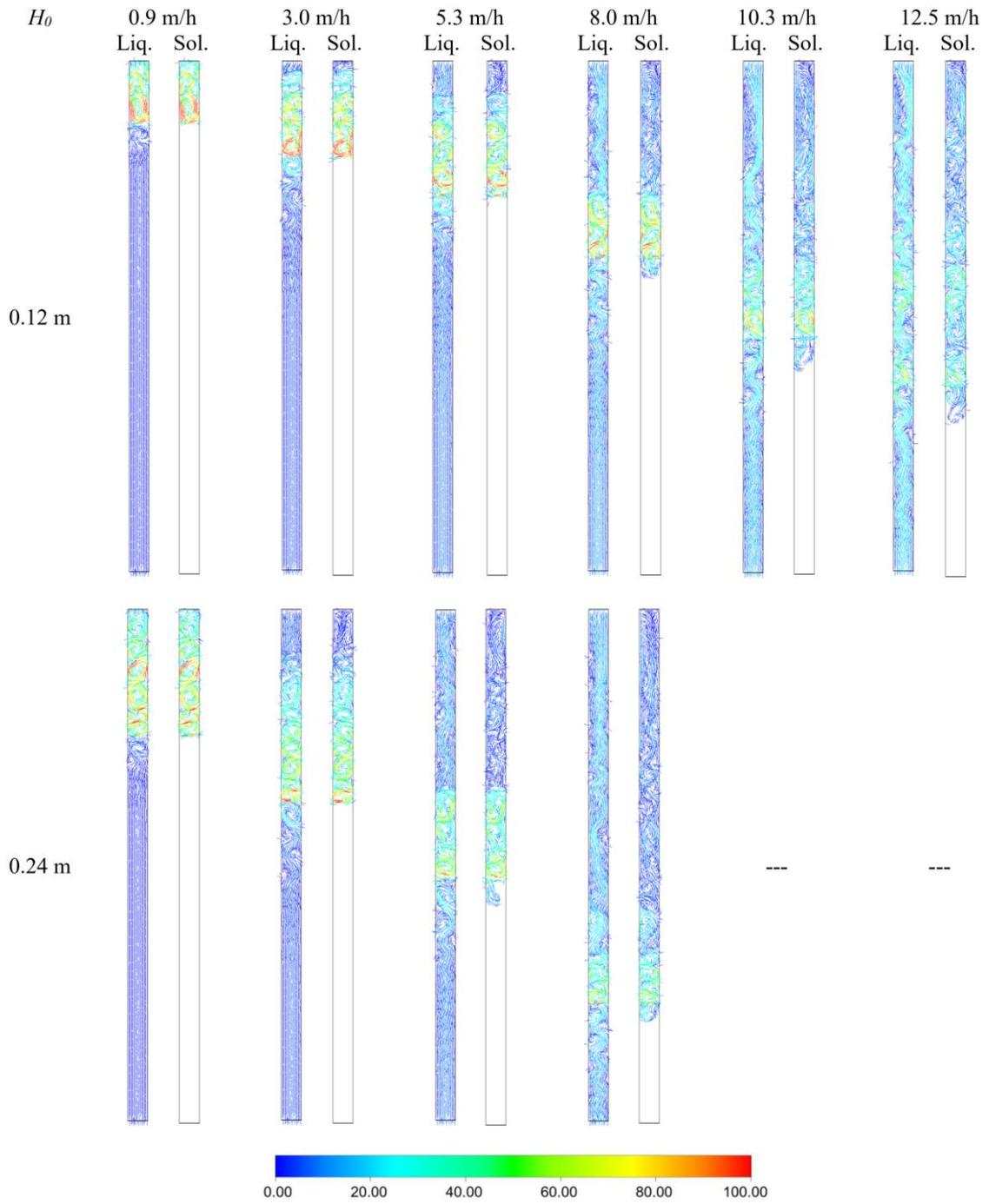


Figura 4.9 Patrones de flujo en forma de vectores con tono de velocidad (m/h) para el RLF1 operando con $H_0=0.12$ m y 0.24 m.

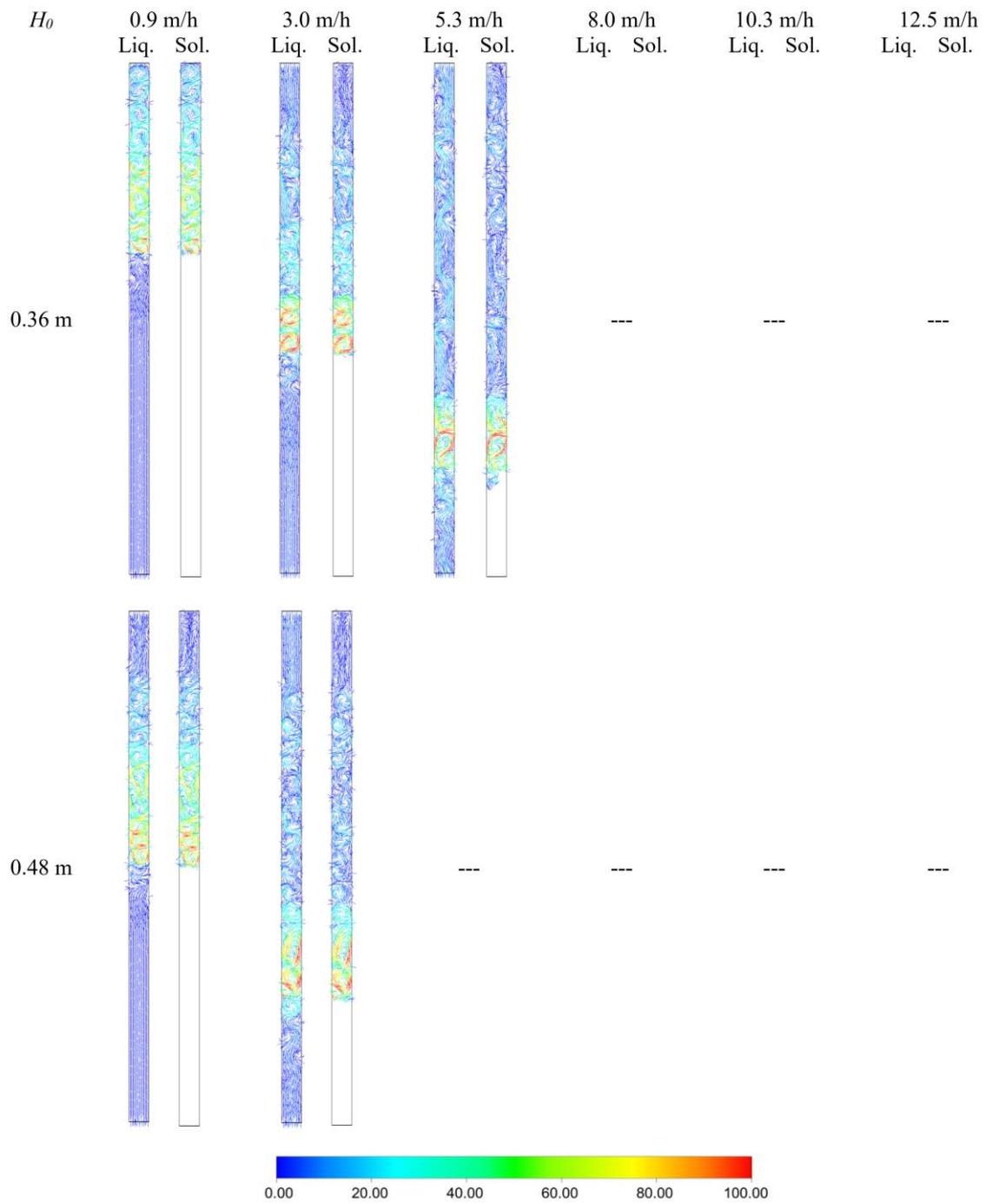


Figura 4.10 Patrones de flujo en forma de vectores con tono de velocidad (m/h) para el RLFI operando con $H_0=0.36$ m y 0.48 m.

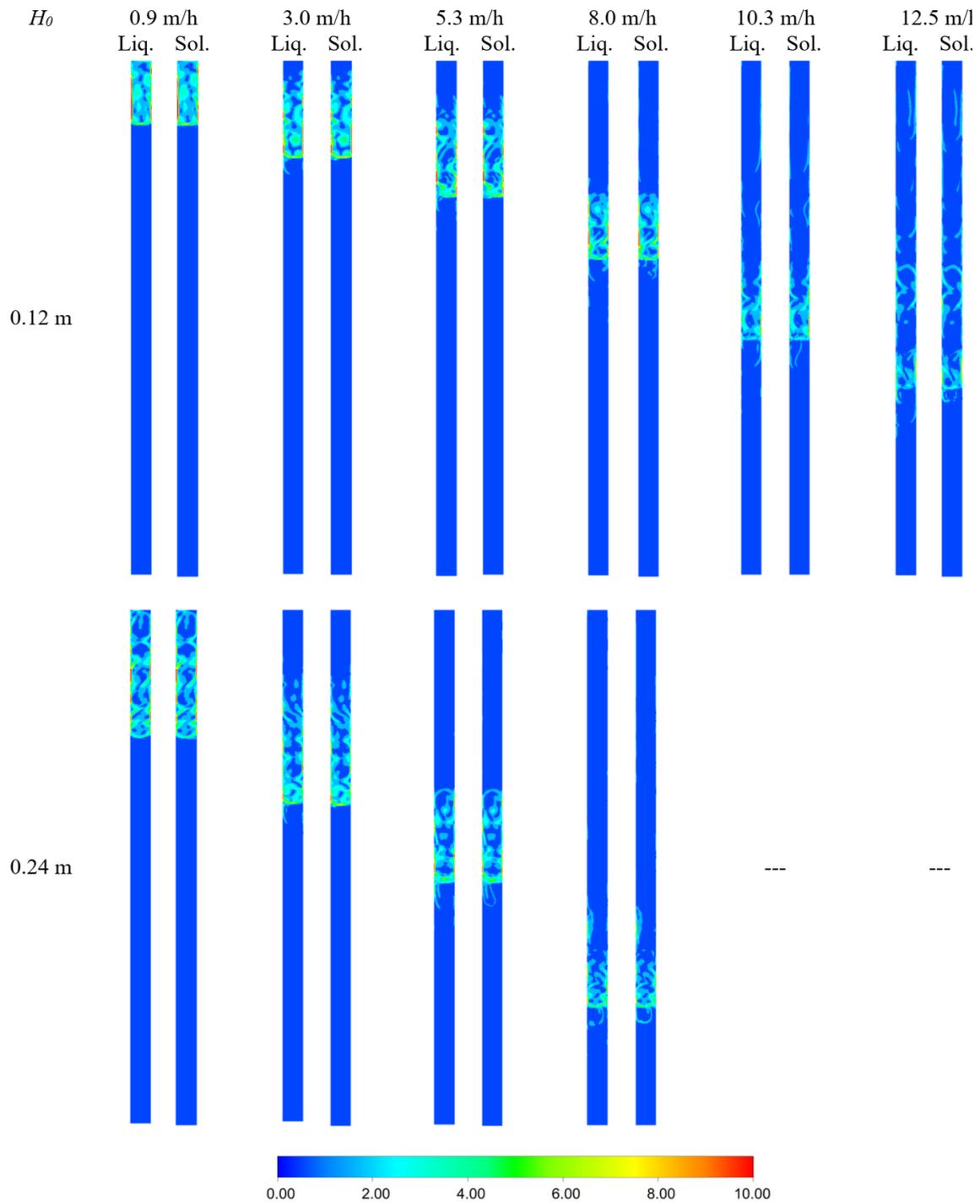


Figura 4.11 Perfiles de la tasa de corte (s^{-1}) para el RLFII operando con $H_0=0.12$ m y 0.24 m.

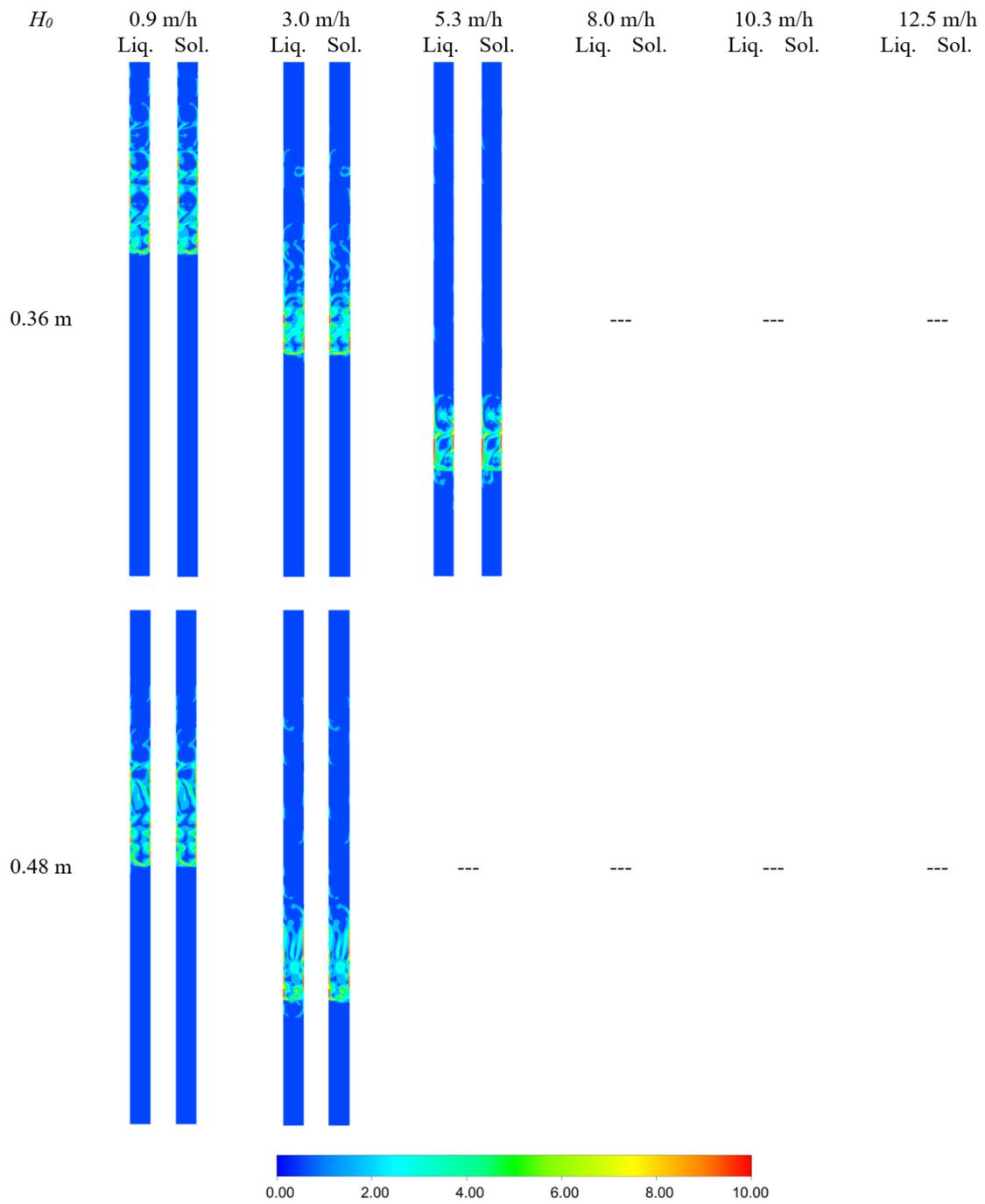


Figura 4.12 Perfiles de la tasa de corte (s^{-1}) para el RLF operando con $H_0=0.36$ m y 0.48 m.

4.2 Modelo tridimensional

Con la finalidad de conocer el efecto de la tridimensionalidad del flujo en el reactor, se desarrolló un modelo 3D para el RLFI analizado. Este modelo fue creado empleado la misma configuración del modelo 2D, tomando en cuenta únicamente el modelo de arrastre de Syamlal y O'Brien (1989) y la altura inicial de lecho de 0.12 m. Únicamente se consideró esta condición debido a los tiempos de simulación largos que requieren los modelos 3D multifasicos, además altura de lecho nos permite comparar un mayor número de velocidades de operación.

4.2.1 Análisis de independencia de malla y paso del tiempo.

Del mismo modo que en modelo 2D se construyeron 5 mallas de tamaños de elemento cada vez menor, el número de elementos de cada malla y su tamaño de elemento promedio se muestra en la Tabla 4.2, mientras estas mallas se muestran en la Figura 4.13. Para analizar el efecto del tamaño de elemento se empleó una velocidad de líquido de 12 m/h para todas las mallas, con un paso de tiempo fijo de 0.1 s el cual es el que se determinó como adecuado en el análisis de independencia en dos dimensiones.

El resultado de este análisis de independencia de malla se muestra en la Figura 4.14 a) y b), para la altura de lecho y las velocidades promedio del líquido y los sólidos, respectivamente. En cuanto a la altura de lecho, se distingue que el número de elementos tiene poco efecto sobre la expansión del lecho, mostrándose un error menor al 1% respecto a la malla 5 en todos los casos. En el caso de las velocidades promedio la fase líquida y los sólidos muestran que a partir de la malla 3, se obtiene un error de 5% respecto a malla más densa (malla 5). Sin embargo, ésta contiene 4 veces menos elementos, motivo por el cual se tomó como malla independiente la malla 3.

Tabla 4.2 Configuración de las mallas 3D

| Malla | Superior | | Inferior | | Total |
|-------|----------|----------|----------|----------|---------|
| | NE | TPE (ml) | NE | TPE (ml) | NE |
| 1 | 70800 | 0.02957 | 19560 | 0.05685 | 90360 |
| 2 | 169400 | 0.01082 | 59290 | 0.01816 | 228690 |
| 3 | 338800 | 0.00541 | 118580 | 0.00919 | 457380 |
| 4 | 677600 | 0.00270 | 237160 | 0.00459 | 914760 |
| 5 | 1434000 | 0.00136 | 430200 | 0.00270 | 1864200 |

Nota: NE=Número de elementos; TPE=Tamaño promedio de elemento



Figura 4.13 Mallas 3D estudiadas en el análisis de independencia de malla.

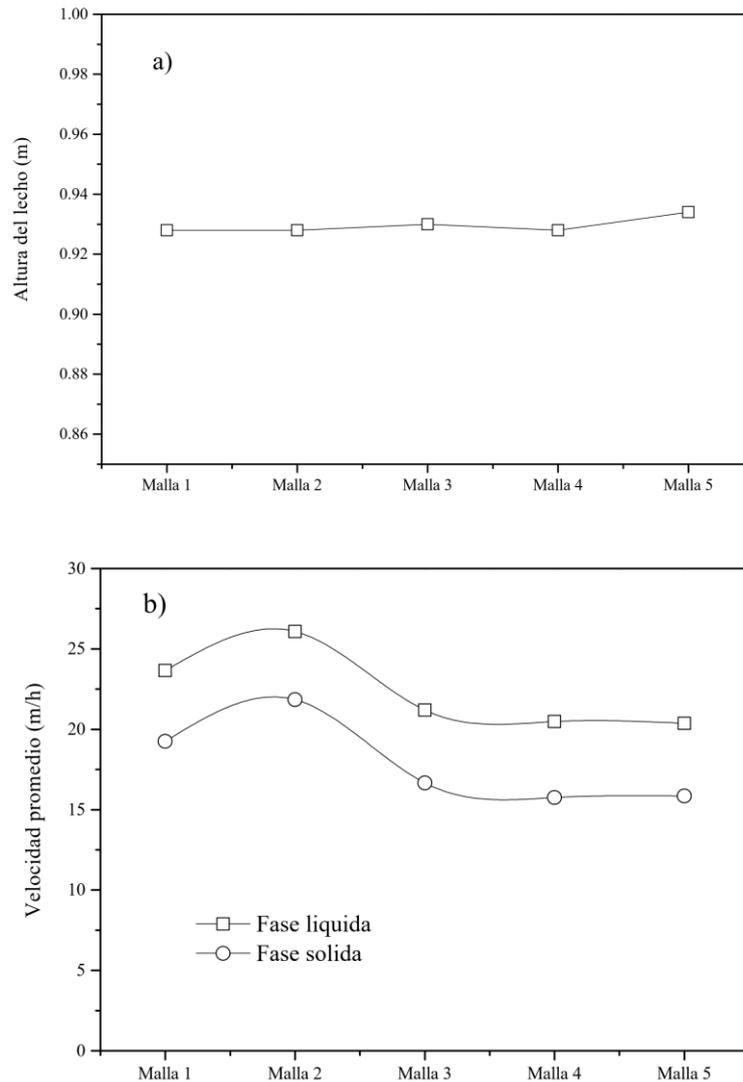


Figura 4.14 Análisis de independencia de malla sobre la altura del lecho expandido (a), la velocidad promedio del líquido y de los sólidos (b).

4.2.2 Comparación con el modelo 2D

En la Figura 4.15 se presenta una comparación de la altura del lecho expandido mediante el modelo 3D y el 2D, con los datos experimentales para una altura inicial de lecho de 0.12 m a todas las velocidades estudiadas. En esta figura se puede notar que para casi todas las velocidades de operación los resultados entre los modelos 3D y 2D son muy parecidos con una diferencia promedio del 5%, a excepción de la velocidad de 12 m/h en donde las diferencias llegan ser del 20%. A pesar de esto ambos modelos muestran una buena aproximación a los datos experimentales.

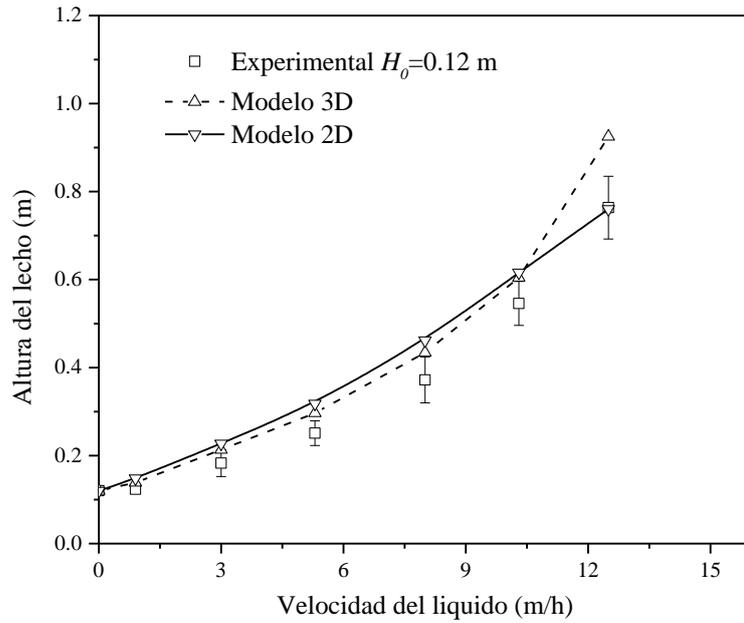


Figura 4.15 Comparación de la altura final del lecho obtenida mediante el modelo 3D y el 2D con los datos de Alvarado-Lassman *et al.* (2008).

Por otro lado, si comparamos la porosidad estimada por ambos modelos la diferencia entre ellos es menor, siendo aproximadamente del 1% en promedio tal como se muestra en la Figura 4.16. Sin embargo, a estas bajas concentraciones de sólidos esta ligera diferencia en el valor de la porosidad de la cama cuando el reactor opera a 12 m/h genera una diferencia importante en el valor de la expansión del lecho tal como mostró en la figura anterior.

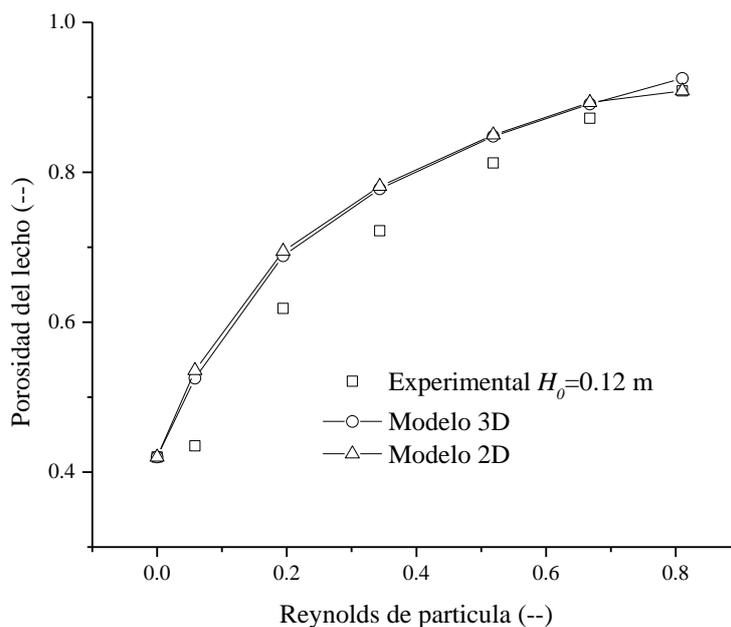


Figura 4.16 Comparación de la porosidad del mediante el modelo 3D y el 2D.

En cuanto a las velocidades calculadas mediante estos modelos, en la Figura 4.17 se presentan los valores de la velocidad para la fase líquida y sólida, promediados en la columna. Es fácil notar que existen diferencias importantes en cuanto este valor, principalmente a velocidades de alimentación superiores a 8 m/h. Mostrando el modelo 3D valores mayores de velocidad promedio para ambas fases. También se puede distinguir que para el caso 2D la velocidad de los sólidos no tiene un aumento importante cuando se incrementa la velocidad del flujo de alimentación.

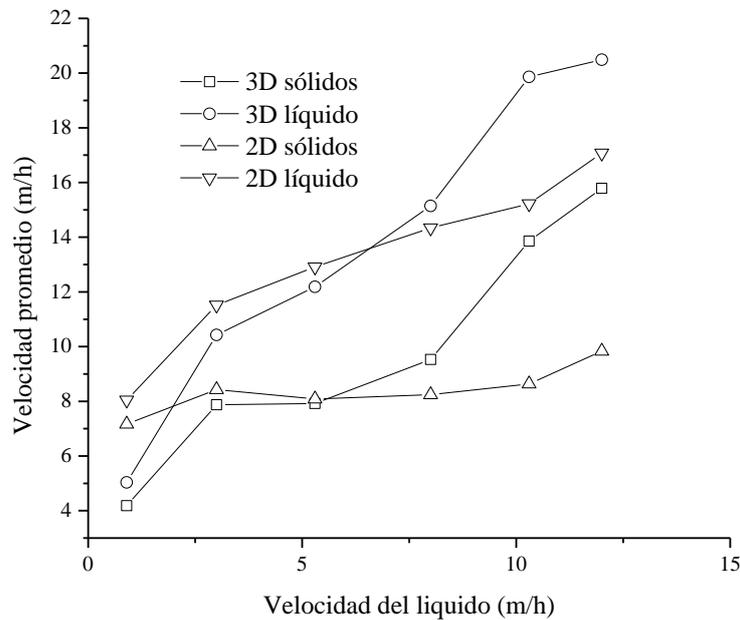


Figura 4.17 Comparación de la porosidad del lecho experimental contra la simulación

Finalmente, la Figura 4.18, muestra los contornos de fracción volumen de partículas y los patrones de flujo en el RLFÍ tanto para la fase líquida como para las partículas para el modelo 3D, mostrando el efecto del incremento en la velocidad del líquido. Al igual que en el caso 2D se puede notar el nivel final de la cama de lodos, además el color mostrado para el valor de la fracción volumen de sólidos es similar al de los contornos 2D, por otro lado, en los patrones de flujo se distingue que en todos los casos también existen numeras recirculaciones en la zona de la cama sólidos y una vez abandonando el lecho, el flujo en la fase líquida se vuelve ordenado, retomando el perfil característico de un tubería.

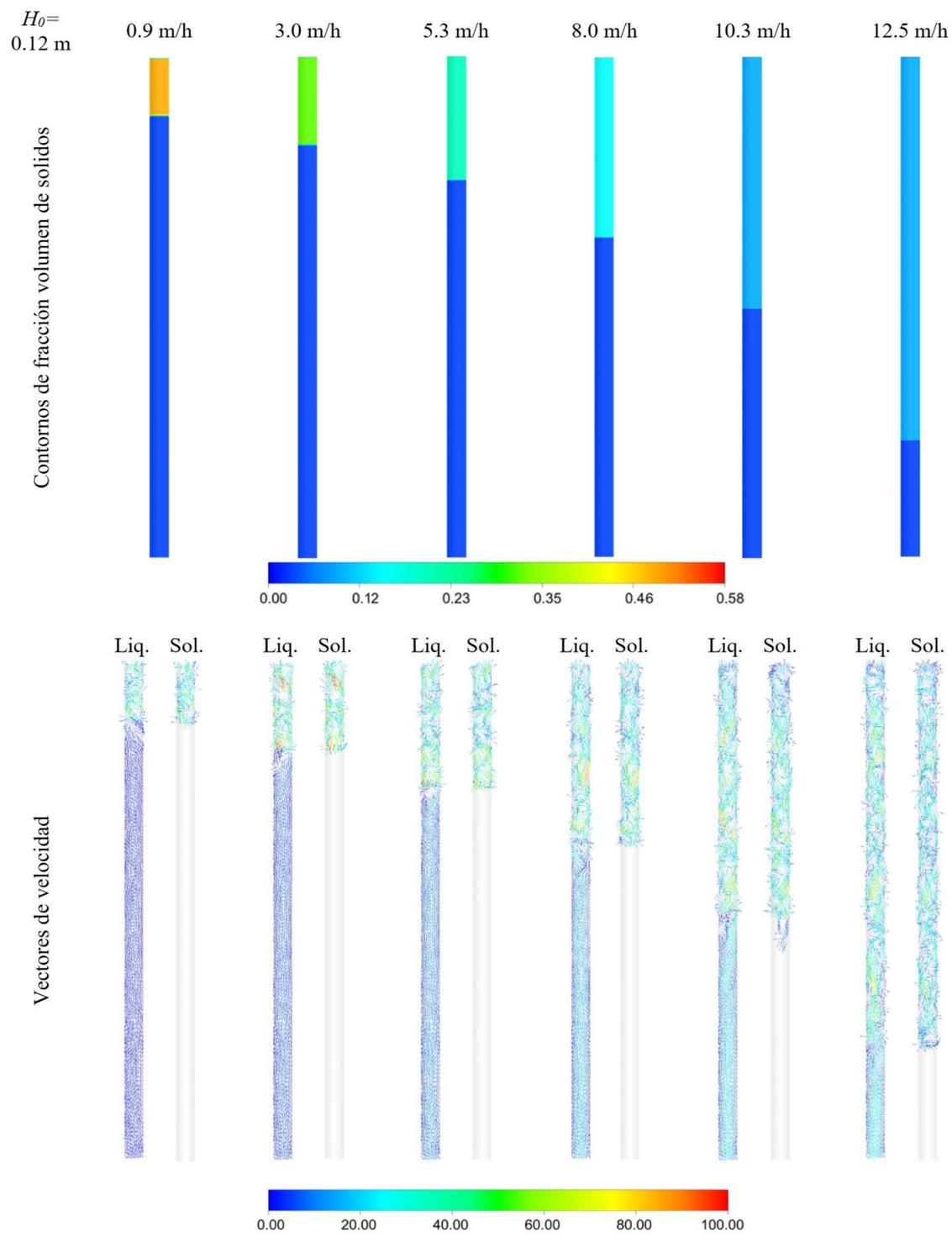


Figura 4.18 Contornos de fracción volumen de partículas y patrones de flujo en forma de vectores con tono de velocidad (m/h) para el RLFI operando con $H_0=0.12$ m.

CAPÍTULO 5.

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se desarrollaron modelos computacionales para un reactor de lecho fluidizado inverso empleado para el tratamiento anaerobio de aguas residuales.

Como conclusiones al trabajo realizado se pueden establecer los siguientes enunciados:

- 1) El modelo Euler-Euler Granular ofrece la posibilidad de representar adecuadamente la física de un RLFI, sin la necesidad de modelar individualmente las partículas del lecho.
- 2) El modelo de Syamlal y O'Brien (1989) presentó mejores resultados de expansión de lecho a distintas condiciones de operación en comparación al modelo de Gidaspow (1994).
- 3) El modelo CFD propuesto representa adecuadamente la expansión del lecho a distintas condiciones de operación, a diferencia de las correlaciones empíricas.
- 4) Los perfiles de la fase sólida muestran que, en la cama de sólidos, la distribución de partículas es homogénea.
- 5) Los patrones de flujo en la columna presentan numerosas recirculaciones en las zonas de los sólidos, y después de ésta, el flujo tiene a ser parabólico.
- 6) La región con mayor corte en el reactor se presenta en el final de la cama de sólidos, principalmente en las paredes.
- 7) El modelo 2D y 3D predicen de manera semejante los valores de la altura de la cama de sólidos en expansión y su porosidad, sin embargo, presentan diferencia en el valor promedio de la velocidad en ambas fases. Un modelo 2D predice muy bien lo que pasa en el reactor LFI lo que ayuda a tener un menor trabajo de cómputo.
- 8) El modelo computacional propuesto puede ser gran utilidad para el análisis de este tipo de reactores, dando la posibilidad de estudiar su comportamiento a cualquier escala, permitiendo una mejor comprensión de su hidrodinámica y el efecto de diversas condiciones de operación sobre su desempeño hidrodinámico.

REFERENCIAS

1. Ahuja, G.N., Patwardhan, A.W. (2008). *CFD y experimental studies of solids hold-up distribution y circulation patterns in gas–solid fluidized beds*. Chemical Engineering Journal 143(1), 147-160.
2. Alvarado-Lassman, A., Rustrián, E., García-Alvarado, M.A., Rodríguez-Jiménez, G.C., Houbroun, E. (2008). *Brewery wastewater treatment using anaerobic inverse fluidized bed reactors*. Bioresource Technology, 99 (8), 3009-3015.
3. Alvarado-Lassman, A., Sandoval-Ramos, A., Flores-Altamirano, M. G., Vallejo-Cantú, N. A., & Méndez-Contreras, J. M. (2010). *Strategies for the Startup of Methanogenic Inverse Fluidized-Bed Reactors Using Colonized Particles*. Water environment research, 82(5), 387-391.
4. Amaiz, C., Elmaleh, S., J, L., Moletta, R. (2005). *Start up of an anaerobic inverse turbulent bed reactor fed with wine distillery wastewater using pre-colonised bioparticles*. Water Science & Technology, 5 (1), 153-158.
5. Arun, N., Razack, A.A., Sivasubramanian, V. (2013). *Recent Progress in hydrodynamics of inverse fluidized bed reactors: a review*. Chemical Engineering Communications, 200 (9), 1260-1277.
6. Burghate, S.P., Ingole, N.W. (2013). *Fluidized Bed Biofilm Reactor – A Novel Wastewater Treatment Reactor*. Int. J. Res. Environ. Sci. Technol, 3, 145-155.
7. Campos-Díaz, K.E., Bandala-González, E.R., Limas-Ballesteros, R. (2012). *Fluid bed porosity mathematical model for an inverse fluidized bed bioreactor with particles growing biofilm*. Journal of Environmental Management, 104, 62-66.
8. Cervantes, F.J. (2010). *Tratamiento anaerobio de las aguas residuales en México*. Concyteg, 5 (60), 554-559.
9. Cloete, S., Amini, S., Johansen, S.T. (2011). *On the effect of cluster resolution in riser flows on momentum y reaction kinetic interaction*. Powder Technology, 210 (1), 6-17.
10. Comte, M.P., Bastoul, D., Hebrard, G., Roustan, M., Lazarova, V. (1997). *Hydrodynamics of a three-phase fluidized bed—the inverse turbulent bed*. Chemical Engineering Science, 52 (21), 3971-3977.
11. CONAGUA, (2016). *Subdirección General de Agua Potable, Drenaje y Sanamiento*.
12. Das, B., Ganguly, U.P., Bar, N., Das, S.K. (2015). *Holdup prediction in inverse fluidization using non-Newtonian pseudoplastic liquids: Empirical correlation y ANN modeling*. Powder Technology, 273, 83-90.
13. Das, B., Ganguly, U.P., Das, S.K. (2010). *Inverse fluidization using non-Newtonian liquids*. Chemical Engineering y Processing: Process Intensification, 49 (11), 1169-1175.
14. Deen, N.G., Van Sint Annaland, M., Van der Hoef, M.A., Kuipers, J.A.M. (2007). *Review of discrete particle modeling of fluidized beds*. Chemical Engineering Science, 62 (1), 28-44.
15. Fan, L.-S., Muroyama, K., Chern, S.-H. (1982). *Hydrodynamic characteristics of inverse fluidization in liquid—solid y gas—liquid—solid systems*. The Chemical Engineering Journal, 24 (2), 143-150.

16. Femin Benedict, R.J., Kumaresan, G., Velan, M., (1998). *Bed expansion y pressure drop studies in a liquid-solid inverse fluidised bed reactor*. Bioprocess Engineering, 19 (2), 137-142.
17. García-Calderon, D., Buffiere, P., Moletta, R., Elmaleh, S. (1998). *Anaerobic digestion of wine distillery wastewater in down-flow fluidized bed*. Water Research, 32 (12), 3593-3600.
18. García-Calderón, D., Buffière, P., Moletta, R., Elmaleh, S. (1998). *Influence of biomass accumulation on bed expansion characteristics of a down-flow anaerobic fluidized-bed reactor*. Biotechnology y Bioengineering, 57 (2), 136-144.
19. Gidaspow, D., Bezburuah, R., Ding, J. (1992). *Hydrodynamics of Circulating Fluidized Beds, Kinetic Theory Approach*.
20. Hoef, M.A.v.d., Annaland, M.v.S., Deen, N.G., Kuipers, J.A.M. (2008). *Numerical Simulation of Dense Gas-Solid Fluidized Beds: A Multiscale Modeling Strategy*. Annual Review of Fluid Mechanics, 40 (1), 47-70.
21. Houbron, E., Alvarado-Lassman, A., Zepeda, A., Rustrian, E. (2012). *Methane yield y microscopic observation as monitoring biofilm behaviour parameters, during start up phase of anaerobic inverse fluidized bed reactor*. African Journal of Biotechnology, 11 (78), 14392-14398.
22. Houbron, E., Sandoval-Rojas, M.E., Hernández-Muñoz, A.F. (2016). *Tratamiento de vinazas en un reactor de lecho fluidizado inverso anaerobio*. Revista Internacional de Contaminación Ambiental, 32 (3), 255-266.
23. Huilin, L., Yurong, H., Wentie, L., Ding, J., Gidaspow, D., Bouillard, J. (2004). *Computer simulations of gas–solid flow in spouted beds using kinetic–frictional stress model of granular flow*. Chemical Engineering Science, 59 (4), 865-878.
24. Johnson, P.C., Jackson, R. (2006). *Frictional–collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing*. Journal of Fluid Mechanics, 176, 67-93.
25. Jun, W.F. (2004). *Computational fluid dynamics analysis-CFD Software Principles y Applications*. Tsinghua University Press.
26. Karamanev, D.G., Nikolov, L.N. (1992a). *Bed expansion of liquid-solid inverse fluidization*. AIChE Journal, 38 (12), 1916-1922.
27. Karamanev, D.G., Nikolov, L.N. (1992b). *Free rising spheres do not obey newton's law for free settling*. AIChE Journal, 38 (11), 1843-1846.
28. Karamanev, D.G., Nikolov, L.N. (1996). *Application of inverse fluidization in wastewater treatment: From laboratory to full-scale bioreactors*. Environmental Progress, 15 (3), 194-196.
29. Kato, M.T., Field, J.A., Versteeg, P., Lettinga, G. (1994). *Feasibility of expanded granular sludge bed reactors for the anaerobic treatment of low-strength soluble wastewaters*. Biotechnology y Bioengineering, 44 (4), 469-479.
30. Khan, M.J.H., Hussain, M.A., Mansourpour, Z., Mostoufi, N., Ghasem, N.M., Abdullah, E.C. (2014). *CFD simulation of fluidized bed reactors for polyolefin production – A review*. Journal of Industrial y Engineering Chemistry, 20 (6), 3919-3946.

31. Kuipers, J.A.M., van Swaaij, W.P.M. (1998). *Computational Fluid Dynamics Applied To Chemical Reaction Engineering*. Advances in Chemical Engineering, 24, 227-328.
32. Leonard, B.P. (1979). *A stable y accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation*. Computer Methods in Applied Mechanics y Engineering, 19 (1), 59-98.
33. Monroy-Hermosillo, O., Famá-Bottini, G., Meraz-Rodriguez, M., Montoya-López, L., Macarie-Olivier, H. (1998). *Digestión anaerobia en México: estado de la tecnología*. Ingeniería y ciencias ambientales, 10 (39), 12-23.
34. Nikolov, V., Farag, I., Nikov, I. (2000). *Gas-liquid mass transfer in bioreactor with three-phase inverse fluidized bed*. Bioprocess Engineering, 23 (5), 427-429.
35. Nikov, I., Karamanev, D. (1991). *Liquid-solid mass transfer in inverse fluidized bed*. AIChE Journal, 37 (5), 781-784.
36. Pfleger, D., Gomes, S., Gilbert, N., Wagner, H.G. (1999). *Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the Eulerian–Eulerian modelling approach*. Chemical Engineering Science, 54 (21), 5091-5099.
37. Ramamurthy, K., Subbaraju, K. (1973). *Bed Expansion Characteristics of Annular Liquid-Fluidized Beds*. Industrial & Engineering Chemistry Process Design y Development, 12 (2), 184-189.
38. Ramírez-Muñoz, J., (2007). *Interacción hidrodinámica de un cuerpo esférico con la estela laminar de otro en un fluido newtoniano con flujo uniforme*. Tesis de Doctorado. Universidad Autonoma Metropolitana-Iztapalapa.
39. Ranade, V.V. (2001). *Computational flow modeling for chemical reactor engineering*. Academic Press.
40. Renganathan, T., Krishnaiah, K. (2005). *Voidage characteristics y prediction of bed expansion in liquid–solid inverse fluidized bed*. Chemical Engineering Science, 60 (10), 2545-2555.
41. Riba, J.P., Couderc, J.P. (1977). *Expansion de couches fluidisées par des liquides*. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 55 (2), 118-121.
42. Richardson, J.F., Zaki, W.N. (1954). *The sedimentation of a suspension of uniform spheres under conditions of viscous flow*. Chemical Engineering Science, 3 (2), 65-73.
43. Roy, S., Dhotre, M.T., Joshi, J.B. (2006). *CFD Simulation of Flow y Axial Dispersion in External Loop Airlift Reactor*. Chemical Engineering Research y Design, 84 (8), 677-690.
44. Sabarunisha Begum, S., Radha, K.V. (2014). *Effect of gas–liquid mass transfer coefficient y liquid–solid mass transfer resistance on phenol biodegradation in three phase inverse fluidized bed biofilm reactor*. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2 (4), 2321-2326.
45. Sánchez, O., Michaud, S., Escudíé, R., Delgenès, J.-P., Bernet, N. (2005). *Liquid mixing y gas–liquid mass transfer in a three-phase inverse turbulent bed reactor*. Chemical Engineering Journal, 114 (1), 1-7.
46. Sandoval-Ramos, A. (2007). *Implementación y evaluación del desempeño de reactores de biopelícula y de lodo granular anaerobio para el tratamiento de agua residual industrial*. Instituto Tecnológico de Orizaba.

47. Si, C., Zhou, J., Guo, Q. (2011). *Characterization of pressure fluctuation signals in an acoustic bubbling fluidized bed*. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 42 (6), 929-936.
48. Sivasubramanian, V. (2010). *Gas-liquid mass transfer in three-phase inverse fluidized bed reactor with Newtonian y non-Newtonian fluids*. Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering, 5 (2), 361-368.
49. Syamlal, M., O'Brien, T.J. (1989). *Computer Simulation of Bubbles in a Fluidized Bed*. AIChE Symp, 85, 22-31.
50. Tisa, F., Abdul Raman, A.A., Wan Daud, W.M.A. (2014). *Applicability of fluidized bed reactor in recalcitrant compound degradation through advanced oxidation processes: A review*. Journal of Environmental Management, 146, 260-275.
51. Ulaganathan, N., Krishnaiah, K. (1996). *Hydrodynamic characteristics of two-phase inverse fluidized bed*. Bioprocess Engineering, 15 (3), 159-164.
52. Lakshmi, A.V., Balamurugan, M., Sivakumar, M., Newton Samuel, T., Velan, M. (2000). *Minimum fluidization velocity y friction factor in a liquid-solid inverse fluidized bed reactor*. Bioprocess Engineering, 22 (5), 461-466.
53. Wang, S., Sun, J., Yang, Q., Zhao, Y., Gao, J., Liu, Y. (2014). *Numerical simulation of flow behavior of particles in an inverse liquid-solid fluidized bed*. Powder Technology, 261, 14-21.
54. Wang, S., Wang, X., Wang, X., Shao, B., Ma, Y., Sun, Q., Zhao, J. (2018). *Numerical simulation of flow behavior of particles in an inverse liquid-solid fluidized bed with a jet using CFD-DEM*. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 82, 214-225.
55. Wen, C.Y., Yu, Y.H. (1966). *Mechanics of fluidization*, Chemical Engineering Progress Symposium, 162, 100-111.
56. Yang, W.-C.(2003). *Handbook of Fluidization y Fluid-Particle Systems*. U.S.A., Marcel Dekker, Inc.