



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Hidrodinámica del Flujo Multifase dentro de un Reactor de Biopelícula

I.M. Ernesto Javier Muñoz Suárez

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Minas, Escuela de Procesos y Energía
Medellín, Colombia

2012

Hidrodinámica del Flujo Multifase dentro de un Reactor de Biopelícula

I.M. Ernesto Javier Muñoz Suárez

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:

Magister en Ingeniería Química

Director (a):

Ph.D. Farid Chejne Janna

Línea de Investigación:

Modelación, Optimización y Simulación de Procesos Físicoquímicos

Grupo de Investigación:

Termodinámica Aplicada y Energías Alternativas TAYEA

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Minas, Escuela de Procesos y Energía

Medellín, Colombia

2012

Dedicatoria

Para Daniel y quien viene en camino quienes se ha convertido en la razón de seguir adelante con mis sueños, y mostrarle que es posible hacer lo que quieres; Para Claudia quien es mi soporte y aliento que me impulsa a seguir el camino; Para mis padres quienes se han dedicado a cuidarme haciendo posible que siga cultivando logros; para mis hermanos y resto de familiares.

La física es simple solo cuando es analizada localmente.

Albert Einstein

Agradecimientos

Un especial agradecimiento a mi Esposa quien con su sacrificio apporto a la consecución de este sueño de mi vida.

Al profesor Farid Chejne Janna por ser el faro que indica el camino hacia a la excelencia académica.

Al grupo TAYEA y a la Universidad Nacional de Medellín por su apoyo brindando los recursos necesarios para el desarrollo de este trabajo.

A mis padres quienes también aportaron su grano de arena en la construcción de este trabajo.

A mi primo Gabriel García Suárez, Mario Buchely Camacho, David Granados, Diego Yepes Maya y María Bernarda Alvarado que me facilitaron las cosas.

Al grupo de desarrolladores de Multiphase Flow with Interphase Exchange MFIX del Departamento de Energía de EE.UU, quienes me brindaron el soporte necesario para usar su aplicación.

Resumen

Se desarrolló un modelo hidrodinámico para flujos multifase apto para analizar el campo de flujo que se genera en la operación de un Reactor Anaeróbico de Flujo Ascendente (UASB). La fase líquida constituida por agua residual se modeló utilizando un esquema Euleriano; entre tanto, para los gránulos anaeróbicos ó biopartículas se utilizó un esquema Lagrangiano, teniendo en cuenta el arrastre y el empuje como interacción entre la fase continua (agua residual) y la fase dispersa (gránulos anaeróbicos ó biopartícula anaeróbicos), interacciones partícula–partículas con base en el modelo de esfera blanda permitiendo modelar el contacto de más de dos partículas. Se estableció una propiedad escalar que se transporta con el agua para modelar el efecto que tienen la hidrodinámica sobre la digestión de la materia orgánica.

El modelado del reactor permitió simular las zonas de lodos y fangosas que son reportadas en la literatura, también fue posible encontrar una tendencia a la segregación lo que permite clasificar los gránulos anaeróbicos según su tamaño y por ende su edad, siendo los de mayor tamaño los más maduros. Con el modelo se predijo la presión que ejercen dichos gránulos sobre el flujo de agua residual, lo cual se crean las condiciones para que se generen burbujas de agua residual, lo que afecta negativamente la digestión de la materia orgánica.

Abstract

We developed a hydrodynamic model for multiphase flows suitable for analyzing the flow field generated in the operation of Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB). The liquid phase consists of waste water was modeled using an Eulerian scheme, meanwhile, bioparticles or anaerobic granules used a Lagrangian scheme, taking into account the drag and lift forces like interaction between the continuous phase (waste water) and phase dispersed (bioparticles or anaerobic granules), particle-particle interactions based on the soft sphere model to model the contact of more than two particles. Scalar property was established that water is transported to model the effect of hydrodynamics on the digestion of organic matter.

Modeling of the reactor allowed simulating sludge and blanketing zones that are reported in the literature, it was also possible to find a tendency to segregate allowing anaerobic granules classified according to their size and therefore its age, being the larger the more mature. In model predicted the solid pressure on flow of wastewater by anaerobic granules, which create conditions for generation of wastewater bubbles, this bring negative effects to digestion of organic material.

Contenido

Resumen	V
Abstract	VI
Contenido	VII
Lista de Figuras	X
Lista de Tablas	XII
Introducción	1
1. ESTADO DEL ARTE	4
2. EQUIPO PARA TRATAMIENTO SECUNDARIO DE AGUA RESIDUAL.....	12
2.1 Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB).....	12
2.2 Descripción del Sistema Dentro del Reactor UASB	13
2.3 Descripción del Modelo Matemático del Reactor UASB.....	15
2.4 Ecuaciones de Balance de Masa y Momentum para un Esquema Euleriano – Lagrangiano	16
2.5 Consideraciones y Simplificaciones del Modelo Matemático para Reactor UASB 17	
2.5.1 Ecuaciones Constitutivas.....	18
2.5.1.1 Ley de Viscosidad de Newton.....	18
2.5.1.2 Ley de Fick	18
2.6 Modelo para el Agua Residual.....	19
2.7 Modelo para los Gránulos Anaeróbicos	20
2.8 Términos de Acoplamiento entre el Agua Residual y los Gránulos Anaeróbicos	21
2.8.1 Masa	21
2.8.2 Momentum	22

2.8.3	Partícula - Partícula	23
2.8.3.1	Dinámica de la Colisión entre Partículas.....	24
2.8.3.2	Modelo de Esfera Blanda (Soft Sphere Model)	26
2.8.3.3	Coefficiente de Rigidez y de Amortiguamiento.....	30
2.8.4	Término Fuente de la Cantidad φ (DQO)	31
3.	SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL MODELO MATEMÁTICO	33
3.1	Método de Solución para la Fase Euleriana (Agua Residual)	33
3.2	Método de Solución para la Fase Lagrangiana (Gránulos Anaeróbicos).....	34
3.3	Fracción de Volumen de Sólidos	35
3.4	Escalas de Tiempo	35
3.5	Algoritmo de Solución Acoplado	36
3.6	Algoritmo de Búsqueda de Partículas.....	38
3.7	Condiciones de Frontera.....	38
3.7.1	Condiciones De Frontera Eulerianas	38
3.7.2	Condiciones de Frontera Lagrangiana.....	40
4.	SIMULACIÓN Y RESULTADOS	42
4.1	Simulación.....	42
4.1.1	Geometría	42
4.1.2	Gránulos Anaeróbicos	44
4.1.3	Constantes	45
4.1.4	Condiciones de Frontera	46
4.2	Resultados	46
4.2.1	Evolución hacia un Estado Cuasi – Estacionario de Reactor	47
4.2.2	Expansión del Lecho en el Reactor de Flujo Ascendente	49
4.2.3	Segregación de la Fase Solida (Gránulos anaeróbicos)	51
4.2.4	Campo de Velocidades del Agua Residual y Gránulos Anaeróbicos	55
4.2.5	Digestión de la Materia Orgánica.....	63

5. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS	68
5.1 Conclusiones	68
5.2 Trabajos Futuros	70
A. Anexo: Archivo de Entrada para la Aplicación Solución del Modelo.....	72
B. Anexo: Tabla de Relación de Diámetros para los 10 Tamaños de Gránulos Anaeróbicos.....	79
BIBLIOGRAFÍA.....	80

Lista de Figuras

<i>Figura 1-1: Tasa de Crecimiento microrganismos según temperatura.</i>	<i>5</i>
<i>Figura 1-2: Granulo Anaeróbico Dia. 1.2 mm (Nicoletta et al 2000).</i>	<i>6</i>
<i>Figura 1-3: Distribución de Tamaños de Gránulos Anaeróbicos (Batstone y Keller 2000).</i>	<i>7</i>
<i>Figura 1-4: Modelo de un Reactor UASB (Saravannan y Srrekrishnan 2006).</i>	<i>9</i>
<i>Figura 1-5: Modelado Hidrodinámico del Reactor UASB (Wu y Hickey et al. 1997).</i>	<i>10</i>
<i>Figura 1-6: Modelado Hidrodinámico del Reactor UASB (Bolle et al 1986).</i>	<i>10</i>
<i>Figura 1-7: Modelado Hidrodinámico del Reactor UASB (Singhal et al 1986).</i>	<i>11</i>
<i>Figura 2-1: Modelo del Reactor UASB (Van Haandel y Lettinga et al 1994).</i>	<i>13</i>
<i>Figura 2-2: Volumen de Control del Sistema Formado en el Reactor UASB.</i>	<i>14</i>
<i>Figura 2-3: Volumen de Control Simplificado del Reactor UASB.</i>	<i>15</i>
<i>Figura 2-4: Contacto entre dos Partícula en Modelo de Esfera Blanda.</i>	<i>24</i>
<i>Figura 2-5: Contacto entre dos Partícula en Modelo de Esfera Blanda.</i>	<i>24</i>
<i>Figura 2-6: Representación Esquemática del Contacto en Dirección Normal y Tangencial según el Modelo de Esfera Blanda.</i>	<i>26</i>
<i>Figura 3-1: Discretización con el Método Up – Wind de Primer Orden.</i>	<i>33</i>
<i>Figura 3-2: Esquema del Algoritmo usado para resolver el Modelo de la Sección 2.</i>	<i>37</i>
<i>Figura 3-3: Condición de Frontera de Pared.</i>	<i>39</i>
<i>Figura 3-4: Condición de Frontera Entrada de Velocidad.</i>	<i>39</i>
<i>Figura 3-5: Condición de Frontera Salida de Presión.</i>	<i>40</i>
<i>Figura 4-1: Geometría del Volumen de Control del Reactor UASB.</i>	<i>43</i>
<i>Figura 4-2: Prueba de Independencia de Malla de la Geometría del Volumen de Control.</i>	<i>43</i>
<i>Figura 4-3: Distribución de Tamaños de Gránulos Anaeróbicos dentro del Reactor UASB.</i>	<i>44</i>
<i>Figura 4-4: Distribución de Gránulos Anaeróbicos en el Área de Simulación.</i>	<i>45</i>
<i>Figura 4-5: Altura del Lecho del Reactor de Flujo Ascendente según Tiempo.</i>	<i>47</i>
<i>Figura 4-6: Fracción Volumétrica del Agua Residual en una Celda de Volumen a la Altura de 9 cm del Reactor de Flujo Ascendente.</i>	<i>48</i>
<i>Figura 4-7: Contorno de Fracción Volumétrica del Agua Residual a los 100, 200 y 300 segundos.</i>	<i>49</i>
<i>Figura 4-8: Fracción Volumétrica del Agua Residual según Altura del Reactor a los 300 segundos para 2 cm, 7 cm y 12 cm.</i>	<i>50</i>

<i>Figura 4-9: Contornos de Fracción Volumétrica de Sólidos por Diámetro de Gránulos Anaeróbicos 0,72 mm, 1,08 mm, 1,44 mm y 1,80 mm a los 300 segundos.</i>	<i>52</i>
<i>Figura 4-10: Velocidad Promedio según Fase de Gránulos Anaeróbicos en la Dirección Axial del Reactor a 300 segundos.....</i>	<i>53</i>
<i>Figura 4-11: Velocidad Promedio según Fase de Gránulos Anaeróbicos en la Dirección Transversal del Reactor a 300 segundos.....</i>	<i>54</i>
<i>Figura 4-12: Contorno de Velocidad del Agua Residual a los 100, 200 y 300 segundos.....</i>	<i>55</i>
<i>Figura 4-13: Velocidad del Agua Residual según Altura del Reactor a los 100 segundos.</i>	<i>56</i>
<i>Figura 4-14: Velocidad del Agua Residual según Altura del Reactor a los 200 segundos.</i>	<i>57</i>
<i>Figura 4-15: Velocidad del Agua Residual según Altura del Reactor a los 300 segundos.</i>	<i>58</i>
<i>Figura 4-16: Fracción de Volumen y Velocidad del Agua Residual según Velocidad de Biopartícula a los 300 segundos.....</i>	<i>59</i>
<i>Figura 4-17: Distribución de Gránulos según su Magnitud de Velocidad a 300 segundos.....</i>	<i>59</i>
<i>Figura 4-18: Contorno de Fracción de Volumen y Velocidad del Agua Residual según Posición de los Gránulos Anaeróbicos a los 300 segundos.....</i>	<i>60</i>
<i>Figura 4-19: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos y Flujo de Agua Residual Axial según Altura del Reactor a 1 cm en la Dirección Trasversal a los 300 segundos.....</i>	<i>61</i>
<i>Figura 4-20: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos y Flujo de Agua Residual Axial según Altura del Reactor a 6 cm en la Dirección Trasversal a los 300 segundos.....</i>	<i>62</i>
<i>Figura 4-21: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos y Flujo de Agua Residual Axial según Altura del Reactor a 13 cm en la Dirección Trasversal a los 300 segundos.....</i>	<i>62</i>
<i>Figura 4-22: Contorno de la Digestión de la Materia Orgánica Representada por la Demanda Química de Oxígeno DQO asociada a la Propiedad ϕ, para los 100, 200 y 300 segundos.</i>	<i>63</i>
<i>Figura 4-23: Distribución de Materia Orgánica en la Dirección Axial del Reactor.....</i>	<i>64</i>
<i>Figura 4-24: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos, Cantidad de Materia Orgánica y Velocidad del Agua Residual a 1 cm en la Dirección Transversal a los 300 segundos.</i>	<i>65</i>
<i>Figura 4-25: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos, Cantidad de Materia Orgánica y Velocidad del Agua Residual a 7 cm en la Dirección Transversal a los 300 seg.....</i>	<i>66</i>
<i>Figura 4-26: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos, Cantidad de Materia Orgánica y Velocidad del Agua Residual a 13 cm en la Dirección Transversal a los 300 seg.</i>	<i>66</i>

Lista de Tablas

<i>Tabla 4-1: Constantes Aplicadas en el Modelo de la Sección 2.</i>	<i>45</i>
<i>Tabla 4-2: Condiciones de Frontera para el Modelo de la Sección 2.</i>	<i>46</i>
<i>Tabla 4-3: Relación de tamaño de partículas entre las fases reportadas en la figura 4-3.</i>	<i>53</i>

Introducción

El tratamiento de aguas residuales se ha vuelto un tema de gran relevancia en la actualidad, dada la importancia que ha tomado el cuidado del medio ambiente; sin embargo, en Colombia hasta el 2008 solo se tenía la capacidad de tratar el 9% de las aguas servidas que se producían en el país. La masificación e industrialización del tratamiento de aguas en Colombia puede convertirse en una práctica común en la transformación de los desechos que producen los colombianos, y de este modo contribuir a la solución del problema ambiental que estamos enfrentando.

El tratamiento de aguas residuales busca la remoción de por lo menos uno de los cuatro constituyentes más importantes que contiene la misma, sólidos suspendidos, material orgánico biodegradable, nutrientes (nitrógeno y fósforo) y organismos patógenos anaeróbicos (Van Haandel y Lettinga 1994). Al tratar las aguas residuales se combinan procesos físicos, químicos y biológicos para disminuir sus contaminantes, y dependiendo del nivel de purificación que puede alcanzar el agua después de los procesos las plantas de tratamiento son clasificadas como primarias, secundarias y terciarias (Drinan 2001).

Los tratamientos primarios requieren básicamente de procesos físicos para la remoción de contaminantes; los secundarios son realizados mediante procesos biológicos y se requieren de tratamientos primarios antes de ponerlos en marcha; finalmente, los terciarios o avanzados son realizados para remover contaminantes específicos cuyos procesos son de naturaleza química, usualmente realizado después de haber cruzado por los dos procesos anteriores (Drinan 2001).

El tratamiento secundario de aguas residuales puede usar dos mecanismos, el mecanismo aerobio en el cual se busca la oxidación de la materia orgánica, y mecanismo de digestión anaerobia que es desarrollado en un ambiente libre de oxígeno (Van Haandel y Lettinga 1994). Siendo este último de gran importancia, dado que produce sustancias que potencialmente tienen utilidad en las actividades humanas, como son el biogás que

articula el proceso de tratamiento de aguas residuales a la producción de energía renovable (Batstone et al 2002), y como productor de abonos orgánicos (Mara 2003).

Durante más de 50 años la comunidad científica ha dedicado muchos esfuerzos en comprender el proceso de digestión anaerobia, sin embargo, a escalas industriales, el tratamiento secundario usando el mecanismo anaerobio no ha superado a su contraparte y sigue siendo un procedimiento a escala doméstica. La mayoría de los desarrollos que se ha dado en el mundo, han sido en el área de la bioquímica, evaluación de equipos a escala de laboratorio y pilotos, no obstante, hay instalaciones industriales operando en varias partes del mundo.

En el campo del modelado matemático del proceso de digestión anaerobia también se han realizado avances importantes por los estudios realizados por Van der Meer 1979, Bolle et al. 1986, Wu y Hickey 1997, Batstone et al 2002, Ojha y Singh 2002, entre otros. Que han basado sus modelos en la suposición de mezclado perfecto, dejando por fuera los efectos que puede causar el comportamiento hidrodinámico de los reactores que se estudian, pues esta hidrodinámica tiene una incidencia importante sobre la cinética de reacción de los microorganismos que participan de la degradación de la materia orgánica y posterior conversión en biogás.

Dada la dependencia de la digestión de la materia orgánica de los gránulos anaeróbicos, es importante conocer como se distribuyen estos dentro del reactor, es decir, conocer su función de distribución una vez se establece un flujo permanentemente ascendente, haciendo necesario crear un modelo matemático que tenga en cuenta la hidrodinámica del flujo multifase dentro del reactor. Para ello se plantean las ecuaciones de balance de masa y momentum y analizar el impacto que tiene el campo de velocidades en la distribución de las colonias y por ende sobre la digestión de la materia orgánica al interior del reactor.

Es la búsqueda de consolidar el objetivo planteado anteriormente, se construyó un modelo matemático bajo el esquema Euleriano – Lagrangiano, donde la fase continua (Euleriana) es el agua residual, y la fase dispersa (Lagrangiana) son los gránulos anaeróbicos, dicho modelo tiene en cuenta los intercambios de momentum entre las dos fases presentes, y adicionalmente se modela la interacción entre partículas (gránulos

anaeróbicos) con base al modelo de esfera blanda que permite el contacto con mas de dos partículas simultáneamente. La materia orgánica transportada en el agua residual es simulada como una propiedad escalar asociada a la fase continua, permitiendo observar el impacto que tiene la hidrodinámica en el consumo de materia orgánica.

Se construye una fase con 7050 partículas, los diámetros de dichas partículas han sido distribuidos según una distribución normal discreta de 10 segmentos, esta fase se asocia a los gránulos anaeróbicos. Las 7050 partículas simulan la presencia de 1 L de gránulos anaeróbicos al interior del reactor, además se establece que no existe intercambio de gránulos hacia o desde el interior del reactor.

La solución numérica del modelo matemático se hace posible mediante un código CFD construido tomando como base el código libre Multiphase Flow Interphase eXchange MFIx acoplado con Discrete Element Model DEM, desarrollado en lenguaje FORTRAN con el apoyo del Departamento de Energía de Estados Unidos. El código modificado permitió construir una aplicación para desarrollar los experimentos computacionales en la Unidad de Calculo Avanzado UNICA adscrita al grupo Termodinámica Aplicada y Energías Alternativas TAYEA de la Escuela de Procesos y Energías de la Facultad de Minas de la Universidad Nacional de Colombia.

1. ESTADO DEL ARTE

El corazón del proceso de digestión anaerobia son los procesos bioquímicos en el interior del reactor, los cuales, se encargan de transformar la materia orgánica presente en el influente y convertirla en biogás en una atmosfera libre de oxígeno (Van Haandel y Lettinga 1994), estos procesos ocurren por la acción de los microorganismos anaerobios, siendo estas susceptibles a las parámetros medioambientales presentes en el ecosistema del reactor, es decir, su desempeño está sujeto a las condiciones medioambientales de su ecosistema, tales como, disponibilidad de nutrientes, temperatura, acides del medio, dinámica poblacional de la especie bacteriana (Horiuchi et al 2001).

La disponibilidad de los nutrientes dentro de un reactor de digestión anaerobia tiene una fuerte relación con la composición del agua residual que se le ingresa al reactor. Pero también juega un papel fundamental el régimen de flujo (Hidrodinámica) que es responsable de la dispersión de los nutrientes en todo el volumen del reactor. Por ende la agitación de influente tiene un impacto positivo en el tiempo de reducción de la concentración de materia orgánica y formación de biogás en el proceso de digestión anaerobia, debido que los nutrientes le llegan con mayor eficiencia a los microorganismos responsables dentro del influente (Pinho et al 2004), esto permite concluir que el régimen de flujo tiene un gran impacto en la el desempeño de un reactor de digestión anaerobia.

Los microorganismos anaerobios son muy sensibles a la temperatura y se clasifican según sea la tolerancia que tengan sobre esta; microorganismos Psicofílicos que viven por debajo de los 25°C, microorganismos Mesofílicos que viven entre 25 °C y 45 °C, y microorganismos Termofílicos que viven entre 45 °C – 65 °C. Estudios recientes que han comparado los rendimientos de los microorganismos ha demostrados que los reactores psicofílicos tienen un rendimiento muy cercanos que los reactores mesofílicos (Connaughton et al 2006), de igual manera una comparación de los rendimientos del reactor mesofílico y termofílico tampoco arroja diferencias perceptibles (Forbes et al

2010), contrario a la que se había hipotetizado; La temperatura tiene un efecto en el crecimiento bacteriano, presentando tendencias como las mostrada en la figura 1-1 (Ortega 2002).

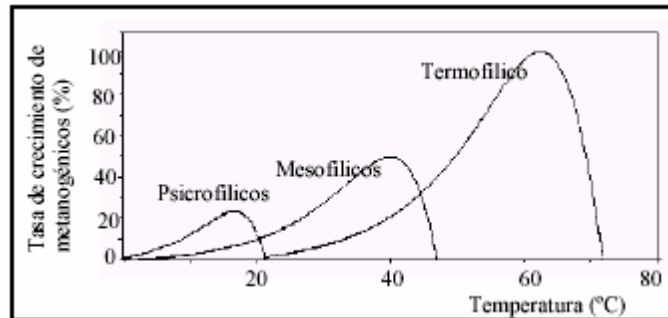


Figura 1-1: Tasa de Crecimiento microorganismos según temperatura.

La acidez del medio es uno de los parámetros que afectan directamente el desarrollo de los microorganismos, debido que variaciones no controladas de este pueden llevar al medio a ser propicio para producir compuestos que inhiben el crecimiento bacteriano, tales como, el amoniaco. El pH tiene valores específicos que generan un ambiente óptimo para que se desarrollen los microorganismos su actividad, se ha encontrado que los valores cercanos a la neutralidad del medio constituye el mejor escenario para favorecer la actividad biológica (Ortega 2002).

- Microorganismos Acidogénicos o Fermentativos, pH entre 7,2 y 7,4
- Microorganismos Acetogénicos, pH entre 7 y 7,2
- Microorganismos Metanogénicos, pH entre 6,5 y 7,5

Con esto el valor del pH debe oscilar entre un valor de 6 y 8.

El crecimiento bacteriano es dependiente de las condiciones antes mencionadas (disponibilidad de nutrientes, temperatura y acides) y cumple la dinámica definida por Monod, los microorganismos presentes en los ecosistemas tienen una tendencia a formar cúmulos donde coexisten, dichos cúmulos se le conocen comúnmente como biopelícula (Biofilm) que en principio fue considerado comportamiento propio de pocas especies

(Lemon et al 2008), la formación de estos cúmulos son atribuibles a tres factores; por emisión de constituyentes celulares exopolisacaridos, proteínas o ácidos nucleicos (Lasa 2006); como respuestas a agentes externos a los microorganismos e incluso a agentes que dependen de sí mismos (Kolter y Greenberg 2006); y por ultimo a respuesta inmunológica de ataques externos (Leid et al 2005). En el caso del proceso de digestión anaerobia la formación de estos cúmulos supone restricciones al flujo de nutrientes hacia los microorganismos internos que forman dicho cúmulo, debido a que estos nutrientes deben difundirse hacia el interior del cumulo formado por los microorganismos (Saravannan y Srrekrishnan 2006).

Los reactores anaerobios bajo condiciones favorables hacen que los microorganismos se aglomeren y crezcan para formar biopelículas tridimensionales o bidimensionales que garanticen su supervivencia, además el suministro de superficies o partículas inertes favorecen la formación biopelícula bien sea tridimensional (partículas) o bidimensional (superficies) (Saravannan y Srrekrishnan 2006). Los reactores anaerobios de flujo ascendente favorece la formación de gránulos anaeróbicos que son cúmulos de microorganismos (biopelículas tridimensionales), y la formación de estos gránulos es la clave para la alta eficiencia de estos reactores (Wu et al. 2009).

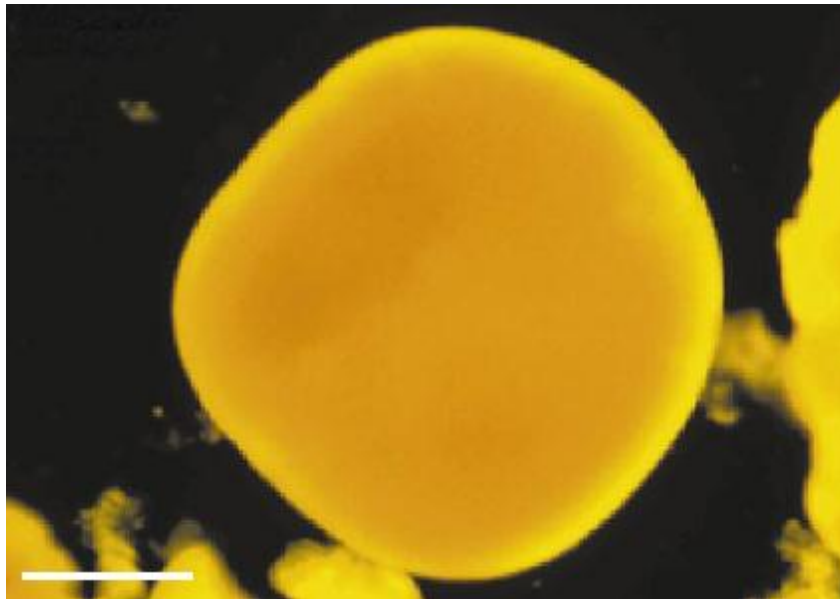


Figura 1-2: Granulo Anaeróbico Dia. 1.2 mm (Nicolella et al 2000).

Las observaciones que se ha hecho de los gránulos anaerobios que se forman en reactores de flujo ascendente muestran una frontera definida y presentan una forma que tiende a ser esférica (Nicolella et al. 2000) ver figura 1-2. La dependencia del tamaño de los gránulos del crecimiento microbiano y a las fuerzas de arrastres que están sometidos dentro del campo de flujo del reactor hacen que sus tamaños varíen con el tiempo (Wu et al. 2009), hacen que dentro del reactor se establezcan una distribución de tamaños que dependen del tipo de sustrato con el cual se alimente el reactor. Los gránulos anaeróbicos pueden alcanzar tamaños hasta de 3 mm y tienen una densidad que va desde 1042 a 1070 kg/m³ (Batstone y Keller 2000) ver figura 1-3.

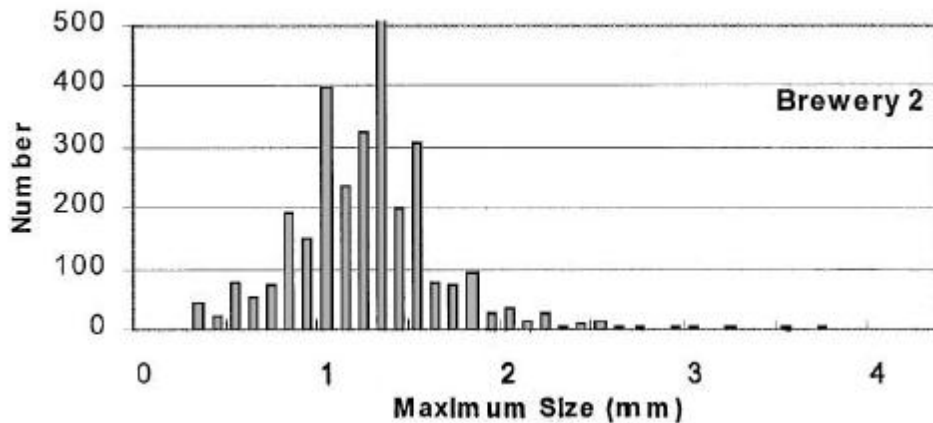


Figura 1-3: Distribución de Tamaños de Gránulos Anaeróbicos (Batstone y Keller 2000).

Se han propuesto varios modelos con el objeto de modelar el flujo de nutrientes hacia el interior del gránulo anaeróbico (Saravanan y Srrekrishnan 2006); el Modelo Multicapas (MacLeod et al 1990 y Guiot et al 1992) contempla que el granulo está compuesto por tres capas, donde ocurren tres procesos Acidogénesis en la capa exterior, Acetogénesis en la capa intermedia y la metanogénesis en el núcleo.

El modelo de micro colonia sintrópica (Schink y Thauer 1998) que supone una relación sinérgica entre los diferentes microorganismos para una eficiente transformación de los compuestos orgánicos complejos. Sin embargo experimentalmente se ha observado que los gránulos presenta una estructura diferente a las multicapas (Fang et al 1995), y que se pueden presentar una estructura multicapas cuando se procesa carbohidratos, en sustratos con razones limitadas de hidrólisis y fermentación. Se presentan gránulos sin multicapas en un reactor UASB (Fang et al 2000). Los gránulos esféricos presentan un color oscuro con manchas blancas (González-Gil et al 2001), y al realizar un corte

transversal del gránulo notaron que las manchas eran parcelas incrustadas en una matriz oscura.

Los primeros intentos para desarrollar un modelamiento del proceso de digestión anaerobia de materia orgánica con microorganismos como catalizadores empezó con el modelo de digestión de materia orgánica que incluía las fases de hidrolisis y acidogénesis (Hill y Barth 1977); después siguió el desarrollo al acoplar las ecuaciones de balances de especies con las ecuaciones de crecimiento de microorganismos (Andrews 1979), asumiendo que el proceso dominante era la degradación del ácido acético; los modelos dinámicos nacen al encontrar que el proceso de digestión anaerobia de material orgánico producto de heces de animales difícilmente opera en un estado estacionario, sino que al contrario es un proceso es semi – estacionario (Boekhorst 1981); la complejidad de las reacciones involucradas en el proceso de digestión dio pie a un modelo que incluye el amoníaco como compuesto regulador del proceso y la interacción de doce compuestos químicos, estableciendo que el proceso consta de una fase de hidrolisis y cuatro fases biológicas (Angelidaki et al 1993).

Un modelo unificado denominado Anaerobic Digestion Model ADM1 fue creado para representar la degradación de cualquier sustancia orgánica usando la digestión anaerobia, modelando el proceso bioquímico en cuatro fases fundamentales hidrolisis, acidogénesis, acetogénesis, metanogénesis (Batstone et al 2002). Todos los modelos anteriormente mencionados parten de la base que hay un mezclado perfecto.

Se han desarrollado varios reactores anaerobio en donde el flujo se establece como ascendente estos son: el UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket), AFBR (Anaerobic Fluidized Bed Reactor) y EGSB (Expand Granular Sludge Bed), donde todos han sido objeto de varios estudios.

El UASB es un reactor compuesto por una torre tubular donde se establece un flujo ascendente lento del influente generalmente entre 0,5 m/h – 1 m/h introducido en los 1970s (Lettinga et al. 1980), siendo este un reactor de biopelícula (Nicoletta et al. 2000), durante la operación se presenta una estratificación del lecho, en los cuales se encuentran tres zonas, ver figura 1-4, Lecho Fangoso, capa Fangosa y aclarador. Como es natural el ingreso de influente se hace por la parte baja y la salida del efluente se hace

por la parte alta, donde antes se encuentra una campana que captura el biogás producto de la digestión anaerobia.

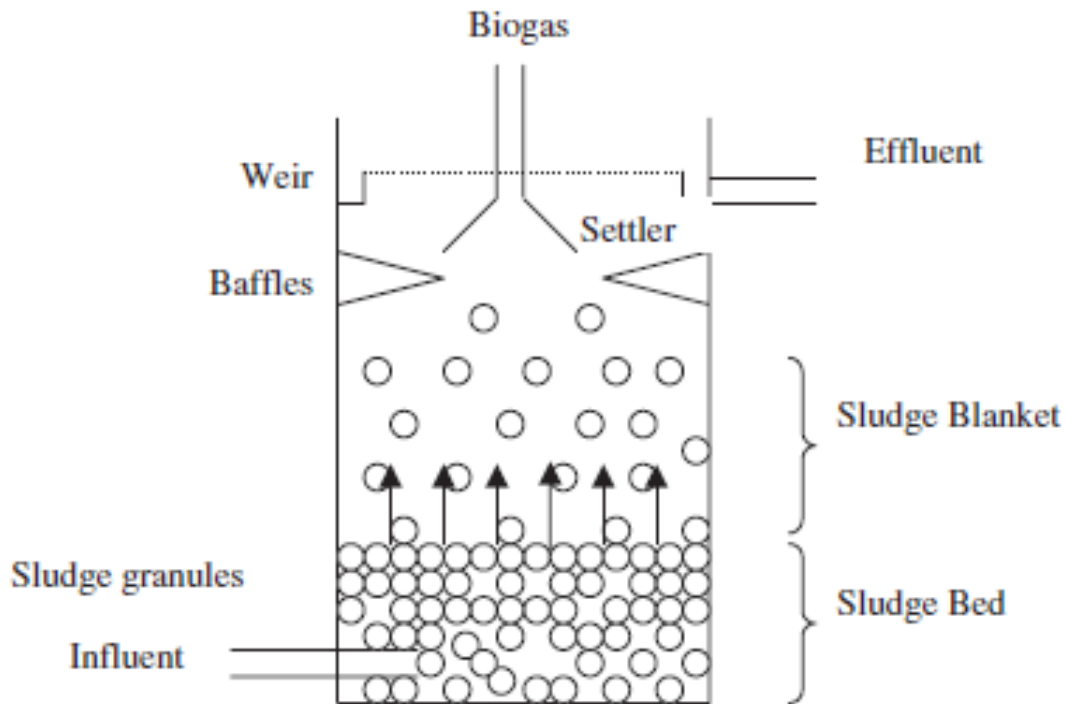


Figura 1-4: Modelo de un Reactor UASB (Saravannan y Srrekrishnan 2006).

El Modelamiento de este reactor ha sido abordado por varios investigadores, realizando la simplificación de la complejidad introducida por la estratificación, modelando el reactor UASB como un sistema CSTR (Continuos Stirred Tank Reactor) o PFR (Plug Flow Reactor) teniendo en cuenta volúmenes muertos y zonas de traspaso o comunicación entre un subsistema a otro. (Bolle et al. 1986, Van der Meer 1979, Wu y Hickey 1997). Como es natural el comportamiento de flujo depende directamente de las características del fluido en este caso, de las características de la biomasa y su concentración (Ojha y Singh 2002).

Una primera aproximación se realiza tomando las zonas del lecho fangoso y la capa fangosa representada en un CSTR no ideal (usando combinaciones de ideales) con una zona muerta y un reactor de flujo pistón disperso (PFR), conectados en serie, ver figura 1-5, y zona de bypass entre el CSTR y el PFR (Wu y Hickey et al. 1997).

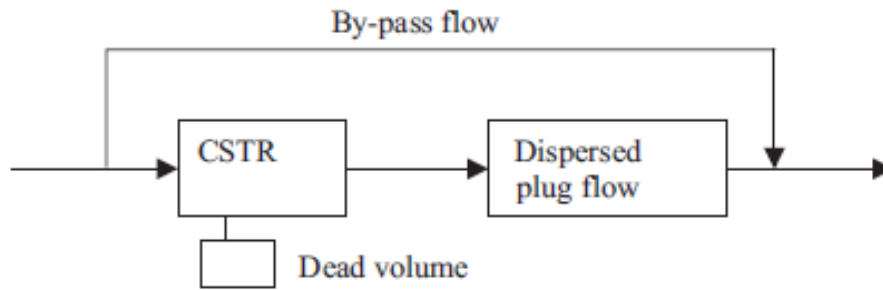


Figura 1-5: Modelado Hidrodinámico del Reactor UASB (Wu y Hickey et al. 1997).

Se ha seguido con el enfoque de separar el flujo dentro de un UASB en zonas, se ha usado la aproximación por resistencia de flujo para representar la distribución del mismo, y se ha encontrado que con el incremento de la resistencia de flujo dentro del sistema, la magnitud del flujo en corto circuito también es aumentada, con este enfoque se pudo reproducir el comportamiento del lecho fangoso y la capa fangosa, pero no fue posible encontrar un modelo globalizado (Ohja y Singh 2002).

El reactor UASB se puede modelar en tres secciones según su estratificación y describirlas como tanques agitados (CSTR) o flujo pistón (PFR) (Bolle et al. 1986) ver figura 1-6; de este modo las secciones de lecho fangoso y capa fangosa se modelan como tanques agitados, y la parte de aclarador se modela como un flujo pistón.

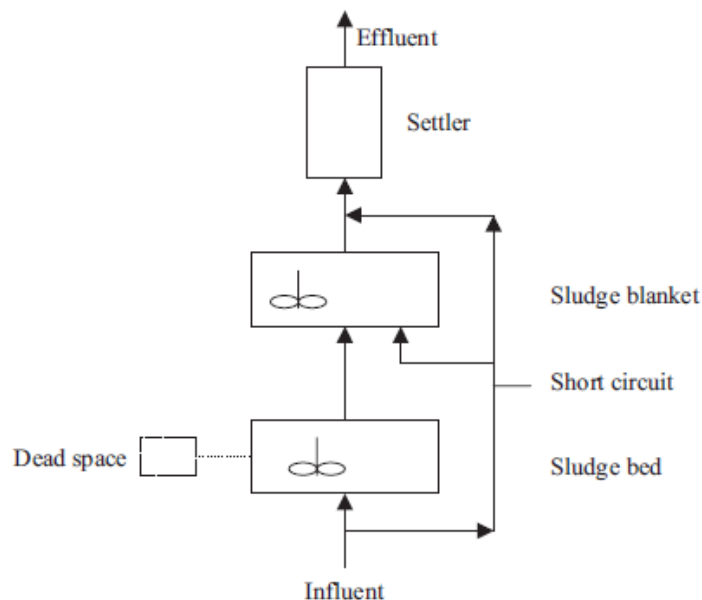


Figura 1-6: Modelado Hidrodinámico del Reactor UASB (Bolle et al 1986).

Otro modelo del reactor UASB que supone que la carga orgánica que el reactor puede procesar depende de la altura del reactor y de la altura de la capa fangosa, concentrándose en la capa fangosa planteando un equilibrio entre las burbujas de gas que suben desde el lecho fangoso y la masa de agua adyacentes, llevando a las partículas sólidas a difundirse hacia la estela debido a la diferencia de concentraciones, situándose debajo de ellas por la acción de la gravedad en estado estacionario (Narnoli y Indu 1997).

Otra forma de modelar las características del flujo en un reactor UASB es describir con una simplificación las dos zonas la capa fangosa y el aclarador modeladas como una dispersión axial. El comportamiento del flujo es fuertemente dependiente de los volúmenes de las zonas y del bypass que entre ellas se da, y el volumen muerto aporta poco al desarrollo del flujo (Singhal et al. 1998) ver figura 1-7.

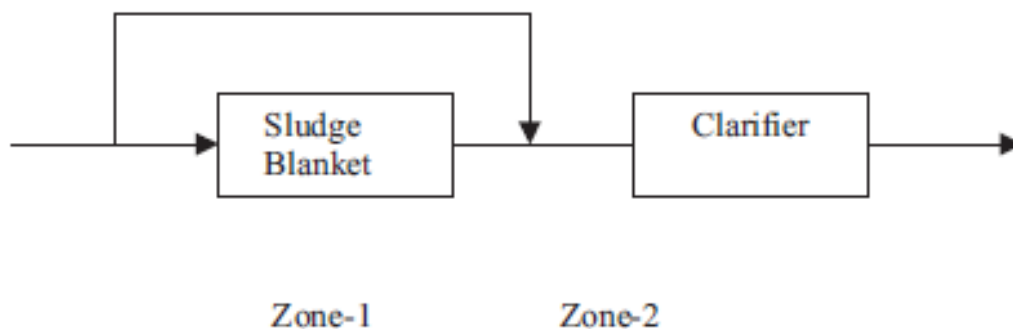


Figura 1-7: Modelado Hidrodinámico del Reactor UASB (Singhal et al 1986).

Los modelos antes descritos buscan representar el comportamiento de los reactores UASB, sin embargo, son aproximaciones de un proceso bastante complejo y heterogéneo que presenta buenos ajustes para reactores a escalas de laboratorio, pero al extrapolarlo a reactores reales no describen adecuadamente su comportamiento, surgiendo desviaciones importantes en la distribución del material alimentado y las zonas y tamaños no son fácilmente identificables. Esto lleva a este trabajo a estar más confiado que la hipótesis que el régimen de flujo tiene un papel muy importante en el desempeño de los microorganismos y por ende en la cinética de reacción global de los microorganismos.

2. EQUIPO PARA TRATAMIENTO SECUNDARIO DE AGUA RESIDUAL

El equipo en cual se enfoca este estudio es el reactor UASB estando en la categoría de reactores de lodos activados, y hace parte de los equipos que proveen tratamiento secundario a las aguas residuales (Cheremisinoff et al. 2006), siendo estos aptos para tratar aguas residuales de alta carga orgánica que contengan hasta 30 g/L de DQO (Nicolella et al. 2000).

2.1 Upflow Anaerobic Sludge Blanket (UASB)

El reactor UASB tiene una sección transversal rectangular o circular, y puede ser ubicado bien sea a nivel de tierra o al interior de esta. El influente o agua residual es ingresada uniformemente por la parte inferior del equipo donde se encuentra los lodos activos, sucediendo el proceso de digestión que degrada la carga orgánica que transporta dicho influente. Seguido de la zona de lodos se encuentra la zona de transición donde los gránulos anaeróbicos arrastrados por el flujo se precipitan hacia la zona de lodos nuevamente. Por último se encuentra la zona de aclarado que está dotada de campanas de separación que permiten la colección del biogás producido, la precipitación de gránulos anaeróbicos que puedan llegar hasta esta zona y deja pasar el agua cuya contaminación ha disminuido ver figura 2-1.

Estos reactores tienen como variables críticas el tiempo de retención hidráulico (HRT) y la altura del reactor (H), Los datos experimentales obtenidos muestran que el HRT debe ser superior a 5 horas para obtener una remoción de la carga orgánica del 80%, y una altura H de 6 metros permitiendo que la velocidad de circulación del agua residual sea baja dentro del reactor aproximadamente 0,5 - 1 m/h (Saravannan y Srrekrishnan 2006), esto

es muy importante debido a que el proceso debe estar libre de turbulencias que perturban la estabilidad del proceso (Van Haandel y Lettinga 1994).

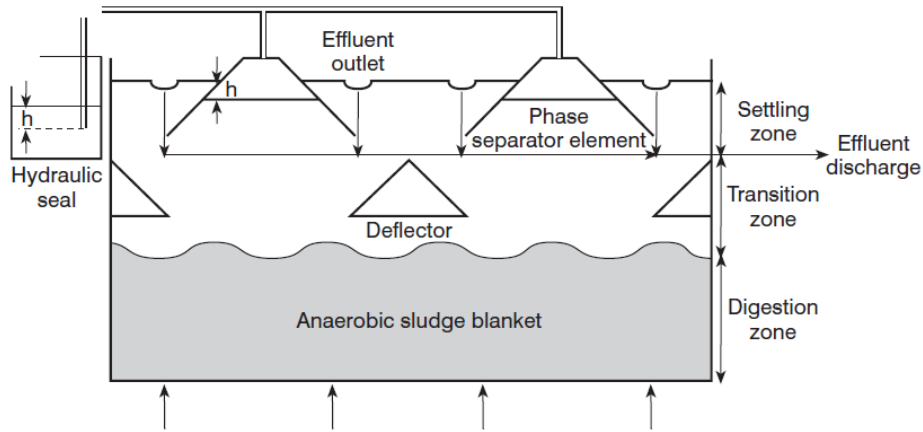


Figura 2-1: Modelo del Reactor UASB (Van Haandel y Lettinga et al 1994).

El desarrollo de la ingeniería y los criterios de diseños de estos equipos se han basado en la experimentación a escala piloto y escala industrial desarrollados en 3 países Colombia, Brasil e India (Van Haandel y Lettinga 1994), lo que justifica la investigación teórica del proceso que ocurre al interior del reactor para develar la física y la química involucrada y poder así establecer desde la teórica los parámetros de ingeniería que se deben tener en cuenta para diseñarlos.

2.2 Descripción del Sistema Dentro del Reactor UASB

Dentro del reactor UASB donde ocurren las reacciones físico – químicas que degradan la materia orgánica transportada por el influente de agua residual, se configura un sistema bastante complejo; se tiene el agua en un estado líquido que transporta una materia orgánica (70% aprox.) e inorgánica (30% aprox.) en estado sólido, estos biosólidos en su gran mayoría están “enlazados” con el agua (Drinan 2001), este material tienen una composición muy compleja por lo que su valoración se hace mediante la prueba de demanda química de oxígeno (DQO) (APHA 1989); los microorganismos presentes en colonias independientes al interior del reactor en forma de gránulos y cuyos tamaños no son uniformes, sino que presentan una distribución que dependen del tipo de sustrato

(biosólidos) con que se alimente el reactor (Batstone y Keller 2000); por último el biogás producto de la degradación de la materia orgánica ocasionada por los microorganismos que se nuclean y forman burbujas al interior de reactor, estas suben hasta unirse a la fase gaseosa presente en la campana de separación (Van Haandel y Lettinga et al 1994).

La presencia de estas cuatro sustancias forman un sistema heterogéneo ver figura 2-2, cuyas fases interactúan estrechamente; la digestión o degradación de la materia orgánica ocurre tanto dentro como fuera (en la fase líquida) de los microorganismos, la digestión en el interior de los microorganismos supone que debe haber intercambio de masa entre el agua residual y los gránulos anaeróbicos causando el crecimiento de estos por la reproducción de microorganismos, su muerte causa la disminución del tamaños de los gránulos anaeróbicos (Batstone et al. 2002).

El metabolismo de los microorganismos resulta en la producción de gases que enriquecen la fase líquida hasta el punto de nuclear burbujas, la aparición de esta fase gaseosa crea un intercambio de masa entre los gránulos anaeróbicos y esta, sin embargo la fase líquida sigue alimentando las burbujas de gas después de nucleadas (Batstone et al. 2002).

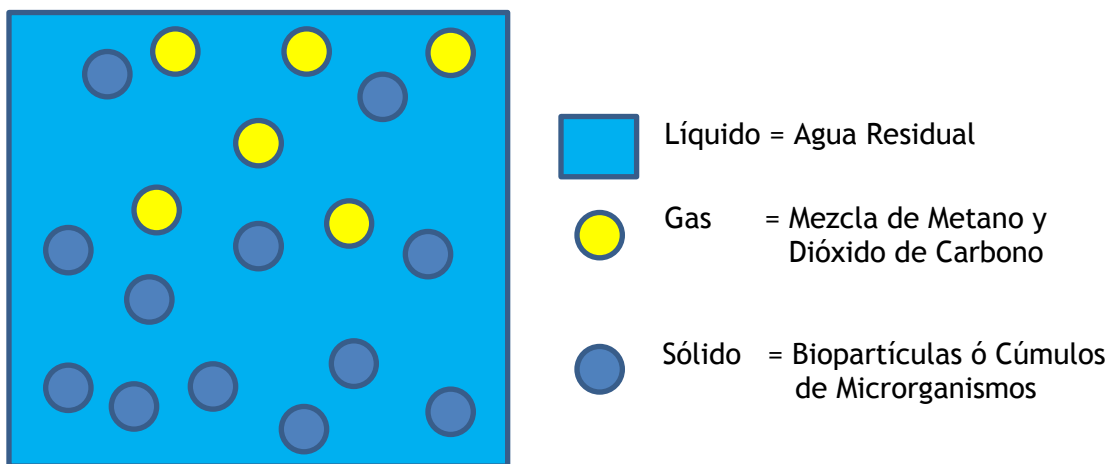


Figura 2-2: Volumen de Control del Sistema Formado en el Reactor UASB.

En el sistema formado dentro del reactor UASB se reconocen tres fases cuyas interfaces están físicamente definidas estas son: el agua residual que contiene la materia orgánica “enlazada” como una fase líquida, las burbujas de gas como una fase gaseosa, y por último los gránulos anaeróbicos que tienen la apariencia de un sólido poroso, ya que los microorganismos forman algo parecido a un clúster de globos llenos de agua.

La figura 2-2 representa esquemáticamente el sistema que se forma dentro del reactor UASB donde se muestra como se distribuyen las fases antes descritas.

2.3 Descripción del Modelo Matemático del Reactor UASB

El sistema heterogéneo antes planteado requiere de simplificaciones para que sea susceptible de modelar y se enfoca en buscar la relación que existe entre la hidrodinámica del reactor y la cinética de reacción de producción de biogás siendo los gránulos anaeróbicos los responsables de esta reacción. Además, el tratamiento matemático que modelan flujos multifases donde coexistan las tres fases aún no ha sido suficientemente desarrollado (Crowe 2006), por tanto, para el desarrollo de presente modelo se tendrán en cuenta las dos fases más abundantes dentro del reactor, siendo estas el agua residual que contiene la materia orgánica a digerir y los gránulos anaeróbicos.

La operación de los reactores UASB deben realizarse a temperatura constantes para garantizar la supervivencia de los microorganismos que catalizan las reacciones (Van Haandel y Lettinga et al 1994), de este modo se hace innecesario el balance de energía dentro del sistema. Teniendo en cuenta estas consideraciones el sistema formado dentro del reactor UASB se describe en la figura 2-3.

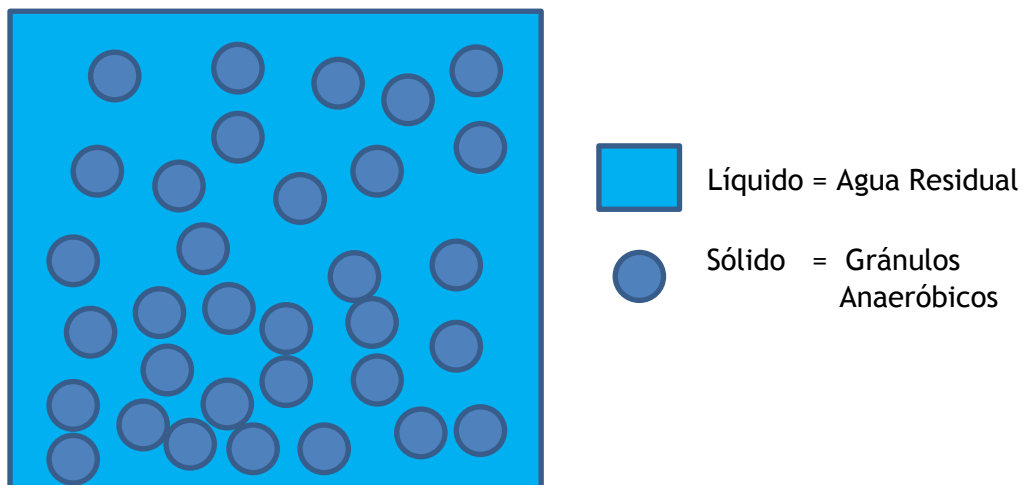


Figura 2-3: Volumen de Control Simplificado del Reactor UASB.

El sistema formado con estas simplificaciones convierten el reactor UASB en un sistema de flujo multifase donde coexisten una fase continua que representa el agua residual, y una fase dispersa que representa a los gránulos anaeróbicos, susceptible a modelar por un esquema Euleriano – Lagrangiano.

2.4 Ecuaciones de Balance de Masa y Momentum para un Esquema Euleriano – Lagrangiano

El modelado de sistemas con flujos multifases isoterms, requiere solo de los balances de masa y momentum que descritos bajo un esquema euleriano – lagrangiano presenta las siguientes ecuaciones tanto para la fase continua como para la fase dispersa (Crowe et al. 2006).

Descripción de la fase continúa según esquema Euleriano para flujo laminar, Balance de Masa Ec. 1 y Balance de Momentum Ec. 2 (Crowe et al. 2006).

$$\frac{\partial \alpha_c \rho_c}{\partial t} + \text{div}(\alpha_c \rho_c \mathbf{V}) = -\frac{1}{V_o} \sum_n \dot{m}_{n,k} \quad \text{Ec. 1}$$

$$\frac{\partial \alpha_c \rho_c \mathbf{V}}{\partial t} + \text{div}(\alpha_c \rho_c \mathbf{V} \mathbf{V}) = -\text{grad}(\mathbf{P}) - \frac{1}{V_o} \sum_n \dot{m}_{n,k} \mathbf{v}_{n,k} + \text{div}(\boldsymbol{\tau}) + \frac{1}{V_o} \sum_n \mathbf{F}_{n,k} + \alpha_c \rho_c \mathbf{g} \quad \text{Ec. 2}$$

Donde α_c es la fracción de fase continua, ρ_c es la densidad, $\dot{m}_{n,k}$ el flujo de masa entre la fase continua y la partícula n de la fase dispersa, \mathbf{V} es la velocidad, \mathbf{P} es la presión y $\boldsymbol{\tau}$ es el tensor de esfuerzos viscosos para la fase líquida. $\mathbf{F}_{n,k}$ son el intercambio de momento con la fase dispersa debido a las fuerzas generadas entre la interfaz, $\dot{m}_{n,k} \mathbf{v}_{n,k}$ es el intercambio de momentum debido al intercambio de masa entre la fase continua y la partícula n por medio de su interfaz, siendo $\mathbf{v}_{n,k}$ la velocidad de la fase dispersa, todo para una celda infinitesimal k.

La descripción de la fase dispersa según el esquema Lagrangiano se da mediante la ecuación de movimiento Ec. 3 (Crowe et al. 2006).

$$m_p \frac{dv}{dt} = F_{cuerpo} + F_{superficie} + F_{colisión} \quad Ec. 3$$

Donde m_p es la masa y v es la velocidad de partícula; F_{cuerpo} es la fuerza de cuerpo a la cual está sometida cada partícula, $F_{superficie}$ es la fuerza que se produce en la interfaz entre la partícula y la fase continua y la $F_{colisión}$ es la fuerza debida a la interacción partícula – partícula.

2.5 Consideraciones y Simplificaciones del Modelo Matemático para Reactor UASB

Adoptando el esquema Euleriano – Lagrangiano para desarrollar el modelo del reactor UASB se simplificara la geometría tridimensional del reactor a un modelo en dos dimensiones, donde el agua residual (Fase Continua) se comporta como un fluido newtoniano en un régimen de flujo laminar a temperatura constante.

Los gránulos anaeróbicos tendrán una distribución de tamaño fija, lo cual, no permitirá el intercambio de masa entre ellos y el agua residual. El consumo de materia orgánica transportada por el agua residual se modelara usando el transporte de una propiedad escalar ϕ que estará asociada al agua residual, del mismo modo que la materia orgánica está “enlazada” con la misma (Drinan 2001). Por lo tanto el consumo de materia orgánica estará asociado con la reducción de esta propiedad que estará medida en demanda química de oxígeno (Batstone et al. 2002). Los gránulos anaeróbicos estarán presentes dentro del reactor y no habrá intercambio de estos con los alrededores.

El acoplamiento entre la fase continua (agua residual) y la fase dispersa (gránulos anaeróbicos) será en cuatro vías para el caso del intercambio de momentum, es decir, se consideran las fuerzas de arrastre entre el agua residual y los gránulos anaeróbicos, las fuerzas de elevación que actúan sobre los gránulos anaeróbicos causadas por los gradientes de presión en el agua residual y las interacciones que ocurren entre los gránulos anaeróbicos con su pares.

2.5.1 Ecuaciones Constitutivas

Para encarar el desarrollo del modelo matemático con base en el esquema Euleriano – Lagrangiano esbozado en la sección 2.4, y además desarrollar la ecuación de transporte escalar mencionada en la sección 2.5 y descrita en la sección 2.6 Ec. 6, se hace necesario usar ecuaciones constitutivas que modelen los términos difusivos asociados a las densidades de flujo de momentum y propiedad escalar.

2.5.1.1 Ley de Viscosidad de Newton

La ley de viscosidad de Newton es la ecuación constitutiva que relaciona el tensor de esfuerzos viscosos con los gradientes de velocidad que se generan dentro del campo de flujo lo cual permite escribir la Ec. 2 como una función que solo depende del campo de velocidad y del campo de presión, por tanto la ley general de viscosidad de Newton (Bird 2006) es como sigue.

$$\boldsymbol{\tau} = -\mu(\text{grad}(\mathbf{V}) + \text{grad}(\mathbf{V})^T) + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa\right) \text{div}(\mathbf{V})\boldsymbol{\delta} \quad \text{Ec. 4}$$

Donde μ es la viscosidad, κ la viscosidad dilatacional y $\boldsymbol{\delta}$ es un tensor unitario. Teniendo en cuenta las consideraciones de la sección 2.5, el carácter de incompresibilidad del agua residual hace que el segundo término del lado derecho sea idéntico a cero, de modo que la Ec. 4 se reduce a.

$$\boldsymbol{\tau} = -\mu(\text{grad}(\mathbf{V}) + \text{grad}(\mathbf{V})^T) \quad \text{Ec. 5}$$

Dejando definida la relación entre el tensor de viscosidad y la velocidad que se usara en la Ec. 8.

2.5.1.2 Ley de Fick

Dada la modelación de la cantidad de materia orgánica propuesta en la sección 2.5 es necesario tener en cuenta en transporte difusivo de dicha propiedad, puesto que dado en

consumo de materia orgánica se establecerán gradientes de concentración de la misma, que se asocian a gradientes en dicha propiedad escalar φ (ver sección 2.6), por lo tanto es necesario modelar este comportamiento y dada la compatibilidad matemática la ley de Fick (Bird 2006) es una buena aproximación teniendo en cuenta que no afecta el balance de masa.

$$\mathbf{J}_\varphi = -\Gamma \text{grad}(\varphi) \quad \text{Ec. 6}$$

Donde \mathbf{J}_φ es el flujo de φ que se asocia al flujo de materia orgánica por difusión, y Γ que es la difusividad asociada a dicha propiedad. Ver Ec. 9.

2.6 Modelo para el Agua Residual

El agua residual como fase continua Euleriana estará descrita por los balances de masa y momentum descritos por la sección 2.1, que aplicándole las consideraciones y restricciones descritas en la sección 2.2, se puede expresar para el balance de masa Ec. 7.

$$\frac{\partial \alpha_L \rho_L}{\partial t} + \text{div}(\alpha_L \rho_L \mathbf{V}_L) = 0 \quad \text{Ec. 7}$$

Donde α_L es la fracción de agua residual y ρ_L la densidad de agua residual, \mathbf{V}_L es el vector velocidad que representa las componentes escalares en dirección X y Y. El balance de momentum sobre el dominio del agua residual se expresa en la Ec. 8.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \alpha_L \rho_L \mathbf{V}_L}{\partial t} + \text{div}(\alpha_L \rho_L \mathbf{V}_L \mathbf{V}_L) \\ & = -\text{grad} \mathbf{P} - \mu \text{div}(\text{grad}(\mathbf{V}) + \text{grad}(\mathbf{V})^T) - \frac{1}{V_{Co}} \sum_n \mathbf{L}_n^k + \alpha_L \rho_L \mathbf{g} \quad \text{Ec. 8} \end{aligned}$$

Donde \mathbf{P} y \mathbf{g} son los vectores de presión del agua residual y gravedad respectivamente, μ es la viscosidad del agua a la temperatura que opera el reactor UASB, V_{Co} es el volumen de control infinitesimal de la celda k que contiene a los gránulos anaeróbicos, \mathbf{L}_n^k es el término de acoplamiento que describe la interacción debida a las fuerzas de arrastre y de elevación que ocasionan el intercambio de momentum entre las dos fases asociado $\mathbf{F}_{n,k}$

termino de intercambio de momentum de la Ec. 2 y es idéntico pero de signo opuesto al termino $\mathbf{F}_{\text{superficie}}$ de la Ec. 3.

La propiedad que medirá la cantidad de materia orgánica contenida en el agua residual se modela como una propiedad continua que obedece las leyes de balance y transporte, por tanto esta se escribe como la Ec. 9.

$$\frac{\partial \alpha_L \rho_L \varphi}{\partial t} + \text{div}((\alpha_L \rho_L \mathbf{V}_L \varphi)) = \text{div}(\text{grad}(\alpha_L \Gamma \varphi)) + F_n^k \quad \text{Ec. 9}$$

Donde φ representa la cantidad de demanda química de oxígeno (mgDQO/L) que hay dentro el agua residual y F_n^k es la degradación o consumo de mgDQO/L que aporta los gránulos anaeróbicos que están presente en el volumen infinitesimal k según se define en la sección 2.8.4 en la Ec. 48.

2.7 Modelo para los Gránulos Anaeróbicos

Los gránulos anaeróbicos como fase dispersa Lagrangiana será descrita por la ecuación de movimiento de Newton para cada una de las partículas o gránulos, que bajo las consideraciones dada en la sección 2.5 los vectores involucrados solo tienen componentes X y Y. por tanto la ecuación de movimiento translacional para los gránulos anaeróbicos estará dada según la Ec. 10.

$$m_n \frac{d\mathbf{V}_n}{dt} = \mathbf{L}_n^k + \mathbf{C}_n + m_n \mathbf{g} \quad \text{Ec. 10}$$

Donde m_n y \mathbf{V}_n es la masa y la velocidad translacional del granulo anaeróbico, \mathbf{L}_n^k es el término de acoplamiento que describe la interacción debida a las fuerzas de arrastre y de elevación que ocasionan el intercambio de momentum entre los gránulos anaeróbicos y el agua residual asociado al termino $\mathbf{F}_{\text{superficie}}$ de la Ec 3, \mathbf{g} es la aceleración de la gravedad lo cual configura la fuerza de cuerpo que actúan sobre los gránulos anaeróbicos y se asocian al termino $\mathbf{F}_{\text{cuerpo}}$ de la Ec. 3. Finalmente \mathbf{C}_n es el término asociado a las

interacciones que se dan entre dos o más gránulos anaeróbicos y por tanto se asocia al término $\mathbf{F}_{\text{colisión}}$ de la Ec. 3 de movimiento de partículas.

$$\frac{d\mathbf{r}_n}{dt} = \mathbf{V}_n \quad \text{Ec. 11}$$

La posición en el espacio \mathbf{r}_n de los gránulos anaeróbicos estará descrita por la ecuación Ec. 11. Sin embargo, la rotación de los gránulos también es importante en las trayectorias que siguen los mismos, dado que estos tienen extensión espacial determinando este efecto por la Ec. 12 (Crowe 2006).

$$I_n \frac{d\boldsymbol{\omega}_n}{dt} = \mathbf{T}_n \quad \text{Ec. 12}$$

Donde I_n y $\boldsymbol{\omega}_n$ es el momento de inercia y la velocidad angular de los gránulos anaeróbicos, y \mathbf{T}_n es el torque generado por fuerzas externas no centradas que someten a los gránulos anaeróbicos y están asociados a las fuerzas tangenciales producto de las colisiones ver sección 2.8.3.2 la Ec. 42.

2.8 Términos de Acoplamiento entre el Agua Residual y los Gránulos Anaeróbicos

La solución del modelo anteriormente descrito requiere la definición de los términos que acoplaran las fases existentes y poder obtener una solución conjunta.

2.8.1 Masa

El balance de masa descrito por la Ec. 7 es insuficiente, debido a que solo cobija al agua residual de este modo es necesario plantear una ecuación que permita describir un balance de masa general que involucre tanto el agua residual como los gránulos anaeróbicos. La Ec. 13 define el balance de masa general del sistema.

$$\alpha_L + \alpha_S = 1 \quad \text{Ec. 13}$$

Donde α_s representa la fracción de gránulos anaeróbicos y α_L como anteriormente se menciona la fracción de agua residual.

2.8.2 Momentum

El intercambio de momentum entre el agua residual y los gránulos se da por dos efectos según la sección 2.5, por el gradiente de presión que actúa sobre los gránulos y por el arrastre creado por la velocidad relativa entre el agua residual y los gránulos. Así que el término de acoplamiento L_n^k está dado por la Ec. 14 (Gart et al. 2010).

$$L_n^k = -\nabla P(\mathbf{r}_n)v_{pn} + \frac{\beta_n^k v_{pn}}{\alpha_s} |\mathbf{V}_L - \mathbf{V}_n| \quad Ec. 14$$

Donde $\nabla P(\mathbf{r}_n)$ es el gradiente de presión del gránulo n-esimo ubicado en la posición \mathbf{r}_n , y cuyo volumen es v_{pn} , y β_n^k es el coeficiente local de transferencia de momentum entre el gránulo n-esimo y el agua residual que lo circunda.

El coeficiente local de transferencia será modelado con la correlación experimental dada en la Ec. 15 (Syamlal y O'Brien 1987).

$$\beta_n^k = \frac{3\alpha_L \alpha_s^2 \rho_L}{4v_{pn} V_{ter}^2 d_n} C_{Ds} \left(\frac{Re_s}{V_{ter}} \right) \quad Ec. 15$$

Donde V_{ter} y d_n es la velocidad terminal y el diámetro de los gránulos anaeróbicos dentro del lecho, C_{Ds} es el coeficiente de arrastre asociado al tipo de geometría de los gránulos y Re_s es el número de Reynolds de partícula.

Ahora bien es necesario determinar la velocidad terminal de las partículas para estimar el coeficiente local de transferencia para ello existe la correlación dada en la Ec. 16 (Garside y Al – Dibouni 1977).

$$V_{ter} = 0,5 \left(A - 0,06Re_s + \sqrt{(0,06Re_s)^2 + 0,12Re_s(2B - A) + A^2} \right) \quad Ec. 16$$

Cuyos coeficientes A y B están dados según las siguientes expresiones Ec. 17 y Ec. 18.

$$A = \alpha_L^{4,14} \quad \text{Ec. 17}$$

$$B = \begin{cases} 0,8\alpha_L^{1,28} & \text{si } \alpha_L \leq 0,85 \\ \alpha_L^{2,65} & \text{si } \alpha_L > 0,85 \end{cases} \quad \text{Ec. 18}$$

Donde el número de Reynolds de partícula se define según la Ec. 19.

$$Re_s = \frac{d_n |\mathbf{V}_n - \mathbf{V}_L| \rho_L}{\mu} \quad \text{Ec. 19}$$

De este modo solo queda por determinar el coeficiente de arrastre, que puede ser resuelto por la Ec. 20 (Dalla Valle 1948), para geometría esférica.

$$C_{Ds}(Re) = \left(0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re}} \right)^2 \quad \text{Ec. 20}$$

Donde Re es el número de Reynolds asociado al campo de flujo.

2.8.3 Partícula - Partícula

La interacción partícula – partícula que se estará dando entre gránulos anaeróbicos presentes en el campo de flujo se modelará usando el modelo de esfera blanda (Cundall y Stack 1979) que busca determinar la fuerza neta que actúa sobre la partícula generada por el contacto con sus pares, cuyo modelo se basa en aproximar el contacto entre partículas hacia un sistema de resorte y amortiguador permitiendo que se evalúe dicho contacto con más de dos partículas al mismo tiempo.

Este modelo requiere de propiedades tales como la rigidez asociados al resorte, coeficiente de amortiguamiento asociado al amortiguador y el coeficiente de fricción de Coulomb, que tienen que estar relacionados con las propiedades de las partículas en este caso los gránulos anaeróbicos.

2.8.3.1 Dinámica de la Colisión entre Partículas

El modelo de esfera suave se basa en un sistema resorte – amortiguador para simular el contacto entre dos partículas, considerando que entre las dos partículas ocurre un traslape cuando estas están en contacto, ver figura 2-4.

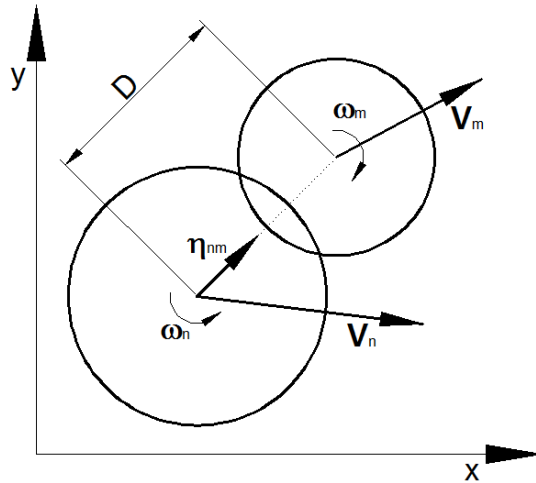


Figura 2-4: Contacto entre dos Partícula en Modelo de Esfera Blanda.

Donde D es la distancia entre centros, V_n , ω_n , V_m y ω_m son las velocidades lineales y angulares respectivas, η_{nm} es el vector director del traslape, r_n y r_m la posición de los centros de las partículas i -ésima y j -ésima.

En la figura 2-5 se puede observar el traslape CC' entre las partículas que puede ser expresado por una componente normal δ_n y una componente tangencial δ_t , donde el traslape normal δ_n puede determinarse mediante la ecuación vectorial Ec. 21.

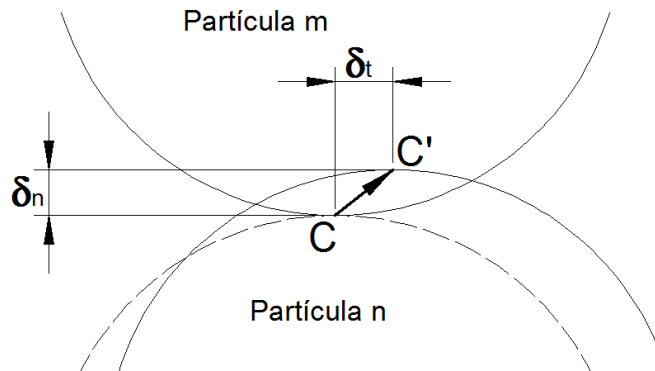


Figura 2-5: Contacto entre dos Partícula en Modelo de Esfera Blanda.

$$\delta_n = 0,5(D_n - D_m) - |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m| \quad Ec. 21$$

La velocidad relativa \mathbf{V}_{nm} entre las dos partículas n-esima y m-esima, estará determinada por la Ec. 22.

$$\mathbf{V}_{nm} = \mathbf{V}_n - \mathbf{V}_m + 0,5 * (L_n \boldsymbol{\omega}_n - L_m \boldsymbol{\omega}_m) \times \boldsymbol{\eta}_{nm} \quad Ec. 22$$

Donde $\boldsymbol{\eta}_{nm}$ es el vector unitario en la dirección normal al contacto entre las partículas n-esima y m-esima, y se determina mediante la expresión Ec. 23.

$$\boldsymbol{\eta}_{nm} = \frac{\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|} \quad Ec. 23$$

Las distancias L_n y L_m se determinan usando las ecuaciones mostradas en Ec. 24 y Ec. 25 (Gart 2010).

$$L_n = \frac{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|^2 + 0,25(D_n^2 - D_m^2)}{2|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|} \quad Ec. 24 \quad \text{y} \quad L_m = |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m| - L_n \quad Ec. 25$$

Dado la descomposición en las componentes normal y tangencial del contacto requiere que la velocidad relativa también sea expresada en estas dos componentes, para ellos se definen $\mathbf{V}_{n, nm}$ como velocidad relativa normal Ec. 26 y $\mathbf{V}_{t, nm}$ como la velocidad relativa tangencial Ec. 27.

$$\mathbf{V}_{n, nm} = \mathbf{V}_{nm} \cdot \boldsymbol{\eta}_{nm} \boldsymbol{\eta}_{nm} \equiv (\mathbf{V}_n - \mathbf{V}_m) \cdot \boldsymbol{\eta}_{nm} \boldsymbol{\eta}_{nm} \quad Ec. 26$$

$$\mathbf{V}_{t, nm} = \mathbf{V}_{nm} - \mathbf{V}_{n, nm} \boldsymbol{\eta}_{nm} \quad Ec. 27$$

Por último el vector unitario que denotara la dirección tangencial estará dado según la expresión vectorial Ec. 28.

$$\mathbf{t}_{nm} = \frac{\mathbf{V}_{t, nm}}{|\mathbf{V}_{t, nm}|} \quad Ec. 28$$

Hasta aquí se ha determinado la dinámica que está involucrada cuando ocurre el contacto entre dos partículas, sin embargo, esta dinámica no se limita al contacto binario, es decir, que cada partícula puede tener más de dos contactos.

2.8.3.2 Modelo de Esfera Blanda (Soft Sphere Model)

La aproximación del contacto entre partículas a un sistema de resorte – amortiguador es lo que caracteriza el modelo de esfera blanda, dada la descomposición del traslape entre partículas en dirección normal y tangencial según la dinámica del contacto descrita en la sección 2.8.3.1, se esquematizan dos sistemas resorte – amortiguador que representarían las componentes normal y tangencial de la fuerza involucrada en el contacto ver figura 2-6.

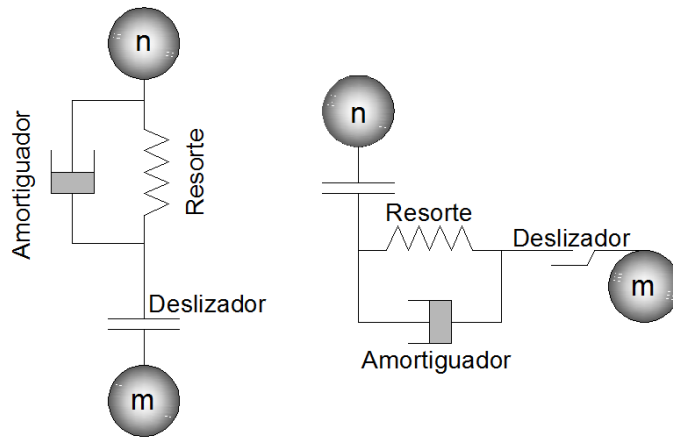


Figura 2-6: Representación Esquemática del Contacto en Dirección Normal y Tangencial según el Modelo de Esfera Blanda.

De donde se desprende la expresión que permite calcular cada componente de la fuerza que se genera en el contacto entre las partículas n-esima y m-esima.

$$\mathbf{F}_{n,nm}(t) = \mathbf{F}_{n,nm}^R(t) + \mathbf{F}_{n,nm}^A(t) \quad \text{Ec. 29}$$

$$\mathbf{F}_{t,nm}(t) = \mathbf{F}_{t,nm}^R(t) + \mathbf{F}_{t,nm}^A(t) \quad \text{Ec. 30}$$

Las ecuaciones Ec. 29 y Ec. 30 determinan las componentes normal y tangencial de la fuerza que se genera en el contacto entre la partícula n-esima y m-esima respectivamente, donde $\mathbf{F}_{n,nm}^R$ representa la fuerza conservativa asociada al resorte y $\mathbf{F}_{n,nm}^A$ representa la fuerza disipativa asociada al amortiguador en la dirección normal al contacto. Y $\mathbf{F}_{t,nm}^R$ representa la fuerza conservativa asociada al resorte y $\mathbf{F}_{t,nm}^A$ representa la fuerza disipativa asociada al amortiguador en la dirección tangencial al contacto.

- **Componentes de la Fuerza Conservativa**

Dado que la componente conservativa de la fuerza de contacto se asocia a un resorte esta debe cumplir con la ley de Hooke, tanto para componente normal como para la componente tangencial. La Ec. 32 muestra la expresión de la fuerza conservativa en la dirección normal $F_{n,nm}^R$, definida para un tiempo t .

$$\mathbf{F}_{n,nm}^R = -k_n \delta_n \boldsymbol{\eta}_{nm} \quad Ec. 31$$

Donde k_n es el coeficiente de rigidez (o de resorte) en la dirección normal y δ_n es el traslape en dirección normal que se produce en el contacto de las partículas n -esima y m -esima, dado en la Ec. 21.

La Ec. 32 da cuenta de la fuerza conservativa que se produce en el contacto de las partículas en la dirección tangencial $\mathbf{F}_{t,nm}^R$, para un tiempo t .

$$\mathbf{F}_{t,nm}^R = -k_t \boldsymbol{\delta}_t \quad Ec. 32$$

Donde k_t es el coeficiente de rigidez (o de resorte) en la dirección tangencial y $\boldsymbol{\delta}_t$ es el traslape en dirección tangencial que se produce en el contacto de las partículas n -esima y m -esima, este traslape $\boldsymbol{\delta}_t$ estará dado por la Ec. 33.

$$\boldsymbol{\delta}_t = \mathbf{V}_{t,nm} \min\left(\frac{|\delta_n|}{\mathbf{V}_{t,nm} \cdot \boldsymbol{\eta}_{nm}}, \Delta t\right) \quad Ec. 33$$

La Ec. 33 pone una restricción al traslape tangencial indicando que este no puede ser superior al traslape normal δ_n . Sin embargo, es de notar que esta componente está afectada por la historia de la partícula, es decir, hay una acumulación de traslape tangencial debido al desplazamiento de la partícula, por lo tanto para un tiempo $t+\Delta t$ se define según la Ec. 34.

$$\boldsymbol{\delta}_t(t + \Delta t) = \boldsymbol{\delta}_t(t) + \mathbf{V}_{t,nm} \Delta t \quad Ec. 34$$

Debido al desplazamiento de las partículas los planos de tangenciales donde se encuentran $\delta_i(t)$ y $\delta_i(t+\Delta t)$, no necesariamente van a coincidir por lo que se hace necesaria una corrección del vector $\delta_i(t+\Delta t)$ con el fin de que corresponda al plano tangencial de la nueva posición sustrayéndole la componente que se extiende hacia la dirección normal según la Ec. 35.

$$\delta_t(t + \Delta t) = \delta_t(t + \Delta t) - (\delta_t(t + \Delta t) \cdot \eta_{nm})\eta_{nm} \quad Ec. 35$$

Donde η_{nm} es el vector unitario en dirección normal en la nueva posición de las partículas en el tiempo $t+\Delta t$.

- Componentes de la Fuerza Disipativa

Las componentes disipativa normal y tangencial de la fuerza deben cumplir la ley de Stokes dado que se asocia a un amortiguador, por ello para la dirección normal para el tiempo t $F_{n,nm}^A$ se aplica la Ec. 36.

$$F_{n,nm}^A = -\eta_n V_{n,nm} \quad Ec. 36$$

Donde $V_{n,nm}$ es la componente normal de la velocidad relativa para el tiempo t como se expresa en la Ec. 26. Para la componente disipativa de la fuerza en la dirección tangencial $F_{t,nm}^A$ se debe aplicar la Ec. 37.

$$F_{t,nm}^A = -\eta_t V_{s,nm} \quad Ec. 37$$

Donde $V_{s,nm}$ es la velocidad de deslizamiento (slip) entre las partículas n -esima y m -esima que se determina mediante la Ec. 38.

$$V_{s,nm} = V_{t,nm} - V_{n,nm} + 0,5D_n(\omega_n + \omega_m) \times \eta_{nm} \quad Ec. 38$$

Donde D_n es el diámetro de la partícula n -esima.

Ya determinadas las componentes conservativas y disipativas de la fuerza en la dirección normal y tangencial dada por las Ec. 29 y Ec. 30, la fuerza tangencial debe cumplir con la restricción impone la ley de fricción Coulomb como se presenta en la Ec. 39.

$$|\mathbf{F}_{t,nm}| \leq |\mu \mathbf{F}_{n,nm}| \quad \text{Ec. 39}$$

Donde μ es el coeficiente de fricción entre las partículas.

Si se alcanza la condición expresada en la Ec. 39 se establece el deslizamiento y es necesario usar las siguientes condiciones.

$$\mathbf{F}_{t,nm} = \begin{cases} -\mu |\mathbf{F}_{n,nm}| \mathbf{t}_{nm} & \text{si } \mathbf{t}_{nm} \neq 0 \\ -\mu |\mathbf{F}_{n,nm}| \frac{\boldsymbol{\delta}_t}{|\boldsymbol{\delta}_t|} & \text{si } \mathbf{t}_{nm} = 0, \boldsymbol{\delta}_t \neq 0 \\ 0 & \text{en caso distinto} \end{cases} \quad \text{Ec. 40}$$

Una vez definida la fuerza que se genera en el contacto entre dos partículas n-esima y m-esima, y teniendo en cuenta que este modelo permite que una partícula n-esima con más de una partícula a la vez, la fuerza total debida a las interacciones partícula – partícula está determinada por la Ec. 41.

$$\mathbf{C}_n(t) = \sum_{\substack{n=1 \\ m \neq n}}^N (\mathbf{F}_{nm}^R(t) + \mathbf{F}_{nm}^A(t)) \quad \text{Ec. 41}$$

Donde N es el número máximo de partículas con la cual entra en contacto la partícula i-esima en un tiempo t. del mismo modo se expresa el momento torsor que hace que la partícula i-esima gire sobre su propio eje la cual es determinada por la Ec. 42.

$$\mathbf{T}_n(t) = \sum_{\substack{n=1 \\ m \neq n}}^N (L_n \boldsymbol{\eta}_{nm} \times \mathbf{F}_{t,nm}(t)) \quad \text{Ec. 42}$$

Donde L_i es la distancia definida por la Ec. 24.

2.8.3.3 Coeficiente de Rigidez y de Amortiguamiento

El coeficiente de rigidez en la dirección normal k_n es una función de propiedades mecánicas del material de par de partículas que esta involucradas en el contacto, que es determinable usando el modelo de contacto Hertziano (Crowe et al. 2006), sin embargo, no es sencillo definir valores para este coeficiente, por ello, es necesario tener en cuenta que sus valores estarán cercanos o son del orden de 10^5 , el coeficiente de rigidez en la dirección tangencial se fija como las dos quintas partes del coeficiente de rigidez en la dirección normal ($k_t=2/5 k_n$) (Gart et al. 2010).

El coeficiente de amortiguamiento en la dirección normal está directamente relacionado con el coeficiente de restitución e_{nm} del par de partículas que están involucrados en el contacto y con el tiempo de que dura la colisión t_{nm}^{col} (Silbert et al. 2001), según las Ec. 43 y Ec. 44.

$$e_{nm} = \exp\left(-\frac{\eta_n t_{nm}^{col}}{2m_{eff}}\right) \quad Ec. 43 \quad \text{y} \quad t_{nm}^{col} = \pi \left(\frac{k_n}{m_{eff}} - \frac{\eta_n^2}{4m_{eff}^2}\right)^{-1/2} \quad Ec. 44$$

Donde m_{eff} es la masa efectiva entre el par de partículas que están involucradas en el contacto, definida por la Ec. 45.

$$m_{eff} = \frac{m_n m_m}{m_n + m_m} \quad Ec. 45$$

Donde m_n y m_m son las masas que corresponden a las partículas n-esima y m-esima. Finalmente el coeficiente de amortiguamiento entre las partículas involucradas en el contacto (n-esima y m-esima) estará dado por la expresión Ec. 46.

$$\eta_n = \frac{2\sqrt{m_{eff} k_n} |\ln e_{nm}|}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e_{nm}}} \quad Ec. 46$$

Del mismo que en el coeficiente de rigidez, el coeficiente de amortiguamiento en la dirección tangencial η_t , está relacionado con el mismo en la dirección normal, para este caso se toma generalmente la mitad del valor del coeficiente de amortiguamiento en la dirección normal para el mismo en la dirección tangencial ($\eta_t=1/2 \eta_n$) (Gart et al. 2010).

2.8.4 Término Fuente de la Cantidad φ (DQO)

Anteriormente se ha descrito que la cantidad escalar φ representa el contenido de materia orgánica que transporta el agua residual, además es sabido que los gránulos anaeróbicos son los encargados de digerir o degradar dicha materia, por lo que la cantidad φ tiende a disminuir en presencia de los gránulos. La manera de reproducir este comportamiento acoplado entre esta propiedad y los gránulos anaeróbicos es por medio del término fuente F_n^k de la Ec. 9, el cual representan la velocidad con que se degrada la propiedad φ en presencia de los gránulos.

La degradación de materia orgánica debe cumplir dos condiciones; una de ellas relacionada con el aumento del número de microorganismos por gránulo, como consecuencia de la disponibilidad de alimento (materia orgánica) y la otra es una disminución del transporte de materia orgánica desde la superficie del gránulo hasta las zonas más internas debido al crecimiento asociado a la primera condición. Esto se traduce en algo simple: los gránulos grandes o de mayor diámetro son las que digieren o consumen menos materia orgánica, puesto que los fenómenos difusivos priman sobre la disponibilidad del alimento; entre tanto, las colonias de menor diámetro son las que digieren más, puesto que los fenómenos difusivos no son los relevantes.

Esta competencia entre la disponibilidad y el transporte de materia orgánica están asociadas a la dinámica de Monod (Angelidaki et al 1993) para el aumento del número de microorganismos, y a la resistencia difusiva en los gránulos (conjunto de microorganismos o colonias) que aumentan su tamaño debido a este crecimiento, puesto que se crea una resistencia de flujo de nutrientes hacia su interior (Saravannan y Srrekrishnan 2006), la función matemática que modela este comportamiento tendrá una forma exponencial que disminuye su valor a medida que se aumenta el tamaño del gránulo proponiéndose así la Ec. 47.

$$f_n = \begin{cases} -f_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{D_0 - D_n}{D_n}\right) \right) & \text{si } \varphi > 0 \\ 0 & \text{si } \varphi \leq 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 47}$$

La Ec. 47 tiene en cuenta un solo gránulo anaeróbico, donde f_0 es el valor del consumo máximo que puede llegar a tener un gránulo anaeróbico, D_0 es el diámetro máximo que podría alcanzar un gránulo anaeróbico y D_n es el diámetro del n-esimo gránulo anaeróbico. Que aplicado al conjunto de gránulos presentes en el volumen de control se debe realizar la sumatoria sobre todos los presentes según la Ec. 48.

$$F_n^k = - \sum_n f_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{D_0 - D_n}{D_n}\right) \right) \quad Ec. 48$$

Donde F_n^k es la suma de los consumos de φ de todos los gránulos n-esimos presentes en la celda k de fluido.

3. SOLUCIÓN NUMÉRICA DEL MODELO MATEMÁTICO

La solución numérica del modelo planteado en la sección 2 requiere de un planteamiento específico del método numérico a usar para una de los esquemas presentados (Euleriano - Lagrangiano), además de resolver dichos planteamiento dentro de un algoritmo que permita el acoplamiento de los dos esquemas.

3.1 Método de Solución para la Fase Euleriana (Agua Residual)

La solución de las ecuaciones asociadas a la fase Euleriana (agua residual), se resuelven en estado transiente con un algoritmo predictor – corrector cuyo paso es $\Delta t_{\text{Euleriano}}$, teniendo como fundamento el algoritmo Semi – Implicit Method for Pressure – Linked Equations SIMPLE (Patankar y Spalding 1972) para resolver las ecuaciones incluyendo los términos transientes que se basado en el método de los volúmenes finitos. Este algoritmo predictor – corrector se desarrolla sobre una malla escalonada donde se almacena los datos de velocidad en las caras de los volúmenes de control y el valor de las propiedades en los centros de los volúmenes de control.

La discretización de las ecuaciones eulerianas fue de primer orden ver figura 3-1, estimando los valores de las propiedades en las caras con el método Up – Wind (FOU), de la manera mostrada en las Ec. 49 y Ec. 50.

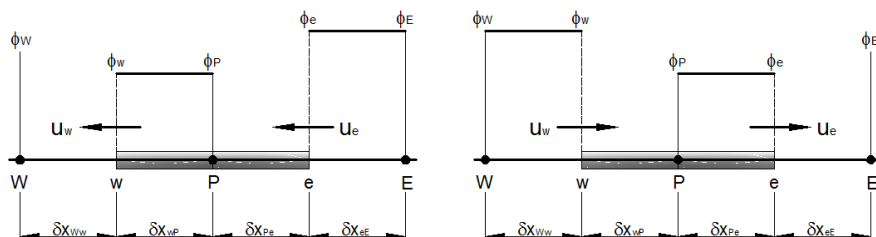


Figura 3-1: Discretización con el Método Up – Wind de Primer Orden.

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{si } u \geq 0 \\ \phi_E & \text{si } u < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 49} \quad \text{y} \quad \phi_o = \begin{cases} \phi_W & \text{si } u \geq 0 \\ \phi_P & \text{si } u < 0 \end{cases} \quad \text{Ec. 50}$$

Donde ϕ_e y ϕ_o son los valores de las caras este y oeste respectivamente del volumen de control en un caso unidimensional.

3.2 Método de Solución para la Fase Lagrangiana (Gránulos Anaeróbicos)

El método de integración del modelo Lagrangiano, se basa en el algoritmo de Euler que consisten en truncar la serie de Taylor de la ecuación de movimiento en el término Δt^2 , siendo este un algoritmo de primer orden. Es deseable que el algoritmo de integración sea estable, eficiente y preserve la energía (Garg et al. 2010), sin embargo el algoritmo de Euler presenta dificultades debido a que no es reversible y presenta un corrimiento grande de energía (Frenkel 2002), además de requerir un paso de tiempo pequeño.

A pesar de no conservar la energía el algoritmo de Euler describen bien las trayectorias de las partículas siendo esta una excelente propiedad, siendo esta de mayor importancia para este estudio. Las expresiones Ec. 51, Ec 52 y Ec. 53, determinar las velocidad, la posición y la velocidad angular respectivamente para j-esimo gránulo anaeróbico dentro del volumen de control.

$$\mathbf{V}_j(t + \Delta t) = \mathbf{V}_j(t) + \frac{\mathbf{F}t_j(t)}{m_j} \Delta t \quad \text{con} \quad \mathbf{F}t_j = \mathbf{L}_j^k + \mathbf{C}_j + m_j \mathbf{g} \quad \text{Ec. 51}$$

$$\mathbf{r}_j(t + \Delta t) = \mathbf{r}_j(t) + \mathbf{V}_j(t + \Delta t) \Delta t \quad \text{Ec. 52}$$

$$\boldsymbol{\omega}_j(t + \Delta t) = \boldsymbol{\omega}_j(t) + \frac{\mathbf{T}_j(t)}{I_j} \Delta t \quad \text{Ec. 53}$$

Donde t en el tiempo en el instante anterior, y Δt es el paso de tiempo, que se define como la cincuentava del menor tiempo que toma en producirse una colisión entre las partículas i-esima y j-esima dada en la Ec. 44, es decir, $\Delta t = \min(t_{ij}^{\text{col}}/50)$ (Garg et al. 2010).

3.3 Fracción de Volumen de Sólidos

El flujo de masa dentro del esquema Lagrangiano se debe determinar mediante el conteo de partículas que fluyen a través de un área en un tiempo t , teniendo en cuenta que se requiere la fracción de sólidos α_s en este caso de gránulos anaeróbicos para una malla Euleriana, se hace necesario el conteo de los mismos dentro de la misma malla, la expresión Ec. 54 determinar el volumen que ocupa la fase sólida.

$$V_s^k = \sum_{j=1}^N v_{pj} \quad \text{Ec. 54}$$

Donde V_s^k es el volumen ocupado por la fase sólida en la celda k y N es el número de partículas presentes en la celda k , de este modo la fracción de sólidos α_s^k en la celda estará dada por la Ec. 55.

$$\alpha_s^k = \frac{V_s^k}{V_k} \quad \text{Ec. 55}$$

Donde V_k es el volumen de la celda computacional Euleriana, dejando la ecuación local definida en la Ec. 13 como.

$$\alpha_L^k = 1 - \alpha_s^k \quad \text{Ec. 56}$$

La Ec. 56 se debe cumplir para todas las k -ésimas celdas computacionales del dominio donde será resuelto el modelo.

3.4 Escalas de Tiempo

Dentro del sistema que se estudia se presentan procesos que obedecen a distintas escalas de tiempo, una de ellas es el tiempo de colisión t_{ij}^{col} entre partículas quien gobierna el desarrollo del esquema Lagrangiano, por ello el paso temporal de este

esquema está sujeto a este valor para describir bien el proceso, según se describió en la sección 2.5.

La escala de tiempo en el desarrollo de flujo es claramente mayor que tiempo en que se desarrollan las colisiones entre partículas, y por ende admite pasos de tiempo mayores al que es necesario aplicar al esquema Lagrangiano, estos pasos de tiempos dependen del número Courant que impone el criterio de estabilidad del algoritmo.

Esta diferencia en las escalas de tiempo entre los dos esquema impone que el algoritmo que acople los dos procesos sea segregado, es decir, se avanza la solución Lagrangiana hasta que el tiempo acumulado por los avances igualen el paso de tiempo de la solución Euleriana ($\sum \Delta t_{\text{Lagrangiano}} = \Delta t_{\text{Euleriano}}$), alcanzado este punto se dispara la solución Euleriana y se continua nuevamente con las solución Lagrangiana (Garg et al. 2010).

3.5 Algoritmo de Solución Acoplado

La figura 3-2 muestra el esquema del algoritmo que servirá para solucionar el modelo propuesto en la sección 2, el cual está basado en el código MFIX escrito en idioma FORTRAN desarrollado por el Departamento de Energía Fósil adscrito al Departamento de Energía de los Estados Unidos (Syamlal et al. 1993).

El software desarrollado arroja resultados en múltiples archivos que se codifican en formato binario, el cual requiere de un software denominado POST – MFIX, para extraer los resultados asociados a la fase Euleriana. Los datos de la solución Lagrangiana están en formato ASCII, los cuales pueden ser leídos por un editor de datos general.

La visualización de los datos tanto los asociados a la fase Euleriana como a la fase Lagrangiana es realizable en el software Paraview, siendo este código libre desarrollado por Kitware.

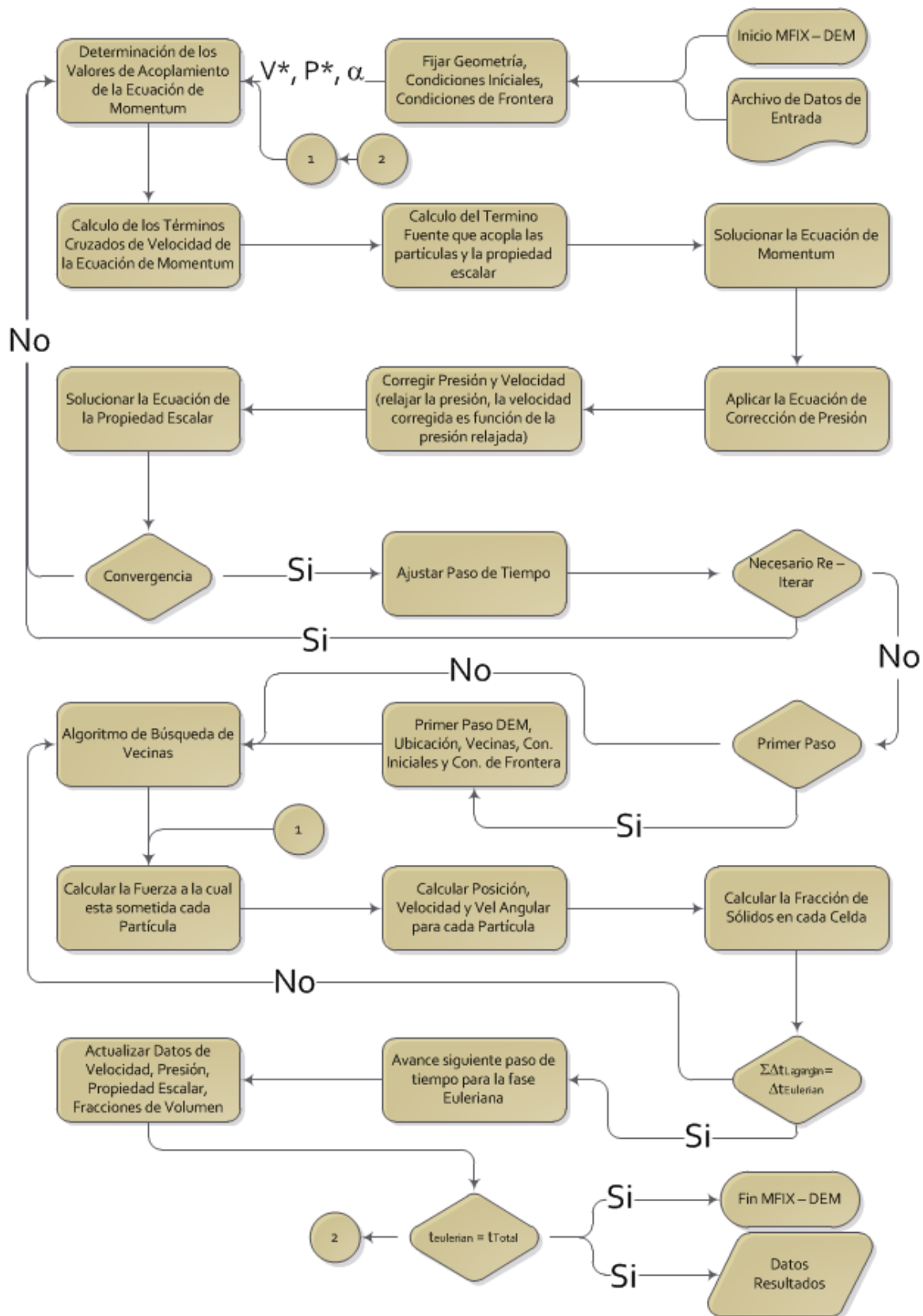


Figura 3-2: Esquema del Algoritmo usado para resolver el Modelo de la Sección 2.

3.6 Algoritmo de Búsqueda de Partículas

Las interacciones entre partículas, requiere conocer las partículas j-esimas vecinas que se encuentran en los alrededores de la partícula i-esima, haciendo necesario usar un algoritmo de búsqueda que se encargue de determinarlas. Multiphase Flow with Interchange Exchange (MFI) acoplado con Discrete Element Model (DEM), cuenta con un algoritmo de búsqueda que se basa la regla mostrada en la Ec. 57 (Garg et al. 2010).

$$|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m| < K \left(\frac{D_n}{2} + \frac{D_m}{2} \right) \quad \text{Ec. 57}$$

Donde K se denomina Factor RLM y tiene un valor de 1,2, y de este modo incluir vecinas que se encuentre vecinas que se encuentren un 20% más de su radio de extensión.

3.7 Condiciones de Frontera

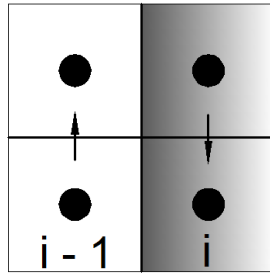
Las condiciones de frontera deben definirse tanto para el esquema Euleriano como para el esquema Lagrangiano.

3.7.1 Condiciones De Frontera Eulerianas

Las condiciones de frontera que se usaran para resolver el modelo planteado anteriormente son:

- **Condición de Pared**

En este caso se considera una pared donde no hay deslizamiento por tanto el gradiente de velocidad es idéntico a cero lo cual se cumple con la condición mostrada en la figura 3-3 y descritas en las Ec. 58 y Ec. 59.



Pared sin Deslizamiento

Figura 3-3: Condición de Frontera de Pared.

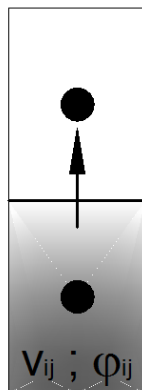
$$v_m(i, j + 1/2, k) + v_m(i - 1, j + 1/2, k) = 0 \quad Ec. 58$$

$$\varphi_m(i, j + 1/2, k) - \varphi_m(i - 1, j + 1/2, k) = 0 \quad Ec. 59$$

Donde v_m es la velocidad en la dirección Y, y φ_m es el valor de la propiedad escalar medida en mgDQO/L en la pared.

- Condición de Velocidad de Entrada

Para esta condición se asigna un valor fijo para todo tiempo t en la frontera por donde se ingresa el flujo al volumen de control, y está determinada según la figura 3-4 y las ecuaciones Ec. 61 y Ec. 62.



Condición de Velocidad

Figura 3-4: Condición de Frontera Entrada de Velocidad.

$$v_{ij}(0 < t < \infty) = v_0 \quad \text{Ec. 61} \quad y \quad \varphi_{ij}(0 < t < \infty) = \varphi_0 \quad \text{Ec. 62}$$

Donde v_{ij} y φ_{ij} son los puntos de frontera, y la dirección velocidad es asignada normal a la frontera.

- **Condición Salida de Presión**

En esta condición solo se le asigna el valor de corrección de presión los demás valores son determinados por el algoritmo y está determinada por la figura 3-5 y la Ec. 63.

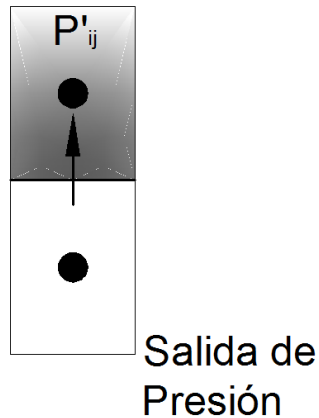


Figura 3-5: Condición de Frontera Salida de Presión.

$$P'_{ij} (0 < t < \infty) = 0 \quad \text{Ec. 63}$$

Donde P'_{ij} es el valor de la corrección de presión para todo tiempo t que tarde la simulación. La velocidad y la propiedad φ son calculadas en las iteraciones.

3.7.2 Condiciones de Frontera Lagrangiana

En el esquema Lagrangiano solo se presenta la condición de pared, dado que el sistema que se estudia no intercambia partículas (gránulos anaeróbicos) con los alrededores, en este caso las partículas también interactúan con las paredes, es decir, colisionan. Estas

colisiones también son simuladas usando el modelo de esfera blanda descrito en la sección 2.8.3.2, con la salvedad que son necesarias las propiedades de rigidez y de amortiguamiento de los pares partícula – pared, y la pared es tomada como una partícula de radio infinito.

4. SIMULACIÓN Y RESULTADOS

El modelo construido en la sección 2, es aplicado a un reactor UASB a escala de laboratorio que fue base en un experimento realizado desarrollado en Biotechnology Research Institute de Montreal Canadá. De cual se toma su geometría siendo esta de 14,3 cm de diámetro y una altura de 90 cm (Zeng et al. 2005).

4.1 Simulación

Se realiza un experimento computacional que parte de la base que el reactor está cargado con 1 Litro de gránulos anaeróbicos y se ingresa un agua residual con una velocidad uniforme de 0,09 cm/seg por la parte inferior del reactor con un contenido de materia orgánica equivalente a 237 mg de DQO por litro (mgDQO/L).

4.1.1 Geometría

En base a la geometría del reactor UASB anteriormente descrita, se hace una aproximación de la geometría tridimensional del mismo a una geometría bidimensional, siendo esta un rectángulo de 14 cm de ancho por 90 cm de largo, ver figura 4-1. Donde se establece una malla con celdas en la dirección X (Horizontal) del tamaño de 1 cm y con celdas del tamaño de 2 cm para la dirección Y (Vertical).

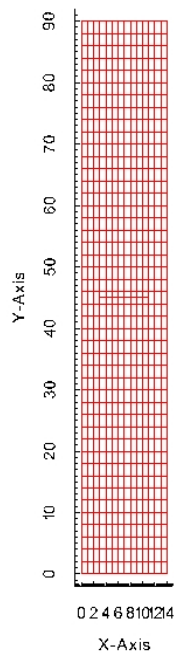


Figura 4-1: Geometría del Volumen de Control del Reactor UASB.

Este tamaño de la celda es definido después de realizar un análisis de independencia de malla con una velocidad de entrada de 3 m/s, donde se analizan 6 diferentes tamaños que van desde las 315 celdas hasta las 5040 celdas.

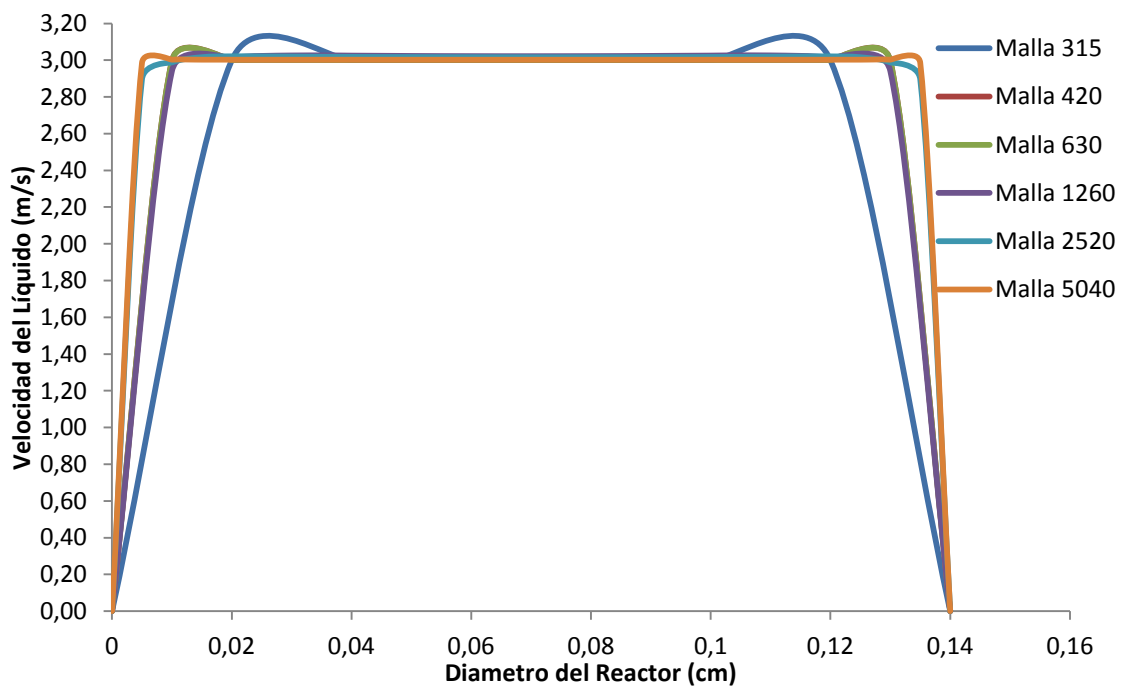


Figura 4-2: Prueba de Independencia de Malla de la Geometría del Volumen de Control.

En la figura 4-2 se observa que no hay diferencias importantes en los resultados obtenidos de la prueba de independencia de malla, de este análisis se toma como malla de simulación la que tiene 630 celdas dado que esta entrega resultados bastante aproximados y el tiempo de simulación se reduce a la mitad del tiempo que tarda la simulación usando la malla de 1260 celdas.

4.1.2 Gránulos Anaeróbicos

La equivalencia de 1 litro de gránulos anaeróbicos, en la geometría simplificada del volumen de control descrita en la sección 4.1 es de 91 cm² aproximadamente, con lo cual, se construye partículas circulares con una distribución de tamaños según la distribución normal que una buena aproximación de los datos reportados en la literatura (Batstone y Keller 2000); donde el tamaño medio es de 1,2 mm, con una desviación estándar de 0,01 mm. Generando tamaños que va desde 0,72 mm hasta 1,8 mm ver figura 4-3.

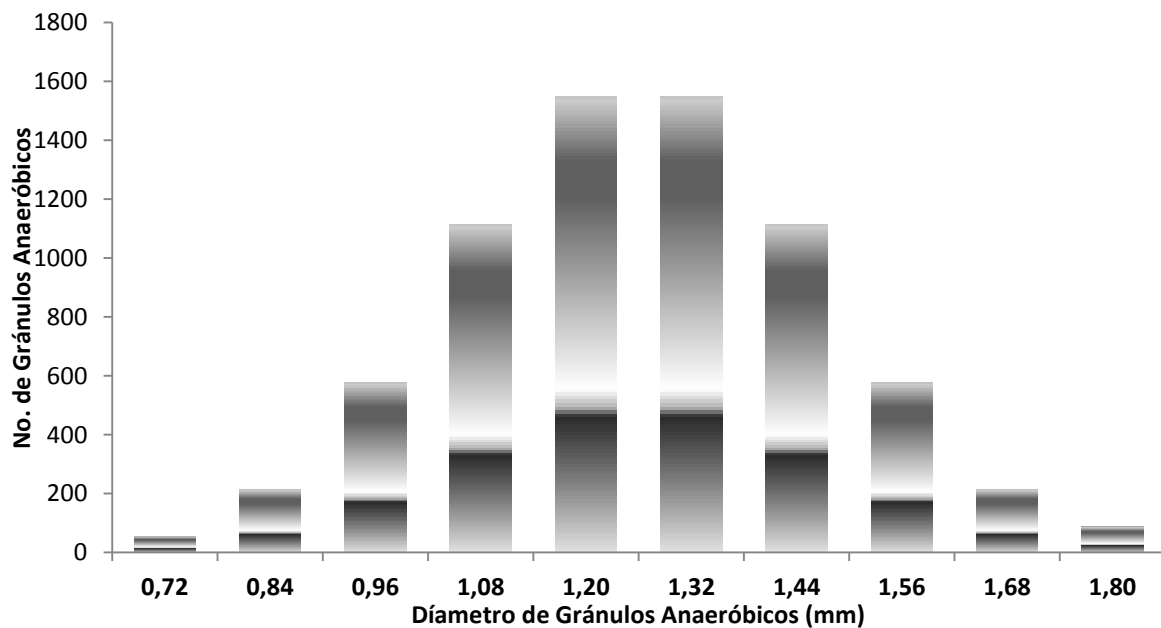


Figura 4-3: Distribución de Tamaños de Gránulos Anaeróbicos dentro del Reactor UASB.

Por tanto dentro del volumen de control que representa el reactor UASB se encontraran 7050 partículas en total que representaran la presencia de los gránulos anaeróbicos las cuales son distribuidas aleatoriamente dentro del volumen del reactor.

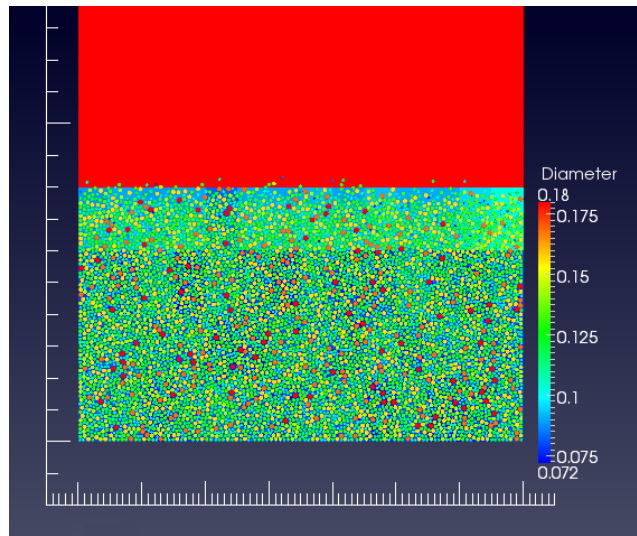


Figura 4-4: Distribución de Gránulos Anaeróbicos en el Área de Simulación.

En la figura 4-4 se puede observar el estado inicial de los gránulos anaeróbicos que representan a los gránulos anaeróbicos distribuidos en el área del reactor, siendo esta distribución aleatoria en cuanto a las posiciones iniciales y a su diámetros, brindando ventajas a la aplicación para alcanzar rápidamente el estado cuasi estacionario, en comparación con una distribución en rejilla y diámetros ordenados.

4.1.3 Constantes

En la tabla 4-1 se reportan los datos de las constantes aplicadas en la simulación del reactor UASB.

Tabla 4-1: Constantes Aplicadas en el Modelo de la Sección 2.

CONSTANTE	VALOR
Densidad del Agua Residual ρ_L	0,993 g/cm ³
Viscosidad del Agua Residual μ_L	0,903 cPas
Densidad de Gránulo Anaeróbico ρ_S	1,070 g/cm ³
Coefficiente de Rigidez normal entre partículas k_n	1x10 ⁵
Coefficiente de Rigidez tangencial entre partículas k_t	2/5 k_n
Coefficiente de Rigidez normal entre partícula y pared k_n	1x10 ⁵
Coefficiente de Rigidez tangencial entre partícula y pared k_t	2/5 k_n
Coefficiente de Fricción entre Partículas μ	0,1
Coefficiente de Restitución entre partículas e^*	0,8
Coefficiente de Restitución entre partícula y pared e^{**}	0,9

Coefficiente de Amortiguamiento tangencial entre partículas η_t	1/2 η_t
Coefficiente de Amortiguamiento tangencial entre partícula y pared η_t	1/2 η_t
Difusividad de la propiedad escalar Γ^{***}	0,1 cm/s
Consumo máximo de propiedad escalar f_0	0,02 mgDQO/L
Diámetro Máximo	1,85 mm

* Se requiere definir 55 datos de coeficiente de restitución que se debe a los pares formados entre partículas dada la presencia de 10 tamaños diferentes.

** Se requiere definir 10 datos de coeficiente de restitución que se debe a los pares formados partícula - pared dada la presencia de 10 tamaños diferentes.

*** Tomada de orden de magnitud de una sustancia que se difunde en el agua (Bird 2006).

4.1.4 Condiciones de Frontera

En la tablas 4-2 se reportan los datos de las condiciones de frontera que se usaran en el experimento computacional a desarrollar.

Tabla 4-2: Condiciones de Frontera para el Modelo de la Sección 2.

Experimento	Condición de Frontera	Valor
Caso Simulado	Tipo de Entrada de Velocidad	Uniforme (0 – 14 cm)
	Velocidad de Entrada	0,09 cm/s
	Cantidad de φ a la entrada	237,5 mgDQO/L

Nota: en el anexo A se encuentra el archivo de datos de entrada para la simulación.

El caso simulado descrito en la tabla 4-2 es lanzado en la Unidad de Cálculos Avanzados (UNICA) que pertenece a la Universidad Nacional de Colombia – Sede Medellín adscrito al grupo de Termodinámica Aplicada y Energías Alternativas de la escuela de Procesos y Energía (TAYEA).

4.2 Resultados

En adelante se analizaran los resultados obtenidos después de realizados los experimentos computaciones desarrollados basados en el modelo construido en las secciones 2 y 3 de un reactor anaerobio de flujo ascendente (UASB), teniendo en cuenta que esta simulación reproduce las condiciones de operación que se reportan en la literatura (Van Haandel y Lettinga 1994).

Basado en lo anterior se hace un análisis riguroso de estos resultados con miras a reproducir de manera cualitativa y cuantitativa las observaciones reportadas y las consideraciones que han sido tenidas en cuenta para construir los modelos hidrodinámicos publicados.

4.2.1 Evolución hacia un Estado Cuasi – Estacionario de Reactor

La naturaleza transitoria en la operación de los reactores anaeróbicos de flujo ascendente, se debe a la complejidad los fenómenos que ocurren dentro del mismo, sin embargo, se esperan que los parámetros de operación oscilen alrededor de un valor medio configurando así un estado cuasi – estacionario para unas condiciones de entrada fijas (Wu y Hickey 1997, López et al. 2009).

Como parámetros indicadores que lleven a concluir que el sistema ha alcanzado un estado cuasi – estacionario se puede tomar la altura del lecho y el valor de la fracción volumétrica del agua residual en un punto específico dentro del lecho del reactor que contenga ambas fases.

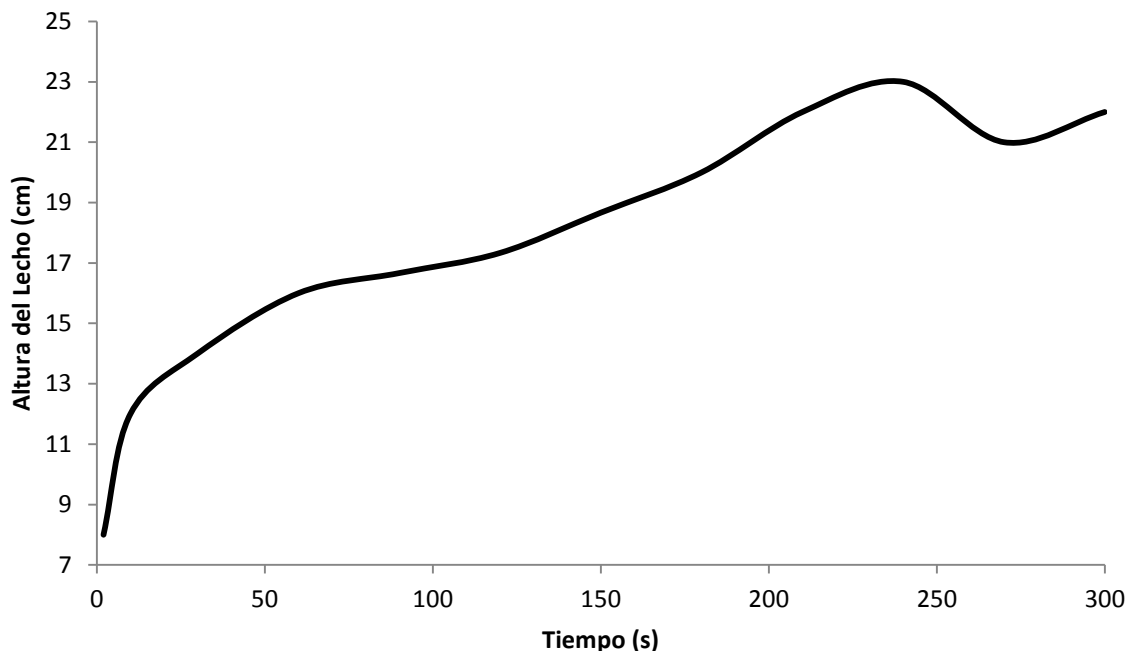


Figura 4-5: Altura del Lecho del Reactor de Flujo Ascendente según Tiempo.

En la figura 4-5 se visualiza que el lecho del reactor se expande una vez arranca el flujo alcanzando un máximo de 23 cm de altura a los 240 segundos de avance temporal, una vez alcanza este máximo dicha altura empieza a caer hasta los 21 cm pasados 270 segundos, seguido de un nuevo aumento en la altura del lecho, lo cual, indica que ha alcanzado un estado de cuasi - equilibrio en este parámetro; este resultado da cuenta que los gránulos anaeróbicos o colonias de bacterias se mantienen siempre dentro del reactor y no son expulsadas por la salida del reactor cumpliendo con la función de catalizadores biológicos, además el fenómeno de expansión del lecho garantiza un mayor tiempo de contacto entre el agua residual y los gránulos anaeróbicos.

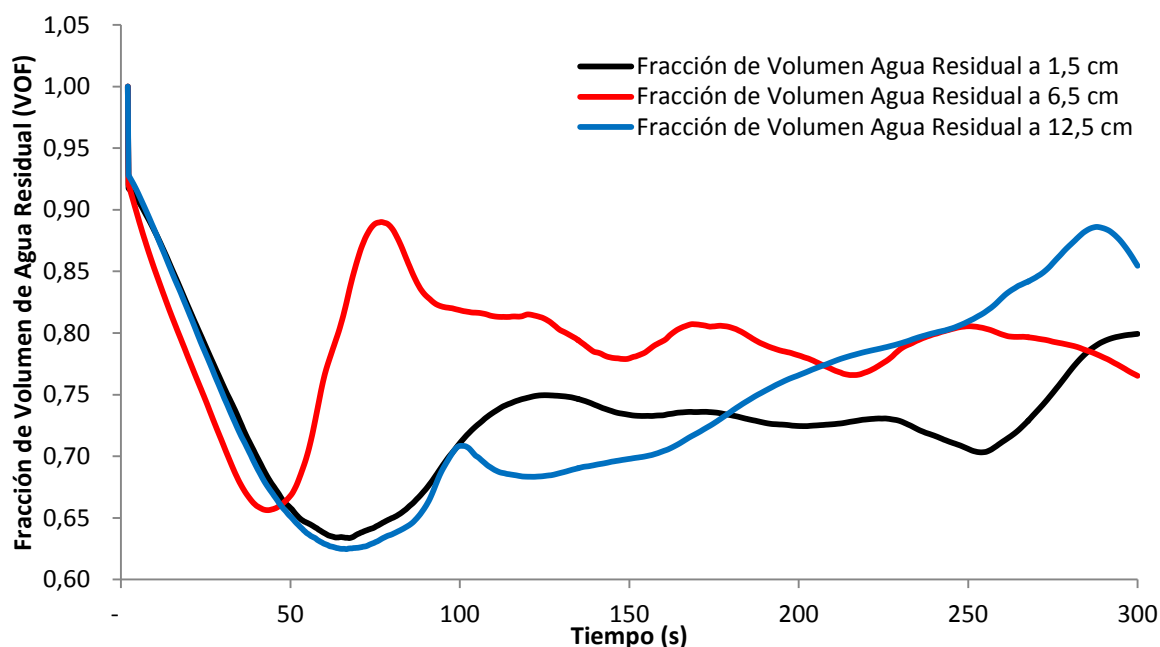


Figura 4-6: Fracción Volumétrica del Agua Residual en una Celda de Volumen a la Altura de 9 cm del Reactor de Flujo Ascendente.

Teniendo en cuenta los dos parámetros requeridos para establecer el estado cuasi – estacionario se tomaron como referencia 3 puntos ubicado a la altura de 9 cm del reactor y en la posiciones transversales 1,5 cm, 6,5 cm y 12,5 cm; como se observa en la figura 4-6 las tendencias son similares en las tres posiciones y sus puntos críticos coinciden aproximadamente con los puntos críticos de la figura 4-5 que muestran cambios de tendencia pasados los 100 segundos, manteniendo valores de la fracción volumétrica de agua residual aproximadamente constante; con lo que se puede concluir que se alcanza un estado de cuasi equilibrio. Sin embargo se observa una tendencia diferente en el punto ubicado hacia el costado derecho del reactor a los 12,5 cm que muestra un crecimiento en

el valor de la fracción de agua residual indicando que hay un desplazamiento de la fase sólida, que se explica por el movimiento de la zona de alta velocidad que se presenta dentro del reactor que se muestra en la figura 4-12.

4.2.2 Expansión del Lecho en el Reactor de Flujo Ascendente

En reactores multifases de flujo ascendente donde participan fases líquidas y sólidas un parámetro de suma importancia es la altura del lecho, dado que este se convierte en un indicador del tiempo de contacto entre las dos fases (agua residual y gránulos anaeróbicos) y por consiguiente controla la conversión o digestión de la materia orgánica para el caso de los reactores anaeróbicos.

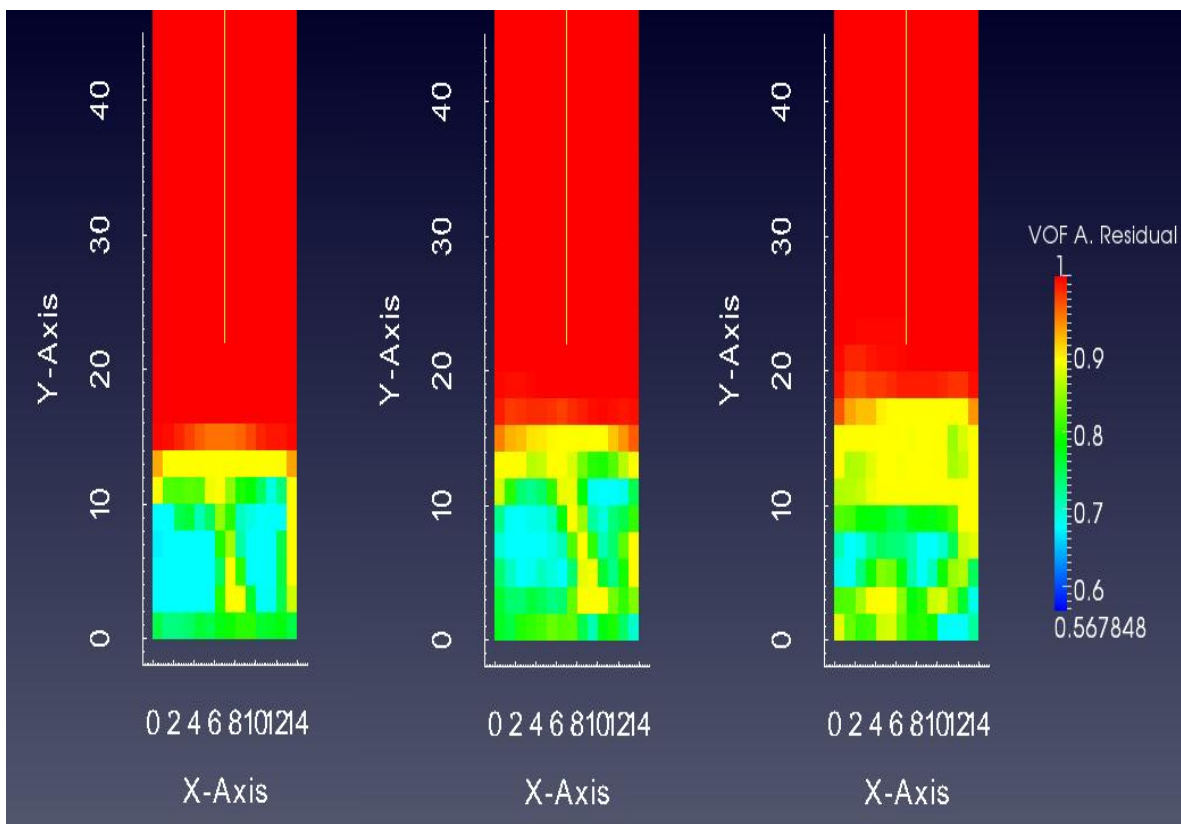


Figura 4-7: Contorno de Fracción Volumétrica del Agua Residual a los 100, 200 y 300 segundos.

En la figura 4-7 se observan las gráficas de contorno de la fracción volumétrica de agua residual dentro del reactor, donde a los 100 segundos muestra dos grandes zonas de acumulación de gránulos anaeróbicos hacia los costados entre los 2 cm y 10 cm de altura del reactor y zona central con baja fracción de gránulos anaeróbicos siendo aproximadamente de 0,1, muestra que el impulso del flujo de agua residual ha roto la presión ejercida por la fase solida; a los 200 segundos se presenta un desplazamiento de la zona de bajo contenido de gránulos anaeróbicos hacia el lado derecho del reactor, y empieza a desaparecer las zonas de acumulación de gránulos anaeróbicos; a los 300 segundos se observa un contorno de fracción volumétrica de agua residual más uniforme en dirección transversal (X), también se observa una segregación en la dirección axial configurándose así las zonas observadas experimentalmente de los reactores de flujo ascendentes (UASB) zona de lodos, zona fangosa y aclarador (Saravannan y Srrekrishnan 2006).

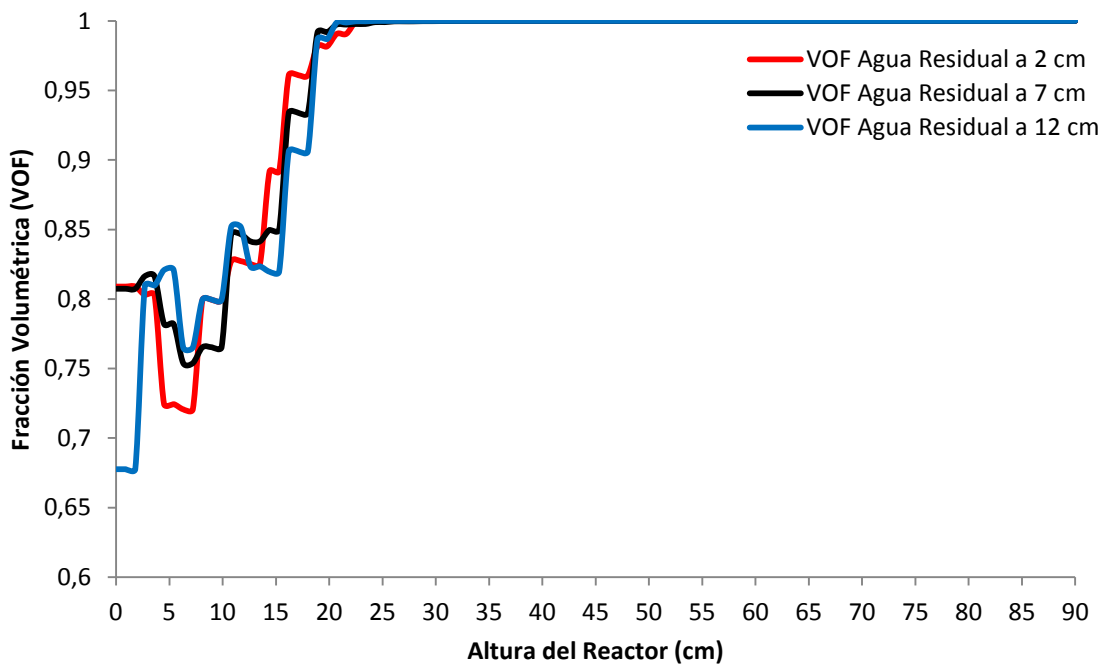


Figura 4-8: Fracción Volumétrica del Agua Residual según Altura del Reactor a los 300 segundos para 2 cm, 7 cm y 12 cm.

En la figura 4-8 se observa la fracción volumétrica del agua residual pasados 300 segundos de simulación en la dirección axial del reactor para el costado izquierdo a 2 cm, ubicación central a 7 cm y por ultimo el costado derecho a 12 cm en dirección transversal, dicha figura exhibe una tendencia inicial que se extiende hasta la altura de 10 cm con un

valor promedio de la fracción de volumen de agua residual de 0,75 y por ende un 0,25 de fracción volumétrica de gránulos anaeróbicos, en segunda instancia se encuentra una tendencia que va desde los 10 cm hasta los 15 cm de altura aproximadamente con un valor promedio de la fracción volumétrica de agua residual de 0,84 dejando así 0,16 de fracción volumétrica de gránulos anaeróbicos lo que significa una reducción importante en la presencia de sólidos esta zona donde se alojan la mayor parte de la fracción de gránulos anaeróbicos configura la zona de lodos; por último a partir de los 15 cm aproximadamente hay una disminución progresiva de la presencia de gránulos anaeróbicos debido al aumento progresivo de la fracción volumétrica de agua residual hacia el valor de 1,00 que se da a la altura de 22 cm lo que constituye la zona de fangosa; finalmente a partir de los 22 cm de altura hacia adelante se encuentra la zona de aclarado del reactor donde no hay presencia de gránulos anaeróbicos. De este modo se identifican las tres zonas descritas en la literatura (Saravannan y Srrekrishnan 2006).

De la figura 4-8 también se muestra una expansión del lecho desde el estado inicial de 8 cm de altura, sin embargo, la mayor cantidad de sólidos se encuentran en los primeros 15 cm de altura pasados los 300 segundos, por lo que se infiere que la gravedad tiene un efecto muy importante en la distribución de los sólidos hacia el fondo del reactor dado que la velocidad del flujo ascendente es muy baja y por lo tanto no genera el arrastre suficiente para vencer dicha fuerza de cuerpo.

4.2.3 Segregación de la Fase Sólida (Gránulos anaeróbicos)

Cuando más de un componente sólido es introducido dentro del sistema con diferentes tamaños, densidad o ambos, las características de expansión del lecho se hacen más compleja, debido a sus diferencias en las velocidades de asentamiento, lo que introduce una tendencia bien sea de mezclado o de segregación de las fases sólidas (Reddy y Joshi 2009).

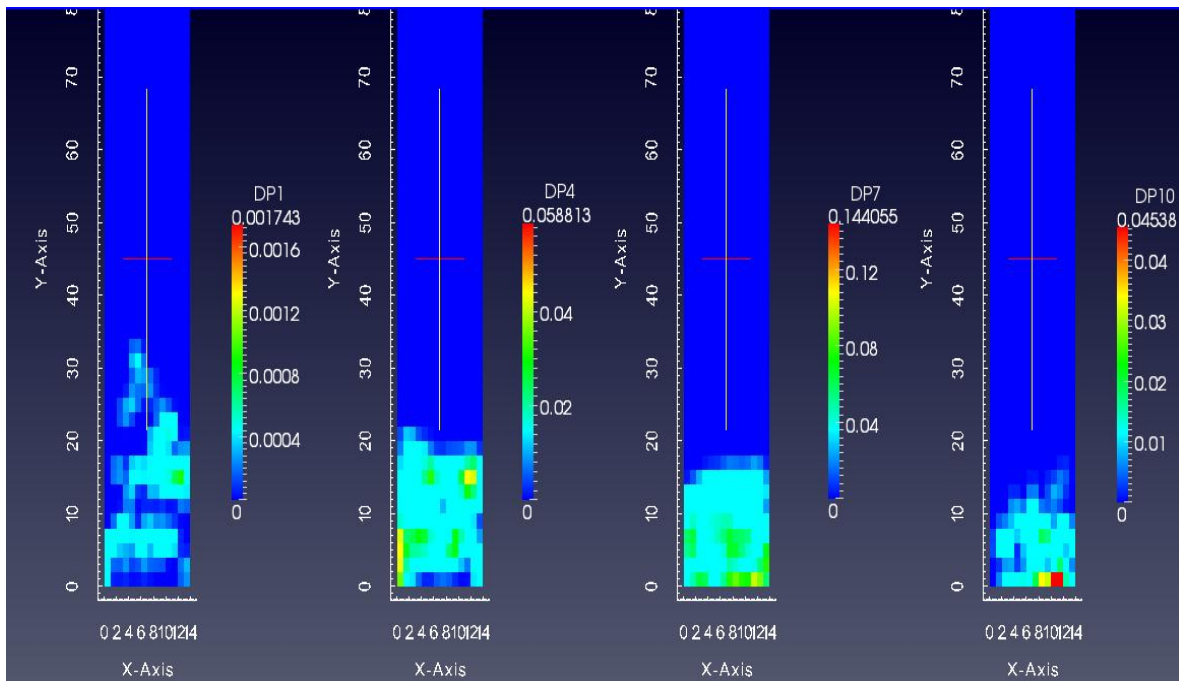


Figura 4-9: Contornos de Fracción Volumétrica de Sólidos por Diámetro de Gránulos Anaeróbicos 0,72 mm, 1,08 mm, 1,44 mm y 1,80 mm a los 300 segundos.

En la figura 4-9 se observa una tendencia mixta entre entremezclado y segregación, dado a la presencia de 10 distintos diámetros de gránulos anaeróbicos (ver figura 4-3) y esto se debe al comportamiento diferente de las fuerzas de arrastre en cada uno de los gránulos de diámetro diferente. La presencia de distintos tamaños de gránulos anaeróbicos permite clasificarlos en clases, dichas tienen un comportamiento diferencial hacia el entremezclado y a la segregación analizadas en pares como sigue para las clases DP1 (0,72 mm), DP4 (1,08 mm), DP7 (1,44 mm) y DP10 (1,80 mm); en la figura 4-9 se observa una tendencia fuerte a la segregación entre la clase de diámetro menor DP1 y la clase de diámetro mayor DP10, y se observa un entremezclado entre la clase DP4 y la clase DP7; entre las parejas de clases DP1 – DP4, y DP7 – DP10 se establece un estado intermedio o de transición entre entremezclado y segregación. Una tendencia mayor a la segregación se encuentra al considerar las parejas de clases DP1 – DP7, y DP4 – DP10. El entremezclado y la segregación han sido observados experimentalmente encontrado que sucede segregación parcial cuando la relación entre los diámetros de partículas de las fases están entre 1,24 – 1,58 (Pruden y Epstein 1964), en otro experimento se encontró que fases sólidas con relación entre diámetro de partículas menores a 1,3 se entremezclan y para relaciones mayores las fases se segregan. Estos resultados experimentales son consecuentes con los resultados calculados por el modelo

presentado, debido a que la tendencia a entremezclarse o a segregarse se da en concordancia con la descripción y la relación de diámetros reportados por los autores anteriores entre las clases aquí analizadas DP1, DP4, DP7 y DP10 ver tabla 4-3.

Tabla 4-3: Relación de tamaño de partículas entre las fases reportadas en la figura 4-3.

	DP1	DP4	DP7	DP10
DP1	1,00	1,50	2,00	2,50
DP4	1,50	1,00	1,30	1,70
DP7	2,00	1,30	1,00	1,30
DP10	2,50	1,70	1,30	1,00

* Ver el cuadro completo de relación entre diámetros de las fases de gránulos anaeróbicos en el anexo B.

Sin embargo el modelo provee otra forma de determinar y explicar la segregación de las fases solidas como se muestra en la figura 4-10.

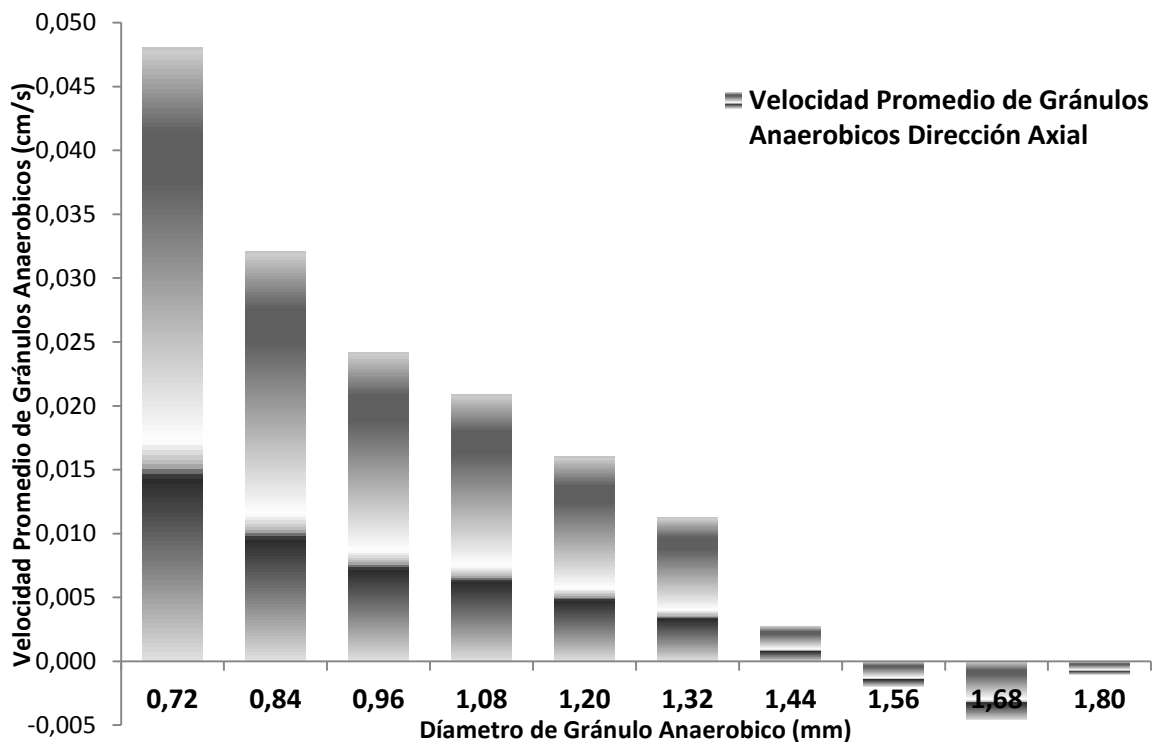


Figura 4-10: Velocidad Promedio según Fase de Gránulos Anaeróbicos en la Dirección Axial del Reactor a 300 segundos.

La figura 4-10 explica claramente el proceso de segregación desde la diferencia de la velocidad promedio en la dirección axial de cada una de las fases de gránulos anaeróbicos presentes dentro del reactor, siendo la fase de diámetro 0,72 mm la que se

mueve con mayor velocidad hacia la parte superior del reactor indicando que es esta es la que más afecta la fuerza de arrastre, las fases con mayor diámetro muestran una tendencia decreciente de dicha velocidad promedio, salvo las tres fases con mayor diámetro de gránulos anaeróbicos que presentan valores negativos que indican que estas están cayendo hacia el fondo del reactor. Un estado de completa segregación es posible cuando participan fases cuya relación de tamaños de partículas superen el valor de 2.10 (Al - Dibouni y Garside 1979), por tanto de la tabla 4-3 este comportamiento se espera entre las fases con diámetros 0,72 mm y 1,80 mm cuyo valor de 2,50 supera el reportado y se explica debido a que sus velocidades promedio van en direcciones opuestas ocasionando el efecto ya expresado. Sin embargo en la figura 4-9 también se observa una tendencia al desplazamiento en la dirección transversal (izquierda a derecha), que lleva a los gránulos anaeróbicos de mayor diámetro hacia el fondo derecho del reactor, siendo explicable por el comportamiento mostrado en la figura 4-11.

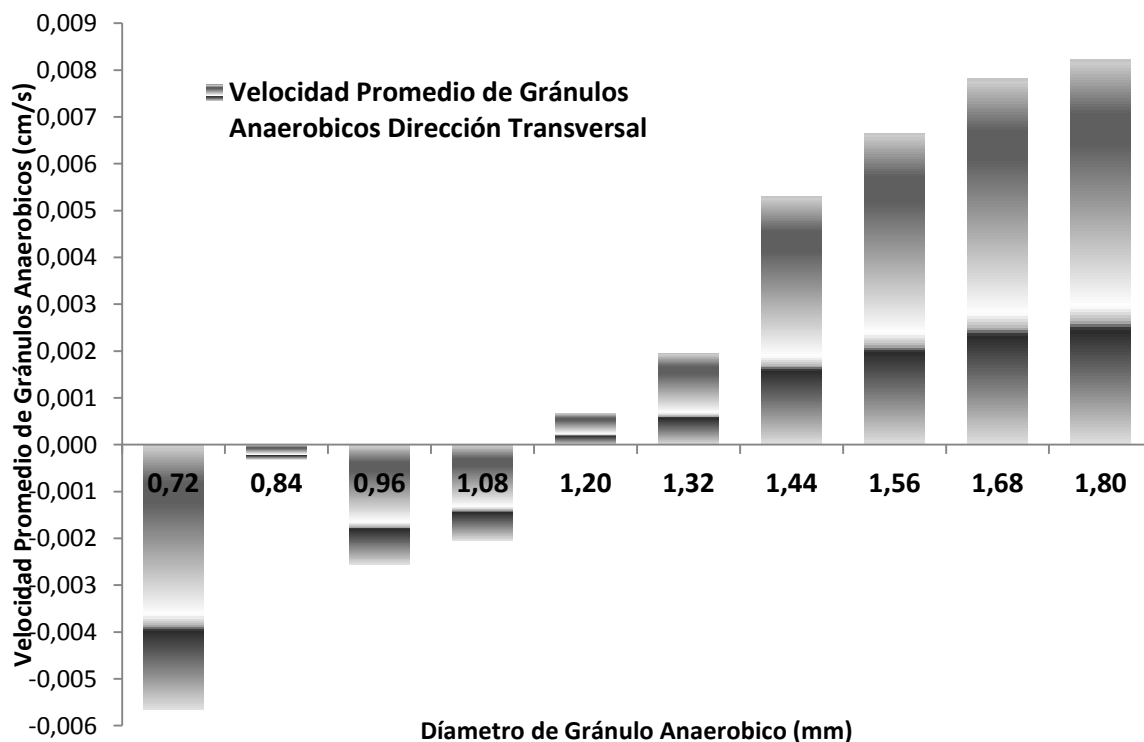


Figura 4-11: Velocidad Promedio según Fase de Gránulos Anaeróbicos en la Dirección Transversal del Reactor a 300 segundos.

La figura 4-11 muestra la velocidad promedio de gránulos anaeróbicos en dirección transversal (X) lo que explica la mayor presencia de las gránulos anaeróbicos más

grandes hacia el lado derecho del reactor, esto se debe a que gracias al movimiento circular que se establece dentro del reactor, ver figura 4-16, todas los gránulos anaeróbicos cubren el ciclo pero una vez tienen que subir las de mayor diámetro no suben con la misma rapidez como lo muestra la figura 4-10 generando dicho resultado.

4.2.4 Campo de Velocidades del Agua Residual y Gránulos Anaeróbicos

El campo de velocidad de la fase líquida indica cómo se distribuye el flujo de agua residual dentro del volumen del reactor, y además da una indicación de las trayectorias que siguen los gránulos anaeróbicos y por ende hacia donde están viajando dentro del reactor.

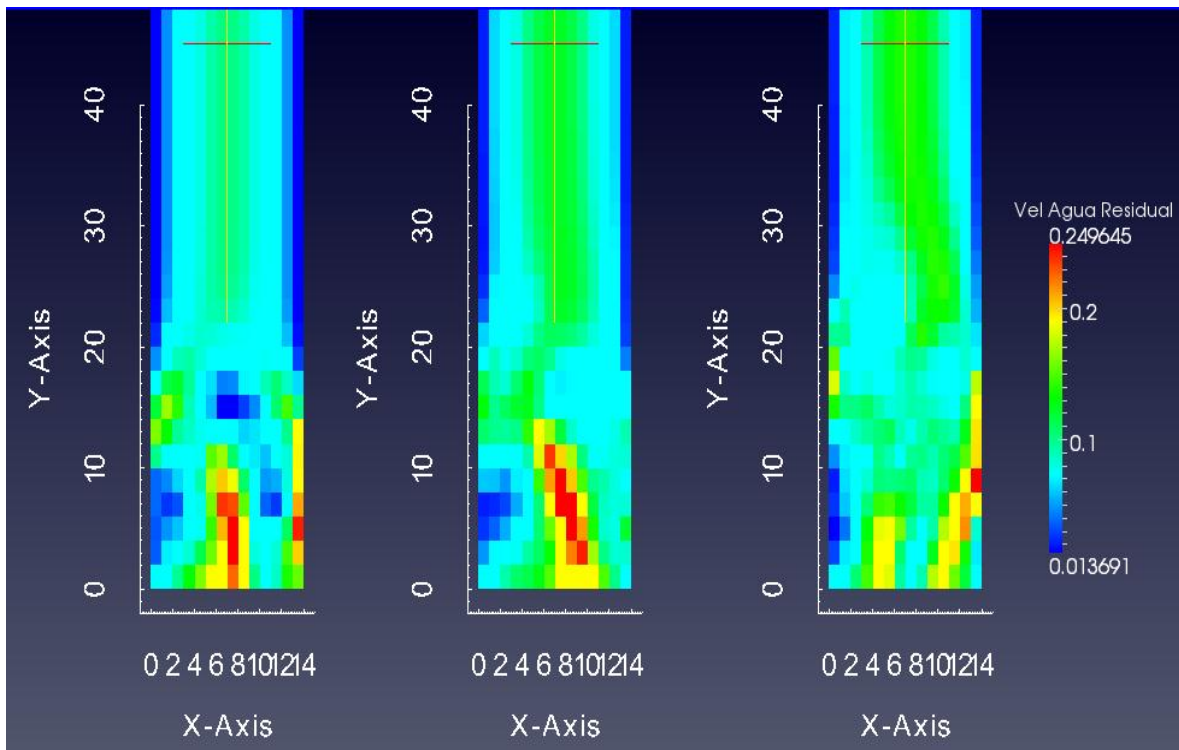


Figura 4-12: Contorno de Velocidad del Agua Residual a los 100, 200 y 300 segundos.

En la figura 4-12 se observa dentro del lecho del reactor una zona de alta velocidad de flujo de agua residual, que inicia en la zona central y derecha del reactor y se mantiene hasta pasados los 100 segundos lo que coincide con las zona de baja presencia de gránulos anaeróbicos, ver figura 4-7, luego la zona de alta velocidad central empieza un

desplazamiento hacia el sector derecho del reactor empujando los gránulos anaeróbicos que están presentes en la zona de baja velocidad que se encuentra entre ella y la zona de alta velocidad que está en dicho sector, debido a la presión que ejercen los gránulos anaeróbicos desaparece la zona de alta velocidad hacia los 200 segundos. Pasados los 300 segundos se observa un fraccionamiento de la zona de alta velocidad lo cual es producto del depósito de gránulos anaeróbicos dado el movimiento circular que estos describen, ver figura 4-16. También se observa una zona de muy baja velocidad al costado izquierdo del reactor, lo que significa que fluye muy poca agua residual, este comportamiento es gracias a la elevada concentración de gránulos anaeróbicos que ejercen una presión sobre el flujo y permiten que los gránulos anaeróbicos se asienten, ver figuras 4-7 y 4-18, estas condición y la alta velocidad que se produce en el costado derecho dan origen al movimiento circular de la fase de gránulos anaeróbicos, ver figura 4-16. La zona de alta velocidad busca abrirse paso e intenta conectarse con la sección del reactor que está libre de gránulos anaeróbicos, siendo este un comportamiento indeseado.

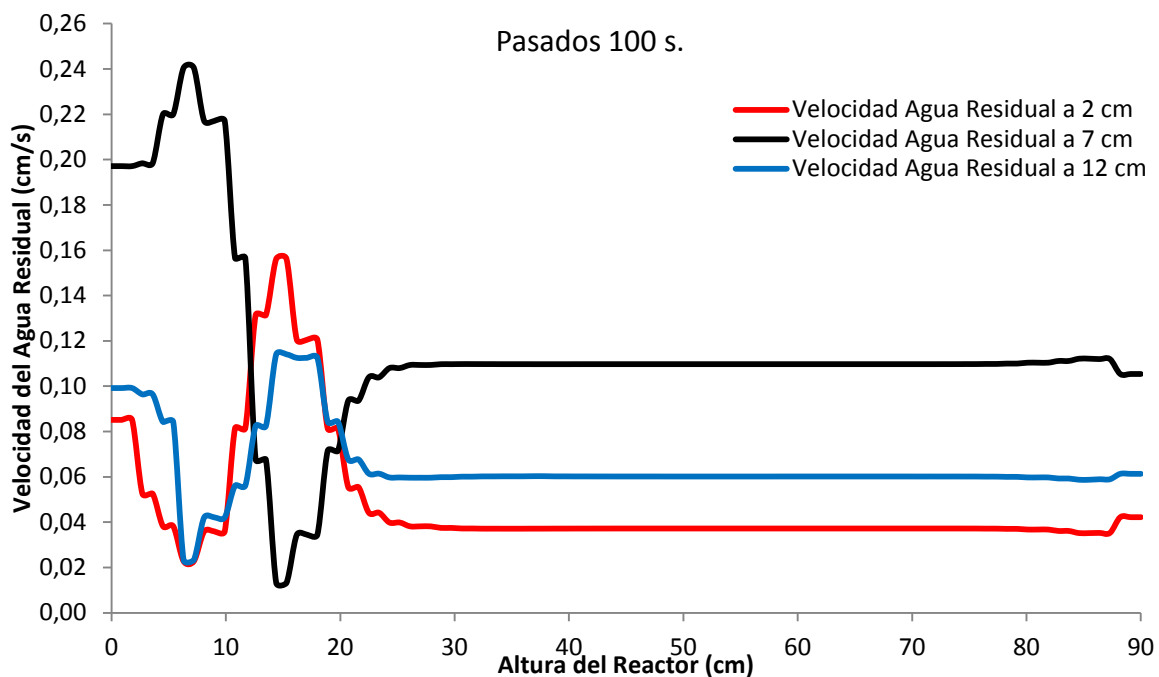


Figura 4-13: Velocidad del Agua Residual según Altura del Reactor a los 100 segundos.

La figura 4-13 muestra que pasados los 100 segundos hay concentración del flujo en la zona central hasta la altura de 12 cm del reactor; para luego revertirse en los siguientes

10 cm llegando a la altura de 22 cm del reactor; la concentración del flujo se debe a la presión que ejerce la fase de gránulos anaeróbicos sobre el agua residual en los primeros 12 cm de altura del reactor, para luego revertirse en los siguientes 10 cm dado que las fuerzas de arrastres se hacen importantes creando los esfuerzos cortantes que inducen un giro en el flujo llevando desde la zona central hacia los costados del reactor, la mayor velocidad hacia el sector izquierdo (ver grafica línea roja) es la consecuencia de la mayor concentración de gránulos anaeróbicos en el lado izquierdo del reactor (ver figura 4-7 para los 100 seg), dado que este flujo adicional arrastra más partículas que su contraparte.

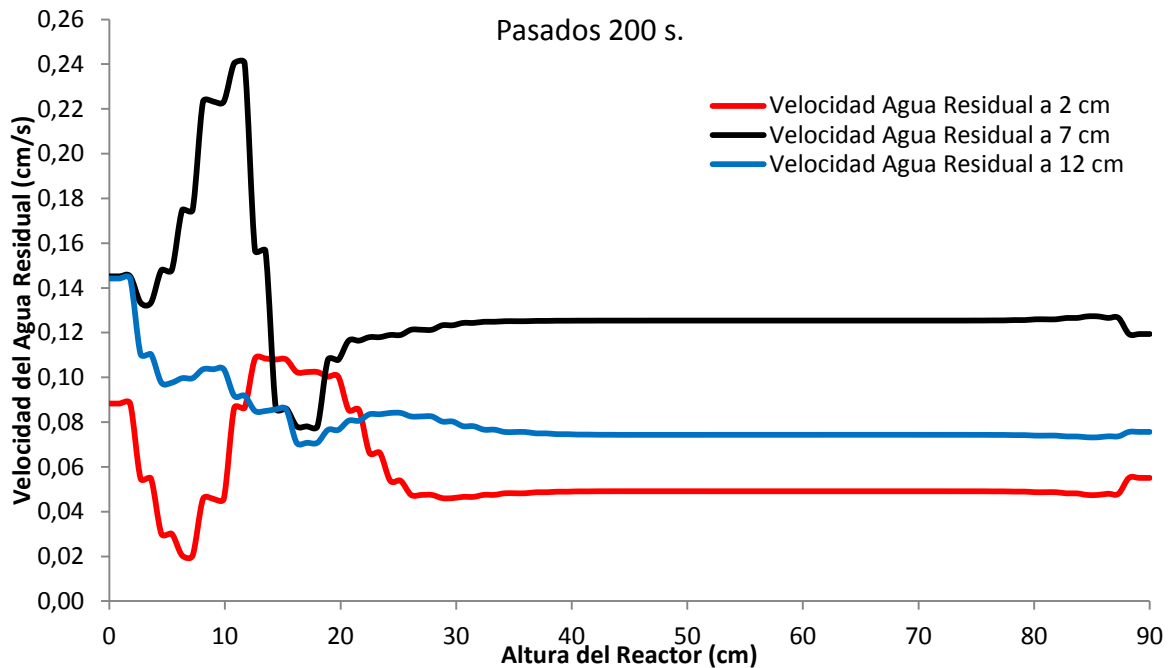


Figura 4-14: Velocidad del Agua Residual según Altura del Reactor a los 200 segundos.

En la figura 4-14 muestra que la zona de alta velocidad tiende a desplazarse, debido a que la velocidad en la zona central (ver grafica línea negra) muestra una caída del 25% de la velocidad en los primeros 5 cm de altura de reactor con respecto, y además muestra un aumento en la velocidad del costado derecho del reactor (ver grafica línea azul), mientras que el costado izquierdo no se presentan modificaciones para los primeros 12 cm de altura del reactor; para una altura superior a los 12 cm hay una tendencia equilibrarse el flujo en la dirección transversal del reactor, alcanzando un perfil de velocidad completamente desarrollado a partir de una altura de 35 cm del reactor.

La figura 4-15 muestra que la zona de alta velocidad se ha desplazado hasta el costado derecho del reactor, aunque la zona media aún tiene una cantidad importante de flujo, estas zonas de alta velocidad se presenta dentro de la zona lodos que se extiende hasta los 10 cm, y luego se observa que el perfil tiende a ser constante en la dirección transversal en la zona fangosa. Sin embargo como fue expuesto anteriormente estas zonas de altas velocidades son indeseables dado que disminuyen el tiempo de contacto entre el agua residual y los gránulos anaeróbicos reduciendo su capacidad de digestión.

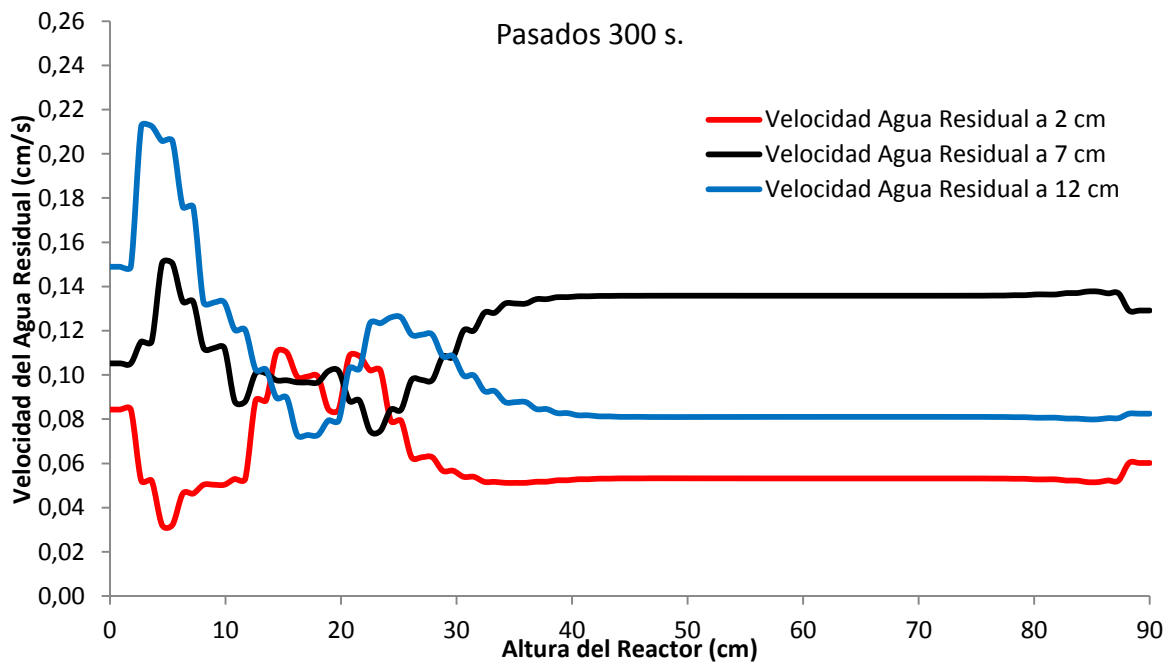


Figura 4-15: Velocidad del Agua Residual según Altura del Reactor a los 300 segundos.

En la figura 4-16 la posición de la flechas representa la posición de los gránulos anaeróbicos y su longitud la velocidad con la que esta se mueve, pasados los 300 segundos puede observarse que se establece dentro del lecho del reactor una circulación de gránulos anaeróbicos que suben por el costado derecho cruzando el reactor en dirección transversal hasta el lado derecho donde bajan hasta el fondo del reactor, recibiendo un impulso por la velocidad moderada del flujo de agua residual en la zona media depositándola en un sector de baja velocidad y de fracción volumétrica alta de gránulos anaeróbicos entre los 8 cm y 12 cm en dirección trasversal y los 4 cm y 8 cm en la dirección axial.

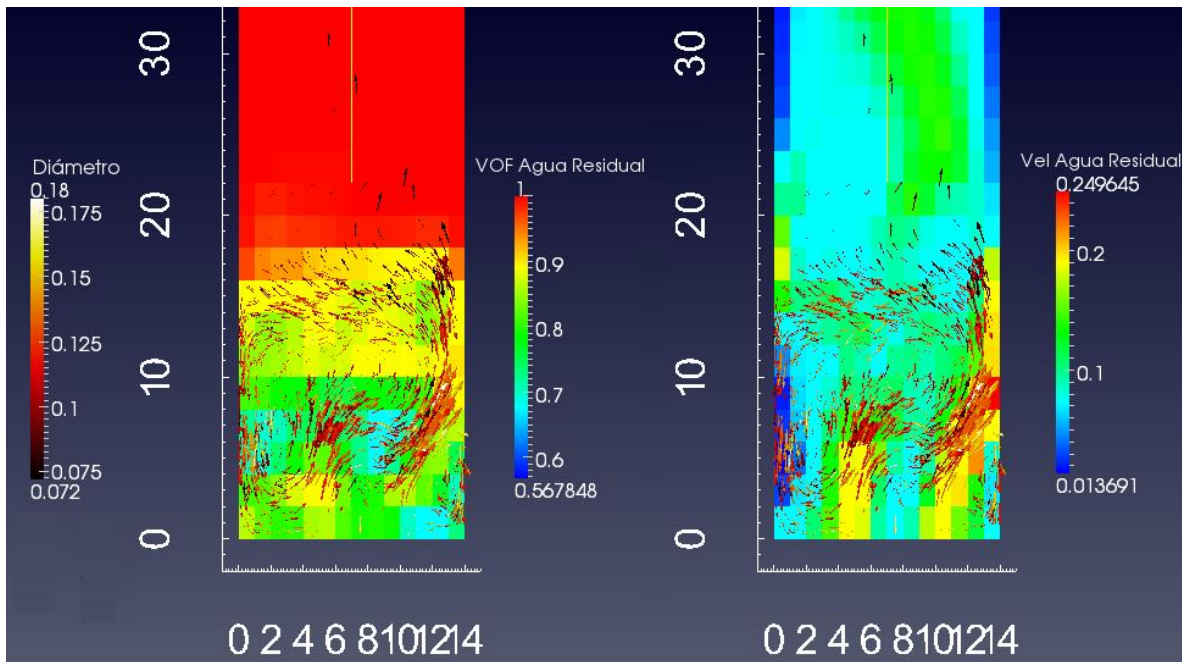


Figura 4-16: Fracción de Volumen y Velocidad del Agua Residual según Velocidad de Biopartícula a los 300 segundos.

La Figura 4-17 muestra la distribución de los gránulos anaeróbicos según su velocidad pasados los 300 segundos.

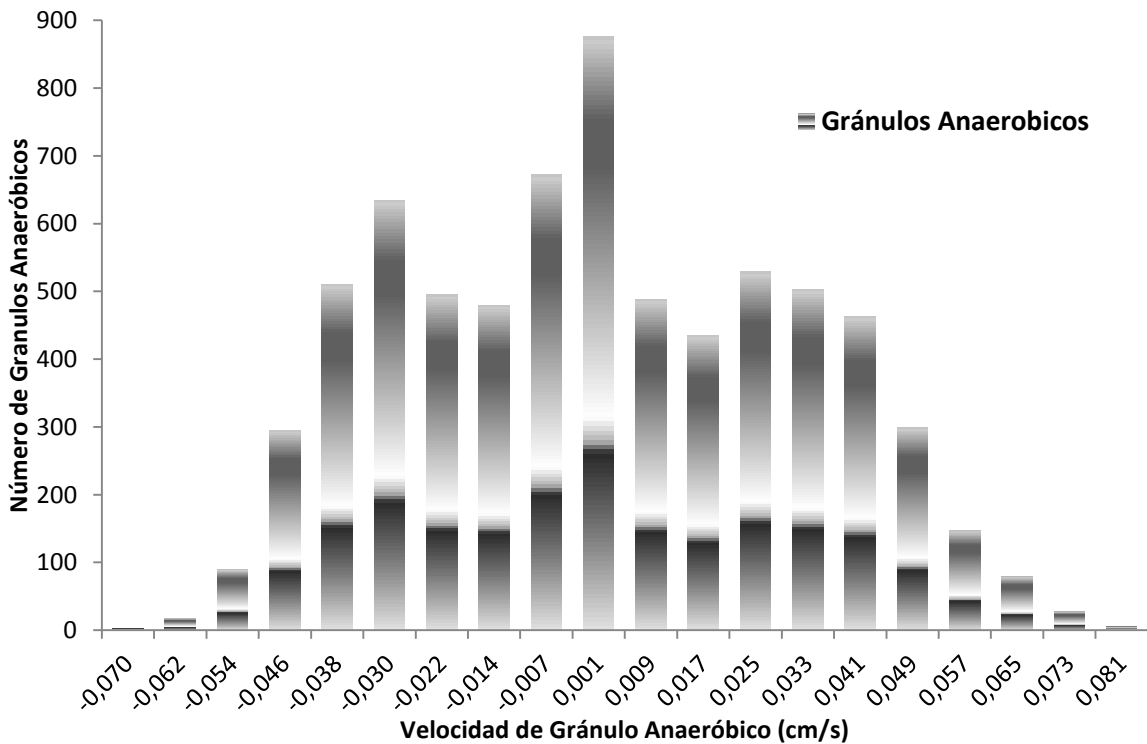


Figura 4-17: Distribución de Gránulos según su Magnitud de Velocidad a 300 segundos.

En la figura 4-17 se observa que la velocidad de los gránulos es cercana a una distribución normal alrededor de 0 cm/s de donde se puede decir que la fase de gránulos anaeróbicos permanece sin desplazamiento, debido a que su velocidad de desplazamiento de fase que corresponde a la media de esta distribución se ubica en -0,001 cm/s. siendo consecuente con el resultado de la circulación de los gránulos anaeróbicos a lo largo del lecho mostrado en la figura 4-16.

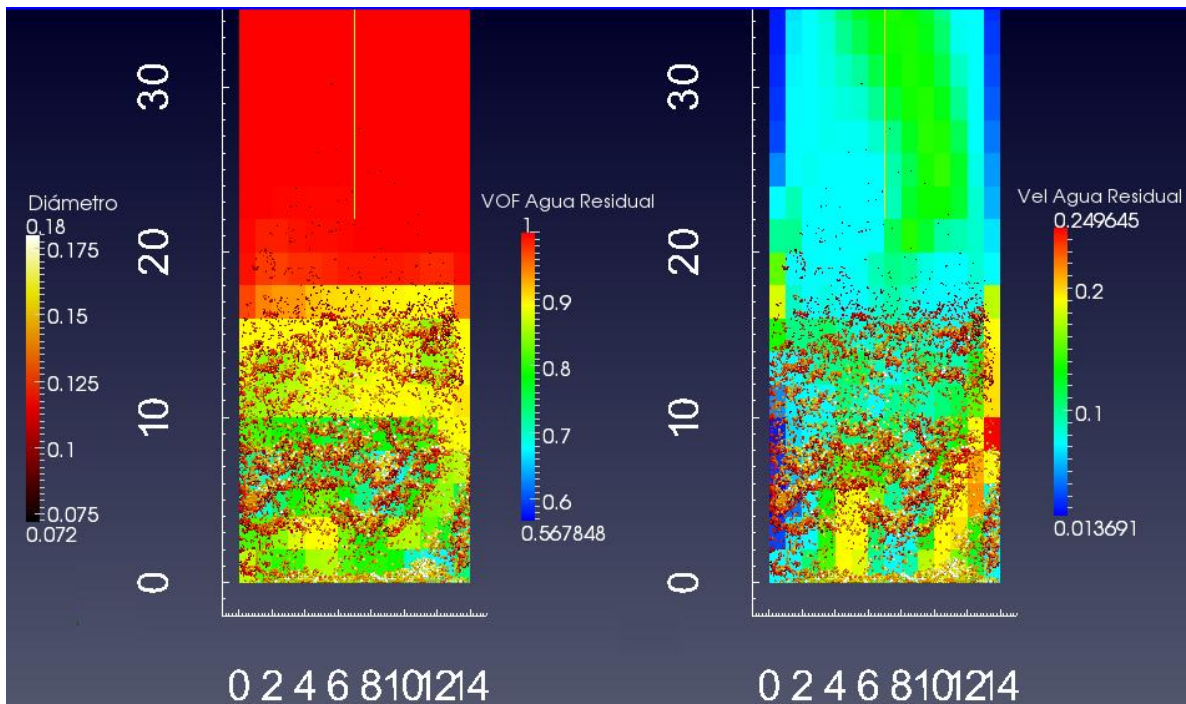


Figura 4-18: Contorno de Fracción de Volumen y Velocidad del Agua Residual según Posición de los Gránulos Anaeróbicos a los 300 segundos.

En la figura 4-18 se ilustra la ubicación de las colonias dentro del reactor respecto a los contornos de fracción volumétrica y de velocidad del agua residual, donde se muestra que las zonas de alta velocidad coinciden con zonas de poca presencia de gránulos anaeróbicos, además se puede establecer que la zona de alta velocidad se abre camino hasta la altura del lecho lo cual constituye una masa de agua que no entra en contacto con los gránulos anaeróbicos lo que constituye una condición indeseada de operación dado que esa masa de agua residual que fluye a través de este túnel es parcialmente digerida por los escasos gránulos anaeróbicos que entran en contacto con la misma,

varios autores ha introducido en el modelado de reactores anaerobio de flujo ascendente una condición de volumen muerto (Bolle et al 1986, Wu y Hickey 1997); este comportamiento del reactor se debe a el flujo de agua residual busca el camino de menor resistencia para fluir lo cual es consecuente con el principio de menor acción de Lagrange, dado que las ecuaciones bases de modelo son solución de la ecuación de Euler – Lagrange.

En la figura 4-19 se observa que el costado izquierdo del reactor procesa muy poco flujo de agua residual dada la poca cantidad de ella que flujo por esta zona; sin embargo, se aprecia que hay una gran presencia de gránulos anaeróbicos lo que supone una fuerte competencia por el poco sustrato que llega a esa zona; pasados los 15 cm empieza a llegar un poco más de agua residual pero la poca presencia de gránulos anaeróbicos hace que la materia orgánica que tenga el agua residual no sea digerida.

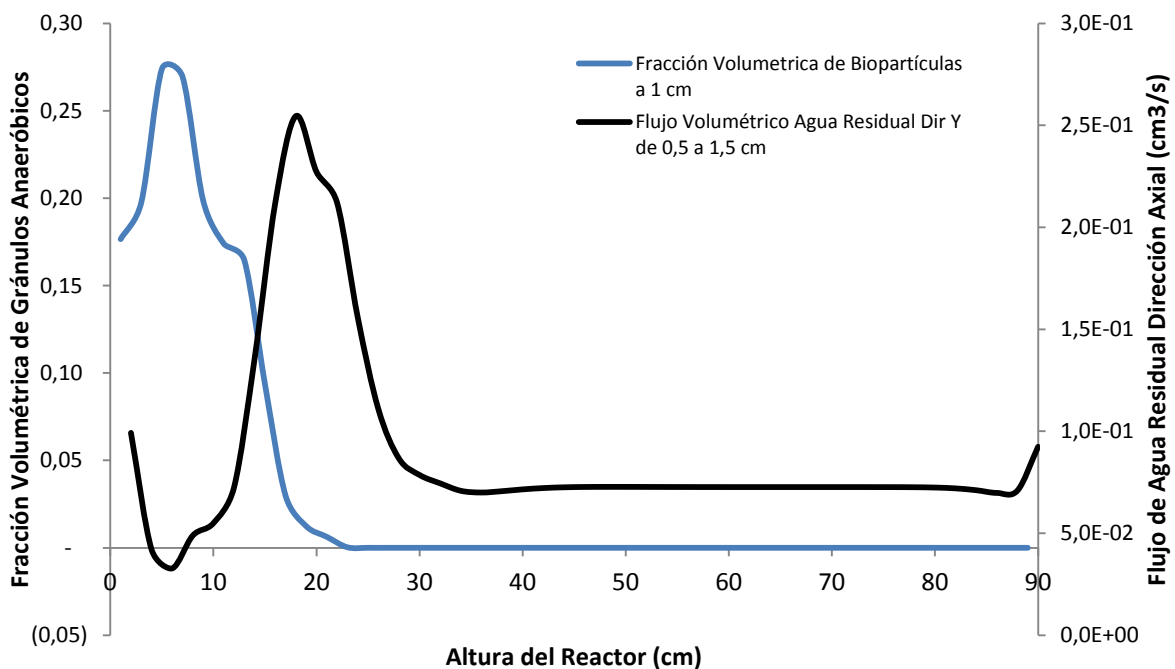


Figura 4-19: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos y Flujo de Agua Residual Axial según Altura del Reactor a 1 cm en la Dirección Trasversal a los 300 segundos.

En la figura 4-20 muestra una buena presencia de gránulos anaeróbicos y agua residual a lo largo de la altura del lecho propiciando las condiciones para que se dé la digestión de la materia orgánica contenida en el agua.

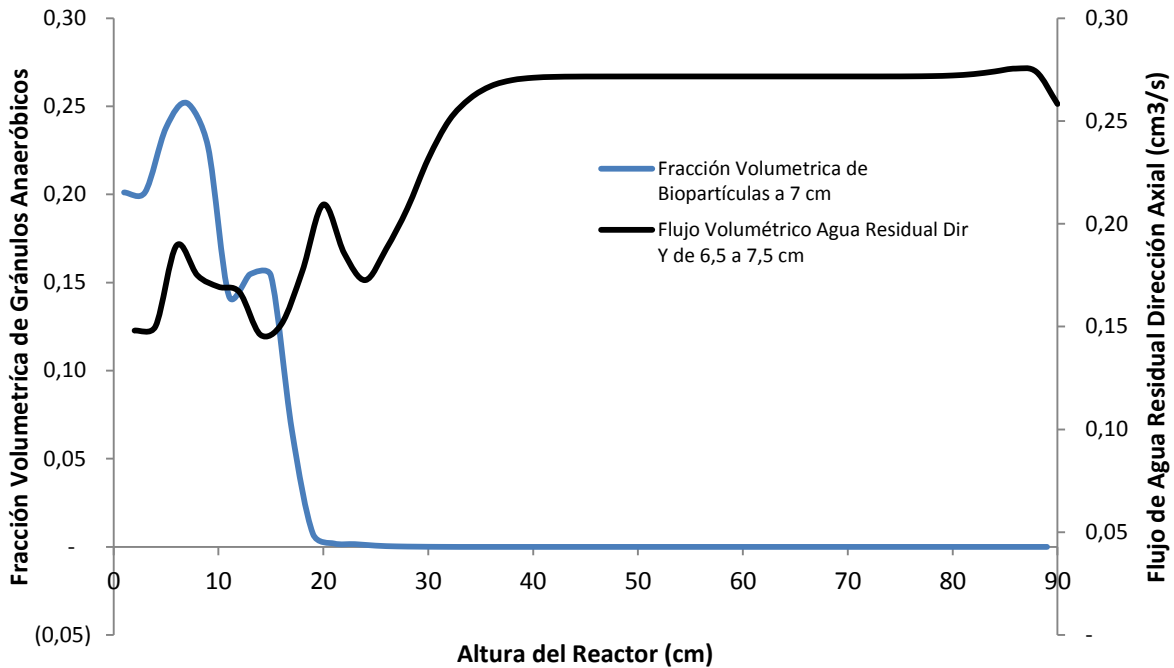


Figura 4-20: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos y Flujo de Agua Residual Axial según Altura del Reactor a 6 cm en la Dirección Trasversal a los 300 segundos.

Si siguiendo con el análisis transversal del reactor sobre el costado derecho del reactor se obtiene un comportamiento como el mostrado en la figura 4-21.

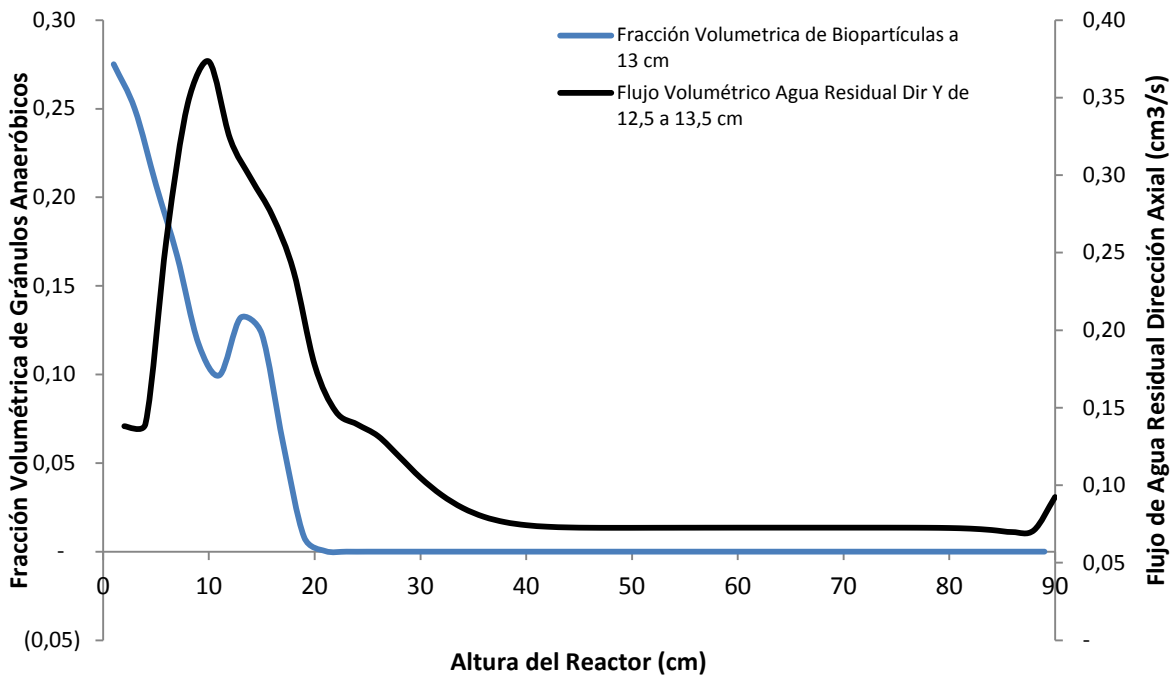


Figura 4-21: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos y Flujo de Agua Residual Axial según Altura del Reactor a 13 cm en la Dirección Trasversal a los 300 segundos.

En la figura 4-21 se indica que el costado derecho del reactor transporta una importante cantidad de flujo de agua residual, sin embargo, alcanza el menor valor de fracción de gránulos anaeróbicos por la cual se configura una zona con mucho flujo y pocas gránulos anaeróbicos, siendo esto indeseable puesto que no serán suficientes para digerir toda la materia orgánica en la zona.

4.2.5 Digestión de la Materia Orgánica

A continuación se realiza un análisis de la evolución de la digestión de la materia orgánica disuelta en el agua residual representada por la propiedad escalar ϕ pasados los 300 segundos.

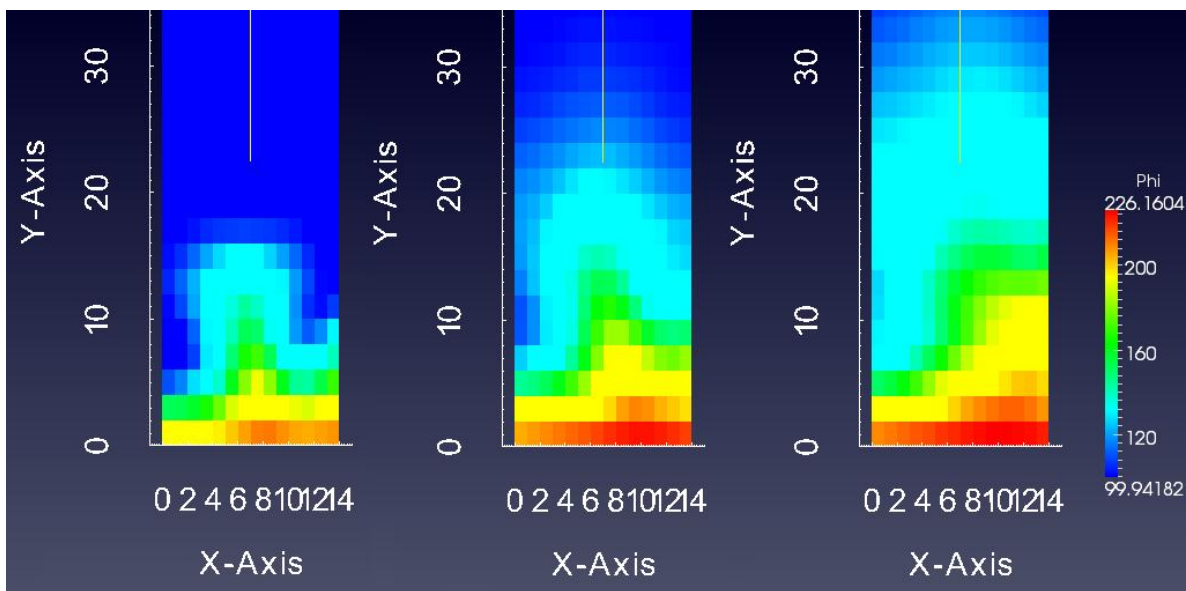


Figura 4-22: Contorno de la Digestión de la Materia Orgánica Representada por la Demanda Química de Oxígeno DQO asociada a la Propiedad ϕ , para los 100, 200 y 300 segundos.

En la figura 4-22 se ilustra como avanza el frente de digestión según avanza la simulación partiendo de un valor inicial de campo fijado en 100 mgDQO/L, el avance del frente de mayor concentración de materia orgánica esta asociado con las zonas donde se ubica la zona de mayor velocidad de flujo ver figura 4-12, y del mismo modo se puede observar un desplazamiento de la zona de mayor concentración de materia orgánica hacia el costado derecho del reactor tal como lo hace la zona de mayor velocidad indicando que el

mecanismo de transporte de mas importancia para la distribución de la materia orgánica dentro del reactor es la convección. La figura 4-21 ilustra una correspondencia entre la zona donde hay mayor flujo y las zonas de baja presencia de gránulos anaeróbicos, este comportamiento da como resultados la zona de mayor concentración que se extiende hasta los 18 cm aproximadamente hacia el costado derecho del reactor pasados los 300 segundos. Adicionalmente la figura 4-19 ilustra una correspondencia entre la zona de menor flujo y una mayor presencia de gránulos anaeróbicos lo que lleva a generar una zona de menor concentración de materia orgánica hacia el costado izquierdo entre los 5 y 18 cm. Lo anterior demuestra el carácter negativo de los gradientes de velocidad dentro del reactor puesto que no se consigue una digestión homogénea de la materia orgánica en su interior.

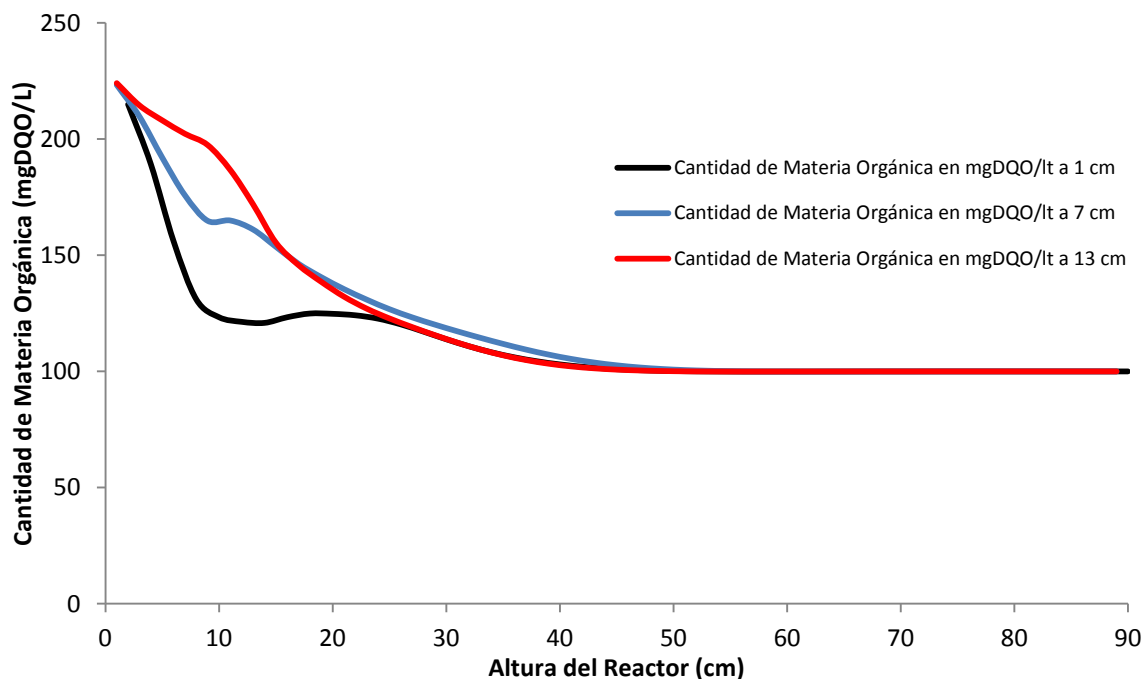


Figura 4-23: Distribución de Materia Orgánica en la Dirección Axial del Reactor.

En la figura 4-23 ilustra como se distribuye la materia orgánica dentro del reactor pasados los 300 segundos de simulación, confirmando cuantitativamente lo observado en los contornos mostrados en la figura 4-22. A esta instancia de tiempo aun no se ha alcanzado un estado estacionario para el consumo de materia orgánica, lo cual, es consecuente con las observaciones experimentales cuyos valores son superiores a 1 hora (Wu y Hickey 1997, Zeng et al. 2005 y López et al. 2009). Sin embargo, se puede decir que hay una

estratificación en la digestión de la materia orgánica dentro del reactor, puesto que, a 1 cm en la dirección transversal se aprecia la mayor disminución por unidad de longitud en dirección axial, en segunda instancia a 7 cm en la dirección transversal una disminución moderada respecto a la primera mencionada, y por ultimo a 13 cm en la dirección transversal presenta la misma tendencia mostrada a los 7 cm, sin embargo, hay una mayor presencia de materia orgánica hasta aproximadamente 15 cm donde ocurre una homogenización, adicionalmente ocurre una segunda homogenización pasados los 22 cm de altura siendo esta la altura del lecho ver figura 4-5. Estas tendencias de consumo tienen como causa el gradiente de velocidad que se produce debido a la presión de sólidos antes expuesta, y las homogenizaciones son debidas a los flujos en la dirección transversal que se deben a las mismas causas.

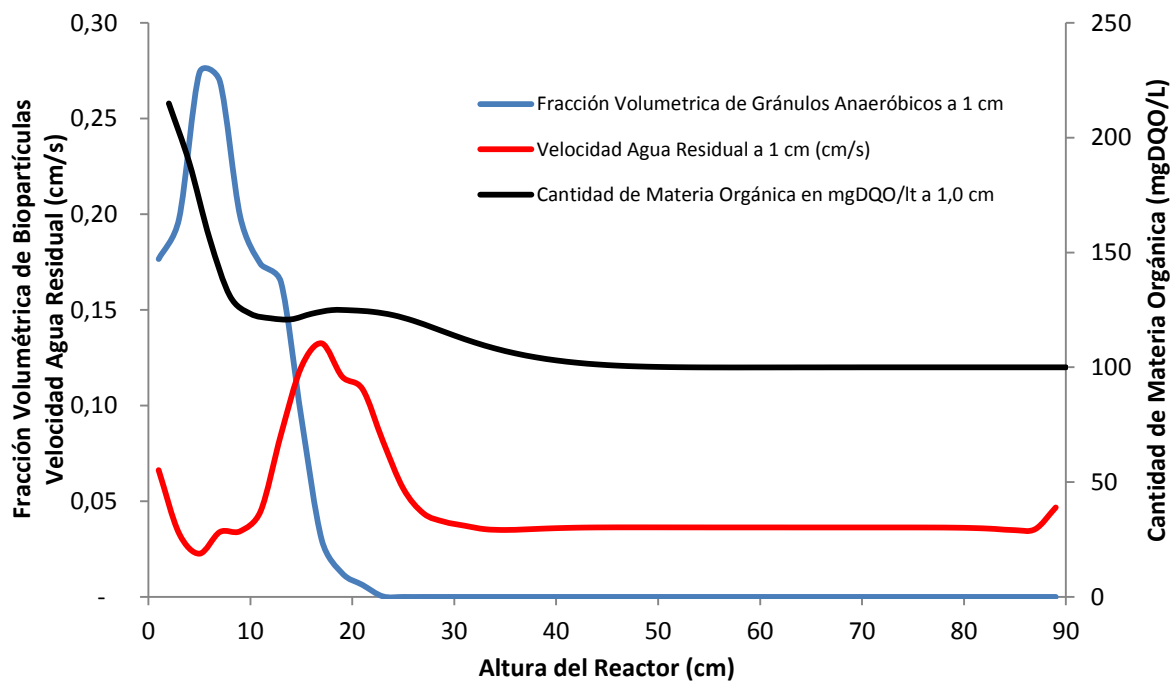


Figura 4-24: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos, Cantidad de Materia Orgánica y Velocidad del Agua Residual a 1 cm en la Dirección Transversal a los 300 segundos.

En la figura 4-24 se aprecia la baja velocidad del agua residual, lo que permite una mayor caída o consumo de la cantidad de materia orgánica transportada por el agua residual por unidad de longitud axial como se indicó anteriormente, sumado a la abundante presencia de gránulos anaeróbicos configuran el comportamiento deseable de la operación de este reactor.

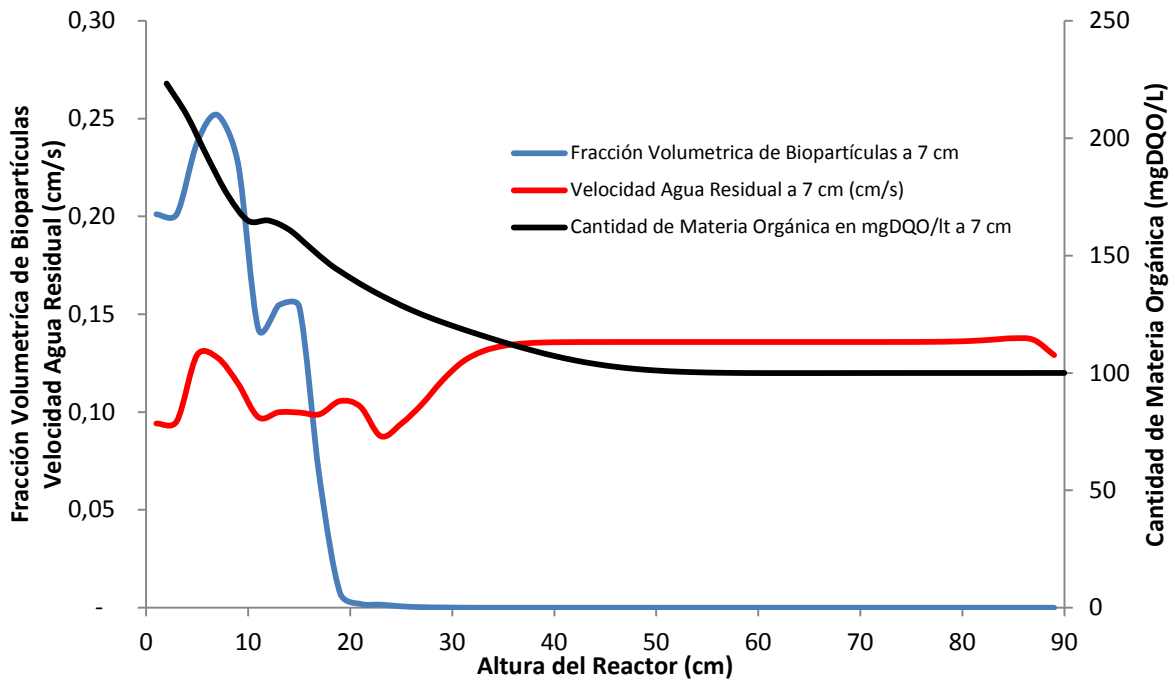


Figura 4-25: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos, Cantidad de Materia Orgánica y Velocidad del Agua Residual a 7 cm en la Dirección Transversal a los 300 seg.

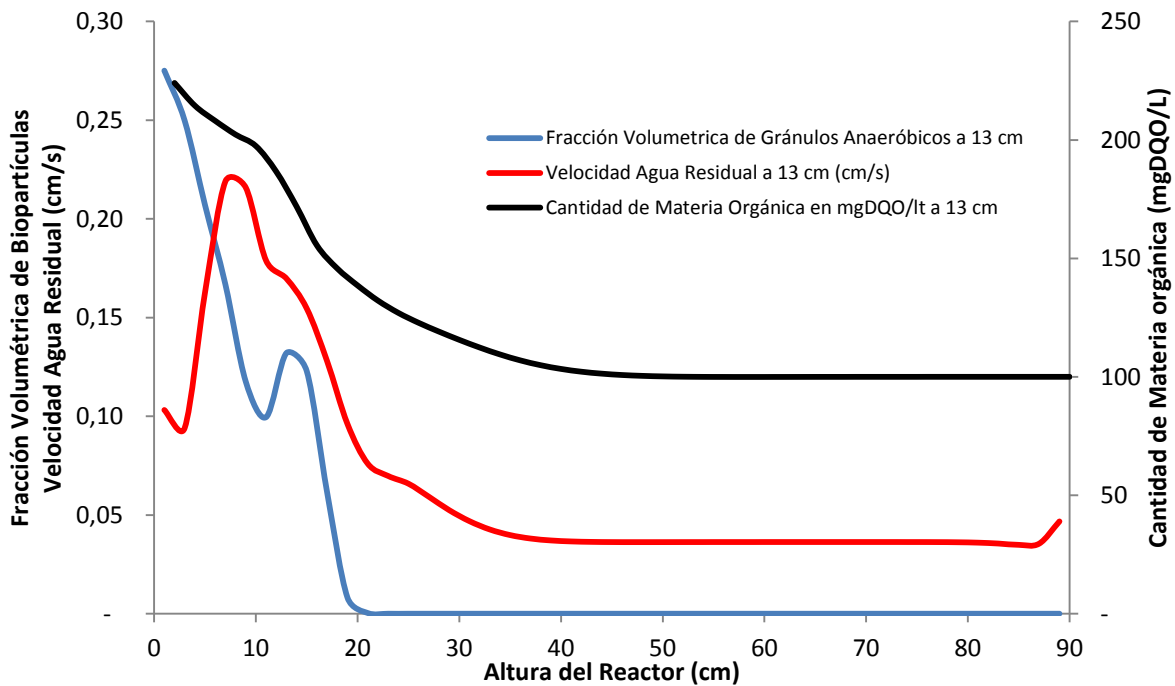


Figura 4-26: Fracción Volumétrica de Gránulos Anaeróbicos, Cantidad de Materia Orgánica y Velocidad del Agua Residual a 13 cm en la Dirección Transversal a los 300 seg.

En la figura 4-25 se observa la segunda tendencia para los 7 cm en la dirección transversal, correspondiéndole una velocidad dos veces mayor a la velocidad a la cual esta sometida la zona izquierda ver figura 4-24, y una cantidad similar de gránulos anaeróbicos, indicando claramente que la velocidad mayor es la causa de la tendencia moderada de consumo de materia orgánica.

Por ultimo la figura 4-26 ilustra un pico de velocidad alrededor de los 10 cm de altura, siendo correspondiente con la desviación que presentan las tendencias de consumo de materia orgánica a 7 cm y a 13 cm mostrada en la figura 4-23, adicionalmente corresponde también con una región de baja presencia relativa de gránulos anaeróbicos configurando el comportamiento no deseado dentro del reactor. Lo aquí expuesto indica que el campo de velocidad del agua residual tiene una incidencia muy importante en la digestión de la materia orgánica transportada por la misma, puesto que afecta la distribución de los gránulos anaeróbicos dentro del reactor y además, controla el tiempo de contacto entre los gránulos anaeróbicos y la materia orgánica disuelta siendo estos los que catalizan la degradación de la misma, donde su mejor desempeño se da a bajas velocidades.

5. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

5.1 Conclusiones

Los intentos de modelar el comportamiento de los reactores de biopelículas por los distintos autores encontrados en la bibliografía disponible, no tienen en cuenta la hidrodinámica del reactor, y aproximan el resultado de sus modelos mezclando varios modelos ideales de reactores agitados (CSTR).

Los reactores de flujo ascendente de biopelícula alcanzan un estado cuasi – estacionario rápidamente en su hidrodinámica en contraste con el tiempo en que alcanza dicho estado reportado por la literatura, siendo esto producto de la alta complejidad que tienen las reacciones bioquímicas que se producen dentro del mismo.

El movimiento de los gránulos anaeróbicos que se establece dentro del reactor, gracias al arrastre que causa el flujo ascendente crea una tendencia a la segregación de las partículas según su tamaño, estas las de mayor tamaño hacia el fondo y las de menor tamaño hacia la parte superior del lecho, lo cual, es benéfico para establecer el punto de purga de los lodos formados por los gránulos anaeróbicos de mayor edad siendo estas las de mayor tamaño.

El campo de flujo del agua residual presenta zonas de baja velocidad lo cual es producido por la presión de que ejercen los gránulos anaeróbicos, estos puntos de baja velocidad y alta densidad de gránulos anaeróbicos son puntos no deseados dentro del reactor debido a que no llegan suficiente materia orgánica para alimentar a las mismas y producir su degradación.

La presión que ejerce los gránulos anaeróbicos sobre el flujo de agua residual hace que este genere burbujas de agua residual que se abren paso hasta la parte superior del lecho sin entrar en contacto con los gránulos anaeróbicos y por ende no es digerida la materia orgánica que esta transporta.

El campo de velocidad del agua residual juega un papel fundamental en la distribución de los gránulos anaeróbicos dentro del reactor, donde se establece una competencia entre la presión de los solidos impulsado por la fuerza de gravedad como fuerza de cuerpo que actúa sobre los gránulos y el arrastre generado por la velocidad ascendente del agua residual.

Las zonas de alta velocidad desplazan los gránulos anaeróbicos creando burbujas de agua residual lo que reduce la capacidad de digestión de los mismos.

Los gradientes de velocidad que se generan en el agua residual impactan la digestión de la materia orgánica, siendo un impacto positivo en las zonas de baja velocidad y un impacto negativo en las zonas de alta velocidad dado que este campo controla el tiempo de contacto de la materia orgánica con los gránulos anaeróbicos que catalizan la digestión.

El modelado del reactor de flujo ascendente de biopelícula por el Método de Elementos Discretos (DEM), permite identificar los puntos críticos donde se conjugan las bajas velocidades con las altas densidades de gránulos anaeróbicos y viceversa, en contraposición con el modelado por combinación de reactores ideales (CSTR) presentados en la literatura.

El Método de Elementos Discretos (DEM) acoplado con un modelo Euleriano de la fase de agua residual permite estudiar la alta complejidad del campo de flujo que se producen dentro de un reactor de flujo ascendente de biopelícula, debido a la presencia de diferentes tamaños de gránulos anaeróbicos.

El Método de Elementos Discretos (DEM) abre la puerta para estudiar los fenómenos complejos que se producen alrededor de la biopartícula como es la transferencia de

nutrientes desde el agua residual hacia la misma, y como se transportan los nutrientes dentro del gránulo anaeróbico (Colonia de Bacterias).

5.2 Trabajos Futuros

Durante el estudio y elaboración de este trabajo, se fueron generando las siguientes inquietudes que pueden ser planteadas y/o abordadas en trabajos subsecuentes con el fin de mejorar la comprensión de los fenómenos que dentro un reactor de biopelícula ocurren.

Las colonias de bacterias que conforman los gránulos anaeróbicos tienen un comportamiento dinámico de crecimiento y muerte, creando una dependencia del diámetro de los gránulos con el tiempo debido al crecimiento bacteriano, esto crea el efecto observado de crecimiento de la masa de lodos activos en el reactor, siendo estos la sumas de todos gránulos anaeróbicos, lo que lleva a crear algoritmos que soporten la variabilidad del diámetro de las partículas dispersas presentes en un flujo multifase.

Realizar experimentación sobre los gránulos para determinar sus propiedades mecánicas e hidrodinámicas que permitan hacer del modelo planteado más ajustado a las condiciones reales de operación.

Realizar la paralelización del código usado para las simulaciones con miras a disminuir los tiempos de simulación lo que permitiría la inclusión de mayor número de partículas dentro del reactor y realizar modelos con volúmenes más grandes.

Desarrollar algoritmos que permitan la coexistencia en la simulación de más de dos fases cuyas densidades sean diferentes, esto es, simular flujos multifases con fases líquidas, sólidas y gaseosas.

Desarrollar un modelo de biopelícula que permita conocer los mecanismos que se producen al interior de los gránulos anaeróbicos.

Acoplar el modelo hidrodinámico, el modelo de biopelícula con el modelo bioquímico que incluye los mecanismos de reacción con más de 40 compuestos intermedios desarrollado por Bastone et al., 2002, denominado Anaerobic Digestión Model ADM No1, con el fin de darle una comprensión completa a los fenómenos que ocurren dentro del reactor.

A. Anexo: Archivo de Entrada para la Aplicación Solución del Modelo

Nombre del Archivo /Caso1.dat

```
! Upflow Anaerobic Sludge Blanket
! DES for solid phase with Soft Sphere Model
! Inlet with uniform velocity

! Run-control section
RUN_NAME           = 'UASB'
DESCRIPTION        = 'FINAL SIMULATION'
RUN_TYPE          = 'NEW'
UNITS              = 'cgs'
TIME              = 0.0           !start time
TSTOP             = 300.0
DT                = 5E-4         !time step
DT_MAX            = 1E-3
NScalar           = 1
Phase4Scalar(1)  = 0
Call_usr          = .True.

! DT_FAC = 1.0

ENERGY_EQ         = .FALSE.      !do not solve energy eq
SPECIES_EQ(0)     = .FALSE.      !do not solve species eq
SPECIES_EQ(1)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(2)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(3)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(4)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(5)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(6)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(7)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(8)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(9)     = .FALSE.
SPECIES_EQ(10)    = .FALSE.

MOMENTUM_X_EQ(1) = .FALSE.
MOMENTUM_Y_EQ(1) = .FALSE.
```

```
MOMENTUM_Z_EQ(1) = .FALSE.  
DRAG_TYPE = 'SYAM_OBRIEN'
```

```
GRAVITY = 980
```

```
MAX_NIT = 250  
TOL_RESID = 1.E-3
```

```
! Geometry Section
```

```
COORDINATES = 'cartesian'  
XLENGTH = 14.0 !X length  
IMAX = 14 !cells in i direction  
YLENGTH = 90.0 !height  
JMAX = 45 !cells in j direction  
NO_K = .TRUE. !2D, no k direction  
DZ(1) = 0.18D0 !Define DZ to be particle  
!for 2D DEM cases
```

```
! Gas-phase Section
```

```
MU_g0 = 0.903E0 !constant gas viscosity  
RO_g0 = 997.95E-3 !constant gas density
```

```
! Solids-phase Section
```

```
MMAX = 10  
RO_s(1) = 1.070 !solids density  
RO_s(2) = 1.070 !solids density  
RO_s(3) = 1.070 !solids density  
RO_s(4) = 1.070 !solids density  
RO_s(5) = 1.070 !solids density  
RO_s(6) = 1.070 !solids density  
RO_s(7) = 1.070 !solids density  
RO_s(8) = 1.070 !solids density  
RO_s(9) = 1.070 !solids density  
RO_s(10) = 1.070 !solids density  
D_p0(1) = 0.0720 !particle diameter  
D_p0(2) = 0.0840 !particle diameter  
D_p0(3) = 0.0960 !particle diameter  
D_p0(4) = 0.1080 !particle diameter  
D_p0(5) = 0.1200 !particle diameter  
D_p0(6) = 0.1320 !particle diameter  
D_p0(7) = 0.1440 !particle diameter  
D_p0(8) = 0.1560 !particle diameter  
D_p0(9) = 0.1680 !particle diameter  
D_p0(10) = 0.1800 !particle diameter  
C_f = 0.30  
e = 0.8 !restitution coefficient
```

```

Phi          = 30.0          !angle of internal friction
EP_star     = 0.42          !void fraction at minimum
                                ! fluidization

! Initial Conditions Section
  ! 1. bed
IC_X_w(1)   = 0.0           !domain
IC_X_e(1)   = 14.0          ! 0 < x < 15, 0 < y < 30
IC_Y_s(1)   = 0.0
IC_Y_n(1)   = 90.0
                                ! initial values in the region
IC_EP_g(1)  = 1.00         ! void fraction
IC_U_g(1)   = 0.0           ! x-dir gas velocity
IC_V_g(1)   = 0.0230      ! y-dir gas velocity
IC_X_g(1,1) = 1.0
IC_Scalar(1,1) = 100

IC_U_s(1,1) = 0.0
IC_V_s(1,1) = 0.0

! Boundary Conditions Section
! 1. Central jet
BC_X_w(1)   = 0.0           ! central jet
BC_X_e(1)   = 14.0          ! 7 < x < 8, y = 0
BC_Y_s(1)   = 0.0
BC_Y_n(1)   = 0.0
BC_TYPE(1)  = 'MI'          !specified mass inflow

BC_EP_g(1)  = 1.0
BC_U_g(1)   = 0.0
BC_V_g(1)   = 0.09         !inlet vel
BC_P_g(1)   = 0.0
BC_Scalar(1,1) = 237.5

! 1. Secondary flow 1
! BC_X_w(2)   = 0.0
! BC_X_e(2)   = 6.0
! BC_Y_s(2)   = 0.0
! BC_Y_n(2)   = 0.0
! BC_TYPE(2)  = 'MI'          !specified mass inflow!!!
!
! BC_EP_g(2)  = 1.0
! BC_U_g(2)   = 0.0
! BC_V_g(2)   = 0.0
! BC_P_g(2)   = 0.0
! BC_Scalar(2,1) = 0.0
!
! 1. Secondary flow 2

```

```

! BC_X_w(3)           = 8.0
! BC_X_e(3)           = 14.0
! BC_Y_s(3)           = 0.0
! BC_Y_n(3)           = 0.0
! BC_TYPE(3)          = 'MI'           !specified mass inflow

! BC_EP_g(3)          = 1.0
! BC_U_g(3)           = 0.0
! BC_V_g(3)           = 0.0
! BC_P_g(3)           = 0.0
! BC_Scalar(3,1)      = 0.0

      ! 2. Exit
BC_X_w(4)              = 0.0           ! top exit
BC_X_e(4)              = 14.0         ! 0 < x < 15, y = 90
BC_Y_s(4)              = 90.0
BC_Y_n(4)              = 90.0
BC_TYPE(4)             = 'PO'        !specified pressure outflow
BC_P_g(4)              = 0.0

! DES INPUT
DISCRETE_ELEMENT = .TRUE.
DES_CONTINUUM_COUPLED = .TRUE.
DES_INTERP_ON = .TRUE.
WALLDTSPLIT = .TRUE.
NFACTOR = 500           ! length of dem settling period in no.
of loops

DIMN = 2
PARTICLES = 7050

KN = 1.0d+5             ! Normal inter-particle collision
spring constant
KT_FAC = @(2/5)         ! Tangential spring factor = KT/KN
MEW = 0.1               ! Inter-particle friction coefficient
KN_W = 1.0d+5           ! Normal particle-wall collision spring
constant
KT_W_FAC = @(2/5)      ! Tangential spring factor = KT_W/KN_W
MEW_W = 0.1            ! Particle-wall friction coefficient
DES_EN_INPUT(1) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(2) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(3) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(4) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(5) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(6) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(7) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(8) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(9) = 0.8  ! particle-particle rest coef
DES_EN_INPUT(10) = 0.8 ! particle-particle rest coef

```



```

DES_EN_WALL_INPUT(7) = 0.9    ! particle-wall rest coef
DES_EN_WALL_INPUT(8) = 0.9    ! particle-wall rest coef
DES_EN_WALL_INPUT(9) = 0.9    ! particle-wall rest coef
DES_EN_WALL_INPUT(10) = 0.9   ! particle-wall rest coef
DES_ETAT_FAC = @(1/2)        ! damping coefficient factor =
ETAT/ETAN
DES_ETAT_W_FAC = @(1/2)      ! damping coefficient factor =
ETAT_W/ETAN_W

DES_NEIGHBOR_SEARCH = 4      !1=n-square; 2=quadtrees; 3=octree;
4=grid-based
NEIGHBOR_SEARCH_N = 20
MN = 20                      ! Maximum number of neighbors allowed
per particle

PRINT_DES_DATA = .T.

! Output Control
!
OUT_DT      = 10.00          !write text file BUB01.OUT
                                ! every 0.1s
RES_DT      = 0.01          !write binary restart file
                                ! BUB01.RES every 0.01 s
NLOG        = 25            !write logfile BUB01.LOG
                                !every 25 time steps
FULL_LOG    = .TRUE.       !display residuals on screen

RESID_STRING = 'P0' 'U0' 'V0' 'S001'

! Output Control DES
! DES_RES_DT      = 0.5
! DES_SPX_DT      = 0.5
! DEBUG_DES       = .TRUE.

!SPX_DT values determine how often SPx files are written. Here
UASB.SP1, which
!contains void fraction (EP_g), is written every 0.01 s, UASB.SP2,
which contains
! gas and solids pressure (P_g, P_star), is written every 0.1 s,
and so forth.
!
!           ! EP_g P_g      U_g  U_s  ROP_s      T_g  X_g
!           !           P_star V_g  V_s           T_s  X_s      Theta
Scalar
!           !           W_g  W_s
SPX_DT = 0.2 10.2 0.2 101. 100. 100. 100. 100.0 0.2 100.
100.

```

! The decomposition in I, J, and K directions for a Distributed
Memory Parallel machine

NODESI = 1 NODESJ = 1 NODESK = 1

! Sweep Direction

LEQ_SWEEP(1) = 'ISIS'
LEQ_SWEEP(2) = 'ISIS'
LEQ_SWEEP(3) = 'ISIS'
LEQ_SWEEP(4) = 'ISIS'
LEQ_SWEEP(5) = 'ISIS'
LEQ_SWEEP(6) = 'ISIS'
LEQ_SWEEP(7) = 'ISIS'
LEQ_SWEEP(8) = 'ISIS'
LEQ_SWEEP(9) = 'ISIS'

B. Anexo: Tabla de Relación de Diámetros para los 10 Tamaños de Gránulos Anaeróbicos

	dp1	dp2	dp3	dp4	dp5	dp6	dp7	dp8	dp9	dp10
dp1	1,0	1,2	1,3	1,5	1,7	1,8	2,0	2,2	2,3	2,5
dp2	1,2	1,0	1,1	1,3	1,4	1,6	1,7	1,9	2,0	2,1
dp3	1,3	1,1	1,0	1,1	1,3	1,4	1,5	1,6	1,8	1,9
dp4	1,5	1,3	1,1	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,6	1,7
dp5	1,7	1,4	1,3	1,1	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4	1,5
dp6	1,8	1,6	1,4	1,2	1,1	1,0	1,1	1,2	1,3	1,4
dp7	2,0	1,7	1,5	1,3	1,2	1,1	1,0	1,1	1,2	1,3
dp8	2,2	1,9	1,6	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	1,1	1,2
dp9	2,3	2,0	1,8	1,6	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	1,1
dp10	2,5	2,1	1,9	1,7	1,5	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0

BIBLIOGRAFÍA

- Batstone, D. 2001. «Variation of bulk properties of anaerobic granules with wastewater type». *Water Research* 35 (7) (mayo): 1723–1729.
- Bird, R. 2006. *Fenómenos de transporte*. 2a ed. México: Limusa Wiley.
- Bolle, W L, J van Breugel, G C van Eybergen, N W Kossen, y W van Gils. 1986. «An integral dynamic model for the UASB reactor». *Biotechnology and Bioengineering* 28 (11) (noviembre): 1621–1636.
- Boyalakuntla, Dhanunjay S. 2003. «Simulation of granular and gas-solid flows using discrete element method». Carnegie Mellon University.
- Campbell, E B, M L Hayward, y O W Griffith. 1991. «Analytical and preparative separation of the diastereomers of L-buthionine (SR)-sulfoximine, a potent inhibitor of glutathione biosynthesis». *Analytical Biochemistry* 194 (2) (mayo 1): 268–277.
- Cheremisinoff, Nicholas. 2006. *Handbook of water and wastewater treatment technologies*. Boston :: Butterworth-Heinemann,.
- Connaughton, S, G Collins, y V Oflaherty. 2006. «Psychrophilic and mesophilic anaerobic digestion of brewery effluent: A comparative study». *Water Research* 40 (13) (julio): 2503–2510.
- Crowe, C. T. 2006. *Multiphase flow handbook*. Boca Raton, FL: CRC : Taylor & Francis.
- Cundall, P. A., y O. D. L. Strack. 1979. «A discrete numerical model for granular assemblies». *Géotechnique* 29 (1) (enero 3): 47–65.
- Dhawale, M R, y E H Creaser. 1975. «Analysis of an L-histidinol-utilizing mutant of *Pseudomonas aeruginosa*». *Journal of General Microbiology* 91 (2) (diciembre): 241–248.
- Drinan, Joanne. 2001. *Water & wastewater treatment : a guide for the nonengineering professional*. Lancaster Pa.: Technomic Pub. Co.
- Forbes, C., D. Hughes, J. Fox, P. Ryan, y E. Colleran. 2010. «High-rate anaerobic degradation of 5 and 6 carbon sugars under thermophilic and mesophilic

- conditions». *Bioresource Technology* 101 (11) (junio): 3925–3930.
- Frenkel, Daan. 2002. *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. 2nd ed. San Diego: Academic Press.
- Garg, R., J. Galvin, T. Li, y S. Pannala. 2010. «Documentation of open-source MFIX–DEM software for gas-solids flows». Oak Ridge National Laboratory.
- Haandel, Adrianus. 1994. *Anaerobic sewage treatment: a practical guide for regions with a hot climate*. Chichester ;New York: J. Wiley.
- Horiuchi, J. 2001. «Modeling of pH response in continuous anaerobic acidogenesis by an artificial neural network». *Biochemical Engineering Journal* 9 (3) (diciembre): 199–204.
- International Association on Water Quality. 2002. *Anaerobic digestion model no. 1*. London: IWA Publishing.
- López, Iván, Mauricio Passeggi, Alejandro Pedezert, y Liliana Borzacconi. 2009. «Assessment on the performance of a series of two UASB reactors compared against one of the same total volume using Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1)». *Water Science & Technology* 59 (febrero): 647.
- Mara, D. 2004. *Domestic wastewater treatment in developing countries*. London ;Sterling VA: Earthscan Publications.
- Narnoli, S.K., y Indu Mehrotra. 1997. «Sludge blanket of UASB reactor: Mathematical simulation». *Water Research* 31 (4) (abril): 715–726.
- Nicolella, Cristiano, Mark C.M. van Loosdrecht, y Sef J. Heijnen. 2000. «Particle-based biofilm reactor technology». *Trends in Biotechnology* 18 (7) (julio): 312–320.
- Ojha, C. S. P., y R. P. Singh. 2002. «Flow Distribution Parameters in Relation to Flow Resistance in an Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactor System». *Journal of Environmental Engineering* 128 (2): 196.
- Ortega, N. 2002. *Phosphorus Precipitation in Anaerobic Digestion Process*. Valencia;; España: Dissertation.com.
- Pinho, Samantha Cristina, Suzana Maria Ratusznei, José Alberto Domingues Rodrigues, Eugenio Foresti, y Marcelo Zaiat. 2004. «Influence of the agitation rate on the treatment of partially soluble wastewater in anaerobic sequencing batch biofilm reactor». *Water Research* 38 (19) (noviembre): 4117–4124.
- Pruden, B.B., y N. Epstein. 1964. «Stratification by size in particulate fluidization and in hindered settling». *Chemical Engineering Science* 19 (9) (septiembre): 696–700.

- Reddy, Rupesh K., y Jyeshtharaj B. Joshi. 2009. «CFD modeling of solid–liquid fluidized beds of mono and binary particle mixtures». *Chemical Engineering Science* 64 (agosto): 3641–3658.
- Romeo, Tony. 2008. *Bacterial biofilms*. Berlin :: Springer,.
- Saravanan, V, y T Sreekrishnan. 2006. «Modelling anaerobic biofilm reactors—A review». *Journal of Environmental Management* 81 (1) (octubre): 1–18.
- Silbert, Leonardo, Deniz Ertas, Gary Grest, Thomas Halsey, Dov Levine, y Steven Plimpton. 2001. «Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology». *Physical Review E* 64 (5) (octubre). doi:10.1103/PhysRevE.64.051302.
- Singhal, A., J. Gomes, V.V. Praveen, y K.B. Ramachandran. 1998. «Axial Dispersion Model for Upflow Anaerobic Sludge Blanket Reactors». *Biotechnology Progress* 14 (4) (agosto): 645–648.
- Syamlal, M, W Rogers, y T O'Brien. 1993. «MFIX Documentation - Theory Guide». Office of Fossil Energy - U.S. Department of Energy.
- Versteeg, Henk. 1995. *An introduction to computational fluid dynamics : the finite volume method*. Essex: Longman scientific and technical.
- Wu, Jing, Hong-ming Zhou, Huai-zhi Li, Peng-cheng Zhang, y Jie Jiang. 2009. «Impacts of hydrodynamic shear force on nucleation of flocculent sludge in anaerobic reactor». *Water Research* 43 (12) (julio): 3029–3036.
- Wu, May M., y Robert F. Hickey. 1997. «Dynamic Model for UASB Reactor Including Reactor Hydraulics, Reaction, and Diffusion». *Journal of Environmental Engineering* 123 (3): 244.
- Zeng, Y., S.J. Mu, S.J. Lou, B. Tartakovsky, S.R. Guiot, y P. Wu. 2005. «Hydraulic modeling and axial dispersion analysis of UASB reactor». *Biochemical Engineering Journal* 25 (2) (septiembre): 113–123. doi:10.1016/j.bej.2005.04.024.