



## Modelación CFD multifase en un reactor UASB en condiciones de flujo laminar y turbulento.

R. Cante-Ríos<sup>a</sup>, H. Rodríguez-Pantano<sup>b</sup>, L. F. Gutiérrez Marcantoni<sup>c\*</sup>

<sup>a</sup> M. I.- Magister en Ingeniería - Recursos Hidráulicos. Universidad Nacional de Colombia

<sup>b</sup> M. I.- Magister en Ingeniería - Mecánica. Universidad ECCI Colombia.

<sup>c</sup> Ph. D -Doctor of Engineering Sciences - Universidad Nacional de Córdoba.

### TEMATICAS DE INTERES

- La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) permite predecir el comportamiento de los fluidos y los hidrosistemas.
- Los Reactores tipo UASB son sistemas de tratamiento de agua residual, ampliamente usados en Latinoamérica y Colombia.
- El análisis de flujos multifase permite una mejor comprensión de la hidráulica de los reactores UASB.
- El entendimiento de los fenómenos hidráulicos de los reactores UASB, permite optimizar los procesos de tratamiento y disminuir el impacto en el ambiente producido por el agua residual.

### INFORMACIÓN DEL ARTICULO

#### Palabras Clave:

Dinámica De fluidos Computacional (CFD).

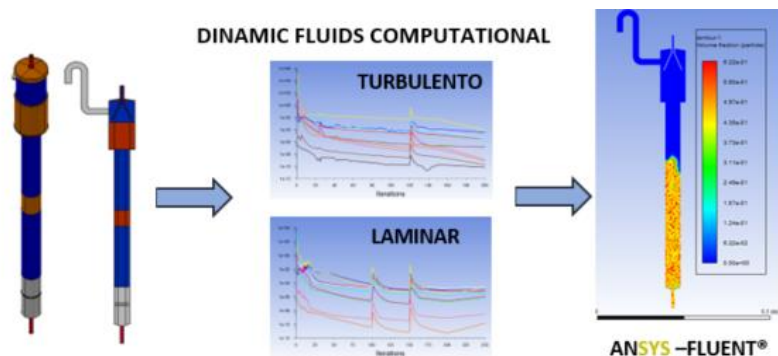
Reactor Anaerobio de flujo ascendente (UASB),

Flujo Multifase

Agua Residual y ambiente.

Flujo turbulento y laminar.

### RESUMEN GRAFICO



### RESUMEN

El presente artículo muestra los resultados de la modelación hidrodinámica en condiciones de flujo laminar y turbulento para un reactor anaerobio de flujo ascendente UASB a escala de laboratorio. El estudio numérico bidimensional se realizó en el software Ansys®. La metodología empleada cuenta con cinco etapas: a) Modelo conceptual, b) Modelo matemático, c) Convergencia de malla y definición de geometría, d) Simulación de flujo laminar y turbulento y e) Análisis Comparativo de la velocidad. El proceso de modelación empleó un enfoque Euleriano – Euleriano, caracterizado por tres fases: líquida ( $\alpha$ ), gas ( $\beta$ ) y sólida ( $\chi$ ), esta última concerniente al lecho fluidizado. La descripción del flujo turbulento se realizó a partir del modelo  $k - \epsilon$ . Para validar el estudio numérico, se usaron datos experimentales de la velocidad de salida de agua del reactor y el cálculo del Índice de convergencia de malla IGC. Del análisis comparativo de los valores de los perfiles de velocidad calculados, se observa que si bien existen diferencias en los valores de la velocidad predichos por los dos modelos de viscosidad evaluados. Dichas diferencias no son significativas y por ende la representación de este tipo de hidrosistemas se puede realizar usando enfoques de flujo laminar o turbulento.

\* Corresponding author.

## ABSTRACT

This article shows the results of the hydrodynamic modelling in laminar and turbulent flow conditions for a UASB up flow anaerobic reactor at laboratory scale. The two-dimensional numerical study was performed using the Ansys® software. The methodology used has five stages: a) Conceptual model, b) Mathematical model, c) Mesh convergence and geometry definition, d) Simulation of laminar and turbulent flow and e) Comparative analysis of velocity. The modelling process used an Eulerian-Eulerian approach, characterized by three phases: liquid ( $\alpha$ ), gas ( $\beta$ ) and solid ( $\chi$ ), the latter concerning the fluidized bed. The description of the turbulent flow was made from the  $k - \epsilon$  model. To validate the numerical study, experimental data of the reactor water exit velocity and the calculation of the IGC Mesh Convergence Index were used. From the comparative analysis of the values of the calculated velocity profiles, it is observed that although there are differences in the velocity values predicted by the two evaluated viscosity models. These differences are not significant and therefore the representation of this type of hydrosystem can be done using laminar or turbulent flow approaches.

**Keywords:** Dynamics Fluid Computational (CFD), Up flow Anaerobic Reactor (UASB), Multiphase flows, Wastewater y Environment, Turbulent and laminar flow.

## 1. Introducción y Estado del arte

En Colombia para el año 2016 el sector doméstico aportó el 45% de la carga neta de materia orgánica biodegradable que fue vertida a corrientes hídricas superficiales (cerca de 528463 T/año DBO) [1]. Estas cargas orgánicas procedentes del agua residual doméstica, generan diferentes presiones y efectos ambientales sobre los ecosistemas, ocasionado procesos de eutrofización, alteración de la calidad del agua y la biota acuática [2]. En consecuencia, la instauración de medidas de manejo para el agua residual doméstica es un campo de especial interés que busca garantizar tanto condiciones ambientales como de saneamiento básico y salud pública [3].

A nivel mundial los sistemas anaerobios aplicados al tratamiento de Agua Residual Doméstica (ARD), han encontrado una amplia aplicación para el control de las cargas orgánicas que producen este tipo de impactos socio-ambientales [4]. Dentro de estos tratamientos anaerobios, los reactores UASB (por sus siglas en inglés *Up Anaerobiy System Biological*), son uno de los sistemas de tratamiento más empleados en países de clima tropical y subtropical [5,6]. Países como Brasil, México y Colombia, cuentan con el mayor porcentaje de aplicación de tecnologías UASB para el tratamiento del agua residual doméstica en América Latina [4]. Siendo este último, uno de los países pioneros en el uso del reactor UASB, con antecedentes que datan del año 1982 con la construcción de la primera planta piloto UASB en la ciudad de Cali [7] y el año 1985 con la implementación de la Planta de Tratamiento de Agua Residual Doméstica (PTAR) a escala real: PTAR Vivero [8].

Estudios como los presentados por Wiegant en 2001 [9], Foresti en 2002 [10] y Van Haandel et al., en 2006 [11], han permitido evidenciar como el uso de reactores UASB en países del trópico, con temperaturas mayores a 20°C y condiciones de operación medias de 8 horas de tiempo de retención hidráulico, se alcanzan eficiencias de reducción del orden del 65 al 80% en las cargas de las Demandas Bioquímicas (DBO) y Químicas (DQO) de oxígeno. Por lo tanto, conocer los procesos de flujo y transporte que se presentan en este tipo de reactores, permitirá un mejor desarrollo de los procesos de diseño, construcción y optimización en la remoción de contaminantes orgánicos presentes en el ARD, lo que se traduce en beneficios ambientales y disminución de los riesgos para la salud humana.

En este proceso de conocimiento, disciplinas como la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD por sus siglas en inglés), se han convertido en una poderosa herramienta para la descripción y el entendimiento de los fenómenos de los procesos hidráulicos y biogeoquímicos presentes en reactores tipo UASB. Investigaciones como las presentadas por Blanco, R. [12], Brito, et al. [13], Suprotim, et al. [14], Caro, et al. [15] y Suárez, E. [17], han logrado predecir el comportamiento del flujo multifásico en lechos fluidizados, aplicando múltiples conceptualizaciones para describir los procesos biogeoquímicos e hidráulicos ocurridos en los reactores anaerobios de flujo ascendente.

En estas investigaciones, la descripción del modelo de flujo se realizó empleando el modelo de turbulencia k-Épsilon [18] propuesto por *Launder y Spalding* en 1972. Este modelo permite incluir los efectos de generación y disipación de la energía turbulenta en el desarrollo del flujo en los reactores UASB, y su inclusión puede que logre una mejor representación de fenómenos hidrodinámicos presentes en estos tipos de hidrosistemas. No obstante, el análisis de los perfiles de velocidad predichos en estas investigaciones por los modelos CFD, evidencian valores del número de Reynolds que sugieren condiciones de flujo laminar. En línea con este último planteamiento, investigaciones como la de *D' Bastiani, et al.* [16], lograron simular y validar el comportamiento hidrodinámico de un reactor UASB en condiciones de flujo laminar. Con porcentajes de diferencia del orden del 3% entre las velocidades simuladas y las experimentales. A partir de lo cual surge la inquietud de la oportunidad de valorar este tipo de hidrosistemas, con conceptualizaciones de modelos de turbulencia. Toda vez que si bien es cierto que el modelo k-Épsilon puede predecir la hidrodinámica del Reactor UASB, su uso requiere de un volumen mayor de información que el modelo de flujo laminar.

En este orden de ideas, el presente estudio busca contrastar los resultados de los perfiles de velocidad, que se predicen bajo las conceptualizaciones de los modelos de: a) flujo laminar (Definido por el Número de Reynolds) y b) flujo turbulento – Modelo k-Épsilon (Empleado en mayor medida en la literatura). Con el fin de comparar cualitativamente los resultados y establecer si existen o no diferencias en la representación de la hidrodinámica de reactores UASB, con estos dos tipos de modelos.

## 2. Objetivos

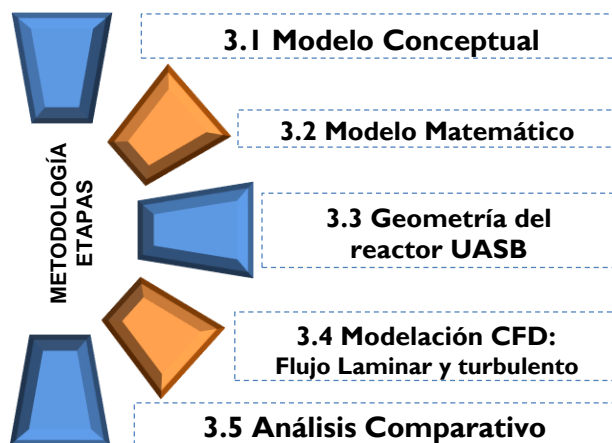
**General:** Simular las condiciones hidrodinámicas multifase en un reactor UASB a escala de laboratorio bajo condiciones de flujo laminar y turbulento.

### Específicos:

- Analizar las condiciones de convergencia de malla en la geometría de un reactor UASB en 2D a partir del Índice de Convergencia de Malla (IGC).
- Obtener los perfiles de velocidad en CFD multifase, para los modelos de flujo laminar y turbulento.
- Realizar un análisis comparativo entre los valores de velocidad obtenidos en CFD multifase, para los regímenes de flujo laminar y turbulento.

## 3. Materiales y métodos

El desarrollo del proceso de simulación se realizó empleando el software ANSYS® en su versión 19.2. La implementación del método para realizar el proceso de modelación de flujo multifase en el reactor UASB, se llevó a cabo mediante la formulación de las siguientes cinco etapas relacionadas en la figura 1.



**Figura 1.** Estructura Metodológica - modelación CFD del flujo multifase en un reactor UASB a escala de Laboratorio.

### 3.1 Modelo Conceptual

El modelo conceptual es una representación esquemática de los procesos de flujo, transporte y geometría. En consecuencia, el mismo abarca todas y cada una de las consideraciones empleadas para la formulación del modelo CFD empleado para describir la hidrodinámica del reactor UASB. Las condiciones iniciales y las consideraciones usadas para la representación de los procesos inmersos en el reactor UASB, se describen a continuación.

#### 3.1.1 Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera empleadas para la solución de las ecuaciones diferenciales parciales, se implementó mediante condiciones de primer tipo o *Dirichlet*. La definición de las mismas se realizó en función de la geometría del reactor UASB, tal y como se mencionan a continuación:

- Entradas: Asignadas de acuerdo con los valores de velocidad de las fases líquida y gaseosa a la entrada del reactor.
- Salidas: Definidas a partir de las condiciones de presión atmosférica de 74660 Pa.

### 3.1.2 Condiciones Iniciales

El reactor UASB a escala de laboratorio, es tomado del estudio realizado por Martínez-Polanco, et al. [19]. El reactor está constituido por un cuerpo de tuberías de PVC. Las dimensiones del reactor UASB son: a) Altura de la columna principal de 547 mm con un diámetro de 38 mm, b) El separador de las tres fases ubicado en la parte superior de la columna tiene una altura de 160 mm y un diámetro de 76 mm y c) el volumen efectivo del reactor UASB es de 1074 mL. En la figura 2 se presenta la geometría del reactor UASB empleado para el presente estudio.

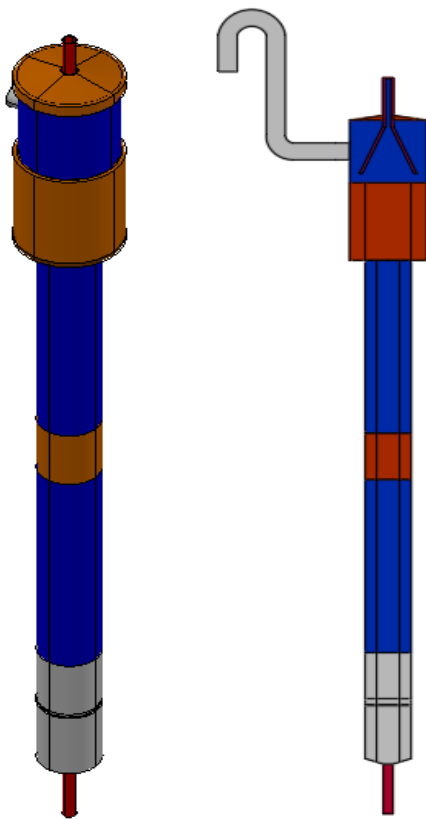


Figura 2. Esquema del reactor UASB a escala de laboratorio empleado para la modelación CFD multifase en condiciones de flujo laminar y turbulento.

### 3.1.3 Consideraciones para la representación de los procesos inmersos en el reactor UASB.

- a) **Fluido:** Se asumió que los fluidos son newtonianos, incompresibles e isotérmicos. Con propiedades físicas constantes de agua a una temperatura media de 27°C o 300 °K.
- b) **Flujo Multifase:** Se consideró un modelo de mezcla Euleriano [20] compuesto por tres fases:
- **Fase líquida ( $\alpha$ ):** Fase continua definida por el agua residual doméstica.
  - **Fase Gas ( $\beta$ ):** Fase dispersa establecida por el volumen de biogás.
  - **Fase Sólida ( $\gamma$ ):** Fase dispersa establecida por el lodo o lecho fluidizado.
- c) **Enfoque:** Euleriano – Euleriano para las fases continua y dispersa
- d) **Régimen de Flujo**  
Flujo desarrollado no permanente o transitorio en condiciones de flujo Laminar y Turbulento: Modelo k-Épsilon.
- e) **Propiedades del Gas**
- Compuesto por el biogás producido en el proceso de actividad metanogénica del lodo, se consideró que la fase de gas está compuesta mayoritariamente metano ( $\text{CH}_4$ ).
- f) **Propiedades del Sólido – Lodo**
- Burbujas de Gas: son consideradas con una Geometría Esférica y un diámetro nominal de 0.003 m [13].
  - La producción de burbujas de gas, son consideradas con una distribución uniforme sobre la sección transversal del lecho fluidizado posicionado a 0.104 m de la entrada de agua o base del reactor.
- g) **Transferencia de momento entre fases**
- $\alpha - \beta$ : Se considera que la interacción principal entre las fases, es debida a las fuerzas de Drag [21, 22].
  - No se consideró en el modelo conceptual los efectos de las reacciones bioquímicas.
- h) **Coefficientes de Drag - Interacción entre fases.**
- La determinación de los coeficientes de Drag, para las fases sólida ( $\gamma$ ) y líquida ( $\alpha$ ):  $C_{D\gamma-\alpha}$ , se establece de acuerdo con el modelo propuesto por Gidaspow, et al. [23]. Con respecto a las fases gas ( $\beta$ ) y líquida ( $\alpha$ ) el coeficiente de Drag:  $C_{D\beta-\alpha}$  se utilizó el modelo propuesto por Schiller and Naumann [24], de acuerdo con las siguientes ecuaciones.

$$C_{D\gamma-\alpha} = \frac{24}{r_\alpha R_{ep}} \left[ 1 + 0.15(r_\alpha R_{ep})^{0.687} \right]$$

$$R_{ep} = \frac{\rho_\alpha d_\gamma |U_\gamma - U_\alpha|}{\mu_\alpha}$$

**Ecuación 1.** Coeficiente de Drag - Interacción entre fases sólida y líquida. [23]

**donde:**  $r_\alpha$  es la fracción volumétrica de líquido,  $R_{ep}$  es el número de Reynolds para la fase dispersa (p),  $\rho_\alpha$  es la densidad de la fase líquida,  $d_\gamma$  es el diámetro promedio de las partículas de la fase sólida,  $\mu_\alpha$  es la viscosidad dinámica de la fase líquida,  $U_\gamma$  y  $U_\alpha$  son las velocidades promedio de las fases sólida y líquida.

$$C_{D\beta-\alpha} = 24 \left[ \frac{1 + 0.15(R_e)^{0.687}}{R_e} \right]$$

$$R_e = \frac{\rho_\alpha d_b |U_\beta - U_\alpha|}{\mu_\alpha}$$

**Ecuación 2.** Coeficiente de Drag - Interacción entre fases gaseosa y líquida. [24]

**donde:**  $R_e$  es el número de Reynolds para la fase continua,  $d_b$  es el diámetro promedio de las partículas de la fase gaseosa: Burbujas y  $U_\beta$  es la velocidad promedio de las fases Gaseosa.

### 3.2 Modelo Matemático

El análisis de la hidrodinámica del flujo en el reactor UASB, se realizó considerando las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido incompresible. No se consideró la transferencia de energía dentro del modelo de flujo. Con respecto al flujo turbulento se empleó el modelo k-Épsilon. Para la solución de las ecuaciones se empleó el algoritmo de solución tipo Coupled [36] del módulo Fluent, presente en el software Ansys® Versión 19.2. A continuación se presentan las ecuaciones de gobierno empleadas.

$$\frac{\partial}{\partial t} r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha + \nabla (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha) = 0$$

**Ecuación 3.** Conservación de la masa – Continuidad.

$$\frac{\partial}{\partial t} r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha + \nabla (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha U_\alpha) = -r_\alpha \nabla P + r_\alpha \rho_\alpha g + \nabla [r_\alpha \mu_\alpha (\nabla \cdot U_\alpha + (\nabla \cdot U_\alpha)^T)] + C_{D\beta-\alpha} (U_\beta - U_\alpha)$$

**Ecuación 4.** Conservación de momento para la fase líquida.

$$\frac{\partial}{\partial t} r_\beta \rho_\beta U_\beta + \nabla (r_\beta \rho_\beta U_\beta U_\beta) = -r_\beta \nabla P + r_\beta \rho_\beta g + \nabla [r_\beta \mu_\beta (\nabla \cdot U_\beta + (\nabla \cdot U_\beta)^T)] + C_{D\beta-\alpha} (U_\beta - U_\alpha)$$

**Ecuación 5.** Conservación de momento para la fase gaseosa.

$$\frac{\partial}{\partial t} r_\gamma \rho_\gamma U_\gamma + \nabla (r_\gamma \rho_\gamma U_\gamma U_\gamma) = -r_\gamma \nabla P + r_\gamma \rho_\gamma g + \nabla [r_\gamma \mu_\gamma (\nabla \cdot U_\gamma + (\nabla \cdot U_\gamma)^T)] + C_{D\gamma-\alpha} (U_\gamma - U_\alpha)$$

**Ecuación 6.** Conservación de momento para la fase sólida.

$$\frac{\partial}{\partial t} r_\alpha \rho_\alpha K_\alpha + \nabla (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha K_\alpha) = \nabla \left[ r_\alpha \left( \mu_\alpha + \frac{\mu_{t\alpha}}{\sigma_k} \right) \nabla K_\alpha \right] + r_\alpha P_{k\alpha} - r_\alpha \rho_\alpha \varepsilon_\alpha + T_{\beta-\alpha}^K \quad \mu_{t\alpha} = \rho C_\mu \frac{K_\alpha^2}{\varepsilon_\alpha}$$

**Ecuación 7.** Cambio de la energía cinética turbulenta (k) – Modelo k-Épsilon.

$$\frac{\partial}{\partial t} r_\alpha \rho_\alpha \varepsilon_\alpha + \nabla (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha \varepsilon_\alpha) = \nabla \left[ r_\alpha \left( \mu_\alpha + \frac{\mu_{t\alpha}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_\alpha \right] + r_\alpha C_{\varepsilon 1} P_{k\alpha} \frac{\varepsilon_\alpha}{K_\alpha} - r_\alpha C_{\varepsilon 2} \rho_\alpha \frac{\varepsilon_\alpha^2}{K_\alpha} + T_{\beta-\alpha}^\varepsilon$$

**Ecuación 8.** Cambio de la disipación de flujo turbulento ( $\varepsilon$ ) – Modelo k-Épsilon.

**dónde:**  $\alpha$  refiere a la fase líquida,  $\beta$  a la fase gaseosa y  $\gamma$  a la fase sólida.  $r$  es la fracción volumétrica,  $\rho$  es la densidad,  $U$  es la velocidad,  $P$  es la presión,  $g$  es la gravedad,  $\mu$  es la viscosidad dinámica,  $C_D$  Es el coeficiente de Drag,  $k$  es el cambio de la energía cinética turbulenta,  $\varepsilon$  es el cambio o la disipación de la energía cinética turbulenta,  $\sigma$  es la tensión superficial,  $\mu_t$  es la viscosidad turbulenta,  $C_\mu$ ,  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$  son constantes del modelo k-Épsilon estándar,  $P_{k\alpha}$  es el termino fuente de producción debida a la incidencia de los esfuerzos de corte que ocasiona el movimiento del flujo – Velocidad media del fluido y  $T_{\beta-\alpha}^K$ ,  $T_{\beta-\alpha}^\varepsilon$  representan la transferencia y disipación del flujo turbulento entre las fases líquida y gaseosa.

### 3.2.2 Propiedades Físicas de las fases y Parámetros de entrada del modelo - Datos

En este aparte del documento se definen los valores de los parámetros inmersos en el análisis de la hidrodinámica del reactor UASB. En la tabla 1 se presentan tanto las propiedades físicas de las fases como los valores de referencia empleados para las constantes y los parámetros del modelo matemático empleado.

**Tabla 1.** Propiedades Físicas de las fases y parámetros del modelo matemático.

Propiedad	Notación	Unidad	Fase Líquida (α): ARD	Fase Gas (β): Biogás	Fase Sólida (γ): Lodo
Densidad	$\rho$	Kg-m <sup>-3</sup>	997	0.6679	1020
Viscosidad Dinámica	$\mu$	Pa-s	8.899 x 10 <sup>-4</sup>	1.087 x 10 <sup>-5</sup>	1.295 x 10 <sup>-4</sup>
Diámetro de partícula	d	m	--	0.003	0.003
Fracción Volumétrica	r	--	0.6	0.33	0.07
Velocidad Promedio	U	m-s <sup>-1</sup>	1.3887 x 10 <sup>-4</sup>	2.94 x 10 <sup>-6</sup>	--
Tensión Superficial	$\sigma$	N-m <sup>-1</sup>	0.072		--

**Tabla 2.** Parámetros del modelo matemático.

Parámetro	Notación	Unidad	Magnitud
Número de Reynolds – Fase Líquida	$R_e$	--	4.64 x 10 <sup>-1</sup>
Diámetro promedio Burbuja - Fase gaseosa	$d_b$	m	0.003*
Número de Reynolds – Fase Gaseosa	$R_{ep}$	--	4.67 x 10 <sup>-1</sup>
Diámetro promedio partículas del Lodo - Fase Sólida	$d_\gamma$	m	0.003*
Energía cinética turbulenta	K	m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	2.89x10 <sup>-10</sup> ***
Disipación de energía cinética turbulenta	$\epsilon$	m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>	1.82x10 <sup>-12</sup> ***
Viscosidad Cinemática turbulenta	$\mu_{t\alpha}$	Pa-s	4.13 x 10 <sup>-6</sup>
Constante de Viscosidad Cinemática Turbulenta	$C_\mu$	--	0.09**
Tensión Superficial Energía cinética turbulenta	$\sigma_k$	N-m <sup>-1</sup>	1.0*
Tensión Superficial Disipación de flujo turbulento	$\sigma_\epsilon$	N-m <sup>-1</sup>	1.3*
Constante 1 del Modelo k-Épsilon	$C_{\epsilon 1}$	--	1.44**
Constante 2 del Modelo k-Épsilon	$C_{\epsilon 2}$	--	1.92**

\* Datos tomados del estudio de Maria G. et al. [13]. \*\*Datos tomados para el modelo k- Épsilon Estándar referenciados en el texto de David C. Wilcox. [25]. \*\*\* Datos calculados a partir de las ecuaciones  $K=1.5(l*Ut)^2$  y  $\epsilon = 0.1643 K^{3/2}/Lt$ , reportadas en las investigaciones realizadas por L. F. Gutierrez, et al. [26] y V. T. Nguyen. [27]. Donde Ut es la Velocidad Turbulenta, Lt es la longitud turbulenta, calculada como  $Lt = 0.07L$  (L: Longitud del problema) y por ultimo l es la intensidad Turbulenta. Esta última tomada con referencia en la investigación de J. Wang, et al. [28].

### 3.3 Geometría Reactor UASB

La geometría 2D del reactor UASB a escala de laboratorio, se realizó con el software Autocad ®. Posteriormente se tomaron los volúmenes correspondientes al flujo interno del reactor, para realizar la modelación CFD. Como primera etapa se llevó a cabo el análisis de la convergencia de la geometría de malla, considerando una geometría bidimensional de cuadriláteros, junto con cinco diferentes tipos de malla. El intervalo de evaluación de la geometría obedece a un proceso de refinamiento en el cual se incrementó paulatinamente el número de elementos en un intervalo desde 481 a 38885, para la geometría bidimensional objeto de estudio.

Dentro de este proceso de refinamiento, se valoraron cuatro parámetros de calidad de malla. Los parámetros de calidad de la geometría de malla [29, 30, 31] empleados para el análisis topológico fueron: a) Calidad Ortogonal (Orthogonal Quality) [30, 32, 33, 34], b) Calidad de Elemento (Element Quality) [30, 34], c) Razón o Relación de aspecto (Aspect Ratio) [30, 34] y d) Asimetría u Oblicuidad (Skewness) [30, 34]. A continuación, en la figura 3 se presenta el diseño de variación paramétrica empleado para el análisis de la convergencia de malla y posteriormente en las tablas 3 a 8 se relaciona el desarrollo conceptual de estos 4 parámetros y su respectivo método de cálculo.

### GEOMETRIA REACTOR UASB

GEOMETRIA

**CUADRILÁTEROS**

TAMAÑO DE ELEMENTO

Tamaño: 10 mm  
Cantidad: 481

Tamaño: 7.5 mm  
Cantidad: 792

Tamaño: 5.0 mm  
Cantidad: 1660

Tamaño: 2.5 mm  
Cantidad: 6063

Tamaño: 1.0 mm  
Cantidad: 38850

PARAMETROS CALIDAD DE MALLA

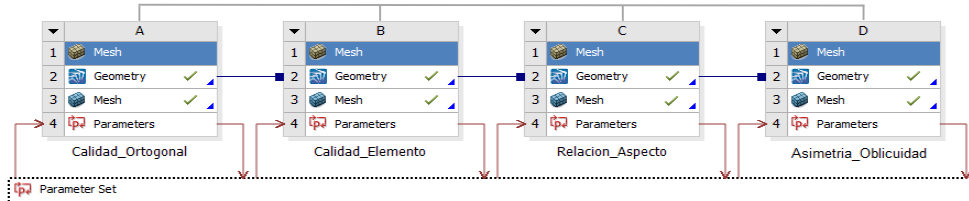


Figura 3. Esquema del diseño experimental empleado para la evaluación de la convergencia y calidad de malla.

• **Calidad Ortogonal**

Tabla 3. Características y ecuación de determinación de la Calidad Ortogonal (OQ).

PARAMETRO	ECUACION
<b>Calidad Ortogonal (OQ)</b>	$OQ = \min \left[ \frac{A_i \cdot f_i}{ A_i   f_i }, \frac{A_i \cdot c_i}{ A_i   c_i } \right]$ <p><b>Ecuación 9.</b> Determinación Calidad Ortogonal</p> <p><b>Dónde:</b> OQ es la Calidad Ortogonal, <math>\vec{A}_i</math> es el vector normal de la cara, <math>\vec{f}_i</math> es un vector desde el centroide de la celda y <math>\vec{c}_i</math> es un vector desde el centroide de la celda adyacente que comparte la cara.</p>
<p><b>Figura 4.</b> Vectores – Calidad Ortogonal. [30, 32]</p>	
<p>El concepto de ortogonalidad de malla se refiere como la deformación que sufren un elemento con respecto a los elementos adyacentes [33]. Esta condición de calidad, se relaciona con qué tan cerca están los ángulos entre las caras de los elementos adyacentes (o los bordes de los elementos adyacentes) a un ángulo óptimo (dependiendo de la topología del elemento) [34].</p>	

• **Calidad de Elemento**

Tabla 4. Características y ecuación de determinación de la Calidad de Elemento (EQ).

PARAMETRO	ECUACION						
<b>Calidad de Elemento (EQ)</b>	$EQ = C \left[ \frac{V}{\sqrt{[\sum(L^2)]^3}} \right]$ <p><b>Ecuación 10.</b> Determinación Calidad Elemento</p> <p><b>Dónde:</b> EQ es la Calidad de Elemento, V es el volumen del elemento, L es la longitud de borde del elemento en 2D y C es un valor constante que depende de cada tipo de elemento.</p>						
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Elemento</th> <th>C</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Tetraedro</td> <td>124.7</td> </tr> <tr> <td>Hexágono</td> <td>41.57</td> </tr> </tbody> </table> <p><b>Tabla 5.</b> Valor C para el Cálculo de EQ. [34]</p>	Elemento	C	Tetraedro	124.7	Hexágono	41.57	
Elemento	C						
Tetraedro	124.7						
Hexágono	41.57						
<p>La calidad del elemento permite establecer un criterio de calidad compuesta que varía en el intervalo de 0 a 1. El criterio de calidad se fundamenta en el análisis de la relación existente entre el volumen del elemento y su longitud de borde correspondiente. Los valores de EQ cercanos a uno (1) indican un cubo Perfecto con longitudes L equidistantes. [30]</p>							

• **Obliviosidad o Asimetría.**

Tabla 6. Características y ecuación de determinación de la Obliviosidad o Asimetría (O).

PARAMETRO	ECUACION																
<b>Obliviosidad (O)</b>	$O = \frac{OCS - CS}{OCS}$ <p><b>Ecuación 11.</b> Determinación Calidad Elemento</p> <p><b>Dónde:</b> O es la Asimetría u Obliviosidad, <b>OCS</b> es el tamaño óptimo del elemento (Del inglés Optimal Cell Size) y CS es el Tamaño Real del Elemento (Del inglés Cell Size). El tamaño de celda óptimo es el tamaño de una celda equilátera con el mismo circunradio.</p> <p>Las cuadrículas de calidad tienen un valor de asimetría de aproximadamente 0,1 para 2D y 0,4 para 3D. La tabla 5 proporciona una guía general sobre la relación entre la asimetría y la calidad de las celdas. [30]</p>																
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Valor O</th> <th>Calidad Enmallado</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1.0</td> <td>Degenerado</td> </tr> <tr> <td>0.9 &lt; O &lt; 1.0</td> <td>Malo</td> </tr> <tr> <td>0.75 &lt; O &lt; 0.9</td> <td>Pobre</td> </tr> <tr> <td>0.5 &lt; O &lt; 0.75</td> <td>Justa</td> </tr> <tr> <td>0.25 &lt; O &lt; 0.5</td> <td>Bueno</td> </tr> <tr> <td>0.0 &lt; O &lt; 0.25</td> <td>Excelente</td> </tr> <tr> <td>O=0.0</td> <td>Equilátero</td> </tr> </tbody> </table> <p><b>Tabla 7.</b> Clasificación del Enmallado frente al Valor de la obliviosidad. [29, 33]</p>	Valor O	Calidad Enmallado	1.0	Degenerado	0.9 < O < 1.0	Malo	0.75 < O < 0.9	Pobre	0.5 < O < 0.75	Justa	0.25 < O < 0.5	Bueno	0.0 < O < 0.25	Excelente	O=0.0	Equilátero	
Valor O	Calidad Enmallado																
1.0	Degenerado																
0.9 < O < 1.0	Malo																
0.75 < O < 0.9	Pobre																
0.5 < O < 0.75	Justa																
0.25 < O < 0.5	Bueno																
0.0 < O < 0.25	Excelente																
O=0.0	Equilátero																

• **Relación de Aspecto**

Tabla 8. Características y Descripción para la determinación de la Relación de Aspecto (AR).

PARAMETRO	DESCRIPCION
<b>Relación de Aspecto (AR)</b>	<p><b>Figura 5.</b> Distancias – Relación de Aspecto para elementos triangulares y cuadriláteros. [30]</p> <p>Este concepto se considera como una medida de estiramiento o deformación de un elemento. La relación de aspecto, vincula en su cálculo los valores de las distancias (máximos y mínimos) que tiene un elemento con respecto a su centroide. Estas distancias pueden ser establecidas como: a) La Distancia Normal existente entre los centroide de la cara y el centroide del elemento y b) La Distancia entre el centroide del elemento y los nodos. [34]</p>

Posterior a la valoración de los parámetros de calidad, se realizó el cálculo del Índice de convergencia de malla (IGC Por sus siglas en ingles). De acuerdo con la siguiente Ecuación:

$$IGC = \left| \frac{FEr^p}{r^p - 1} \right|$$

**Ecuación 12.** Índice de Convergencia de Malla IGC. [35]

**dónde:** R Relación de tamaño de malla gruesa y fina, E es el Error relativo de la solución frente a la variable de respuesta, F es el factor de seguridad (1.25) y r es el coeficiente de regresión Potencial de la cantidad en función del valor de la variable de respuesta obtenida con la malla analizada.

A partir de este proceso se seleccionó, la mejor geometría y la malla con mejor IGC para definir el número de elementos empleados en el proceso de discretización del reactor UASB. Con los cuales se llevó a cabo la construcción de una propuesta de enmallaado estructurado que cumpliera con las condiciones de calidad de la malla.

### 3.4 Modelación CFD: Flujo Laminar y turbulento.

La implementación del proceso de modelación CFD, se realizó empleando el módulo Fluent del software Ansys ® Versión 19.2. Dicho proceso se llevó a cabo

en estado transitorio empleando un método de volúmenes finitos con un solver segregado.

El método de Linealización de las ecuaciones diferenciales, se definió a partir de una formulación implícita dando lugar a un conjunto de ecuaciones para cada elemento del dominio computacional. Con base en estas definiciones se seleccionó un algoritmo de acoplamiento presión-velocidad para la resolución del flujo laminar y turbulento mediante el algoritmo de solución tipo Coupled [36]. Para la formulación del flujo en estado transitorio se empleó el mecanismo adaptativo para el paso del tiempo, con el cual se garantizó valores del número de Courant entre 0.1 y 0.2, lo anterior con el fin de mantener las condiciones de estabilidad numérica entre la discretización espacial y temporal del dominio 2D. Dentro de este proceso el software ejecuta el cálculo de los valores del paso de tiempo, para cada una de las condiciones geométricas del volumen de control del elemento bidimensional.

### 3.5 Análisis Comparativo

Los datos obtenidos de las simulaciones de flujo laminar y turbulento, para la variable de velocidad se analizaron a partir de un análisis descriptivo de los intervalos de oscilación mínimos y máximos que predice por el software.

## 4. Resultados y discusión

Las tablas 9 y 10 relaciona los resultados de velocidad y del análisis de calidad de malla para la geometría bidimensional de cuadriláteros. De igual manera las figuras 6 y 7 muestran la tendencia de los cuatro (4) parámetros de calidad en función del número de elementos junto con el estudio de convergencia de malla a partir de la velocidad media del flujo a la salida del reactor UASB, en condiciones de flujo laminar y turbulento.

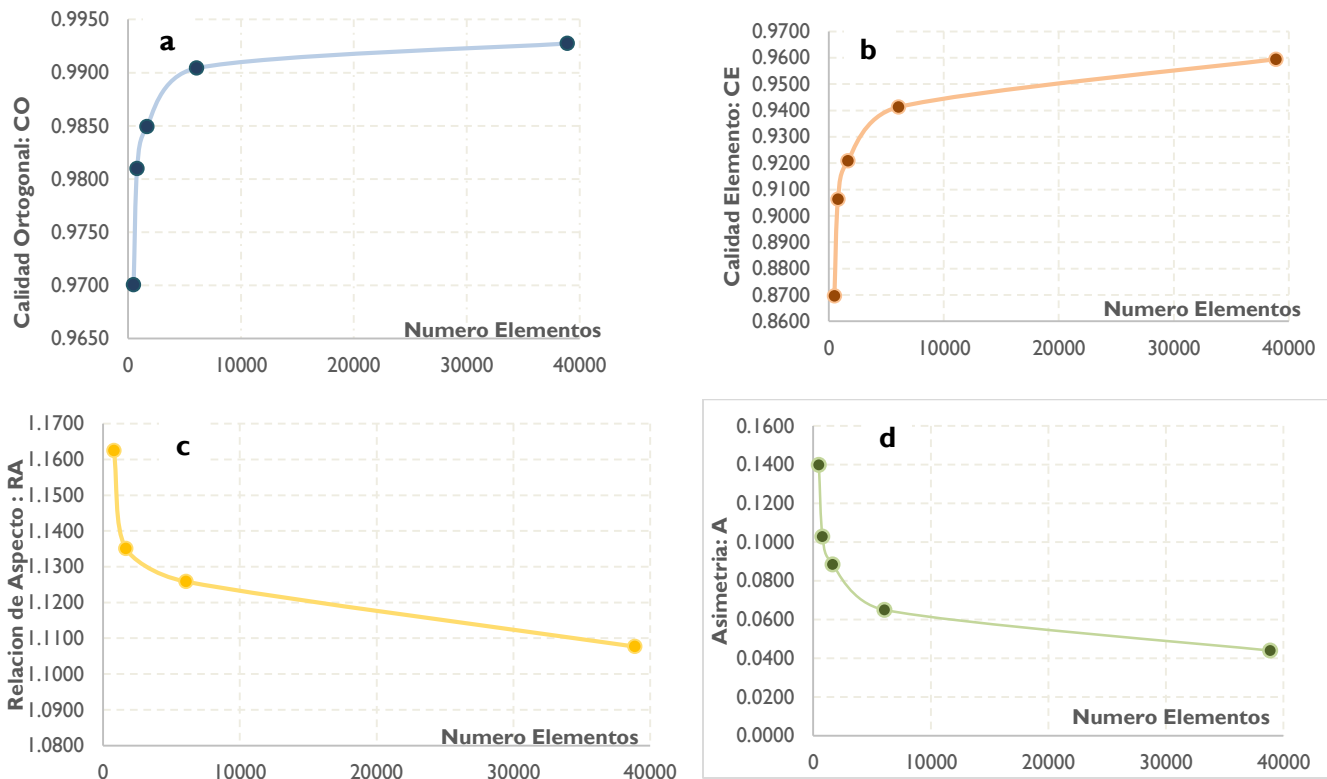
**Tabla 9.** Resultados parámetros de calidad de geometría de malla con elementos 2D cuadriláteros.

	Tamaño Elemento (m)	Número Elementos	Nodos	CALIDAD ORTOGONAL		CALIDAD DE ELEMENTO		RELACION DE ASPECTO		ASIMETRIA	
				Promedio	Desviación Estándar	Promedio	Desviación Estándar	Promedio	Desviación Estándar	Promedio	Desviación Estándar
				<b>CUADRILÁTEROS</b>	1.00E-02	481	619	0.9701	0.0483	0.8696	0.1299
	7.50E-03	792	962	0.9810	0.0403	0.9063	0.1093	1.1351	0.1377	0.1028	0.1169
	5.00E-03	1660	1899	0.9849	0.0316	0.9209	0.0912	1.1258	0.1082	0.0884	0.1011
	2.50E-03	6063	6536	0.9904	0.0234	0.9413	0.0717	1.1077	0.0851	0.0649	0.0801
	1.00E-03	38885	40052	0.9927	0.0213	0.9595	0.0666	1.0882	0.0625	0.0439	0.0743
	<b>Maximo</b>	38885	40052	0.9927	0.0483	0.9595	0.1299	1.1625	0.1818	0.1398	0.1345
	<b>Mínimo</b>	481	619	0.9701	0.0185	0.8696	0.0584	1.0573	0.0625	0.0318	0.0657
	<b>Discrepancia</b>	38404	39433	0.0226	0.0298	0.0899	0.0715	0.1052	0.1193	0.108	0.0688

**Tabla 10.** Resultados de velocidad e Índice GCI para las diferentes geometrías de malla con elementos 2D cuadriláteros.

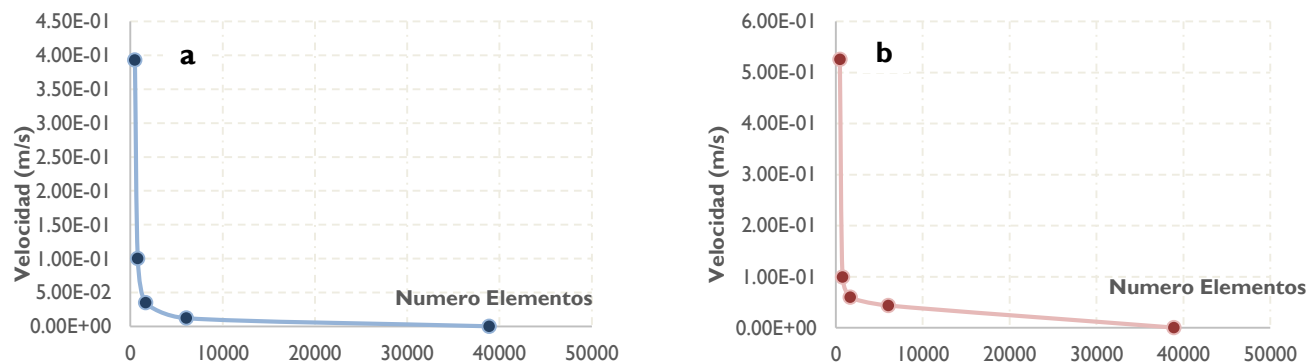
# Elementos	481	792	1660	6063	38885
Flujo Laminar Velocidad (m/s)	0.3931	0.10024	0.03468	0.01208	0.000147
GCI - Laminar	71.2030	18.1364	6.2569	2.1617	0.0004
Flujo Turbulento Velocidad (m/s)	0.5255	0.099104	0.05935	0.04341	0.000170
GCI - Turbulento	95.1940	17.9306	10.7271	7.8388	0.0036





**Figura 6.** Resultados de los parámetros de calidad en función del número de elementos.

a) Calidad Ortogonal, b) Calidad Elemento, c) Relación de Aspecto y d) Asimetría.

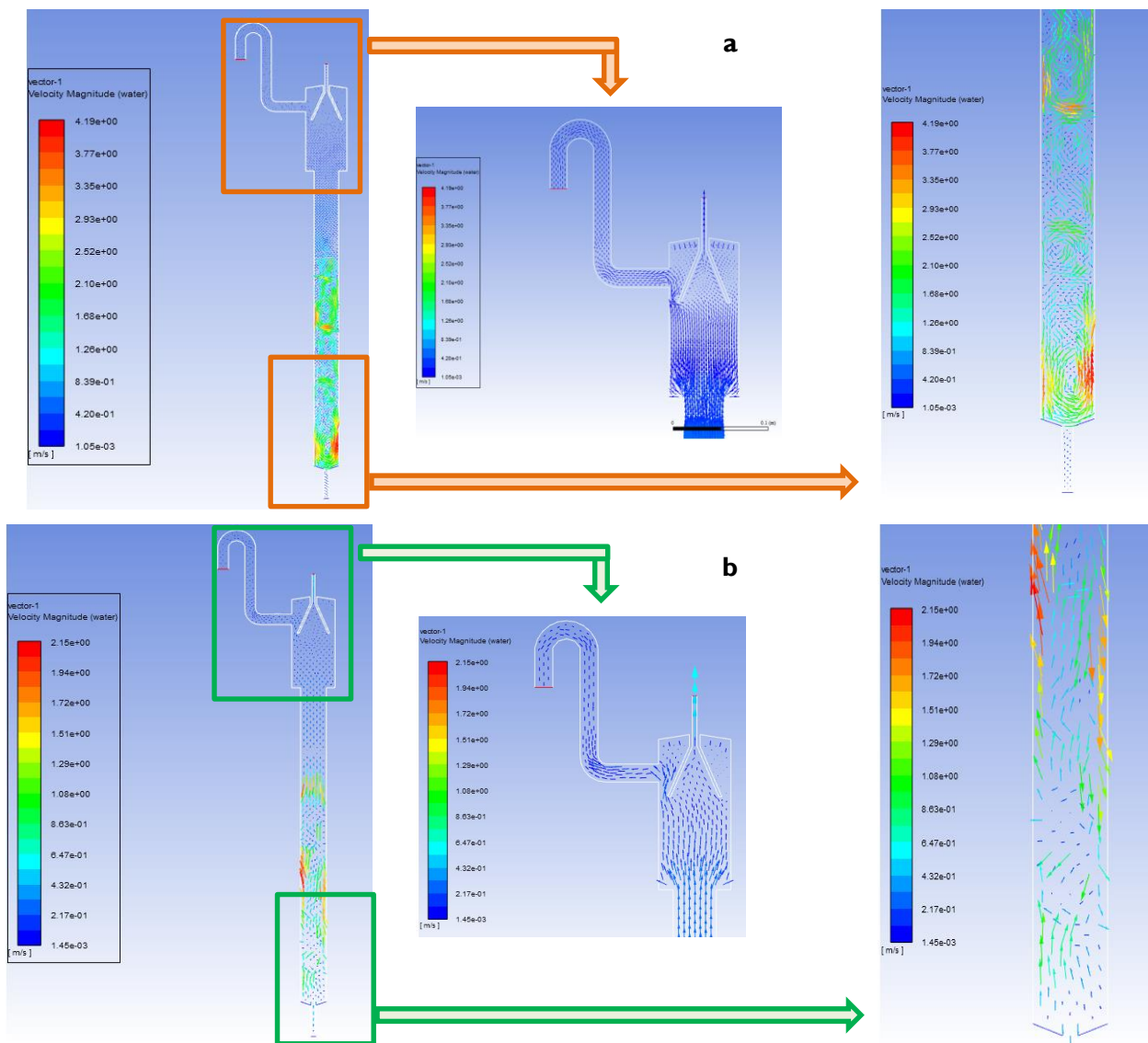


**Figura 7.** Resultados del análisis de convergencia de malla en función de la velocidad media de salida y el número de elementos.

a) Flujo Laminar y b) Flujo Turbulento.

Los resultados de la evaluación de la calidad de malla con respecto a la velocidad promedio de salida de agua, reflejan que para la geometría objeto de estudio, mallas iguales o superiores a 38885 elementos son los que mejor predicen los órdenes de magnitud de la variable física medida experimentalmente ( $1.5E-04$  m/s). Esta afirmación se comprueba con los valores calculados del GCI para las geometrías con un tamaño de elemento de 1.0 mm, en donde se obtienen los menores valores de este índice: 0.0004 para Flujo Laminar y 0.0036 para Flujo turbulento. De forma paralela, las geometrías de malla con tamaño de elemento de 1.0 mm, permiten evidenciar mallas estructuradas con valores de calidad ortogonal de 0.9927 y relaciones de aspecto de 1.0882. Lo cual indica geometrías de elementos poco perturbados, factor que permite mejorar las condiciones de estabilidad de solución del método numérico de volúmenes finitos. Con base en estos argumentos, se definió una malla con un tamaño de elemento de 1 mm, con un total de 38885 elementos y 40052 nodos.

A partir de lo expuesto en el párrafo anterior: análisis de convergencia, calidad y tamaño de malla (1mm), se implementaron las simulaciones en Ansys para el flujo multifase. En la figura 8 se presentan los resultados de los vectores de los contornos de velocidad para la fase líquida.



**Figura 8.** Resultados del comportamiento de la velocidad de la fase: líquida en el Reactor UASB, a) Flujo Laminar y b) Flujo Turbulento.

- El análisis de estos resultados permite observar que a pesar de que los valores de las velocidades medias ascendentes del agua, (Figura 7) en el interior del reactor UASB, presentan comportamientos diferentes, las velocidades de salida en el reactor tanto para el flujo laminar como el turbulento se encuentran en el orden de  $10^{-3} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ . Esto indica que si bien el flujo sufre perturbaciones por la incidencia de las fases líquida y Gaseosa, dichas perturbaciones se mitigan a lo largo del recorrido del fluido por el cuerpo del reactor. El análisis comparativo de estos intervalos de velocidad: a) Laminar –  $1.05\text{E}-3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  (min) –  $4.19 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ (max) y b) Turbulento –  $1.45\text{E}-3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  (min) –  $2.15 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ (max), permiten observar que si bien existen diferencias en los valores de la velocidad predichos por el flujo laminar y el turbulento, dichas diferencias se mantienen en los mismos ordenes de magnitud  $1.0\text{E}-3$  y  $1.0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ . Por tal razón, la representación de este tipo de hidrosistemas se puede realizar tanto en enfoques de flujo laminar como de flujo turbulento. No obstante, tomando en consideración los valores calculados de los números de Reynolds y de los parámetros  $k$  y Épsilon obtenidos en el proceso de simulación, se observa que los efectos de la turbulencia son mínimos y que el modelo Laminar reproduce los efectos del flujo multifase dentro del reactor UASB.

## 5. Conclusiones

El análisis de convergencia de malla a la luz del análisis de la variable velocidad, permitió establecer que con mallas de un tamaño de elemento igual o inferior a 1.0 mm, es posible reproducir las condiciones de flujo multifase en reactores anaerobios a escala de laboratorio. Con geometrías basadas en esta configuración se obtienen parámetros de calidad de malla óptimos para los procesos de discretización del dominio computacional objeto de estudio del presente artículo.

Finalmente, con los valores de los perfiles de velocidad calculados, se observa que si bien existen diferencias en los valores de la velocidad predichos por el flujo laminar y el turbulento. Dichas diferencias no son significativas y que la representación de este tipo de hidrosistemas se puede realizar tanto en enfoques de flujo laminar como de flujo turbulento. No obstante, tomando en consideración los valores calculados de los números de Reynolds y de los parámetros  $k$  y  $\epsilon$  obtenidos en el proceso de simulación, se observa que los efectos de la turbulencia son mínimos. Por lo que usar el modelo  $k$ - $\epsilon$ , en este tipo de hidrosistemas requiere de una demanda computacional y teórica con un grado de complejidad superior, a las representaciones que se pueden dar con el modelo de viscosidad de tipo laminar.

## Agradecimientos

A los docentes Hernando y Luis Felipe por su apoyo constante y su amistad. Muchas gracias por acompañarme en esta travesía de la simulación del flujo multifase y por transmutar la vida de los colombianos a través de la docencia. Un especial agradecimiento a mi amada Cielito, que con sus palabras a través del atlántico y su soporte infinito, me abrigó en el momento más crucial de este proyecto. De corazón gracias mi cielo. Agradezco a mi familia putativa y mis compañeros de choco aventuras Nelson y Jeyson Arévalo. Quienes a pesar de todas mis locuras siempre están prestos a brindarme su apoyo sin medida. Me permito expresar un sentido agradecimiento a todos los investigadores que comparten su conocimiento en las plataformas virtuales, en especial a los canales: Nazmul Hossain, CFD.NINJA ANSYS y Sergio Baz Rodríguez de la plataforma YouTube. Gracias por sus indicaciones y permitir al mundo conocer el manejo de la herramienta computacional Ansys Fluent. Por último y no menos importante muchas gracias al padre cosmos y la madre tierra por guiarme en esta travesía de conocer mi alma a través del conocimiento.

## Referencias

1. Instituto de Hidrología Meteorología y Estudios Ambientales – IDEAM. Estudio Nacional del Agua 2018. Bogotá: Ideam 2019, 452 pp.
2. Salazar-Larrota, L., Uribe-García, L., Gómez-Torres, L. and Zafra-Mejía, C. Analysis of the efficiency of UASB reactors in a municipal wastewater treatment plant. DYNA, 86(209), pp. 319-326, April - June, 2019.
3. Eugene McJunkin, F., Agua y Salud Humana. ORGANIZACIÓN PANAMERICANA DE LA SALUD, Oficina Sanitaria a Panamericana, Oficina Regional de la ORGANIZACIÓN MUNDIAL DE LA SALUD. 1988. ISBN 968- 18 - 2265 – X.
4. Torres, Patricia. Perspectivas del tratamiento anaerobio de aguas residuales domésticas en países en desarrollo. Revista EIA, (18), 115-129. Retrieved May 19, 2012.
5. Maria G. S. L. Brito, Flávio C. B. Nunes, Hortência L. F. Magalhães, Wanderson M. P. B. Lima, Flávia L. C. Moura, Severino R. Farias Neto and Antonio G. B. Lima. Hydrodynamics of Uasb Reactor Treating Domestic Wastewater: A Three-Dimensional Numerical Study. Water 2020, 12, 279; doi:10.3390/w12010279.
6. Karthikeyan, K. and Kandasamy, J., Upflow anaerobic sludge blanket (UASB) reactor in wastewater treatment, in: Vigneswaran, S., Encyclopedia of life support systems: water sciences, Engineering and Technology Resources, II, Oxford, United Kingdom: EOLSS Publishers Co. Ltd.; 2009, pp.180-198.
7. Lettinga, H.; De Man, A.; Grin, P. and Hulshoff Pol, L. W. "Anaerobic wastewater treatment as an appropriate technology for developing countries". La Tribune du Cebedeau, vol. 40.; 1987, pp. 21-32.
8. Schellinkhout, A.; Lettinga, H.; Van Velsen, L. and Louwe, J. The application of UASB reactor for the direct treatment of domestic wastewater under tropical conditions. Proceedings of the Seminar/Workshop on Anaerobic Treatment of Sewage. Switzenbaum MS (Amherst, USA); 1985, pp. 259-276.
9. Wiegant, W. M. Anaerobic digestion for sustainable development. Wageningen, The Netherlands, 2001. pp. 111-118.
10. Foresti, E. "Anaerobic treatment of domestic sewage: Established technologies and perspectives". Water Science and Technology, vol. 45, No. 10.; 2002, pp.181-186.

11. Van Haandel, A. and Van Der Lubbe, J. Handbook biological waste water treatment: Design and optimisation of activated sludge systems. Leidschendam, The Netherlands: Quist, 2007. 537 p.
12. Blanco, R. Application of computational fluid dynamics to the simulation and optimization of multi-environment bioreactors for wastewater treatment. Universidad de Cantabria, 2020.
13. María G. S. L. Brito, Flávio C. B. Nunes, Hortência L. F. Magalhães, Wanderson M. P. B. Lima, Flávia L. C. Moura, Severino R. Farias Neto and Antonio G. B. Lima. Hydrodynamics of Uasb Reactor Treating Domestic Wastewater: A Three-Dimensional Numerical Study. *Water* 2020, 12, 279; doi:10.3390/w12010279.
14. Suprotim, D., Supriya, S. and Sanjeev C. Modification of UASB reactor by using CFD simulations for enhanced treatment of municipal sewage. *Water Science & Technology*, 2017.
15. Cristian David Caro Moya y Jhon Sebastian Mosquera Ocampo. Estudio hidrodinámico y termodinámico de biorreactores UASB mediante el uso de la herramienta CFD. Universidad Militar Nueva Granada, 2020.
16. Camila D' Bastiani., Jéferson Luis Alba., Gabriel Tomazzoni Mazzarotto., Severino Rodrigues de Farias Neto., Lademir Luiz Beal., Anthony Reynolds., and David Kennedy. Multiphase CFD Modelling and PIV Validation of a UASB Reactor. *AIP Conference Proceedings* 2116, 030007 2019. <https://doi.org/10.1063/1.5113991>.
17. Ernesto Javier Muñoz Suárez. Eulerian-Lagrangian model with Discrete Element Method on liquid-solid flow with low upstream velocity. *rev.ion*, 2012;25(2):73-84. Bucaramanga (Colombia), 2012.
18. Launder, B.E., Spalding, D.B. Lectures in Mathematical Models of Turbulence. Academic Press, London England, 1972.
19. María P. Martínez-Polanco, Joaquín A. Valderrama-Rincón, Andrés J. Martínez-Rojas, Héctor J. Luna-Wandurraga, María C. Díaz-Báez, Martha C. Bustos-López y Juan D. Valderrama-Rincón. Degradation of high concentrations of azithromycin when present in a high organic content wastewater by using a continuously fed laboratory-scale UASB biorreactor. *Chemosphere*, 2022.
20. C. I. Pairetti. Modelización de flujos turbulentos multifásicos aplicada al diseño de sistemas inyectoros de nafta en motores de combustión interna. Universidad Nacional de Rosario Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, 2018.
21. J.M. van Baten, J. Ellenberger, and R. Krishna, *Chem. Eng. Process. Process Intensif.* 42, 733, 2003.
22. M.G.S. Lima, S.R. de Farias Neto, A.G.B. de Lima, F.C. Brito Nunes, and L.D.A. Gomes, *Int. J. Chem. React. Eng.* 9, 2011.
23. D. Gidaspow, R. Bezburuah, and J. Ding, in VII Eng. Found. Conf. Fluid. (Engineering Foundation, New York, 1992.
24. L. Schiller and Z. Naumann, *Zeitschrift Des Vereins Dtsch. Ingenieure* 77, 318, 1933.
25. D. C. Wilcox - Turbulence Modeling for CFD (Third Edition)-D C W Industries, 2006.
26. L. F. Gutierrez, J. P. Tamagno and S. A. Elaskar. RANS Simulation of Turbulent Diffusive Combustion. *Journal of Applied Fluid Mechanics*, 2016.DOI:10.18869/acadpub.jafm.68.225.24104.
27. V. T. Nguyen. Three Dimensional Computation Of turbulent Flow in Meandering Channels. Institut Für Wasserwirtschaft und Kulturtechnik Universität Karlsruhe (KH), 2000.
28. J. Wang, W. Xu, J. Yan and J. Yu. Study on the flow characteristics and the wastewater treatment performance in modified internal circulation reactor. *Chemosphere*, 2014.
29. L. Palomino. Modelación numérica para determinar la orientación de una bifurcación en el Tramo B del Río Piura. Universidad de Piura, 2019.
30. ANSYS. Meshing User's Guide. 2004.
31. ANSYS. Modeling and Meshing Guide. 2004.
32. Delfel, S. Introduction to Mesh Generation with ANSYS workbench. Coanda, 2013.
33. Sánchez, A. Modelación Y Análisis De Un Panel Ante Los Efectos Del Viento Empleando Dinámica De Fluidos Computacional Y Su Comparación Con Resultados De Túnel De Viento. Universidad Nacional Autónoma De México, 2013.
34. Cristancho Sainz, R. Modelación computacional de mezcla de cloro residual en agua para nudos en redes de distribución de agua potable utilizando CFD. Universidad de los Andes, 2018.
35. NASA (2008). Examining Spatial (Grid) Convergence. url: <https://www.grc.nasa.gov/WWW/wind/valid/tutorial/spatconv.html>.
36. ANSYS. Fluent Tutorial Guide. 2017