

DOCTORADO EN TECNOLOGÍAS INDUSTRIALES

TRABAJO FIN DE PERIODO FORMATIVO

Estudio fluidodinámico de un reactor de
mezcla continua para la digestión de fangos
provenientes de aguas residuales

Francisco José Hurtado Sánchez

dirigido por

Dr. Blas Zamora Parra

Dr. Antonio Sánchez Káiser



Departamento de Ingeniería Térmica y de Fluidos

Universidad Politécnica de Cartagena

Septiembre de 2012

RESUMEN

En el presente trabajo se ha realizado la modelización numérica de un reactor de mezcla continua para digestión anaerobia de aguas residuales instalado en la planta de depuración de aguas de Alcantarilla, en Murcia, cuyas dimensiones y características han sido proporcionadas por la empresa ACCIONA AGUA, S.A., en colaboración con ESAMUR, S.A.. Los objetivos del estudio consisten en determinar la caracterización del flujo de fangos en el interior del tanque digestor, la distribución de tiempos de residencia y el volumen activo del reactor bajo diferentes criterios. Se han estudiado los efectos del diseño y potencia del sistema de recirculación sobre los factores que determinan la calidad del proceso de digestión y se ha analizado la evolución de los mismos bajo condiciones transitorias para los regímenes de arranque y parada del sistema de recirculación. Se ha podido determinar un régimen de funcionamiento alternativo que mantiene el volumen activo del digestor por encima del 95%. Los resultados obtenidos plantean la posible optimización energética del sistema de recirculación hidráulica del digestor.

ABSTRACT

The numerical modeling of the continuous mixing reactor for anaerobic digestion of wastewater installed in the water treatment plant at Alcantarilla in Murcia was carried out in this work. The dimensions and features of the digester tank were provided by the company ACCIONA AGUA, S.A. in collaboration with the company ESAMUR, S.A.. The objectives of the study are to determine the characterization of the sludge flow inside the digester tank, the residence time distribution and the active volume of the reactor under different criteria. The effects of design and power of the recirculation system on the factors that influence the quality of the digestion process was studied. The evolution of the active volume under non-steady conditions for the starting and stopping regimes of the recirculation system and a start/stop regime with an active volume between 95 and 99% were determined. The obtained results reveal the eventual energy optimization of the hydraulic recirculation system of the digester.

Índice

1. Introducción	1
1.1. Estado del arte	2
1.2. Identificación de objetivos	3
2. EDAR de Alcantarilla	4
2.1. Introducción	4
2.2. Descripción de la instalación	5
2.3. Características constructivas y datos experimentales	6
2.4. Criterios de diseño	7
3. Modelo matemático	8
3.1. Introducción	8
3.2. Volumen de control para el reactor	9
3.3. Algunas simplificaciones relevantes	10
3.4. Condiciones de contorno	11
3.5. Modelos de turbulencia	13
3.5.1. Energía cinética turbulenta (k)	17
3.5.2. Modelo k - ϵ	19
3.6. Modelos matemático de la fase discreta	24
3.6.1. Ecuaciones de movimiento de las partículas	25
3.6.2. Dispersión turbulenta de las partículas	27
3.6.3. Acoplamiento entre la fase continua y la discreta	30
3.7. Modelo ideal de un reactor de mezcla continua	32
4. Modelo numérico	36
4.1. Introducción	36
4.2. Descripción general del código ANSYS Fluent	37
4.3. Procedimiento de discretización	39
4.3.1. Generación de la malla	40
4.3.2. Discretización	41
4.3.3. Resolución del sistema de ecuaciones	47
4.3.4. Flujos no estacionarios	53
4.4. Discretización del volumen de control	62

5. Validación del modelo numérico	69
5.1. Introducción	69
5.2. Sistemas de impulsión	70
5.3. Velocidad media de los fangos	71
5.4. Estudio de las trayectorias del flujo	72
5.5. Algunas consideraciones sobre la validación	76
6. Análisis fluido-dinámico del reactor de mezcla continua	77
6.1. Descripción cualitativa del flujo	77
6.2. Volumen activo del reactor	83
6.3. Caminos preferentes	85
7. Análisis del sistema de recirculación	86
7.1. Potencia	86
7.2. Volumen activo	89
7.3. Diseño del sistema de recirculación	94
8. Régimen de funcionamiento	103
8.1. Análisis teórico previo	103
8.2. Régimen de parada	104
8.3. Régimen de re-arranque	105
8.4. Régimen de funcionamiento alternativo	107
9. Conclusiones	108
Bibliografía	111

Nomenclatura

A	área
c_p	calor específico
g	gravedad
G_b	generación de energía cinética turbulenta debido al gradiente térmico
G_k	término de producción en la ecuación k
k	energía cinética turbulenta
l	escala de longitud
\dot{m}	flujo másico
p	presión
p'	componente fluctuante de la presión
P_k, P_ω	producción neta por unidad de disipación en k, ω
\dot{Q}	caudal
Pr	número de Prandtl
Re	número de Reynolds
s_{ij}	tensor de esfuerzos Reynolds
S_k, S_ω	término fuente en la ecuación k, ω
t	tiempo
T	temperatura
TRH	tiempo de retención o residencia hidráulica
TRVD	tiempo de recirculación del volumen del digestor
V	volumen
v	velocidad
u, v, w	componentes de la velocidad en las direcciones x, y, z.
u', v', w'	componentes fluctuantes de la velocidad
u^+	velocidad adimensionalizada próxima a la pared
x, y, z	coordenadas cartesianas
y^+	distancia adimensional a la pared
Y_k, Y_ω	término de disipación en la ecuación de k, ω

Símbolos griegos

β	coeficiente de expansión térmica
ε	disipación específica
δ_{ij}	delta de Krönecker
ρ	densidad
μ	viscosidad dinámica
ν	viscosidad cinemática
ν_t	viscosidad cinemática turbulenta
ω	disipación específica
Γ_k	difusividad efectiva para la energía cinética turbulenta
Γ_r	difusividad turbulenta
Γ_ε	difusividad efectiva para la disipación específica
θ	tiempo adimensionalizado

Subíndices

f	fangos
i, j, k	componentes de un vector o matriz

1. Introducción

Las estaciones de depuración de aguas residuales (EDAR) tratan mediante diferentes tecnologías las aguas residuales provenientes del uso urbano, con la finalidad eliminar su contaminación y obtener como producto un agua con las adecuadas condiciones de calidad para verterla a un cauce receptor. Para conseguir la depuración de las aguas residuales en la EDAR se aplican diferentes tratamientos físicos, químicos y biológicos que eliminan los sólidos en suspensión, materia orgánica disuelta y microorganismos patógenos. Uno de los subproductos obtenidos en la EDAR son los fangos provenientes de aguas residuales que concentran gran parte de la contaminación eliminada, compuestos por entre un 95 y 99% de agua, con un alto contenido en materia orgánica y organismos patógenos. Los fangos deben recibir un tratamiento adecuado dentro del cual se encuentra el proceso de estabilización o digestión que tiene por objeto la descomposición de la materia orgánica contenida, evitando así la posible fermentación o putrefacción de los fangos, y la eliminación de gérmenes patógenos. Como producto del proceso de digestión se obtienen los fangos digeridos y metano.

La obtención de metano en el proceso de digestión permite la implantación de procesos de cogeneración en la EDAR, que permiten producir energía eléctrica y el calor necesario para ciertos tratamientos de la línea de fangos. La producción de metano como subproducto del proceso de digestión ofrece un valor añadido a las EDAR que, junto a una adecuada optimización energética del proceso de depuración de aguas, puede abrirles paso en el mercado de producción de energía eléctrica. Los estudios desarrollados sobre el proceso de digestión con objeto de incrementar dicho valor añadido presentan se centran en dos campos, por un lado el de aumentar la producción de biogás, facilitando unas condiciones óptimas de pH y temperatura o agregando a los fangos a digerir productos residuales de procesos industriales, y por el otro la optimización del consumo de energía de la planta de depuración.

Con el objetivo de optimizar energéticamente el proceso de digestión de fangos provenientes del proceso de depuración de aguas residuales, el presente trabajo desarrolla el análisis numérico del comportamiento del flujo de fangos establecido en el interior del digestor de mezcla continua instalado en la estación de depuración de aguas residuales de Alcantarilla, Murcia.

1.1. Estado del arte

Uno de los factores clave en la digestión que se lleva a cabo en el interior de los reactores de mezcla continua es el mezclado; la calidad de éste determinará la eficiencia del proceso de digestión (Hendricks [1]), facilitando una adecuada dispersión y contacto entre la biomasa activa y el sustrato a digerir, además de reducir la estratificación de los fangos debida a gradientes de temperatura y la decantación o depósito de sólidos en suspensión en el suelo y paredes del reactor. El proceso de mezclado, que puede ser llevado a cabo mediante agitación mecánica o recirculación hidráulica, es el sistema con mayor consumo energético del proceso de digestión, debido a su operación continua y a sus requisitos de potencia, y por tanto en el que se fija un mayor interés para la optimización de un diseño dado.

La optimización del diseño de un reactor de mezcla continua requiere la caracterización del comportamiento fluido dinámico del fango en el interior de un reactor. Existen modelos matemáticos (Levenspiel [2]) que permiten el estudio del comportamiento hidráulico a través de la determinación de curvas de distribución de tiempos de residencia. La realización de ciertos ensayos experimentales permite obtener dichas curvas a través del estudio de la evolución con el tiempo de la concentración a la salida del digestor de partículas trazadoras inyectadas a la entrada (Franco-Uría [3], Olivet et al. [4], Borroto et al. [5]). La comparativa entre las curvas de distribución de tiempos de residencia experimentales con las teóricas permite determinar si en el comportamiento del digestor existe alguna deficiencia y si el proceso de mezclado es adecuado (Monteith [6]); sin embargo, estos modelos y ensayos no caracterizan el flujo a lo largo de todo el volumen del reactor.

La modelización mediante la simulación numérica del flujo ('Computational Fluid Dynamics', CFD) ofrece la posibilidad de analizar la distribución de tiempos de residencia en digestores anaerobios, mediante métodos numéricos de rastreo de partículas (Patwardhan [7], Terashima et al. [8] y Martin [9]), y obtener las características del flujo en el interior del reactor (Wu [10] y [11], Yu et al. [12], Wasewar y Sarathi [13], Vesvikar y Al-Dahhan [14]). Los estudios mediante CFD han empleado modelos multifásicos para determinar las trayectorias del flujo (Bridjeman [15]) o el flujo de mezcla entre fangos y biogás (Wu [16]) y determinado los modelos de turbulencia más adecuados para simular el comportamiento del fluido en el interior de un reactor (Wu [17]). Si bien, la mayoría de los estudios realizados se centran en los reactores con agitación mecánica, existen algunos estudios del flujo de fangos en el interior de digestores con sistema de recirculación hidráulica (Meroney y Colorado [18]).

1.2. Identificación de objetivos

En el presente trabajo se plantean los siguientes objetivos:

1. Análisis del funcionamiento de un reactor de mezcla continua.
2. Estudio constructivo del digestor.
3. Análisis de los criterios de diseño y factores de la digestión.
4. Desarrollo de un modelo numérico mediante el software ANSYS Fluent.
5. Validación experimental del modelo numérico.
6. Estudio de la influencia del diseño y potencia del sistema de recirculación sobre los factores que determinan la calidad del proceso de digestión, con la finalidad de determinar la posible optimización energética del sistema, mediante las siguientes estrategias:
 - 1.- Instalación de un regulador de frecuencia en las bombas de recirculación para reducir su potencia, con la intención de disminuir el consumo eléctrico. La influencia de este efecto se determinara mediante el estudio del modelo numérico bajo condiciones estacionarias para siete caudales de recirculación diferentes: caudal nominal de recirculación, 90, 80, 60, 45, 30 y 15% del caudal nominal.
 - 2.- Impulsión del caudal de recirculación a través de una única tubería de recirculación. Para estudiar el efecto del diseño sobre el flujo de fangos en el interior del digestor se realizara un modelo numérico considerando solo una de las tuberías de entrada al tanque del sistema de recirculación, estudiando dicho modelo bajo condiciones estacionarias para el caudal nominal de recirculación y para un caudal de recirculación igual al 65%del caudal nominal.
 - 3.- Implantación de un régimen de funcionamiento alternativo (arranque/parada) de las bombas de impulsión del sistema de recirculación. Se estudiarán los regímenes de arranque y parada desde el punto de funcionamiento nominal a través del estudio transitorio del modelo numérico, para obtener el tiempo en el que el fluido alcanza los niveles mínimos de agitación una vez detenida la recirculación. Se determinará un régimen de funcionamiento alternativo en función del valor del volumen activo, obteniendo el tiempo mínimo durante el cual se podrían detener las bombas de recirculación manteniendo la calidad del proceso de digestión.

2. EDAR de Alcantarilla

2.1. Introducción

El digestor de mezcla continua estudiado en este trabajo está instalado en la estación depuradora de aguas residuales (EDAR) de Alcantarilla, en Murcia, gestionada por la Entidad Regional de Saneamiento y Depuración de Aguas Residuales de la Región de Murcia (ESAMUR), cuyo servicio de mantenimiento y explotación es llevado a cabo por la empresa ACCIONA Agua.



Figura 2.1. Estación depuradora de aguas residuales de Alcantarilla.

La EDAR de Alcantarilla está diseñada para la depuración de $4.745.000 \text{ m}^3/\text{año}$ aplicando las tecnologías de fangos activos más doble capa, laminación, coagulación, floculación, filtro de arena y desinfección ultravioleta. El agua depurada mediante la instalación se destina al riego a través de su vertido en el cauce del río Guadalentín.

Dentro de los diferentes procesos que se llevan a cabo en la EDAR de Alcantarilla, el presente trabajo analiza el reactor de mezcla continua, también conocido por sus siglas anglosajonas CSTR (Continuos Stirred Tank Reactor), destinado a la purificación de aguas residuales mediante digestión anaerobia. Las características del reactor de mezcla continua, que serán necesarias para el desarrollo del modelo numérico, se recogen en este capítulo.

2.2. Descripción de la instalación

El sistema purificación mediante digestión anaerobia está compuesto por un tanque de grandes dimensiones, en cuyo interior tiene lugar el proceso de digestión, y cuatro subsistemas hidráulicos:

Subsistema 1.- Alimentación/Salida de fangos: Introduce y extrae los fangos del interior de tanque digestor.

Subsistema 2.- Calentamiento de fangos: Su misión es mantener lo fangos en el interior del tanque a una temperatura determinada.

Subsistema 3.- Recirculación/Agitación de fangos: Se encarga de mantener los fangos contenidos en el tanque en continuo movimiento.

Subsistema 4.- Salida de gases: Gestiona el gas natural producto del proceso de digestión.

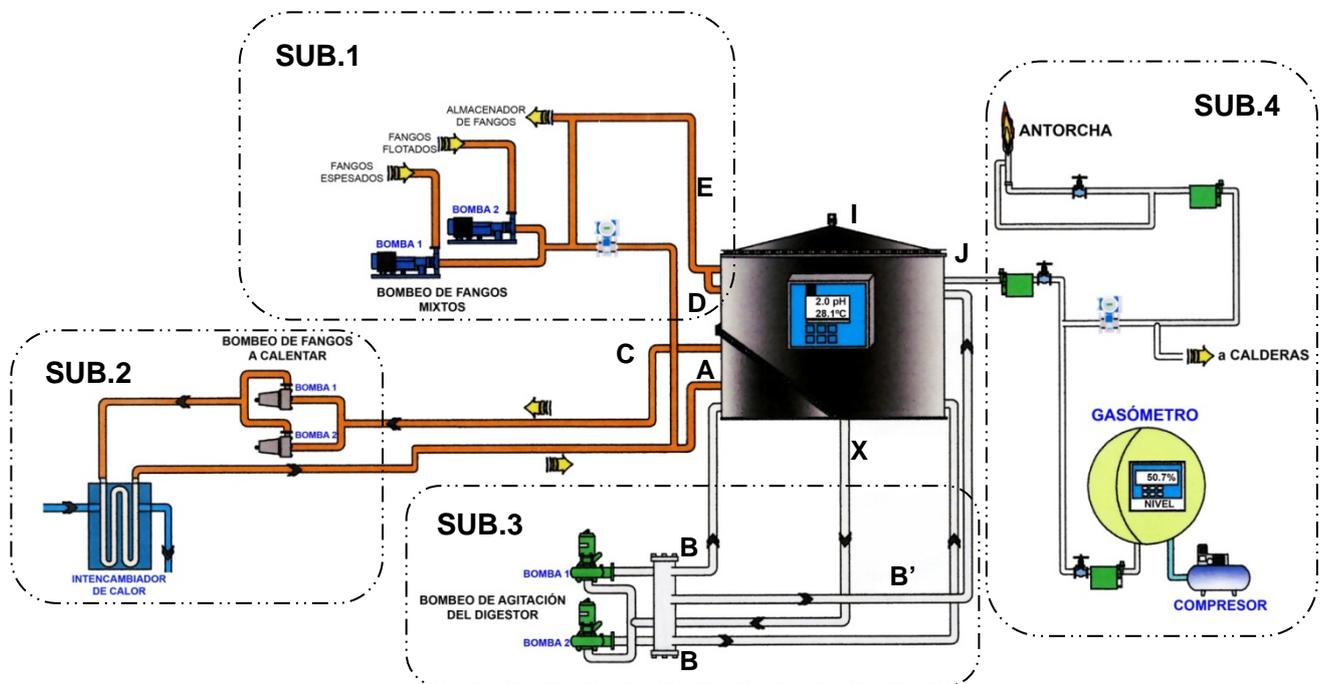


Figura 2.2. Esquema de la instalación.

En la Figura 2.2 se muestra el esquema del digestor de fangos junto a sus subsistemas asociados, en los que las diferentes tuberías están señalizadas según la siguiente nomenclatura:

- A : Bombeo de fangos calientes al digestor.
- B : Bombeo de recirculación/agitación de fangos.
- B' : Bombeo de recirculación/agitación de fangos, rotura de costra.
- C : Aspiración de fangos fríos al calentamiento.
- D : Salida de sobrenadantes del digestor.
- E : Salida de sobrenadantes del digestor.
- I : Válvula de anti-vacío y sobrepresión.
- J : Salida de gas a gasómetro.
- X : Aspiración de recirculación/agitación de fangos.

2.3. Características constructivas y datos experimentales

A continuación se exponen las características de los diferentes subsistemas y de los fluidos presentes en la instalación, donde las cotas indicadas son las verticales referidas al punto más bajo de la base del tanque digestor.

Subsistema 1 - Alimentación/Salida de fangos:

- Tubería de Entrada DN-150 ($\varnothing_{int} = 155,1$ mm) - Cota: 1,85 m.
- Tubería de Salida DN-200 ($\varnothing_{int} = 207,3$ mm) - Cota: 9,23 m.
- Caudal de entrada: $150 \text{ m}^3/\text{día} = 6'25 \text{ m}^3/\text{h} = 1'796875 \text{ Kg/s}$.
- Caudal de salida: $150 \text{ m}^3/\text{día} = 6'25 \text{ m}^3/\text{h} = 1'796875 \text{ Kg/s}$.

Subsistema 2 - Calentamiento de fangos:

- Tubería DN-150 ($\varnothing_{int} = 155,1$ mm) - Cota: 8 m.
- Caudal de salida de fangos fríos: $60 \text{ m}^3/\text{h} = 17'25 \text{ Kg/s}$.

Subsistema 3 - Recirculación/Agitación de fangos:

- Tubería de Aspiración ($\varnothing_{int} = 500$ mm)- Cota de Entrada: 9,735 m.
- Tuberías de Impulsión DN-400($\varnothing_{int} = 401,4$ mm) - Cota de Salida: 1,25 m.
- Caudal de recirculación: $818 \text{ m}^3/\text{h} = 235'175 \text{ Kg/s}$.

Subsistema 4.- Salida de gases:

- Tubería de extracción de biogás ($\varnothing_{int} = 100$ mm)
- Caudal de gas: $130 \text{ m}^3/\text{h}$.

Características del Tanque:

- Volumen: 3.325 m^3 .
- Diámetro: 20 m.
- Cota máxima del fluido: 10,88 m.
- Cota mínima del fluido: 10,58 m.

Características de los Fangos:

- Densidad: 1.035 Kg/m^3 .
- Viscosidad a 37°C : $37'7 \text{ cp} = 0'00377 \text{ Kg}/(\text{m}\cdot\text{s})$; Par: 63'4%.
- Materia en suspensión: 1'91%.

Características de Biogás:

- Densidad: $1,08 \text{ Kg/m}^3$.
- Composición:
 - 50-70% de Metano (CH_4).
 - 30-40% de Anhídrido Carbónico (CO_2).
 - $\leq 5\%$ de Hidrógeno (H_2), Ácido Sulfhídrico (H_2S), y otros gases.

2.4. Criterios de diseño

Los reactores de mezcla continua requieren largos tiempos de retención hidráulica (TRH) para un tratamiento efectivo del influente, ya que carecen de medios específicos de retención de la biomasa activa. Con la reducción del TRH en un digestor de mezcla completa, la cantidad de microorganismos dentro del digestor también disminuye, ya que son lavados con el efluente. El tiempo de retención hidráulico crítico (TRC) se alcanza cuando las bacterias son extraídas del reactor a una velocidad mayor a la que éstas se reproducen. Dado que las bacterias formadoras de metano son de más lento crecimiento que las bacterias formadoras de ácidos, las primeras son consideradas como el componente limitante en el proceso de digestión anaerobia. Para asegurar el funcionamiento del proceso, los TRH suelen variar entre 10 y 30 días a 35 °C.

El tiempo de retención hidráulica se calcula como:

$$TRH = \frac{V_T}{Q_{f-IN}} \quad (2.1)$$

siendo V_T el volumen de fangos contenido en interior del tanque y Q_{f-IN} el caudal de entrada de fangos.

Para que el proceso de digestión se produzca satisfactoriamente, es necesario que el fluido se encuentre en continua agitación. Ésta es producida a través del subsistema de agitación/recirculación de fangos, que funciona de manera continua, realizando la aspiración mediante una tubería instalada en el centro del tanque, que absorbe los fangos a aproximadamente 1'5 metros por debajo de la capa límite superficial del fluido, para después reinyectarlos en el tanque mediante dos tuberías laterales, induciendo así en los fangos del interior del tanque un movimiento en forma de vórtice y proporcionando la agitación necesaria para el proceso.

El parámetro que determina el mezclado de los fangos es el tiempo de recirculación del volumen del digestor (TRVD) calculado como:

$$TRVD = \frac{V_T}{Q_{Mezcla}} \quad (2.2)$$

siendo V_T el volumen de fangos contenido en interior del tanque y Q_{Mezcla} el caudal de recirculación.

Según los datos constructivos del digestor, los factores nominales de la digestión son los siguientes:

- Tiempo de Retención Hidráulico: 22 días y 4 horas.
- Tiempo de Recirculación del Volumen del Digestor: 4 horas.

3. Modelo Matemático

3.1. Introducción

Un modelo numérico tiene como misión reproducir un fenómeno que ocurre en la realidad mediante simulación computacional. El desarrollo de un modelo numérico requiere un análisis matemático previo con la finalidad de obtener las ecuaciones matemáticas que expresan el comportamiento del fenómeno. En este capítulo se estudian las condiciones de contorno y la modelización matemática del reactor de mezcla continua objeto de análisis para desarrollar un modelo numérico del mismo, estudiando su estructura física, materiales de los que está constituido, condiciones de contorno y comportamiento.

3.2. Volumen de control para el reactor

La geometría estudiada, mostrada en la Figura 3.1, consiste en un tanque cilíndrico (A en la Fig. 3.1) en cuyo interior tiene lugar el proceso de digestión junto con varios sistemas hidráulicos; el sistema de recirculación (E, Fig.3.1) tiene como función realizar el mezclado en el interior del reactor y está compuesto por una tubería instalada en el interior del reactor que absorbe los fangos (e_1 , Fig. 3.1) para después reinyectarlos en los laterales del tanque (e_2 y e_2' , Fig. 3.1) con una inclinación adecuada para generar cierta vorticidad en el flujo; el sistema de calefacción y entrada introduce el caudal de entrada de fangos (a través de B, Fig. 3.1) en el interior del tanque así como un cierto caudal recirculado (a través de D, Fig. 3.1) y calentado para compensar las pérdidas térmicas a través de las paredes del tanque del reactor; por último, el sistema de salida (C, Fig. 3.1) está compuesto por una tubería instalada en el interior del tanque con una embocadura en forma de embudo, cuya misión es facilitar la salida de los fangos digeridos del tanque reactor.

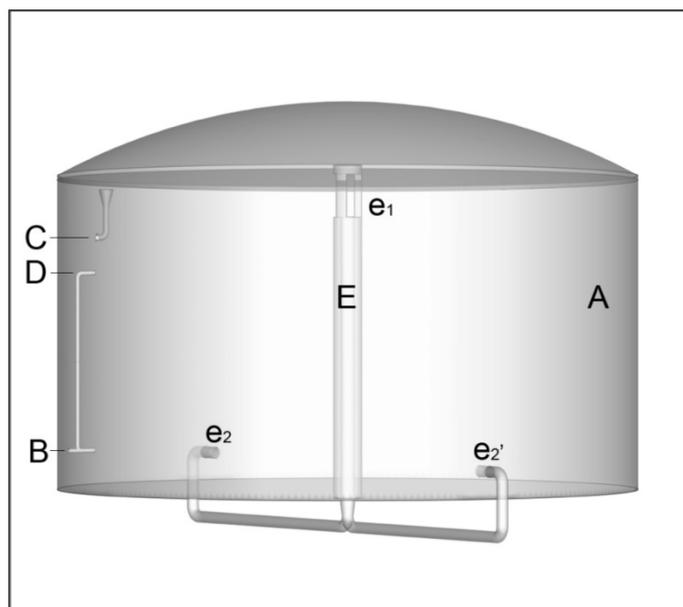


Figura 3.1. Geometría del tanque digestor.

3.3. Algunas simplificaciones relevantes

En la modelización del sistema se han tenido en cuenta las siguientes simplificaciones:

Aunque la presencia de una fase sólida podría significar la necesidad de incluir un modelo de viscosidad no newtoniana, se ha considerado que el porcentaje de fase sólida es reducido y por tanto no es necesario incluir este modelo, considerando el modelo $k-\varepsilon$ estándar con funciones logarítmicas de pared como el más adecuado para la simulación del comportamiento turbulento del flujo en el interior del reactor.

Subsistemas Hidráulicos

Ya que para validar el modelo se debe tener en cuenta el tiempo de retención hidráulica del sistema, los subsistemas hidráulicos de recirculación/agitación y calefacción, que extraen fangos del digestor para posteriormente volver a inyectarlos, deben ser incluidos en el modelo numérico, con la finalidad de que las partículas que entran en estos subsistemas vuelvan a ser inyectadas en el tanque. Sin embargo, no es necesaria una simulación completa de estos sistemas en el modelo, por lo cual han sido simplificados según la geometría que se puede observar en la figura 3.1.

Subsistema de Calentamiento

A pesar de que el subsistema de calentamiento ha sido incluido en el modelo, su interés solo se debe al flujo que induce y no al efecto de calentamiento. Este subsistema sirve para mantener los fangos del interior del tanque a una temperatura constante, contrarrestando así las pérdidas de calor producidas a través de las paredes del tanque. Sin embargo, estas pérdidas no son elevadas, y al no existir grandes variaciones de temperatura en el sistema, este efecto no ha sido incluido por considerarse despreciable.

Capa Superficial

La salida de los fangos se realiza por rebose del cono de aspiración de la tubería de salida. Ya que la simulación de la capa límite superficial requiere un gran coste computacional y se considera que su influencia sobre el estudio realizado no es determinante, se ha decidido simplificar la capa límite superficial mediante una interfase con esfuerzo cortante nulo. Por lo tanto, la entrada a la tubería de salida no puede estar ubicada a la misma altura que la cota máxima del fluido, por lo que se ha elevado la capa límite superficial 15 cm por encima del cono de la tubería de salida.

3.4. Condiciones de Contorno

Las condiciones de contorno a las que se ve expuesto el flujo de fangos en el interior del tanque reactor y que condicionarán su comportamiento fluido dinámico vienen dadas por los caudales de entrada y salida, los caudales de los sistemas de recirculación y calentamiento, así como por las características que determinan las fuerzas de fricción entre los fangos y las paredes del tanque o tuberías del sistema de digestión.

- El flujo de entrada de fangos ha sido establecido como un flujo másico de 1'79 Kg/s, con un flujo másico de salida idéntico al de entrada.
- Los caudales de los sistemas de recirculación y calentamiento quedan establecidos por las bombas de dichos sistemas y su efecto ha sido introducido en el modelo numérico mediante saltos de presión ajustados para obtener el caudal experimental necesario.
- La lámina libre ha sido establecida especificando un esfuerzo cortante nulo en la interfase entre el fluido y el gas.
- Se ha establecido en las paredes del tanque del reactor la condición de no deslizamiento del flujo fluido, así como en las tuberías de los diferentes sistemas hidráulicos. Las tuberías de los sistemas hidráulicos del digestor están fabricadas en acero por lo que se ha considerado una rugosidad de 0'08 mm correspondiente el valor medio del rango de rugosidades para tuberías de acero comerciales. La tubería central del sistema de recirculación y el tanque del digestor están constituidos por hormigón. Puesto que se carece de información experimental en cuanto a su rugosidad y debido a que el efecto de fricción entre fangos y pared puede influir considerablemente sobre los gradientes de velocidad del fluido en el interior del reactor se ha realizado un estudio de la influencia de la rugosidad sobre el comportamiento del flujo.

La velocidad media del flujo de fangos en el interior del digestor en función del valor de rugosidad superficial aplicado en las paredes de hormigón (tanque y tubería de aspiración del sistema de recirculación) se muestra en la Figura 3.2. El análisis de rugosidades demuestra que la velocidad media de los fangos prácticamente no está influenciada cuando el valor de rugosidad se encuentra por debajo de los 5 mm.

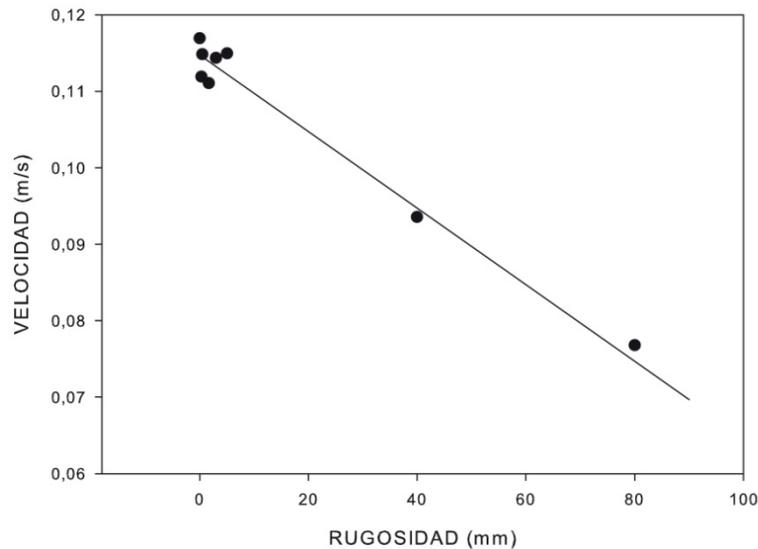


Figura 3.2 Velocidad media de los fangos en el interior del digestor en función de la rugosidad de la pared del tanque.

Como se aprecia en la Figura 3.2, cuando se consideran rugosidades de un orden de magnitud mayor (del orden de centímetros), simulando, por ejemplo, deposiciones de material sólido en las paredes del digestor, su efecto influye de modo significativo en el campo de velocidades en el interior del reactor, frenando la masa fluida, para una rugosidad de 4 cm se produce una reducción del 20% en la velocidad media de los fangos, cuando se mantiene la potencia del sistema de recirculación. Tras analizar la influencia de la rugosidad en el comportamiento del flujo, se ha determinado considerar como condición de contorno en las paredes de la tubería central y del tanque digestor una rugosidad de 1,65 mm, correspondiente al valor medio del rango habitual de acabado superficial del hormigón (0,3 - 3 mm).

Condiciones de Operación

La posible existencia de gradientes de temperatura y su efecto sobre la densidad de los fangos se considera despreciable ya que la estratificación térmica es eliminada por el proceso de mezclado y las pérdidas de calor son compensadas por el sistema de calefacción, con lo que las condiciones de operación consideradas son las siguientes:

Presión: 101.325 Pa.
Gravedad: 9,81 m/s².

3.5. Modelos de turbulencia

Dada la importancia que en esta investigación tiene la modelización de la turbulencia, resulta conveniente introducir detalladamente los distintos modelos de turbulencia que serán objeto de aplicación. Para tal fin, se comenzará describiendo algunos aspectos generales de la modelización de la turbulencia, para centrarse posteriormente en el modelo $k-\varepsilon$, utilizado en este trabajo.

En los flujos turbulentos, las variables instantáneas incluidas en las ecuaciones generales como velocidad del flujo, densidad, temperatura y presión, fluctúan con el tiempo de manera aleatoria, ocasionando igualmente el mezclado de cantidades de transporte como cantidad de movimiento y energía. Dado que estas fluctuaciones pueden ser de pequeña escala y de alta frecuencia, resulta en muchos casos computacionalmente muy costoso afrontar la simulación directa de la mayoría de los problemas planteados. No obstante, se han aportado algunas soluciones DNS (Direct Numerical Simulation) a problemas concretos como los presentados por Versteegh y Nieuwstadt [19]. Teniendo en cuenta este planteamiento, una de las prácticas más comunes en muchas de las aplicaciones en ingeniería consiste en resolver numéricamente las ecuaciones generales de conservación promediadas en el tiempo, conocidas como ecuaciones promediadas de Reynolds. Sin embargo, al promediarlas aparecen nuevas variables desconocidas, designadas como esfuerzos y flujos turbulentos de Reynolds, que se han de estimar para su resolución. Para resolver este problema, conocido como el problema de cierre, se plantean los distintos modelos de turbulencia.

No existe un modelo de turbulencia aceptado universalmente como óptimo para todos los posibles problemas que se puedan plantear. La elección de un modelo de turbulencia concreto dependerá de aspectos como la física del problema, el nivel de precisión requerido, los recursos computacionales y la cantidad de tiempo disponible para la simulación, entre otros.

Los modelos de turbulencia clásicos se basan en asumir que existe una analogía entre los esfuerzos viscosos y los esfuerzos de Reynolds sobre el flujo medio. Experimentalmente se observa que la turbulencia decae a menos que exista un esfuerzo cortante en el flujo o un aporte continuado de energía cinética, y que los esfuerzos turbulentos aumentan a medida que lo hace la deformación (Versteeg y Malalasekera [20]). Teniendo en cuenta estas consideraciones, Boussinesq propuso en 1877 que los esfuerzos de Reynolds deberían ir asociados a la deformación media de la siguiente forma:

$$s_{ij} = -\overline{u_i u_j} = \nu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.1)$$

similar a la expresión del esfuerzo viscoso laminar, donde s_{ij} se conoce como el tensor de esfuerzos turbulentos de Reynolds específico.

El transporte turbulento de calor, masa y otras propiedades escalares Φ se modelan de forma similar:

$$\overline{-u_i \phi} = \Gamma_t \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \quad (3.2)$$

Debido a que el transporte turbulento de momento, calor o masa se debe al mismo mecanismo (mezclado de vórtices) se espera que el valor de la difusividad turbulenta Γ_t sea próximo al de la viscosidad turbulenta ν_t .

Sin embargo, las ecuaciones anteriormente descritas no resuelven el problema de la turbulencia sino más bien transfieren la atención a modelizar ν_t . La mayoría de estas modelizaciones se basan en el análisis dimensional. En este punto conviene tener en cuenta que dicho análisis no nos dice nada acerca de la física de los procesos; somos nosotros al elegir las variables características para definir un modelo quienes los tenemos en cuenta.

Las unidades de la viscosidad cinemática turbulenta ν_t son m^2/s , por lo que necesitamos al menos dos de las tres escalas (velocidad, longitud y tiempo) para modelizarla. Algunos modelos estiman estas escalas a través de expresiones algebraicas. Así, el modelo de longitud de mezcla de Prandtl parte de la hipótesis de que la mayoría de la energía cinética turbulenta está contenida en los grandes vórtices y por tanto la escala de longitud de la turbulencia l es la característica de estos vórtices que interactúan con el flujo medio. Si asumimos que existe una fuerte conexión entre el flujo medio y el comportamiento de los vórtices más grandes podemos unir la escala de velocidad característica de los vórtices con las propiedades del flujo medio. Estas hipótesis funcionan bien en flujos turbulentos bidimensionales donde solamente son significativos la componente del tensor de esfuerzos de Reynolds $\overline{-u_i u_j}$ y el gradiente de velocidad media $\partial U / \partial y$:

$$\nu_t = C \cdot v \cdot l, \quad \nu = C' \cdot l \cdot \left| \frac{\partial U}{\partial y} \right| \quad (3.3)$$

siendo C y C' constantes particulares. Este modelo simplista de la turbulencia no resulta apropiado en aquellos casos en los que sea preciso obtener los efectos de transporte de las propiedades turbulentas a través del flujo medio y de la difusión así como valorar la producción y destrucción de turbulencia. Por ello, otros modelos más complejos proponen resolver ecuaciones de transporte adicionales que tengan en cuenta estos aspectos.

El siguiente modelo en complejidad lo representan los modelos que resuelven una ecuación adicional, generalmente la ecuación para la energía cinética turbulenta k , que se definirá más adelante, y estiman la escala de longitud utilizando la aproximación de longitud de mezcla. Estas cantidades tienen que combinarse para obtener la viscosidad turbulenta. Estos modelos tienen la ventaja de su reducido coste computacional, aunque resultan modelos incompletos dado que en ellos hemos de estimar una de las cantidades en función del caso que nos ocupa. A estos modelos se les conoce como modelos de una ecuación.

Otros modelos más complejos no solamente calculan k sino también la escala de longitud de la turbulencia o equivalente. Consecuentemente, estos modelos de dos ecuaciones son completos, es decir, pueden utilizarse para predecir propiedades de un flujo turbulento dado sin un conocimiento previo de la estructura de la turbulencia. El punto de partida para todos los modelos de dos ecuaciones es la hipótesis de viscosidad turbulenta de Boussinesq (3.1) y la ecuación de la energía cinética turbulenta k . Hay cierta arbitrariedad al definir la escala de longitud de la turbulencia, l , o equivalente. Kolmogorov en 1942 (Wilcox [21]) señaló que se necesitaba una segunda ecuación de transporte para calcular el promedio de disipación específica, ω . Esta cantidad tiene dimensiones de (tiempo)⁻¹. Según su propuesta, a través del análisis dimensional, la viscosidad turbulenta, la escala de longitud turbulenta y la disipación vienen dadas por:

$$v_t \sim \frac{k}{\omega} \quad l \sim \frac{k^{1/2}}{\omega} \quad \varepsilon \sim k\omega \quad (3.4)$$

Esta definición de escalas representa el punto de partida del modelo k - ω que será posteriormente descrito más en detalle. Chou en 1945 (Wilcox [21]) propuso modelizar la ecuación para ε . En términos de esta formulación, v_t y l son:

$$v_t \sim \frac{k^2}{\varepsilon} \quad l \sim \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (3.5)$$

Rotta en 1951 (Wilcox [21]) sugirió inicialmente una ecuación de transporte para la escala de longitud, l , y después (1968) propuso una ecuación para el producto $k l$. En cualquier caso,

$$v_t \sim \frac{k^{1/2}}{l} \quad \varepsilon \sim \frac{k^{3/2}}{l} \quad (3.6)$$

Más recientemente, Zeierman y Wolfshtein en 1986 (Wilcox [21]) introdujeron una ecuación de transporte para el producto $k t$, siendo t el tiempo de disipación de la turbulencia, recíproco del parámetro de Kolmogorov ω :

$$v_t \sim kt \quad l \sim k^{1/2} t \quad \varepsilon \sim \frac{k}{t} \quad (3.7)$$

Teniendo en cuenta que la energía cinética turbulenta, k , se define como

$$k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (3.8)$$

donde u' , v' y w' representan las componentes fluctuantes de la velocidad, estos modelos de dos ecuaciones no permiten detectar diferencias entre dichas componentes según las diferentes direcciones del espacio. Por ello, no son válidos en problemas turbulentos con alto grado de anisotropía.

Para abordar problemas con anisotropía existen otros modelos donde se modelizan cada uno de los esfuerzos turbulentos de Reynolds, además de una ecuación para resolver la escala de longitud de la turbulencia. Se trata de modelos de alto coste computacional, cuyo uso no está justificado en muchos problemas prácticos.

De todos los modelos indicados en el desarrollo anterior, el modelo k - ϵ estándar de dos ecuaciones ha sido utilizado para resolver los casos de flujo turbulento en la configuración sometida a estudio. Antes de afrontar el modelo k - ϵ estándar pasaremos a describir la ecuación correspondiente a la energía cinética turbulenta, dado que constituye la primera de las dos ecuaciones.

3.5.1. Energía cinética turbulenta (k)

Los modelos de la ecuación de la energía turbulenta han sido desarrollados para incorporar efectos no locales y de historia del flujo en la viscosidad turbulenta. En ambos modelos objeto de estudio, la energía cinética turbulenta representa la base para la escala de velocidad. Por ello, en términos de las escalas l y k , el análisis dimensional dicta que la viscosidad cinemática turbulenta venga dada por

$$v_t = C \cdot k^{1/2} \cdot l \quad (3.9)$$

La cuestión que ahora se plantea es cómo determinar k . La respuesta la podemos encontrar si nos fijamos en la relación que existe entre la traza del tensor de esfuerzos turbulentos y la propia energía cinética turbulenta k :

$$s_{ii} = -\overline{u_i' u_j'} = -2k \quad (3.10)$$

Como se puede apreciar en (3.10) la traza del tensor de esfuerzos de Reynolds es proporcional a la energía cinética de las fluctuaciones turbulentas por unidad de volumen. Para flujo incompresible, la traza de dicho tensor conduce a la siguiente ecuación de transporte para k :

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = s_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \epsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \overline{u_i' u_i' u_j'} - \frac{1}{\rho} \overline{p' u_j'} \right] \quad (3.11)$$

(I) (II) (III) (IV) (V) (VI) (VII)

donde (I) es el término transitorio y (II) el término convectivo de la ecuación, y representan la variación total de k en un diferencial de volumen; (III) representa la producción de turbulencia y es la tasa de transferencia de energía cinética del flujo medio a la turbulencia, (IV) representa la disipación y es la tasa a la que la energía cinética turbulenta se convierte en energía interna y viene dado por la expresión $\epsilon \approx \nu (\partial u_i' / \partial x_k) (\partial u_i' / \partial x_k)$ (V) es el término de difusión molecular, representa la difusión de energía turbulenta producida por el proceso de transporte natural molecular del fluido; (VI) es el transporte turbulento o promedio a través del que se transporta la energía cinética turbulenta debido a las fluctuaciones turbulentas; (VII) es la difusión por presión o el transporte turbulento producido por la relación entre la presión y las fluctuaciones de la velocidad.

El término transitorio, la convección y la difusión molecular están perfectamente determinados, mientras la producción, la disipación, el transporte turbulento y la difusión por presión representan cantidades desconocidas que se deben estimar. Para cerrar esta ecuación necesitamos especificar las cantidades que se acaban de exponer. No hemos de olvidar que estas aproximaciones para cerrar el sistema no gozan de un perfecto rigor. El objetivo es encontrar correlaciones que proporcionen las soluciones posibles de mayor precisión.

La aproximación empleada para determinar el tensor de esfuerzos de Reynolds viene dada por la expresión

$$s_{ij} = 2\nu_t S_{ij} - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \quad (3.12)$$

donde S_{ij} es el tensor de esfuerzos del movimiento medio. Nótese que sobre la expresión (3.1) definida por Boussinesq se ha añadido el término $-\frac{2}{3} k \delta_{ij}$ con el fin de que la traza del tensor s_{ij} esté correctamente definida. En efecto, para flujo incompresible, la traza del tensor de esfuerzos medio es cero ($S_{ii} = 0$) y la expresión (3.13) conduce a $s_{ij} = -2 k$, coherente con la ecuación (3.10).

La aproximación estándar realizada para representar el transporte turbulento de cantidades escalares en un flujo turbulento es a través de la difusión de gradiente. De manera análoga a los procesos de transporte molecular, decimos que:

$$-\overline{u_j \phi} \sim \nu_t \frac{\partial \Phi}{\partial x_j} \quad (3.13)$$

No hay correspondencia directa para el término de difusión por presión. En ausencia de datos experimentales, el término de difusión por presión se suele agrupar con el término de transporte turbulento, suponiendo que la suma de ambos se comporta como un proceso de transporte por gradiente. Afortunadamente se ha comprobado que para flujos sencillos este término es muy pequeño.

Así, se supone que:

$$\frac{1}{2} \overline{u_i u_i u_j} + \frac{1}{\rho} \overline{p' u_j} = \frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \quad (3.14)$$

siendo σ_k un coeficiente de cierre, constante en la mayoría de los casos.

La forma en la que determinamos la disipación entre los distintos modelos de turbulencia no es única. Recordemos que todavía tenemos dos parámetros desconocidos, la escala de longitud de la turbulencia, l , y la disipación, ϵ . Si se supone que ambas propiedades son estrictamente funciones de la turbulencia e independientes de las propiedades del fluido como la viscosidad molecular, el análisis dimensional proporciona la relación $\epsilon \sim k^{3/2} / l$. Todavía necesitamos por tanto determinar la escala de longitud de la turbulencia y cerrar así nuestro sistema de ecuaciones. Esta elección es propia de cada modelo, como se pondrá de manifiesto en los próximos apartados.

3.5.2. Modelo k - ϵ

El modelo k - ϵ estándar es un modelo semiempírico basado en las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta, k , y su promedio de disipación, ϵ . La ecuación de transporte para k se deriva de forma similar a como se presentó en el apartado anterior, mientras que la ecuación para ϵ es más bien el producto del análisis dimensional unido a un razonamiento físico que el desarrollo de una ecuación exacta matemática.

En este modelo utilizamos k y ϵ para definir la escala de velocidad v y la escala de longitud l , representativas de las grandes escalas de la turbulencia:

$$l \sim \frac{k^{3/2}}{\epsilon} \quad v \sim k^{1/2} \quad (3.15)$$

Cabe preguntarse acerca de la validez de utilizar la variable ϵ propia de los vórtices más pequeños para definir la escala l propia de los vórtices más grandes. Esto es posible dado que para números de Reynolds altos la tasa de transferencia de energía del flujo medio a los grandes vórtices coincide con la tasa de transferencia de los vórtices grandes a los vórtices pequeños. Así, en este modelo los valores de k y ϵ están intrínsecamente unidos. Si este no es el caso, la energía en las diferentes escalas puede crecer o disminuir sin límite. En la práctica, esto no suele ocurrir para flujos completamente turbulentos. Por ello hemos de decir que este modelo es solamente válido para este tipo de flujos.

Teniendo en cuenta la definición de escalas anterior, la viscosidad turbulenta según este modelo vendrá dada por:

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (3.16)$$

Las ecuaciones que constituyen el modelo se detallan a continuación:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\Gamma_k}{\rho} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \frac{G_k}{\rho} + \frac{G_b}{\rho} + \frac{S_k}{\rho} \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + U_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\Gamma_\epsilon}{\rho} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\rho k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \frac{\epsilon^2}{k} + \frac{S_\epsilon}{\rho} \quad (3.18)$$

donde G_k representa la generación de energía cinética turbulenta debido a los gradientes de velocidad media, G_b es la generación de energía cinética turbulenta debido a la flotación, S_ϵ y S_k representan los términos fuente de las ecuaciones de transporte, Γ_ϵ la difusividad efectiva para la ecuación de ϵ .

Modelización de los términos de producción G_k y G_b

$$\frac{G_k}{\rho} = s_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \quad (3.19)$$

$$\frac{G_b}{\rho} = g_i \beta \frac{v_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (3.20)$$

Se debe tener en cuenta que dependiendo de la estratificación térmica, este término fuente de flotación puede actuar mejorando la turbulencia como un término de producción o amortiguándola, como un término de destrucción.

Modelización de la difusividad efectiva Γ_ϵ

$$\frac{\Gamma_\epsilon}{\rho} = \nu + \frac{v_t}{\sigma_\epsilon} \quad (3.21)$$

Las constantes del modelo $C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$, $C_{3\epsilon}$, C_μ , σ_k y σ_ϵ presentadas en la ecuación (3.18) vienen dadas por:

$$\left. \begin{array}{l} C_{1\epsilon} = 1,44 \\ C_{2\epsilon} = 1,92 \\ C_{3\epsilon} = \tanh \left| \frac{v}{u} \right| \\ C_\mu = 0,09 \\ \sigma_k = 1 \\ \sigma_\epsilon = 1,3 \end{array} \right\} \quad (3.22)$$

siendo v y u las componentes de la velocidad del flujo paralela y perpendicular respectivamente.

Transición de régimen laminar a régimen turbulento

Uno de los objetivos principales en el desarrollo de modelos de turbulencia en los últimos años es el de ser capaces de captar la transición de régimen laminar a régimen turbulento, no obstante y tal y como se ha planteado anteriormente, el modelo $k-\varepsilon$ no puede ser utilizado para predecir la transición, ya que en el proceso de la transición es posible encontrar discrepancias entre la producción y la disipación, motivo por el que el modelo estándar $k-\varepsilon$ no proporciona resultados acertados. Durante los últimos años, algunos investigadores han modificado este modelo para simular flujos con números de Reynolds bajos. Así, Ince y Launder [22] introdujeron en el modelo la hipótesis de difusión de gradiente generalizado para modelizar el vector de flujo de calor. Hanjalic y Vasic [23] propusieron un modelo algebraico para el flujo de calor que proporcionó resultados satisfactorios. Según Heindel et al. [24] la inclusión de modificaciones en el modelo $k-\varepsilon$ para ajustarse al comportamiento del flujo para Reynolds bajos proporciona en general una mejora en la predicción del flujo de calor en la pared. Sin embargo, tras el estudio de Henkes y Hoogendoorn [25], se pusieron de manifiesto algunos problemas como que los resultados no eran independientes de la densidad de mallado cerca de la pared. En muchas ocasiones, la transición a lo largo de una pared vertical no adiabática se retrasaba a medida que la malla se refinaba, obteniéndose en ocasiones resultados laminares irrealistas. Por estas razones expuestas, no se utilizará este modelo para predecir la transición. Sin embargo, al presentar el flujo altos números de Reynolds dentro de todo el volumen fluido no es necesario modelizar la transición y se considera que el flujo es totalmente turbulento, por lo que el modelo de turbulencia $k-\varepsilon$ estándar es válido para reproducir la turbulencia dentro del modelo numérico desarrollado.

Tratamiento cerca de la pared

Otro de los aspectos a considerar a la hora de describir el modelo de turbulencia es el tratamiento del flujo cerca de una pared. La presencia de una pared afecta de manera significativa al desarrollo de un flujo turbulento. La condición de no deslizamiento que impone una pared modifica el valor de la velocidad media del flujo, al tiempo que, muy cerca de la misma, el amortiguamiento viscoso reduce las fluctuaciones de la velocidad. Sin embargo, cuando nos alejamos de esta subcapa viscosa, la turbulencia aumenta rápidamente por la producción de energía cinética turbulenta debido a los grandes gradientes en la velocidad media.

Parece claro que la modelización de la zona cercana a la pared resulta decisiva a la hora de obtener resultados numéricos satisfactorios, ya que ésta puede considerarse como una de las principales fuentes de vorticidad media y de turbulencia. Así podemos decir que una representación precisa del flujo en la región cercana a la pared determina el éxito de las predicciones de un flujo en presencia de las mismas.

Según los numerosos experimentos existentes, la región cercana a la pared puede ser subdividida en tres capas. La capa interior denominada subcapa viscosa, donde el flujo puede considerarse laminar y la viscosidad molecular juega un papel importante en la transferencia de cantidad de movimiento, energía y masa; la región exterior de la capa límite, capa de flujo completamente turbulento, donde la turbulencia es el factor más dominante en el desarrollo del flujo, y la zona intermedia entre estas dos capas, donde los efectos de las fuerzas de viscosidad molecular y la turbulencia tienen un peso similar.

Atendiendo a este comportamiento universal cerca de la pared, algunos modelos de turbulencia imponen en esta zona las llamadas leyes de pared que simulan este comportamiento y evitan de este modo tener que resolver el flujo en esta zona. Esto puede ser apropiado en flujos donde la turbulencia está plenamente desarrollada y no existe una alta tridimensionalidad ni zonas con recirculación. Sin embargo, cuando sí que se producen estos efectos, la alternativa de las leyes de pared no resulta apropiada, dado que el flujo no se desarrolla según ellas en la zona cercana a la pared. Para estas situaciones resulta más apropiado resolver íntegramente la capa límite, incluyendo la subcapa viscosa.

Cuando el número de Reynolds es alto, el flujo cerca de la pared se asemeja al comportamiento universal cerca de la pared, o leyes de pared, descrito anteriormente. Estas leyes son utilizadas por el modelo $k-\varepsilon$ cerca de la pared para evitar así el hecho de tener que simular el flujo en esta zona, donde la producción y la disipación no tienen porqué estar equiparadas y donde por tanto este modelo no es de aplicación. Si y es la coordenada normal a la pared, la velocidad media en un punto y_c con $30 < y_c^+ < 500$ satisface la ley logarítmica y las medidas de la energía cinética turbulenta indican que el promedio de producción de turbulencia es igual al promedio de disipación. Así, las leyes de pared utilizadas en este modelo son las descritas en las expresiones (3.24), (3.25), (3.26) y (3.27).

El valor de u^* viene dado por

$$u^* = \frac{1}{\kappa_v} \ln(Ey^*) \quad (3.23)$$

tomando la constante E el valor aproximado de 9,8 y con u^* y y^* dados por

$$u^* \equiv \frac{U_c C_\mu^{1/4} k_c^{1/2}}{\tau_w / \rho} \quad (3.24)$$

$$y^* \equiv \frac{\rho C_\mu^{1/4} k_c^{1/2} y_c}{\mu} \quad (3.25)$$

donde κ_v representa la constante de von Kármán. El procedimiento de cálculo consiste en resolver de manera conjunta en la capa en la que estemos, partiendo de los valores iniciales, la ecuación para la energía cinética turbulenta junto con el valor de ω en la primera celda pegada a la pared, según se ha puesto de manifiesto en el desarrollo anterior, y la viscosidad turbulenta hasta llegar a una solución tan aproximada como el método de cálculo permita.

La ley de pared impuesta para la temperatura en la ecuación de la energía viene dada por

$$T^* \equiv \frac{(T_p - T_c) \rho c_p C_\mu^{1/4} k_c^{1/2}}{\dot{q}} = \begin{cases} Pr y^*, & (y^* < y_T^*) \\ Pr_t \left[\frac{1}{\kappa_v} \ln(Ey^*) + P \right], & (y^* > y_T^*) \end{cases} \quad (3.26)$$

donde \dot{q} es el flujo de calor y P se calcula utilizando la fórmula de Jayatilleke [26].

$$P = 9,24 \left[\left(\frac{Pr}{Pr_t} \right)^{3/4} - 1 \right] \left[1 + 0,28 e^{-0,007 (Pr/Pr_t)} \right] \quad (3.27)$$

3.6. Modelo matemático de la fase discreta

El estudio del flujo fluido en su transcurso a través del digestor se ha realizado mediante la inyección de partículas en sistema por medio de un modelo lagrangiano de fase discreta que proporciona el código 'ANSYS Fluent'. Las partículas sin masa inyectadas son arrastradas por el flujo comportándose como trazadores que permiten estudiar el comportamiento y la trayectoria del flujo, así como su tiempo de permanencia en el interior del sistema.

El modelado de fluidos multifásicos mediante la aproximación de Euler-Lagrange es capaz de simular la interacción entre dos fluidos, siendo uno de ellos la fase continua tratada desde el punto de vista de Euler, siendo el otro fluido la fase dispersa que ocupa una pequeña fracción del volumen, formado por partículas que se modelizan desde el punto de vista Lagrangiano. El volumen de fangos en el interior del digestor se trata como un fluido continuo (de ahí la denominación de fase continua) donde se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes, mientras que el volumen trazador inyectado en la entrada del digestor para el estudio de tiempos de residencia es considerado como la fase discreta y se resuelve mediante el rastreo de un gran número de partículas a través del campo fluido calculado. La fase discreta puede intercambiar momento, masa y energía con la fase continua.

En esta sección se define el modelo matemático de la fase discreta y se exponen los cambios que son necesarios realizar en las ecuaciones de la fase continua. También se incluye el acoplamiento entre ambas fases y el impacto que produce una sobre la otra.

3.6.1. Ecuaciones del movimiento para las partículas

Balance de fuerzas en la partícula

Se puede predecir la trayectoria de las partículas en la fase discreta mediante la integración del balance de fuerzas en la partícula, que está escrita desde el punto de vista Lagrangiano. Este balance de fuerza iguala la inercia de la partícula con las fuerzas que actúan sobre la misma, y puede ser escrita como:

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = \vec{F}_D + \vec{F}_p + \vec{F}_g + \vec{F}_{otras} \quad (3.28)$$

donde cada \vec{F} es un término de fuerza por unidad de masa. \vec{F}_D es la fuerza de arrastre por unidad de masa:

$$\vec{F}_D = m_p \frac{18 \rho}{24 \rho_p} \frac{C_D}{d_p} \frac{d\vec{u}_p}{dt} \|\vec{u} - \vec{u}_p\| (\vec{u} - \vec{u}_p) \quad (3.29)$$

donde u es la velocidad de la fase fluida, u_p es la velocidad de la partícula (se utiliza el subíndice p porque este análisis es igualmente válido para otro tipo de partícula), μ es la viscosidad molecular del fluido, ρ es la densidad del fluido, ρ_p es la densidad de la partícula y d_p es su diámetro.

El término de fuerzas debidas a la presión es:

$$\vec{F}_p = \int_{\Sigma_p} -p \vec{n} dS = -\frac{m_p}{\rho_p} \nabla p \quad (3.30)$$

Y la fuerza gravitatoria sobre las partículas:

$$\vec{F}_g = m_p \frac{\rho_p - \rho}{\rho_p} \vec{g} \quad (3.31)$$

Leyes para los coeficientes de arrastre

El coeficiente de arrastre de la partícula, C_D puede ser calculado a partir de

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (3.32)$$

donde a_1, a_2, a_3 , son constantes que se aplican a partículas esféricas lisas en distintos rangos de Re . También puede ser calculado a partir de

$$C_D = \frac{24}{Re_{esf}} (1 + b_1 Re_{esf}^{b_2}) + \frac{b_3 Re_{esf}}{b_4 + Re_{esf}} \quad (3.33)$$

donde

$$b_1 = \exp(2,3288 - 6,4581\phi + 2,4486\phi^2) \quad (3.34)$$

$$b_2 = 0,0964 + 0,5565\phi \quad (3.35)$$

$$b_3 = \exp(4,905 - 13,8944\phi + 18,4222\phi^2 - 10,2599\phi^3) \quad (3.36)$$

$$b_4 = \exp(1,4681 + 12,2584\phi - 20,7322\phi^2 + 15,8855\phi^3) \quad (3.37)$$

El factor de forma, ϕ , se define como

$$\phi = \frac{s}{S} \quad (3.38)$$

donde s es el área superficial de una esfera con el mismo volumen que la partícula, y S es la superficie real de la partícula. Para el caso de las partículas, se tomará siempre $\phi=1$, es decir, que las partículas son todas de forma esférica. El número de Reynolds Re_{esf} se calcula a partir del diámetro de la partícula.

Para partículas microscópicas, existe una forma de la ecuación de arrastre de Stokes. En este caso, F_D se define como

$$F_D = \frac{18\mu}{d_p^2 \cdot \rho_p \cdot C_c} \quad (3.39)$$

El factor C_c es la corrección de Cunningham a la ley de arrastre de Stokes y puede ser calculado como

$$C_c = 1 + \frac{2\lambda}{d_p} \left[1,257 + 0,4e^{-\left(\frac{1,1d_p}{2\lambda}\right)} \right] \quad (3.40)$$

donde λ es el camino medio libre molecular.

3.6.2. Dispersión turbulenta de partículas

La dispersión de partículas, debido a la turbulencia de la fase fluida puede ser predicha usando el modelo de rastreo estocástico de nubes de partículas. El modelo de rastreo estocástico (camino aleatorio) incluye el efecto de las fluctuaciones de la velocidad instantánea turbulenta en las trayectorias de las partículas (partículas) mediante el uso de métodos estocásticos. El modelo de nubes de partículas (particle cloud model) rastrea la evolución estadística de nubes de partículas sobre una trayectoria media. La concentración de partículas en las nubes es representada por la función de densidad de probabilidad de Gauss, sobre la trayectoria media.

Cuando el flujo es turbulento, se puede predecir las trayectorias de las partículas usando la velocidad media de la fase fluida \vec{u} en la ecuación (3.28). Opcionalmente, se puede incluir el valor instantáneo de la velocidad fluctuante:

$$u = \bar{u} + u' \quad (3.41)$$

para predecir la dispersión de las partículas debida a la turbulencia.

En la aproximación del rastreo estocástico, se predice la dispersión turbulenta de partículas integrando las ecuaciones de trayectoria para partículas individuales, usando la velocidad instantánea a lo largo del recorrido de la partícula. Evaluando de esta manera las trayectorias, para un número suficientemente grande de partículas representativas, se pueden tener en cuenta los efectos de la dispersión turbulenta de partículas.

Fluent usa un método estocástico (Random Walk Model) para determinar la velocidad instantánea. En el modelo de trayectorias discretas aleatorias (Discrete Random Walk, DRW), las componentes de la velocidad fluctuante son funciones del tiempo discretizadas por segmentos. Su valor aleatorio se mantiene constante en un intervalo de tiempo dado por la vida media característica de los torbellinos.

El modelo DRW puede dar resultados no físicos en flujos con difusión fuertemente no homogénea dominante, donde las pequeñas partículas deberían distribuirse uniformemente. En su lugar, el DRW mostrará una tendencia a concentrar esas partículas en regiones de baja turbulencia.

La predicción de la dispersión de partículas hace uso del concepto de tiempo integral, T , que describe el tiempo invertido por la partícula en el movimiento turbulento a lo largo de todo su recorrido, ds :

$$T = \int_0^{\infty} \frac{u_p'(t)u_p'(y+s)}{\bar{u}_p'^2} ds \quad (3.42)$$

El tiempo integral es proporcional a la velocidad o ritmo de dispersión de la partícula, cuanto mayor es el valor indica que hay más movimiento turbulento en el flujo. Se puede observar que la difusividad de la partícula está dada por $\overline{u_i u_j} T$.

Para pequeñas partículas trazadoras que se mueven con el fluido (no hay velocidad de arrastre) el tiempo integral se convierte en el tiempo integral Lagrangiano del fluido, T_L . Este tiempo puede aproximarse por

$$T_L = C_L \frac{k}{\epsilon} \quad (3.43)$$

donde C_L debe ser determinado, si no es ya conocido. Uniendo la difusividad de las partículas trazadoras al ritmo de difusión escalar predicho por el modelo de turbulencia, ν_t/σ , se puede obtener que

$$T_L \approx 0,15 \frac{k}{\epsilon} \quad (3.44)$$

para el modelo $k-\epsilon$ y sus variantes.

Modelo de trayectorias discretas aleatorias (DRW)

En el modelo de trayectorias discretas aleatorias (*Discrete Random Walk, DRW*), se simula la interacción de una partícula con una sucesión de torbellinos turbulentos en la fase discreta. Cada torbellino se caracteriza por:

- Una distribución Gaussiana para las fluctuaciones de velocidad aleatoria, u' , v' y w' .
- Una escala de tiempo, τ_e .

Los valores de u' , v' y w' que prevalecen durante el tiempo de vida de los remolinos son muestreados asumiendo que obedecen a una distribución de probabilidad de Gauss, de manera que

$$u' = \zeta \sqrt{\overline{u'^2}} \quad (3.45)$$

donde ζ es un número aleatorio que sigue una distribución normal de probabilidad, y $\sqrt{\overline{u'^2}}$ es la media geométrica de las fluctuaciones de velocidad. Ya que la energía cinética turbulenta es conocida en todos los puntos del campo fluido, esos valores pueden ser definidos como:

$$\sqrt{\overline{u'^2}} = \sqrt{\overline{v'^2}} = \sqrt{\overline{w'^2}} = \sqrt{2k/3} \quad (3.46)$$

para el modelo $k-\varepsilon$ y sus variantes. Cuando se usa la media geométrica se induce la anisotropía de los esfuerzos en la derivación de las fluctuaciones de velocidad:

$$u' = \zeta \sqrt{u'^2} \quad (3.47)$$

$$v' = \zeta \sqrt{v'^2} \quad (3.48)$$

$$w' = \zeta \sqrt{w'^2} \quad (3.49)$$

El tiempo de vida característico de los remolinos también se define como una constante:

$$\tau_e = 2T_L \quad (3.50)$$

donde T_L está dado por la ecuación (3.43), o como una variación aleatoria sobre T_L

$$\tau_e = -T_L \log(r) \quad (3.51)$$

donde r es un número aleatorio entre 0 y 1 y T_L está definido por la ecuación (3.43). La opción del cálculo aleatorio de τ_e da una descripción más real de la función de correlación.

La partícula interactúa con los torbellinos de la fase fluida durante el tiempo menor entre el tiempo de vida del torbellino y el tiempo de cruce del torbellino, cuando ese tiempo es alcanzado se calcula un nuevo valor de la velocidad instantánea, aplicando un nuevo valor de ζ en la ecuación (3.45).

3.6.3. Acoplamiento entre la fase continua y la discreta

El acoplamiento entre la fase continua y la discreta se puede llevar a cabo mediante la predicción del modelo de la fase discreta basado en el campo fluido continuo invariable (aproximación desacoplada o “one-way coupling”), o incluyendo el efecto de la fase discreta en la continua (aproximación acoplada o “two-way coupling”), por lo tanto, mientras que la fase continua siempre afecta a la fase discreta, el efecto de la fase discreta en la continua puede ser incorporado o no. La aproximación acoplada (“two-way coupling”) se lleva a cabo resolviendo alternativamente las ecuaciones de la fase discreta y la fase continua, hasta que se alcanza una solución acoplada convergida. El proceso de acoplamiento entre ambas fases se resuelve mediante un método iterativo, a la vez que se calcula la trayectoria de la partícula, el algoritmo de computo lleva determina el calor, momento y masa ganado o perdido por una partícula que sigue una determinada trayectoria, dichos valores pueden ser incorporados en cómputo consiguiente de la fase continua, para lo que las ecuaciones de la fase continua deben ser adaptadas para tener en cuenta los efectos de la fase discreta, mediante términos fuente en las ecuaciones de continuidad, conservación del momento y de energía.

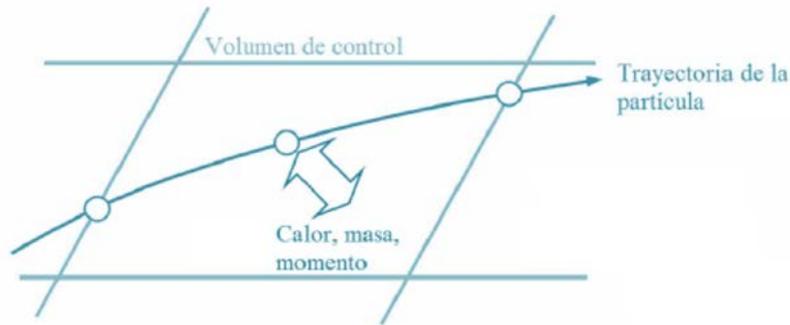


Fig. 3.3. Esquema del balance de calor, masa y momento entre la fase continua y la discreta.

Las ecuaciones de la fase continua, modificadas para tener en cuenta estos efectos se muestran a continuación:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = S_i \quad (3.65)$$

$$\rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \delta_{ij} \right] + \rho g_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} + F_i \quad (3.66)$$

$$\rho u_i \frac{\partial e}{\partial x_i} = -p \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \Phi_v + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_i^n h_i J_{i,i'} \right) + S_b \quad (3.67)$$

$$\rho u_i \frac{\partial m_{i'}}{\partial x_i} = - \frac{\partial J_{i',i}}{\partial x_i} + S_{i'} \quad (3.68)$$

donde S_i , F_i y S_b representan los términos fuente y $J_{i',i}$ el flujo de difusión de la especie i' .

El término fuente de la ecuación de continuidad (3.65) puede escribirse como:

$$S_i = \frac{\Delta m_p \dot{m}_{p0}}{m_{p0} dV} \quad (3.69)$$

donde Δm_p es la variación en la masa de la partícula en cada diferencial de volumen, dV , en un diferencial de tiempo dt ; \dot{m}_{p0} el flujo másico inicial de la partícula inyectada y m_{p0} la masa inicial de la partícula. Esta variación en la masa de la partícula en cada dV puede ser expresada como:

$$\Delta m_p(dV) = m_p(t) - m_p(t-dt) = N_v M_v A_p dt \quad (3.70)$$

donde $dt = ds/|V_p + V|$ y ds es la fracción de trayectoria dentro de cada volumen diferencial, dV ; M_v es el peso molecular de la fase vapor de la partícula, A_p es el área de la partícula y N_v es el flujo molar de vapor:

$$N_v = K_c(C_{v,s} - C_v) \quad (3.71)$$

En la expresión anterior, $C_{v,s}$ es la concentración de vapor en la superficie de la partícula y C_v la concentración de vapor en la fase continua:

$$C_{v,s} = \frac{p_{v,s}(T_p)}{R(T_p)} \quad (3.72)$$

$$C_v = \frac{px_v}{RT} \quad (3.73)$$

siendo x_v la fracción másica de vapor. El coeficiente de transferencia de masa, K_c , se obtiene por una correlación para el número de Nusselt dada por Ranz-Marshall en 1952:

$$K_c = \frac{Nu \cdot D_{v,m}}{D_p} = \frac{(2 + 0,6 \cdot Re^{1/2} \cdot Sc^{1/3}) D_{v,m}}{D_p} \quad (3.74)$$

Los términos fuente de la ecuación de momento (3.66), F_i , y la ecuación de la energía (3.67), S_h , están dados por las siguientes expresiones:

$$F_i = \left(\frac{18\mu C_D Re}{24\rho_p D_p^2} (V - V_p) + g \frac{(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \frac{\rho}{\rho_p} V_p \frac{\partial V}{\partial r_p} \right) \frac{\dot{m}_{p0} dt}{dV} \quad (3.75)$$

$$S_h = \left[\frac{\bar{m}_p}{m_{p0}} C_p \Delta T_p + \frac{\Delta m_p}{m_{p0}} \left(-h_f + \int_{T_{ref}}^{T_p} C_{p,i} dT \right) \right] \frac{\dot{m}_{p0}}{dV} \quad (3.76)$$

donde \bar{m}_p es la masa media de la partícula en el volumen de control dV , y ΔT_p la variación en la temperatura de la partícula en dicho volumen.

3.7. Modelo ideal de un reactor de mezcla continua

El comportamiento hidráulico de un reactor puede ser determinado mediante la obtención de curvas de distribución de tiempos de residencia. El método experimental empleado para obtener dichas curvas consiste en la inyección de cierta concentración de sustancias químicas (azul de dextrano o cloruro de litio, entre otros) en la entrada del digestor, que actúan a modo de trazadores, el estudio de la concentración de estos marcadores a la salida del digestor (análisis de tiempos de residencia) determinará las curvas de distribución de tiempos de residencia. La comparación de las curvas determinadas experimentalmente con las curvas correspondientes a un reactor ideal de mezcla continua, cuya formulación matemática se recoge en Levenspiel [2] determina el comportamiento del reactor y si existen o no defectos en el diseño del sistema de recirculación o en la instalación, problemas en las tuberías de entrada o salida, volúmenes muertos en el interior del tanque, mezclado inadecuado o caminos preferentes.

El análisis de tiempos de residencia se basa en el estudio estadístico de la variación en función del tiempo de la concentración de un trazador en la salida del tanque con respecto al caudal total de dicho trazador inyectado en la entrada. Para una adecuada comprensión de dicho análisis es preciso introducir ciertos conceptos que más adelante serán empleados:

- **Distribución de Weibull ($f(t)$):** Distribución de probabilidad continua, que define la función de densidad de una variable aleatoria según la ecuación 3.77.

$$f(t) = \frac{k}{c} \left(\frac{t}{c}\right)^{k-1} \cdot e^{-\left(\frac{t}{c}\right)^k} \quad (3.77)$$

donde k es el parámetro de forma, c el parámetro de escala y t la variable estudiada (el tiempo). A través de la integración de esta expresión se obtiene la función de distribución:

$$F(t) = 1 - e^{-\left(\frac{t}{c}\right)^k} \quad (3.78)$$

Aplicando la distribución de Weibull a un fluido se obtiene la función de densidad del tiempo de residencia de dicho fluido que define la frecuencia de distribución de tiempos con la que los elementos del fluido abandonan un volumen de control considerado.

- **Tiempo de Residencia (\bar{t}):** Es el tiempo que emplea una partícula en recorrer el volumen analizado, desde su entrada en dicho volumen hasta su salida.

- **Tiempo de Retención Hidráulica (TRH):** Es el tiempo de permanencia de una corriente que circula a través de un recipiente de volumen determinado. Dentro del campo de las reacciones químicas también puede definirse como el tiempo necesario para tratar un volumen de alimentación igual al del reactor, medido en las condiciones de la corriente de entrada al reactor. Su cálculo se realiza mediante la ecuación 3.79.

$$TRH = \frac{V_T}{Q_{f-IN}} \quad (3.79)$$

donde V_T es el volumen de fangos contenido en interior del tanque y Q_{f-IN} el caudal de entrada de fangos.

- **Tiempo Adimensionalizado (θ):** Variable empleada para expresar las funciones de distribución de forma adimensional, calculada según la siguiente expresión:

$$\theta = \frac{t}{TRH} \quad (3.80)$$

El análisis de la distribución de tiempos de residencia en reactores químicos a través de funciones de distribución de probabilidad fue propuesto por MacMullin y Weber (Levenspiel [2]); a continuación se presentan las funciones de distribución para un reactor de mezcla continua ideal.

- **Función de densidad de distribución de tiempos de residencia ($E(t)$):** Define la frecuencia de distribución de tiempos con la que los elementos del fluido abandonan un volumen de control considerado. Para un reactor de mezcla continua el valor ideal de la distribución de tiempos de residencia viene determinado por la siguiente ecuación:

$$E(t) = \frac{1}{TRH} e^{-\frac{t}{TRH}} \quad (3.81)$$

La curva obtenida para un tiempo de retención hidráulica igual al nominal del digestor estudiado (22 días y 4 horas) se presenta en la Figura 3.4.

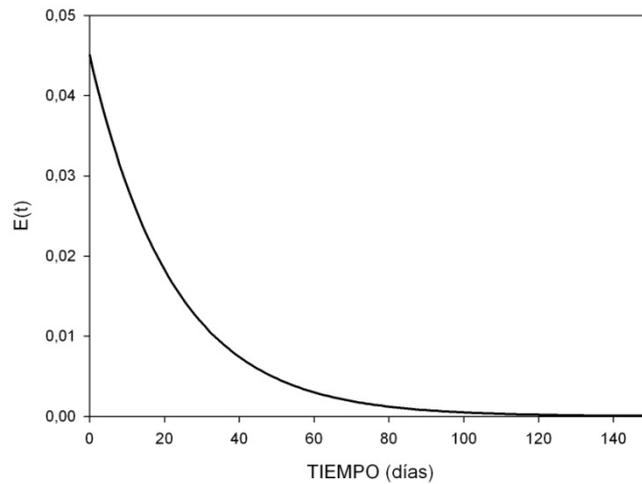


Figura 3.4. Distribución ideal de tiempos de residencia para el caso nominal.

- ***Función de densidad de distribución de tiempos de residencia adimensionalizada ($E(\theta)$):*** Expresa la frecuencia de distribución de tiempos de residencia en múltiplos del valor nominal del tiempo de retención hidráulica del reactor analizado. Su valor viene dado por:

$$E(\theta) = TRH \cdot E(t) \quad (3.82)$$

La representación de la función de densidad de distribución de tiempos de residencia adimensionalizada precisa el tratamiento de los valores de concentración del trazador respecto al tiempo estudiados según dicha adimensionalización, para lo que dichos valores deben ser multiplicados por el TRH . La curva obtenida mediante los valores nominales se representa en la Figura 3.5.

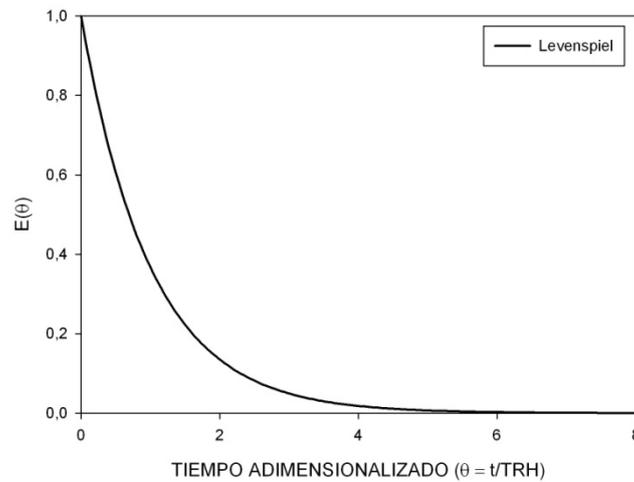


Figura 3.5. Distribución ideal de tiempos de residencia adimensionalizados para el caso nominal.

- **Función de distribución de tiempos de residencia acumulados ($F(t)$):** Esta función representa la fracción volumétrica de fluido que abandona el volumen de control considerado tras permanecer en su interior un tiempo inferior a t . Su modelización viene dada por la siguiente ecuación:

$$F(t) = 1 - e\left(-\frac{t}{TRH}\right) \quad (3.83)$$

La curva de comportamiento ideal para el digestor estudiado se muestra en la Figura 3.6.

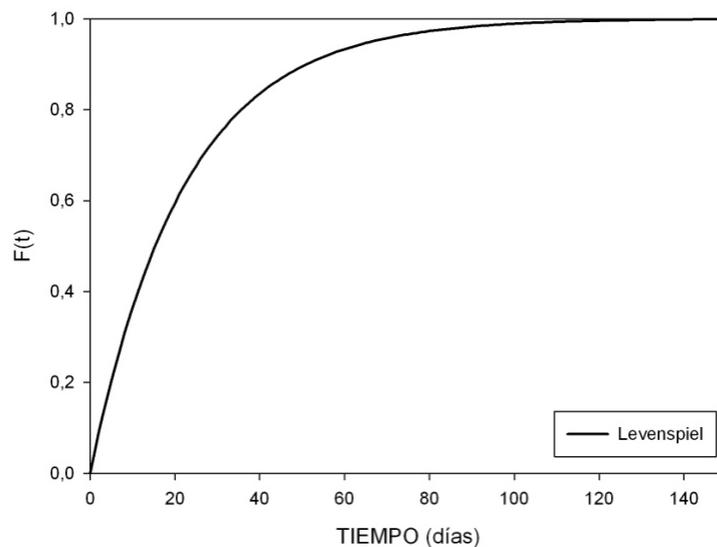


Figura 3.6. Distribución ideal de tiempos de residencia acumulados para el caso nominal.

El análisis de las curvas obtenidas experimentalmente permite determinar el comportamiento hidráulico del digestor. Para el caso de reactores de mezcla continua se pueden deducir diferentes comportamientos según la curva experimental obtenida. Para una curva con decrecimiento exponencial y un tiempo medio aproximadamente igual al nominal el comportamiento del digestor es razonablemente bueno (Fig. 3.7a). Una curva exponencial desplazada con respecto al origen que existe un flujo en pistón en serie con el de mezcla perfecta, debido a problemas en las tuberías de entrada y/o salida (Fig. 3.7b). Una curva temprana con un tiempo medio inferior al nominal indica la existencia de un volumen muerto (Fig. 3.7c). Un agudo pico al comienzo de la curva indica flujo en cortocircuito o la existencia de caminos preferentes hacia la salida (Fig 3.7d).

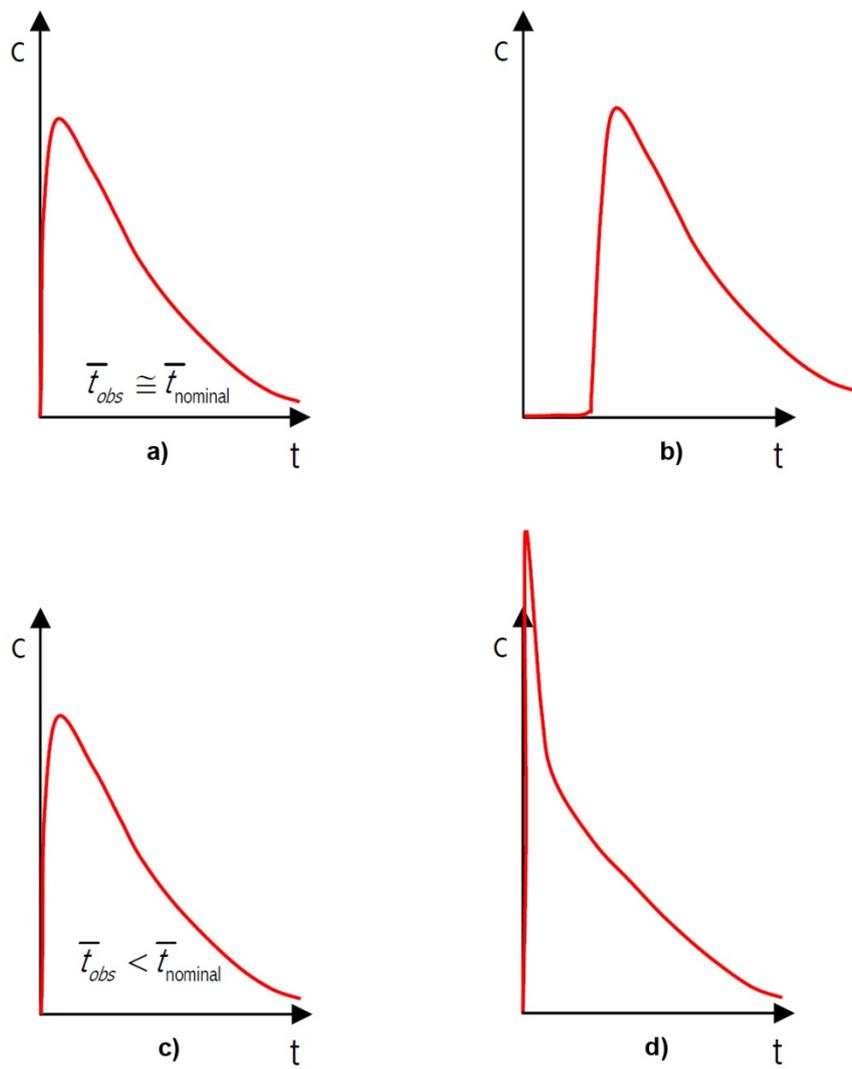


Figura 3.7. Distribuciones experimentales características. a) Flujo normal. b) Flujo en pistón en serie con el de mezcla. c) Flujo con volúmenes muertos. d) Flujo en cortocircuito.

4. Modelo numérico

4.1. Introducción

El sistema de ecuaciones planteado para abordar el modelo desarrollado en el presente trabajo ha sido resuelto numéricamente mediante el método de los volúmenes finitos utilizando el código de propósito general ANSYS Fluent. Las ecuaciones de conservación han sido discretizadas utilizando el esquema Upwind de segundo orden para las ecuaciones de momento y el esquema QUICK de tercer orden para las ecuaciones de energía y disipación turbulenta. El acoplamiento entre la presión y la velocidad en las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento ha sido resuelto mediante el algoritmo SIMPLE. El conjunto de ecuaciones algebraicas lineales resultantes ha sido resuelto mediante el método Gauss-Seidel. El estudio se ha realizado bajo dos criterios diferentes en cuanto a la dependencia de las características del flujo respecto al tiempo; por un lado, se ha empleado un modelo estacionario para analizar el comportamiento del flujo en función de la potencia y diseño del sistema de recirculación, por el otro, se ha empleado un modelo transitorio para estudiar la variación de las características del flujo en función del tiempo, con la intención de analizar la posibilidad de establecer un régimen de funcionamiento del sistema de recirculación intermitente. Dichos esquemas y algoritmos deben ser desarrollados para la comprensión del modelo numérico realizado y a continuación se expone la descripción tanto del código Fluent, como del proceso de resolución numérica del modelo.

Ante cualquier problema de Mecánica de Fluidos, existen diferentes metodologías para obtener información del mismo: la metodología analítica, la experimental y la numérica. La primera de ellas proporciona la solución exacta, aunque existen muy pocos problemas en esta área de conocimiento que puedan afrontarse mediante este método. La segunda sea quizás la que más se ha prodigado, aunque también presenta sus inconvenientes, sobre todo debido a las incertidumbres en los procesos de medida o a la necesidad de empleo de equipos de medida no intrusivos. La tercera, con el aumento de la capacidad de los ordenadores, está abriéndose camino con fuerza por la abundante información que es capaz de proporcionar.

Probablemente, la mejor forma de abordar un problema complejo sea a través de una combinación de las tres. En esta investigación se ha seguido esta línea utilizando las soluciones que la metodología analítica proporciona en problemas más básicos, como punto de partida para el conocimiento general del problema tratado. Al mismo tiempo, se ha empleado la información de la metodología experimental a partir de fuentes bibliográficas.

Los problemas a los que se ha hecho alusión, al igual que todos los flujos de fluidos, se encuentran descritos por ecuaciones diferenciales de conservación, que pueden representarse mediante una ecuación general en función de una variable dependiente ϕ . Para resolverlos mediante esta metodología, se ha de buscar una solución numérica a esta ecuación general.

La mayoría de los métodos numéricos parten de los valores desconocidos de la variable dependiente en un número finito de localizaciones (nodos de malla), que cubren todo el dominio de cálculo. El método se basa en encontrar un conjunto de ecuaciones algebraicas para dichos valores y en la utilización de un algoritmo para resolver dichas ecuaciones. En este trabajo, las ecuaciones se resuelven numéricamente utilizando el código de propósito general Fluent.

4.2. Descripción general del código Fluent

Fluent es un código de ordenador de propósito general de volúmenes finitos desarrollado por la empresa Fluent.inc en lenguaje C, que es capaz de simular distintos flujos de fluidos. Simula en geometrías 2D y 3D flujos incompresibles o compresibles, estacionarios o transitorios, laminares o turbulentos, con fluidos newtonianos o no newtonianos, convección de calor natural y forzada, conducción y convección acopladas, transmisión de calor por radiación, especies químicas, flujos multifásicos, entre otros. Las simulaciones mediante Fluent se pueden utilizar para la predicción sobre el funcionamiento de equipos, generación de energía y aplicaciones medioambientales. También puede ser utilizado para aplicaciones aeroespaciales, automóviles, electrónica, procesamiento de materiales, diseño arquitectónico y resistencia al fuego.

Aunque la aplicación Fluent consta de diferentes códigos, en esta investigación utilizaremos solamente dos de ellos: el preprocesador denominado Gambit, a partir del cual se construye la geometría y se discretiza el dominio de cálculo, y el procesador y postprocesador llamado Fluent, donde se interpreta la geometría y la malla realizada en Gambit, se introducen las características propias del problema a resolver (condiciones iniciales, condiciones de contorno y modelo de ecuaciones a resolver), y se presentan los resultados de la solución obtenida.

Teniendo en cuenta este esquema, la forma de abordar un problema general mediante la aplicación Fluent se describe a continuación. Inicialmente hemos de partir de los datos correspondientes a la geometría así como las características de las fronteras del dominio considerado, que se introducen en la aplicación Gambit. Una vez llevado a cabo este proceso, dentro de la misma aplicación se realiza el mallado correspondiente a esa geometría. Este es un punto importante de la simulación dado que se ha de construir un mallado que no afecte a la solución obtenida. Se ha de buscar en lo posible relaciones de aspecto de las celdas próximas a la unidad, aunque si los gradientes en una dirección son muy reducidos, se puede llegar hasta relaciones de 50.

En aquellas zonas donde los gradientes sean elevados se ha de intensificar el mallado para conseguir captar dicho gradiente. Otro aspecto a considerar a la hora de confeccionar un mallado es buscar en lo posible que las caras de las celdas sean perpendiculares a la dirección del flujo, evitando así la posible difusión numérica. Una vez realizado este proceso y asignadas las condiciones de contorno, se exporta la malla obtenida.

El siguiente paso consiste en importar mediante la aplicación Fluent la malla realizada mediante la aplicación Gambit e introducir las características del modelo físico a resolver. Fluent dispone de distintos modelos dependiendo del problema del que se trate. Podemos especificar que se resuelva o no la ecuación de la energía, que se resuelvan las ecuaciones laminares o turbulentas (presentando varias alternativas), que se considere la radiación (mediante diferentes modelos), que se simule flujo multifásico, que se consideren distintas especies químicas, que se trabaje con flujo compresible o incompresible, etc.

Cuando ya hemos especificado el modelo físico, el siguiente paso es precisar el método de resolución numérica de ese modelo físico. Para ello Fluent dispone de diferentes esquemas de discretización de primer, segundo y tercer orden atendiendo al error de truncamiento de la serie de Taylor (Upwind de primer orden, Upwind de segundo orden, ley potencial, QUICK) así como de diferentes esquemas para el acoplamiento presión-velocidad (SIMPLE, SIMPLEC y PISO). La descripción de estos esquemas y la discusión acerca de la conveniencia de cada uno de ellos se encuentran en Versteeg y Malalasekera [20].

A partir de este momento estamos en disposición de poder llevar a cabo el cálculo. Una vez realizado, la aplicación Fluent permite realizar el postproceso de los resultados, presentando las variables solución del problema como presión, velocidad, temperatura, densidad, energía cinética turbulenta, etc. Con esto podemos dar por concluido la simulación de un problema concreto. A continuación se describe más en detalle el método de resolución numérica empleado en esta investigación.

4.3. Procedimiento de discretización

De la observación de las ecuaciones diferenciales que rigen los flujos de fluidos, se deduce que todas las variables dependientes de interés obedecen a un principio de conservación generalizado. Así, cualquier ecuación de conservación en Mecánica de Fluidos puede ponerse como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S_\phi \quad (4.1)$$

donde el primer término representa el término transitorio, el segundo el término convectivo, el tercero el término difusivo y el cuarto el término fuente, siendo ρ la densidad del fluido, ϕ la variable dependiente y Γ el coeficiente de difusión. Sobre cada una de las ecuaciones a resolver, que tienen la estructura anterior, se aplica la técnica numérica de los volúmenes finitos. Esta técnica se basa en tres puntos fundamentales:

- División del dominio en volúmenes de control no solapados entre sí.
- Integración de las ecuaciones de conservación en cada uno de esos volúmenes de control individuales para construir ecuaciones algebraicas para las variables dependientes discretas, tales como velocidad, presión, temperatura y otros escalares.
- Linealización de las ecuaciones discretizadas y resolución del sistema de ecuaciones resultante para obtener los valores de las variables dependientes.

A continuación se describe cada uno de estos puntos, que representan el modelo numérico propuesto para la solución de los problemas plantados.

4.3.1. Generación de la malla

El primer paso en el método de los volúmenes finitos es dividir el dominio en volúmenes de control discretos, cada uno de los cuales contiene un nodo donde se va a obtener el valor de la variable dependiente estudiada. Las caras de los volúmenes de control se encuentran a medio camino entre dos nodos adyacentes. En los volúmenes de control que se encuentren en los extremos, las fronteras físicas del problema van a coincidir con las fronteras de esos volúmenes de control. La nomenclatura seguida en este capítulo se presenta en la figura 3.1. El punto P representa el nodo del volumen de control considerado. Los nodos al oeste, al este, al norte y al sur se identifican respectivamente por W , E , N y S , siendo las correspondientes caras frontera las identificadas por w , e , n y s .

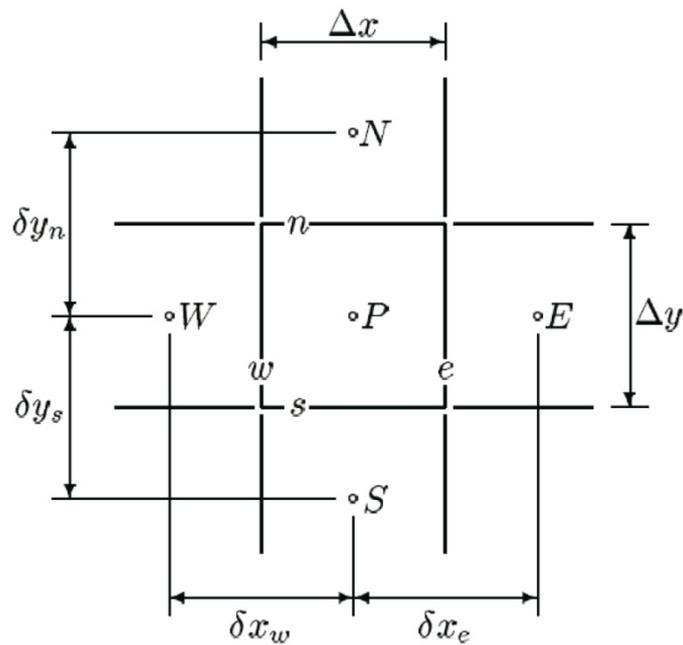


Figura 4.1. Esquema de la nomenclatura para un volumen de control en la malla cartesiana bidimensional.

4.3.2. Discretización

El paso clave del método de los volúmenes finitos es la integración de las ecuaciones de conservación sobre el volumen de control para alcanzar una ecuación en cada punto P . Dicho de otro modo: Fluent utiliza la técnica basada en volúmenes de control para convertir las ecuaciones de conservación en ecuaciones algebraicas que se pueden resolver numéricamente. Esta técnica consiste en integrar estas ecuaciones en cada volumen de control dando lugar a ecuaciones discretas que conservan la cantidad física considerada sobre cada volumen de control. Para el volumen de control anteriormente definido, suponiendo régimen estacionario, esta técnica da lugar a

$$\int_A \vec{n} \cdot (\rho \vec{u} \phi) dA = \int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \text{grad} \phi) dA + \int_{VC} S_\phi dV \quad (4.2)$$

donde el primer término representa el flujo convectivo de ϕ a través de la superficie del volumen de control, el segundo término el flujo difusivo y el tercero la generación o destrucción de la propiedad ϕ en el volumen de control. Esto constituye una ecuación de balance para ϕ en el volumen de control. En nuestro dominio, para un problema unidimensional estacionario, la superficie S está rodeada de las caras e y w , por lo tanto:

$$\int_A \vec{n} \cdot (\rho \vec{u} \phi) dA = (\rho u \phi A)_e - (\rho u \phi A)_w \quad (4.3)$$

Para la difusión térmica se obtiene:

$$\int_A \vec{n} \cdot (\Gamma \text{grad} \phi) dA = \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} A \right)_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} A \right)_w \quad (4.4)$$

y para la fuente:

$$\int_{VC} S_\phi dV = \bar{S} \Delta V \quad (4.5)$$

Así, para poder obtener los términos difusivos necesitamos conocer el coeficiente de difusión Γ y los gradientes de la propiedad ϕ en las caras. Según la práctica establecida, los valores de la propiedad ϕ y del coeficiente Γ se definen y deben ser evaluados en los nodos. Para calcular los gradientes en las caras se utiliza una distribución aproximada de las propiedades definidas en los nodos. Las aproximaciones lineales parecen ser la forma más obvia y simple de calcular los valores en las caras y los gradientes. Esta práctica es lo que se conoce como diferencias centrales. De este modo, en una malla uniforme interpolada linealmente, los valores para Γ_e y Γ_w vienen dados por:

$$\Gamma_w = \frac{\Gamma_W + \Gamma_P}{2} \quad (4.6)$$

$$\Gamma_e = \frac{\Gamma_E + \Gamma_P}{2} \quad (4.7)$$

y los términos del flujo difusivo se evalúan por

$$\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} A \right)_e = \Gamma_e A_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\delta x_e} \right) \quad (4.8)$$

$$\left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} A \right)_w = \Gamma_w A_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\delta x_w} \right) \quad (4.9)$$

En situaciones prácticas, el término fuente puede ponerse en general como una función de la variable dependiente ϕ :

$$\bar{S}\Delta V = S_u + S_P\phi_P \quad (4.10)$$

El principal problema en la discretización de los términos convectivos es el cálculo del valor de la propiedad transportada ϕ en las caras del volumen de control y el flujo convectivo de esta propiedad a través de estas fronteras (estamos suponiendo conocidos los valores de la velocidad en las caras, posteriormente se entrará más en detalle en este tema).

Con el fin de llevar a cabo este cometido, se han definido dos variables intermedias como son el flujo másico convectivo por unidad de área ($F = \rho u$) y el coeficiente de difusión por unidad de longitud ($D = \Gamma/\delta x$) en las caras de la celda. Se ha considerado que $A_w = A_e = A$. Teniendo en cuenta estas definiciones, los términos convectivos se pueden expresar en la forma:

$$(\rho u \phi A)_e - (\rho u \phi A)_w = F_e \phi_e A - F_w \phi_w A \quad (4.11)$$

Parecería obvio discretizar estos términos empleando el mismo procedimiento que para los términos difusivos. Sin embargo, el proceso de difusión afecta a la distribución de las cantidades transportadas a lo largo de sus gradientes en todas las direcciones, mientras que la convección ejerce su influencia solamente en la dirección del flujo. De este modo, para flujos altamente convectivos parece poco adecuado utilizar un esquema de diferencias centrales para estos términos. Por ello, en esta investigación se ha utilizado un esquema alternativo conocido como Upwind de segundo orden. Con el fin de mostrar este esquema de discretización, comenzaremos introduciendo las ecuaciones correspondientes al primer orden para posteriormente incluir los elementos del esquema de segundo orden.

4.3.2.1. Esquema Upwind

Según ya se ha comentado, uno de los mayores inconvenientes de las diferencias centrales es su incapacidad para identificar la dirección del flujo. El valor de la propiedad ϕ en la cara oeste de la celda está siempre influenciado por ϕ_P y ϕ_W en las diferencias centrales. En flujos altamente convectivos de oeste a este, esa forma de actuación es inapropiada porque la cara oeste de la celda debería recibir una influencia más fuerte del nodo W que del nodo P . El esquema Upwind tiene en cuenta este hecho cuando determina el valor en la cara de la celda: el valor convectivo de ϕ en una cara se toma igual al valor del nodo aguas arriba.

Cuando el flujo actúa de oeste a este, $F_e > 0$, $F_w > 0$, y entonces $\phi_w = \phi_W$ y $\phi_e = \phi_P$ y la ecuación (3.2) una vez discretizada toma la forma:

$$F_e\phi_P - F_w\phi_W = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) + (S_u + S_P\phi_P) \quad (4.12)$$

Cuando el flujo va en sentido contrario, $F_e < 0$, $F_w < 0$, y entonces $\phi_w = \phi_P$ y $\phi_e = \phi_E$, tomando ahora la ecuación (3.2) la forma:

$$F_e\phi_E - F_w\phi_P = D_e(\phi_E - \phi_P) - D_w(\phi_P - \phi_W) + (S_u + S_P\phi_P) \quad (4.13)$$

Estas ecuaciones pueden ser reordenadas y escritas en la forma:

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_W\phi_W + S_u \quad (4.14)$$

donde:

$$a_P = a_W + a_E + (F_e - F_w) - S_P \quad (4.15)$$

$$a_W = D_w + \max(F_w, 0) \quad (4.16)$$

$$a_E = D_e + \max(0, -F_e) \quad (4.17)$$

Cuando se selecciona un Upwind de segundo orden, el valor de la cara ϕ_f se obtiene utilizando la siguiente expresión:

$$\phi_f = \phi + \text{grad}\phi \cdot \Delta s \quad (4.18)$$

donde ϕ y $grad\phi$ representan el valor en el centro de la celda y su gradiente aguas arriba en la celda, y Δs es el vector desplazamiento desde el centro de la celda aguas arriba y el centro de la cara. Esta formulación requiere el cálculo de $grad\phi$ en cada celda.

Este gradiente se calcula mediante la expresión

$$grad\phi = \frac{1}{V} \sum_f^N \tilde{\phi}_f nA \quad (4.19)$$

Donde los valores en las caras $\tilde{\phi}_f$ se computan promediando ϕ de las dos celdas adyacentes a la cara.

4.3.2.2. Esquema Quick

El código Fluent dispone de esquemas de discretización de alto orden, como el esquema QUICK, propuesto por Leonard [27], que ha sido utilizado para resolver las ecuaciones de energía y disipación turbulenta.

El esquema QUICK efectúa una interpolación basada en tres nodos de la malla para calcular los valores de la variable convectiva ϕ en las caras de los volúmenes de control. El esquema es de tercer orden y lineal, aunque parte de una interpolación cuadrática los valores finalmente interpolados sobre las caras de los volúmenes de control son combinaciones lineales de los valores en los nodos circundantes.

Si el flujo va hacia la derecha ($u_w > 0$ y $u_e > 0$), entonces se utiliza un promediado cuadrático entre WW, W y P para evaluar ϕ_w y W, P y E para calcular ϕ_e . Si el flujo es hacia la izquierda ($u_w < 0$ y $u_e < 0$), se utilizan los puntos W, P y E para calcular ϕ_w y los puntos P, E y EE para calcular ϕ_e .

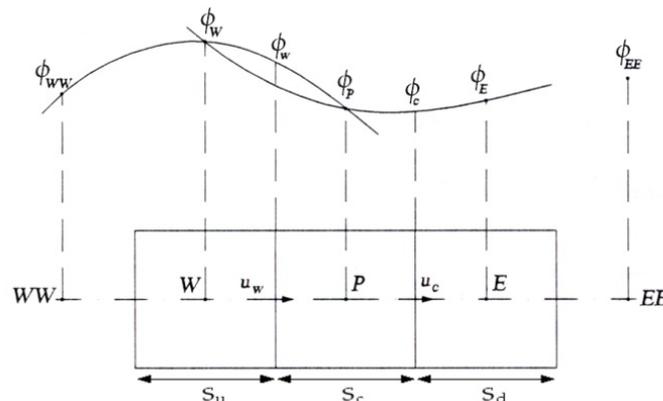


Figura 4.2. Interpolación cuadrática utilizada en el esquema QUICK estándar.

Como se observa en la figura se plantea una función cuadrática ajustada a los tres puntos que intervienen en la interpolación de ϕ_w y ϕ_e . El resultado de esta interpolación, considerando que el flujo es de izquierda a derecha, es el siguiente:

$$\phi_e = \theta \left[\frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_P + \frac{S_c}{S_c + S_d} \phi_E \right] + (1 - \theta) \left[\frac{S_u + 2S_c}{S_u + S_c} \phi_P - \frac{S_c}{S_u + S_c} \phi_W \right] \quad (4.20)$$

El esquema Quick está basado en un promedio ponderado entre el esquema Upwind de segundo orden e interpolaciones centrales de la variable, para $\theta = 1$ la ecuación resultaría una interpolación central de segundo orden, mientras que para $\theta = 0$ sería el valor obtenido por el esquema Upwind de segundo orden. El valor habitual que el código Fluent toma para θ para el esquema Quick es el de $\theta = 1/8$.

Según el desarrollo de Versteeg y Malalasekera [20] y si la malla es uniforme, el resultado de esta interpolación, para el caso $u_w > 0$ y $u_e > 0$, es el siguiente:

$$\phi_w = \frac{6}{8} \phi_W + \frac{3}{8} \phi_P - \frac{1}{8} \phi_{WW} \quad (4.22)$$

$$\phi_e = \frac{6}{8} \phi_P + \frac{3}{8} \phi_E - \frac{1}{8} \phi_W \quad (4.23)$$

Si el método se aplica a la ecuación de referencia

$$\frac{d}{dx}(\rho u \phi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right) \quad (4.24)$$

se utilizan las ecuaciones anteriores para los términos convectivos y diferencias centrales para los términos de difusión, se puede comprobar que el esquema resulta en:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_{WW} \phi_{WW} \quad (4.25)$$

con

$$a_P = a_W + a_E + a_{WW} + (F_e - F_w) \quad (4.26)$$

$$a_W = D_w + \frac{6}{8} F_w + \frac{1}{8} F_e \quad ; \quad a_E = D_e + \frac{3}{8} F_e \quad ; \quad a_{WW} = -\frac{1}{8} F_w \quad (4.27)$$

De manera similar se procedería para el caso $u_w < 0$ y $u_e < 0$. Puede plantearse una generalización del esquema, teniendo en cuenta el sentido del flujo, del modo que se describe a continuación. La ecuación general discretizada puede ponerse por:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_{WW} \phi_{WW} + a_{EE} \phi_{EE} \quad (4.28)$$

con el coeficiente central dado por

$$a_P = a_W + a_E + a_{WW} + a_{EE} + (F_e - F_w) \quad (4.29)$$

y los coeficientes de los puntos circundantes

$$a_W = D_w + \frac{6}{8} \alpha_w F_w + \frac{1}{8} \alpha_e F_e + \frac{3}{8} (1 - \alpha_w) F_w \quad (4.30)$$

$$a_{WW} = -\frac{1}{8} \alpha_w F_w \quad (4.31)$$

$$a_E = D_e - \frac{3}{8} \alpha_e F_e - \frac{6}{8} (1 - \alpha_e) F_e - \frac{1}{8} (1 - \alpha_w) F_w \quad (4.32)$$

$$a_{EE} = \frac{1}{8} (1 - \alpha_e) F_e \quad (4.33)$$

con

$$\alpha_w = 1 \text{ para } F_w > 0 \text{ y } \alpha_e = 1 \text{ para } F_e > 0, \quad (4.34)$$

$$\alpha_w = 0 \text{ para } F_w < 0 \text{ y } \alpha_e = 0 \text{ para } F_e < 0.$$

4.3.3. Resolución del sistema de ecuaciones

Una vez discretizadas las ecuaciones de conservación (ecuación de continuidad, cantidad de movimiento y energía, así como otras ecuaciones escalares), el siguiente paso es resolver este conjunto de ecuaciones en cada nodo. En el desarrollo anterior se ha supuesto que el campo de velocidades era conocido. En general, no se conoce y hay que obtenerlo como parte de la solución general con el resto de variables del flujo.

En el proceso de resolución de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento aparecen dos nuevos problemas. Por un lado aparecen términos no lineales de la forma ρu^2 . Por otro, las dos ecuaciones se encuentran acopladas a través de la presión, aunque no se conoce ninguna ecuación escalar para obtenerla. Si se considera flujo incompresible, la densidad y la presión no están asociadas. En este caso, el acoplamiento entre la presión y la velocidad impone que si se aplica el campo de presiones correcto en la ecuación de conservación de cantidad de movimiento, el campo de velocidades resultante ha de satisfacer la ecuación de continuidad.

Estos problemas de no linealidad y acoplamiento entre la velocidad y la presión se resuelven mediante el algoritmo SIMPLE. Bajo este algoritmo, los flujos convectivos por unidad de masa a través de las caras de las celdas se evalúan mediante las componentes de la velocidad supuestas. De igual forma se supone el campo de presiones y se resuelven las ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento. Calculado el campo de velocidades, se obtiene a partir de la ecuación de continuidad una ecuación para la corrección de la presión. Corregida la presión, se introduce de nuevo en la ecuación de cantidad de movimiento, se vuelve a calcular el campo de velocidades, se calcula de nuevo la corrección de la presión, repitiéndose el proceso hasta que se alcance la convergencia. Este algoritmo se describe más en detalle más adelante.

4.3.3.1. Malla alternada

Por el modo de discretización de la ecuación de cantidad de movimiento, pueden originarse campos de presión alternados, debido a que la diferencia de presión se toma entre dos puntos alternados, en vez de entre dos puntos adyacentes. Este campo de presión alternado, no real, será tratado como un campo uniforme de presión por la ecuación de cantidad de movimiento. Por otro lado, del proceso de discretización de la ecuación de continuidad, se deduce que se exige la igualdad de velocidades entre dos puntos alternados y no entre dos adyacentes; como consecuencia de esto, puede obtenerse un campo de velocidad alternado, que no puede aceptarse como solución real.

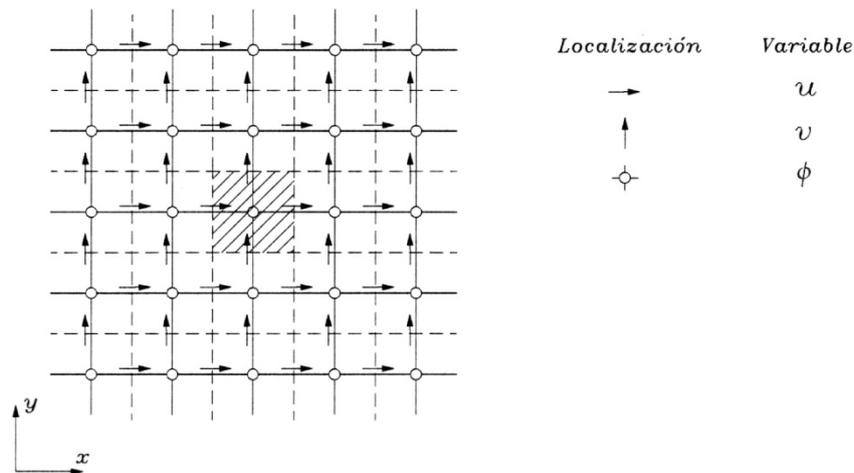


Figura 4.3. Esquema tipo de la malla alternada utilizada en este trabajo.

Las dificultades anteriores desaparecen utilizando una malla alternada, donde las componentes de la velocidad se calculan para los puntos que se sitúan sobre las caras de los volúmenes de control. Esto es, la componente x de la velocidad se calcula en las caras que son normales a la dirección x (ver figura 4.3).

Al emplear la malla alternada, se puede calcular el flujo de masa a través de las caras de los volúmenes de control, sin ninguna interpolación para la componente de la velocidad. Además, la forma discretizada de la ecuación de continuidad contendrá términos que expresan diferencias de velocidades adyacentes, lo que evitará la aparición de un campo de velocidad alternado. En la malla alternada, solo podrán introducirse, con resultados aceptables en la ecuación de continuidad, campos de velocidades aceptables. Otra ventaja del uso de esta malla, es que la diferencia de presión entre dos puntos adyacentes constituirá la fuerza natural que provocará la aparición de las componentes de la velocidad localizadas entre esos dos puntos. Por tanto, eventuales campos de presión alternados no serán tratados ya como campos uniformes y no aparecerán como posibles soluciones.

De esta forma evaluamos las variables escalares, tales como presión, densidad, temperatura, etc, en los nodos ordinarios (malla original) pero calculamos las componentes de la velocidad en una nueva malla cuyas celdas están centradas en las caras de la malla original (malla alternada).

4.3.3.2. Descripción del algoritmo SIMPLE

El acrónimo SIMPLE proviene del término inglés 'Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations'. Fue originalmente propuesto por Patankar y Spalding [28] y es esencialmente un procedimiento de suposición-corrección para el cálculo de la presión en una malla alternada. El procedimiento se ilustra para un flujo bidimensional estacionario en coordenadas cartesianas.

La forma discretizada de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento para la componente u de la velocidad puede ponerse:

$$a_e u_e = \sum a_{ady} u_{ady} + b + (p_P - p_E) A_e \quad (4.21)$$

donde el subíndice e indica el punto que define el volumen de control considerado, y el subíndice ady , los correspondientes puntos adyacentes; los coeficientes a_{ady} cuantifican el efecto combinado de la convección y de la difusión en las caras del volumen de control; el término b engloba los términos fuente, excepto el correspondiente al gradiente de presión; el término $(p_P - p_E) A_e$ representa la fuerza actuante debida al gradiente de presión, siendo A_e el área sobre la que actúa dicho gradiente. La ecuación de cantidad de movimiento para otras direcciones puede ponerse de forma similar. Por ejemplo, la forma discretizada para la componente v de la velocidad puede ponerse:

$$a_n v_n = \sum a_{ady} v_{ady} + b + (p_P - p_N) A_n \quad (4.22)$$

Las expresiones anteriores sólo pueden resolverse cuando la distribución de presión es conocida, o cuando se supone de alguna manera. Si no se emplea una distribución de presión adecuada, la distribución de velocidad resultante no satisfará la ecuación de continuidad. Si p^* denota la distribución de presión supuesta, entonces u^* y v^* denotan las correspondientes componentes de la velocidad, que se obtienen a partir de las siguientes ecuaciones discretizadas:

$$a_e u_e^* = \sum a_{ady} u_{ady}^* + b + (p_P^* - p_E^*) A_e \quad (4.23)$$

$$a_n v_n^* = \sum a_{ady} v_{ady}^* + b + (p_P^* - p_N^*) A_n \quad (4.24)$$

El objetivo es encontrar un método de obtención de la distribución supuesta de presión p^* , de forma que la distribución de las componentes de velocidad u^* y v^* satisfaga la ecuación de conservación de la masa. Puede suponerse que la distribución correcta de presión p se obtiene de la ecuación

$$p = p^* + p' \quad (4.25)$$

donde p' se denomina corrección de la presión p . Es preciso conocer ahora la respuesta de las componentes de la velocidad frente a este cambio de la presión. Las correcciones correspondientes para esta distribución de velocidad u' y v' pueden introducirse de forma similar:

$$u = u^* + u', \quad v = v^* + v' \quad (4.26)$$

Restando la ecuación (3.21) de la ecuación (3.23), se obtiene

$$a_e u'_e = \sum a_{ady} u'_{ady} + (p'_P - p'_E) A_e \quad (4.27)$$

Con el fin de simplificar la expresión anterior, el término sumatorio se desprecia, lo que constituye la principal aproximación del algoritmo Simple. De este modo obtenemos

$$u'_e = d_e (p'_P - p'_E) \quad (4.28)$$

donde $d_e = A_e / a_e$. La ecuación (3.28) se denomina fórmula de corrección de la velocidad y puede ponerse alternativamente como sigue:

$$u_e = u_e^* + d_e (p'_P - p'_E) \quad (4.29)$$

Para la dirección y , la fórmula de corrección de la velocidad se escribe en forma similar,

$$v_n = v_n^* + d_n (p'_P - p'_N) \quad (4.30)$$

donde $d_n = A_n / a_n$.

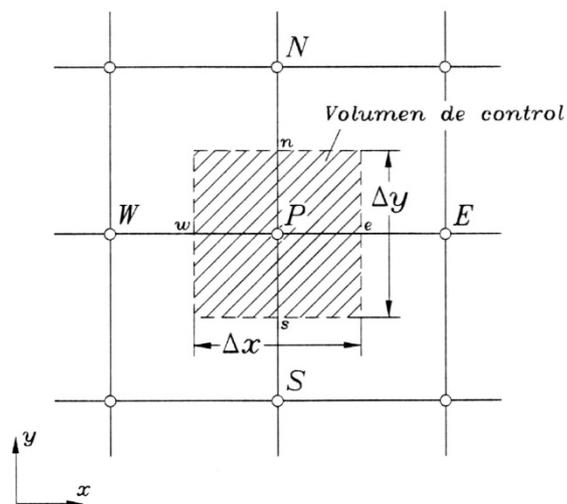


Figura 4.4. Volumen de control para flujos bidimensionales.

El siguiente paso es convertir la ecuación de continuidad en una ecuación para la corrección de la presión. Con este propósito, se supone que la densidad no depende directamente de la presión.

La ecuación de continuidad en régimen estacionario,

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (4.31)$$

ha de integrarse sobre el volumen de control mostrado en la figura 4.4. Si se sustituye en la ecuación integrada sobre el volumen de control las componentes de la velocidad obtenidas mediante las fórmulas de corrección (4.28) y (4.29), se obtiene la siguiente ecuación discretizada para p' :

$$a_P p'_P = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + b' \quad (4.32)$$

$$(4.33)$$

donde

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S$$

$$a_W = \rho_w d_w A \quad (4.34)$$

$$a_E = \rho_e d_e A \quad (4.35)$$

$$a_N = \rho_n d_n A \quad (4.36)$$

$$a_S = \rho_s d_s A \quad (4.37)$$

$$b' = (\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho v^* A)_s - (\rho v^* A)_n \quad (3.38)$$

La ecuación (4.32) es la ecuación de continuidad discretizada y representa una expresión para la corrección de la presión. El término fuente b' es un término de ajuste que proviene del campo de velocidades incorrecto u^* y v^* . Resolviendo la ecuación (4.32), se puede obtener la corrección del campo de presiones p' en todos los puntos. Una vez que esta corrección es conocida, se puede obtener el campo de presiones correcto utilizando la expresión (4.25) y las componentes de la velocidad a través de (4.29) y (4.30). La omisión de los términos $\sum a_{ady} u'_{ady}$ no afecta a la solución final porque las correcciones para la presión y la velocidad han de ser cero en la solución convergida.

La ecuación de corrección de la presión es muy susceptible a diverger a menos que se empleen coeficientes de relajación en el proceso iterativo. Así,

$$p_{nueva} = p^* + \alpha_p p' \quad (4.39)$$

donde α_p es el factor de relajación de la presión.

La aplicación Fluent dispone de otros algoritmos como el SIMPLEC o el PISO para el acoplamiento presión velocidad. En general, estos algoritmos de acoplamiento suelen proporcionar una convergencia más rápida aunque el número de operaciones a realizar es superior. En los casos contrastados con los diferentes algoritmos no se han apreciado diferencias significativas ni en la solución obtenida ni en los tiempos de cálculo. Versteeg y Malalasekera [20] afirman que no está todavía claro cuál de las variantes del algoritmo SIMPLE es la más adecuada para la resolución de un problema concreto.

4.3.3.3. Introducción de las condiciones de contorno en la malla

Teniendo en cuenta el concepto de malla alternada, alrededor de las fronteras físicas de la geometría estudiada se generan nodos adicionales que las rodean. Sin embargo, los cálculos se realizan solamente en los nodos internos. Teniendo en cuenta este hecho va a ocurrir que las fronteras físicas coinciden con las fronteras de los volúmenes de control de la malla original mientras que existen una serie de nodos exteriores a estas fronteras que pueden utilizarse para almacenar las condiciones de contorno. La forma en la que cada una de las condiciones de contorno adoptadas en los problemas estudiados son introducidas en el código se encuentra detallada en Versteeg y Malalasekera [20].

4.3.3.4. Algoritmo de cálculo de las ecuaciones

El resultado del desarrollo anterior es un conjunto de ecuaciones algebraicas lineales que se necesita resolver. Existen dos familias de técnicas de solución para ecuaciones algebraicas lineales: métodos directos y métodos indirectos (o métodos iterativos). Ejemplos simples de métodos directos son la regla de Cramer para la inversión de la matriz y la eliminación Gaussiana. En estos métodos es posible conocer a priori el número de operaciones necesarias para alcanzar la solución.

Los métodos iterativos se basan en la aplicación repetitiva de un algoritmo simple que conduzca a la convergencia después de un número de repeticiones. Algunos ejemplos de este método son los métodos de iteración punto a punto de Jacobi y Gauss-Seidel. En ellos no es posible predecir de antemano el número de operaciones necesarias para alcanzar la solución. La principal ventaja de estos métodos iterativos es que solamente los coeficientes distintos de cero de las ecuaciones necesitan ser almacenados en memoria. Estos métodos son fáciles de implementar aunque alcanzan la convergencia muy lentamente cuando el sistema de ecuaciones a resolver es muy grande.

ANSYS Fluent resuelve el sistema lineal de ecuaciones utilizando el método Gauss-Seidel en conjunción con el método algebraico AMG (Algebraic Multigrid Method).

4.3.4. Flujos no estacionarios

Una vez desarrollado el método de los volúmenes finitos, en este apartado, se va a analizar el caso de problemas que dependen del tiempo. La ley de conservación para el transporte de un escalar en un flujo transitorio viene dada por la forma general:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S_\phi \quad (4.40)$$

El primer término de esta ecuación representa la variación con el tiempo de dicho escalar y es cero para flujos estacionarios. Para predecir problemas transitorios se debe mantener este término en el proceso de discretización. La integración en volúmenes finitos de la ecuación 4.40 sobre el volumen de control VC debe ser incrementada con una integración adicional sobre el paso de tiempo Δt . Reemplazando los integrales de volumen de los términos convectivos y difusivos por integrales de superficie y cambiando el orden de integración en el término de variación respecto al tiempo se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_{VC} \left(\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dt \right) dV + \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_A n \cdot (\rho u\phi) dA \right) dt = \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_A n \cdot (\Gamma \text{grad}\phi) dA \right) dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} S_\phi dV dt \end{aligned} \quad (4.41)$$

La integración en el volumen de control es esencialmente la misma que para flujos estacionarios, expuesta en el apartado 4.3.2., para los términos convectivos, difusivos y de generación de la propiedad. Por lo este apartado se centra en los métodos necesarios para la integración temporal y a continuación expone éste proceso para la ecuación de difusión no estacionaria en unidimensional.

Como ejemplo sencillo de ecuación con término transitorio, término difusivo y término fuente, a continuación, se expone el análisis numérico de la ecuación de transmisión de calor transitoria en un volumen de control unidimensional.

4.3.4.1. Transmisión de Calor Transitoria y Unidimensional

La transmisión de calor no estacionaria unidimensional está gobernada por la ecuación:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + S \quad (4.42)$$

Además de las variables ya vistas, en este caso aparece el calor específico del material, c (J/kg·K).

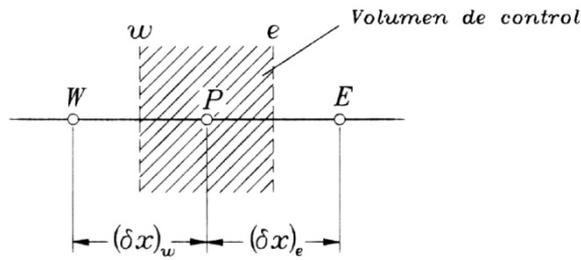


Figura 4.5. Volumen de control unidimensional.

Integrando la ecuación 4.42 sobre el volumen de control unidimensional, mostrado en la figura 4.5, y sobre el intervalo de tiempo desde t a $t+\Delta t$ se obtiene:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dV dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dV dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{VC} S dV dt \quad (4.43)$$

que, con la nomenclatura de la figura 4.5, puede ser escrita como:

$$\int_w^e \left[\int_t^{t+\Delta t} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dt \right] dV = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(kA \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e - \left(kA \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w \right] dt + \int_t^{t+\Delta t} \bar{S} \Delta V dt \quad (4.44)$$

donde, A es el área de la cara del volumen de control, ΔV es su volumen, el cual es igual a $A \cdot \Delta x$, donde $\Delta x = \Delta x_{we}$ es el ancho del volumen de control, y \bar{S} es la media del término de generación de esfuerzos. Si se considera que la temperatura en un nodo permanece a lo largo del volumen de control, entonces:

$$\int_{CV} \left[\int_t^{t+\Delta t} \rho c \frac{\partial T}{\partial t} dt \right] dV = \rho c (T_p - T_p^o) \Delta V \quad (4.45)$$

donde T_p^o es la temperatura correspondiente al momento de tiempo t y T_p a la temperatura en el momento de tiempo $t+\Delta t$. Este mismo resultado puede ser obtenido discretizando $\partial T / \partial t$ mediante un esquema de primer orden.

Aplicando integración por diferencias centrales a los términos de difusión de la ecuación 4.44:

$$\rho c(T_P - T_P^o)\Delta V = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(k_e A \frac{T_E - T_P}{\delta x_{PE}} \right) - \left(k_w A \frac{T_P - T_W}{\delta x_{WP}} \right) \right] dt + \int_t^{t+\Delta t} \bar{S} \Delta V dt \quad (4.46)$$

Para poder evaluar esta ecuación es necesario realizar una suposición acerca de la variación de las temperaturas T_P , T_E y T_W con el tiempo. Es posible utilizar el valor de las temperaturas en el momento de tiempo t o en el momento $t+\Delta t$ para calcular la integral de tiempo o, alternativamente, una combinación de su valor para el tiempo t y $t+\Delta t$.

Realizando una aproximación por medio del parámetro θ , cuyo valor se encuentra entre 0 y 1, se obtiene la integral de la temperatura con respecto al tiempo como:

$$\int_t^{t+\Delta t} T_P dt = [\theta T_P + (1-\theta)T_P^o] \Delta t \quad (4.47)$$

donde para $\theta = 0$ el valor de la integral sería $T_P^o \Delta t$ interviniendo solo el valor de la temperatura en el tiempo t , si $\theta = 1$ el valor de la integral sería $T_P \Delta t$ interviniendo solo el valor de la temperatura en el tiempo $t+\Delta t$. Y si $\theta = 1/2$ el valor de la integral sería $\frac{1}{2}(T_P^o + T_P) \Delta t$ teniendo el mismo peso sobre la solución los valores tanto del momento t , como de $t+\Delta t$.

Empleando esta integración para T_W y T_E en la ecuación 4.46 y dividiendo por $A \Delta t$ se obtiene:

$$\begin{aligned} \rho c \left(\frac{T_P - T_P^o}{\Delta t} \right) \Delta x = & \theta \left[\left(k_e \frac{T_E - T_P}{\delta x_{PE}} \right) - \left(k_w \frac{T_P - T_W}{\delta x_{WP}} \right) \right] + \\ & + (1-\theta) \left[\left(k_e \frac{T_E^o - T_P^o}{\delta x_{PE}} \right) - \left(k_w \frac{T_P^o - T_W^o}{\delta x_{WP}} \right) \right] + \bar{S} \Delta x \end{aligned} \quad (4.48)$$

que puede ser reordenada para obtener:

$$\begin{aligned} \left[\rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} + \theta \left(\frac{k_e}{\delta x_{PE}} + \frac{k_w}{\delta x_{WP}} \right) \right] T_P = \\ = \frac{k_e}{\delta x_{PE}} [\theta T_E + (1-\theta)T_E^o] + \frac{k_w}{\delta x_{WP}} [\theta T_W + (1-\theta)T_W^o] + \\ + \left[\rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} - (1-\theta) \frac{k_e}{\delta x_{PE}} - (1-\theta) \frac{k_w}{\delta x_{WP}} \right] T_P^o + \bar{S} \Delta x \end{aligned} \quad (4.49)$$

Identificando los coeficientes de T_W y T_E como a_W y a_E , la ecuación 4.49 puede ser reescrita de la forma

$$a_P T_P = a_W [\theta T_W + (1-\theta) T_W^o] + a_E [\theta T_E + (1-\theta) T_E^o] + [a_P^o - (1-\theta) a_W - (1-\theta) a_E] T_P^o + b \quad (4.50)$$

donde:

$$a_P = \theta(a_W + a_E) + a_P^o \quad (4.51)$$

con

$$a_P^o = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.52)$$

$$a_W = \frac{k_w}{\delta x_{WP}} \quad (4.53)$$

$$a_E = \frac{k_e}{\delta x_{PE}} \quad (4.54)$$

$$b = \bar{S} \Delta x \quad (4.55)$$

La forma exacta de la ecuación discretizada depende del valor de θ . Cuando $\theta = 0$ solo intervienen los valores de las temperaturas T_P^o , T_W^o y T_E^o , del paso de tiempo anterior en el momento t , en el valor de T_P del nuevo momento de tiempo $t + \Delta t$ y el resultado obtenido es llamado explícito. Cuando $0 < \theta \leq 1$ las temperaturas en el nuevo momento de tiempo intervienen en la ecuación y el resultado obtenido es llamado implícito. En el caso de que $\theta = 1$ la solución se considera como totalmente implícita.

4.3.4.2. Esquema totalmente implícito

Para $\theta = 1$, de la ecuación 4.50, se obtiene el esquema totalmente implícito. En este caso el término de generación es linearizado como $b = S_u + S_p T_p$. La ecuación discretizada es la siguiente:

$$a_p T_p = a_w T_w + a_e T_e + a_p^0 T_p^0 + S_u \quad (4.56)$$

donde:

$$a_p = a_p^0 + a_w + a_e - S_p \quad (4.57)$$

y

$$a_p^0 = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.58)$$

con

$$a_w = \frac{k_w}{\delta x_{wp}} \quad (4.59)$$

$$a_e = \frac{k_e}{\delta x_{pe}} \quad (4.60)$$

Ambos lados de la ecuación contienen temperaturas del nuevo paso de tiempo, y un sistema de ecuaciones algebraicas debe ser resuelto para cada paso de tiempo. El procedimiento de inicialización comienza con un campo de temperaturas T^0 inicialmente dado. El sistema de ecuaciones (4.56) es resuelto después de seleccionar el paso de tiempo Δt . Después la solución de T es asignada a T^0 y el procedimiento se repite para avanzar en la solución al paso de tiempo siguiente.

Como se puede ver todos los coeficientes tienen un valor positivo, lo cual hace que el esquema implícito sea incondicionalmente estable para cualquier tamaño del paso de tiempo. Ya que la exactitud del esquema es solo de primer orden respecto al tiempo, es necesario que el tamaño de los pasos de tiempo sea pequeño para asegurar la exactitud de los resultados. El método implícito está recomendado para cálculos transitorios de propósito general debido a su robustez y estabilidad incondicional.

4.3.4.3. Método implícito para problemas de dos y tres dimensiones

La difusión transitoria tridimensional está gobernada por la ecuación:

$$\rho c \frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S \quad (4.61)$$

Considerando un volumen de control tridimensional la ecuación discretizada quedaría como:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_B \phi_B + a_T \phi_T + a_P^0 \phi_P^0 + S_u \quad (4.62)$$

donde:

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T + a_P^0 - S_P \quad (4.63)$$

$$a_P^0 = \rho c \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (4.64)$$

Para problemas unidimensionales tendremos los coeficientes a_W (west) y a_E (east), para bidimensionales a_W , a_E , a_S (south) y a_N (north), y para tridimensionales a_W , a_E , a_S , a_N , a_B (bottom) y a_T (top). Siendo el término de generación linearizado como $b = S_u + S_P \phi_P$.

El valor de los coeficientes viene dado por:

	a_W	a_E	a_S	a_N	a_B	a_T
1D	$\frac{\Gamma_w}{\delta_{xWP}} A_w$	$\frac{\Gamma_e}{\delta_{xPE}} A_e$	-	-	-	-
2D	$\frac{\Gamma_w}{\delta_{xWP}} A_w$	$\frac{\Gamma_e}{\delta_{xPE}} A_e$	$\frac{\Gamma_s}{\delta_{ySP}} A_s$	$\frac{\Gamma_n}{\delta_{yPN}} A_n$	-	-
3D	$\frac{\Gamma_w}{\delta_{xWP}} A_w$	$\frac{\Gamma_e}{\delta_{xPE}} A_e$	$\frac{\Gamma_s}{\delta_{ySP}} A_s$	$\frac{\Gamma_n}{\delta_{yPN}} A_n$	$\frac{\Gamma_b}{\delta_{zBP}} A_b$	$\frac{\Gamma_t}{\delta_{zPT}} A_t$

Siendo el valor de los volúmenes y de las caras de las áreas para cada uno de los casos:

	1D	2D	3D
ΔV	Δx	$\Delta x \Delta y$	$\Delta x \Delta y \Delta z$
$A_w = A_e$	1	Δy	$\Delta y \Delta z$
$A_n = A_s$	-	Δx	$\Delta x \Delta z$
$A_b = A_t$	-	-	$\Delta x \Delta y$

4.3.4.4. Discretización de ecuaciones de convección y difusión transitorias

En la discretización totalmente implícita los términos derivados de la discretización temporal aparecen como la contribución de a_p^0 al coeficiente a_p y la contribución de $a_p^0 \phi_p^0$ como término fuente adicional en el lado derecho de la ecuación. El resto de coeficientes no se alteran y son iguales para las ecuaciones discretizadas de problemas estacionarios. Empleado estos conceptos como base, la discretización de ecuaciones para sistemas transitorios de convección y difusión es fácil de obtener. El transporte transitorio de una propiedad ϕ viene dado por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma \text{grad}\phi) + S_\phi \quad (4.65)$$

La convección-difusión transitoria tridimensional de la propiedad ϕ en un campo de velocidades u está gobernada por la ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v\phi)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w\phi)}{\partial z} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial\phi}{\partial z} \right) + S \end{aligned} \quad (4.66)$$

La discretización totalmente implícita es:

$$a_P \phi_P = a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N + a_B \phi_B + a_T \phi_T + a_P^0 \phi_P^0 + S_u \quad (4.67)$$

donde:

$$a_P = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T + a_P^0 + \Delta F - S_P \quad (4.68)$$

con:

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0 \Delta V}{\Delta t} \quad (4.69)$$

y

$$\bar{S} \Delta V = S_u + S_P \phi_P \quad (4.70)$$

Siendo el valor de los coeficientes:

	1D	2D	3D
a_W	$\max \left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right), 0 \right]$	$\max \left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right), 0 \right]$	$\max \left[F_w, \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right), 0 \right]$
a_E	$\max \left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right), 0 \right]$	$\max \left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right), 0 \right]$	$\max \left[-F_e, \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right), 0 \right]$
a_S	-	$\max \left[F_s, \left(D_s + \frac{F_s}{2} \right), 0 \right]$	$\max \left[F_s, \left(D_s + \frac{F_s}{2} \right), 0 \right]$
a_N	-	$\max \left[-F_n, \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right), 0 \right]$	$\max \left[-F_n, \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right), 0 \right]$
a_B	-	-	$\max \left[F_b, \left(D_b + \frac{F_b}{2} \right), 0 \right]$
a_T	-	-	$\max \left[-F_t, \left(D_t - \frac{F_t}{2} \right), 0 \right]$
ΔF	$F_e - F_w$	$F_e - F_w + F_n - F_s$	$F_e - F_w + F_n - F_s + F_t - F_b$

Siendo el valor de F y D, el calculado mediante las siguientes formulas:

Cara	w	e	s	n	b	t
F	$(\rho u)_w A_w$	$(\rho u)_e A_e$	$(\rho v)_s A_s$	$(\rho v)_n A_n$	$(\rho w)_b A_b$	$(\rho w)_t A_t$
D	$\frac{\Gamma_w}{\delta_{xWP}} A_w$	$\frac{\Gamma_e}{\delta_{xPE}} A_e$	$\frac{\Gamma_s}{\delta_{ySP}} A_s$	$\frac{\Gamma_n}{\delta_{yPN}} A_n$	$\frac{\Gamma_b}{\delta_{zBP}} A_b$	$\frac{\Gamma_t}{\delta_{zPT}} A_t$

4.3.4.5. Algoritmo SIMPLE transitorio

El algoritmo SIMPLE, descrito en el punto 4.3.3.2., puede ser ampliado para el cálculo transitorio. La discretización de las ecuaciones de momento incluye en estos casos términos transitorios como se ha visto en el punto anterior. Para la ecuación de la presión, también es necesario, agregar nuevos términos. La ecuación de continuidad de un flujo bidimensional transitorio viene dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \quad (4.71)$$

Integrando esta ecuación dentro de un volumen de control bidimensional obtenemos:

$$\frac{(\rho_P - \rho_P^0)}{\Delta t} \Delta V + [(\rho u A)_e - (\rho u A)_w] + [(\rho v A)_n - (\rho v A)_s] = 0 \quad (4.72)$$

La ecuación de corrección de presión es derivada de la ecuación de continuidad y por lo tanto contiene términos con carácter transitorio. El equivalente a la ecuación 4.32 para la corrección de la presión en un flujo transitorio bidimensional viene dada por:

$$a_P p'_P = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + b' \quad (4.73)$$

donde:

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (4.74)$$

y

$$b' = (\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho v^* A)_s - (\rho v^* A)_n + \frac{(\rho_P - \rho_P^0) \Delta V}{\Delta t} \quad (4.75)$$

$$a_E = (\rho dA)_e \quad (4.76)$$

$$a_W = (\rho dA)_w \quad (4.77)$$

$$a_N = (\rho dA)_n \quad (4.78)$$

$$a_S = (\rho dA)_s \quad (4.79)$$

4.4. Discretización del volumen de control

Una vez planteado el modelo numérico a continuación se determina la discretización del volumen de control en volúmenes finitos, proceso denominado mallado. En cada uno de los volúmenes se realizará el cómputo numérico de las ecuaciones generales que se aplican para la resolución del problema planteado, según los métodos expuestos en el punto anterior.

La discretización del volumen de control en problemas de mecánica de fluidos viene condicionada por el modelo de turbulencia seleccionado. Como se indicó en el capítulo anterior, el modelo de turbulencia empleado es el $k-\varepsilon$ estándar con tratamiento mejorado en la zona próxima a la pared, que no requiere un mallado muy fino en las regiones próximas a la pared, ya que simula el comportamiento del fluido en las zonas de capa límite laminar, en lo que a esfuerzo cortante y campos de velocidades se refiere, con lo que se ven reducidos, en comparación con otros modelos de turbulencia, el número de elementos necesario y el costo computacional necesario para obtener la solución. Para que la simulación del comportamiento cercano a la pared por parte del modelo de turbulencia sea válida, el mallado realizado debe cumplir una condición en lo que se refiere a la distancia adimensional a la pared obtenida, que para el modelo de turbulencia $k-\varepsilon$ se encuentra dentro de unos límites, siendo válido cuando $30 < y^+ < 500$.

El proceso de discretización del volumen de control requiere un estudio de mallado con la finalidad de optimizar el modelo numérico para obtener una solución válida con el menor coste computacional. Se han estudiado cuatro mallados diferentes, con 6, 3, 2, y 1,8 millones de elementos. El mallado que ofrece una relación adecuada entre la precisión de los resultados y el número de elementos y un valor de y^+ dentro de los límites condicionados por el modelo $k-\varepsilon$, consta de un total de 1.886.565 volúmenes tetraédricos.

En el proceso de mallado del volumen de control se ha de tener en cuenta la diferencia de escala entre el gran volumen del tanque digestor y el tamaño de las tuberías instaladas en el interior del tanque o los diámetros de las tuberías de entrada y salida al tanque. Para obtener un tamaño de celda que se adapte a dicho cambio de escala y asegure unos resultados precisos en las proximidades de las zonas singulares ha sido necesario dividir el volumen de control en diferentes sub-volúmenes para posteriormente realizar la discretización en volúmenes finitos.

Subdivisión del volumen de control

Debido a las singularidades que se presentan en la geometría, como son la tubería de recirculación y la tubería de salida, ubicadas en el interior del volumen del tanque, se ha dividido el volumen de control en varios sub-volumenes concéntricos, para obtener un mallado adecuado en las áreas próximas a las entradas y salidas y entorno a las tuberías, al tiempo que se consigue reducir el número de celdas necesario para mallar el volumen total.

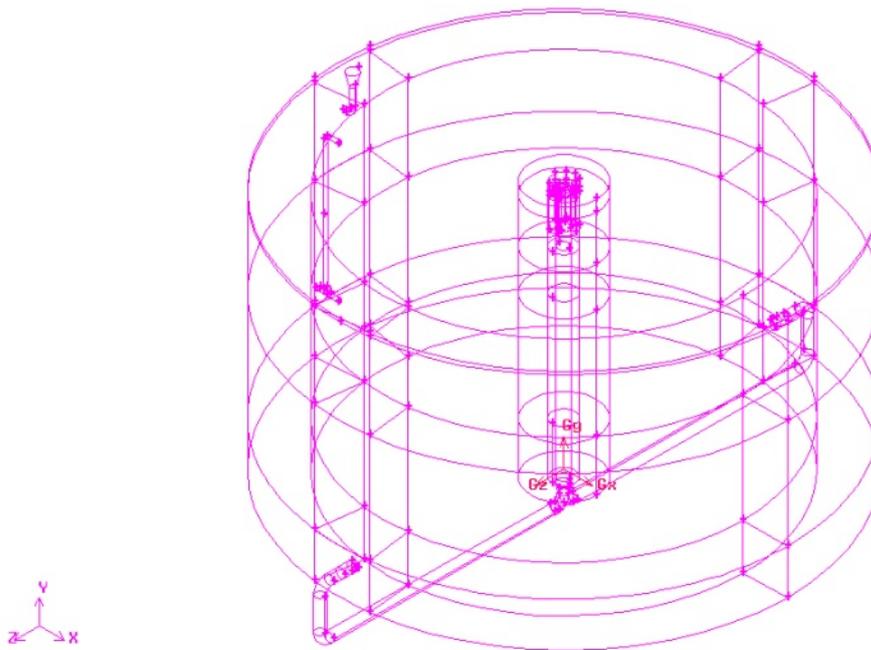


Figura 4.6. Geometría dividida en volúmenes. Vista isométrica.

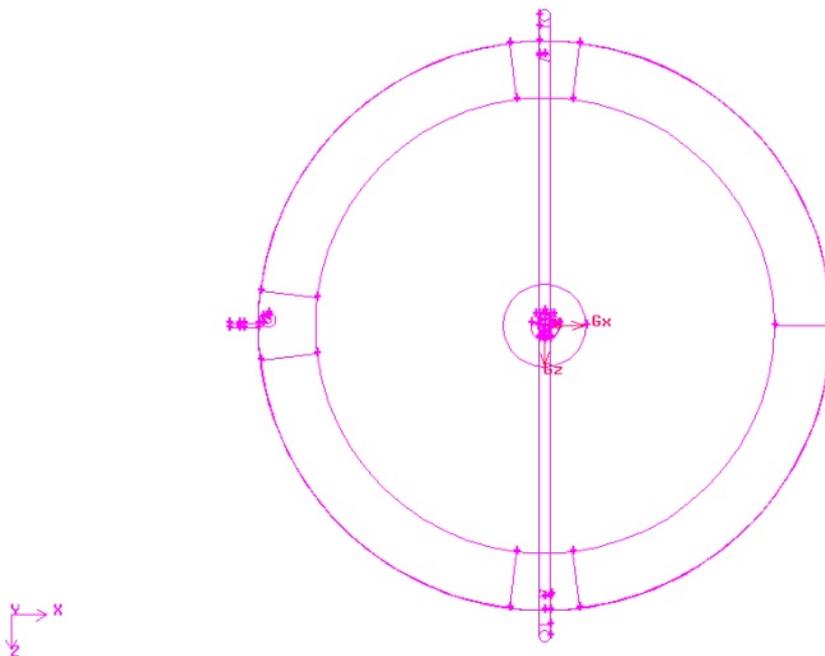


Figura 4.7. Geometría dividida en volúmenes. Vista en planta.

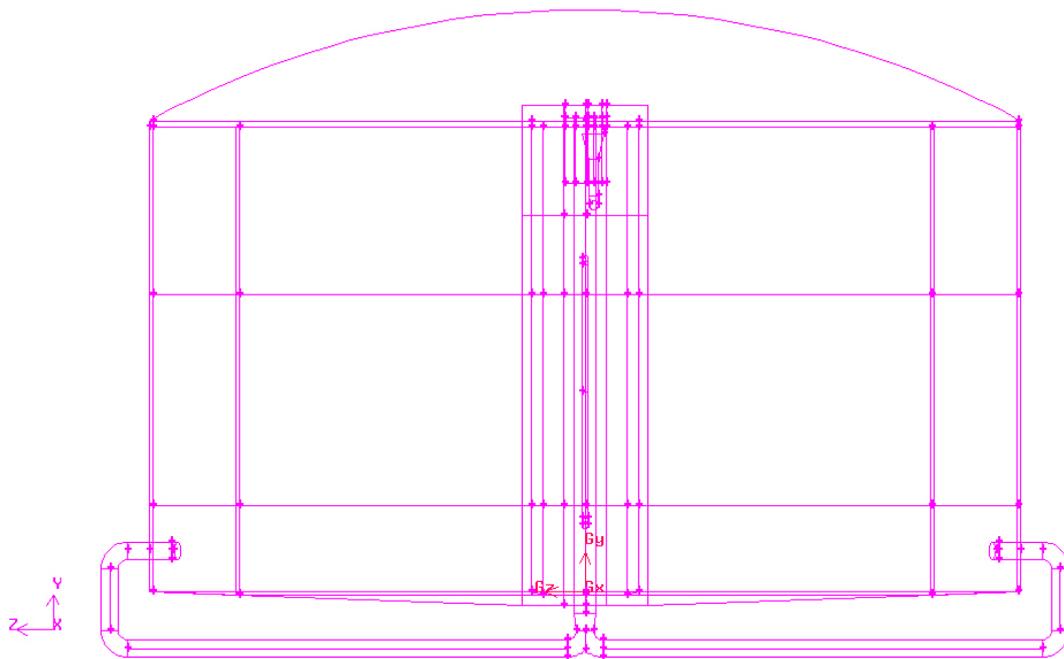


Figura 4.8. Geometría dividida en volúmenes. Vista en alzado

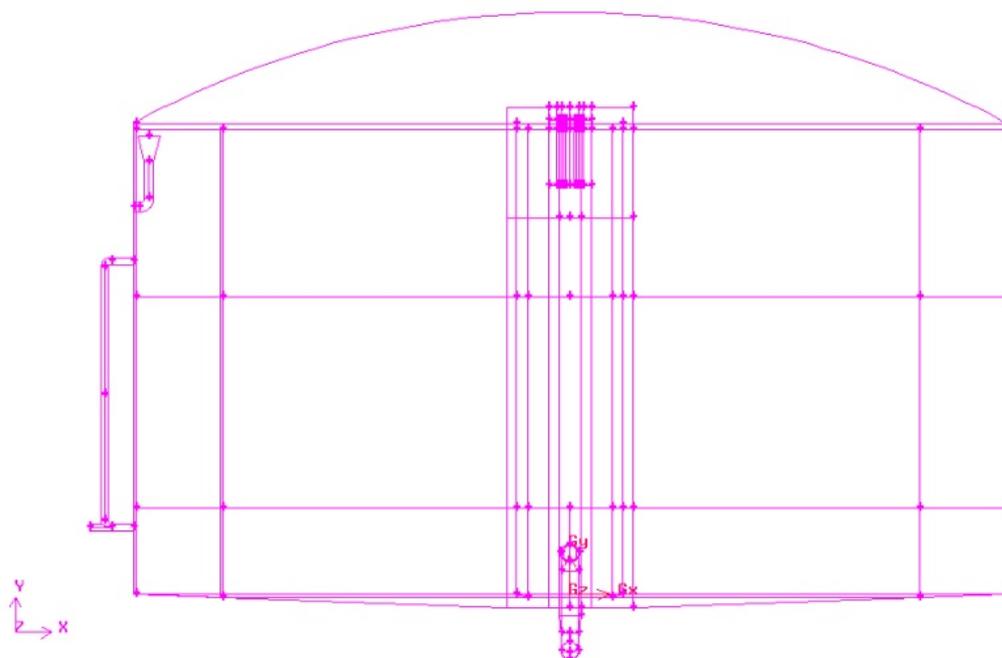


Figura 4.9. Geometría dividida en volúmenes. Vista de perfil.

Mallado

La geometría del reactor ha sido modelada tridimensionalmente mediante el software Gambit. La discretización del volumen fluido se ha desarrollado generando un mallado combinado estructurado - no estructurado, mostrado en la Figura 4.9, que divide la geometría en un total de 1.886.565 volúmenes tetraédricos.



Figura 4.9. Mallado del volumen de control.

Desde la figura 4.10 a la 4.15 se muestra el mallado superficial de las diferentes tuberías que componen el sistema.

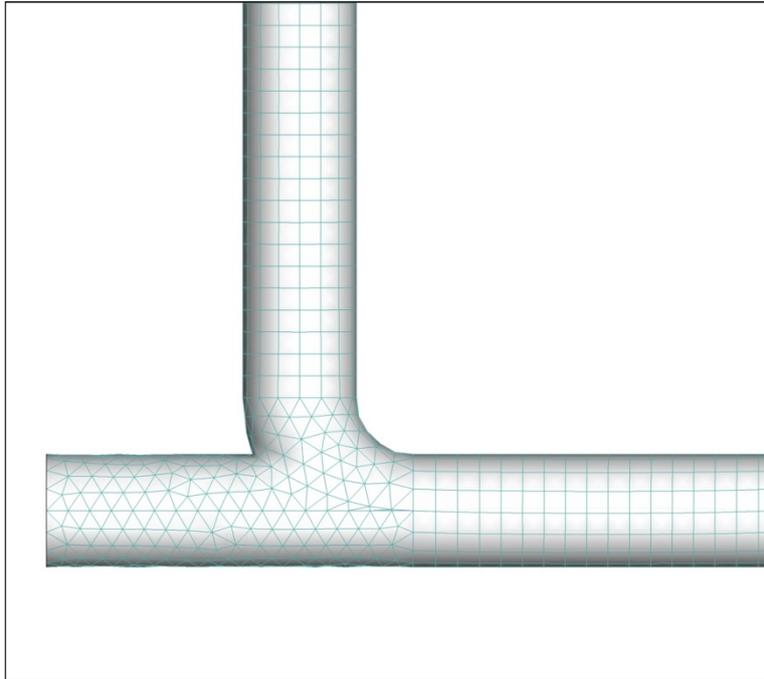


Figura 4.10. Tubería de alimentación/calefacción, zona de impulsión.

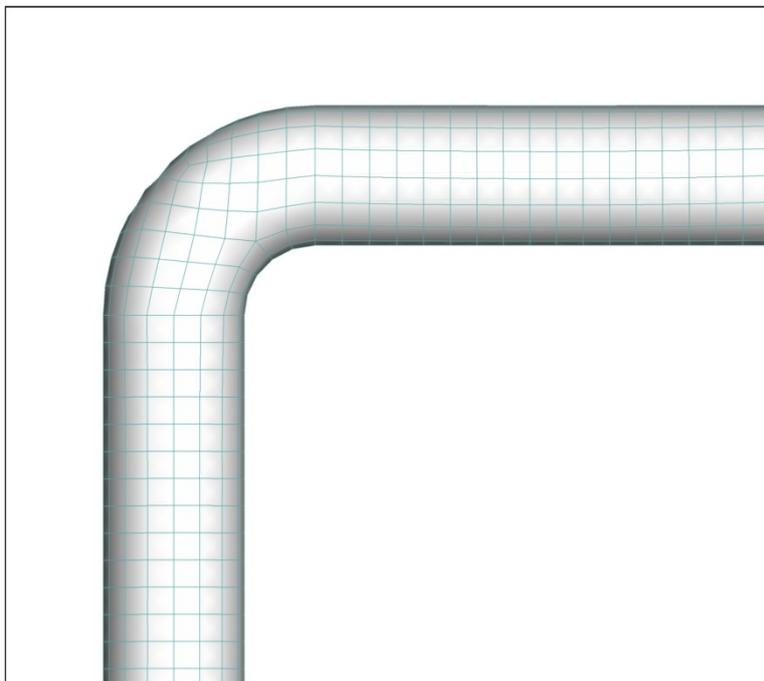


Figura 4.11. Tubería de alimentación/calefacción, zona de aspiración.

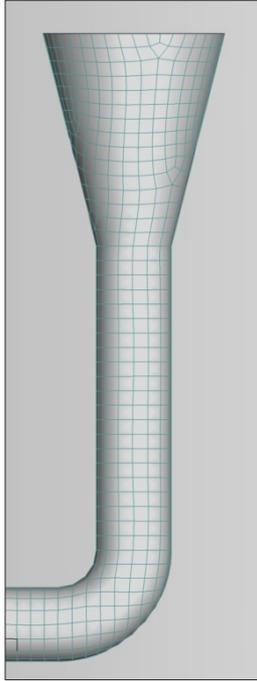


Figura 4.12. Tubería de salida de fangos.

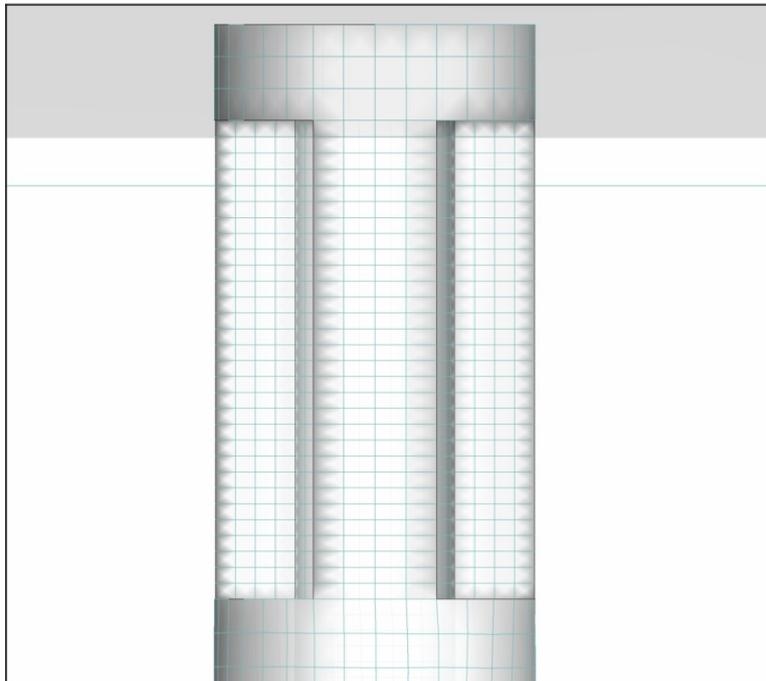


Figura 4.13. Entrada a la tubería de recirculación.

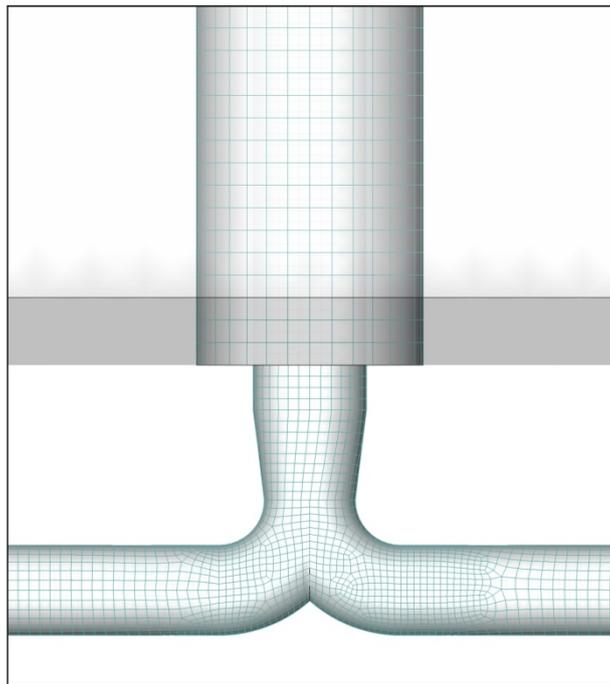


Figura 4.14. Bifurcación de la tubería de recirculación.

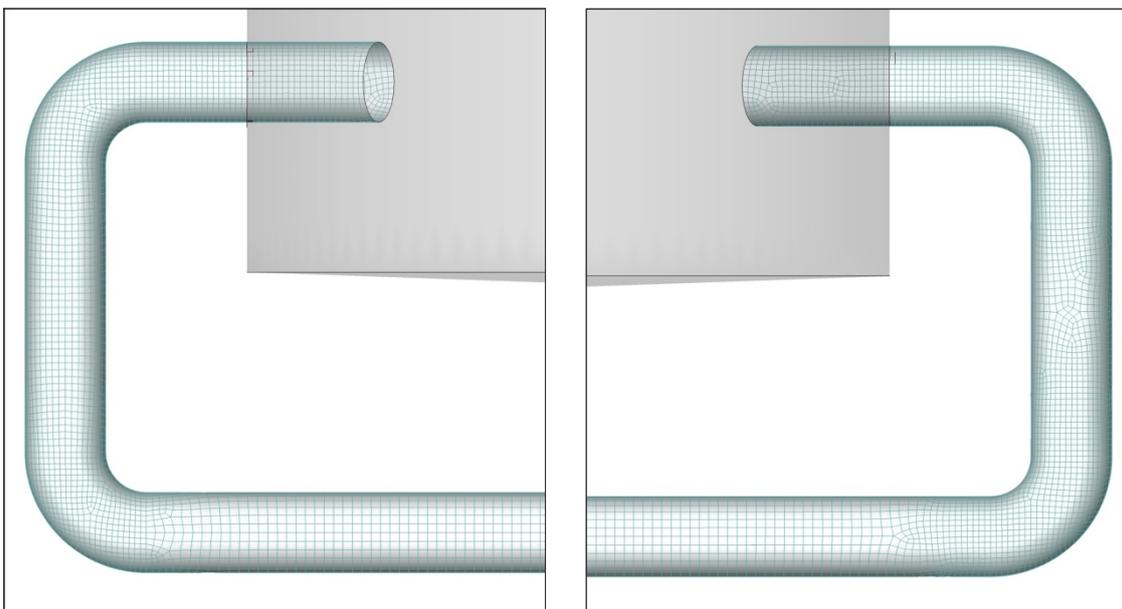


Figura 4.15. Tuberías de salida al tanque de la recirculación.

5. Validación del modelo numérico

5.1. Introducción

El proceso de validación de un modelo numérico se lleva a cabo comparando los resultados obtenidos mediante cómputo numérico con los resultados obtenidos por el modelo experimental, cuyo comportamiento se desea reproducir, para ello se estudian ambos modelos bajo idénticas condiciones de contorno y se comparan las variables que determinan el comportamiento a analizar.

En el presente capítulo se realiza la validación del modelo numérico del digestor de mezcla continua comparando los valores numéricos de flujo másico generado por los sistemas de impulsión en los diferentes subsistemas hidráulicos y de velocidad media de los fangos en el interior del tanque digestor con los valores experimentales obtenidos en la instalación. Además, se han analizado las curvas de distribución de tiempos de residencia que caracterizan el comportamiento hidráulico del digestor, comparando los resultados numéricos con el modelo ideal para un reactor de mezcla continua.

5.2. Sistemas de impulsión

La impulsión de fangos a través del sistema de recirculación/agitación y del sistema de calentamiento se realiza mediante dos bombas que proporcionan un flujo másico de fangos de 235,175 kg/s y de 17,25 kg/s para el sistema de recirculación y para el sistema de calentamiento, respectivamente. El efecto de las bombas de ambos sistemas ha sido introducido en el modelo numérico mediante sendos saltos de presión ajustados para alcanzar dichos valores de flujo másico. Las velocidades y flujos másicos de los fangos establecidos en las secciones de entrada y salida de las tuberías que conectan el tanque digestor con los diferentes subsistemas hidráulicos y en los sistemas de impulsión se recogen en la Tabla 5.1.

	FLUJO MÁSICO (kg/s)	VELOCIDAD MEDIA (m/s)
Entrada de fangos	1,797	0,068
Aspiración de fangos fríos al calentamiento	17,301	0,961
Bomba del sistema de calentamiento	17,301	0,909
Entrada de fangos calientes al tanque digestor	19,098	1,006
Aspiración de fangos a la recirculación/agitación	234,473	1,161
Bomba del sistema de recirculación/agitación	234,473	1,162
Entrada al tanque de fangos recirculados 1	117,028	0,911
Entrada al tanque de fangos recirculados 2	117,445	0,915
Salida de fangos del tanque digestor	1,797	0,053

Tabla 5.1. Flujo másico y velocidad media de los fangos en las secciones de entrada y salida de las tuberías y en los sistemas de impulsión.

Los flujos másicos que se obtienen en el modelo numérico presenta un error del 0% para los caudales de entrada y salida de fangos, del 0,3% para el caudal impulsado por la bomba del sistema de recirculación/agitación y del 0,3% para el caudal impulsado por la bomba del sistema de calentamiento, por lo que la modelización de los sistemas de impulsión mediante saltos de presión queda validada.

5.3. Velocidad media de los fangos

Un factor determinante de la agitación en los reactores de mezcla continua es la velocidad del flujo; se ha analizado la velocidad de los fangos en el interior del tanque digestor, sin contar con el flujo en el interior de las tuberías o subsistemas hidráulicos asociados; los porcentajes volumétricos de fangos en el interior del digestor asociados a determinados rangos de velocidad se muestran en la Figura 5.1.

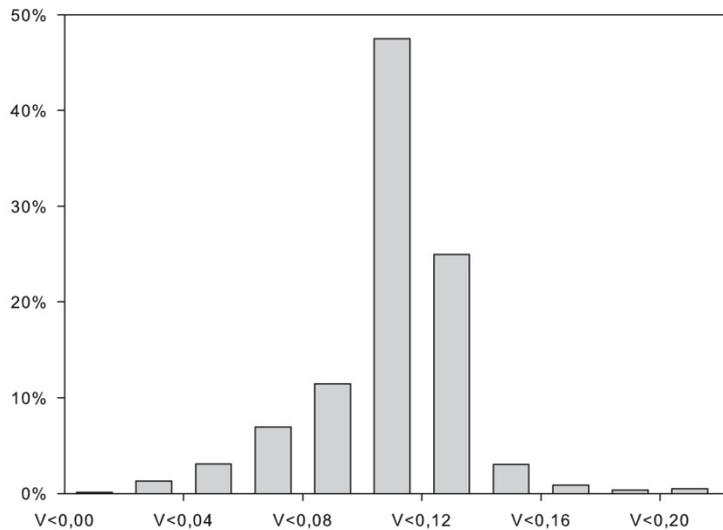


Figura 5.1. Porcentajes de volumen asociados a rangos de velocidades para un caudal de recirculación de 234,5 Kg/s (100%).

Se ha comprobado que la velocidad de los fangos en el interior del tanque no es superior a 0,4 m/s y que su velocidad media es de 0,11 m/s, valores que han sido validados por los responsables de la instalación, ESAMUR y ACCIONA Agua.

5.4. Estudio de las trayectorias del flujo

El estudio de la trayectoria del flujo fluido en el interior del reactor, que conduce al análisis de tiempos de residencia, se ha realizado mediante la inyección de partículas sin masa en la tubería de entrada al digestor; estas partículas o trazadores permiten determinar la posible existencia de caminos preferentes en el flujo, los tiempos de residencia de cada una de ellas, así como la posible existencia de un flujo defectuoso dentro del comportamiento del reactor. Como se puede apreciar en la Figura 5.2, las partículas introducidas describen una trayectoria alrededor de la tubería central debido al vórtice generado por el sistema de recirculación. Las partículas son absorbidas por los sistemas de recirculación y calefacción, hasta que por último abandonan el tanque al entrar en la tubería de salida.

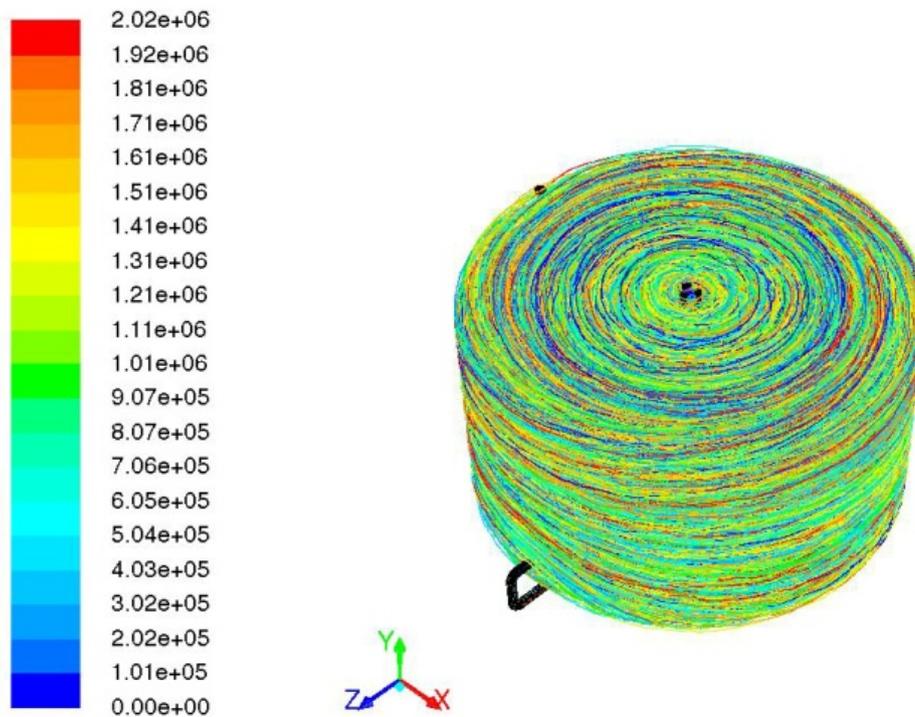


Figura 5.2. Representación de la trayectoria de una partícula. Leyenda: Tiempo de residencia en segundos.

Este análisis desarrolla la validación del modelo numérico comparando los modelos teóricos recogidos por Levenspiel [2] con los datos numéricos obtenidos por el modelo (datos recogidos en la tabla del Anexo), mediante las funciones de distribución que se exponen a continuación.

Tiempos de residencia

La inyección de 576 partículas sin masa en la tubería de entrada de fangos del modelo numérico del digestor y el estudio de su tiempo de residencia ha dado como resultado, para el caso nominal, la distribución en tiempos de residencia de las partículas considerando intervalos de tiempo de 5 días, que se muestra en la Figuras 5.3, presenta una clara tendencia exponencial decreciente.

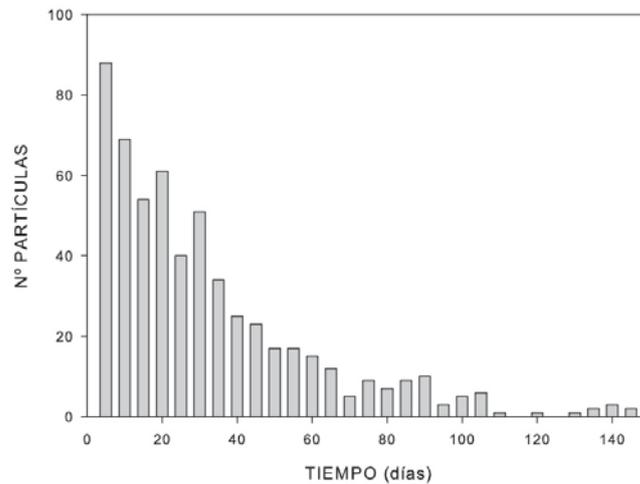


Figura 5.3. Número de partículas que abandonan el digestor en función del tiempo. Representación discreta.

A continuación se comparan los resultados obtenidos por el modelo numérico y su ajuste según la distribución de Weibull con las funciones que caracterizan el modelo ideal de reactor de mezcla continua propuesto por MacMullin y Weber (Levenspiel [2]), representando el porcentaje de partículas con respecto al total inyectado en función del tiempo de residencia de dichas partículas en el interior del reactor.

Función de densidad de distribución de tiempos de residencia

En la Figura 5.4 se representan el porcentaje de trazadores que abandonan el digestor con respecto al tiempo, la distribución Weibull que describen dichos porcentajes y la curva del modelo ideal de un reactor de mezcla continua (MacMullin y Weber recogida en Levenspiel [2]).

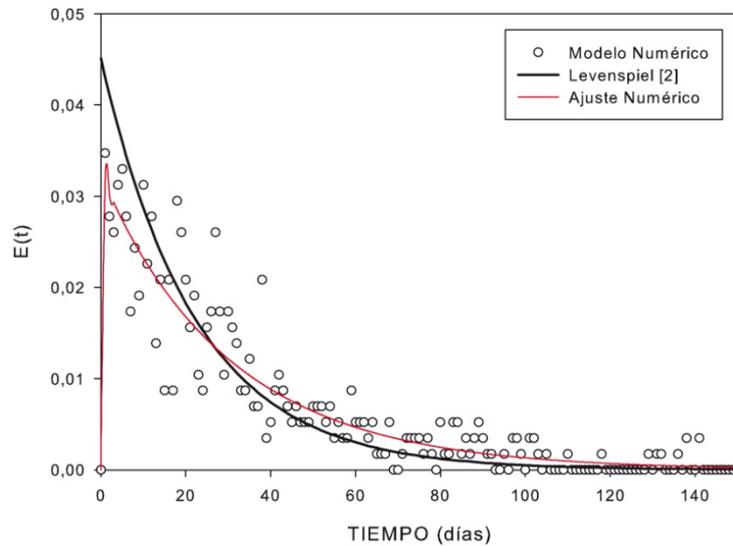


Figura 5.4. Distribución de tiempos de residencia para el caso nominal.

La representación de la función de densidad de distribución de tiempos de residencia adimensionalizada se muestra en la Figura 5.5.

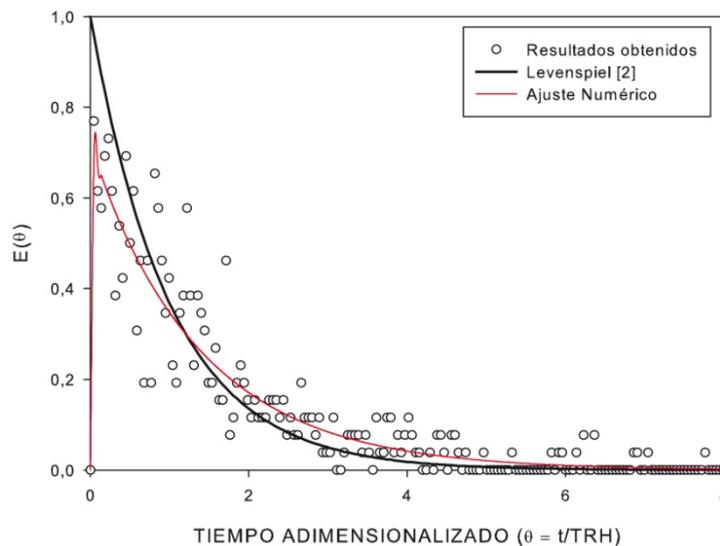


Figura 5.5. Distribución de tiempos de residencia adimensionalizados para el caso nominal.

Función de distribución de tiempos de residencia acumulados

Esta función para el modelo ideal de reactor de mezcla continua se representa, junto a los porcentajes acumulados de concentración de trazadores y la distribución Weibull descrita por los mismos, en la Figura 5.6; se aprecia que la tendencia del modelo numérico y el ideal es muy aproximada.

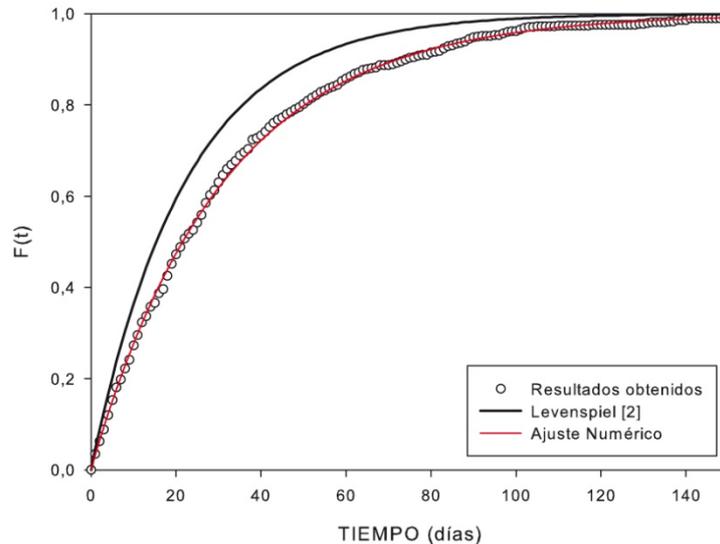


Figura 5.6. Distribución de tiempos de residencia acumulados.

Las ecuaciones para la distribución de tiempos de residencia propuestas por MacMullin y Weber (Levenspiel [2]) permiten comparar la curva obtenida numéricamente con el modelo ideal para tanques en serie, que responde a la ecuación 5.1.

$$E(\theta) = \frac{N(N\theta)^{N-1}}{(N-1)!} \cdot e^{-(N\theta)} \quad (5.1)$$

donde N es el número de digestores en serie y θ el tiempo de retención hidráulico adimensionalizado.

La distribución de tiempos obtenida por el modelo numérico para el caso nominal se ajusta, según el modelo ideal para tanques en serie, al comportamiento de 0,993 reactores con un TRH 1,4 veces superior al TRH nominal.

Los resultados obtenidos tras el estudio de partículas inyectadas para el caso nominal (dos recirculaciones con una caudal de recirculación de 234,5 kg/s) ofrecen un valor de tiempo de residencia medio aproximado al nominal y una tendencia exponencial decreciente, ajustada a la distribución ideal, como se aprecia en las Figuras 5.5 y 5.6; la tendencia descrita por la curva de ajuste numérico refleja, según la bibliografía, un adecuado mezclado en el interior del reactor.

5.5. Algunas consideraciones sobre la validación

El modelo numérico del digestor de mezcla continua ha sido validado analizando las características de los fangos en el interior del tanque y subsistemas hidráulicos y comparando los valores obtenidos con valores experimentales y modelos matemáticos.

El modelo numérico reproduce con precisión los valores del flujo másico de fangos a través de las tuberías de entrada y salida y de los sistemas de recirculación y calentamiento.

La velocidad media de los fangos en el interior del tanque digestor es de 0,11 m/s,

El análisis de las funciones de distribución de tiempos de residencia demuestra que el modelo del digestor y la simulación numérica de trazadores mediante el modelo de fase discreta son válidos.

Los resultados numéricos obtenidos describen distribuciones de tiempos de residencia de comportamiento y tendencia similar a la obtenida mediante experimentación al inyectar un trazador en el flujo de entrada al digestor y analizar su concentración respecto al tiempo en el flujo de salida, descrita en la bibliografía, y que indica un adecuado mezclado del flujo en el interior del reactor. El análisis de las funciones de distribución de tiempos de residencia indica que no existen desviaciones considerables con respecto a los patrones ideales de comportamiento, por lo que, según Levenspiel [2], se puede deducir que no existen zonas estancadas o muertas en el interior del digestor.

6. Análisis fluidodinámico del reactor de mezcla continua

A continuación se presenta una descripción cualitativa del flujo analizando los campos y los gradientes de velocidad, mostrando información cuantitativa de los perfiles de velocidades a diferentes alturas; se presentan resultados de las trayectorias y los tiempos de residencia de las partículas fluidas, en el estudio se ha hecho especial hincapié en la detección de recirculaciones, zonas muertas y caminos preferentes.

6.1. Descripción cualitativa del flujo

Debido al momento cinético que producen las entradas oblicuas del fluido procedente del sistema de recirculación, el flujo en el interior del reactor describe un movimiento en forma de vórtice. Las Figuras 6.1 y 6.2 muestran los campos de velocidades en el interior del depósito. Como se puede observar, se alcanzan velocidades máximas próximas a 0,3 m/s (sin tener en cuenta las velocidades alcanzadas en el interior de las tuberías), siendo la velocidad media de 0,11 m/s. En la Figura 6.1, que representa los planos de velocidad desde 1m de altura hasta los 10 m, se pone de manifiesto como vorticidad inducida se va amortiguando conforme se desplaza el flujo hacia la parte superior del depósito. Del mismo modo se aprecia una zona de velocidades bajas próxima a la tubería central del depósito.

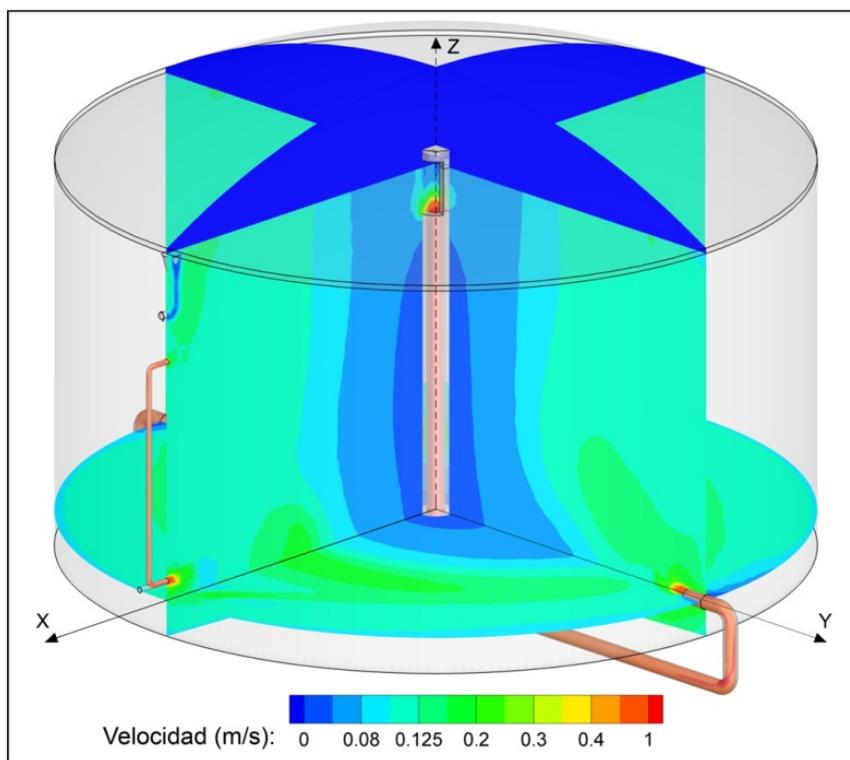


Figura 6.1. Descripción de la velocidad en el interior del digestor.

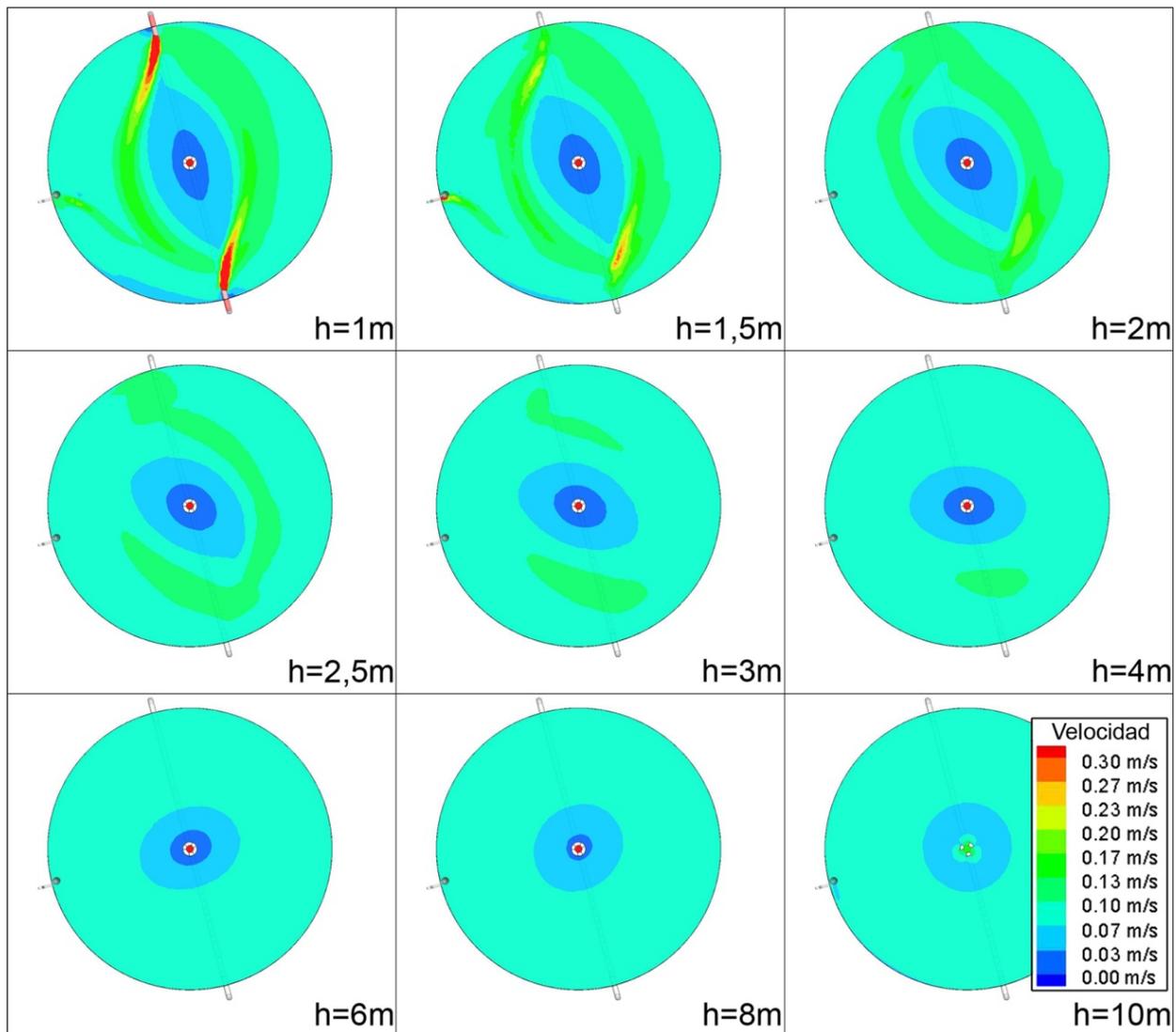
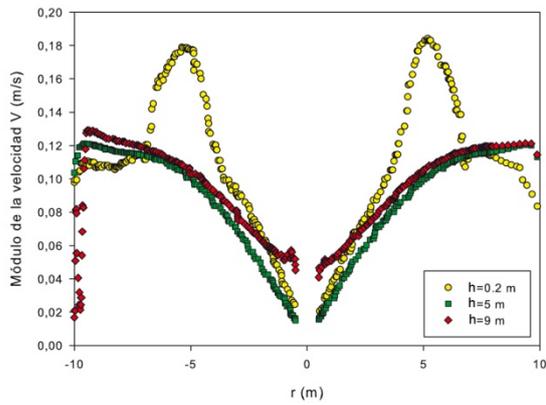


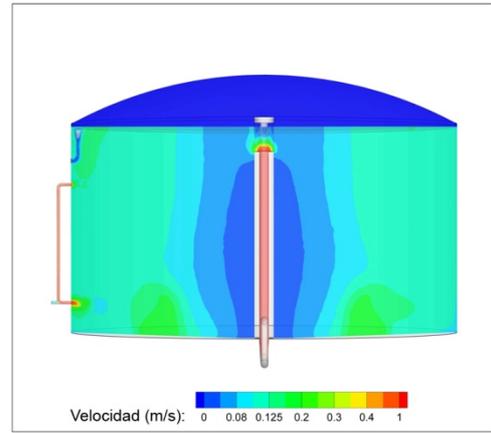
Figura 6.2. Evolución del campo de velocidades con la altura.

Según apuntan algunos autores (Bridgeman [15]) otro aspecto importante a considerar en el proceso de digestión anaeróbica es la distorsión angular de un elemento de volumen cuando está sometido a fuerzas superficiales tangenciales, esto es, el gradiente de velocidad. Para una digestión anaeróbica efectiva, la literatura sugiere que los gradientes de velocidad medios deberían estar en el rango de $50-80 \text{ s}^{-1}$. Sin embargo, Bridgeman obtuvo una buena digestión para valores de dicho gradiente significativamente inferiores a este rango. Resultados similares han sido obtenidos en esta simulación, con valores para esta magnitud en un rango de $0 - 48 \text{ s}^{-1}$.

En las Figuras 6.3 y 6.4 se presentan los perfiles de velocidades en el interior del depósito para las secciones transversales y perpendiculares entre si XZ de la Fig. 6.1, que contiene la entrada del flujo de fangos a través de la tubería de alimentación, e YZ de la Fig. 6.1, que contiene la salida de las recirculaciones.

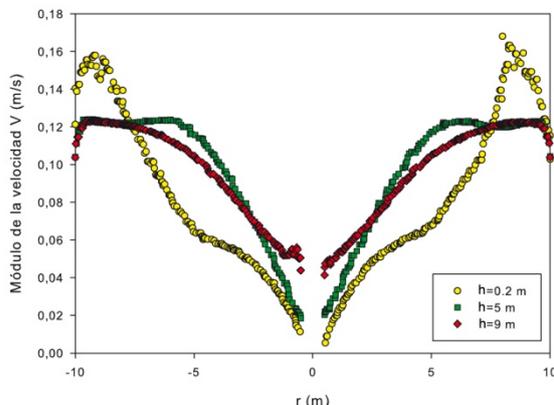


a)

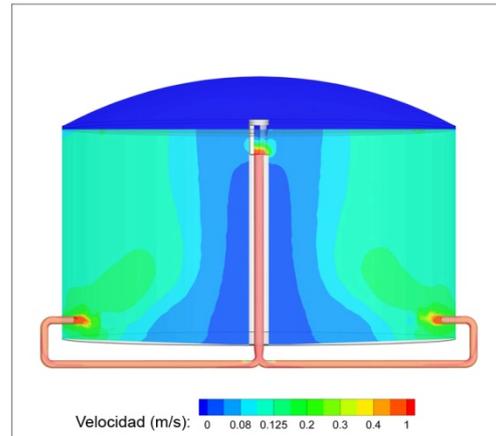


b)

Figura 6.3. Módulo de la velocidad en el plano XZ de la Fig. 3. a) Para diferentes alturas h. b) Distribución total en el plano.



a)



b)

Figura 6.4. Módulo de la velocidad en el plano YZ de la Fig. 3. a) Para diferentes alturas h. b) Distribución total en el plano.

La desembocadura del sistema de recirculación al interior del tanque origina un efecto localizado en sus inmediaciones por el cual las características del flujo son de un orden de magnitud mayor a las del resto del fluido en el interior del reactor, como se aprecia en la Figura 6.5b, sin embargo la influencia de este flujo a mayor velocidad pronto se atenúa debido a su dispersión en el interior del gran volumen del tanque del digester y, como queda de manifiesto en la Figura 6.5a, su efecto ya ha desaparecido al efectuar el flujo un cuarto de vuelta en el interior del tanque, este hecho es fácilmente apreciable observando la evolución del campo de velocidades con la altura mostrado en la Figura 6.2.

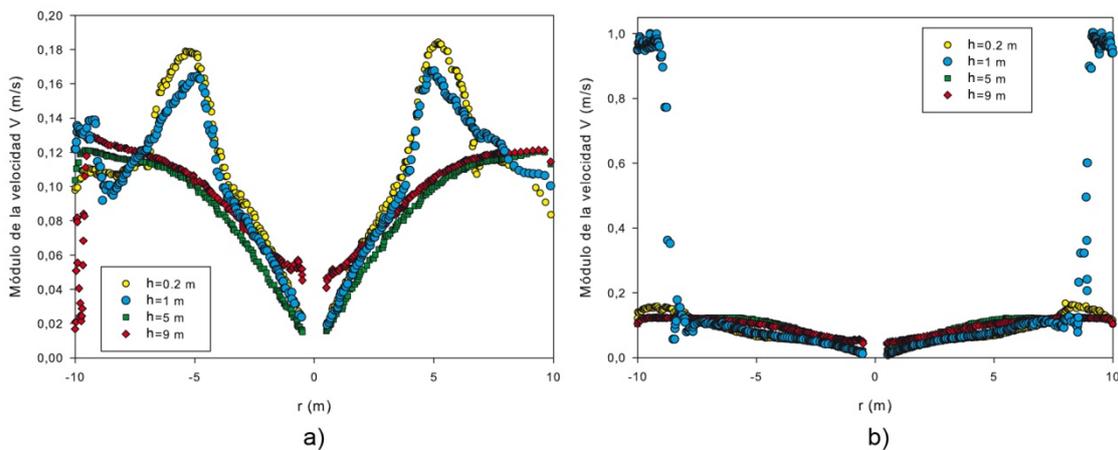


Figura 6.5. Módulo de la velocidad a diferentes alturas h . a) Para el plano XZ de la Fig. 3. b) Para el plano YZ de la Fig. 3.

En el plano XZ mostrado en la Figura 6.5a, junto a la pared del reactor, en $r \approx -10$ m, se observa un pico de velocidad a la cota de 1 metro de altura debido al efecto de la desembocadura del sistema de entrada de fangos al tanque digester, por otro lado, se aprecia una caída en la magnitud de la velocidad a la cota de 9 metros de altura debida al efecto del tránsito del flujo alrededor de la tubería de salida de fangos.

Los efectos anteriormente comentados pierden su influencia en el flujo de fangos con rapidez conforme éste se aleja de las zonas identificadas, por lo que no se consideran relevantes ya que el presente estudio se enfoca en el comportamiento global del flujo en el reactor y no en estas pequeñas zonas localizadas, por lo tanto los valores de flujo contenido a una cota de 1 metro de altura con respecto a la parte inferior del tanque (que incluye el efecto de la desembocadura del sistema de recirculación al interior del tanque) no se incluirán en las posteriores figuras, debido a que su representación impide una percepción clara de los valores que se alcanzan en el resto de las alturas representadas, como se aprecia comparando las Figuras 6.4a y 6.5b.

En la Figura 6.6 se representa el módulo de la velocidad a una altura de 5 m en el interior del depósito para estos los planos XZ e YZ de la Fig.3, tal y como ya se ha puesto de manifiesto en la Figura 5, se observa que existe cierta asimetría en el flujo como consecuencia de la posición de las tuberías de entrada.

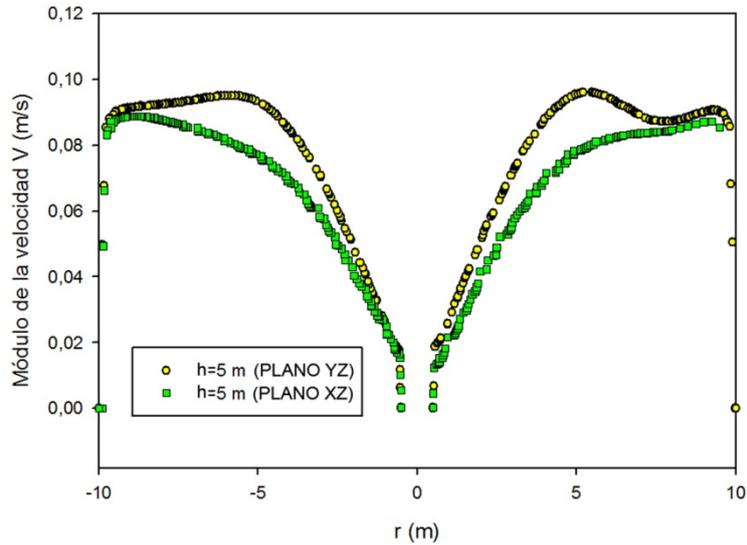


Figura 6.6. Módulo de la velocidad a una altura de 5 m en el interior del depósito para los planos XZ e YZ de la Fig. 3.

En la Figura 6.7 se ha representado la velocidad acimutal en el interior del depósito, producida por el momento cinético inducido por las dos tuberías de entrada; se observa el efecto del vórtice generado por el sistema de recirculación.

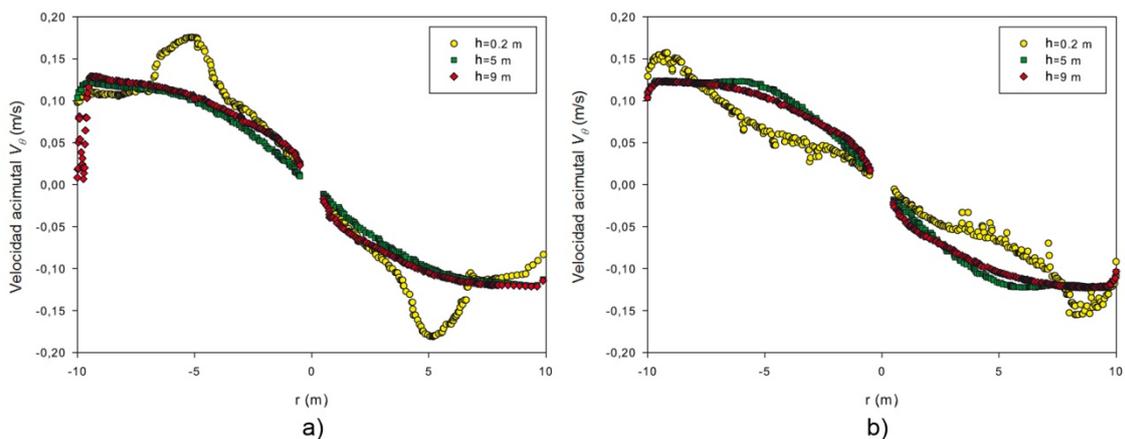


Figura 6.7. Componente acimutal de la velocidad a diferentes alturas h. a) Para el plano XZ de la Fig. 3. b) Para el plano YZ de la Fig. 3.

En la Figura 6.8 se muestra la componente radial de la velocidad; se observa, en XZ a la cota de 9 metros de altura, el efecto de succión de la tubería de entrada al sistema de recirculación.

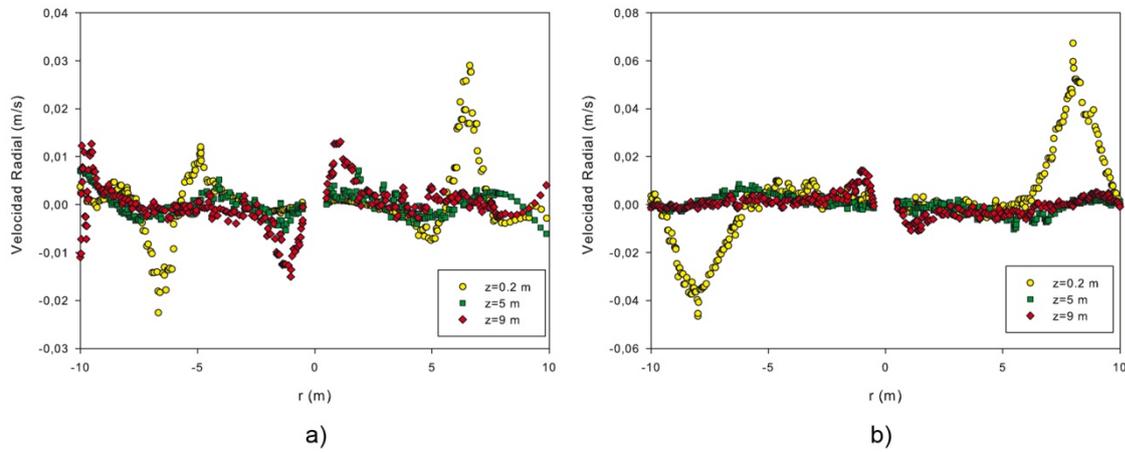


Figura 6.8. Componente radial de la velocidad a diferentes alturas. a) Para el plano XZ de la Fig. 3. b) Para el plano YZ de la Fig. 3.

La Figura 6.9 representa la intensidad de turbulencia a diferentes alturas para los planos XZ e YZ. El pico de turbulencia que se observa en el plano XZ próximo a la pared del tanque, en $r \approx -10$ m, a la cota de 9 metros de altura es debido a la influencia de la tubería de salida instalada en el interior del digestor que se interpone al tránsito del flujo. En los dos planos representados se aprecia el efecto de succión del sistema de recirculación en los picos que se observan a la cota de 9 metros de altura próximos a la tubería central, en $r \approx \pm 0,5$ m; se observa en el plano XZ, a 0,2 metros de altura, el efecto de la cantidad de movimiento que el caudal recirculado introduce en el interior del digestor, en $r \approx \pm 5$ m. Para cotas intermedias, en las que el efecto de la recirculación, ya sea debido a la impulsión o la absorción, se ha dispersado, por ejemplo a 5 metros de altura, el flujo turbulento presenta un perfil mucho más desarrollado, aunque todavía asimétrico por efecto del vórtice generado por el sistema de recirculación.

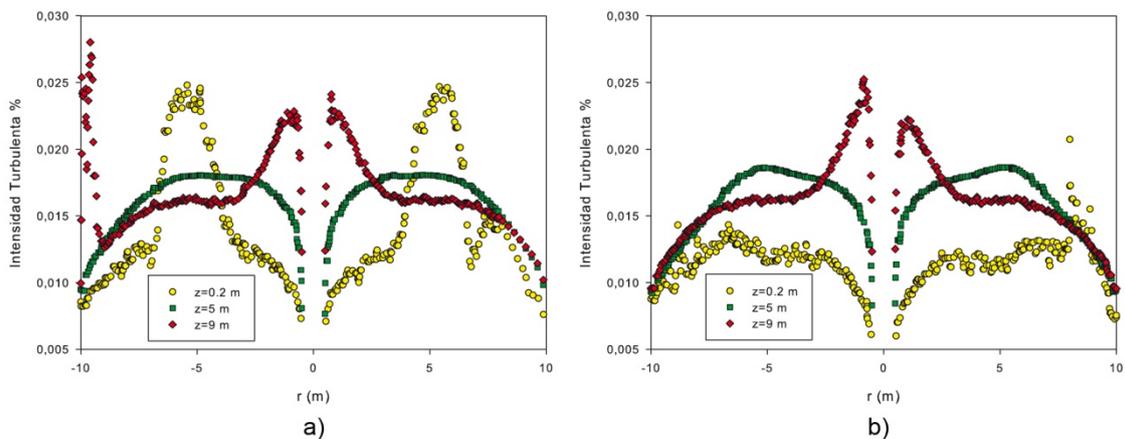


Figura 6.9. Intensidad de turbulencia a diferentes alturas. a) Para el plano XZ de la Fig. 3. b) Para el plano YZ de la Fig. 3.

6.2. Volumen activo del reactor

El volumen activo o útil del reactor, es decir, la fracción de volumen de fluido que puede en relación al volumen total de los fangos contenidos en el reactor en donde el proceso de digestión puede ser considerado satisfactorio, se ha determinado, para varios criterios, tras obtener los porcentajes de volumen asociados a rangos de velocidades del flujo fluido en el interior del digestor; esta información se presenta en la Figura 6.10. Teniendo en cuenta las consideraciones de Vesvikar y Al Dahhan [14], las localizaciones donde la velocidad es inferior al 5% de la velocidad máxima dentro del volumen se pueden considerar zonas estancadas o inactivas. En nuestro caso, teniendo en cuenta que la velocidad máxima dentro del depósito se encuentra entre 0,2 y 0,3 m/s, la velocidad límite de estancamiento es de entre 0,01 y 0,015 m/s. Según los resultados que muestra la Figura 13, para el caso en el que se considera el caudal nominal del modelo experimental, el porcentaje de volumen que presenta una velocidad inferior a este valor es inferior al 1%, por lo que se puede concluir que hay una buena homogeneización del flujo aunque la zona central del depósito junto a la tubería presenta velocidades relativamente bajas. Los resultados obtenidos indican que más del 60% del volumen se encuentra a una velocidad comprendida entre 0,1 y 0,14 m/s.

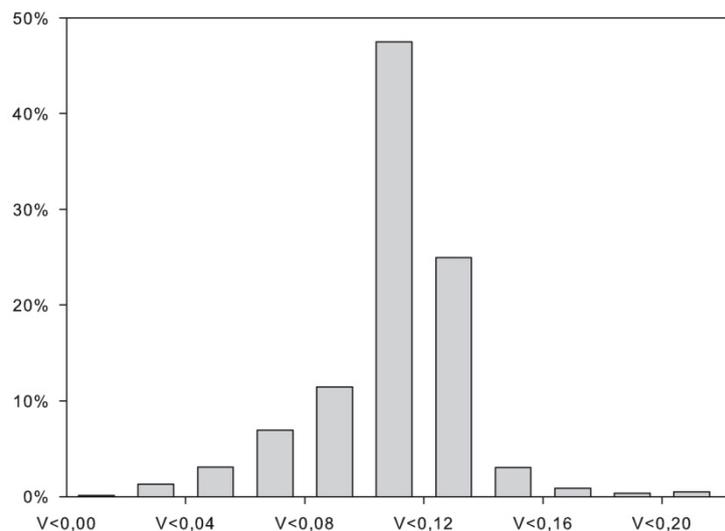


Figura 6.10. Porcentajes de volumen asociados a rangos de velocidades para un caudal de recirculación de 234,5 Kg/s (100%).

La Figura 6.11 muestra el volumen que se puede considerar como inactivo dentro del tanque digestor, con una velocidad inferior a 0,02 m/s; éste ocupa el 0,108% del volumen del reactor y contiene el flujo en el que se alcanza la velocidad de estancamiento, siendo el volumen activo del reactor en el punto de funcionamiento nominal, bajo dicho criterio, igual al 99,89% de su volumen total; por ser esta una condición límite se ha analizado otro criterio con intención de dar a conocer con mayor exactitud el comportamiento del flujo y se ha representado, en la Figura 6.12, el volumen de fangos en el interior del reactor con una velocidad inferior a la velocidad media del flujo en el interior del tanque, igual a 0,05 m/s, que abarca el 2,587% del volumen total del reactor.

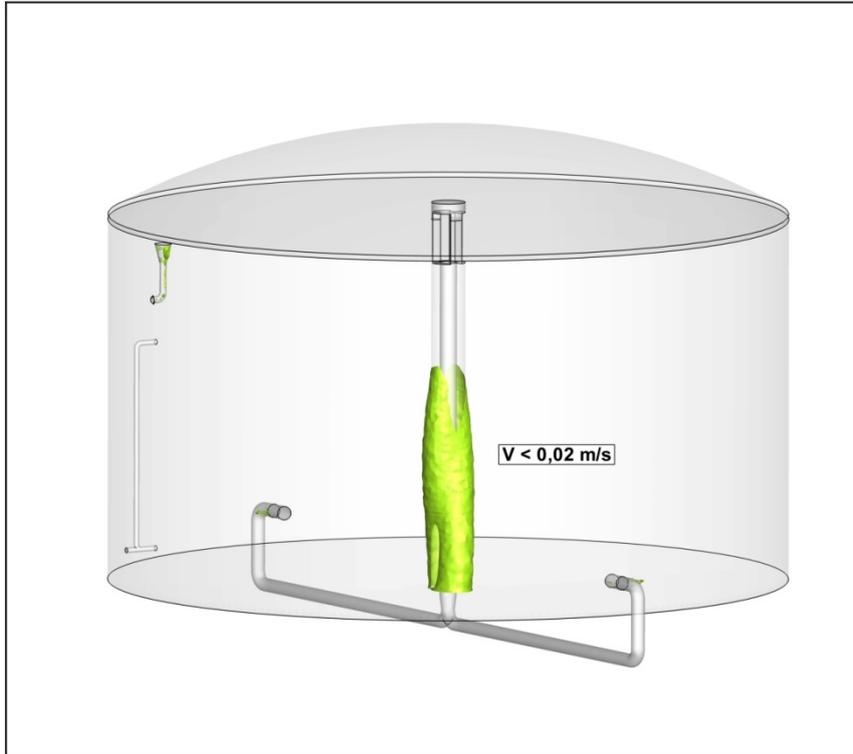


Figura 6.11. Volumen del dominio con velocidad inferior a 0,02 m/s.

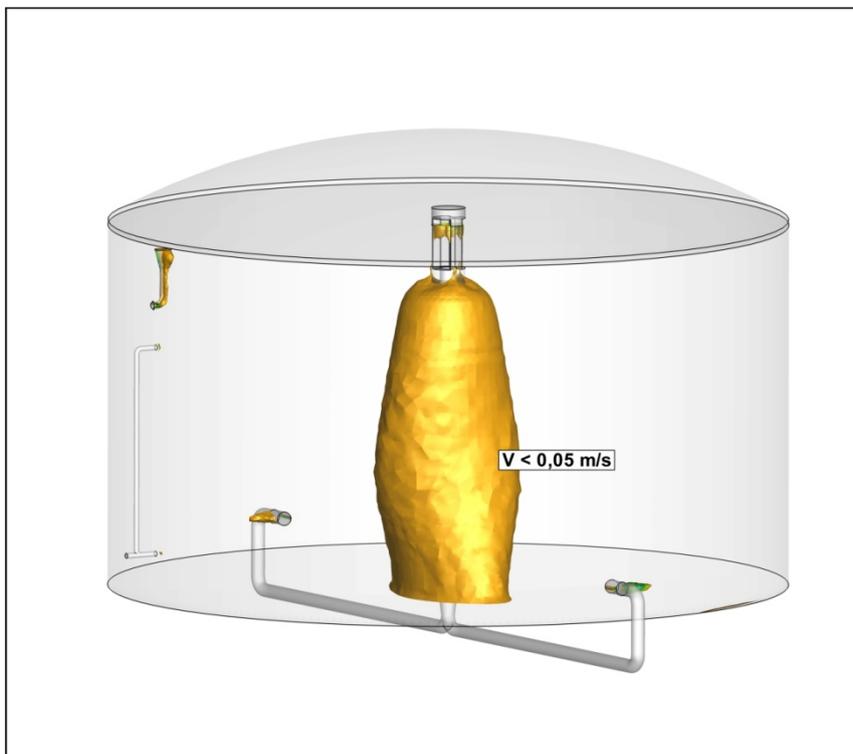


Figura 6.12. Volumen del dominio con velocidad inferior a 0,05 m/s.

6.3. Caminos preferentes

Se ha analizado la posible existencia de caminos preferentes que conduzcan el flujo de entrada directamente a la salida, a pesar de que el estudio de las curvas de distribución de tiempos de residencia advierte de que no existen. Se han observado las trayectorias de las partículas analizadas, como la mostrada en la Figura 6.13, comprobando que todas ellas pasan en alguna ocasión por la recirculación y que la aleatoriedad del flujo termina conduciéndolas a la salida, concluyendo que la modelización numérica realizada reproduce las características de un reactor con un adecuado mezclado del flujo en su interior en el que no se presentan caminos preferentes.

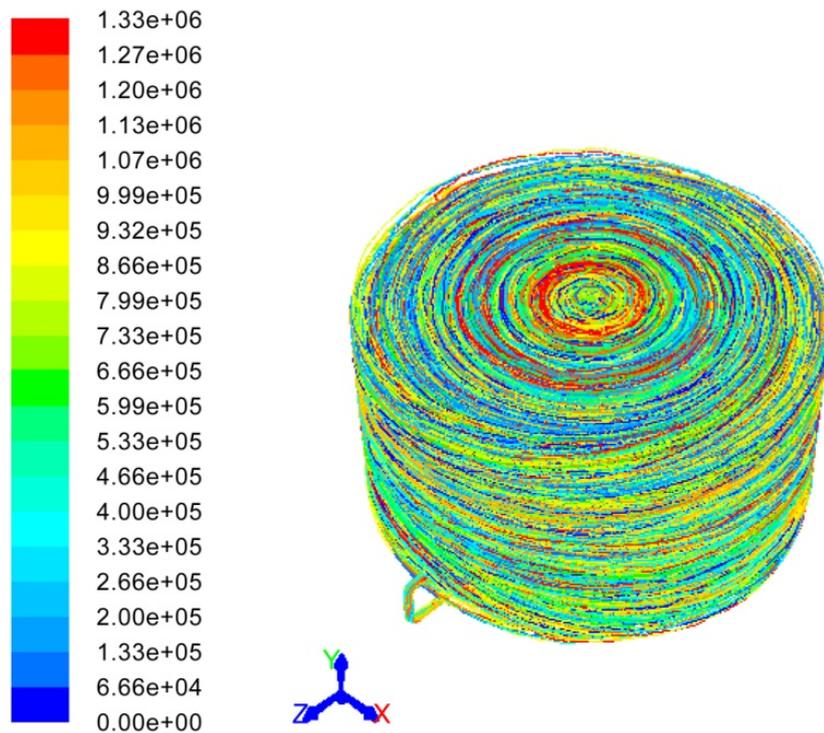


Figura 6.13. Trayectoria de una partícula fluida en el interior del reactor. Leyenda de tiempo de residencia en el dominio en segundos.

7. Análisis del sistema de recirculación

El presente estudio se plantea la optimización energética de un digestor de aguas residuales con un diseño dado, para lo cual se ha desarrollado un modelo numérico, en el apartado anterior se estudió el comportamiento del flujo de fangos en el interior del digestor a través de los resultados obtenidos mediante el cálculo computacional del modelo, determinando que éste es válido y que los resultados obtenidos a través de él pueden permitirnos optimizar el sistema. En este apartado se plantea dicha labor analizando diferentes características del sistema de recirculación, que como ya se indicó supone la mayor parte del consumo energético del sistema de digestión, atendiendo a su potencia, diseño y régimen de funcionamiento.

7.1. Potencia

La potencia del sistema de recirculación determina el campo de velocidades en el interior del reactor y con éste el mezclado del flujo y la calidad del proceso de digestión. Partiendo del valor nominal del caudal de recirculación del modelo experimental de 818 m³/h, se han realizado varios estudios reduciendo la potencia de la bomba de recirculación hasta alcanzar unos caudales correspondientes al 90%, 80%, 60%, 45%, 30% y 15% de dicho caudal nominal. Los resultados obtenidos se comparan a continuación en lo referente a la velocidad media de los fangos en el interior del reactor y a los porcentajes de volumen del dominio clasificados por rangos de velocidades para la determinación del volumen activo del reactor en cada caso.

Descripción del flujo

La velocidad del fluido en el interior del tanque digestor evoluciona en función del caudal de recirculación con una tendencia lineal, como se muestra en la Figura 7.1, cuyos valores se recogen en la Tabla 7.1.

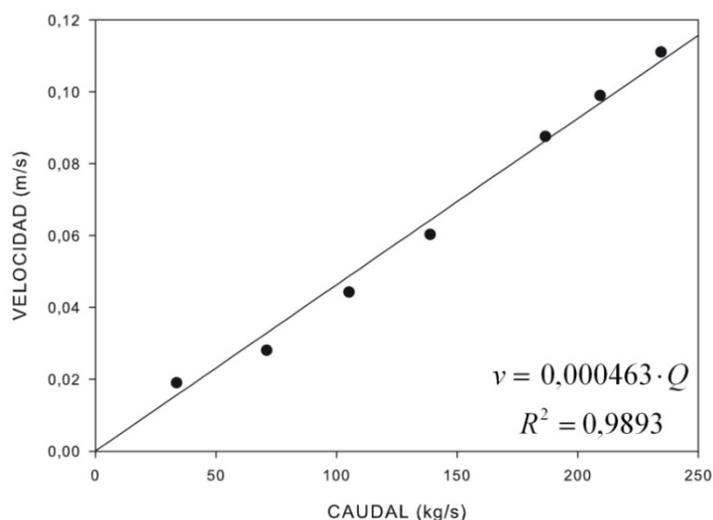


Figura 7.1. Velocidad media de los fangos en función del caudal de recirculación.

	VELOCIDAD m/s
Q 100% - 234,5 Kg/s	0.1110
Q 90% - 209,3 Kg/s	0.0990
Q 80% - 186,6 Kg/s	0.0876
Q 60% - 139,9 Kg/s	0.0603
Q 45% - 105,8 Kg/s	0.0442
Q 30% - 70,55 Kg/s	0.0281
Q 15% - 35,28 Kg/s	0.0190

Tabla 7.1. Velocidad media de flujo de fangos en función del caudal de recirculación.

En las Figuras 7.2, 7.3 y 7.4 se muestra la evolución del módulo y las componentes de velocidad, así como la intensidad de turbulencia del flujo a diferentes alturas en el interior del tanque digestor para los casos con un caudal de recirculación igual al 100%, 90%, 80% y 60% del valor nominal; se comprueba que la caracterización del flujo evoluciona de forma proporcional a la magnitud del caudal de recirculación.

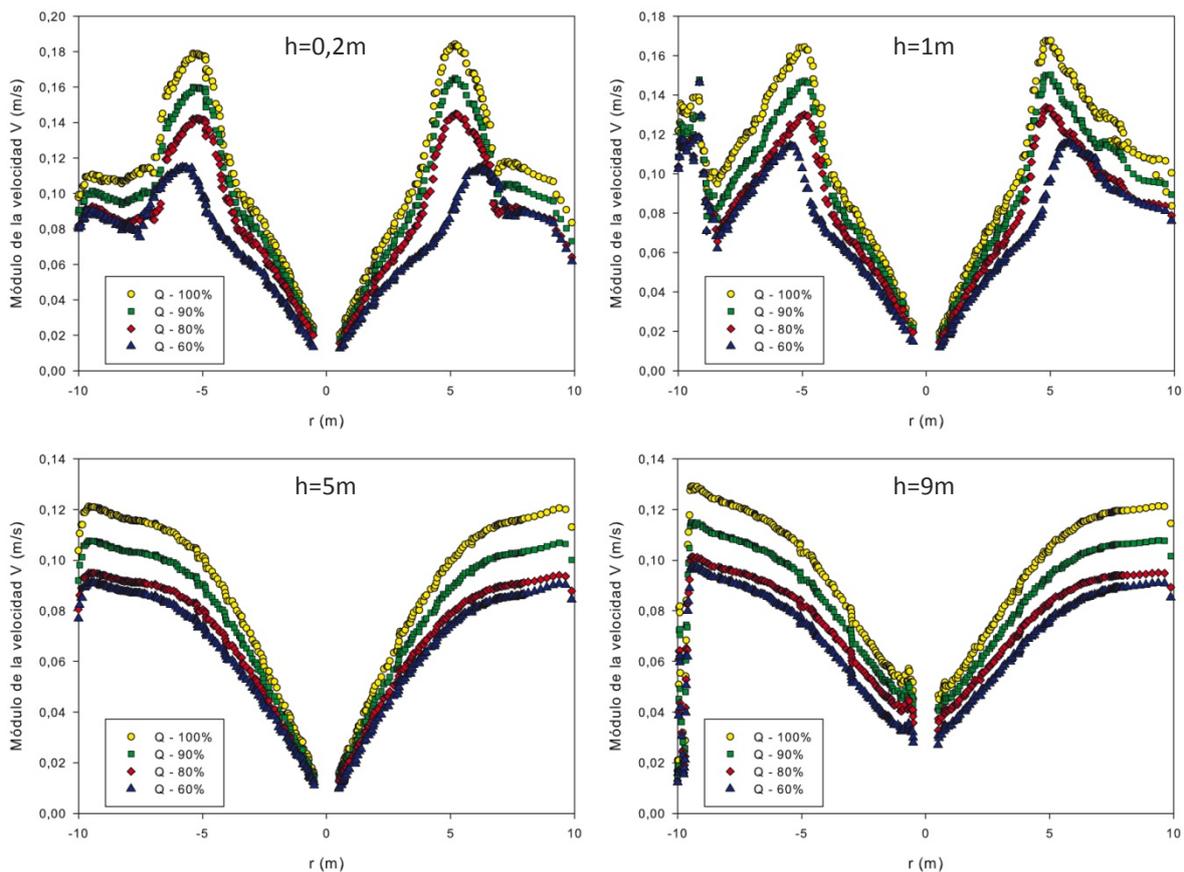


Figura 7.2. Módulo de la velocidad a diferentes alturas para la sección XZ, para los diferentes caudales de recirculación estudiados.

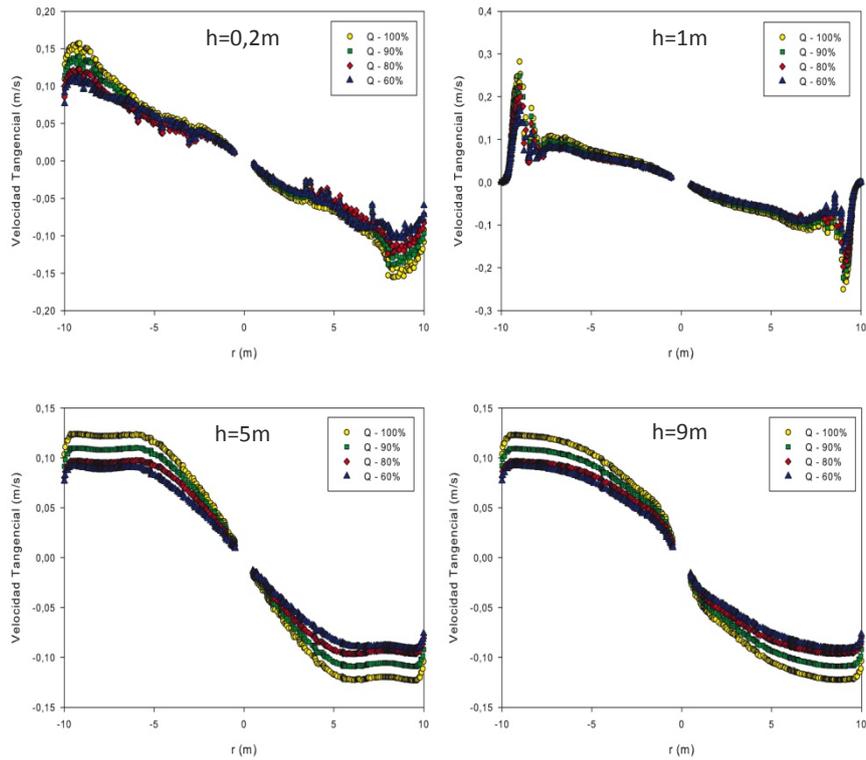


Figura 7.3. Componente acimutal de la velocidad a diferentes alturas para la sección XZ, para los diferentes caudales de recirculación estudiados.

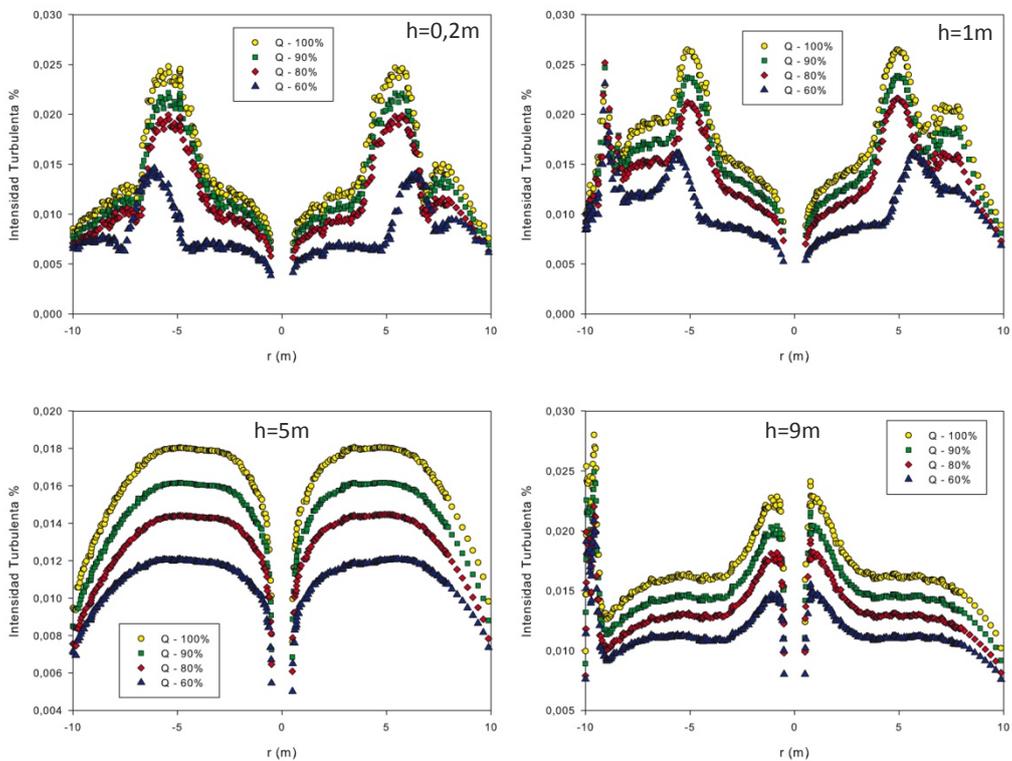


Figura 7.4. Intensidad Turbulenta a diferentes alturas para la sección XZ, para los diferentes caudales de recirculación estudiados.

7.2. Volumen activo

La evolución de velocidad del flujo en función del caudal de recirculación se ve reflejada en los porcentajes de volúmenes asociados a rangos de velocidades, mostrados en la Figura 7.5 para cada uno de los casos estudiados, y a su vez en el valor del volumen activo del digestor.

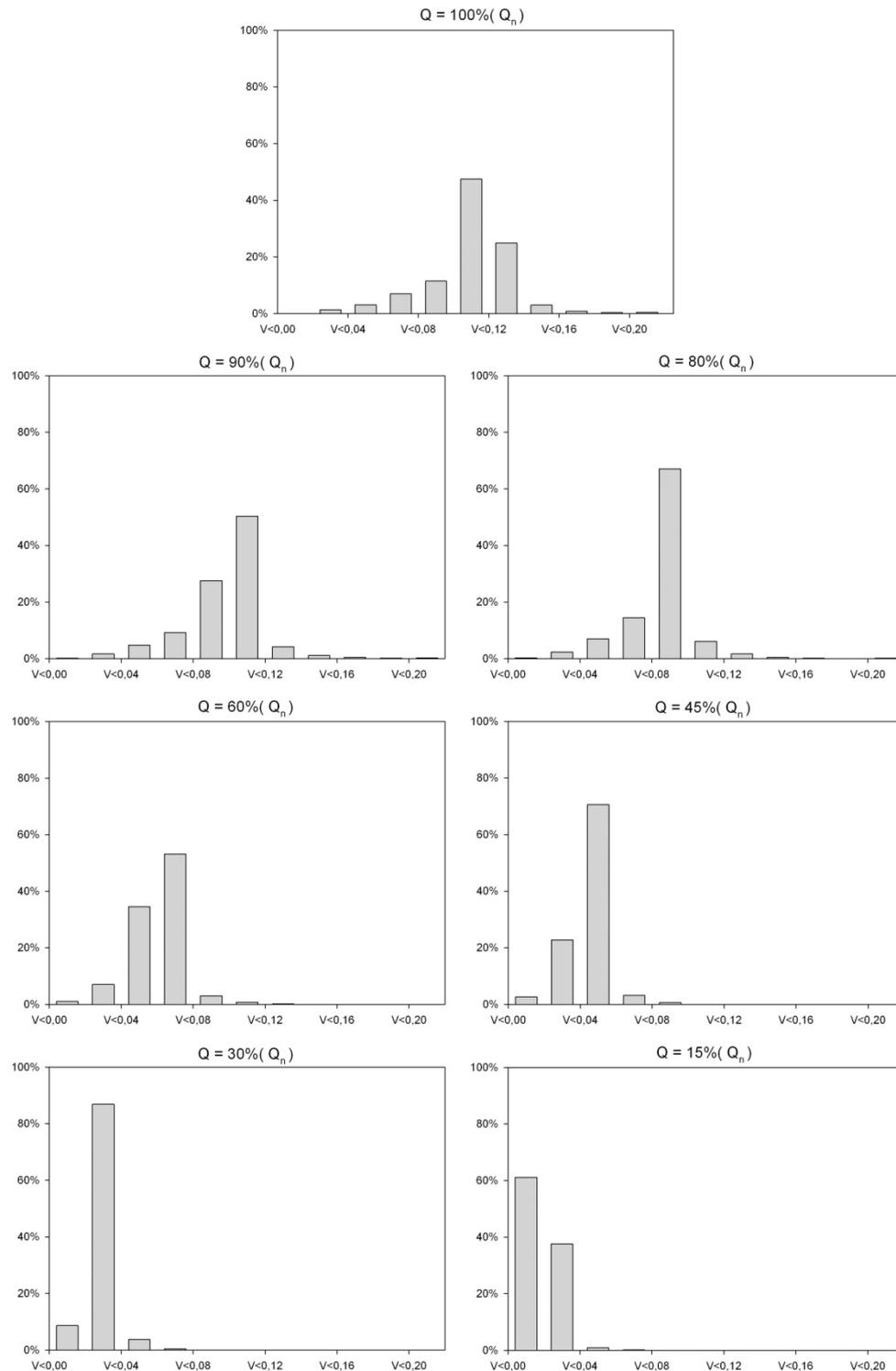


Figura 7.5. Porcentajes de volumen asociados a rangos de velocidades.

El volumen inactivo del digestor comprende el volumen que puede ser considerado estancado y en el cual el mezclado es nulo o de baja calidad, ya que la velocidad de los fangos que contiene es inferior a la velocidad límite de estancamiento, igual al 5% de la velocidad máxima en el volumen considerado (Vesvikar y Al Dahhan [9]); en el presente estudio se considera el volumen inactivo del digestor como aquel en el que el flujo de fangos tiene una velocidad igual o inferior a 0,02 m/s, y por consiguiente, el volumen activo comprende el volumen en el que los fangos tienen una velocidad superior a 0,02 m/s. Al analizar la evolución de los volúmenes asociados a rangos de velocidades en función de la potencia del sistema de agitación se determina que el volumen inactivo del digestor aumenta conforme disminuye el caudal de recirculación, disminuyendo el volumen activo. En la Tabla 7.2 se muestran los valores del volumen inactivo del digestor y del volumen con una velocidad superior a 0,05 m/s.

	VOLUMEN ACTIVO %	VOLUMEN $v > 0.05$ m/s %
Q 100% - 234,5 Kg/s	99.89 %	97.41 %
Q 90% - 209,3 Kg/s	99.82 %	96.39 %
Q 80% - 186,6 Kg/s	99.70 %	94.76 %
Q 60% - 139,9 Kg/s	98.95 %	73.40 %
Q 45% - 105,8 Kg/s	97.42 %	9.58 %
Q 30% - 70,55 Kg/s	91.36 %	1.61 %
Q 15% - 35,28 Kg/s	38.84 %	0.56 %

Tabla 7.2. Volumen activo y volumen con una velocidad superior a 0,05 m/s (se indica el porcentaje respecto del volumen total del reactor).

El volumen inactivo y el volumen que comprende un flujo de velocidad inferior a 0,05 m/s dentro del tanque de digestión se muestran en las Figuras 7.6 y 7.7 para cada uno de los casos estudiados; se observa que para los casos con una potencia próxima a la nominal (100%, 90% y 80%) dichos volúmenes se encuentran concentrados alrededor de la tubería de aspiración del sistema de recirculación, instalada en el centro del tanque digestor, sin embargo, conforme decae el caudal de recirculación la velocidad de los fangos va disminuyendo, aproximándose a el valor límite de estancamiento, en el caso del volumen inactivo este efecto se hace notable a partir de un caudal de recirculación inferior al 45% del nominal y cuando el caudal es igual al 15% el volumen inactivo alcanza al 61,16% del volumen del tanque, en el estudio del volumen con una velocidad inferior a 0,05 m/s es a partir de un caudal de recirculación igual al 60% cuando dicho volumen comienza a extenderse por el resto del digestor hasta alcanzar el 99,44% del volumen del tanque para el caso en el que se considera un caudal de recirculación igual al 15% del valor nominal.

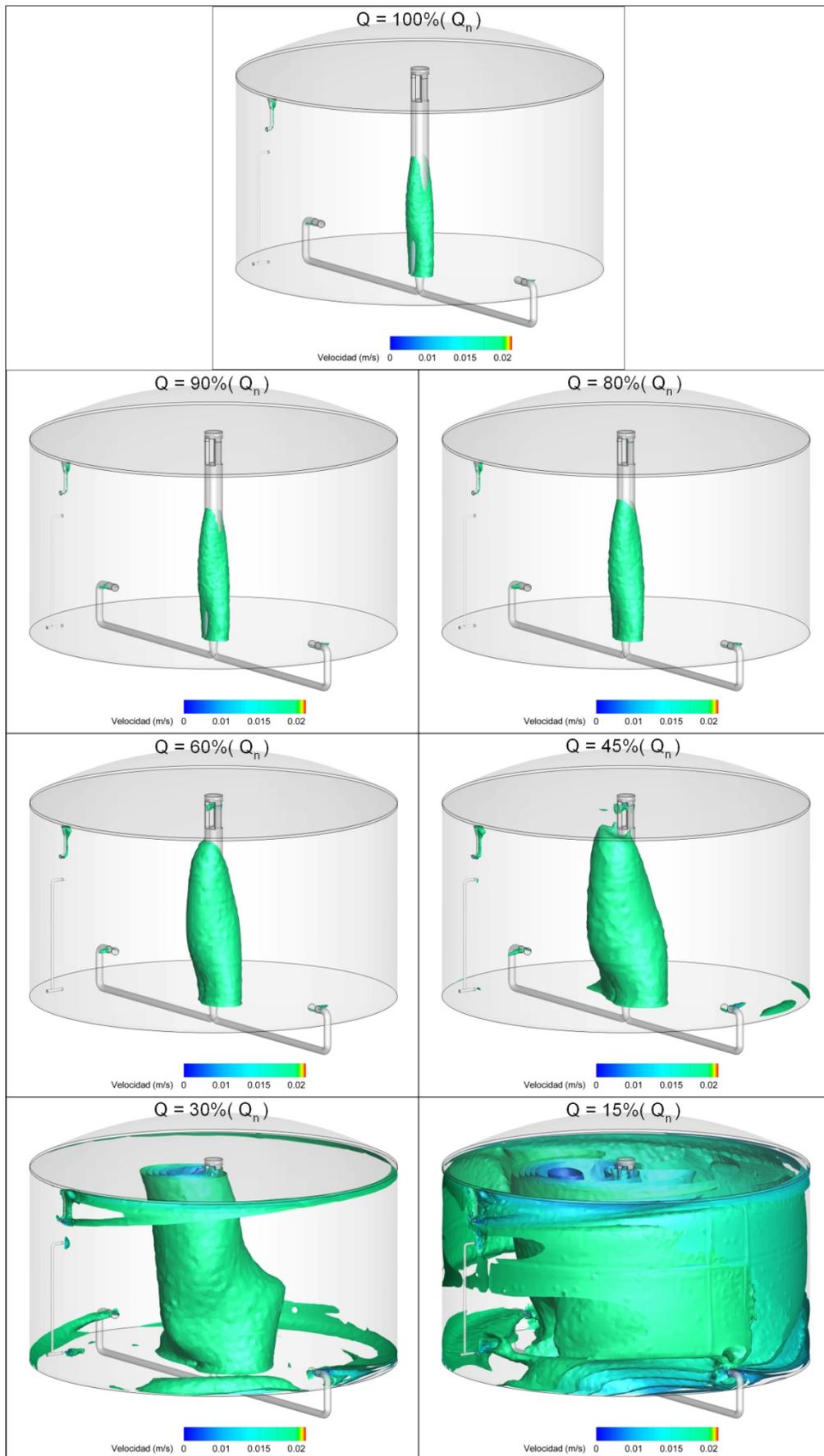


Figura 7.6. Volumen del dominio con velocidad inferior a 0,02 m/s.

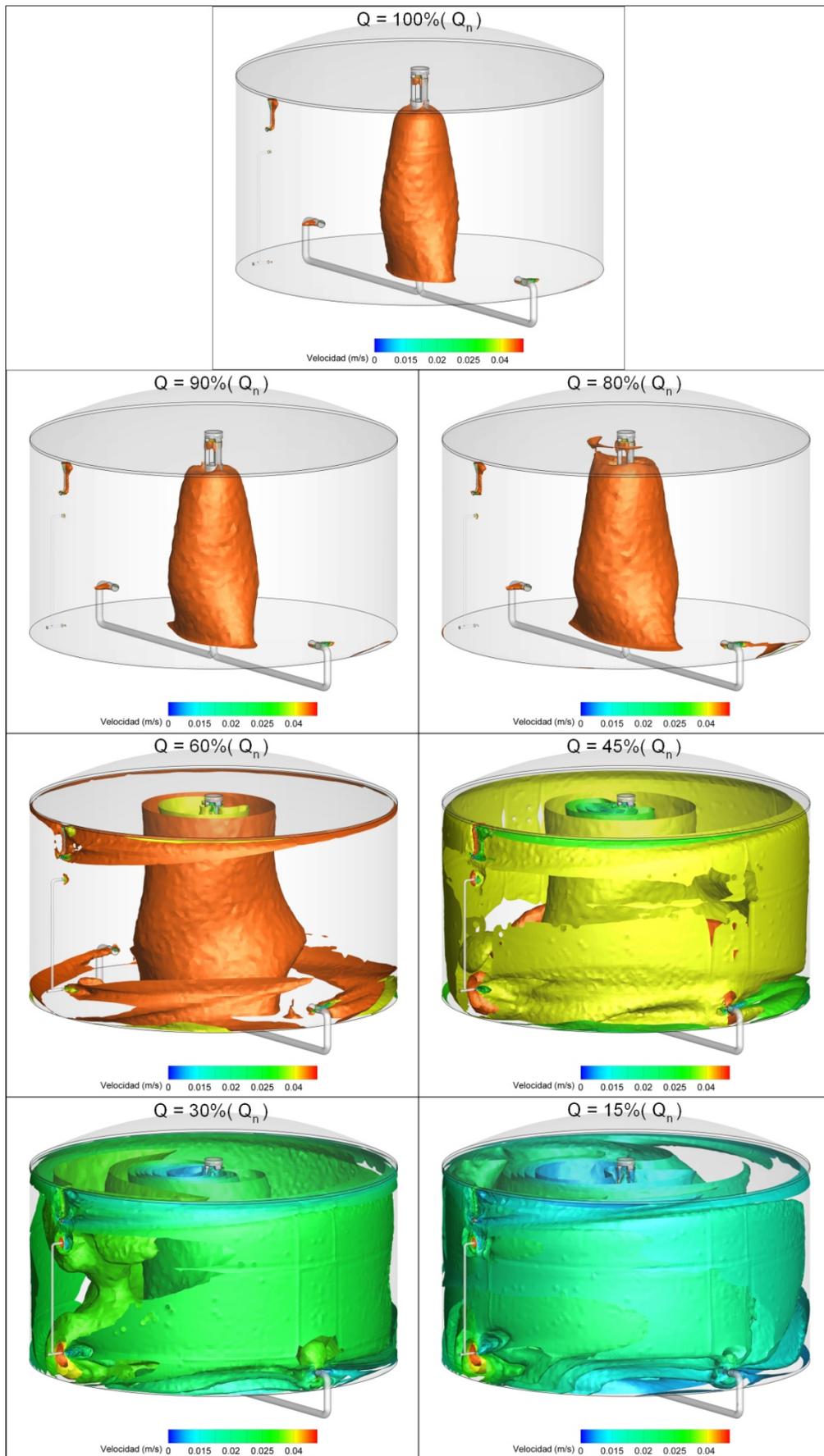


Figura 7.7. Volumen del dominio con velocidad inferior a 0,05 m/s.

La evolución del volumen activo y del volumen con una velocidad superior a 0,05 m/s describen una curva logística, como se muestra en las Figuras 7.8 y 7.9. Las funciones logísticas modelizan el crecimiento de un conjunto respecto a una variable cuando dicho crecimiento, inicialmente exponencial, alcanza un punto en el que se ve limitado por un determinado factor, de modo que la tasa de crecimiento va disminuyendo hasta detenerse; por tanto la evolución del volumen asociado a un determinado rango de velocidades en función de la potencia del sistema de agitación debe mostrar de manera natural una tendencia logística, ya que el crecimiento en función del caudal de recirculación del conjunto de volúmenes con dicho rango de velocidad dentro del digestor se encuentra limitado por el propio volumen del digestor, ya que cuando todo el volumen del tanque se encuentra a una velocidad superior al valor seleccionado el crecimiento del conjunto cesa.

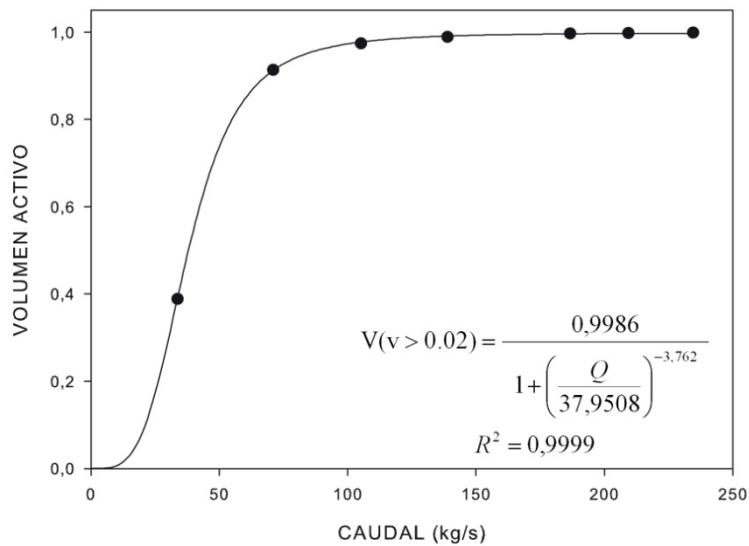


Figura 7.8. Volumen activo del reactor en función del caudal de recirculación.

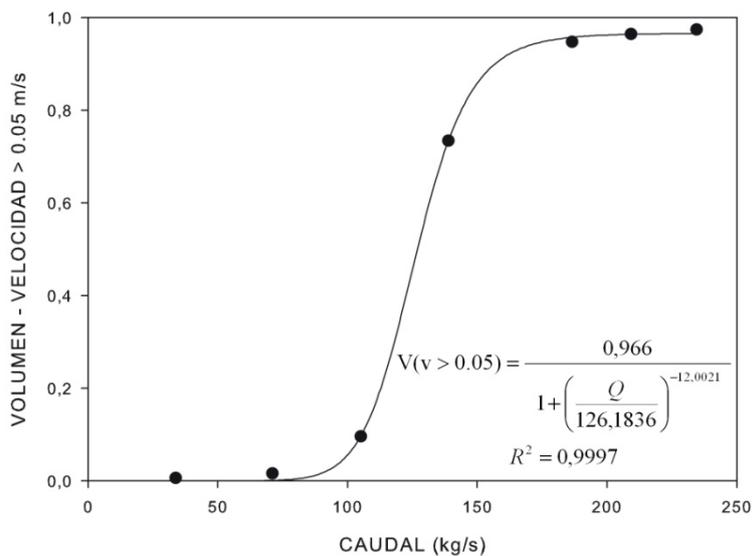


Figura 7.9. Volumen con una velocidad superior a 0,05 m/s en función del caudal de recirculación.

7.3. Diseño del sistema de recirculación

La optimización del diseño sin variar significativamente el modelo experimental base de estudio no permite una amplia maniobrabilidad; sin embargo, para el caso que nos ocupa se ha establecido la posibilidad de desviar todo el caudal de recirculación por una sola tubería hacia el interior del digester y estudiar las variaciones relacionadas con el comportamiento del flujo de fangos, de las dos posibles tuberías de impulsión del sistema de recirculación se ha seleccionado aquella que impulsa el flujo en dirección contraria a la tubería de salida del tanque digester; por lo tanto se plantea un nuevo volumen de control en el que, como se aprecia en la Figura 7.10, solo se presenta una única recirculación.



Figura 7.10. Diseño alternativo del tanque digester con una recirculación.

Dicho modelo ha sido estudiado bajo dos condiciones de caudal de recirculación, una igual al caudal nominal del modelo experimental, 234,5 kg/s, y otra igual al 65% de este valor, 151,96 kg/s, y sus resultados han sido comparados con los obtenidos por el modelo con dos recirculaciones.

Descripción del flujo

La velocidad media del flujo en el interior del reactor para los casos estudiados con una recirculación se muestra en la Tabla 7.3.

	VELOCIDAD m/s
Q 100% - 234,5 kg/s	0.1318
Q 65% - 151,96 kg/s	0.1053

Tabla 7.3. Velocidad media del flujo en función del caudal de recirculación, para la alternativa con una sola recirculación.

Los perfiles de velocidad, así como su componente tangencial y los de intensidad de turbulencia, estudiados a diferentes alturas en el interior del tanque digestor para los dos casos de caudal de recirculación, mostrados en las Figuras 7.11 a 7.16, ponen de manifiesto la fuerte asimetría que se desarrolla en el flujo debido a la existencia de una sola recirculación, así como que su magnitud es proporcional, al igual que ocurría en el caso de dos recirculaciones, a la magnitud del caudal de recirculación.

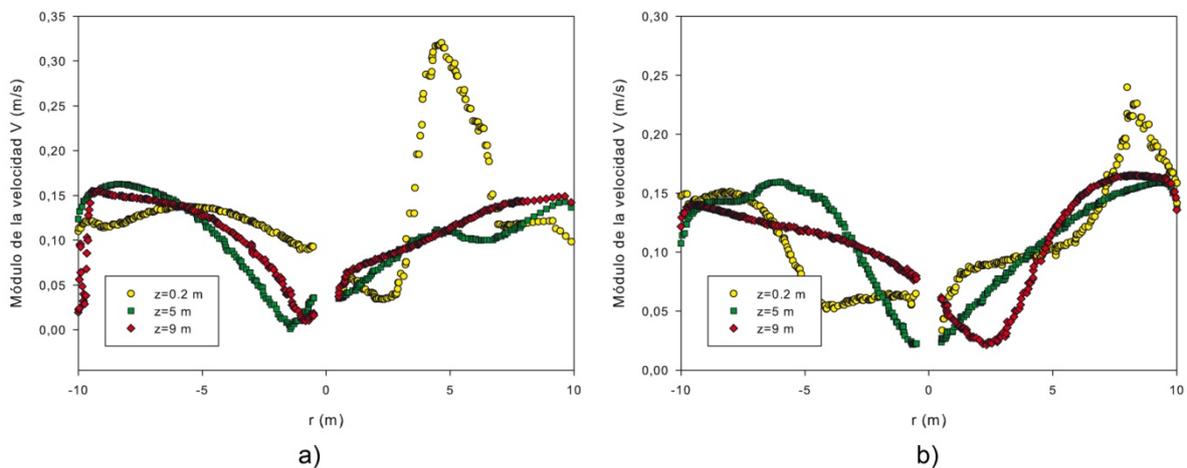


Figura 7.11. Módulo de velocidad a diferentes alturas para un caudal de recirculación igual al 100% del nominal, para la alternativa con una sola recirculación. a) Para el plano XZ de la Fig. 6.1. b) Para el plano YZ de la Fig. 6.1.

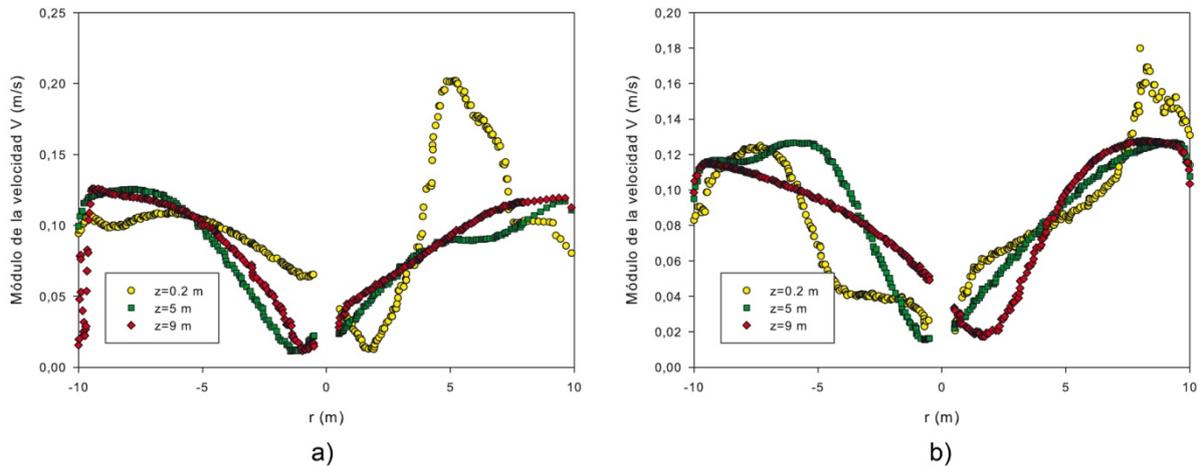


Figura 7.12. Módulo de velocidad a diferentes alturas para un caudal de recirculación igual al 65% del nominal, para la alternativa con una sola recirculación. a) Para el plano XZ de la Fig. 6.1. b) Para el plano YZ de la Fig. 6.1.

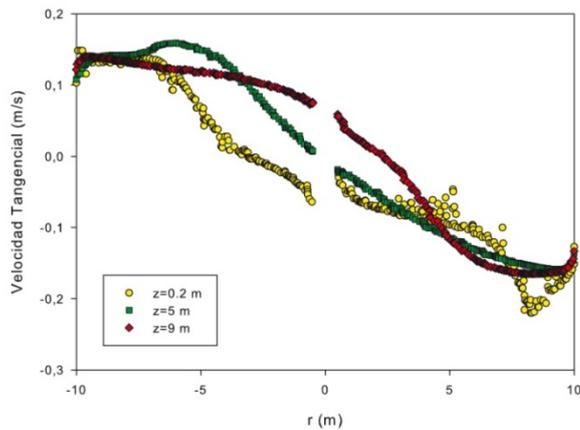


Figura 7.13. Componente tangencial de a velocidad a diferentes alturas para un caudal de recirculación igual al 100% del nominal, para la alternativa con una sola recirculación en la sección YZ.

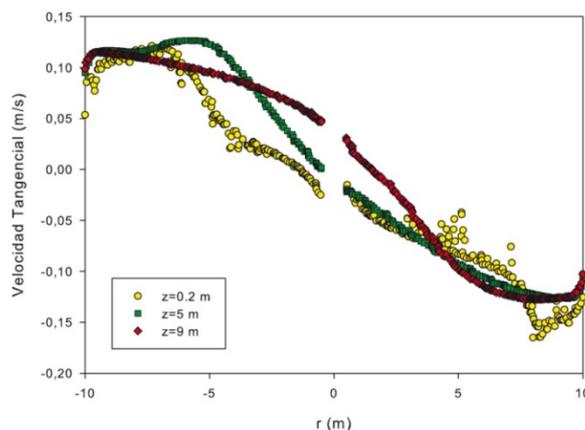


Figura 7.14. Componente tangencial de a velocidad a diferentes alturas para un caudal de recirculación igual al 65% del nominal, para la alternativa con una sola recirculación en la sección YZ.

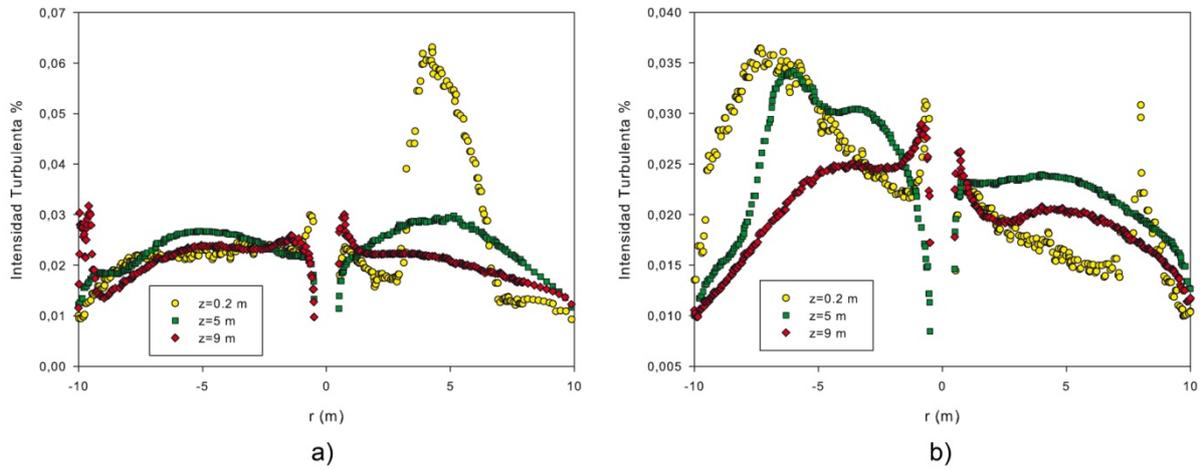


Figura 7.15. Intensidad turbulenta a diferentes alturas para un caudal de recirculación igual al 100% del nominal, para la alternativa con una sola recirculación. a) Para el plano XZ de la Fig. 6.1. b) Para el plano YZ de la Fig. 6.1.

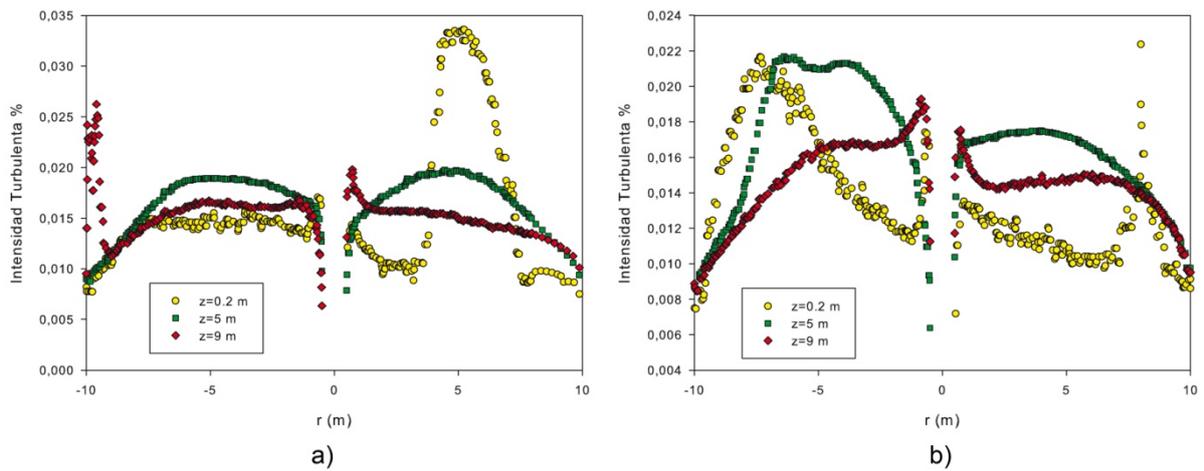


Figura 7.16. Intensidad turbulenta a diferentes alturas para un caudal de recirculación igual al 65% del nominal, para la alternativa con una sola recirculación. a) Para el plano XZ de la Fig. 6.1. b) Para el plano YZ de la Fig. 6.1.

Volumen Activo

Los porcentajes de volúmenes asociados a rangos de velocidades para el diseño con una sola recirculación se muestran en la Figura 7.17.

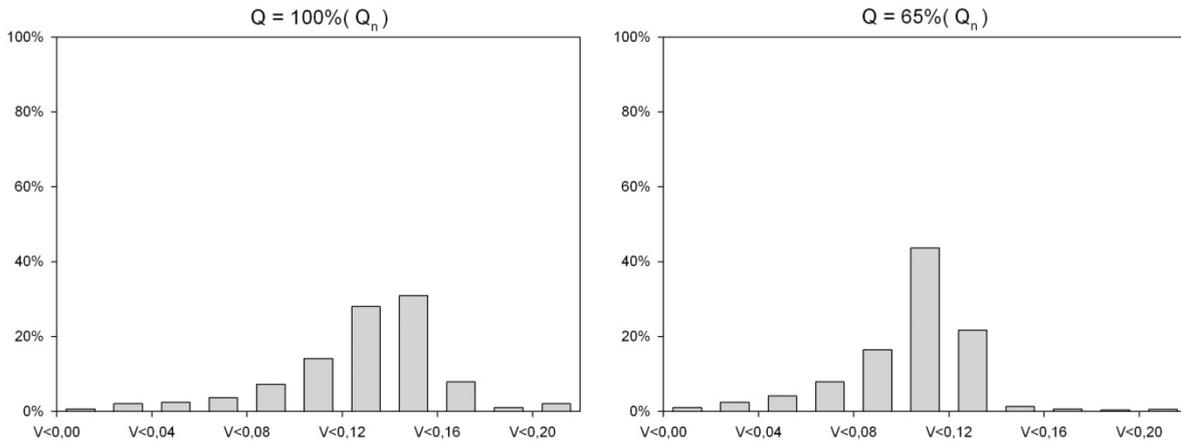


Figura 7.17. Porcentajes de volumen asociados a rangos de velocidades, para la alternativa con una sola recirculación.

Los valores del volumen activo y del volumen de fangos cuya velocidad es superior al 0,05 m/s se recogen en la Tabla 7.4, su valor resulta de la sustracción del volumen inactivo o del volumen de fangos con una velocidad inferior a 0,05 m/s, mostrados en las Figuras 7.18 y 7.19, al volumen del tanque digestor.

	VOLUMEN ACTIVO %	VOLUMEN $v > 0.05$ m/s %
Q 100% - 234,5 kg/s	99.35%	94.87%
Q 65% - 151,96 kg/s	98.94%	92.34%

Tabla 7.4. Volumen activo y volumen con una velocidad superior a 0,05 m/s, se exponen en porcentajes respecto del volumen total del reactor, para la alternativa con una sola recirculación.

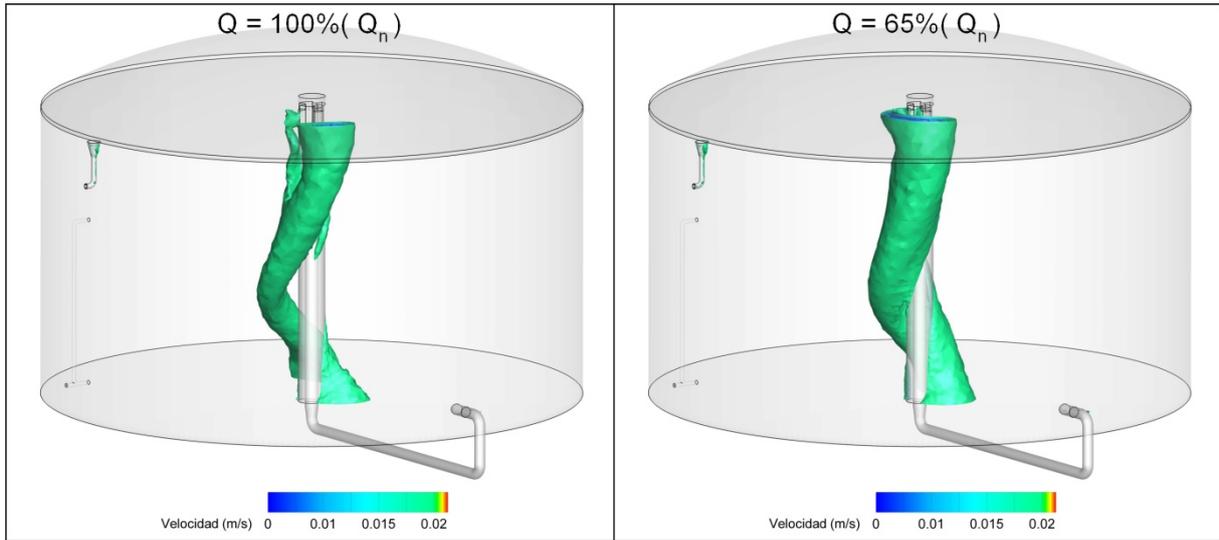


Figura 7.18. Volumen del dominio con velocidad inferior a 0,02 m/s, para la alternativa con una sola recirculación.

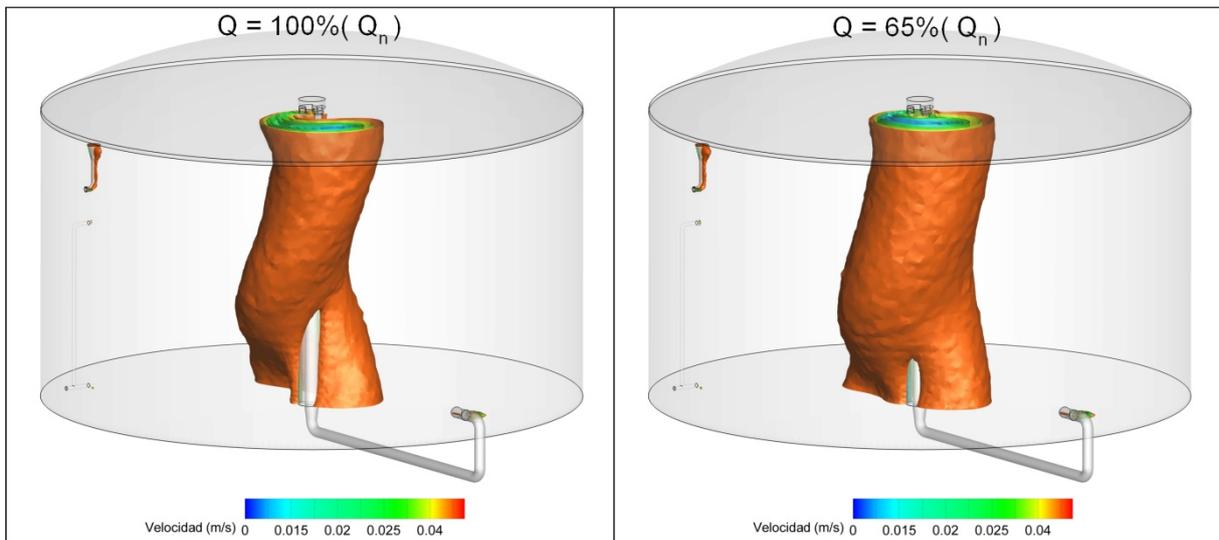


Figura 7.19. Volumen del dominio con velocidad inferior a 0,05 m/s, para la alternativa con una sola recirculación.

Análisis comparativo entre los diseños con una y dos recirculaciones

Los resultados obtenidos del estudio de ambos diseños muestran que la velocidad del flujo obtenida por el diseño con una sola recirculación es superior a la del de dos recirculaciones, con se observa en la Figura 7.20.

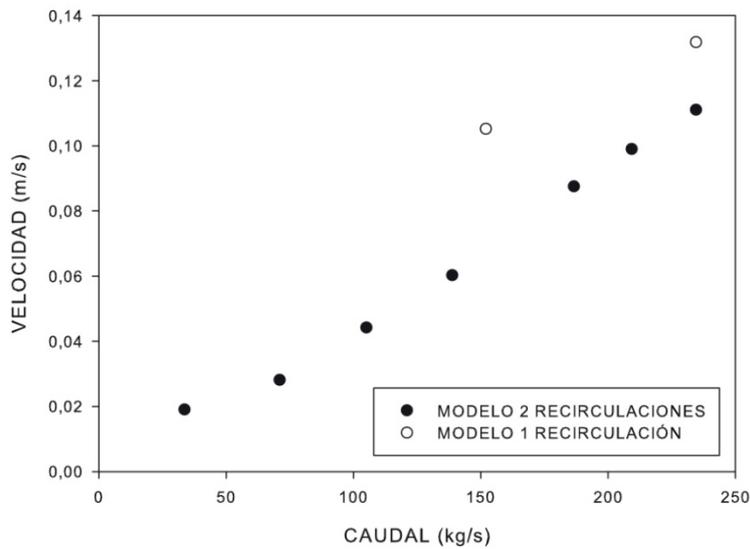


Figura 7.20. Comparación de la velocidad del flujo en el interior del digester entre los diseños de dos y una recirculaciones.

El sistema con una sola recirculación consigue una mayor velocidad en los fangos para un mismo caudal de recirculación; sin embargo para conseguir este caudal desviando el flujo por una sola recirculación es necesario aumentar la potencia de la bomba, como se muestra en la Figura 7.21, ya que se trasiega el mismo caudal por un solo conducto, aumentando la velocidad y provocando un aumento de las pérdidas según la conocida Ecuación de Darcy para la pérdida de carga:

$$\Delta p = \rho \cdot g \cdot \Delta H = \rho \cdot Q^2 \cdot \frac{8 \cdot \lambda \cdot L}{\pi^2 \cdot D^5}$$

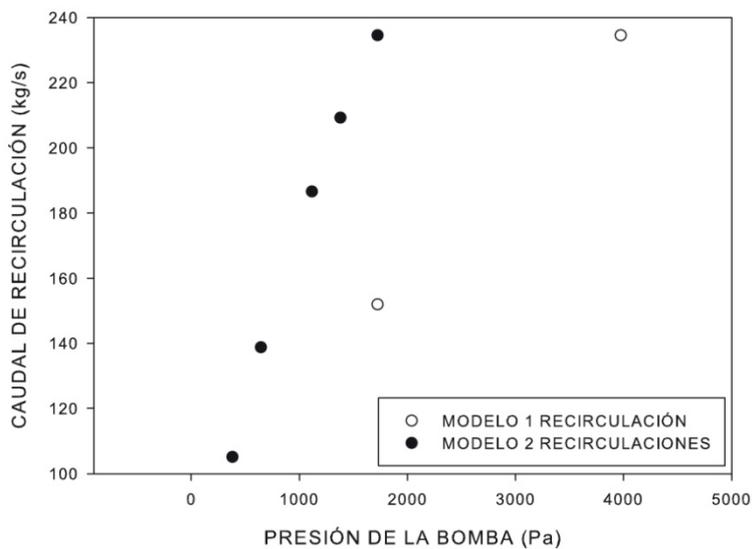


Figura 7.21. Caudal de recirculación en función del salto de presión introducido por la bomba de recirculación.

El diseño de una sola recirculación, además de precisar una mayor potencia y por lo tanto ser energéticamente deficiente en comparación con el de dos recirculaciones, obtiene un volumen activo y un volumen de velocidad superior a 0,05 m/s inferiores a los obtenidos por el diseño con dos recirculaciones. Esto resultados se muestran en las Figuras 7.22 a 7.25.

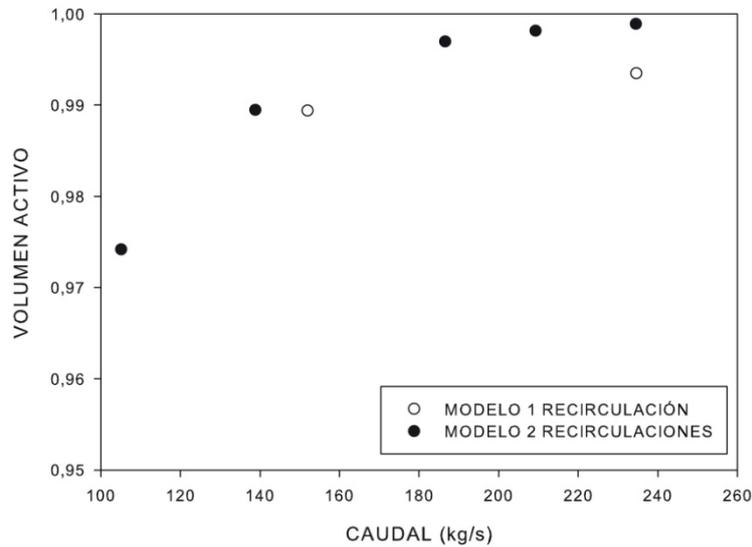


Figura 7.22. Comparación del volumen activo del digester entre los diseños de dos y una recirculaciones, en función del caudal de recirculación.

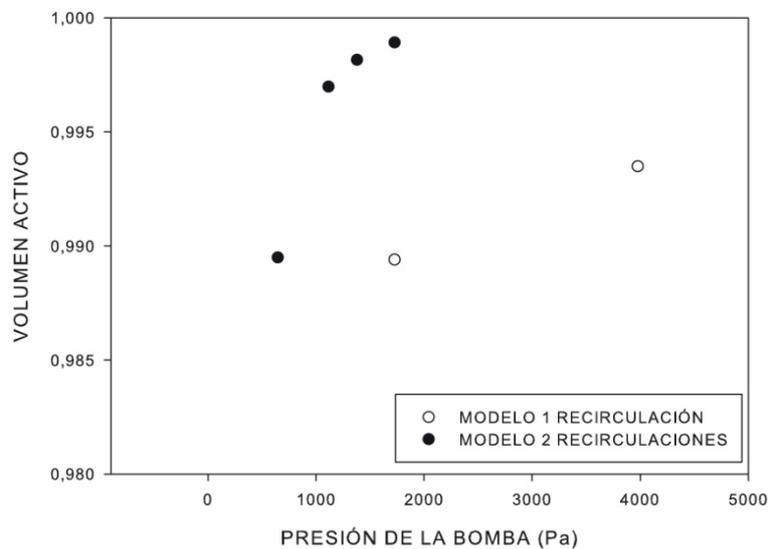


Figura 7.23. Comparación del volumen activo del digester entre los diseños de dos y una recirculaciones, en función de la potencia de la bomba de recirculación.

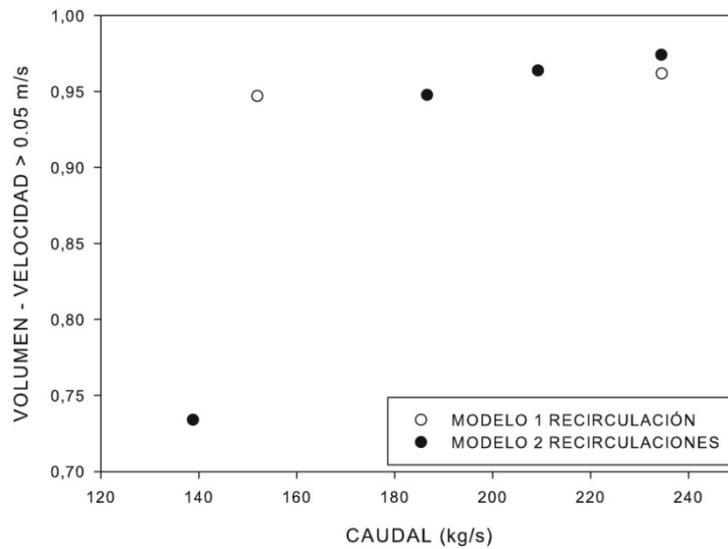


Figura 7.24. Comparación del porcentaje de volumen con una velocidad de flujo superior a 0,05 m/s del digester entre los diseños de dos y una recirculaciones, en función del caudal de recirculación.

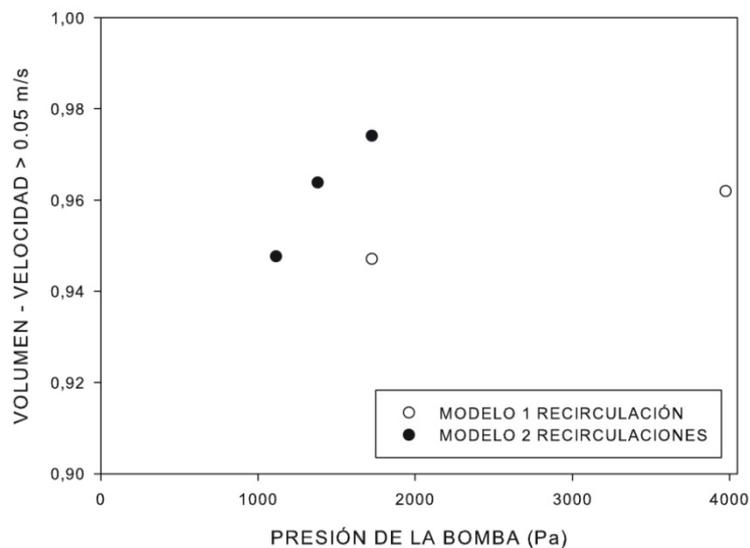


Figura 7.25. Comparación del porcentaje de volumen con una velocidad de flujo superior a 0,05 m/s del digester entre los diseños de dos y una recirculaciones, en función de la potencia de la bomba de recirculación.

El diseño de digester con una sola recirculación obtiene, para una misma potencia de la bomba de recirculación, una velocidad media de los fangos y un volumen activo del reactor, inferiores al caso de emplear esa potencia en el diseño de dos recirculaciones, por lo que este diseño no mejora la eficiencia energética.

8. Régimen de funcionamiento

En un reactor de mezcla continua el sistema de agitación se encuentra activo a lo largo de todo el proceso de digestión, con un régimen de funcionamiento de 24 horas los 365 días del año. En el diseño estudiado, el sistema de agitación es llevado a cabo mediante una recirculación hidráulica de los fangos en el interior del digestor, cuyo caudal es mucho mayor al caudal de entrada de fangos, por lo tanto este es el sistema con un mayor requerimiento energético de todo el proceso de digestión. El análisis transitorio del flujo fluido en el interior del digestor ofrece información acerca de cómo evolucionan los parámetros del flujo que determinan la calidad del proceso de digestión una vez detenida la bomba de recirculación, con lo cual se puede analizar la posibilidad de establecer un régimen intermitente de funcionamiento.

8.1. Análisis teórico previo

Una vez detenidas la bomba de recirculación, la única fuerza que se opone a la inercia de la masa fluida en el interior del reactor es la fricción con las paredes. A través del estudio de órdenes de magnitud del término inercial y del término de fricción en la ecuación del momento cinético es posible estimar el orden de magnitud del tiempo característico de parada. Así:

$$\frac{\partial}{\partial t}(I\omega) \sim R \cdot \tau \cdot A_l \quad \longleftrightarrow \quad \frac{I\omega}{t_c} \sim R \cdot \tau \cdot A_l$$

Realizando los cálculos aplicados al reactor se comprueba que

$$I \sim 10^8 \text{ kg}\cdot\text{m}^2$$

$$\omega \sim 10^{-2} \text{ rad/s}$$

$$\tau \sim 10^{-2} \text{ Pa}$$

$$A_l \sim 10^3 \text{ m}^2$$

Por lo que

$$t_c \sim \frac{I\omega}{R \cdot \tau \cdot A_l} \sim \frac{10^6}{10^2} \sim 10^4 \text{ s}$$

Lo que pone de manifiesto que el tiempo característico en el que la masa fluida alcanza el reposo es del orden de horas.

8.2 Régimen de parada

Tras detener la bomba de recirculación la inercia de los fangos va decayendo y con ella lo hace la velocidad media; dicha evolución se muestra en la Figura 8.1. Tras 10 horas de la desconexión de la bomba de recirculación todo el volumen del reactor se puede considerar inactivo ya que la velocidad es igual al valor límite de estancamiento.

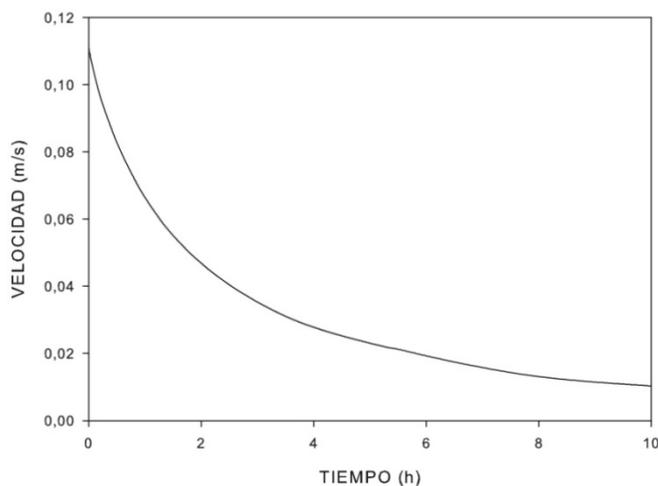


Figura 8.1. Evolución de la velocidad media del flujo con el tiempo tras la parada de la bomba de recirculación.

En la Figura 8.2 se muestra la evolución del volumen activo del tanque tras la parada del reactor; el análisis de esta gráfica puede permitir determinar un régimen intermitente en el que se reactive la bomba de recirculación una vez superado el margen de volumen activo dentro del cual se desee trabajar. La Figura 8.3 muestra dicha evolución para el volumen de fangos en el interior del digester con una velocidad superior a 0,05 m/s.

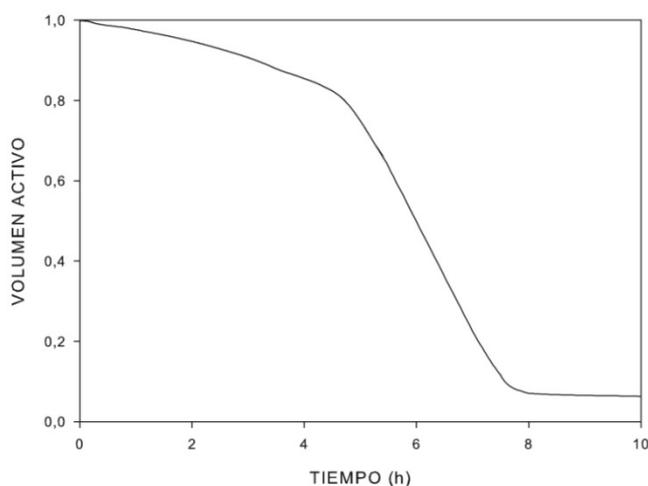


Figura 8.2. Evolución del volumen activo del reactor con el tiempo tras la parada de la bomba de recirculación.

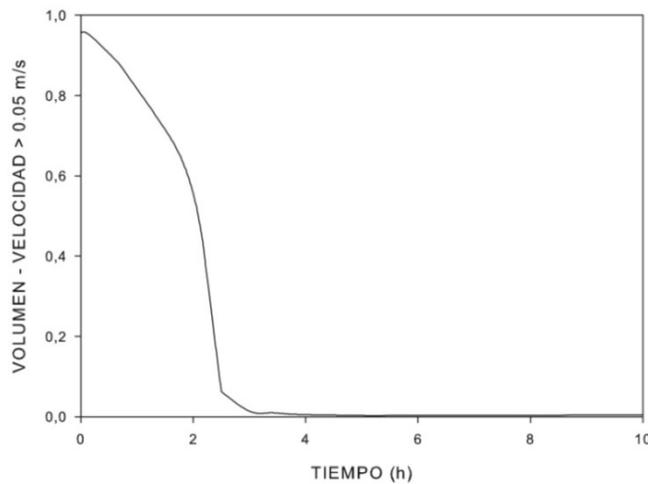


Figura 8.3. Evolución del volumen con velocidad superior a 0,05 m/s del reactor con el tiempo tras la parada de la bomba de recirculación.

8.3. Régimen de re-arranque

El estudio transitorio del re-arranque de la bomba de recirculación nos permite conocer el tiempo necesario para que los fangos vuelvan a alcanzar la velocidad correspondiente al caudal nominal. En la Figura 8.4 se muestra la evolución de la velocidad media de los fangos tras el re-arranque partiendo del caso en el que la bomba ha permanecido parada hasta que la velocidad media del flujo en el interior del digestor es igual a la velocidad límite de estancamiento. En las Figuras 8.5 y 8.6 se muestran la evolución del volumen activo y del volumen asociado a una velocidad superior a 0,05 m/s de dicho proceso.

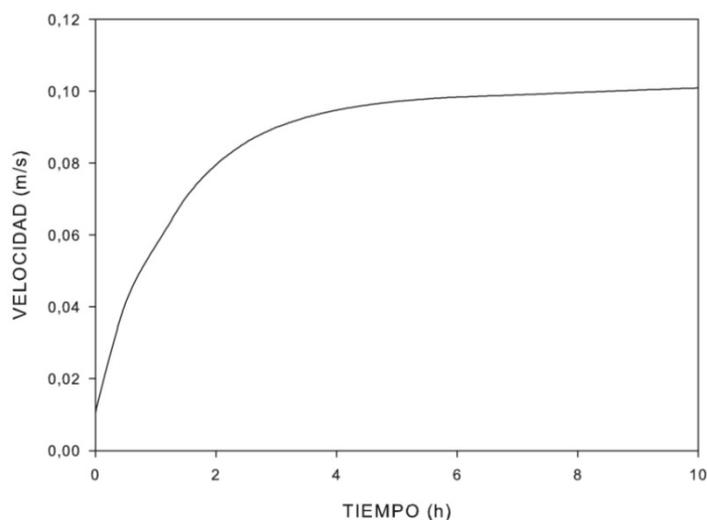


Figura 8.4. Evolución de la velocidad media del flujo con el tiempo tras el arranque de la bomba de recirculación.

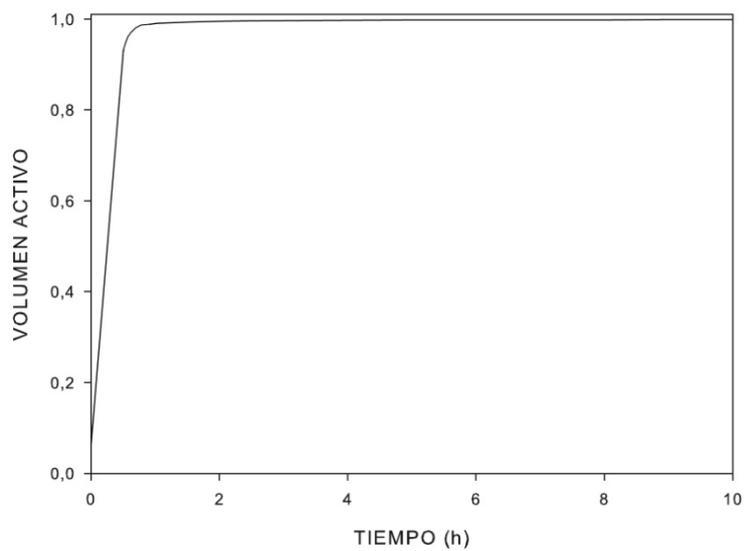


Figura 8.5. Evolución del volumen activo del reactor con el tiempo tras el arranque de la bomba de recirculación.

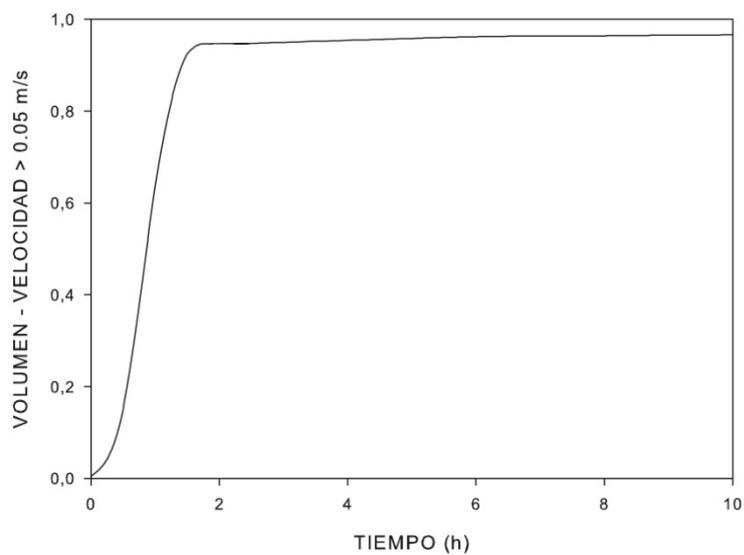


Figura 8.6. Evolución del volumen con velocidad superior a 0,05 m/s del reactor con el tiempo tras el arranque de la bomba de recirculación.

8.4. Régimen de funcionamiento alternativo

Para establecer un régimen de funcionamiento intermitente se deberá determinar el rango del porcentaje de volumen activo dentro del cual se desee permanecer durante el proceso de digestión y en el que se considere que el proceso se efectúa con una calidad adecuada. A modo de ejemplo, se ha calculado un régimen de funcionamiento que alterna la actividad/inactividad del sistema de recirculación cada dos horas y en el que el volumen activo permanece entre el 99 y el 95% del volumen total del tanque reactor, mostrado en la Figura 8.7; se observa como el volumen activo del reactor decae tras la desconexión de la bomba de recirculación hasta que a las dos horas ha disminuido al 94,7%, en ese momento la bomba se reactiva durante otras dos horas alcanzando un volumen activo por encima del 99%.

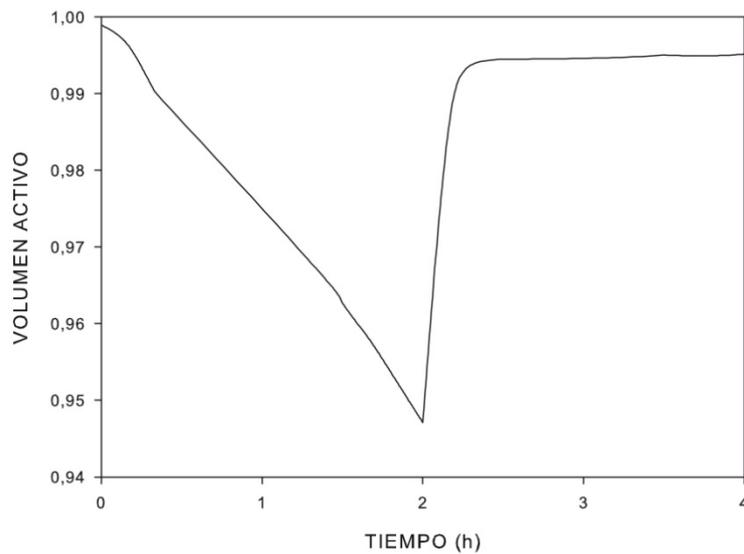


Figura 8.7. Evolución del volumen activo del reactor para un régimen de funcionamiento intermitente de dos horas.

9. Conclusiones

Con el objetivo de realizar un análisis del funcionamiento hidráulico de un digestor de fangos de mezcla continua de una planta depuradora de agua para la mejora de la eficiencia energética, se ha desarrollado una modelización numérica CFD del flujo. Para el desarrollo de los cálculos numéricos se han tenido en cuenta las siguientes consideraciones:

- Se ha realizado un estudio de la geometría concluyendo que es necesario incluir en el dominio las tuberías de recirculación, simplificando su recorrido por el exterior del tanque digestor, con objeto de poder determinar posteriormente los tiempos de residencia reales de las partículas fluidas.
- Se ha llevado a cabo un estudio de sensibilidad del mallado para conseguir independencia de resultados de la malla y tiempos de cálculo óptimos. El volumen fluido del modelo numérico ha sido discretizado en un total de 1.886.565 celdas, con 3.877.783 caras y 376.130 nodos.
- Como condiciones de contorno en la modelización numérica se ha determinado los saltos de presión necesarios para generar los caudales de recirculación reales de ensayo. Los caudales de entrada y salida de fangos y saltos de presión originados por los elementos de impulsión han sido ajustados según los valores experimentales, de modo que el modelo numérico reproduce con exactitud el caudal impulsado por la bomba del sistema de recirculación/agitación y el caudal impulsado por la bomba del sistema de calentamiento.
- El análisis del comportamiento hidráulico del digestor por medio de las curvas de distribución de tiempos de residencia se ha desarrollado a través del estudio de tiempos de residencia de partículas fluidas introducidas en el modelo numérico a través de un modelo lagrangiano de fase discreta.
- La resolución de la modelización numérica mediante el código *ANSYS Fluent* realizada en el centro de supercomputación *Ben Arabi* de la Fundación Parque Científico de Murcia, para todos los casos estudiados, ha convergido adecuadamente; se han obteniendo unos errores residuales inferiores a 10^{-5} , tanto para los balances de las ecuaciones de conservación como para el balance de flujo másico y para la velocidad media del flujo de fangos en el interior del digestor.

Los resultados del estudio fluidodinámico del caso en el que se consideran los valores nominales del modelo experimental arrojan las siguientes conclusiones principales:

- En el interior del tanque digestor se alcanzan velocidades máximas inferiores a 0,3 m/s (sin tener en cuenta las velocidades alcanzadas en el interior de las tuberías), siendo la velocidad media de 0,11 m/s. También se aprecia el giro del flujo en el interior inducido por la inclinación en las boquillas de las tuberías de recirculación. Esta vorticidad inducida se va amortiguando conforme se desplaza el flujo hacia la parte superior del depósito.
- Teniendo en cuenta la bibliografía revisada, la velocidad límite de estancamiento se fija en 0,02 m/s. Según los resultados obtenidos, el porcentaje de volumen que presenta una velocidad inferior a inferior al 1% del volumen de fangos contenidos en el digestor, por lo que se puede concluir que hay una buena homogeneización del flujo aunque la zona central del depósito junto a la tubería presenta velocidades relativamente bajas. El volumen activo del reactor para el caso nominal es igual al 99,89% del volumen total de tanque digestor.
- Los resultados obtenidos mediante la modelización lagrangiana de las trayectorias fluidas se ajustan a los modelos ideales propuestos en la bibliografía, lo que valida el estudio y determina que el flujo en el interior del reactor ofrece un mezclado de calidad y que no existen caminos preferentes que conduzcan el flujo de entrada directamente hacia la salida. Se ha determinado que para obtener un análisis significativo de las distribuciones de tiempos de residencia es necesario inyectar un mínimo de 500 partículas para el caso analizado.

El análisis para la optimización del sistema de recirculación ofrece las siguientes conclusiones:

- Se ha analizado la influencia de la potencia de sistema de agitación sobre el comportamiento del flujo de fangos; para determinarla se han estudiado 8 casos considerando diferentes caudales de recirculación. La velocidad media del flujo en el interior del digestor en función del caudal de recirculación presenta una tendencia lineal, mientras que el volumen activo y el volumen de fangos con una velocidad superior a 0,05 m/s presentan un crecimiento logístico con la potencia del sistema de agitación.

	VELOCIDAD m/s	VOLUMEN ACTIVO	VOLUMEN $v > 0.05$ m/s
Q 100% - 234,5 Kg/s	0.1110	99.89 %	97.41 %
Q 90% - 209,3 Kg/s	0.0990	99.82 %	96.39 %
Q 80% - 186,6 Kg/s	0.0876	99.70 %	94.76 %
Q 60% - 139,9 Kg/s	0.0603	98.95 %	73.40 %
Q 45% - 105,8 Kg/s	0.0442	97.42 %	9.58 %
Q 30% - 70,55 Kg/s	0.0281	91.36 %	1.61 %
Q 15% - 35,28 Kg/s	0.0190	38.84 %	0.56 %
Curva de Tendencia	$v = 0,000463 \cdot Q$	$V.A. = \frac{0,9986}{1 + \left(\frac{Q}{37,9508}\right)^{-3,762}}$	$V = \frac{0,966}{1 + \left(\frac{Q}{126,1836}\right)^{-12,0021}}$
Coefficiente de Determinación	$R^2 = 0,9893$	$R^2 = 0,9999$	$R^2 = 0,9997$

Tabla 9.1. Valores y tendencia de la velocidad media y volúmenes activos del digestor en función del caudal de recirculación.

- Se ha estudiado un diseño alternativo del sistema de agitación, recirculando todo el caudal por la tubería de recirculación que impulsa el flujo de fangos en dirección contraria a la tubería de salida. Se ha determinado que emplear una sola recirculación para realizar la agitación hidráulica en el diseño del digestor estudiado no resulta eficiente energéticamente en comparación con el sistema con dos recirculaciones debido al aumento de pérdidas por fricción originado por la reducción del diámetro de paso.
- Se ha realizado un estudio transitorio del comportamiento de los fangos. Partiendo de las condiciones nominales se observa que tras la parada del sistema de agitación la velocidad media de los fangos cae por debajo de la velocidad límite de estancamiento, establecida en 0,02 m/s, tras 6 horas y el volumen activo cae por debajo del 50%. Partiendo de las condiciones que se alcanzan tras 10 horas de inactividad del sistema de agitación se ha analizado la evolución de las características del flujo con el tiempo tras re-arrancar el sistema de agitación, el volumen activo alcanza el 99,5% tras dos horas, aunque la velocidad media no alcanza el valor bajo las condiciones nominales de funcionamiento hasta transcurridas 10 horas desde el re arranque.
- La determinación de un régimen de funcionamiento intermitente implica establecer un rango de volumen activo del reactor en el que se considere que el proceso de digestión cumple con los requisitos de calidad establecidos y para éste obtener los tiempos de funcionamiento del sistema de recirculación; una vez determinados éstos, se deberán comparar los consumos energéticos ocasionados por el régimen continuo y el intermitente. Se ha establecido un régimen de funcionamiento que, bajo los criterios establecidos en el presente estudio, mantiene el volumen activo del digestor entre el 99% y el 95% alternando el funcionamiento y desconexión del sistema de recirculación cada dos horas.

Bibliografía

- [1] Hendricks, D., *Water Treatment Unit Processes: Physical and Chemical*. Ed. CRC Publishers (2006).
- [2] Levenspiel, Octave, *Ingeniería de las Reacciones Químicas*. Ed. Limusa Wiley, 3ªed, (2004).
- [3] Franco-Uría, Amaya, *Biorreactores pulsantes para el tratamiento anaerobio/anóxico de aguas residuales de alta carga*. PhD. Universidad de Santiago de Compostela (2004).
- [4] Olivet, D., Valls, J., Gordillo, M.A., Freixo, A. y Sánchez, A., *Application of residence time distribution technique to the study of the hydrodynamic behaviour of a full-scale wastewater treatment plant plug-flow bioreactor*. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* 80:425–432 (2005).
- [5] Borroto, J.I., Domínguez, J., Griffith, J., Fick, M., Leclerc, J.P., *Technetium-99m as a tracer for the liquid RTD measurement in opaque anaerobic digester: application in a sugar wastewater treatment plant*. *Chemical Engineering and Processing* 42 (2003) 857 – 865.
- [6] Monteith, H.D., Stephenson, J.P., 1981. *Mixing efficiencies in fullscale anaerobic digesters by tracer methods*. *Journal of the Water Pollution Control Federation* 53 (1), 78–84.
- [7] Patwardhan, A. W., *CFD modeling of jet mixed tanks*. *Chemical Engineering Science* 57 (2002) 1307 – 1318.
- [8] Terashima, M., Goel, R., Komatsu, K., Yasui, H., Takahashi, H., Li, Y.Y., Noike, T., *CFD simulation of mixing in anaerobic digesters*. *Bioresource Technology* 100 (2009) 2228–2233.
- [9] Martin, A.D., *Interpretation of residence time distribution data*. *Chemical Engineering Science* 55 (2000) 5907 – 5917.
- [10] Wu, B., *Advances in the use of CFD to characterize, design and optimize bioenergy systems*. *Computers and Electronics in Agriculture* xx (2012) xxxx – xxxx.
- [11] Wu, B., *CFD simulation of mixing in egg-shaped anaerobic digesters*. *Water Research* 44 (2010) 1507 – 1519.
- [12] Yu, L., Ma, J., Chen, S., *Numerical simulation of mechanical mixing in high solid anaerobic digester*. *Bioresource Technology* 102 (2011) 1012–1018.

- [13] Wasewar, K.L., Sarathi, J.V., 2008. *CFD modeling and simulation of jet mixed tanks*. Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics 2 (2), 155–171.
- [14] Vesvikar, M.S., Al-Dahhan, M., 2005. *Flow pattern visualization in a mimic anaerobic digester using CFD*. Biotechnology and Bioengineering 89 (6), 719–732.
- [15] Bridgeman, J. *Computational fluid dynamics modelling of sewage sludge mixing in an anaerobic digester*. Advances in Engineering Software, 24/06/2011.
- [16] Wu, B., *CFD simulation of gas and non-Newtonian fluid two-phase flow in anaerobic digesters*. Water Research 44 (2010) 3861 – 3874.
- [17] Wu, B., *CFD investigation of turbulence models for mechanical agitation of non-Newtonian fluids in anaerobic digesters*. Water Research 45 (2011) 2082 – 2094.
- [18] Robert N. Meroney, P.E. Colorado, *CFD simulation of mechanical draft tube mixing in anaerobic digester tanks*. Water Research 43 (2009) 1040 – 1050.
- [19] Versteegh, T. y Nieuwstadt, F., *A direct numerical simulation of natural convection between two infinite vertical differentially heated walls scaling laws and wall functions*. Int. J. Heat Mass Transfer 42, 1999, pp. 3673 - 3693.
- [20] Versteeg, H. y Malalasekera, W., *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*, Prentice Hall, 1995, Londres.
- [21] Wilcox, D., *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries, 2003, California.
- [22] Ince, N. y Launder, B., *On the computation of buoyancy-driven turbulent flows in rectangular enclosures*. Int. J. Heat Fluid Flow 10, 1989, pp. 110 - 117.
- [23] Hanjalic, K. y Vasic, S., *Computantion of turbulent natural convection in rectangular enclosures with an algebraic flux model*. Int. J. Heat Mass Transfer 36, 1993, pp. 3603–3624.
- [24] Heindel, T., Ramadhyani, S. y Incropera, F., *Assessment of turbulence models for natural convection in an enclosure*. Numerical Heat Transfer 26, 1994, pp. 147–162.
- [25] Henkes, R. y Hoogendoorn, C., *Comparison exercise for computations of turbulent natural convection in enclosures*. Int. J. Heat Mass Transfer 28, 1995, pp. 59 - 78.
- [26] Jayatilleke, C., *The influence of prandtl number and surface roughness on the resistance of the laminar sublayer to momentum and heat transfer*. Prog. Heat Mass Transfer 1, 1969, pp. 193–321.

- [27] Leonard, B. P., y Mokhtari., S., *ULTRA-SHARP Nonoscillatory Convection Schemes for High-Speed Steady Multidimensional Flow*. NASA TM 1-2568 (ICOMP-90-12), NASA Lewis Research Center, 1990.

- [28] Patankar, S. y Spalding, D., *A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows*. Int. J. Heat Mass Transfer 15, 1972, p. 1787.

- [29] Thomas, L., *Elliptic Problems in Linear Difference Equations over a Network*. Columbia University, New York, 1949.

- [30] Zamora, B., *Notas sobre Simulación Numérica de Flujos de Fluidos*. Universidad Politécnica de Cartagena. E.T.S. de Ingenieros Industriales, 2008.