

**ESTUDIO HIDRODINÁMICO DE UN REACTOR FOTOELECTROQUÍMICO  
TUBULAR MEDIANTE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL**

**JEFERSON OWALDO RUIZ LIZARAZO  
LINETH ANDREA SANABRIA MEJÍA**



**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA METALÚRGICA Y CIENCIA DE MATERIALES  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA, SANTANDER**

**2016**

**ESTUDIO HIDRODINÁMICO DE UN REACTOR FOTOELECTROQUÍMICO  
TUBULAR MEDIANTE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL**

**JEFERSON OWALDO RUIZ LIZARAZO  
LINETH ANDREA SANABRIA MEJÍA**

**Trabajo de grado presentado como requisito para optar al título de:  
Ingeniero Metalúrgico e Ingeniera Química**

**Director:**

**Julio Andrés Pedraza Avella, Dr.  
Ing. Químico**

**Co-directora:**

**María Inés Jaramillo Gutiérrez, Mg.  
Ing. Química**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-QUÍMICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA METALÚRGICA Y CIENCIA DE MATERIALES  
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA  
BUCARAMANGA, SANTANDER**

**2016**

## DEDICATORIA

*Hoy, que estoy a punto de culminar este paso de mi vida quiero dedicar este logro en primer lugar a Dios, que siempre ha estado guiándome y ayudándome cuando más lo he necesitado.*

*A mi mamá, Nubia Mejía, por ser la mejor mamá del mundo y enseñarme que en esta vida se puede ser feliz sin importar las circunstancias, por enseñarme que el amor incondicional existe y por ser quien soy.*

*A mi papá, Henry Sanabria, porque a pesar de todo siempre me ha apoyado, por enseñarme que todos merecemos una segunda oportunidad, por el gran esfuerzo que hace y por el amor brindado.*

*A mi hermano Henry Mauricio, que es la luz de mis ojos, porque en él veo a mi otro yo y eso me da motivos para ser cada vez mejor y especialmente porque siempre me ha brindado su amor incondicional.*

*A Jeferson Ruiz, mi novio y compañero de trabajo de grado, el cual me ha acompañado durante este arduo camino, y me ha enseñado a ver la vida con otros ojos, con ojos de esfuerzo y dedicación, por ser esa persona que se encarga de aguantarme, de quererme y de entenderme.*

*A mi Charlotte, porque fue lo que más he adorado en esta vida.*

*A toda mi familia, porque cada uno de ellos ha estado de una u otra forma cuando los he necesitado.*

*Lineth Andrea Sanabria Mejía*

## DEDICATORIA

*Dedicado a Dios por ser mi guía, por darme esperanza en las adversidades y por permitirme cumplir este sueño. A mamita María por interceder por mí, cuidarme y protegerme.*

*A mi padre Carlos Ruiz que siempre tiene una historia para mí y unos brazos abiertos que refortalecen y dan tranquilidad.*

*A mi madre Claudia Lizarazo que me dio la vida y que con su amor ha luchado por mi crecimiento profesional enseñándome que de la mano de Dios todo se puede alcanzar.*

*A mi hermana Jeimy por estar presente en cada uno de los momentos de mi vida, por ser el impulso para superarme cada vez más y por demostrarme su valor al enfrentar los obstáculos.*

*A mi hermano Jair por ser el ejemplo perfecto de hermano mayor, sirviendo y protegiendo la familia como un gran tesoro.*

*A Lineth Sanabria por cambiar el argumento de mi vida con su amor y permitirme conquistar esta meta a su lado, estoy orgulloso de presentar este proyecto contigo.*

*Jeferson Oswaldo Ruiz Lizarazo*

## AGRADECIMIENTOS

A Dios porque sin él nada hubiera sido posible.

Al profesor Julio Andrés Pedraza Avella y María Inés Jaramillo Gutiérrez quienes se arriesgaron con nosotros a realizar este trabajo, por su ayuda, por sus consejos, por su dirección y sobre todo por los conocimientos brindados, que me ayudaron a crecer como profesional y como persona.

A los profesores Crisóstomo Barajas y Ramiro Martínez por su incondicional apoyo y motivación.

A todos los profesores de los que tuve la oportunidad de recibir su conocimiento, porque gracias a ellos amé la Ingeniería Química.

A la UIS, al GIMBA por acogerme y permitirme vivir esta gran experiencia.

A mis amigos Catalina Camargo, Mayadir Sandoval, Daniel Chaparro e Iván Suárez, que juntos nos involucramos en esa aventura tan linda que es el centro de estudios y gracias a ella aprendí a ser más fuerte, a administrar un negocio y a entender que los negocios son una cosa y que la amistad es otra, gracias a ustedes he podido ser la persona que hoy soy y aprendí que la amistad en la universidad si se encuentra y que sin importan los obstáculos siempre he contado con ustedes.

A mis amigos Malena Bayona, Lorena Segura, Sergio Cáceres, Mario Jiménez, Said Mora, Luis Bohórquez, Santiago Páez, Lina Abril y Silvia Flórez, porque cada uno ha puesto su granito de arena para culminar este camino.

A mi tía Itala Mejía, por recibirme cuando decidí emprender este reto en Bucaramanga lejos de los míos.

A Jeferson Ruiz, Jeimy Ruiz, a la señora Claudia, Jair Ruiz y el señor Carlos, por ser esas personas que se encargan de no hacerme sentir sola, al estar lejos de mi familia.

A mis padres, mi hermano y a mi familia, por ser mi motivación para superarme cada día.

*Lineth Andrea Sanabria Mejía*

## AGRADECIMIENTOS

Al final de este largo camino recorrido, debo agradecer a todas las personas y entidades que han contribuido en el cumplimiento de esta meta.

Al Profesor Julio A. Pedraza por ser ese gran maestro dispuesto a enseñar y a contribuir en el futuro de la investigación. A María Inés Jaramillo por creer en nosotros y por acompañarnos durante la realización de este trabajo de grado con su valioso conocimiento y experiencia.

A la UIS mi alma mater y al GIMBA mi grupo de investigación por permitir el desarrollo de este proyecto de investigación.

A la Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales, a su Directora la profesora Elcy Córdoba y a todos sus profesores por tan valioso cariño y aprendizaje recibido.

Al profesor Ramiro Martínez Por sus valiosas sugerencias y acertados aportes durante el desarrollo de este trabajo.

A mi familia que son las bases donde me soporto para alcanzar mis metas, que mis pasos son sus pasos y que este logro es tan suyo como mío.

A mi hermana Adriana y su esposo Diomedes que siempre han sido un apoyo incondicional sin importar lo destornillada que sean mis ideas.

A mi amigo Fredy Pineda de quien he recibido mi formación profesional, esa que no se aprende en las universidades y que me han ayudado a no ver el mundo “tan cuadrulado”, a él que ha estado ahí en las más grandes decisiones de mi vida un inmenso gracias.

A mis compañeros y amigos Carlos Rondón, Jasbleidy Niño, Lina Sierra y Jhon Neira por todos los momentos vividos entre sacrificios, traspasadas y risas, porque sin importar que nos trajó aquí nos une la misma pasión por los materiales, gracias por hacer de estos años de universidad algo de lo me siento orgulloso de recordar.

A mis amigos Jose Olmedo, Carlos Quinche y David Caballero por demostrarme que la amistad es algo que siempre perdura sin importar la distancia que nos separe.

A todos los que creyeron profundamente en mi gestión como Representante estudiantil, a mi equipo de trabajo, con el que servimos desde la ética y la transparencia.

*Jefferson Oswaldo Ruiz Lizaraso*

## TABLA DE CONTENIDO

	<b>Pág.</b>
INTRODUCCIÓN.....	21
1. METODOLOGÍA .....	24
1.1 ADQUISICIÓN DE HARDWARE Y SOFTWARE .....	25
1.1.1 Licencia COMSOL Multiphysics® 5.2. ....	25
1.1.2 Selección del equipo de cómputo.....	26
1.2 MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA DEL REACTOR.....	26
1.2.1 Construcción de la geometría del reactor en el simulador. ....	26
1.2.2 Sistema de ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica del fluido. ...	28
1.2.2.1 Modelado del régimen turbulento. ....	29
1.2.2.2 Consideraciones y condiciones límite .....	31
1.2.3 Simulación del comportamiento del fluido al interior del reactor. ....	32
2. ANÁLISIS DE RESULTADOS .....	33

2.1	ANÁLISIS HIDRODINÁMICO DEL REACTOR UIS-GIMBA 2.0 .....	33
2.1.1	Descripción de resultados. ....	33
2.1.2	Análisis detallado de las zonas del reactor. ....	34
2.2	PROPUESTA DE DISEÑO DEL REACTOR MEJORADO (UIS-GIMBA 2.1).....	40
3.	CONCLUSIONES .....	52
4.	RECOMENDACIONES .....	53
	REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS.....	54
	BIBLIOGRAFÍA.....	63
	ANEXOS .....	70

## LISTA DE FIGURAS

	<b>Pág.</b>
Figura 1. Metodología del estudio realizado. ....	24
Figura 2. Reactor UIS-GIMBA 2.0 y las zonas de estudio.....	26
Figura 3. Perfil de velocidad del dominio del fluido. (a) Cabezal de entrada, (b) Parte central de reactor y (c) Cabezal de salida.....	33
Figura 4. Perfil de velocidad en la Zona 1 del reactor UIS-GIMBA 2.0. (a) Unidad de entrada. (b) Sección transversal. ....	34
Figura 5. Perfil de velocidad en la Zona 2 en el reactor UIS-GIMBA 2.0. (a) Perfil de velocidad en la sección transversal. (b) Isosuperficie del perfil de velocidad. ....	35
Figura 6. Perfil de velocidad de la Zona 3 en el reactor UIS-GIMBA 2.0.....	36
Figura 7. Perfil de velocidad lineal de la Zona 3 en el reactor UIS-GIMBA 2.0.....	37
Figura 8. Cabezal de salida del reactor UIS-GIMBA 2.0. ....	38
Figura 9. Perfil de velocidad de la Zona 4 en el reactor UIS-GIMBA 2.0.....	38
Figura 10. Perfil de velocidad de la Zona 4 en el reactor UIS-GIMBA 2.0.....	39
Figura 11. Perfil de velocidad de la Zona 1 en el reactor UIS-GIMBA 2.1. (a) Unidad de entrada. (b) Sección transversal. ....	43

Figura 12. Perfil de velocidad en la Zona 2 del reactor UIS-GIMBA 2.1. (a) Perfil de velocidad en la sección transversal. (b) Isosuperficie del perfil de velocidad. ....	44
Figura 13. Perfil de velocidad de la Zona 3 del reactor UIS-GIMBA 2.1.....	45
Figura 14. Perfiles de velocidad del reactor UIS-GIMBA 2.0 y del reactor UIS-GIMBA 2.1. ....	46
Figura 15. Cabezal de salida con las modificaciones planteadas.....	47
Figura 16. Perfil de velocidad en la Zona 4 del reactor UIS-GIMBA 2.1.....	48
Figura 17. Perfil de velocidad Zona 4 del reactor UIS-GIMBA 2.1.....	49
Figura 18. Diseño total del reactor UIS-GIMBA 2.1.....	50
Figura 19. Dominio del fluido. ....	71

## LISTA DE TABLAS

	<b>Pág.</b>
Tabla 1. Relación de los números adimensionales $\psi'$ y $\zeta$ , antes y después de las mejoras.....	51
Tabla 2. Dimensiones del reactor UIS-GIMBA 2.0. ....	70
Tabla 3. Propiedades fisicoquímicas del agua. ....	72
Tabla 4. Condiciones límites.....	76
Tabla 5. Tabla de resultados del mallado del reactor.....	76
Tabla 6. Valores de la velocidad a lo largo del radio del reactor UIS-GIMBA 2.0..	77
Tabla 7. Valores de velocidad a lo largo del radio del reactor UIS-GIMBA 2.1.....	78

## LISTA DE SIMBOLOS

$\tau_{ij}$  : Esfuerzo cortante por área.

$\mu$  : Viscosidad del fluido.

$\delta_{ij}$ : Tensor unitario.

$\nabla v_i$ : Tensor del gradiente de velocidad.

$(\nabla v_j)^+$  : Transpuesta del tensor gradiente de velocidad.

$\nabla \cdot v_k$ : Divergencia del vector de velocidad.

$k$  : Viscosidad dilatacional.

$\rho$ : Densidad del fluido.

$\nabla \cdot v$  : Divergencia del vector de velocidad.

$\nabla \cdot \rho v v$  : Divergencia del producto de la velocidad.

$\nabla p$  : Gradiente del escalar P.

$\nabla \cdot \tau$ : Divergencia del tensor  $\tau$

$\rho g$ : Peso del fluido.

- $\kappa$ : Energía cinética de disipación.
- $\varepsilon$ : Disipación de la energía cinética.
- $P_K$ : Generación de la energía cinética turbulenta debido al gradiente de la velocidad.
- $G_K$ : Generación de la energía cinética turbulenta debido a las fuerzas de flotación.
- $\mu_t$ : Viscosidad turbulenta.
- $Y_M$ : Contribución de fluctuación de la dilatación en la turbulencia compresible debida a la tasa de disipación.
- $(C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}$  y  $C_{3\varepsilon})$ : Constantes involucradas en disipación de energía cinética.
- $\sigma_k$  y  $\sigma_\varepsilon$ : Números de *Prandtl* turbulentos.
- $\psi$ : Factor de diseño.
- $\psi'$ : Factor de diseño para reactores tubulares.
- $L$ : Longitud del compartimiento.
- $d_e$ : Diámetro hidráulico.
- $\gamma$ : Relación de aspecto.
- $\lambda$ : Parámetro relacionado con la disposición geométrica de los distribuidores.

$\zeta$  : Área libre que existe en el distribuidor para el paso del fluido al interior del reactor.

$A_R$ : Área transversal del reactor.

$n_D$ : Número de distribuidores.

$A_D$ : Área total de los distribuidores.

$d_e$ : Diámetro hidráulico del orificio de entrada.

## LISTA DE ANEXOS

	<b>Pág.</b>
ANEXO A. Dimensiones del reactor uis-gimba 2.0 y dominio del fluido en COMSOL MULTIPHYSISCS® 5.2. ....	700
ANEXO B. Propiedades fisicoquímicas del agua de producción. ....	722
ANEXO C. Ecuación de la Ley de Newton para la viscosidad, Ecuación de Continuidad y la Ecuación de Cantidad de Movimiento. ....	733
ANEXO D. Características de los modelos de turbulencia. ....	755
ANEXO E. Condiciones límites y condiciones de solución del mallado del reactor UIS- GIMBA 2.0. ....	766
ANEXO F. Datos del perfil de velocidad lineal en la zona 3 del reactor UIS-GIMBA 2.0. ....	777
ANEXO G. Datos del perfil de velocidad lineal en la zona 3 del reactor UIS-GIMBA 2.1. ....	78

## RESUMEN

**TITULO:** ESTUDIO HIDRODINÁMICO DE UN REACTOR FOTOELECTROQUÍMICO TUBULAR MEDIANTE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL.

**AUTORES:** JEFERSON OWALDO RUIZ LIZARAZO \*\*

LINETH ANDREA SANABRIA MEJÍA \*\*

**PALABRAS CLAVES:** Dinámica de fluidos computacional, hidrodinámica, fotoelectroquímica, COMSOL.

### DESCRIPCIÓN:

La hidrodinámica de reactores aplicados a procesos de oxidación avanzada, juega un papel crítico en el diseño de sistemas de tratamientos de aguas de producción, así como en la producción de hidrógeno. En este trabajo se utilizó la dinámica de fluidos computacional (CFD, *Computational Fluid Dynamics*) para estudiar y proponer mejoras en el comportamiento hidrodinámico del reactor fotoelectroquímico tubular UIS-GIMBA 2.0

El software empleado fue COMSOL Multiphysics 5.2, el cual utiliza el método de elementos finitos (FEM) para solucionar las ecuaciones que describen el movimiento. Inicialmente se identificaron problemas de flujo en el reactor UIS-GIMBA 2.0, como lo son las zonas muertas y zonas de recirculación, ocasionados por la geometría de los distribuidores. Estos resultados proporcionan información, para proponer un nuevo diseño del reactor realizando modificaciones principalmente en los distribuidores de flujo de los cabezales de entrada y salida, disminuyendo así las zonas muertas dentro del reactor y solucionando la salida de los gases producidos en la reacción.

Finalmente, se empleó un número adimensional asociado a la geometría ( $\psi'$ ) para correlacionar las variables geométricas que tienen influencia en la distribución del fluido dentro del reactor, y de esta forma fue posible observar el porcentaje de mejora en el cabezal de entrada en un 22,76 % y en el cabezal de salida en un 99,17%. Posteriormente  $\psi'$  podrá ser incluido dentro del número adimensional de Sherwood (Sh) para el análisis de la transferencia de masa.

---

\* Trabajo de Grado

\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Metalúrgica. Director: Julio Andrés Pedraza Avella, Ingeniero Químico.

\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Julio Andrés Pedraza Avella, Ingeniero Químico.

## ABSTRACT

**TITLE:** HYDRODYNAMICS STUDY OF A PHOTOELECTROCHEMICAL TUBULAR REACTOR USING COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS.

**AUTHORS:** JEFERSON OWALDO RUIZ LIZARAZO \*\*

LINETH ANDREA SANABRIA MEJÍA \*\*

**KEYWORDS:** Computational Fluid Dynamics, hydrodynamics, photoelectrochemical, COMSOL.

### DESCRIPTION:

The hydrodynamics of reactors applied to advanced oxidation processes, plays a critical role in the design of production water treatment systems, as well as in the production of hydrogen. Computational fluid dynamics (CFD) was used to study and propose improvements to the hydrodynamic behaviour of the reactor photoelectrochemical tubular UIS-GIMBA 2.0

The used software was COMSOL Multiphysics® 5.2, which uses the method of finite elements (FEM) to solve the equations that describe the movement. Initially problems of flow were identified in the reactor UIS-GIMBA 2.0, as there it are the dead areas and recirculation areas, caused by the geometry of the distributors. These results provide information, to propose a new design of the reactor realizing modifications principally in the distributors of flow of the compresses of entry and exit, diminishing this way the areas died inside the reactor and solving the exit of the gases produced in the reaction.

Finally, was used a number dimensionless associated to the geometry ( $\psi'$ ) to correlate them variable geometric that have influence in the distribution of the fluid within the reactor, and of this form was possible observe the percentage of improves in the head of input in a 22,76% and in the head of output in a 99,17%. Then  $\psi'$  will be able to be included by it inside the number dimensionless of Sherwood (Sh) for the analysis of the transference of mass.

---

\* Bachelor Thesis

\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Metalúrgica. Director: Julio Andrés Pedraza Avella, Ingeniero Químico.

\* Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Julio Andrés Pedraza Avella, Ingeniero Químico.

## INTRODUCCIÓN

Recientemente el Grupo de Investigación en Minerales, Biohidrometalurgia y Ambiente (GIMBA) por medio de consideraciones de flujo macroscópico y limitaciones prácticas, desarrolló el reactor fotoelectroquímico UIS-GIMBA 2.0 para evaluar la degradación de contaminantes y la producción de hidrógeno. Este tiene una geometría tubular y se compone de cabezales de entrada y salida con distribuidores en su interior que canalizan el fluido; están conectados mediante un tubo transparente que contiene dos electrodos (mallas) concéntricos, los cuales son energizados mediante conexiones en el cabezal de entrada [1].

Los reactores fotoelectroquímicos fusionan las tecnologías electroquímicas y fotocatalíticas, por esta razón es posible encontrar diversas geometrías para este tipo de reactores, tales como los anulares, tubulares, filtro-prensa y de lecho fluidizado [2]. Sin embargo, los reactores tubulares ofrecen mayores ventajas, porque permiten acoplarse a colectores solares para concentrar la radiación y favorecen el control de las reacciones. Debido a que su funcionamiento se da en estado estacionario y su comportamiento se puede ajustar al modelo de un reactor flujo pistón (*Plug Flow Reactor-PFR*), que garantiza la variación en forma axial de la concentración a lo largo del reactor [3, 4].

En estos reactores se debe garantizar una distribución uniforme del fluido con el fin de lograr altas eficiencias. Por esta razón, el análisis y evaluación de la hidrodinámica en los reactores es un paso obligatorio. Carver et al. desarrollaron un reactor fotoelectroquímico tipo filtro-prensa con electrodos ubicados de forma paralela en todas las direcciones favoreciendo la reacción [5], así como distribuidores en la entrada y a la salida que canalizan el fluido a lo largo del reactor

[6]. Ellos también implementaron la dinámica de fluido computacional (CFD, *Computational Fluid Dynamics*) para estudiar el comportamiento hidrodinámico del reactor [7, 8].

Un estudio similar se desarrolló en el GIMBA utilizando un reactor tipo filtro-prensa llamado UIS-GIMBA 1.0. En donde se logró establecer que el modelamiento y simulación del reactor es uno de los métodos más importantes para su estudio hidrodinámico [9]. Debido a que se evitan modificaciones continuas de los pilotos, se disminuye el tiempo de investigación y los costos asociados [10].

Los procesos fotoelectrocatalíticos constituyen una alternativa promisoría para el tratamiento de aguas de producción, las cuales contienen contaminantes orgánicos [11, 9]. Es decir, la aplicación de reactores fotoelectroquímicos como el UIS-GIMBA 2.0, permite eliminar los compuestos orgánicos disueltos y generar hidrógeno de forma simultánea como valor agregado [12]. Un ejemplo a nivel industrial es el avance de esta tecnología en la Plataforma Solar de Armería (PSA) en donde se utilizó un reactor tubular para degradar 4-clorofenol [13].

En este trabajo inicialmente se identificaron los problemas de flujo y comportamientos inadecuados (zonas muertas y discontinuidades) [14] en el reactor UIS-GIMBA 2.0, que son ocasionados por las perturbaciones en el flujo según la geometría del cuerpo del reactor y la disposición de los electrodos [15]. Para este análisis se seleccionó la herramienta computacional COMSOL Multiphysics® 5.2 (Burlington, MA: COMSOL, Inc.), esta herramienta requiere el manejo de conceptos de hidrodinámica y fenómenos de transporte. Finalmente, los problemas de flujo

fueron resueltos realizando modificaciones en su geometría, lo que permitió la homogenización del fluido.

Este documento se dividió en tres capítulos:

En el CAPITULO 1, se describe la metodología que se siguió para realizar el estudio hidrodinámico del reactor.

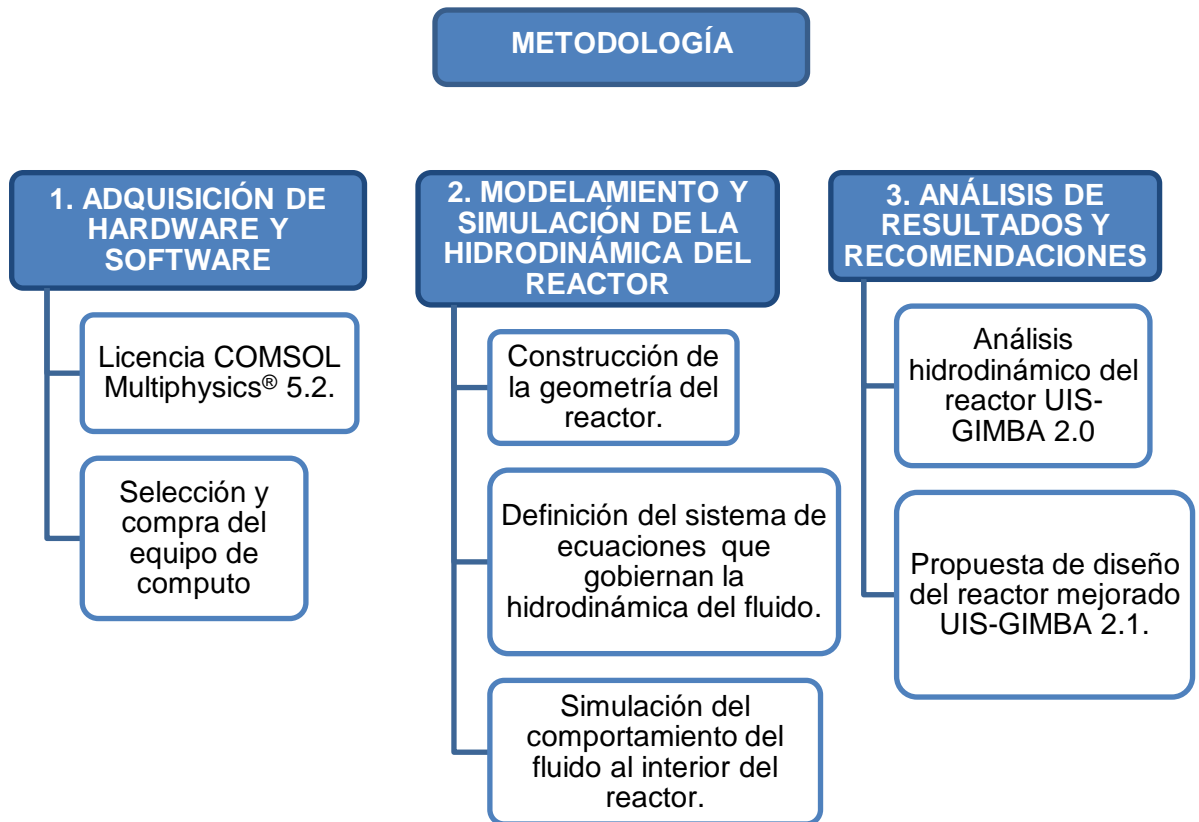
En el CAPITULO 2, se analiza el reactor tubular UIS-GIMBA 2.0 con el fin de encontrar problemas de distribución del flujo.

En el CAPITULO 3, se presentan las mejoras realizadas al reactor tubular UIS-GIMBA 2.0 y su respectivo análisis.

# 1. METODOLOGÍA

Las etapas metodológicas seguidas en este trabajo se presentan en la Figura 1:

Figura 1. Metodología del estudio realizado.



## 1.1 ADQUISICIÓN DE HARDWARE Y SOFTWARE

**1.1.1 Licencia COMSOL Multiphysics® 5.2.** COMSOL Multiphysics®, es un paquete de modelización para la simulación de los procesos físicos descrito mediante ecuaciones diferenciales parciales [16]. Esta herramienta ofrece gran variedad de funcionalidades en la modelación de los fenómenos físicos, inclusive tiene la capacidad de operar con varios módulos físicos (modelación multifísica) por medio de la adición de estos [17].

Este software resuelve modelos de métodos numéricos utilizando la técnica de elementos finitos (FEM, *Finite Element Method*), en donde se divide la geometría estudiada en un número finito de elementos, que son asociados por medio de un punto llamado nodo [18]. Permitiendo, realizar un modelo analítico del sistema real de manera más económica, rápida y fácil [19]. Además, COMSOL puede desarrollar todo tipo de geometrías en diferentes dimensiones (1D, 2D y 3D), por medio del mallado del cuerpo geométrico, permitiendo al usuario asignar indistintas dimensiones espaciales simultáneamente [17, 16].

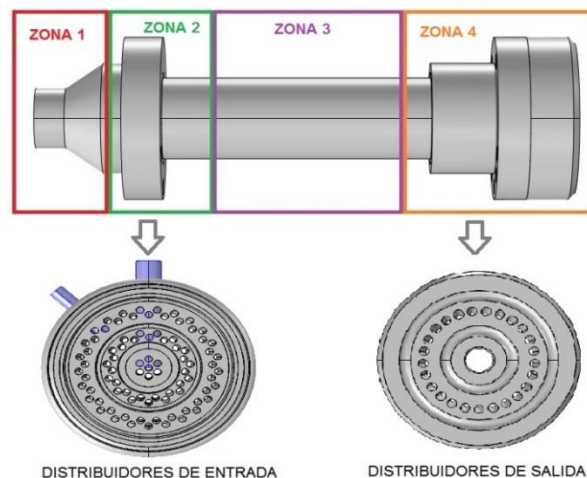
Recientemente la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad Industrial de Santander adquirió la licencia de COMSOL Multiphysics® 5.2, esta incluye los módulos físicos de CFD module y Chemical Reaction Engineering module, los cuales describen a la perfección el flujo de fluidos y definen el transporte de calor y masa en soluciones, respectivamente [20, 21].

**1.1.2 Selección del equipo de cómputo.** Las herramientas computacionales de simulación requieren de una unidad con características específicas (memoria física del computador, tipo de procesador, tarjeta de video) debido a su influencia directa con el tiempo computacional. El equipo de cómputo seleccionado para el desarrollo de COMSOL Multiphysics® tiene 16 GB de memoria física del computador (RAM) y cuatro núcleos de procesador. Debido a que es recomendado el uso de 4 GB de RAM por núcleo del procesador [22].

## 1.2 MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DE LA HIDRODINÁMICA DEL REACTOR

**1.2.1 Construcción de la geometría del reactor en el simulador.** Con el fin de facilitar el análisis de la geometría del reactor y de exponer los resultados de este estudio de manera específica, en la Figura 2 se muestran cuatro zonas de análisis en las que se dividió el reactor:

**Figura 2.** Reactor UIS-GIMBA 2.0 y las zonas de estudio.



*Zona 1. Antes de ingresar a los distribuidores de entrada:* se compone de un cono acoplado a una sección cilíndrica transversal en la que posteriormente se encuentran los distribuidores de flujo de entrada al cuerpo del reactor.

*Zona 2. Distribuidores de flujo de entrada:* son 87 distribuidores que canalizan el fluido que entra al reactor, están distribuidos de forma radial en la sección transversal del cabezal de entrada y tienen un patrón de ubicación determinado según la sección en donde se encuentren.

*Zona 3. Parte central del reactor:* es la región donde ocurren las reacciones de interés, puesto que en esta zona se encuentra el volumen ocupado por las mallas electrónicas.

*Zona 4. Distribuidores de flujo de salida:* son 25 distribuidores de flujo que canalizan el fluido que sale del reactor, organizados de manera radial en la sección transversal del cabezal de salida y tienen un solo patrón de ubicación debido a que solo existe una sección en donde se encuentran.

Para la construcción de la geometría en el simulador, se utilizaron las medidas de cada una de las piezas del reactor (Anexo 1). Con esto, se garantizó dimensiones exactas del reactor previamente construido, obteniendo una escala 1:1.

Es importante mencionar, que para reducir el tiempo de cómputo se decidió tomar como dominio de análisis el área ocupada por el fluido dentro de las piezas del reactor, puesto que esta sección es la región que presentará problemas

hidrodinámicos en el flujo. Por esta razón, se utilizaron operaciones geométricas como las operaciones booleanas y particiones (unión, diferencia e intersección) y las operaciones transformadas (mover, rotar y matriz) de COMSOL para limitar el dominio de la simulación en el sólido. La región ocupada por el fluido dentro del reactor se muestra en el Anexo 1.

**1.2.2 Sistema de ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica del fluido.** Para definir el modelo matemático que gobiernan la hidrodinámica del sistema, se debe conocer inicialmente propiedades fisicoquímicas relevantes del fluido como la densidad y viscosidad. El fluido estudiado en este proyecto son las aguas de producción de la industria petrolera [11], las cuales tienen una densidad de  $1.077 [kg/m^3]$  y una viscosidad de  $1,287 \times 10^{-3} [kg/m \cdot s]$  (Anexo 2) [23].

Este flujo fue clasificado como Newtoniano al tener en cuenta sus propiedades. En consecuencia, el comportamiento de la viscosidad se rige según la *Ley de Viscosidad de Newton* (ver ecuación en el Anexo 3), la cual establece que la viscosidad del fluido es constante sin importar la deformación que se le aplique al mismo [24].

Después de especificadas las propiedades del fluido, se deben definir las ecuaciones que gobiernan su movimiento, las cuales dependen del tipo fluido y del régimen flujo.

Basado en que la turbulencia en un reactor PFR asegura que la concentración a lo largo del cuerpo del equipo sea homogénea, debido a que existe una continua mezcla del fluido en el reactor favoreciendo la reacción sin depender de la difusión

del contaminante. Se decidió trabajar en régimen turbulento [25] y se seleccionó un caudal de  $2,52 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$ .

**1.2.2.1 Modelado del régimen turbulento.** Las ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica del fluido (*ecuación de continuidad y la ecuación de cantidad de movimiento*, ver Anexo 3) fueron planteadas considerando la hipótesis del medio continuo, es decir, las propiedades del fluido son funciones continuas a lo largo de la cavidad que recorre [26], y están basadas en la formulación *Euleriana*, que delimita un volumen de control (CV, *Control Volume*) en el espacio a través del cual pasa un fluido [27].

Al realizar el balance de cantidad de movimiento al volumen de control de estudio, se obtiene como resultado una ecuación para cada coordenada. La forma general en estado estacionario de la expresión de cantidad de movimiento para fluidos newtonianos se muestra en el Anexo 3. Sin embargo, estas ecuaciones deben especificar la turbulencia presente en el reactor, por lo que se debe buscar un modelo de turbulencia que describa este comportamiento. Para esto se consideraron tres familias de modelos de turbulencia, los cuales son [27, 28]:

- Ecuaciones de Navier-Stokes promediadas de Reynolds. (RANS, *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*).
- Simulación de remolinos grandes. (LES, *Large-Eddy Simulation*).
- Simulación numérica directa.(DNS, *Direct Numerical Simulation*).

Para el desarrollo del modelo del flujo del fluido, se usaron las ecuaciones de *Navier-Stokes* promediadas de *Reynolds*, debido a que disminuyen el uso de aproximaciones matemáticas [27] y utilizan el promedio en el tiempo de las propiedades del fluido [29].

Por tanto, las ecuaciones de continuidad y la de cantidad de movimiento se convierten en:

$$(\nabla \cdot \rho \bar{v}_i) = 0 \quad (1)$$

$$[\nabla \cdot \rho \bar{v}_i \bar{v}_j] = -\nabla \bar{p} - \left[ \nabla \cdot \left( -\mu \left( \nabla \bar{v}_i + (\nabla \bar{v}_j)^+ \right) + (\rho \bar{v}_i \bar{v}_j) \right) \right] + \rho g_i \quad (2)$$

$$\text{con } i = x, y, z \quad j = x, y, z$$

Dónde se observa que en la ecuación de cantidad de movimiento en el término del modelo de viscosidad se origina un término más, el cual es el tensor de esfuerzos de *Reynolds* ( $\rho \bar{v}_i \bar{v}_j$ ), que es un tensor simétrico y se presenta por la transferencia de cantidad de movimiento del campo de velocidades variantes [27].

Debido a que el tensor es simétrico, involucra nuevas incógnitas, las cuales introducen el concepto de energía cinética turbulenta ( $k$ ), que en conjunto con la disipación de energía cinética turbulenta ( $\varepsilon$ ) en la familia de ecuaciones RANS son la base para la solución de estas variables desconocidas [28]. Es necesario incluir ecuaciones que ayuden a cerrar el problema, para esto usaremos los modelos de turbulencia de dos ecuaciones de la familia RANS, los cuales son [27]:

- Modelos de *k-epsilon* ( $k-\varepsilon$ )
- Modelos de *k-omega* ( $k-\omega$ ).

Para este estudio se determinó el uso de los modelos k-épsilon, debido a que los otros modelos implican mayor número de ecuaciones y variables. También se eligió dentro de este grupo de modelos el k-épsilon estándar, porque supone velocidades turbulentas y tienen una convergencia relativamente más fácil (Anexo 4). A continuación, se presentan tanto las ecuaciones como una breve explicación del modelo k-épsilon estándar.

#### *Modelo de k-épsilon estándar (k- ε)*

En su método de desarrollo asume que el flujo es totalmente turbulento y que los efectos de la viscosidad molecular son despreciables [4]. De tal modo que solo puede ser usado para fluidos turbulentos en su totalidad. Las ecuaciones 3 y 4 representan las expresiones de la energía cinética turbulenta y su disipación, respectivamente [27, 28, 30]:

$$\nabla \rho \bar{u} \bar{v} k = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_K + G_K - \rho \varepsilon - Y_M \quad (3)$$

$$\nabla \rho \bar{u} \bar{v} \varepsilon = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{K} [P_K + C_{3\varepsilon} G_K] - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{K} \quad (4)$$

**1.2.2.2 Consideraciones y condiciones límite.** Se consideró un fluido en estado estable, Newtoniano, sin variación en la temperatura, régimen turbulento, coordenadas cartesianas y con condición de no deslizamiento.

Las condiciones límites para la solución del problema se dan en términos de velocidad. Sin embargo, se tienen las condiciones límites para las cantidades turbulentas en forma de expresión, debido a que dependerán de otras variables [27]. Las condiciones límites del reactor se encuentran en el Anexo 5.

**1.2.3 Simulación del comportamiento del fluido al interior del reactor.** Para continuar con la solución del sistema de ecuaciones se debe tener en cuenta que estas ecuaciones no tienen solución analítica, por lo que se resolvió el sistema con el simulador COMSOL Multiphysics® 5.2 [16, 20], reduciendo de este modo el tiempo de solución.

Este software al ser de tipo CFD (*Computational Fluid Dynamics*) permite la solución de problemas de mecánica de fluidos al aplicar los elementos finitos a las Ecuaciones de *Navier-Stokes* promediadas de *Reynolds* [31]. Es decir, realiza un mallado o discretización del dominio del flujo y obtiene una solución.

El mallado se realiza en diferentes tipologías como las tetraédricos (4 nodos), prismáticos o hexaédricos (6 nodos) y los tetraédricos libre y de barrido [31]. La diferencia de cada tipo de mallado radica en el número de nodos con el que se resuelven las ecuaciones por configuración. Por tanto, a mayor número de nodos mayor exactitud habrá en la solución interna [31].

Para el mallado de la geometría del reactor UIS-GIMBA 2.0, se tuvo en cuenta el concepto anterior y se especificó una malla con grosor *normal*, con el fin de asegurar que la solución del sistema tuviera buena exactitud.

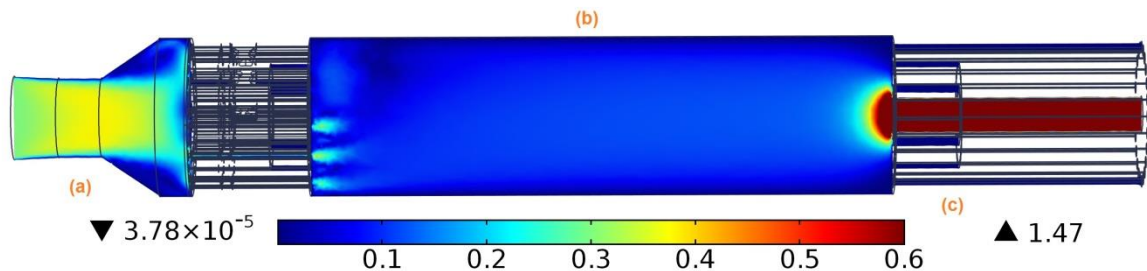
Las condiciones de solución que se especificaron al final del mallado y la imagen correspondiente se presentan en el Anexo 5.

## 2. ANÁLISIS DE RESULTADOS

### 2.1 ANÁLISIS HIDRODINÁMICO DEL REACTOR UIS-GIMBA 2.0

**2.1.1 Descripción de resultados.** COMSOL Multiphysics®, ofrece herramientas de análisis que permiten observar el comportamiento de la física simulada [32], entre estas herramientas se tienen los perfiles de velocidad, que son importantes para analizar la hidrodinámica. El perfil de velocidad a  $2,52 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$  en el reactor UIS-GIMBA 2.0 se presenta en la Figura 3. La velocidad del fluido está representada por una escala de colores; el color azul indica las zonas de baja velocidad y el color rojo las zonas de alta velocidad.

**Figura 3.** Perfil de velocidad del dominio del fluido. (a) Cabezal de entrada, (b) Parte central de reactor y (c) Cabezal de salida.

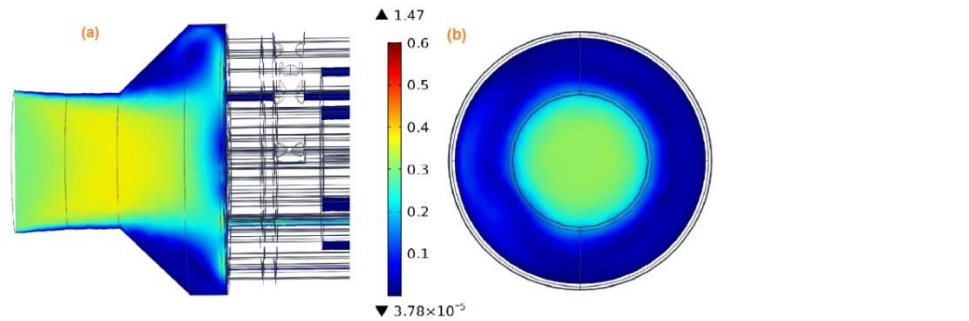


En la Figura 3 se puede observar que el fluido al ingresar por el cabezal de entrada (a) presenta una velocidad alta en la parte central (color verde), pero disminuye al acercarse a los distribuidores. En el cuerpo del reactor (b) se observa una velocidad casi homogénea, sin embargo, se ven los efectos de borde presentados por la condición de no deslizamiento de la pared [33] (color azul oscuro). A la salida del

reactor (c), el fluido tiene preferencia por el distribuidor central del cabezal de salida (color rojo).

**2.1.2 Análisis detallado de las zonas del reactor. Zona 1. Antes de ingresar a los distribuidores de entrada.** El perfil de velocidad en la Zona 1 se muestra en la Figura 4.

**Figura 4.** Perfil de velocidad en la Zona 1 del reactor UIS-GIMBA 2.0. (a) Unidad de entrada. (b) Sección transversal.



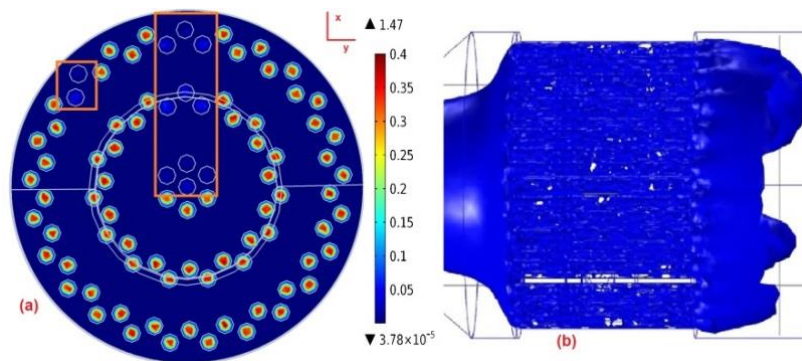
En la Figura 4 (a) se puede observar como el flujo disminuye la velocidad a medida que se acerca a los distribuidores de flujo del cabezal de entrada, debido al aumento del área de la sección [34]. En la parte inclinada del cambio de sección se presenta una zona muerta [35] o de baja velocidad (color azul oscuro), generando diferencias en las velocidades del flujo, que se desplaza por el centro de la unidad de entrada.

En la Figura 4 (b) se puede observar dos zonas distintivas, una zona central que se extiende casi hasta la mitad del radio con velocidad media (color verde) entre 0,3 y 0,4 [m/s]; y una zona perimetral entre el borde del reactor y la zona media con

una velocidad baja (color azul oscuro) aproximadamente de 0 a 0,2 [m/s], produciendo un flujo no uniforme. Este comportamiento se debe a los efectos de borde.

**Zona 2. Distribuidores de flujo de entrada.** El corte sobre el plano transversal del cabezal de entrada, a media longitud de la distancia total de los distribuidores se presenta en la Figura 5:

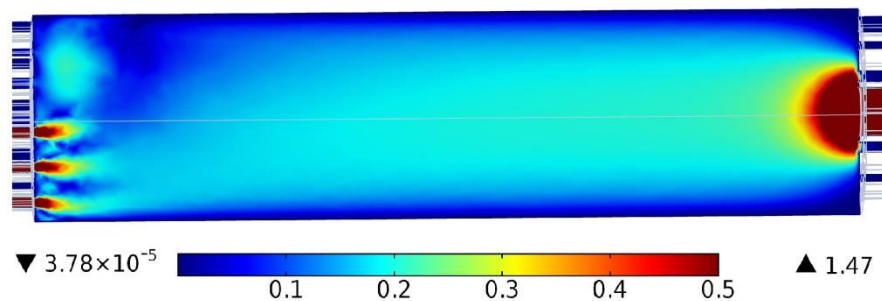
**Figura 5.** Perfil de velocidad en la Zona 2 en el reactor UIS-GIMBA 2.0. (a) Perfil de velocidad en la sección transversal. (b) Isosuperficie del perfil de velocidad.



En la Figura 5 (a) se pueden observar que 12 de los 87 distribuidores de flujo no poseen un paso continuo de fluido, esto debido al espacio ocupado por los electrodos de contacto que atraviesan el cabezal de entrada en la dirección positiva de la coordenada x. En la Figura 5 (b) se puede observar que el flujo no es homogéneo sobre la sección transversal del reactor, porque algunos puntos de la Zona 2 tienen igual velocidad a diferentes posiciones.

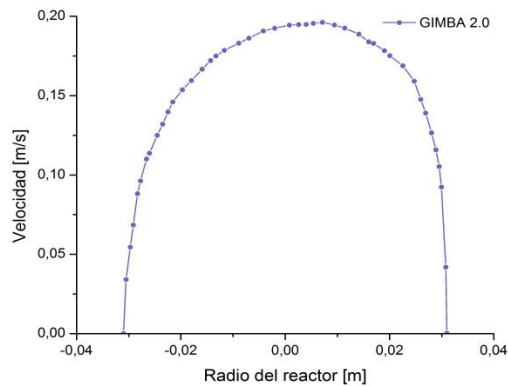
**Zona 3. Parte central del reactor.** Esta zona es de gran importancia para el análisis, puesto que en la parte central del reactor se espera el máximo desarrollo del flujo del fluido [36,37]. De acuerdo a la literatura, al estar en régimen turbulento se debe obtener un perfil parabólico achatado [38,39]. El perfil de velocidad en la zona media del reactor se presenta en la Figura 6:

**Figura 6.** Perfil de velocidad de la Zona 3 en el reactor UIS-GIMBA 2.0.



En la Figura 6 se puede observar el desarrollo del flujo a lo largo del reactor, manteniendo la condición de no deslizamiento cerca a las paredes. En la sección inicial no existe un flujo homogéneo por la interrupción que los electrodos realizan. En la sección final el flujo se presenta únicamente sobre el distribuidor central de salida. Con el fin de verificar la presencia de un perfil achatado en la zona central, se seleccionó una herramienta en COMSOL que permite visualizar la magnitud de la velocidad en función del eje radial permitiendo valorar con mayor precisión esta zona, aunque este es un perfil de velocidad muy específico, pues solo es descrito para un corte central del reactor y solo representa la posición radial en una línea que atraviesa el diámetro del reactor. El perfil lineal de la velocidad se muestra en la Figura 7 y los datos graficados se encuentran en el Anexo 6.

**Figura 7.** Perfil de velocidad lineal de la Zona 3 en el reactor UIS-GIMBA 2.0.

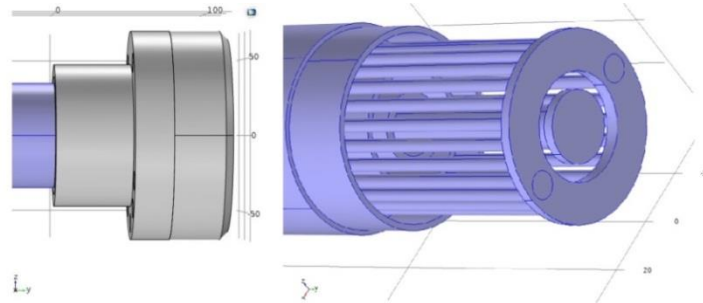


En la Figura 7 se puede observar que el perfil es parabólico y no presenta un perfil completamente achatado, puesto que se observa una zona de la mayor velocidad entre -0,004 y 0,011 [m] del área transversal del reactor, mientras que las zonas próximas a los extremos del ducto son de baja velocidad.

**Zona 4. Distribuidores de flujo de salida.** La función de los distribuidores de flujo de salida es básicamente permitir que el fluido abandone el reactor de manera uniforme y rápida. De manera, que permita el ingreso al reactor de un fluido nuevo con alta concentración de reactivos, tal como es el funcionamiento de un reactor continuo flujo tapón [40].

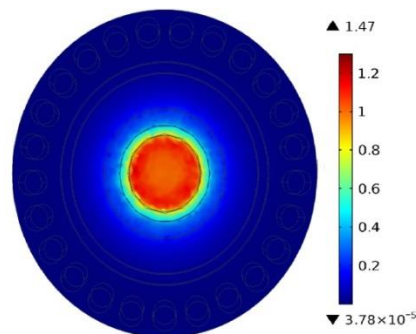
A continuación, en la Figura 8 se aprecia el cabezal de salida del reactor:

**Figura 8.** Cabezal de salida del reactor UIS-GIMBA 2.0.



Al realizar el dimensionamiento del cabezal de salida, se observa que los distribuidores extremos de la zona radial no poseen conexión con la tubería de salida. Por lo tanto, se infiere que, en el reactor tuvo una construcción inadecuada en la tapa de sellado del cabezal. Razón por la que el fluido abandona el reactor únicamente por el distribuidor central, ocasionando el perfil de velocidad mostrado en la Figura 9:

**Figura 9.** Perfil de velocidad de la Zona 4 en el reactor UIS-GIMBA 2.0.

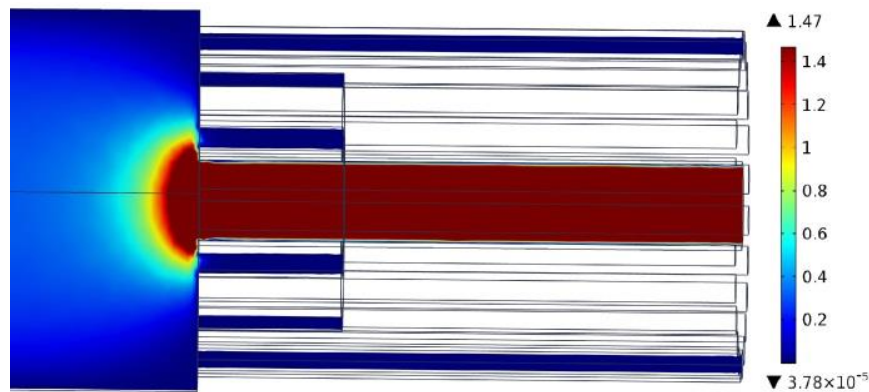


La Figura 9 permite visualizar el fluido justo antes de entrar a los distribuidores de salida, donde se puede observar dos regiones importantes: La zona central (color rojo), donde el fluido posee mayor velocidad debido al área del distribuidor central

de salida y a los esfuerzos cortantes más bajos. La zona media y extrema de baja velocidad (azul oscuro) donde se presentan zonas muertas, generando volúmenes no reaccionantes dentro del reactor.

Para continuar con el análisis de esta sección se presenta en la Figura 10 el perfil de velocidad en forma de lámina.

**Figura 10.** Perfil de velocidad de la Zona 4 en el reactor UIS-GIMBA 2.0.



En la Figura 10 se observa que la magnitud de la velocidad del fluido a la salida es alta (color rojo). Puesto que al disminuir el área de la sección transversal, la velocidad debe aumentar para compensar el caudal. Entonces, se tiene en el distribuidor de salida un perfil de velocidad de comportamiento máximo en el centro y mínimo en los extremos, generando así que la salida del fluido del reactor sea rápida por el paso del distribuidor.

## 2.2 PROPUESTA DE DISEÑO DEL REACTOR MEJORADO UIS-GIMBA 2.1

Basados en los resultados obtenidos en la sección 2.1 y con el fin de eliminar los flujos preferenciales y zonas estancadas presentes en el reactor UIS-GIMBA 2.0, se realizaron modificaciones en la geometría y en los distribuidores de flujo tanto en la entrada como a la salida del reactor. Específicamente, se modificó el diámetro de los distribuidores y su disposición en los cabezales. Con estas modificaciones se espera mejorar la distribución del fluido en el reactor durante su recorrido por las diferentes secciones.

El principal criterio para realizar las modificaciones en la geometría consistió en minimizar los efectos entrada/salida. Estos ocasionan que el fluido al salir de los distribuidores presente variaciones apreciables en la velocidad, ocasionando cambios importantes en las propiedades del transporte de materia, que sólo se normalizan cuando se alcanza un flujo completamente desarrollado. Frías-Ferrer empleó un factor de diseño para los distribuidores ( $\psi$ ), que le permitió cuantificar los efectos entrada/salida [41]. En la Ecuación 5 se presenta la expresión para  $\psi$ :

$$\psi = \frac{\gamma}{\frac{L}{d_e} \lambda \zeta} \quad (5)$$

En donde  $L$  es la longitud del compartimiento,  $d_e$  el diámetro hidráulico,  $\gamma$  es la relación de aspecto, el parámetro  $\lambda$  está relacionado con la disposición geométrica de los distribuidores y el parámetro  $\zeta$  hace referencia al área libre que existe en el distribuidor para el paso del fluido al interior del reactor.

La relación de aspecto ( $\gamma$ ) para secciones circulares es 1, debido a su simetría [42]. La disposición geométrica  $\lambda$ , para orificios de distribución uniforme está definida como [41]:

$$\lambda = \frac{\text{cantidad de orificios}}{\gamma} \quad (6)$$

Y el parámetro de control de áreas ( $\zeta$ ) se define como:

$$\zeta = \frac{\text{sumatoria del area de los orificios}}{\text{area de la sección transversal del reactor}} \quad (7)$$

Al sustituir  $\lambda$  y  $\zeta$  en la Ecuación 5 y establecer los parámetros para un reactor tubular se tiene:

$$\psi' = \frac{d_e * A_R * \gamma^2}{L * n_D * A_D} \quad (8)$$

Donde  $A_R$  es el área transversal del reactor,  $n_D$  es el número de distribuidores y  $A_D$  es el área total de los distribuidores.

Si se considera que la longitud y el diámetro del reactor deben permanecer constantes para este estudio hidrodinámico, y el valor  $\gamma$  está definido para la geometría de reactor tubular. Entonces, se tiene como variables críticas de modificación en el reactor fotoelectroquímico UIS-GIMBA 2.0 el número de distribuidores y el área que estos ocupan.

Ahora, valores bajos de  $\psi'$  indicarían un comportamiento similar al de un reactor ideal, es decir un canal de sección circular con una entrada de líquido que sería su sección total, sin orificios de entrada. Un reactor sin cambios de área no generaría corrientes de alta presión a la entrada o a la salida. Por lo que se dice que valores bajos de  $\psi'$  implican regímenes poco influenciados por el efecto entrada/salida [41] en relación con las modificaciones realizadas al número adimensional  $\psi'$  que permiten la utilización para reactores tubulares. De esta forma se garantiza un flujo totalmente desarrollado desde la entrada y en consecuencia mayor área disponible para que ocurran reacciones de interés.

Con estas deducciones se plantea como principio de cualquier modificación a realizar en el reactor, el incremento cuantitativo de la relación entre  $n_D$  y  $A_D$  teniendo en cuenta que existe una correlación directa entre ellas.

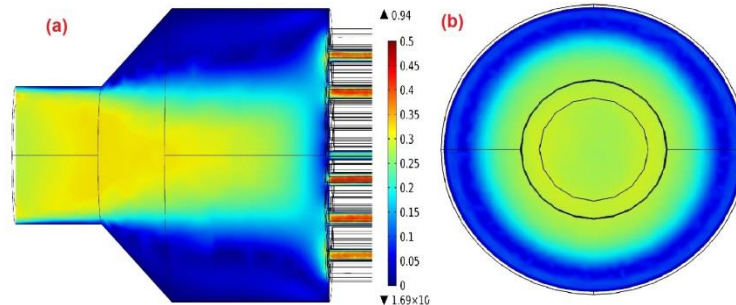
**Zona 1. Antes de ingresar al cabezal de entrada.** En esta zona la modificación geométrica del reactor está orientada en asegurar una magnitud uniforme en la velocidad del fluido antes de ingresar a los distribuidores del cabezal de entrada. De igual forma, se busca eliminar zonas preferenciales en el área central del cuerpo del reactor. En este sentido, Pickett et al. determinaron la distancia necesaria para alcanzar un régimen de flujo totalmente desarrollado desde la entrada del reactor [43]. La Ecuación 9 presenta la relación desarrollada:

$$L = 6 * d_e \quad (9)$$

Donde,  $d_e$  representa el diámetro hidráulico del orificio de entrada.

Esta estimación solo tiene en cuenta el cambio de sección y no se debe usar para entradas de flujo por más de un canal, las cuales pueden disminuir o aumentar esta distancia estimada. En el reactor UIS-GIMBA 2.0 la longitud estimada para que el flujo se desarrolle completamente es 0,084 [m], esta modificación se incluyó en el modelo geométrico de la herramienta computacional. El perfil de velocidad en la Zona 1 luego de ampliar la unidad de entrada se muestra en la Figura 11:

**Figura 11.** Perfil de velocidad de la Zona 1 en el reactor UIS-GIMBA 2.1. (a) Unidad de entrada. (b) Sección transversal.

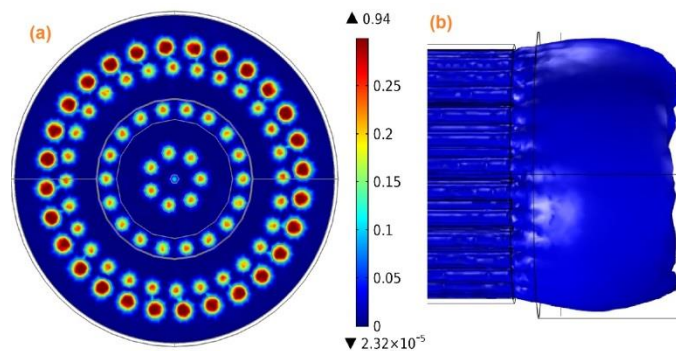


En la Figura 11 (a) se puede observar que el fluido en la entrada tiene una velocidad alta (zona verde). Posteriormente, al expandirse la unidad de entrada, el fluido presenta una reducción de velocidad mostrando zonas muertas sobre la parte inclinada del canal. Al finalizar su trayectoria adquiere un perfil de velocidad homogéneo, facilitando su ingreso a todos los distribuidores de entrada sin flujo preferencial.

En la Figura 11 (b) se puede observar un perfil desarrollado a la entrada de los distribuidores de flujo, que permite verificar que se homogenizó la velocidad antes de abandonar la Zona 1. Logrando un aumento en el área comprendida por la zona de color verde que representa una mayor velocidad.

**Zona 2. Distribuidores de flujo de entrada.** En la Zona 2 se plantearon dos modificaciones: la primera consiste en trasladar los electrodos al cabezal de salida para generar un paso continuo de fluido por todos los distribuidores de entrada y mejorar el flujo a la entrada del reactor [44]. La segunda modificación consistió en reorganizar y aumentar el diámetro de los distribuidores extremos de la zona radial de 0,003 a 0,004 [m], con el objetivo de aumentar el movimiento del fluido en la zona aledaña a la pared del ducto del reactor. El perfil de velocidad en la Zona 2 se presenta en la Figura 12.

**Figura 12.** Perfil de velocidad en la Zona 2 del reactor UIS-GIMBA 2.1. (a) Perfil de velocidad en la sección transversal. (b) Isosuperficie del perfil de velocidad.



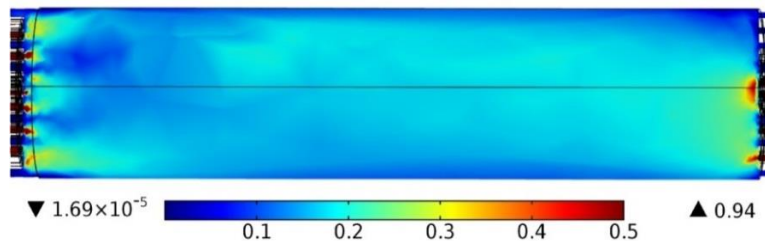
En la Figura 12 (a) se puede apreciar el funcionamiento y la nueva estructura de los distribuidores de flujo de entrada, donde se observa que los distribuidores extremos tienen una mayor velocidad (color rojo), para garantizar así un mayor traslado de fluido sobre la pared del reactor.

En la Figura 12 (b) se observa un flujo homogéneo sobre la sección transversal, debido a que todos los puntos de la zona tienen igual velocidad a diferentes posiciones. Lo que corresponde a un flujo mejor distribuido sobre la sección de

entrada del reactor, permitiendo que el desarrollo del flujo del fluido sea más próximo y se aproveche mayor volumen del reactor [41]. En comparación con la Figura 5 (b) se puede detallar que el perfil formado después de las modificaciones presenta un comportamiento uniforme a una misma magnitud de velocidad disminuyendo el efecto entrada/salida.

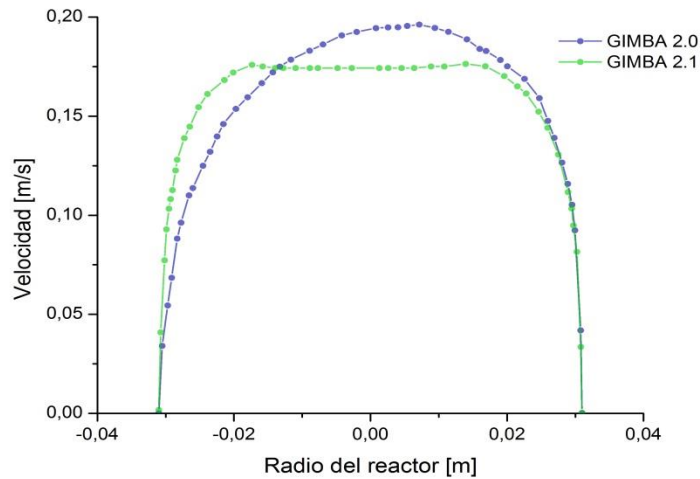
**Zona 3. Parte central del reactor.** En esta zona tienen lugar las reacciones de interés, por lo tanto, se analizaron los efectos de entrada y salida luego de realizar las modificaciones en los cabezales del reactor. Y de esta forma se determinó el grado de mejora obtenido en esta nueva propuesta de diseño. En la Figura 13 se puede observar el perfil de velocidad en la Zona 3:

**Figura 13.** Perfil de velocidad de la Zona 3 del reactor UIS-GIMBA 2.1.



En la Figura 13 se puede observar mayor uniformidad de flujo en comparación a la Figura 6, comprobando de este modo las mejoras realizadas. Con el objetivo de observar con mayor detalle la variación de la magnitud de la velocidad antes y después de las modificaciones en los distribuidores, se muestran de manera conjunta los perfiles lineales en la Figura 14 y los datos graficados se encuentran en el Anexo 7.

**Figura 14.** Perfiles de velocidad del reactor UIS-GIMBA 2.0 y del reactor UIS-GIMBA 2.1.



En la Figura 14 se puede observar que el reactor UIS-GIMBA 2.1 presenta un perfil flujo tapón. En este, las zonas próximas a los extremos del ducto tienen menor velocidad, debido a la condición de no deslizamiento. Y en comparación con el perfil del reactor UIS-GIMBA 2.0 se tiene una velocidad máxima en casi todo su diámetro.

**Zona 4. Distribuidores de flujo de salida.** Con el fin de mejorar la distribución del flujo a la salida del reactor, eliminar las zonas de baja velocidad y aumentar la eficiencia global del proceso, se propuso una serie de modificaciones en el cabezal de salida:

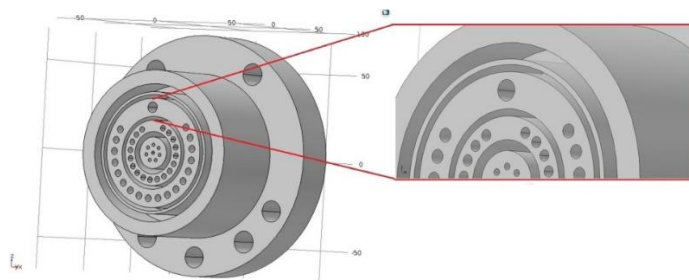
- Incluir un sistema para la evacuación de gases [45].
- Ampliar el espacio de los electrodos de contacto.
- Nueva estructura de los distribuidores de flujo de salida.

- Modificación de la tapa de sellado del cabezal.

- *Sistema de evacuación de gases.* Es una de las modificaciones incluidas en la geometría de los distribuidores de salida [9], puesto que con este sistema se favorece la salida de gases como el hidrógeno, el oxígeno y el dióxido de carbono que son generados como producto de las diversas reacciones que se dan a cabo en el reactor.

Naturalmente, los gases se acumulan en la parte superior del reactor disminuyendo la eficiencia global del proceso debido a la pérdida del volumen reaccionante [46]. Es por ello que en la estructura de los distribuidores de flujo, se propuso considerar un distribuidor dedicado hacer las veces de válvula de escape, donde en las condiciones de operación se contemple que la cabeza de presión en el distribuidor de escape sea mayor a la de los demás distribuidores de salida, para que el líquido no se desplace por esa zona y así poder garantizar el vaciado de gases. En la Figura 15 se presenta el sistema de salida de gases, ubicado en el cabezal de salida.

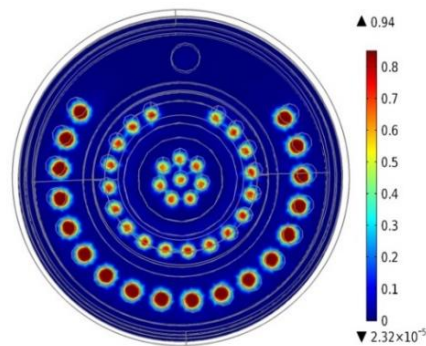
**Figura 15.** Cabezal de salida con las modificaciones planteadas.



En la Figura 15 se puede observar que el distribuidor de escape de gases se ubica en la parte más alta del área admisible del cabezal, alejado de los distribuidores de salida de líquido y bajo condiciones de operación dadas. Además, se plantea una curva ascendente de la desembocadura de este distribuidor asegurando de este modo la salida únicamente de gases. Esta curvatura se dará justo después de que finalice la longitud del ducto de pyrex o acrílico.

- *Ampliar el espacio de los electrodos.* Los electrodos se ubicarán convenientemente en la zona donde no existen distribuidores de flujo, con el objetivo de no interrumpir el paso libre de fluido a través de estos. En la Figura 16 se observa el perfil de velocidad de la Zona 4:

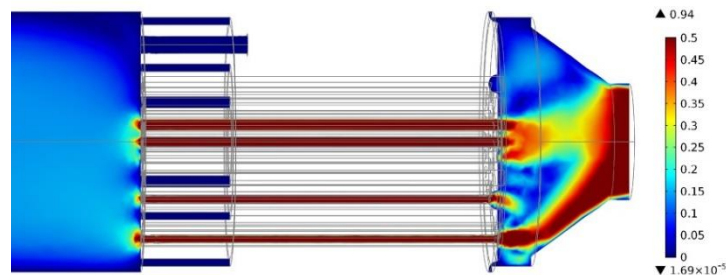
**Figura 16.** Perfil de velocidad en la Zona 4 del reactor UIS-GIMBA 2.1.



En la Figura 16 se evidencia una mejor distribución en la salida del fluido por un aumento del flujo, que se desplaza por las áreas perimetrales y que eliminan las zonas muertas en las zonas aledañas al distribuidor de salida.

- Nueva estructura de los distribuidores de flujo de salida. Al aumentar el número de distribuidores se corrige el efecto de salida, el cual permitirá mayor control sobre toda la longitud del reactor. El área total se aumentó, para permitir que el flujo mejorara y el efecto de salida disminuyera. Aunque se sigue conservando que la sumatoria de las áreas transversal de los distribuidores de entrada sea mayor a la sumatoria de las áreas transversales de los distribuidores de salida. De esta manera, se logró una relación de 5:3. Ocasionando un efecto tobera que aumenta la velocidad de salida y por ende disminuye la presión en el cabezal. Adicionalmente, se genera un diferencial de presión mayor entre entrada y salida que recupera perdidas por defectos. La disminución de área es conveniente para el llenado total del reactor como se ha destacado en trabajos anteriores [41]. En la Figura 17 se muestra el perfil de velocidad inmediatamente después de los distribuidores de salida:

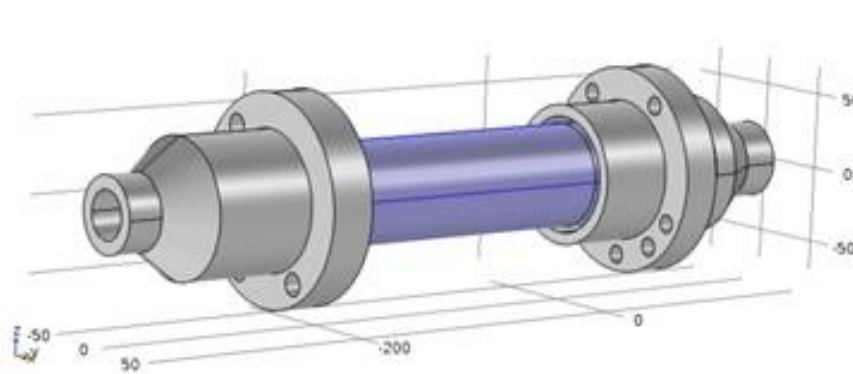
**Figura 17.** Perfil de velocidad Zona 4 del reactor UIS-GIMBA 2.1.



En la Figura 17 se puede observar que la modificación de la tapa de sellado permite que el cambio de sección sea gradual, conectando el fluido directamente con la tubería del circuito y permitiendo la salida libre de fluido por todos los distribuidores, dando rápido desalojo del agua agotada para generar un flujo continuo en el reactor.

**Diseño total del reactor.** En general, se realizaron modificaciones en el diseño del reactor que han permitido visualizar mejoras en el flujo de agua por las diferentes zonas. En la Figura 18 se muestra el diseño total del reactor:

**Figura 18.** Diseño total del reactor UIS-GIMBA 2.1.



En la Figura 18 se puede observar el diseño con las mejoras geométricas, las cuales permitieron una mejor distribución hidrodinámica. Esto se hace evidente, al analizar los valores de  $\psi'$  y  $\zeta$  obtenidos para el reactor UIS-GIMBA 2.0 y UIS-GIMBA 2.1. La mejora en el comportamiento hidrodinámico se ve reflejada cuando el parámetro  $\zeta$  aumenta su magnitud y el parámetro  $\psi'$  disminuye su magnitud, al reducir efectos de entrada/salida y al alcanzar comportamientos de flujo más ideales y mejor desarrollados. Los valores para los parámetros se presentan en la Tabla 1:

**Tabla 1.** Relación de los números adimensionales  $\psi$  y  $\zeta$ , antes y después de las mejoras.

	<b>Reactor GIMBA 2.0</b>	<b>Reactor GIMBA 2.1</b>	
	<b>Cabezal de entrada</b>		<b>Porcentaje (%)</b>
$\zeta$	0,164	0,195	18,674
$\psi'$	0,022	0,017	22,768
	<b>Cabezal de salida</b>		
$\zeta$	0,041	0,110	166,423
$\psi'$	6,900	0,057	99,174

De la Tabla 1 se puede observar que para el cabezal de entrada el parámetro  $\zeta$  aumentó en un 18,67% para el reactor UIS-GIMBA 2.1, mientras que  $\psi'$  se redujo en un 22,77%. Para el cabezal de salida el parámetro  $\zeta$  aumento en un 166,42% para el reactor UIS-GIMBA 2.1, mientras que  $\psi'$  se redujo en un 99,17%. Estos porcentajes en los parámetros  $\zeta$  y  $\psi'$  permiten concluir que el diseño propuesto cumple las expectativas tanto en el cabezal de entrada como en el de salida, produciendo un mayor control hidrodinámico. Además, es importante mencionar que el número adimensional  $\psi'$  podrá ser incluido en el número adimensional de Sherwood (Sh) para el análisis de la transferencia de masa.

### 3. CONCLUSIONES

Se mejoró la geometría del reactor (cabezales de entrada y salida), logrando alcanzar una distribución homogénea del fluido en la zona de reacción y disminuyendo el efecto entrada/salida en todo el compartimiento del reactor.

Se logró mejorar la homogeneidad dentro del volumen del reactor, debido a que la velocidad dentro de este, presenta mayor uniformidad. Como se demuestra en la zona achatada del perfil del UIS-GIMBA 2.1.

El porcentaje de mejora del reactor se especificó en cada uno de los cabezales, por medio de los números adimensionales  $\psi'$  y  $\zeta$ . En donde en el cabezal de entrada se presentó un porcentaje de aumento para  $\zeta$  de 18,6 % y un porcentaje de reducción para  $\psi'$  de 22,7 %, representando una mejora significativa. De igual manera, en el cabezal de salida se presentó un porcentaje de aumento para  $\zeta$  de 166,4 % y un porcentaje de reducción para  $\psi'$  de 99,1 %, representando una mejora importante pues eliminaron los problemas geométricos presentados en este.

#### **4. RECOMENDACIONES**

Se recomienda considerar la fricción en las paredes del reactor en posteriores estudios hidrodinámicos. Seleccionando un material que posea baja rugosidad como característica de importancia hidrodinámica, pero sin dejar de lado la permeabilidad lumínica y la resistencia química a los electrolitos presentes en el proceso de descomposición de los contaminantes del agua de producción.

Se debe realizar el estudio del efecto de las mallas electródicas en el comportamiento hidrodinámico del reactor, con el fin de identificar posibles zonas de alta turbulencia y de retro mezcla provocada por las mallas. De esta forma poder generar un modelo hidrodinámico más completo del reactor.

Se recomienda realizar una evaluación hidrodinámica experimental donde se valide los resultados obtenidos en la simulación, analizando la unidad de evacuación de gases y los distribuidores de salida de agua. De esta forma garantizar la evacuación del hidrógeno gaseoso no suspendido.

## REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

[1] ESPINOSA, Sneidy y MONSALVE, Mónica. Evaluación de la degradación de un surfactante aniónico empleado en el recobro químico del petróleo con S-TiO<sub>2</sub> en suspensión y luz visible en un fotorreactor tubular. Trabajo de grado Ingeniera química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería química, 2015. 18-46 p.

[2] RAMIREZ, Yazmin. Diseño, construcción y puesta en marcha de un reactor tubular fotocatalítico (UV-A) para la degradación de desechos químicos orgánicos. Trabajo de grado Químico industrial. Pereira: Universidad Tecnológica de Pereira. Facultad de tecnologías. Programa de Química Industrial, 2013. 18-116 p.

[3] FERNÁNDEZ, P, et al. Water disinfection by solar photocatalysis using compound parabolic collectors. En: Catalysis Today. 2005, vol 101, p. 345–352.

[4] FOGLER SCOTT, H.. En: Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 3 ed. Pearson Educación, 2001. 11-14 p.

[5] CARVER, C., et al.. Modelling and development of photoelectrochemical reactor for H<sub>2</sub> production. En: Journal International of Hydrogen Energy. September, 2012, vol 37, p. 2911-2923.

**[6]** JARAMILLO, María, et al. Photoelectrocatalytic hydrogen production from oilfield-produced wastewater in a filter-press reactor using TiO<sub>2</sub>-based photoanodes. En: Catalysis Today. May, 2016, vol 266, p. 17-26.

**[7]** GUMY, D., et al. Solar photocatalysis for detoxification and disinfection of water: Different types of suspended and fixed TiO<sub>2</sub> catalysts study. En: Solar Energy. 2006, vol 80, p.1376-1381.

**[8]** MCLOUGHLIN, O., et al. Photocatalytic disinfection of water using low cost compound parabolic collectors. En: Solar Energy.2004, vol 77, p.625-633.

**[9]** JARAMILLO, María Inés. Estudio de factibilidad de un proceso fotoelectroquímico para la producción de hidrógeno a partir del agua asociada a la producción de petróleo. Trabajo de investigación Magíster en Ingeniería química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería química, 2014. 19-50 p.

**[10]** HERNÁNDEZ, Joel. Análisis de la transferencia de calor mediante la técnica Hot Wire y COMSOL Multiphysics. Trabajo de tesis Doctor en tecnología avanzada. México D.F.: Instituto Politécnico Nacional. Centro de investigación en ciencia y tecnología aplicada, 2013. 1-63 p.

[11] MANCILLA, Robinson y MESA, Henry. Metodología para el manejo de aguas de producción en un campo petrolero. Trabajo de grado Ingeniero de petróleos. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería de petróleos, 2012. 22-193 p.

[12] CARDEÑO, Mónica y JAIMES, Judith. Producción de hidrógeno mediante foto-electrólisis de agua, usando películas de tipo pirocloro  $\text{Bl}_2\text{MNbO}_7$  (M=In, Fe) soportadas sobre acero inoxidable AISI-SAE 304. Trabajo de grado Ingeniera química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería química, 2009. 1-27 p.

[13] HERRMANN, J. Solar photocatalytic detoxification of used waters in 'Plataforma Solar de Almeria'. En: Catalysis B, Environmental. 1997, vol 12, p. 1-16.

[14] IBRAHIM, Dhorgham, et al.. Flow dynamics and mass transfer studies in a tubular electrochemical reactor with a mesh electrode. En: Computer & Fluids. December, 2013, vol 73, p. 97-103.

[15] WANG Jiade, et al.. Characterization of hydrodynamics and mass transfer in two types of tubular electrochemical reactors. En: Electrochimica Acta. May, 2015, vol 173, p. 698-704.

**[16]** Introduction to COMSOL Multiphysics. Disponible en Internet: <<http://cdn.comsol.com/documentation/5.2.1.152/IntroductionToCOMSOLMultiphysicsInt.pdf>>.

**[17]** MONTES, Richard. Aplicación del programa COMSOL Multiphysics en la ingeniería mecánica. Trabajo de grado Ingeniero Mecánico. Pereira: Universidad tecnológica de Pereira. Facultad de Ingeniería mecánica, 2015. 7-160 p.

**[18]** FRÍAS, Eduardo. Aportaciones al estudio de las maquinas eléctricas de flujo axial mediante la aplicación de métodos de los elementos finitos. Tesis doctoral. UPC. Departamento de Ingeniería Eléctrica. 2004, 112-144 p.

**[19]** Introducción al MEF. Disponible en Internet: <[http://www.iit.comillas.edu/~carnicero/Resistencia/Introduccion\\_al\\_MEF.pdf](http://www.iit.comillas.edu/~carnicero/Resistencia/Introduccion_al_MEF.pdf)>

**[20]** CFD Module. Disponible en Internet: <<https://www.comsol.com/cfd-module>>.

**[21]** Chemical Reaction Engineering Module. Disponible en Internet: <<https://www.comsol.com/chemical-reaction-engineering-module>>.

**[22]** What hardware do you recommend for COMSOL Multiphysics. Disponible en Internet: <<https://www.comsol.com/support/knowledgebase/866/>>.

**[23]** RIVERO, Eligio et al.. Ignacio. Numerical simulation of mass transport in a filter press type electrochemical reactor FM01-LC: Comparison of predicted and experimental mass transfer coefficient. En: Chemical Engineering Research and Design. 2012, vol 90, p. 1969-1978.

**[24]** BIRD, R. Byron; STEWART, Warren y LIGHTFOOT, Edwin. En: Fenómenos de Transporte. 2 ed. México. Editorial Limusa, S.A.. 2006. Cap 1,12-13 p.

**[25]** SALAZAR, Oscar y GONZÁLES, Germán. Consideración de la transferencia de masa y cantidad de movimiento en el modelamiento de un reactor tubular. Trabajo de grado Ingeniero químico. Manizales: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ingeniería y Arquitectura. Departamento de Ingeniería química, 2004. 5-16 p.

**[26]** MARTÍN, Agustín. Apuntes de mecánica de fluidos. Disponible en Internet: <<http://oa.upm.es/6934/1/amd-apuntes-fluidos.pdf>>.

**[27]**           CAPÍTULO           III.           Disponible           en           Internet:  
<<http://tesis.uson.mx/digital/tesis/docs/19406/Capitulo3.pdf>>.

**[28]** CAPOTE J., et al.. Influencia del modelo de turbulencia y del refinamiento de la discretización espacial en la exactitud de las simulaciones computacionales de incendios. En: Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería. 2008, vol 24, p. 227-245.

**[29]** BIRD, R. Byron, et al.. En: Fenómenos de Transporte. 2 ed. México. Editorial Limusa,S.A. 2006. 178 p.

**[30]** BALLESTEROS, Rafael. Universidad de Oviedo. Área de mecánica de fluidos. 2005.

**[31]** CARRILLO, José y CASTILLO, Luis. Consideraciones del mallado aplicadas al cálculo de flujos bifásicos con las técnicas de dinámica de fluidos computacional. En: IV Jornadas de introducción a la investigación de la UPCT. Disponible en Internet:<[http://www.upct.es/hidrom/publicaciones/revistas/Consideraciones\\_del\\_mallado\\_aplicadas\\_al\\_calculo\\_de\\_flujos\\_bifasicos\\_con\\_las\\_tecnicas\\_de\\_dinamica\\_de\\_fluidos\\_computacional.pdf](http://www.upct.es/hidrom/publicaciones/revistas/Consideraciones_del_mallado_aplicadas_al_calculo_de_flujos_bifasicos_con_las_tecnicas_de_dinamica_de_fluidos_computacional.pdf)>

**[32]** Essentials of Postprocessing and Visualization in COMSOL Multiphysics®. Disponible en Internet:<[http://www.addlink.es/images/pdf/COMSOL\\_HANDBOOK\\_SERIES\\_Essentials\\_of\\_Postprocessing\\_and\\_Visualization.pdf](http://www.addlink.es/images/pdf/COMSOL_HANDBOOK_SERIES_Essentials_of_Postprocessing_and_Visualization.pdf)>

**[33]** ALCALDE, Isaias. Propiedades de los fluidos y definiciones. [Diapositivas]. México. 2015. Disponible en Internet: <<http://ri.uaemex.mx/bitstream/handle/20.500.11799/35385/secme-22781.pdf?sequence=1&isAllowed=y>>

**[34]** BELENDEZ, Augusto. Acústica, fluidos y termodinámica, E. U. Politécnica de Alicante. Universidad de Alicante.1992. Disponible en Internet: <<https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/11348/1/Dinamica%20de%20fluidos%20y%20fluidos%20reales.pdf>>

**[35]** GIÁCOMAN, Germán. Evaluación de los aspectos hidrodinámicos de un reactor de lecho fluidificado. Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Yucatán. p. 7.

**[36]** DULHOSTE, Jean-François. Flujos Internos. Escuela de Ingeniería Mecánica. ULA. Disponible en Internet: <[http://webdelprofesor.ula.ve/ingenieria/cramirez/documentos/MF\\_Tema\\_6\\_Flujos\\_internos.pdf](http://webdelprofesor.ula.ve/ingenieria/cramirez/documentos/MF_Tema_6_Flujos_internos.pdf)>

**[37]** WILKES, James. En: Fluid Mechanics for Chemical Engineers. 2 ed. Department of Chemical Engineering. The University of Michigan. October, 2012. Chapter 3. 123-128 p.

**[38]** WILKES, James. En: Fluid Mechanics for Chemical Engineers. 2 ed. Department of Chemical Engineering. The University of Michigan. October, 2012. Chapter 3. 154-156 p.

**[39]** COEURET, F.. En: Introducción a la ingeniería electroquímica. Reverte, 1992. 12-16 p.

**[40]** LAINFIESTA, Diego. Diseño, construcción y evaluación de un reactor flujo pistón de forma helicoidal escala. Trabajo de grado Ingeniero Químico. Guatemala: Universidad de San Carlos de Guatemala. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería química, 2009, 1-81 p.

**[41]** FRÍAS-FERRER, Ángel. Optimización de la hidrodinámica de reactores electroquímicos: empleo de métodos experimentales y numéricos. Tesis doctoral. Alicante: Universidad de Alicante, 2004, 1-386 p.

**[42]** MOTT, Robert. En: Mecánica de fluidos. Pearson Educación. 2006, 265 p.

**[43]** PICKETT, D.J. and WILSON, C.J.. Mass transfer in a parallel plate electrochemical cell – the effect of change of flow cross- section at the cell inlet, En: Electrochimica. 1992. Acta 27, p. 591-594.

**[44]** WEBER, Walter. En: Control de calidad del agua: procesos fisicoquímicos. Reverte.1979. 48-51 p.

**[45]** FRÍAS-FERRER, Ángel; TUDELA, Ignacio; LOUISNARD, Olivier; SÁEZ, Verónica; ESCLAPEZ, María; DÍEZ, María Isabel; BONETE, Pedro y GONZÁLEZ, José. Optimized design of an electrochemical filter-press reactor using CFD methods. En: Chemical Engineering Journal. 2011, vol 169, p 270-281.

**[46]** Ingeniería de las reacciones químicas. Disponible en Internet: <<http://ocw.upm.es/ingenieria-quimica/ingenieria-de-la-reaccion-quimica/contenidos/OCW/LO/cap1.pdf>>

**[47]** BIRD, R. Byron, et al.. En: Fenómenos de Transporte. 2 ed. México. Editorial Limusa, S.A.. 2006. Cap 1, 20 p.

**[48]** BIRD, R. Byron, et al.. En: Fenómenos de Transporte. 2 ed. México. Editorial Limusa, S.A. 2006. Cap 3, 87,89 p.

**[49]** BEDFORD, Anthony. En: Dinámica: Mecánica para ingeniería. Pearson Educación. 2000. vol 1, p. 100.

**[50]** RIVERA, E. Introducción a la mecánica de fluido. Disponible en Internet: <<http://erivera-2001.com/files/Introduccion.pdf>>

**[51]** BAYONA, Carlos; LONDOÑO, Lina Paola y NIETO, Eduardo. Identificación del modelo de turbulencia más adecuado, utilizando software de dinámica de fluidos computacional, para el diseño del vehículo urbano de la competencia Shell Eco Marathon. Trabajo de grado Ingeniero Aeronáutico. Bogotá: Universidad de San Buenaventura. Facultad de ciencias básicas e Ingeniería. Escuela de ingeniería aeronáutica, 2015, 29-61 p.

## BIBLIOGRAFÍA

BAYONA, Carlos; LONDOÑO, Lina Paola y NIETO, Eduardo. Identificación del modelo de turbulencia más adecuado, utilizando software de dinámica de fluidos computacional, para el diseño del vehículo urbano de la competencia Shell Eco Marathon. Trabajo de grado Ingeniero Aeronáutico. Bogotá: Universidad de San Buenaventura. Facultad de ciencias básicas e Ingeniería. Escuela de ingeniería aeronáutica, 2015, 29-61 p.

BEDFORD, Anthony. En: Dinámica: Mecánica para ingeniería. Pearson Educación. 2000. vol 1, p. 100.

BELENDEZ, Augusto. Acústica, fluidos y termodinámica, E. U. Politécnica de Alicante. Universidad de Alicante.1992. Disponible en Internet: <<https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/11348/1/Dinamica%20de%20fluidos%20y%20fluidos%20reales.pdf>>

BIRD, R. Byron; STEWART, Warren y LIGHTFOOT, Edwin. En: Fenómenos de Transporte. 2 ed. México. Editorial Limusa, S.A.. 2006. Cap 1,12-13 p.

BIRD, R. Byron; STEWART, Warren y LIGHTFOOT; Edwin. En: Fenómenos de Transporte. 2 ed. México. Editorial Limusa, S.A.. 2006. Cap 1, 20 p.

BIRD, R. Byron; STEWART, Warren y LIGHTFOOT; Edwin. En: Fenómenos de Transporte. 2 ed. México. Editorial Limusa, S.A.. 2006. 178 p.

BIRD, R. Byron; STEWART, Warren y LIGHTFOOT; Edwin. En: Fenómenos de Transporte. 2 ed. México. Editorial Limusa, S.A.. 2006. Cap 3, 87,89 p.

CAPÍTULO III. Disponible en Internet:  
<<http://tesis.uson.mx/digital/tesis/docs/19406/Capitulo3.pdf>>.

CAPOTE J. et al.. Influencia del modelo de turbulencia y del refinamiento de la discretización espacial en la exactitud de las simulaciones computacionales de incendios. En: Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería. 2008, vol 24, p. 227-245.

CARDEÑO, Mónica y JAIMES, Judith. Producción de hidrógeno mediante foto-electrólisis de agua, usando películas de tipo pirocloro  $\text{Bi}_2\text{MNbO}_7$  (M=In, Fe) soportadas sobre acero inoxidable AISI-SAE 304. Trabajo de grado Ingeniería química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería química, 2009. 1-27 p

CARRILLO, José y CASTILLO, Luis. Consideraciones del mallado aplicadas al cálculo de flujos bifásicos con las técnicas de dinámica de fluidos computacional. En: IV Jornadas de introducción a la investigación de la UPCT. Disponible en Internet:<[http://www.upct.es/hidrom/publicaciones/revistas/Consideraciones\\_del\\_mallado\\_aplicadas\\_al\\_calculo\\_de\\_flujos\\_bifasicos\\_con\\_las\\_tecnicas\\_de\\_dinamica\\_de\\_fluidos\\_computacional.pdf](http://www.upct.es/hidrom/publicaciones/revistas/Consideraciones_del_mallado_aplicadas_al_calculo_de_flujos_bifasicos_con_las_tecnicas_de_dinamica_de_fluidos_computacional.pdf)>

CARVER, C, et al.. Modelling and development of photoelectrochemical reactor for H<sub>2</sub> production. En: Journal International of Hydrogen Energy. September, 2012, vol 37, p. 2911-2923.

CFD Module. Disponible en Internet: <<https://www.comsol.com/cfd-module>>. Chemical Reaction Engineering Module. Disponible en Internet: <<https://www.comsol.com/chemical-reaction-engineering-module>>.

ESPINOSA, Sneidy y MONSALVE, Mónica. Evaluación de la degradación de un surfactante aniónico empleado en el recobro químico del petróleo con S-TiO<sub>2</sub> en suspensión y luz visible en un fotorreactor tubular. Trabajo de grado Ingeniera química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería química, 2015. 18-46 p.

FERNÁNDEZ, P., et al. Water disinfection by solar photocatalysis using compound parabolic collectors. En: Catalysis Today. 2005, vol 101, p. 345–352.

FOGLER SCOTT, H.. En: Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 3 ed. Pearson Educación, 2001. 11-14 p.

FRÍAS, Eduardo. Aportaciones al estudio de las maquinas eléctricas de flujo axial mediante la aplicación de métodos de los elementos finitos. Tesis doctoral. UPC. Departamento de Ingeniería Eléctrica. 2004, 112-144 p.

FRÍAS-FERRER, Ángel. Optimización de la hidrodinámica de reactores electroquímicos: empleo de métodos experimentales y numéricos. Tesis doctoral. Alicante: Universidad de Alicante, 2004, 1-386 p.

FRÍAS-FERRER, Ángel, et al.. Optimized design of an electrochemical filter-press reactor using CFD methods. En: Chemical Engineering Journal. 2011, vol 169, p 270-281.

GIÁCOMAN, Germán. Evaluación de los aspectos hidrodinámicos de un reactor de lecho fluidificado. Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Yucatán. p. 7.

GUMY, D., et al. Solar photocatalysis for detoxification and disinfection of water: Different types of suspended and fixed TiO<sub>2</sub> catalysts study. En: Solar Energy. 2006, vol 80, p.1376-1381.

HERNÁNDEZ, Joel. Análisis de la transferencia de calor mediante la técnica Hot Wire y COMSOL Multiphysics. Trabajo de tesis Doctor en tecnología avanzada. México D.F.: Instituto Politécnico Nacional. Centro de investigación en ciencia y tecnología aplicada, 2013. 1-63 p.

HERRMANN, J. Solar photocatalytic detoxification of used waters in 'Plataforma Solar de Almeria'. En: Catalysis B, Environmental. 1997, vol 12, p. 1-16.

IBRAHIM, Dhorgham, et al.. Flow dynamics and mass transfer studies in a tubular electrochemical reactor with a mesh electrode. En: Computer & Fluids. December, 2013, vol 73, p. 97-103.

Introducción al MEF. Disponible en Internet:  
<[http://www.iit.comillas.edu/~carnicero/Resistencia/Introduccion\\_al\\_MEF.pdf](http://www.iit.comillas.edu/~carnicero/Resistencia/Introduccion_al_MEF.pdf)>

JARAMILLO, María. Estudio de factibilidad de un proceso fotoelectroquímico para la producción de hidrógeno a partir del agua asociada a la producción de petróleo. Trabajo de investigación Magíster en Ingeniería química. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería química, 2014. 19-50 p.

JARAMILLO, María, et al.. Photoelectrocatalytic hydrogen production from oilfield-produced wastewater in a filter-press reactor using TiO<sub>2</sub>-based photoanodes. En: Catalysis Today. May, 2016, vol 266, p. 17-26.

LAINFIESTA, Diego. Diseño, construcción y evaluación de un reactor flujo pistón de forma helicoidal escala. Trabajo de grado Ingeniero Químico. Guatemala: Universidad de San Carlos de Guatemala. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería química, 2009, 1-81 p.

MANCILLA, Robinson y MESA, Henry. Metodología para el manejo de aguas de producción en un campo petrolero. Trabajo de grado Ingeniero de petróleos. Bucaramanga: Universidad Industrial de Santander. Facultad de Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería de petróleos, 2012. 22-193 p.

MONTES, Richard Javier. Aplicación del programa COMSOL Multiphysics en la ingeniería mecánica. Trabajo de grado Ingeniero Mecánico. Pereira: Universidad tecnológica de Pereira. Facultad de Ingeniería mecánica, 2015. 7-160 p.

PICKETT, D.J. and WILSON, C.J.. Mass transfer in a parallel plate electrochemical cell – the effect of change of flow cross- section at the cell inlet, En: Electrochimica. 1992. Acta 27, p. 591-594.

RAMIREZ, Yazmin. Diseño, construcción y puesta en marcha de un reactor tubular fotocatalítico (UV-A) para la degradación de desechos químicos orgánicos. Trabajo de grado Químico industrial. Pereira: Universidad Tecnológica de Pereira. Facultad de tecnologías. Programa de Química Industrial, 2013. 18-116 p.

RIVERO, Eligio et al.. Numerical simulation of mass transport in a filter press type electrochemical reactor FM01-LC: Comparison of predicted and experimental mass transfer coefficient. En: Chemical Engineering Research and Design. 2012, vol 90, p. 1969-1978.

SALAZAR, Oscar y GONZÁLES, Germán. Consideración de la transferencia de masa y cantidad de movimiento en el modelamiento de un reactor tubular. Trabajo de grado Ingeniero químico. Manizales: Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ingeniería y Arquitectura. Departamento de Ingeniería química, 2004. 5-16 p.

WANG Jiade, et al.. Characterization of hydrodynamics and mass transfer in two types of tubular electrochemical reactors. En: *Electrochimica Acta*. May, 2015, vol 173, p. 698-704.

WILKES, James O.. En: *Fluid Mechanics for Chemical Engineers*. 2 ed. Department of Chemical Engineering. The University of Michigan. October, 2012. Chapter 3. 123-128 p.

WILKES, James O.. En: *Fluid Mechanics for Chemical Engineers*. 2 ed. Department of Chemical Engineering. The University of Michigan. October, 2012. Chapter 3. 154-156 p.

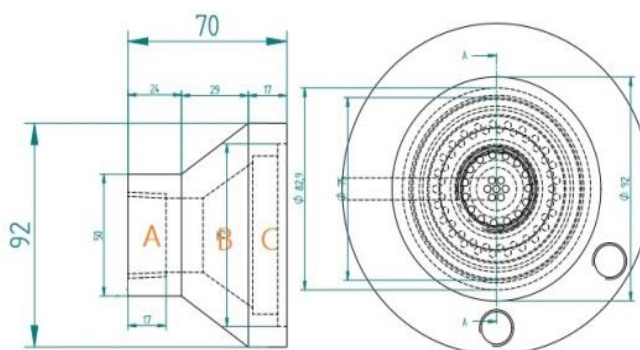
## ANEXOS

**ANEXO A.** Dimensiones del reactor UIS-GIMBA 2.0 y dominio del fluido en COMSOL Multiphysics® 5.2.

**Tabla 2.** Dimensiones del reactor UIS-GIMBA 2.0.

### Dimensiones del reactor UIS-GIMBA 2.0

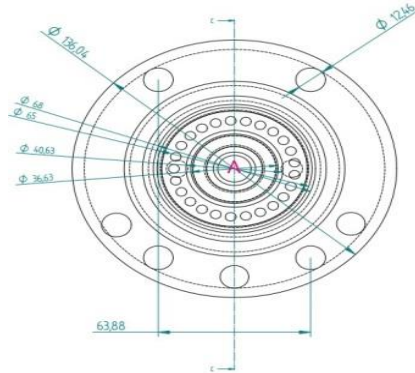
#### Cabezal de entrada



Dimensión	Valor (metros)
Sección A. Diámetro de entrada	0,05
Sección A. Longitud	0,024
Sección B. Longitud	0,029
Sección C. Diámetro interno	0,075
Sección C. Diámetro externo	0,092
Sección C. Longitud	0,017
Diámetro del tubo pyrex o acrílico	0,070
Diámetro de la malla electródica 1	0,067
Diámetro de la membrana	0,041
Diámetro de la malla electródica 2	0,024
Diámetro de los distribuidores de entrada	0,003

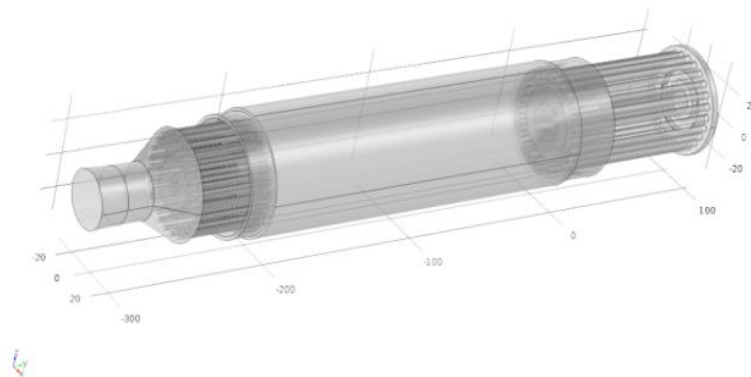
**Tabla 2.** (Continuación)

**Cabezal de salida**



Dimensión	Valor (metros)
Diámetro de los distribuidores de salida	0,0045
Diámetro del orificio central A	0,014
Cuerpo del reactor	
Longitud del tubo de pyrex o acrílico que delimita el reactor	0,25

**Figura 19.** Dominio del fluido.



**ANEXO B.** Propiedades fisicoquímicas del agua de producción.

**Tabla 3.** Propiedades fisicoquímicas del agua.

<b>Propiedades</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Color	-	NS
Conductividad a 25°C	mS/cm	0,34
Densidad	kg/m <sup>3</sup>	1077
Grasas y aceites (G&A)	mg/L	< 1,0
pH	-	7,92
Resistividad a 25°C	Ωm	29,41
Salinidad	mg/L NaCl	145,1
Sólidos totales disueltos (STD)	mg/L	294,5
Turbidez	NTU	0,35
Viscosidad	Kg/m*s	1,287x10 <sup>-3</sup>

**ANEXO C.** Ecuación de la Ley de Newton para la viscosidad, ecuación de continuidad y la ecuación de cantidad de movimiento.

*Ley de Viscosidad de Newton*

Establece que el comportamiento de la viscosidad del fluido es constante sin importar la deformación que se le aplique al mismo [24]. Esta ley se representa matemáticamente y de forma generalizada en la Ecuación 10 [47]:

$$\tau_{ij} = -\mu \left( \nabla v_i + (\nabla v_j)^+ \right) + \left( \frac{2}{3} \mu - k \right) (\nabla \cdot v_k) \delta_{ij} \quad (10)$$

*con  $i = x, y, z$   $j = x, y, z$*

Dónde,  $\tau_{ij}$  es el esfuerzo cortante por área,  $\mu$  es la viscosidad del fluido,  $\delta_{ij}$  es el tensor unitario,  $\nabla v_i$  es el tensor del gradiente de velocidad,  $(\nabla v_j)^+$  es la transpuesta del tensor gradiente de velocidad,  $\nabla \cdot v_k$  es la divergencia del vector de velocidad y  $k$  es la viscosidad dilatacional.

Sin embargo, para fluidos donde se estima una densidad constante el término  $\nabla \cdot v$  puede omitirse y para gases monoatómicos a baja densidad el término  $k$  es igual a cero. Por tanto, la Ecuación 10 se convierte en la Ecuación 11:

$$\tau_{ij} = -\mu \left( \nabla v_i + (\nabla v_j)^+ \right) + \left( \frac{2}{3} \mu \right) \delta_{ij} \quad (11)$$

*con  $i = x, y, z$   $j = x, y, z$*

*Ecuación de continuidad*

Describe la velocidad de variación respecto al tiempo de la densidad del fluido en un punto fijo en el espacio. Se obtiene al aplicar el principio de conservación de masa [48]. La Ecuación 12 representa la ecuación de continuidad usando notación vectorial en estado estacionario:

$$(\nabla \cdot \rho v_i) = 0 \quad \text{con } i = x, y, z \quad (12)$$

Dónde,  $\rho$  es la densidad del fluido y  $\nabla \cdot v$  es la divergencia del vector de velocidad.

### *Ecuación de cantidad de movimiento*

Representa matemáticamente la segunda *Ley de Newton* [27], la cual establece que las fuerzas sobre un volumen de control (CV) son igual a la razón de cambio de su cantidad de movimiento lineal, producto de su masa y velocidad [49]. Las fuerzas que intervienen sobre un CV son de tipo másico y de tipo superficial, es decir las de tipo másico actúan de manera directa en el cuerpo o en la masa del volumen del control como lo es la gravedad, la fuerza centrífuga, entre otras y las de tipo superficial, como su nombre lo indican actúan en la superficie del CV, como por ejemplo la presión [50].

Al realizar el balance al volumen de control de estudio, se obtiene como resultado una ecuación para cada coordenada. En la Ecuación 13 se muestra la expresión de cantidad de movimiento para fluidos newtonianos de forma general y en estado estacionario [48]:

$$[\nabla \cdot \rho v_i v_j] = -\nabla p - [\nabla \cdot \tau_{ij}] + \rho g_i \quad (13)$$

Con  $[\nabla \cdot \tau_{ij}] = \nabla \cdot \left( -\mu (\nabla v_i + (\nabla v_j)^+) \right) + \left( \frac{2}{3} \mu \right) \delta_{ij}$

$$\text{con } i = x, y, z \quad j = x, y, z \quad \delta = \begin{pmatrix} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{pmatrix}$$

Dónde,  $\nabla \cdot \rho v v$  es la divergencia del producto diádico,  $\nabla p$  es el gradiente del escalar  $p$ ,  $\nabla \cdot \tau$  es la divergencia del tensor  $\tau$  y  $\rho g$  es la fuerza externa sobre el fluido, en este caso el peso.

## **ANEXO D.** Características de los modelos de turbulencia.

### *1. Modelos $k$ -épsilon ( $k$ - $\varepsilon$ )*

Estos modelos agrupan la energía cinética del fluido turbulento ( $k$ ) y su velocidad de disipación ( $\varepsilon$ ). Los más conocidos son el modelo de *Shih et al. (1995)*, conocido como el  $k$ - $\varepsilon$  realizable ( $k$ - $\varepsilon$ -r) y el modelo de *Jones y Launder (1972)*, llamado como el modelo  $k$ - $\varepsilon$  estándar [27,28].

*Modelo  $k$ -épsilon realizable ( $k$ - $\varepsilon$ -r).* Este modelo difiere del  $k$ -épsilon, en que este modelo contiene una formulación distinta para analizar la viscosidad turbulenta, y en que para hallar la disipación de  $\varepsilon$ , se usa una derivación de la raíz de la fluctuación en la vorticidad. Entre sus ventajas se tiene que este modelo es especialmente preciso en flujos planos, capas límite bajo gradientes de presión extremos o separación de la misma, rotación, recirculación, y una alta curvatura de las líneas de corriente [51].

*Modelo  $k$ -épsilon estándar ( $k$ - $\varepsilon$ -).* Permite obtener una solución independiente de las escalas de longitud y velocidad turbulenta y está compuesto por dos ecuaciones. Entre sus ventajas se tiene que es un modelo simple de implementar, los cálculos convergen de manera relativamente fácil y se dan resultados coherentes para distintos regímenes de fluidos y tipos de fluidos, sin embargo no es muy preciso para flujos en rotación, con gran separación, flujos simétricos y fluidos totalmente desarrollados en tubos no circulares [51].

### *2. Modelos $k$ -omega ( $k$ - $\omega$ )*

Es más simplificado que el modelo  $k$ - $\varepsilon$ , pues establece una ecuación de menor grado de complejidad para la energía cinética turbulenta, sin embargo establece una ecuación de transporte para  $\omega$ , la cual representa la tasa específica de disipación. Además, se aborda de manera diferente el análisis de los efectos de complejidad y flujo cortante [51].

**ANEXO E.** Condiciones límites y condiciones de solución del mallado del reactor UIS- GIMBA 2.0.

**Tabla 4.** Condiciones límites

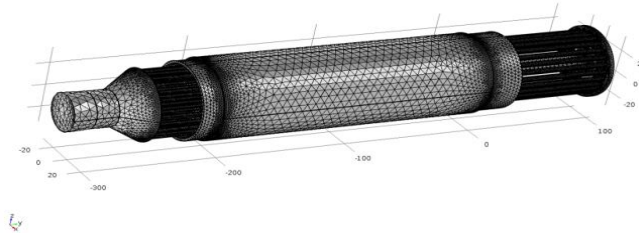
Condiciones Límites	
$z = r = R$	$\bar{v} = 0$
$z = r = -R$	$\bar{v} = 0$
$y = 0$	$\bar{v} = V_e = 0,3162 \text{ m/s}$
$y = 0,4133 \text{ m}$	$P = 0 \text{ Pa}$

Condiciones límite para las cantidades turbulentas

Energía cinética turbulenta a la entrada	$k_{en} = 1,5(0,04 V_{en})^2$
Disipación de energía cinética turbulenta en la entrada	$\varepsilon = \frac{(k_{en})^{0,5}}{H_{en}} * 0,1$

**Tabla 5.** Tabla de resultados del mallado del reactor.

**Mallado de la geometría del reactor UIS-GIMBA 2.0**



Parámetro	Valor
Dominio	1
Contornos	6
Aristas y vértices	12
Número de grados de libertad	273,498
Número de elementos de contorno	10.114
Número de elementos de aristas	336
Número de elementos de vértices	8
Calidad mínima de elementos	0,1897
Tasa de disipación turbulenta ( $\varepsilon$ )	0,00023
Energía cinética turbulenta ( $k$ )	0,00012

**ANEXO F.** Datos del perfil de velocidad lineal en la Zona 3 del reactor UIS-GIMBA 2.0.

**Tabla 6.** Valores de la velocidad a lo largo del radio del reactor UIS-GIMBA 2.0

UIS-GIMBA 2.0		UIS-GIMBA 2.0	
RADIO [m]	VELOCIDAD [m/s]	RADIO [m]	VELOCIDAD [m/s]
0,0310	0,0002	-0,0133	0,1750
0,0308	0,0419	-0,0143	0,1721
0,0299	0,0924	-0,0159	0,1666
0,0295	0,1052	-0,0180	0,1595
0,0289	0,1158	-0,0197	0,1536
0,0281	0,1265	-0,0215	0,1460
0,0269	0,1390	-0,0225	0,1397
0,0260	0,1476	-0,0235	0,1320
0,0247	0,1591	-0,0245	0,1250
0,0226	0,1688	-0,0260	0,1137
0,0201	0,1752	-0,0266	0,1100
0,0190	0,1783	-0,0277	0,0962
0,0169	0,1829	-0,0283	0,0882
0,0160	0,1839	-0,0291	0,0684
0,0141	0,1888	-0,0297	0,0544
0,0114	0,1926	-0,0305	0,0340
0,0094	0,1945	-0,0310	0,0000
0,0072	0,1962		
0,0054	0,1955		
0,0040	0,1948		
0,0026	0,1948		
0,0008	0,1945		
-0,0020	0,1925		
-0,0042	0,1907		
-0,0069	0,1862		
-0,0089	0,1830		
-0,0117	0,1785		

**ANEXO G.** Datos del perfil de velocidad lineal en la Zona 3 del reactor UIS-GIMBA 2.1.

**Tabla 7.** Valores de velocidad a lo largo del radio del reactor UIS-GIMBA 2.1.

UIS-GIMBA 2.1		UIS-GIMBA 2.1	
RADIO [m]	VELOCIDAD [m/s]	RADIO [m]	VELOCIDAD [m/s]
0,0310	0,0000	-0,0140	0,1743
0,0308	0,0335	-0,0158	0,1750
0,0302	0,0815	-0,0173	0,1759
0,0297	0,0948	-0,0201	0,1720
0,0295	0,1034	-0,0214	0,1682
0,0290	0,1116	-0,0239	0,1612
0,0275	0,1306	-0,0252	0,1545
0,0260	0,1441	-0,0265	0,1447
0,0246	0,1523	-0,0273	0,1389
0,0228	0,1614	-0,0283	0,1279
0,0215	0,1650	-0,0286	0,1225
0,0196	0,1702	-0,0290	0,1127
0,0168	0,1752	-0,0293	0,1081
0,0140	0,1763	-0,0295	0,1032
0,0108	0,1750	-0,0299	0,0928
0,0089	0,1750	-0,0302	0,0772
0,0064	0,1742	-0,0307	0,0408
0,0046	0,1742	-0,0310	0,0016
0,0026	0,1742		
0,0013	0,1742		
-0,0027	0,1743		
-0,0048	0,1742		
-0,0077	0,1743		
-0,0089	0,1743		
-0,0110	0,1742		
-0,0128	0,1743		