

**Estudio Hidrodinámico de un Reactor Fotoelectroquímico tipo Filtro Prensa
mediante Dinámica de Fluidos Computacional**

Andrés David López Contreras

Trabajo de Grado para Optar el título de Ingeniero Metalúrgico

Director

Dr. Julio Andrés Pedraza Avella

Profesor Asociado

Codirector

ing. Jeferson Oswaldo Ruiz Lizarazo

Ingeniero Metalúrgico

Universidad industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Físicoquímicas

Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales

Bucaramanga

2018

Dedicatoria

A Dios por ser el soporte y la luz que guía mis pasos para seguir adelante, todo es resultado de tu manifestación en mi vida que le da sentido a mi existencia, permitiendo que disfrute de la calidez de la familia y ayudándome a crecer como persona y profesional a través de las pruebas que me hacen aprender de mis errores, por brindarme las fuerzas y sabiduría para poder culminar esta etapa y superar las adversidades.

A mi padres y mis hermanas porque me hacen desear dar lo mejor de mí para que estén orgullosos de mí, por su esfuerzo en ayudarme a cumplir mis sueños, su paciencia, buenos consejos y amor incondicional, a Dios le pido para que estemos siempre unidos y con salud para poder retribuirles al menos un poco del amor y los esfuerzos que han depositado en mí para ser quien soy.

A toda mi familia por creer en mí y siempre desearme cosas positivas y sinceras, que definitivamente se han reflejado en mi vida y en mis metas, especialmente Andrés que me ha apoyado y aconsejado a lo largo de la vida universitaria.

A mi compañera y amor Karen Urrego por alentarme y hacerme ver siempre el lado positivo de las cosas, ayudándome a tomar siempre las mejores decisiones, por compartir sonrisas, tristezas y darme su amor incondicional.

A mis compañeros y amigos que me brindaron su amistad e hicieron mi estancia en la universidad agradable y llena de experiencias inolvidables, por compartir sus conocimientos, dificultades, alegrías y errores de los que aprendimos y superamos juntos.

Agradecimientos

Expreso mi más sincero agradecimiento a todas aquellas personas que aportaron los conocimientos y sugerencias necesarias para la realización de este proyecto.

A Dios primeramente, porque sin el nada hubiera sido posible.

Al profesor Julio Andrés Pedraza y Jeferson Ruiz por su dirección, paciencia y apoyo, por los conocimientos impartidos, que sin lugar a dudas serán de utilidad tanto para mi vida personal como profesional, por brindarme la confianza y acompañamiento indispensable para la culminación de este trabajo.

A María Inés y Lineth Sanabria, por estar pendientes de mis avances y brindarme información adicional, escuchar mis inquietudes y alentarme en la búsqueda soluciones para concluir este proyecto.

A la UIS por acogerme y brindarme una formación de calidad, así como el grupo de investigación GIMBA por prestarme sus instalaciones y sus integrantes por su amabilidad y calidez.

A mis padres y mis hermanas que me apoyaron incondicionalmente para aprender una segunda lengua y viajar para adquirir nuevas experiencias que me permitieran ser mejor persona y profesional.

Tabla de Contenido

Introducción.....	14
1. Antecedentes.....	15
2. Objetivos.....	18
Objetivo general.....	18
Objetivos específicos	18
3. Metodología experimental.....	19
3.1. Modelamiento y simulación de la hidrodinámica del reactor.....	20
3.1.1 Construcción de la geometría del reactor y dominio de estudio.....	20
3.1.2 Definición del sistema de ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica del fluido..	21
3.1.3 Simulación del dominio de estudio.....	23
3.2 Análisis y comparación de resultados	24
3.2.1 Análisis del reactor UIS-GIIMBA 1.0 posición vertical vs. horizontal.....	24
3.3 Propuesta de mejora a partir del análisis realizado	32
3.3.1 Propuesta de mejora (UIS-GIMBA 1.1).....	32
3.3.2 Análisis del dominio propuesto para el UIS-GIMBA 1.1.....	36
3.3.3 Análisis del efecto de la malla electródica.....	38

3.3.4 Diseño del reactor completo.....39

4. Conclusiones 41

5. Recomendaciones..... 42

Referencias 43

Apéndices 47

Lista de Tablas

Tabla 1. Condiciones de frontera tomadas sobre los dominios de simulación (fluido).....	22
Tabla 2. Parámetros adimensionales antes y después de las modificaciones.....	40
Tabla 3. Propiedades fisicoquímicas del agua de producción.....	49
Tabla 4. Características de mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.0.....	52
Tabla 5. Características de mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1.....	54
Tabla 6. Características de mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1 incluyendo la malla eléctrica.....	55

Lista de Figuras

Figura 1. Metodología experimental de la investigación.	19
Figura 2. Reactor fotoelectroquímico UIS_GIMBA 1.0, a) Carcaza externa, b) empaques, c) Fotoánodo, d) Distribuidores de flujo, e) Membrana de intercambio iónico, f) Cátodo.	20
Figura 3. a) corte de velocidad en la mitad, b) perfiles de velocidad a lo largo del canal de flujo, a distancias de 30, 50 y 70 mm de los distribuidores de entrada.....	25
Figura 4. Corte medio en la línea a trozos y	27
Figura 5. Líneas de flujo para el reactor UIS_GIMBA 1.0 en posición vertical.	28
Figura 6. a) corte de velocidad en la mitad del dominio y b) perfiles de velocidad a 30,50 y 70 [mm] de los distribuidores.	29
Figura 7. Corte medio en la línea trozos y	30
Figura 8. Líneas de flujo en el reactor dispuesto horizontalmente.	31
Figura 9. Arreglo de distribuidores en la entrada y salida.....	34
Figura 10. Evolución de los diseños para la entrada y salida de flujo.	35
Figura 11. a) Corte de velocidad en el centro, b) perfiles de velocidad a 30, 50 y 70 [mm] de los distribuidores de entrada.	36
Figura 12. Líneas de flujo a lo largo del dominio de estudio, b) Isosuperficie para una magnitud de velocidad de 5.4×10^{-3} [m/s].	37
Figura 13. a) Perfiles de velocidad en la mitad (sin malla electródica), b) perfiles de velocidad en la mitad (con malla electródica).	38
Figura 14. Diseño total del reactor UIS_GIMBA 1.1.	39
Figura 15. Esquema de funcionamiento para el reactor UIS_GIMBA 1.0.	47

Figura 16. Planos de las medidas utilizadas para el diseño en Comsol multiphysics ® 5.2.	47
Figura 17. Plano del arreglo de distribuidores en la sección de entrada y salida, con medidas en milímetros y diámetro de circunferencia de 3 [mm], a) Entrada, b) Salida, para el reactor UIS_GIMBA 1.0.	48
Figura 18. Mallas electrónicas, IMT-10 calibre 20 (Cold rolled).....	48
Figura 19. Volumen ocupado por el fluido sin malla electrónica para el reactor UIS_GIMBA 1.0.....	48
Figura 20. Mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.0.....	52
Figura 21. Dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1.	53
Figura 22. Mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1.....	53
Figura 23. Dominio con malla electrónica y su respectivo mallado para el reactor UIS_GIMBA 1.1.....	54
Figura 24. Mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1 con malla electrónica.	55
Figura 25. Corte de velocidad en el centro para el reactor UIS_GIMBA 1.1.	56
Figura 26. Isosuperficie con velocidad a $5,6 \times 10^{-3}$ [m/s] para el reactor UIS_GIMBA 1.1.	56
Figura 27. Líneas de flujo para el dominio con malla electrónica para el reactor UIS_GIMBA 1.1.....	57
Figura 28. Distribuidor simétrico del reactor UIS_GIMBA 1.1.....	57
Figura 29. Parte A y B del distribuidor de entrada del reactor UIS_GIMBA 1.1.	58
Figura 30. Parte A y B del distribuidor de salida del reactor UIS_GIMBA 1.1.....	58

Apéndices

Apéndice A. Esquema de operación del reactor, Dimensiones del reactor UIS_GIMBA 1.0 y dominio de simulación.....	47
Apéndice B. Propiedades fisicoquímicas del agua de producción.	49
Apéndice C. Ley de viscosidad de newton, ecuación de continuidad y cantidad de movimiento.....	49
Apéndice D. mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.0 y características de dominio.....	52
Apéndice E. Dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1 con mallado y características de malla.	53
Apéndice F. Cortes de velocidad, líneas de flujo e isosuperficie para el dominio con la malla electródica.	56
Apéndice G. Partes del distribuidor simétrico del reactor UIS_GIMBA 1.1.....	57

RESUMEN

TÍTULO: ESTUDIO HIDRODINÁMICO DE UN REACTOR FOTOELECTROQUÍMICO TIPO FILTRO PRENSA MEDIANTE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL *

AUTORES: López Contreras, Andrés David**

PALABRAS CLAVES: Hidrodinámica, dinámica de fluidos computacional (CFD), Comsol multiphysics®.

DESCRIPCIÓN: La hidrodinámica de fluidos en los reactores electroquímicos está ligada a la geometría del reactor, cambios de sección y dirección de flujo, además promotores de turbulencia y rugosidad. Durante la realización de este estudio se analizó el comportamiento hidrodinámico de un reactor de placas (UIS_GIMBA 1.0) en posición vertical frente al horizontal, que fue numéricamente simulado con el software Comsol multiphysics® 5.2 el cual utiliza el método de elementos finitos (FEM) para resolver las ecuaciones diferenciales asociadas a la dinámica de fluidos. Posterior al análisis sobre el volumen de fluido en el interior de reactor se observaron discontinuidades en el flujo, por el efecto entrada-salida y el cambio de dirección del flujo que provocan zonas estancadas y de recirculación. Estos aspectos se tomaron en consideración para proponer una nueva geometría (UIS_GIMBA 1.1), que incluyó adicionalmente el efecto de las mallas electródicas en los patrones de flujo. Una vez obtenidos los resultados se tomaron distintos conjuntos de datos para comparar los cambios en los patrones de flujo, utilizando gráficos de líneas de flujo, isosuperficies, así como cortes y perfiles de velocidad. Finalmente se empleó un número adimensional (ψ) para cuantificar los efectos entrada-salida que inicialmente generaban un mayor transporte de materia en el cambio de sección y a su vez una zona de recirculación, resultando en el desaprovechamiento de parte del volumen del reactor, con base en este parámetro fue posible observar un porcentaje de mejora 68.8% y 35,7% en el distribuidor de entrada y de salida. En consecuencia con la disminución de ψ se logró un comportamiento más homogéneo en la distribución de flujo que adicionalmente podrá ser asociado con el número adimensional de Sherwood (Sh) para el análisis de transporte de masa.

* Proyecto de Grado. Modalidad: Proyecto de Investigación.

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales.

Diretor: D. Julio Andrés Pedraza Avella. Codirector: Ing. Jeferson Oswaldo Ruiz Lizarazo.

ABSTRACT

TITLE: HYDRODYNAMIC STUDY OF A FOTOELECTROCHEMICAL REACTOR TYPE FILTER PRESS THROUGH COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS *

AUTHORS: López Contreras, Andrés David **

KEYWORDS: Hydrodynamic, computational fluid dynamics (CFD), Comsol multiphysics®.

DESCRIPTION: Hydrodynamics of fluids in electrochemical reactors is related to the geometry of the reactor, changes in section and flow direction, as well as turbulence promoters and roughness. During the realization of this study, the hydrodynamic behavior of a plate reactor (UIS_GIMBA 1.0) was analyzed vertically against horizontal, which was numerically simulated with Comsol multiphysics® software 5.2 which uses the finite element method (FEM) to solve the differential equations associated with fluid dynamics. After analyzing the volume of fluid inside the reactor, discontinuities in the flow were observed, due to the input-output effect and the change in flow direction that cause stagnant areas and recirculation. These aspects were taken into account to propose a new geometry (UIS_GIMBA 1.1), which also includes the effect of the mesh-shaped electrodes in the flow patterns. Once the results were taken into datasets to compare changes in flow patterns, flow lines, isosurfaces, as well as cuts and velocity profiles. Finally, a dimensionless number (ψ) was used to quantify the effects of the input-output that initially generated a greater transport of matter in the section change that turn a recirculation zone, wasting part of the volume of the reactor, based on this parameter it was possible to observe an improvement percentage of 68.8% and 35.7% in the input and output distributor. with the decrease of ψ more homogeneous behavior was obtained in the flow distribution that can be additionally associated with the dimensionless number of Sherwood (Sh) for mass transport analysis.

* Degree project. Modality: Research project.

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de Materiales.

Adviser: D. Julio Andrés Pedraza Avella. Coadviser: Ing. Jeferson Owaldo Ruiz Lizarazo.

Introducción

Los reactores fotoelectroquímicos tipo filtro prensa han demostrado ser una alternativa viable en el tratamiento de aguas dado que las distribuciones de corriente y potencial de las mallas electródicas son ciertamente uniformes, existiendo facilidad para la separación de productos de reacción, además de tener una geometría sencilla para su construcción. De acuerdo con lo anteriormente mencionando el grupo de investigación en minerales, biohidrometalurgia y ambiente (GIMBA), diseño y desarrolló un reactor fotoelectroquímico UIS_GIMBA 1.0 con el fin de tratar el agua asociada a la producción del petróleo mediante procesos fotoelectrocatalíticos (Mancilla y Mesa, 2012), en el cual se llevan a cabo la oxidación de compuestos orgánicos en el compartimiento anódico y en el catódico se genera simultáneamente la producción de hidrogeno como valor agregado.

Asimismo se pretende estudiar la degradación de H_2S , cuando el reactor adopta una posición horizontal, puesto que en esta disposición el reactor recibiría la mayor incidencia de la radiación solar durante el día, a diferencia de la posición vertical que presentaba el reactor inicialmente, puesto que era proporcionada por una lámpara (Jaramillo, 2014). Por lo que se espera que la hidrodinámica se vea perturbada con la modificación en su disposición, sumado a las discontinuidades de flujo encontradas en el reactor UIS_GIMBA 1.0 debidas a las perturbaciones de flujo por los cambios de sección, dirección de flujo inherentes a la geometría del reactor y las mallas electródicas (Ruiz y Sanabria, 2016; González *et al.*, 2000). A su vez estos problemas de flujo eventualmente serán una limitante para obtener los rendimientos deseados, en cuanto al transporte de materia, distribución de potencial, eficiencia de la corriente y selectividad de las reacciones (Martínez, Ramírez y Vargas, 2017; Cengel y Cimbala, 2012). Finalmente se pretende analizar el comportamiento hidrodinámico del reactor UIS_GIMBA 1.0 frente al dispuesto en

posición horizontal, dado que la presencia de discontinuidades de flujo, como zonas estancadas y de recirculación, limitan el transporte de materia hacia los electrodos y por tanto se desaprovecharía parte del volumen de reactor, debido a que no existiría renovación del fluido.

En este estudio se utilizará el método de CFD en régimen laminar, para con ello proponer una nueva geometría UIS_GIMBA 1.1 que considere las discontinuidades de flujo encontradas en el UIS_GIMBA 1.0, así como el efecto en la hidrodinámica de la malla electródica, a fin de garantizar una distribución del fluido más uniforme, lo que se refleja en el aumento de la eficiencia global del proceso al aumentar el transporte uniforme de materia.

1. Antecedentes

Investigaciones plantean la importancia del comportamiento hidrodinámico y su influencia en el diseño correcto de un reactor, si bien el flujo del fluido no solo controla la magnitud y la uniformidad del transporte de materia, sino que de igual manera tiene gran relevancia en aspectos como (Frías, 2004; Walsh, 1999):

- La capacidad de separación del producto y retirada de gases, a fin de evitar que las burbujas de gas o productos de reacción cubran los electrodos, limitando el área activa.
- El diseño de los distribuidores que permiten introducir el electrolito y retirar los productos de reacción.
- En el control de la composición y temperatura que favorezcan el funcionamiento según lo especificado.
- La caída de presión, que determinará los requerimientos de bombeo, así como el diseño de equipamiento adicional, válvulas de escape de gases y promotores de turbulencia que eventualmente generan caídas de presión adicionales.

- Distribución del potencial y densidades de corriente no uniformes que favorecen la formación de reacciones secundarias afectando la selectividad y dando lugar a productos indeseados, que pueden contaminar los electrodos y por tanto dificultando la cinética de reacción.

Algunas de las técnicas para la caracterización del comportamiento hidrodinámico son: el estudio de curvas de distribución de tiempos de residencia (RTD), métodos de visualización con el uso de trazadores, basados en el estudio del transporte global de materia, flujómetros y Dinámica de fluidos computacional (CFD), que permiten obtener una visión general de los diversos aspectos que intervienen en las condiciones hidrodinámicas (Cengel y Cimbala, 2012; Frías, 2004).

Durante la realización de este proyecto se utilizará el método de CFD, para identificar las discontinuidades de flujo y proponer una geometría como solución a los problemas de flujo en el reactor en estudio, puesto que posibilita (Hernández, 2013; Modulo CFD. 2018):

- Resolver las ecuaciones matemáticas involucradas en el flujo de fluidos, que no tienen solución para las condiciones estudiadas.
- Analizar el comportamiento del fluido, mediante la presentación de datos, a partir de un conjunto de datos que puede ser representado 1D, 2D y 3D.
- Disminuir costos y tiempos de investigación, posibilitando la adaptación de reactor a nuevos diseños y condiciones de operación.

Estudios realizados han validado los resultados obtenidos por CFD en régimen laminar para reactores filtro prensa, puesto que el fluido fluye a través de pasajes estrechos y a bajas velocidades, puesto el flujo requiere un movimiento ordenado idealmente y uniforme sobre los electrodos para garantizar un transporte de materia homogéneo, obteniendo un comportamiento en

el que existe un avance global de fluido (Walsh, 1999). Frías *et al.* (2011), realizaron la validación experimental de la simulación por CFD con las curvas de distribución de tiempos de residencia (RTD) para la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes bajo la hipótesis de flujo laminar en lugar de utilizar un modelo turbulento para el rango de números de Reynolds (Re) entre 129 y 414, en donde asimismo se realizaron modificaciones en las unidades de entrada y salida, logrando distribuciones uniformes de velocidad de flujo, a su vez a partir de las curvas RTD propusieron un modelo para la interacción de las zonas dinámicas y estáticas, las cuales tendrían un comportamiento de flujo pistón con dispersión axial (Frías *et al.*, 2011).

Estudios similares han sido llevados a cabo en el grupo GIMBA, en donde se obtuvo una correlación adimensional experimental para el transporte de materia $Sh=7.92Re^{0.309}Sc^{0.33}$, con número de Sherwood (Sh) y Schmidt (Sc), para un reactor tipo filtro-prensa con Re entre 100 y 800 (Jaramillo, 2014), lo cual se ajusta al valor teórico propuesto por Pickett (1977) igual a 0,3 para flujo laminar (Pickett, 1977). De igual manera Vázquez *et al.* (2010), Obtuvieron valores de coeficientes de transporte de masa en el régimen laminar ($150 < Re < 550$) de forma experimental, para posteriormente compararlo con el teórico obtenido por la sustitución de la velocidad lineal del electrolito de los patrones de flujo por CFD en la correlación de transporte de masa, obteniendo de esta manera los coeficientes con un error relativo entre 5% y 29% (Vázquez, Álvarez, Sierra, Ponce de León y Walsh, 2010). Por lo tanto la hipótesis de flujo laminar para la simulación por CFD se ha considerado como una buena aproximación de lo que ocurre en el sistema en condiciones reales, además de que ha sido posible identificar zonas estancadas y de recirculación, donde se desaprovecha parte del volumen del reactor, con ello se espera dar solución a los problemas de flujo, garantizando el avance global del fluido y el transporte de materia uniforme a los electrodos (Frías, 2004; Frías *et al.* 2011; Rivero, Rivera, Cruz, Mayen y González, 2012).

2. Objetivos

Objetivo general

Identificar y resolver las discontinuidades de flujo derivados del reactor UIS_GIMBA 1.0, utilizando conceptos de hidrodinámica y fenómenos de transporte mediante dinámica de fluidos computacional.

Objetivos específicos

- Analizar el comportamiento hidrodinámico del reactor filtro prensa UIS_GIMBA 1.0, debidos a su geometría y el cambio de posición del reactor, utilizando dinámica de fluidos computacional.
- Proponer una nueva geometría para el reactor UIS_GIMBA 1.1, basada en el estudio de problemas encontrados en el reactor UIS-GIMBA 1.0 cuando el reactor adopta una posición horizontal mediante CFD.
- Evaluar el diseño propuesto del reactor fotoelectroquímico tipo filtro prensa UIS_GIMBA 1.1 involucrando las mallas electrónicas mediante los conjuntos de datos obtenidos con CFD.

3. Metodología experimental

El esquema mostrado en la Fig. 1 representa las etapas y actividades seguidas para la realización del presente trabajo.

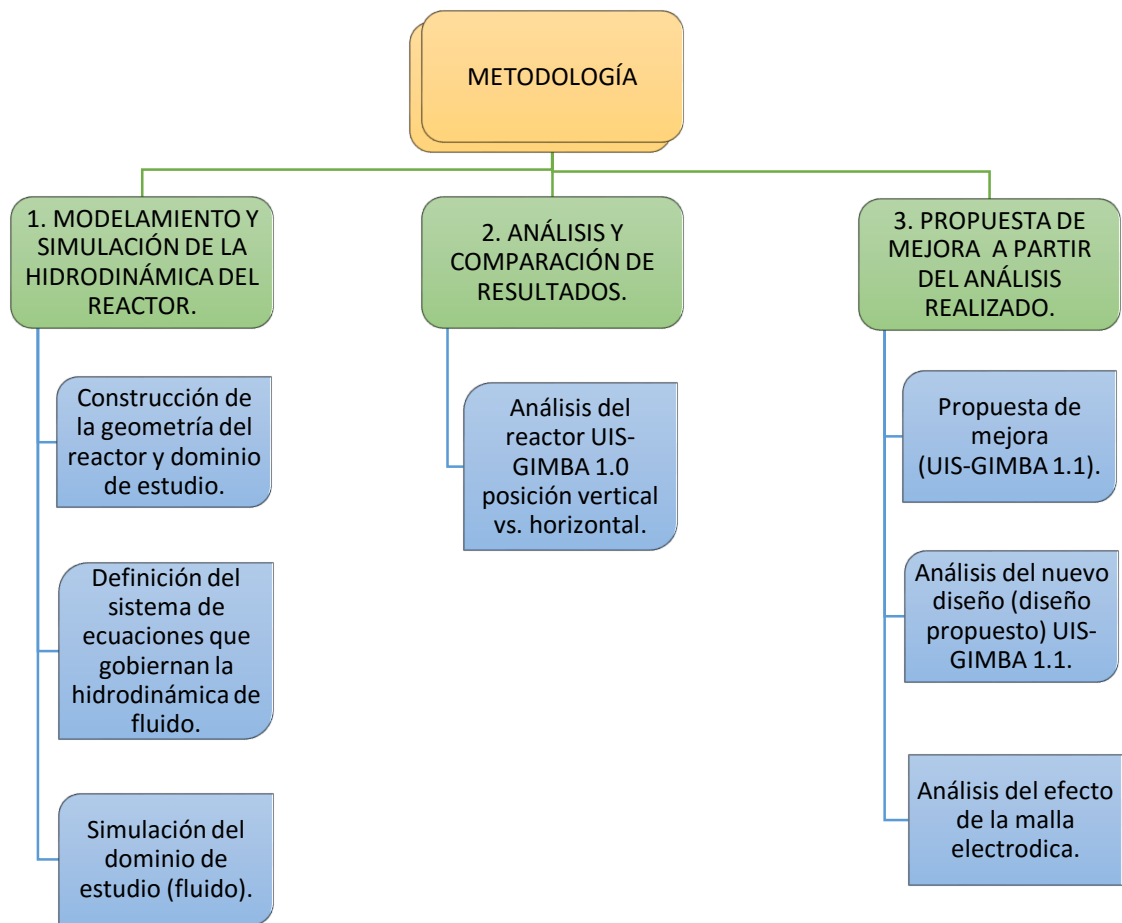


Figura 1. Metodología experimental de la investigación.

3.1. Modelamiento y simulación de la hidrodinámica del reactor

3.1.1 Construcción de la geometría del reactor y dominio de estudio. Se realizó la construcción de la geometría en Comsol multiphysics® de acuerdo con la Fig. 2, donde se diseñó cada componente individual del reactor, posteriormente se ensambló utilizando las operaciones geométricas transformadas (copiar, mover, rotar, espejo), booleanas y particiones (unir, diferencia) para vincular las piezas y obtener el dominio de estudio (fluido), además de operaciones virtuales (formar dominios compuestos, fusionar aristas, fusionar caras).

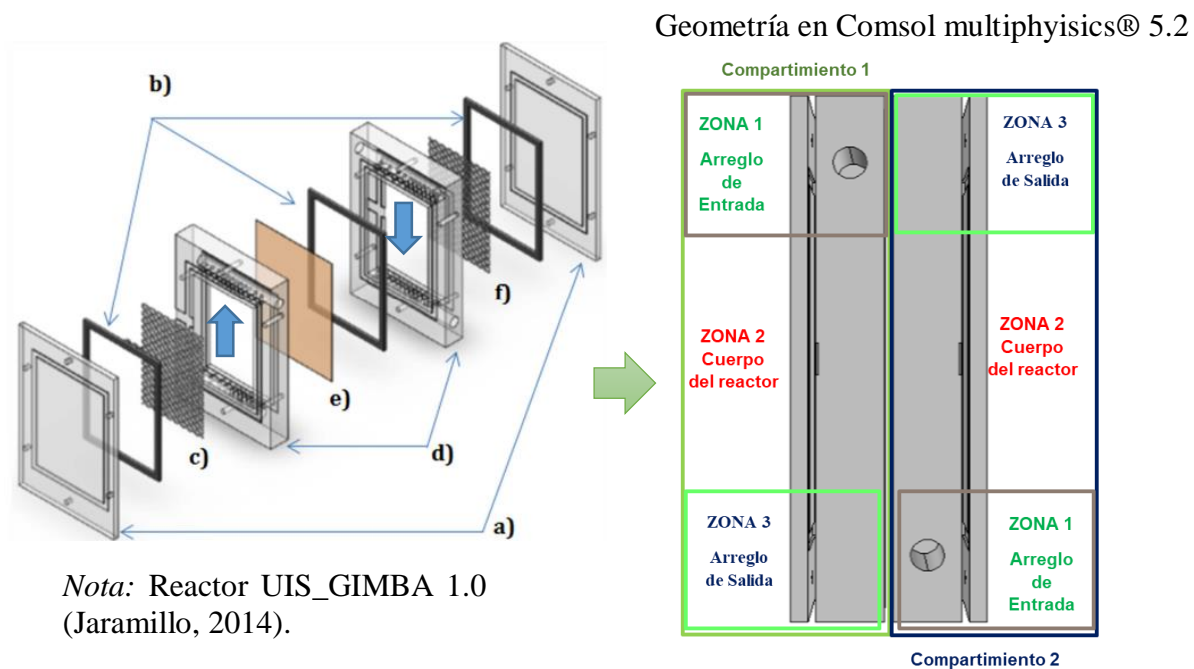


Figura 2. Reactor fotoelectroquímico UIS_GIMBA 1.0, a) Carcaza externa, b) empaques, c) Fotoánodo, d) Distribuidores de flujo, e) Membrana de intercambio iónico, f) Cátodo.

El reactor consta principalmente de dos compartimientos simétricos separados, los cuales se encuentran divididos en tres zonas, y en donde además el flujo atraviesa en forma ascendente en una de las secciones y al otro de manera descendente. A continuación se describe cada zona:

Zona 1. Distribuidor de entrada: Sección con 24 distribuidores de 3 [mm] de diámetro, que distribuyen el flujo al interior del compartimiento, buscando reducir los flujos preferenciales.

Zona 2. Compartimiento de reacción: Lugar donde se encuentran ubicadas las mallas electrónicas, y en consecuencia allí se llevan a cabo las reacciones.

Zona 3. Distribuidor de salida: Sección con 22 distribuidores de 3 [mm] de diámetro, que canalizan y orientan el fluido que sale del reactor permitiendo su rápida y homogénea evacuación.

El esquema de operación del reactor UIS_GIMBA 1.0 y las medidas utilizadas para su construcción se muestran en el anexo A, asimismo el dominio de fluido, el cual fue obtenido mediante la operación geométrica de diferencia y por lo tanto se garantizan dimensiones exactas.

3.1.2 Definición del sistema de ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica del fluido.

Inicialmente para la realización de este proyecto se incluyeron las propiedades fisicoquímicas del fluido requeridas por el software como la densidad (ρ) y la viscosidad (μ), para de esta manera poder determinar las ecuaciones aplicadas al sistema. Para este estudio, el fluido analizado fueron las aguas asociadas a la producción del petróleo (Mancilla y Mesa, 2012), con una densidad de 1,077 [kg/m³] y una viscosidad de $1,287 \cdot 10^{-3}$ [kg/m.s] (Rivero *et al.*, 2012), (anexo B).

Este fluido es clasificado como newtoniano, dado que su viscosidad permanece constante sin importar el esfuerzo aplicado y la deformación sufrida por lo tanto se rige bajo la ley de viscosidad de Newton (Munson y Young, 2010), (anexo C).

La densidad del fluido se consideró como constante, debido a que es un fluido incompresible para la temperatura y velocidad de operación, aspecto que viene dado por el número adimensional de mach (Ma) que en general para líquidos en aplicaciones ingenieriles ($Ma < 0.3$), en consecuencia

para flujos incompresibles la ecuación de continuidad es $(\nabla \cdot \rho \vec{v}) = 0$ (ver ecuación de continuidad en anexo C) (Bird, Stewart y Lightfoot, 2006; Modulo CFD, 2018).

Además se tomaron las siguientes consideraciones: Estado estacionario, puesto que se consideró que el sistema llega a un punto en el cual la magnitud de velocidad no depende del tiempo y por lo tanto no hay acumulación de cantidad de movimiento (Bird *et al.*, 2006). Igualmente se consideró flujo isotérmico, no reactivo, incompresible y en régimen laminar, en donde el Re es ligeramente diferente cuando se incluye la malla, debido a que el área que ocupa la malla disminuye la sección transversal en el compartimiento de reacción. Seguidamente se establecieron las siguientes condiciones de frontera.

Tabla 1. Condiciones de frontera tomadas sobre los dominios de simulación (fluido).

- Condición de entrada: v_i [m/s].

Razón de flujo Q [L/min]	Velocidad Promedio de entrada v_i [m/s]	Velocidad Promedio en el compartimiento v_i [m/s]		Numero de Reynolds en el compartimiento interior $Re = \frac{v_i \rho D_h}{\mu}$	
		Sin malla electródica	Con malla electródica	Sin malla electródica	Con malla electródica
1,00	0,2	0,012	0,0125	309,9	313,3

$D_h = \frac{2AB}{A+B}$; D_h es el diámetro hidráulico, A y B son la altura y el ancho en metros del cuerpo del reactor respectivamente.

- Condición de Salida: Presión = 0 [atm].
- Condición de no deslizamiento.

Posterior a la especificación de las propiedades fisicoquímicas y a las condiciones de frontera, las ecuaciones que gobiernan la hidrodinámica de fluidos y que se ajustan a nuestras consideraciones son la ecuación de continuidad para fluidos incompresibles en estado estacionario (1) y la de Navier-Stokes (2) que puede ser vista como la segunda ley de Newton para los fluidos o de cantidad de movimiento (ver ecuación de cantidad de movimiento en el anexo C).

$$(1) \quad (\nabla \cdot v) = 0$$

$$(2) \quad \underbrace{[\nabla \cdot \rho v_i v_j]}_{\mathbf{a}} = \underbrace{-\nabla \cdot p}_{\mathbf{b}} - \underbrace{\left[\nabla \cdot \left(-\mu (\nabla v_i + (\nabla v_j)^+) + (\rho v_i v_j) \right) \right]}_{\mathbf{c}} + \underbrace{\rho g_i}_{\mathbf{d}}$$

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

Estas ecuaciones son consideradas en forma conservativa dado que al lado izquierdo poseen el símbolo de divergencia (∇), siendo estas las más sencillas de trabajar a nivel computacional puesto que se pueden expresar como vectores columna, llamados vectores de flujo. Los diferentes términos corresponden: **(a)** las fuerzas inerciales (por el movimiento global del fluido, transporte por convección), **(b)** fuerzas debido a las diferencias de presión, **(c)** fuerzas viscosas (por transporte molecular) y **(d)** las fuerzas externas aplicadas sobre el fluido para el caso de estudio el peso (Bird *et al.*, 2006; Modulo CFD, 2018).

3.1.3 Simulación del dominio de estudio. Comsol multiphysics® se encarga de encontrar un vector solución resolviendo las ecuaciones diferenciales parciales (1) y (2) que describen la dinámica de fluidos, mediante el método de elementos finitos (FEM), que es un procedimiento aplicado a elementos continuos y que consiste en la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales aproximándolo a un problema con un número finito de variables desconocidas,

mediante la discretización del elemento, es decir dividiendo el sistema en el número de elementos cuyo comportamiento se especifica por un número finito de parámetros (Zienkiewicz, 2007).

Se utilizó el módulo de flujo laminar en estado estacionario sobre el dominio de estudio, además se incluyeron las consideraciones y condiciones límite mencionadas para posteriormente, generar un mallado sobre el dominio, que consiste en la subdivisión de este en un conjunto de elementos o sub-dominios, asociados por un punto llamado nodo, sobre el cual serán evaluadas el sistema de ecuaciones, por lo tanto entre mayor sea el número de nodos mayor será la exactitud de la solución obtenida, de igual manera con un tamaño de elemento menor (malla refinada) se obtienen un mayor número de nodos, sin embargo esto no es siempre conveniente en términos de tiempo para obtener la solución, por lo que en este trabajo se utilizó un mallado normal, con lo que se garantiza la obtención de la solución con una exactitud aceptable y un tiempo computacional racional de estudio (ver dominio mallado en el anexo D) (Frei, 2013; Frei, 2015).

3.2 Análisis y comparación de resultados

3.2.1 Análisis del reactor UIS-GIIMBA 1.0 posición vertical vs. horizontal. Se utilizaron las siguientes formas de mostrar la información, una de ellas es mediante la obtención de cortes de velocidad, las cuales muestran un plano y para cada punto que lo forma se indica una magnitud de velocidad asociada con una tonalidad representada en una paleta de colores, donde por convención el color azul indica menor velocidad y el rojo mayor magnitud de la misma, también se obtuvieron líneas como conjunto de datos y a partir de estas obtener la magnitud de velocidad de cada partícula y representarla como gráfica de velocidad vs. posición llamados perfiles de flujo.

Adicionalmente en este estudio se utilizarán las líneas de flujo, que siguen la trayectoria de un número de partículas a través del dominio de estudio, y mediante un esquema de colores es posible

saber los cambios de velocidad que el elemento experimenta en todo el recorrido a través del dominio.

3.2.1.1 Reactor UIS-GIMBA 1.0 en posición vertical. Los conjuntos de datos en la Fig. 3, corresponden al corte de velocidad y perfiles de flujo del reactor a lo largo de la mitad del compartimiento de reacción, cuando el reactor está en posición vertical y el flujo es ascendente y por tanto en contra de la gravedad.

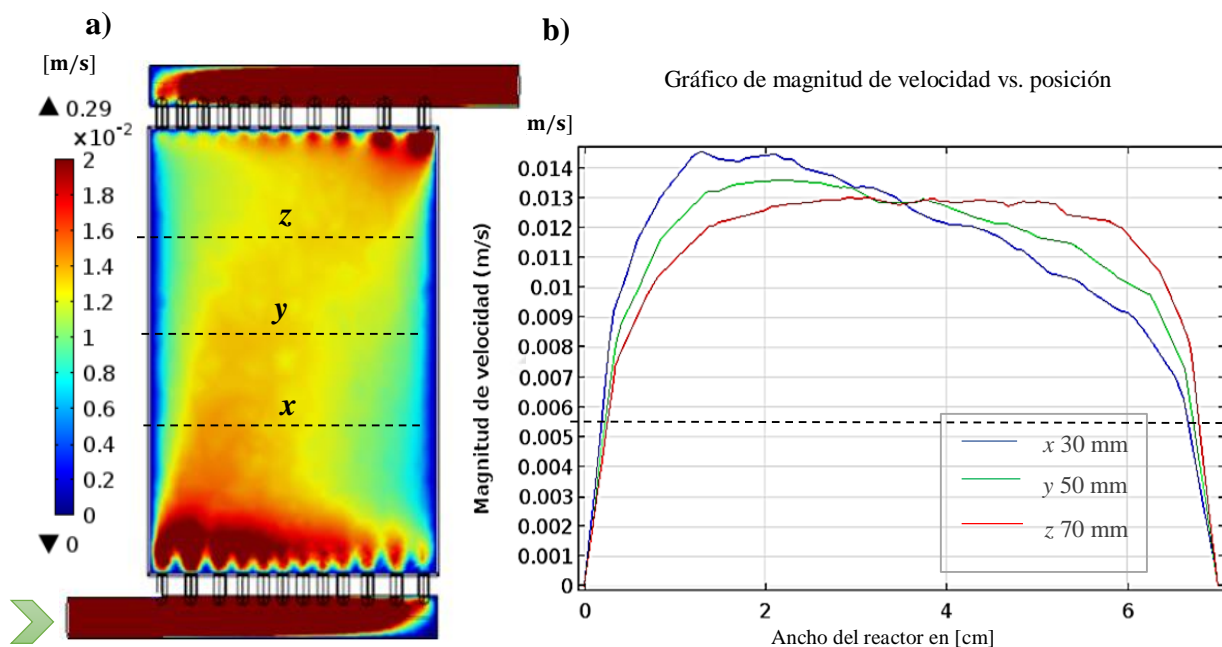


Figura 3. a) corte de velocidad en la mitad, b) perfiles de velocidad a lo largo del canal de flujo, a distancias de 30, 50 y 70 mm de los distribuidores de entrada.

En la Fig. 3a se puede observar que el flujo no avanza de manera totalmente uniforme, sino más bien tiende a curvarse hacia la derecha, sin embargo no se observan zonas estancadas indicadas por el color azul, con excepción de las regiones adyacentes a las paredes del compartimiento de reacción debidas a la condición de no deslizamiento que implica que la magnitud de velocidad en las paredes es de cero, retrasando las capas de fluido adyacentes y dando

lugar zonas de baja velocidad, sin embargo existe un movimiento global del fluido en el compartimiento central en el plano medio de estudio.

Inicialmente el fluido entraba desde la izquierda y debido a los distribuidores el fluido se dispersa saliendo a elevadas velocidades superiores $1,6 \times 10^{-2}$ [m/s] indicado por el color rojo, sin embargo esta velocidad no se mantiene, si no que disminuye a medida que llena el compartimiento y avanza hacia los distribuidores de salida, con magnitudes de velocidad entre $0,7 \times 10^{-2}$ y $1,4 \times 10^{-2}$ [m/s] mostrado con un color amarillo en la mayor parte de la sección, asimismo al acercarse a la salida aumenta la velocidad mayor a $1,6 \times 10^{-2}$ [m/s] al atravesar secciones más pequeñas principalmente en la parte superior derecha, mientras que en la superior izquierda debido a que concentra un mayor número de distribuidores la velocidad será más baja, puesto que el fluido tenderá a ir donde la presión disminuye y esto ocurre donde la sección transversal para el paso de fluido es mayor, por lo que en esta zona se muestra una tonalidad con velocidades entre $0,6 \times 10^{-2}$ y $1,2 \times 10^{-2}$ [m/s].

En (a) se seleccionaron 3 conjuntos de datos ubicados a 30, 50 y 70 [mm] desde la entrada de los distribuidores, los cuales se muestran en la Fig. 3b como perfiles de velocidad, donde cada punto que pertenece a la línea a trazos tiene asociado una magnitud de velocidad, estos comprueban el flujo preferencial en el compartimiento de reacción, puesto que hay mayor velocidad en una sección que no es la central y esta no se mantiene a lo largo del compartimiento, como se muestra en la curva azul a 30 [mm] de la entrada, sin embargo el perfil de velocidad representado por la curva roja, muestra un perfil parabólico lo que es acorde con la literatura.

En relación a las zonas muertas zonas muertas, para nuestro estudio utilizaremos lo definido por Frías *et al.* (2004), para zonas estancadas, que serán aquellas en las cuales el campo de velocidad permanece debajo del 45% de la magnitud lineal de velocidad para el correspondiente Re , es otras palabras el número de Reynolds del compartimiento central involucra una velocidad promedio, entonces los elementos moviéndose bajo el 45% de esta se consideraran como volumen muerto.

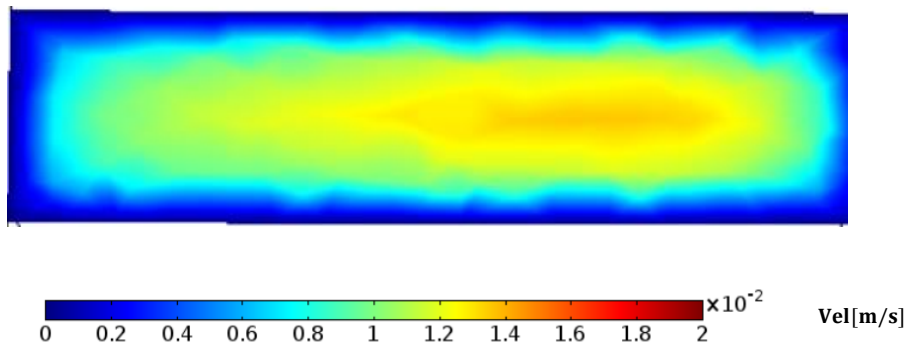


Figura 4. Corte medio en la línea a trozos y.

En síntesis para el caudal utilizado, la velocidad promedio en el compartimiento de reacción será aproximadamente 0.012 [m/s] como se mencionó en la tabla 1. Bajo el criterio anterior si la velocidad es inferior a 5.4×10^{-3} [m/s] se considerara una zona estancada, por lo tanto para poder cuantificar las zonas estancadas, se realizó un corte en la mitad (y) como muestra la Fig. 4 y del conjunto de datos se determinó que el 25,13 % de las magnitudes de velocidad se encontraban por debajo del criterio.

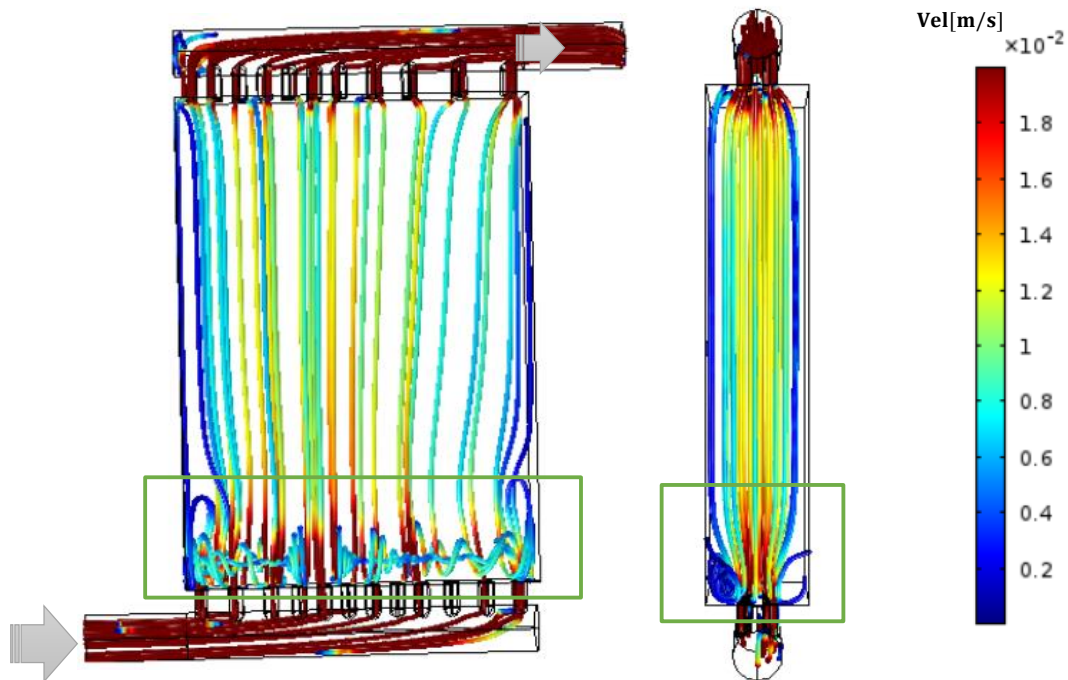


Figura 5. Líneas de flujo para el reactor UIS_GIMBA 1.0 en posición vertical.

En la Fig. 5 se muestran las trayectorias seguidas por 45 partículas y los cambios de velocidad sufridos, representados por un rango de colores como señala su respectiva paleta de tonalidades, por lo tanto igualmente el fluido ingresa desde la parte inferior y se distribuye al interior del compartimiento, no obstante el cambio de sección transversal da lugar una zona de recirculación de flujo como ilustra el cuadro verde, generando un mayor transporte de materia en la zona inicial, asimismo se observa que las partículas avanzan cerca de las paredes con bajas velocidades, por tanto transporte por convección hacia las paredes es bajo indicado con un color azul oscuro y velocidades menores a $0,54 \times 10^{-2}$ [m/s], esto es debido a que el flujo va preferencialmente por la zona central donde se ubican los distribuidores (Levenspiel y Bischoff, 1963; Belendez, 1992; Arenas, 2010).

3.2.1.2 Reactor UIS-GIMBA 1.0 en posición horizontal. De igual manera que el estudio anterior se procedió a simular el comportamiento hidrodinámico del fluido cuando el reactor se encuentra en posición horizontal, que en efecto es la disposición que se piensa adoptar para la realización de este proyecto, para esta posición los dos compartimientos presentaran los mismos patrones de flujo visto que son simétricos y por tanto se realizará el análisis sobre uno solo.

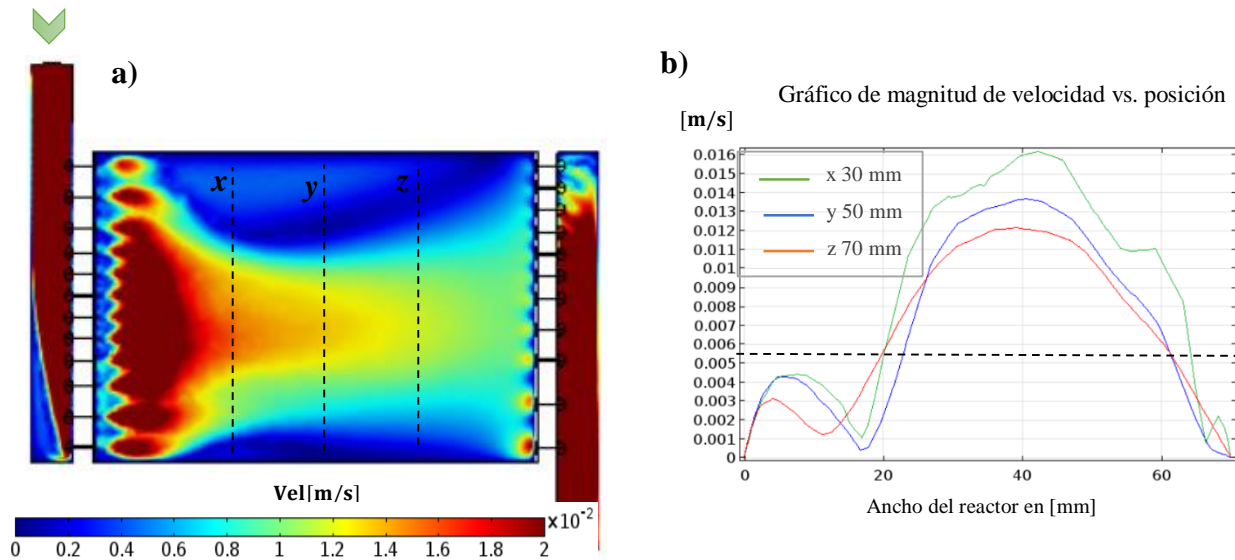


Figura 6. a) Corte de velocidad en la mitad del dominio y b) Perfiles de velocidad a 30,50 y 70 [mm] de los distribuidores.

Cuando el reactor adopta una posición horizontal el patrón de flujo es menos homogéneo como se muestran en la Fig. 6, dado que el fluido ingresa con una cantidad de movimiento en la dirección de entrada, por tanto el flujo tiende a continuar su trayectoria hasta que encuentre una fuerza que se oponga (Bird *et al*, 2006), en este caso debido al cambio brusco de dirección el flujo se orienta hacia la pared, como se ilustra en la parte inferior de la Fig. 6a, a su vez ingresa gran parte del flujo por el centro debido a que hay un mayor número de distribuidores, mostrado con tonalidad roja correspondientes de velocidades superiores a $1,7 \times 10^{-2}$ [m/s], el cual avanza hacia la salida dispersándose y disminuyendo su velocidad a medida que llena la cavidad cambiando con velocidades $0,8 \times 10^{-2}$ y $1,2 \times 10^{-2}$ [m/s], asimismo debido a que los conductos de salida están

concentrados en la parte superior derecha de la Fig. 6a, el fluido tendera ligeramente a ir esa dirección, favorecida por la diferencia de presión de mayor a menor dada por el área en la salida de esta zona, mientras que en la parte inferior derecha de la figura se presenta un ligero aumento de velocidad ya que el fluido debe pasar por un menor área de flujo (Arenas, 2010).

Se puede observar que este flujo preferencial tiene asociado zonas de baja velocidad inferior a 0.54×10^{-2} [m/s] indicadas por el color azul oscuro en gran parte del compartimiento, las cuales no se pueden atribuir únicamente a la condición de no deslizamiento, sino que además pueden estar relacionado con zonas de recirculación de flujo debido a los gradientes de velocidad de flujo, puesto que el color puede cambiar en un tramo corto en el centro, lo que no se observaba cuando el reactor estaba dispuesto verticalmente.

En la Fig. 6b se observa que las mayores velocidad están concentradas en una sección por lo que no se observa un perfil parabólico, a su vez de acuerdo con el criterio de volumen estancado expuesto anteriormente, para zonas que están por debajo del 45% de la velocidad promedio en la sección de estudio, se indica la magnitud como la línea a trozos y por lo tanto se consideran como zonas estáticas aquellas por debajo de 5.4×10^{-3} , las cuales ocupan gran parte del volumen del reactor, aspecto que se puede confrontar con la Fig. 6a, por otra parte se realizó un corte en la línea a trozos (y) se obtuvo lo siguiente.

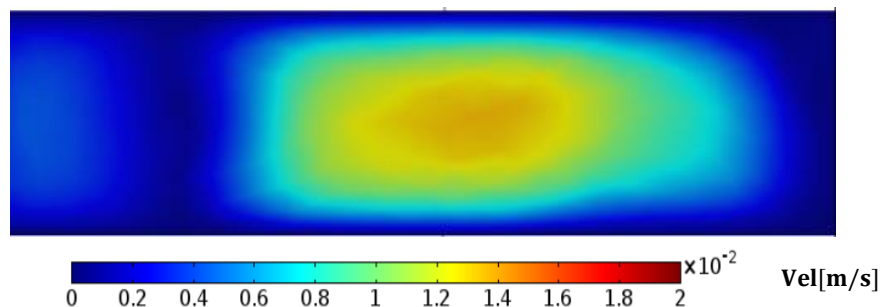


Figura 7. Corte medio en la línea trozos y.

Se determinó partir del conjunto de datos tomado de la Fig. 7 que el 66,1% de las magnitudes de velocidad estaban por debajo del criterio,

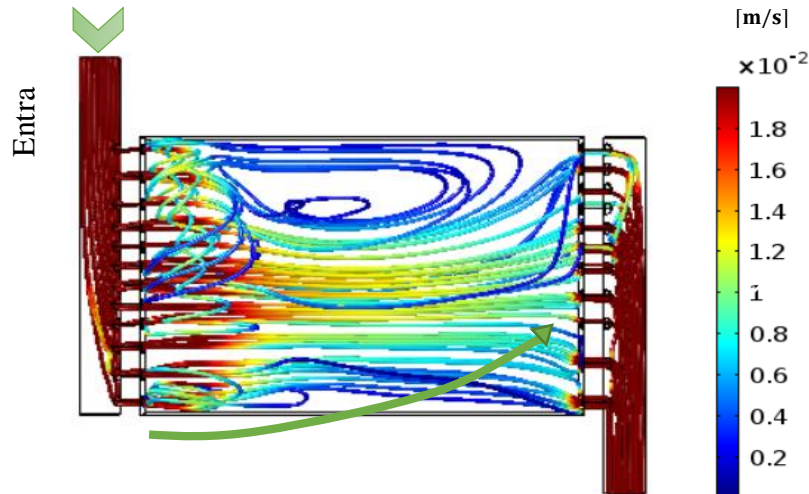


Figura 8. Líneas de flujo en el reactor dispuesto horizontalmente.

Los patrones de flujo mostrados en la Fig. 8, concentran la mayor parte de trayectorias en la sección de preferencia de flujo, donde el fluido presenta las mayores magnitudes de velocidad indicadas por el color rojo, cambiando de tonalidad a medida que avanza hacia los distribuidores de salida, sin embargo debido a su disposición se favorece un cambio de dirección en el flujo tal como señala la flecha verde formando una trayectoria de flujo cerrada, retornando el fluido y provocando zonas de recirculación en la parte superior de la figura y la sección próxima a los distribuidores de entrada, comportamiento que limita el flujo de volúmenes de fluido hacia la salida, debido a que este debería ser renovado continuamente, sin embargo se generan zonas de acumulación de flujo mostradas como zonas de bajas velocidades inferiores a 0.54×10^{-2} [m/s] con tonalidad azul oscuro y que en consecuencia disminuye la eficiencia global del proceso.

3.3 Propuesta de mejora a partir del análisis realizado

3.3.1 Propuesta de mejora (UIS-GIMBA 1.1). De acuerdo con los razonamientos realizados y análisis de resultados en la sección 3.2, con el fin de eliminar las discontinuidades en el flujo presentes en el reactor UIS_GIMBA 1.0 en posición horizontal, se realizaron modificaciones en la geometría del reactor con el propósito de mejorar la distribución de fluido en el compartimiento de reacción, de tal forma que el avance sea homogéneo (Frías, 2004).

Es evidente que la zona de recirculación después de los distribuidores de entrada es un comportamiento que favorece el transporte de materia por convección, sin embargo esto solo tiene lugar en la sección inicial, generando una distribución no uniforme de flujo que solo se normaliza a medida que se desarrolla el flujo, asimismo al aproximarse a la salida se adopta la forma del arreglo de distribuidores distorsionando el flujo nuevamente, por lo tanto es necesario minimizar este efecto entrada/salida.

Frías-Ferrer (2004) propuso un parámetro adimensional ψ , para cuantificar el efecto entrada/salida en el diseño del reactor, el cual considera el arreglo geométrico de los distribuidores, y aspectos como su diámetro y el área libre que existe en el distribuidor para el paso del fluido bien sea al interior o desde el hacia la salida, pese a que se calcule a la entrada o la salida.

$$\psi = \frac{\gamma}{\frac{L}{D_h} \lambda \zeta} \quad (3)$$

La ecuación (3) es la expresión para el parámetro ψ , en donde L es la longitud del compartimiento de reacción, D_h es el diámetro hidráulico en dicha zona, γ es la relación de aspecto para un reactor filtro prensa, la cual está definida por:

$$\gamma = \frac{A}{B} \quad (4)$$

En donde A es la altura y B el ancho del compartimento.

El parámetro λ está relacionado con la disposición geométrica de los distribuidores y ζ hace referencia al área libre de flujo, definidos como se muestra en (5) y (6).

$$\lambda = \frac{n_d n_f}{\gamma} \quad (5)$$

$$\zeta = \frac{\sum Area_{distribuidores}}{Area_{Transversal}} = \frac{n_d (\pi * D^2 / 4)}{AB} \quad (6)$$

Siendo n_d el número de distribuidores, n_f el número de filas y D el diámetro de cada distribuidor.

Regímenes de flujo muy influenciados por el efecto entrada/salida, implican valores elevados de ψ , mientras que un valor bajo estaría asociado con un comportamiento ideal, en el que hay avance del flujo de manera uniforme por toda la sección transversal (Frías, 2004).

En relación con los planteamientos anteriores, para disminuir este efecto entrada/salida y evitar las corrientes de alta presión que generan dispersión del flujo, se requiere una disminución en el parámetro ψ , sin embargo no se pretende modificar el tamaño de la malla electródica, por lo tanto L y AB permanecerían sin modificaciones, por ello se plantea el incremento de ζ (área libre de flujo) y λ aumentando n_d , $Area_{distribuidores}$ y n_f , de tal manera que la entrada de flujo no esté ubicada solo en la zona central, sino que los distribuidores estén dispuestos en el margen de la sección transversal, tal como un reactor ideal de placas en el cual su entrada de flujo es su sección transversal total, por lo que no habrían conductos que den lugar a corrientes de chorro.

Con estos razonamientos se planteó una nueva disposición geométrica para los distribuidores de entrada y salida, tal como se muestra en la Fig. 9.

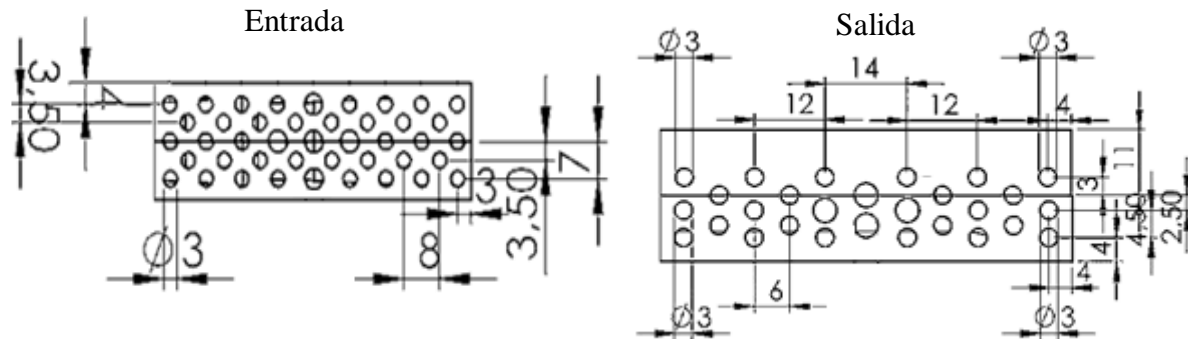


Figura 9. Arreglo de distribuidores en la entrada y salida.

La disposición de los distribuidores de entrada cuenta con 43 orificios de 3 [mm] mientras que el de salida cuenta con 28 de 3 [mm]. Adicionalmente para su diseño se tuvieron en cuenta dos aspectos, el primero fue mantener una relación en el área total de entrada de 5 a 3 con respecto a la total de salida, con el fin de garantizar el llenado total del reactor (Ruiz y Sanabria, 2016; Frías, 2004). Por otra parte se dejó una sección vacía en el arreglo de salida debido a que el proceso involucra la producción de gases como el hidrogeno, oxígeno y dióxido de carbono, por lo que esta área se pretende destinar para acumular los productos gaseosos en esta sección para su posterior purga mediante un sistema de salida de gases.

Para proponer un nuevo diseño se partió desde modificaciones en el dominio de simulación, puesto que si se diseñaba inicialmente el reactor y a partir de este se obtenía el dominio, y si este no cumplía con lo esperado se desperdiciaría tiempo en la planificación tanto del dominio como del reactor, por consiguiente se evaluó una geometría y cuando con esta se obtuvieron resultados

favorables a partir de ella se diseñó el reactor final. Con base en lo anterior se realizaron los siguientes cambios.

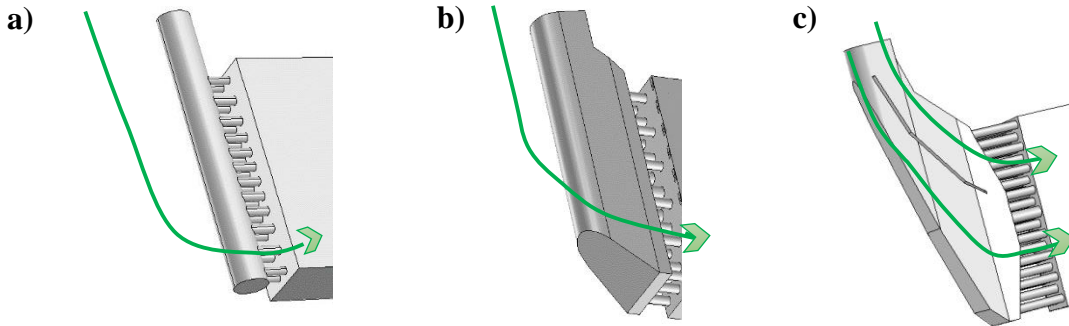


Figura 10. Evolución de los diseños para la entrada y salida de flujo.

Inicialmente el cambio de dirección del flujo requería ser modificado gradualmente para que ingresará el reactor, de tal manera que no tuvieran lugar preferencias de flujo en el compartimento central como se observa en la Fig. 8 y la Fig. 10a, por lo tanto la sección antes de los distribuidores de entrada repercute en gran medida para lograr una distribución uniforme de flujo.

En la Fig. 10b se observa una sección con mayor volumen que la inicial mostrada en (a), puesto que se ha reportado que zonas de orden antes de los distribuidores favorecen la distribución de flujo, provocado por el aumento del área de la sección se disminuye la velocidad y reorganiza el flujo antes de ingresar a través de los orificios (Belendez, 1992; Arenas, 2010).

Es conveniente mencionar que los cambios de sección y dirección pueden provocar turbulencia, por lo que se decidió aumentar la longitud de los distribuidores de entrada como se observa en la Fig. 10c, teniendo en cuenta el concepto de longitud mínima de desarrollo (Cengel y Cimbala, 2012). Obteniéndose un valor aproximado de 18[mm] utilizando la expresión propuesta por Kays y Crawford, (1993) ($L \approx 0.05ReD_h$), sin embargo solo cuentan con esa longitud los

distribuidores ubicados en los extremos, mientras los centrales solo de 11[mm] puesto que se añadió una zona para reorganizar el flujo, posterior a la barrera de 1.5 [mm] que divide el flujo en dos direccionándolo hacia el compartimiento interior.

3.3.2 Análisis del dominio propuesto para el UIS-GIMBA 1.1. Sobre la base de las consideraciones expuestas anteriormente, se diseñó el dominio mostrado en el anexo E, del cual se obtuvo lo mostrado en la figura 11.

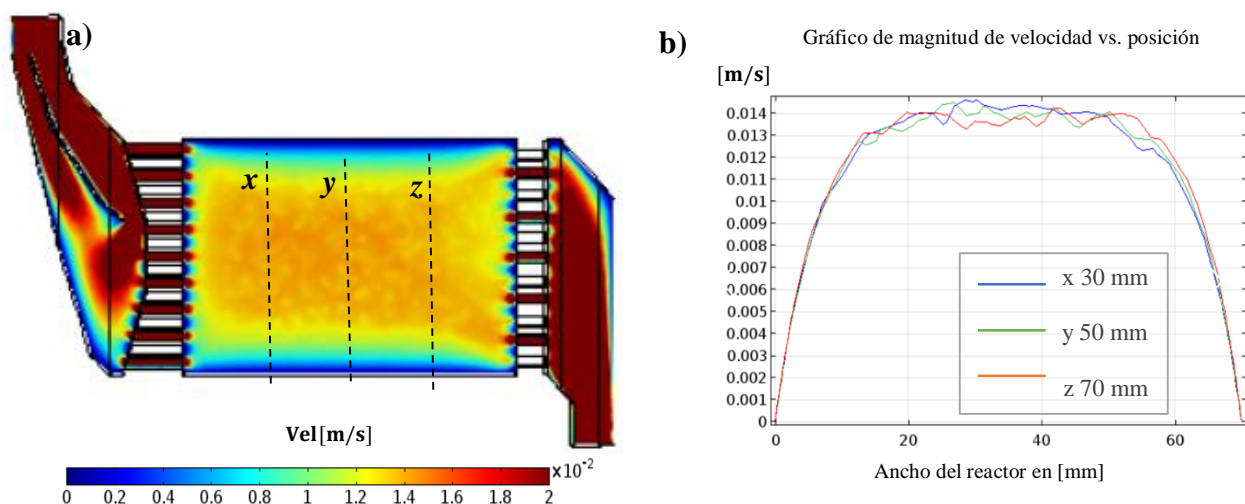


Figura 11. a) Corte de velocidad en el centro, b) perfiles de velocidad a 30, 50 y 70 [mm] de los distribuidores de entrada.

En la Fig. 11a se observa que el fluido avanza por el compartimiento central de forma uniforme puesto que mantiene una velocidad promedio entre $1,2 \times 10^{-2}$ y $1,5 \times 10^{-2}$ [m/s], indicado por un color entre amarillo y naranja desde la entrada hasta la salida del compartimiento, estas variaciones de tonalidad son producto de ligeros cambios de velocidad, a su vez en las paredes se evidencia la condición de no deslizamiento, que crea una capa límite hidrodinámica retrasando las capas de

fluido adyacentes (Belendez, 1992), es por ello que la coloración varía desde azul con velocidad nula hasta la zona central con velocidad máxima.

En la Fig. 11b se presentan los perfiles de velocidad parabólicos, el cual mantiene su forma a lo largo del compartimiento con ligeras diferencias de velocidad en la parte superior, lo que se ajusta más al flujo disperso, como se ha reportado por Frías (2004) para el reactor filtro prensa. a su vez se observa que en los extremos la velocidad disminuye gradualmente hasta la pared, debido a la condición de no deslizamiento (Levenspiel, 2004).

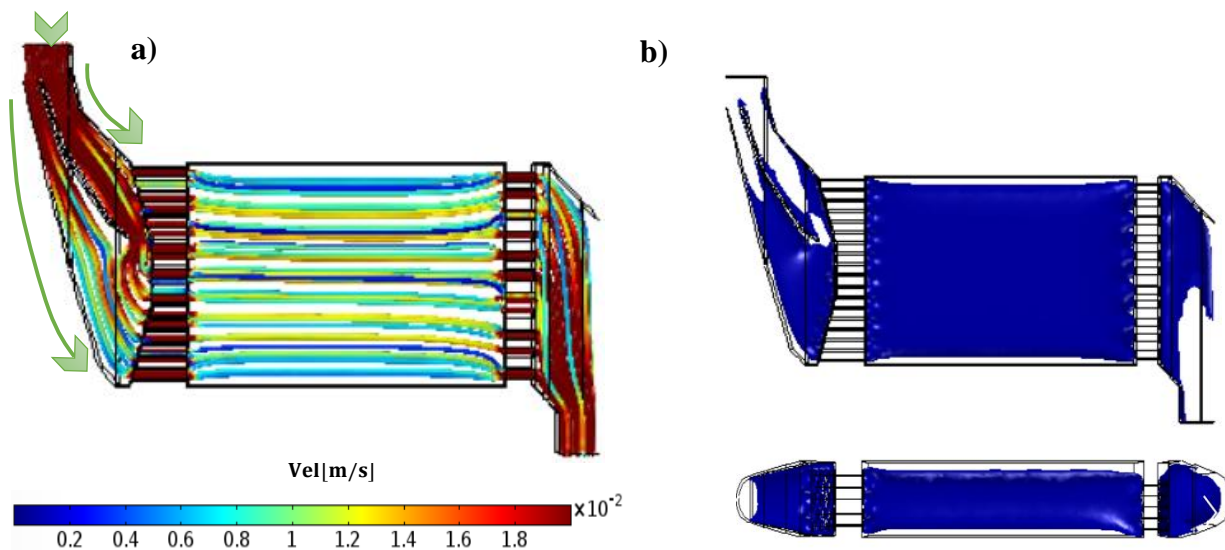


Figura 12. Líneas de flujo a lo largo del dominio de estudio, b) Isosuperficie para una magnitud de velocidad de 5.4×10^{-3} [m/s].

En la Fig. 12a se observa la trayectoria de 80 partículas que ingresan y se dividen en dos corrientes, indicadas por las flechas verdes, debido a la pared intermedia que obstruye el paso de fluido, una de las zonas con mayor concentración de partículas con elevada velocidad (color rojo principalmente), mientras la otra con tonalidades que van desde azul hasta rojo, que posteriormente ingresan al compartimiento y avanzan de modo uniforme hasta los distribuidores de salida, que facilitan el desalojo del fluido como un reactor de flujo continuo, sin embargo se ven partículas

que experimentan bajas velocidades en el compartimiento de reacción mostrado con un color azul, esto es debido a las trayectorias van a lo largo de todo el dominio y por tanto existirán algunas que vayan próximas a las paredes donde el movimiento es bajo.

En la Fig. 12b se empleó una forma nueva forma de presentar los datos, mediante la construcción de una isosuperficie, que es una capa en la cual cada punto que la compone tiene la misma magnitud de velocidad, es conveniente notar que en el centro se tendrán mayores velocidades por lo que no harán parte de la isosuperficie mostrada en azul y por tanto el interior será hueco, por otra parte las velocidades exteriores a esta serán menores a $5,4 \times 10^{-2}$ [m/s], debido a la condición de no deslizamiento y en consecuencia el volumen exterior a esta se considerará como estancado, teniendo en cuenta que la velocidad para (b) fue seleccionada bajo el criterio mencionado anteriormente para el compartimiento central.

3.3.3 Análisis del efecto de la malla electródica. Los cortes de velocidad, líneas de flujo e isosuperficie para el dominio con la malla electródica no revelan mayor diferencia (anexo F), sin embargo el perfil de velocidad en la mitad sufre algunos cambios.

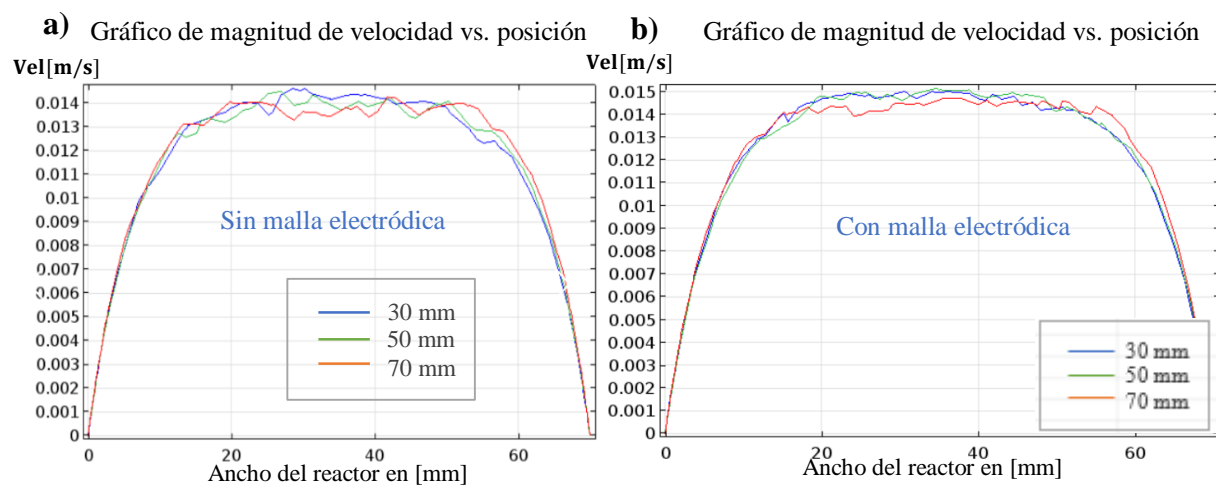


Figura 13. a) Perfiles de velocidad en la mitad (sin malla electródica), b) Perfiles de velocidad en la mitad (con malla electródica).

Como se observa en la Fig. 13, los perfiles de la derecha presenta un valor de velocidad máximo ligeramente más elevado, lo que podría esperarse conforme con la tabla 1, puesto que el número Reynolds obtenido cuando se incluye la malla electródica es mayor y por tanto su velocidad promedio en el compartimiento, a su vez se observa que el ruido observado en (a) sobre la copa de los perfiles disminuye comparada con (b) solapándose la curva azul con la verde y dando lugar a perfiles más achatados, por lo tanto la malla en lugar de añadir turbulencia canaliza el flujo aumentando la velocidad, sin embargo este comportamiento ocurre en reactores pequeños, mientras que mayores dimensiones las mallas electródicas cumplen su función como promotores de turbulencia (Frías, 2004).

3.3.4 Diseño del reactor completo. El diseño propuesto ha permitido visualizar mejoras en el flujo a través del compartimiento central como se reportó en las Fig. 11 y 12, el cual avanza con velocidades máximas en la zona central, promoviendo un movimiento global del fluido. En la figura 11 se observa el diseño total del reactor. Las partes del distribuidor se muestran en el Apéndice G.

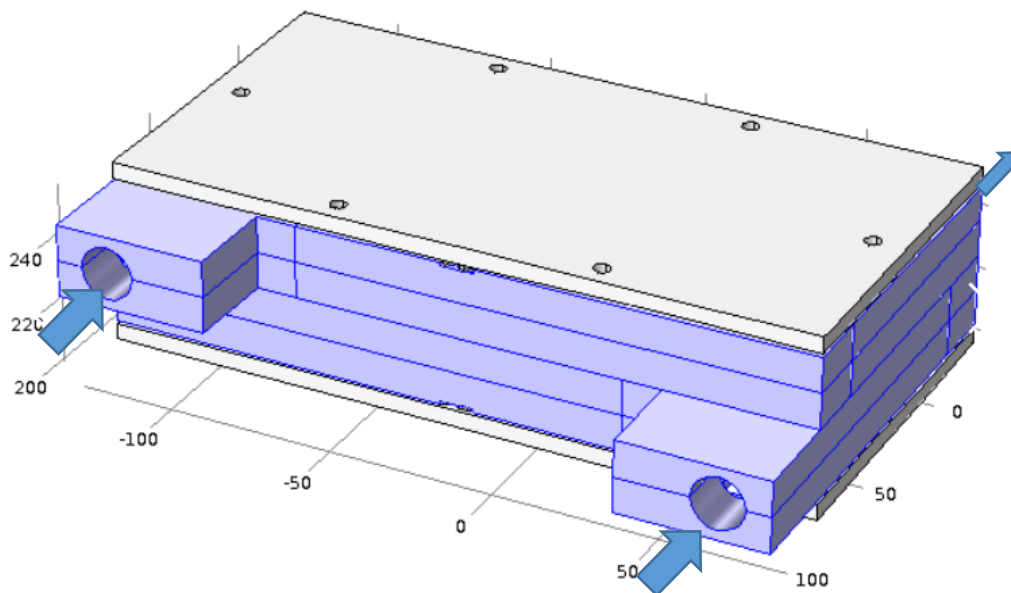


Figura 14. Diseño total del reactor UIS_GIMBA 1.1.

En la Fig. 14 se puede observar el diseño con las modificaciones que permitieron una mejor evolución del flujo en el compartimiento central, lo que se evidencia a partir de los valores de ψ obtenidos para el reactor UIS_GIMBA 1.0 y 1.1, que indican un régimen de flujo menos influenciado por el efecto entrada/salida, alcanzando un comportamiento de flujo más ideal. Los valores para este parámetro se presentan en la tabla 2.

Tabla 2. Parámetros adimensionales antes y después de las modificaciones.

	Reactor UIS_GIMBA 1.0	Reactor UIS_GIMBA 1.1	Porcentaje (%)
Arreglo de entrada			
ζ	0,121	0,2171	79,42
ψ	$8,75 \times 10^{-3}$	$2,73 \times 10^{-3}$	68,80
Arreglo de salida			
ζ	0,111	0,141	27,03
ψ	0,01	$6,43 \times 10^{-3}$	35,7

Se observa en la tabla 2, que con las modificaciones realizadas se obtuvo un aumento del parámetro ζ de 79,42% y 27,03% para el distribuidor de entrada y salida respectivamente, mientras que ψ se redujo un 68.8% para el distribuidor de entrada, logrando un comportamiento menos influenciado por el efecto de entrada que genera alta turbulencia, mientras que en la salida se obtuvo una disminución del 35,7% para ψ facilitando la rápida evacuación del fluido. Estos porcentajes en los parámetros ψ y ζ permiten concluir que el diseño propuesto para el reactor UIS_GIMBA 1.1 genera un mayor control hidrodinámico favoreciendo la rápida evolución del fluido hasta su condición de flujo desarrollado sin zonas estancadas o de retromezcla.

4. Conclusiones

- Los resultados indican que con el diseño propuesto se alcanzaron distribuciones de flujo uniformes a lo largo de todo el compartimiento de reacción, evidenciado por los perfiles de flujo con curvas simétricas y velocidades máximas en la zona central.
- En el reactor UIS_GIMBA 1.0 en posición vertical se obtuvo un 25,13% de área con velocidad de flujo inferior a la velocidad de estancamiento de $5,4 \times 10^{-3}$ [m/s] mientras que en la disposición horizontal se obtuvo un 66,1% de zonas estancadas, por lo que el peso en la posición vertical favorece un movimiento más uniforme de flujo, debido a que permite reorganizar el flujo en los distribuidores de entrada, a diferencia de la horizontal en la que el fluido tiende a continuar en la dirección inicial, dando lugar a un flujo preferencial.
- La malla electródica permite canalizar el flujo aumentando ligeramente su velocidad, dando como resultado perfiles más planos en la zona de mayor velocidad.
- La reducción del parámetro ψ del 68,8% y 35,7% para el arreglo de entrada y salida respectivamente, representa una mejora significativa para obtener una distribución más uniforme de flujo a lo largo del compartimiento de reacción, dando lugar a un régimen poco influenciado por el efecto entrada/ salida, lo que permite eliminar problemas de recirculación y favorece el movimiento global del fluido y su rápida evolución hasta alcanzar perfiles simétricos.

5. Recomendaciones

- Realizar las pruebas hidrodinámicas experimentales para validar los resultados de este trabajo, igualmente evaluando si el comportamiento de flujo favorece la acumulación y separación de la fase gaseosa de la líquida.
- Realizar un estudio que relacione la conversión de reacción y el transporte de masa según el caudal de operación, para encontrar la mejor condición de flujo volumétrico.
- Establecer una relación entre la capa límite hidrodinámica y el transporte de materia, de manera que se pueda comprender su efecto en la tasa de conversión.
- Evaluar la relación entre el comportamiento hidrodinámico, las densidades de corriente y distribución de potencial sobre las mallas electrónicas, para determinar el efecto de diferentes caudales de operación que generan diferentes tasas de transporte de materia.
- Realizar un estudio técnico de la inclinación óptima del reactor para obtener la mejor captación solar y así poder tener la mayor eficiencia fotónica.

Referencias

- Arenas, B. (2010). *Mecánica de fluidos 5*, E. U. Universidad de Antioquia. Recuperado de: http://aprendeenlinea.udea.edu.co/lms/moodle/pluginfile.php/150404/mod_resource/content/0/texfluidos.pdf.
- Bedford, A. (Ed). (2008). *Dinámica: Mecánica para ingeniería*. México: Pearson Educación, 100- 106.
- Belendez, A. (1992). *Acústica, fluidos y termodinámica*. Universidad de Alicante. Recuperado de: <https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/11348/1/Dinamica%20de%20fluidos%20y%20fluidos%20reales.pdf>.
- Bird, B. Stewart, W. y Lightfoot, E. (Ed). (2006). *Fenómenos de Transporte*. España: Editorial Repla, S.A., 1-12.
- Cengel, Y. y Cimbala, J. (Ed.). (2012). *Mecánica de fluidos, Fundamentos y aplicaciones*. México, Editorial McGraw Hill.
- Frei, W. (2013). Comsol Blog: *Using Adaptive Meshing for Local Solution Improvement CFD Module*. Recuperado de: <https://www.comsol.com/blogs/using-adaptive-meshing-local-solution-improvement/>.
- Frei, W. (2015). Comsol Blog: *Improving Your Meshing with Partitioning CFD Module*. Recuperado de: <https://www.comsol.com/blogs/improving-your-meshing-with-partitioning/>.
- Frías, A. (2004). *Optimización de la hidrodinámica de reactores electroquímicos: empleo de métodos experimentales y numéricos* (Tesis doctoral) , Universidad de Alicante, Alicante, España.

- Frías, A. Tudela, I. Louisnard, O. Sáez, V. Deseada, M. Díez, M. Bonete, P.... González, J. (2011). Optimized design of an electrochemical filter-press reactor using CFD methods. *Chemical Engineering Journal*. (2011). 69, 270-281.
- González, J. Frías, A. Expósito, E. Montiel, V. Aldaz, A. y Conesa, J. (2000). Characterization of an Electrochemical Pilot- Plant Filter- Press Reactor by Hydrodynamic and Mass Transport Studies. *kinetics, catalysis, and reaction Eng. Chem.*, 39 (5), 1132 – 1142.
- Hernández, J. (2013). *Análisis de la transferencia de calor mediante la técnica Hot Wire y COMSOL Multiphysics*. (Tesis doctoral en tecnología avanzada). México D.F.: Instituto Politécnico Nacional. Centro de investigación en ciencia y tecnología aplicada, 1-63.
- Jaramillo, M. (2014) *Estudio de factibilidad de un proceso fotoelectroquímico para la producción de hidrógeno a partir del agua asociada a la producción de petróleo*. (Tesis de maestría). Bucaramanga, Colombia Universidad Industrial de Santander.
- Levenspiel, O. (Ed). (2004). Ingeniería de las reacciones químicas. México: Editorial Limusa, S.A., 293-296.
- Levenspiel, O. y Bischoff, B. (1963). Patterns of flow in chemical process vessels. *Advances in Chemical Engineering*, 4, 95–198.
- Mancilla, R. y Mesa, H. (2012) *Metodología para el manejo de aguas de producción en un campo petrolero*. (Trabajo de grado Ingeniero de petróleos). Universidad Industrial de Santander. Bucaramanga, Colombia.

- Martínez, J. Ramirez, P. y Vargas, M. (2017). *Materials Processing Fundamentals, The minerals, Metals & Materials Series*. Study of a Filter- Press Electrochemical Reactor for the treatment of Industrial Waste. Doi: 10.1007/9978-3-319-51580-9_12.
- Modulo CFD. (2018). *Navier-Stokes Equations*. Recuperado de: <https://www.comsol.com/multiphysics/navier-stokes-equations>.
- Modulo CFD. (2018). *Simulate Fluid Flow Applications with the CFD Module*. Recuperado de: <https://www.comsol.com/cfd-module>.
- Munson, B. y Young, D. (Ed). (2010). *Fundamentals of fluid Mechanics*. Estados Unidos: Editorial John wiley & Sons, 14-18.
- Pickett, D. (1977), *Electrochemical reactor design*. Michigan: Elsevier, p 434.
- Rivera, F. Ponce de León, C. Walsh, F. y Nava, J. (2015). The reaction environment in a filter-press laboratory reactor: the FM01-LC flow cell. *Electrochimica Acta*. 161. 436-452.
- Rivero, E. Rivera, F. Cruz, M. Mayen, E. y González, I. (2012). Numerical simulation of mass transport in a filter press type electrochemical reactor FM01-LC: Comparison of predicted and experimental mass transfer coefficient. *Chemical Engineering Research and Design*, 90(11), 1969-1978.
- Ruiz, J. y Sanabria, L. (2016). *Estudio Hidrodinámico de un reactor fotoelectroquímico tubular mediante dinámica de fluidos computacional*. (Trabajo de pregrado). Bucaramanga, Colombia.
- Vázquez, L. Alvarez, A. Sierra, F. Ponce de León, C. y Walsh, F. (2010) Prediction of mass transport profiles in a laboratory filter-press electrolyser by computational fluid dynamics modelling. *Electrochimica Acta*. 55. 3446-3453.

Walsh, F. (Ed). (1999). *Un primer curso en ingeniería Electroquímica.*: Club universitario., p 243-281.

Zienkiewicz, O. (2007). *El método de los elementos finitos.* México: Editorial Reverté, S. A., p 3.

Apéndices

Apéndice A. Esquema de operación del reactor, Dimensiones del reactor UIS-GIMBA 1.0 y dominio de simulación.

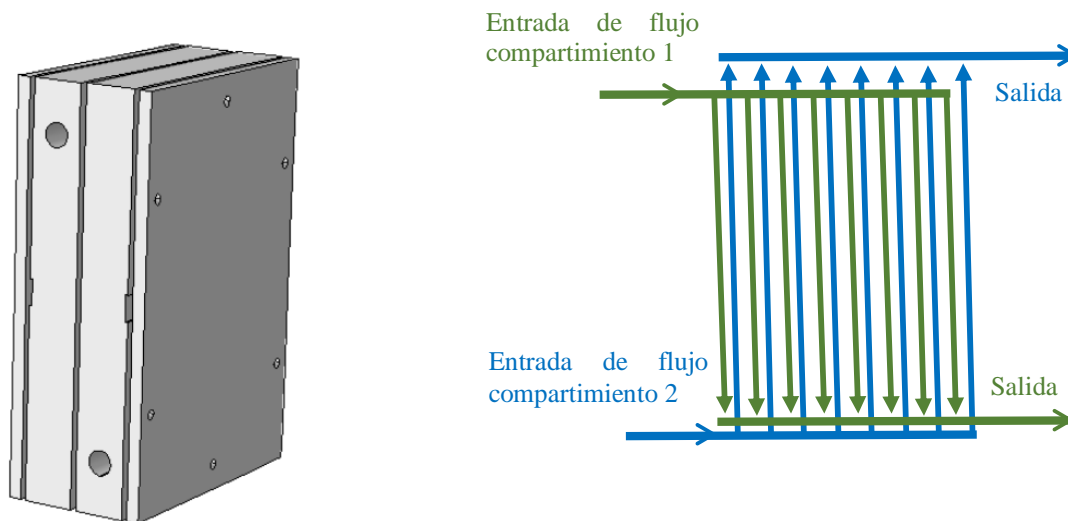


Figura 15. Esquema de funcionamiento para el reactor UIS_GIMBA 1.0.

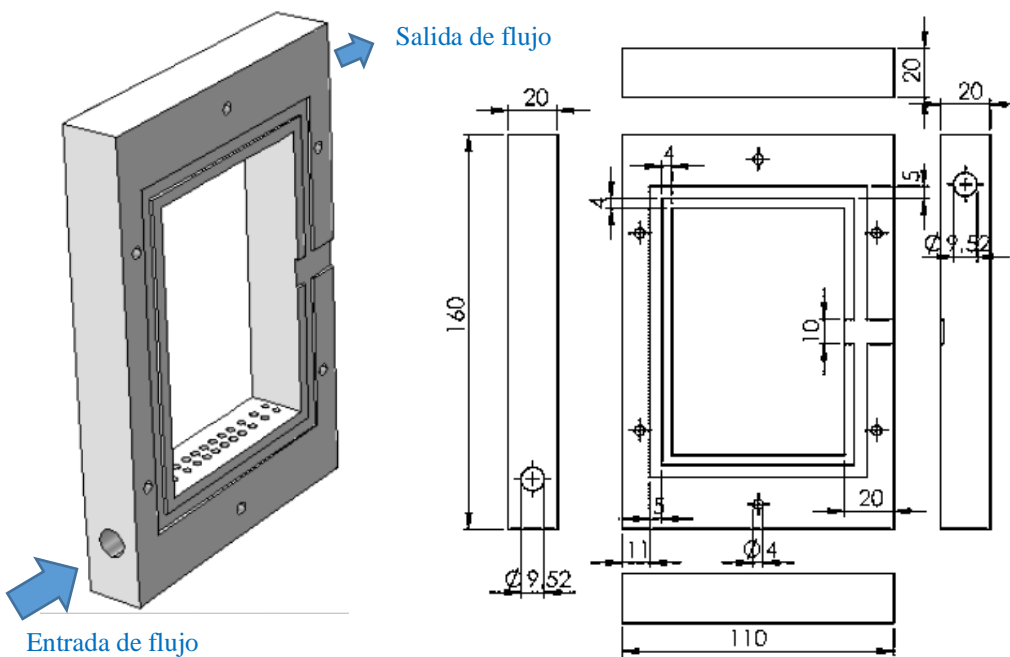


Figura 16. Planos de las medidas utilizadas para el diseño en Comsol multiphysics ® 5.2.

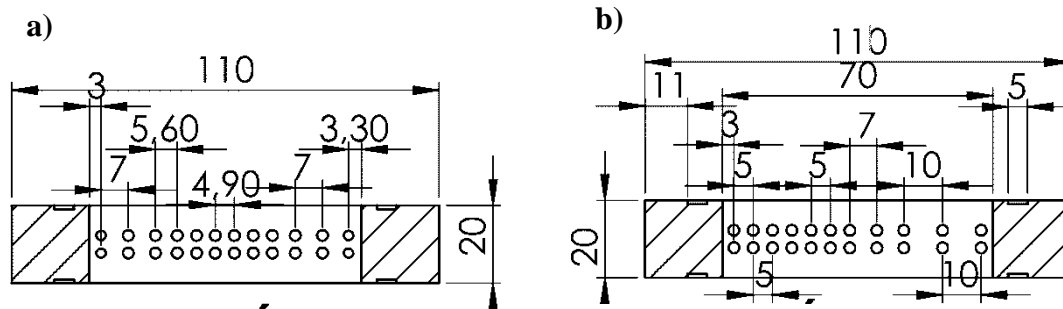


Figura 17. Plano del arreglo de distribuidores en la sección de entrada y salida, con medidas en milímetros y diámetro de circunferencia de 3 [mm], a) Entrada, b) Salida, para el reactor UIS_GIMBA 1.0.

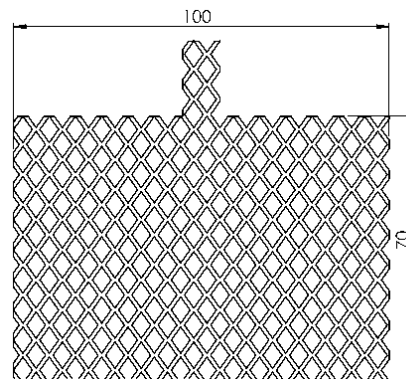


Figura 18. Mallas electrónicas, IMT-10 calibre 20 (Cold rolled).

A partir de estas dimensiones se construyó el reactor en Comsol multiphysics® 5.2 y con la operación geométrica de diferencia se obtuvieron los volúmenes que el fluido ocupa en el reactor cuando se incorpora la malla y sin ella.

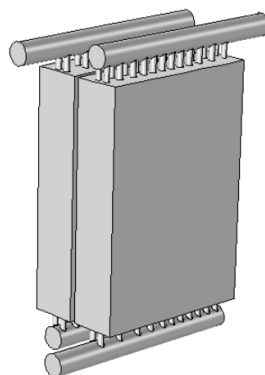


Figura 19. Volumen ocupado por el fluido sin malla electrónica para el reactor UIS_GIMBA 1.0.

Apéndice B. Propiedades fisicoquímicas del agua de producción.

Tabla 3. Propiedades fisicoquímicas del agua de producción.

<i>Propiedades</i>	<i>Unidad</i>	<i>Valor</i>
Color	-	NS
Conductividad a 25 °C	mS/cm	0,34
Densidad	Kg/m ³	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
Solidos totales disueltos (STD)	mg/L	294,5
Turbidez	NTU	0,35
Viscosidad	kg/m*s	1,287x10 ⁻³

Apéndice C. Ley de viscosidad de newton, ecuación de continuidad y cantidad de movimiento.*Ley de viscosidad de Newton*

Aplicada aquellos fluidos que presentan cierta oposición al flujo manteniéndose constante sin importar la deformación aplicada al mismo y los fluidos que la cumplen se denominan fluidos newtonianos. Esta ley se establece en forma generalizada de la siguiente forma (Bird *et al*, 2006):

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\nabla v_i + (\nabla v_j)^+ \right) + \left(\frac{2}{3}\mu - \kappa \right) (\nabla \cdot v) \delta_{ij} \quad (7)$$

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

Donde τ_{ij} es el esfuerzo cortante por unidad de área, δ_{ij} es el tensor unitario, ∇v_i es el tensor del gradiente de velocidad con componentes $(\partial/\partial x_i)v_j$, $(\nabla v_j)^+$ es la traspuesta del tensor del gradiente de velocidad con componentes $(\partial/\partial x_j)v_i$, y $\nabla \cdot v$ es la divergencia del vector velocidad.

Se puede observar dos coeficientes caracterizan el fluido, μ que es la viscosidad y κ la viscosidad dilatacional, sin embargo como se menciona el siguiente apartado para líquidos incompresibles $\nabla \cdot v = 0$ y por tanto el término se elimina, quedando como resultado:

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\nabla v_i + (\nabla v_j)^+ \right) \quad (8)$$

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

Ecuación de continuidad

Es obtenida a partir de un balance de materia sobre un elemento diferencial fijo en el espacio a través del cual circula fluido y describe la velocidad de variación respecto al tiempo de la densidad. La ecuación se describe de forma generalizada como sigue (Bird *et al*, 2006):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho v) \quad (9)$$

Donde $\nabla \cdot \rho v$ se denomina divergencia de ρv y es la densidad de flujo de materia, $-(\nabla \cdot \rho v)$ es la velocidad neta con que sale la densidad de flujo de materia por unidad de volumen y $\partial \rho / \partial t$ el cambio de densidad respecto al tiempo e implica la velocidad de incremento de materia por unidad de volumen, por lo tanto debido a que no hay variación de la densidad para líquidos incompresibles se obtiene la siguiente expresión:

$$(\nabla \cdot v) = 0 \quad (10)$$

Ecuación de continuidad

Es obtenida a partir de un balance de cantidad de movimiento sobre un fluido y establece que las fuerzas que actúan sobre un volumen de control (CV) son igual a la razón de cambio de su cantidad de movimiento producto de su masa y velocidad (Bedford, 2008). En estado estacionario intervienen tres términos, las velocidades de entrada y salida de cantidad de movimiento y las fuerzas externas que actúan sobre el (CV) que pueden ser de tipo másico y superficial como la gravedad y presión respectivamente, de acuerdo con lo anterior se muestra la expresión general de cantidad de movimiento para los newtonianos (Bird *et al*, 2006).

$$[\nabla \cdot \rho v_i v_j] = -\nabla p - [\nabla \cdot \tau_{ij}] + \rho g_i \quad (11)$$

Sabiendo que:

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

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

Donde $\nabla \cdot \rho v_i v_j$ es la divergencia del producto diádico, ∇p es el gradiente escalar, $\nabla \cdot \tau_{ij}$ es la divergencia del tensor τ y ρg_i es la fuerza ejercida por el peso.

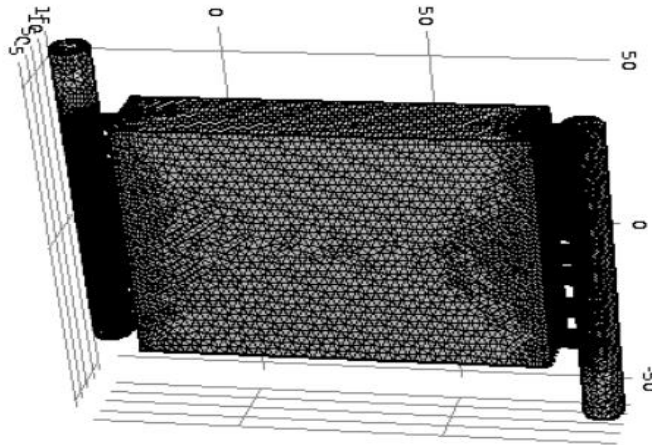
Apéndice D. Mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.0 y características de dominio.

Figura 20. Mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.0.

Tabla 4. Características de mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.0.

<i>Parámetro</i>	<i>Valor</i>
Elementos tetraédricos:	590528
Elementos piramidales:	7410
Elementos de prisma:	101570
Elementos triangulares:	57662
Elementos cuadriláteros:	56
Elementos de arista:	3665
Elementos de vértice:	200
Número de elementos:	699508
Calidad mínima de elemento:	0,005768
Calidad media de elemento:	0,6268
Ratio de volumen de elemento:	$6,077 \times 10^{-5}$
Volumen de malla:	155600,0 mm ³

El dominio y características de mallado serán las mismas tanto para el reactor UIS_GIMBA 1.0 en la posición vertical como horizontal.

Apéndice E. Dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1 con mallado y características de malla.

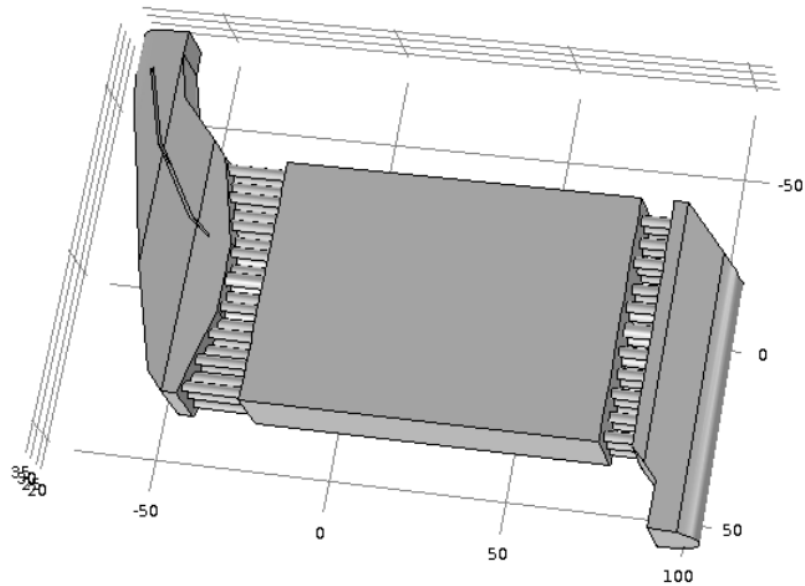


Figura 21. Dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1.

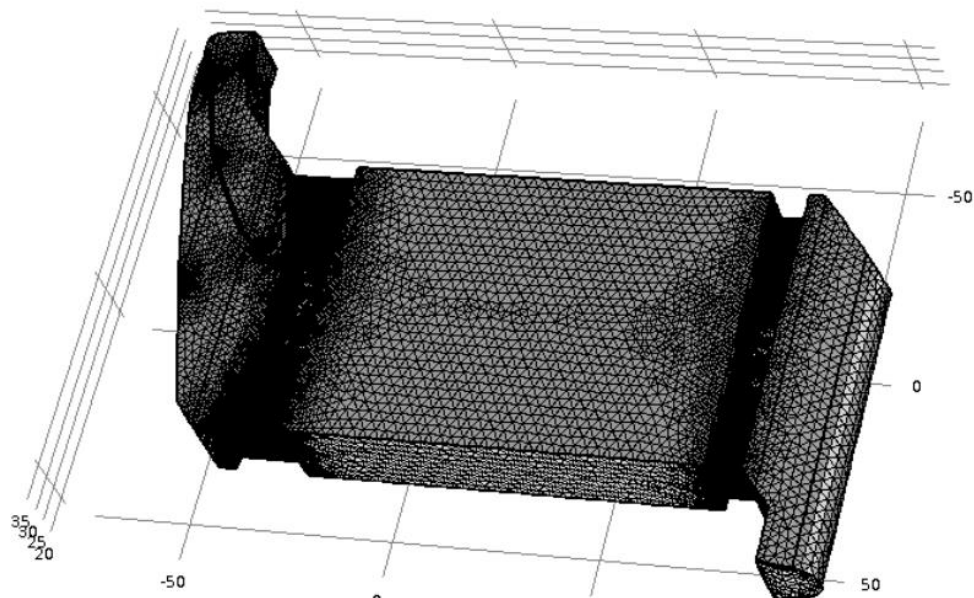


Figura 22. Mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1.

Tabla 5. Características de mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1.

<i>Parámetro</i>	<i>Valor</i>
Elementos tetraédricos:	981880
Elementos piramidales:	12418
Elementos de prisma:	174840
Elementos triangulares:	99924
Elementos cuadriláteros:	106
Elementos de arista:	7481
Elementos de vértice:	360
Número de elementos:	1169138
Calidad mínima de elemento:	$9,439 \times 10^{-4}$
Calidad media de elemento:	0,6272
Ratio de volumen de elemento:	$2,905 \times 10^{-5}$
Volumen de malla:	209900,0 mm ³

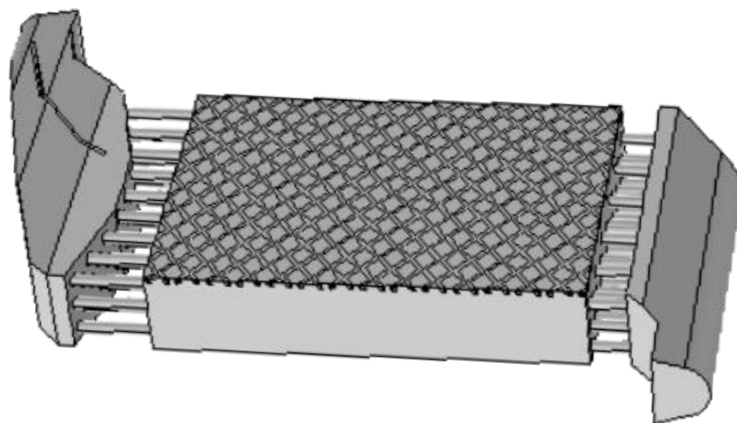


Figura 23. Dominio con malla electródica y su respectivo mallado para el reactor UIS_GIMBA 1.1.

Resulta oportuno mencionar que en tanto sea más compleja la geometría, es decir con mayor número de aristas y secciones pequeñas, se requiere de un refinamiento en el mallado como se observa en la siguiente figura.

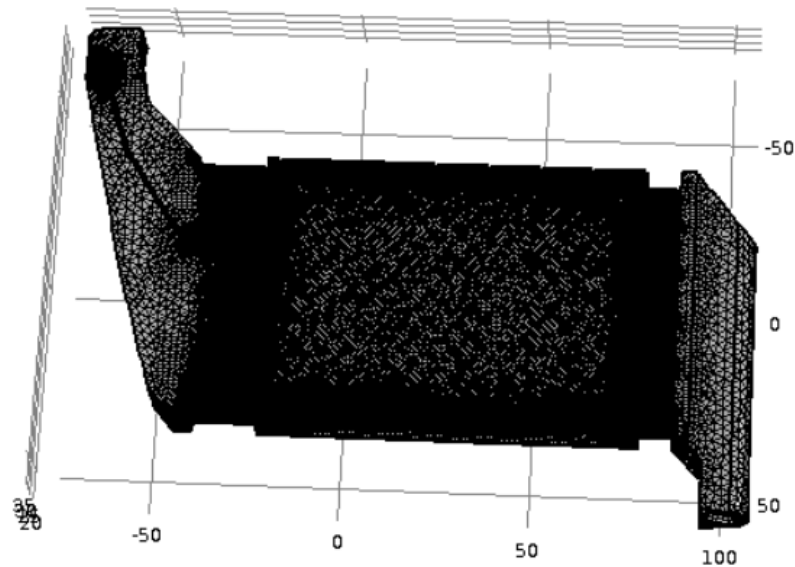


Figura 25. Mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1 con malla electrónica.

Tabla 6. Características de mallado del dominio para el reactor UIS_GIMBA 1.1 incluyendo la malla electrónica.

<i>Parámetro</i>	<i>Valor</i>
Elementos tetraédricos:	2415625
Elementos piramidales:	97598
Elementos de prisma:	304636
Elementos triangulares:	243714
Elementos cuadriláteros:	98
Elementos de arista:	28825
Elementos de vértice:	2600
Número de elementos:	2817859
Calidad mínima de elemento:	$2,806 \times 10^{-6}$

Calidad media de elemento:	0,5931
Ratio de volumen de elemento:	6,617x10 ⁻⁶
Volumen de malla:	206800,0 mm ³

Apéndice F. Cortes de velocidad, líneas de flujo e isosuperficie para el dominio con la malla electrónica.

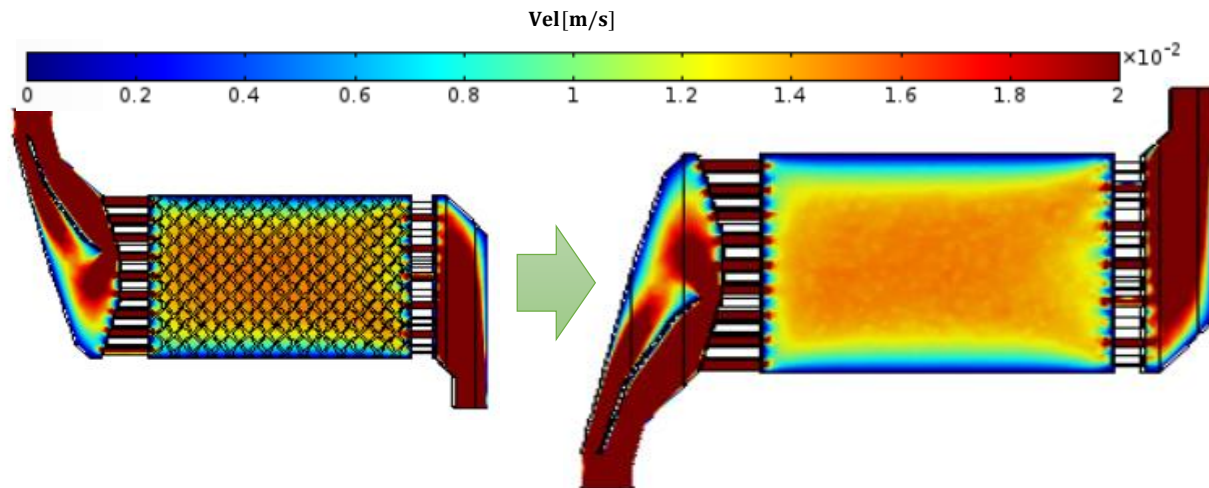


Figura 27. Corte de velocidad en el centro para el reactor UIS_GIMBA 1.1.

En el Corte mostrado en la izquierda de la Fig. 25 no es representativo, debido a la presencia de la malla electrónica por lo que se recurre a la Vista posterior.

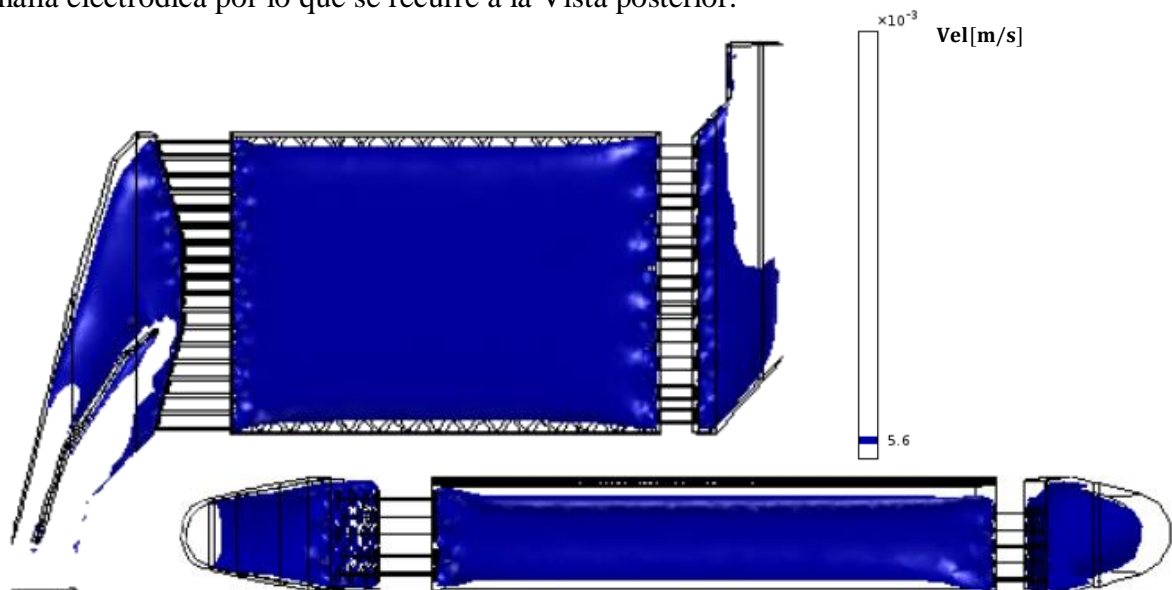


Figura 29. Isosuperficie con velocidad a 5,6x10⁻³ [m/s] para el reactor UIS_GIMBA 1.1.

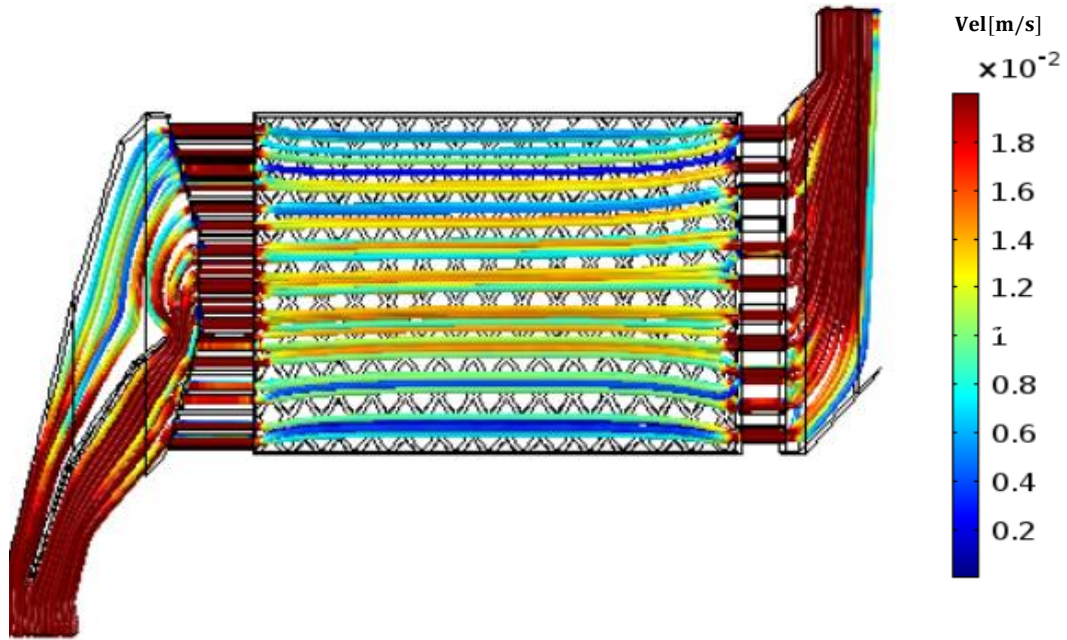


Figura 31. Líneas de flujo para el dominio con malla electrónica para el reactor UIS_GIMBA 1.1.

Apéndice G. Partes del distribuidor simétrico del reactor UIS_GIMBA 1.1.

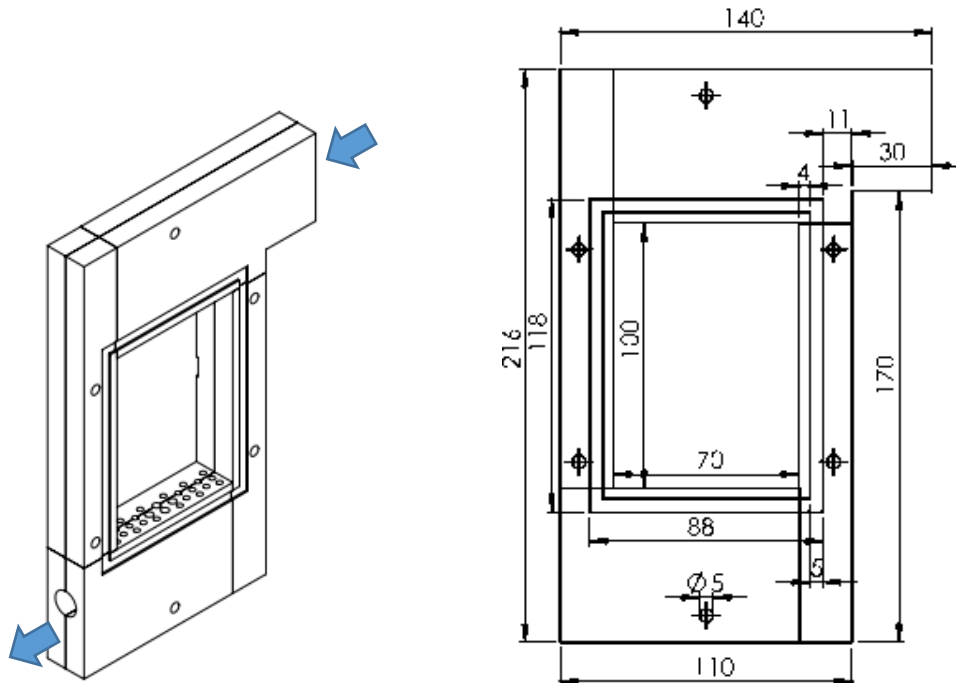


Figura 33. Distribuidor simétrico del reactor UIS_GIMBA 1.1.

Figura 35. Parte A y B del distribuidor de entrada del reactor UIS_GIMBA 1.1.

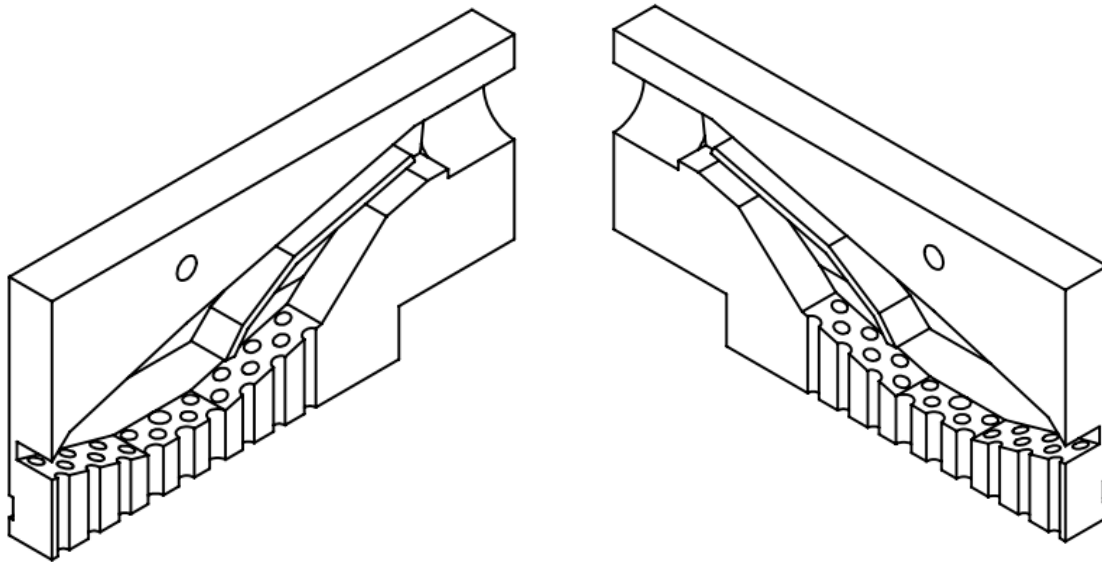


Figura 37. Parte A y B del distribuidor de salida del reactor UIS_GIMBA 1.1.

