



**UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO**  
**CAMPUS GUANAJUATO**  
**DIVISIÓN DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

**DISEÑO TEÓRICO DE MAMPARAS DE FLUJO VERTICAL PARA UN  
SEDIMENTADOR DE ELECTROCOAGULACIÓN USANDO DINÁMICA  
DE FLUIDOS BIFÁSICA**

**TESIS**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
**INGENIERA QUÍMICA**

PRESENTA

**ELIZABETH DEL ROSARIO SALAS SANDOVAL**

DIRECTOR DE TESIS

**DR. TZAYAM PÉREZ SEGURA**

CO-DIRECTOR DE TESIS

**DR. ALAN DANIEL VILLALOBOS LARA**

Guanajuato, Gto. Noviembre de 2021

## **DECLARATORIA**

Por medio de la presente me responsabilizo de la autenticidad y originalidad del presente trabajo titulado:

### **DISEÑO TEÓRICO DE MAMPARAS DE FLUJO VERTICAL PARA UN SEDIMENTADOR DE ELECTROCOAGULACIÓN USANDO DINÁMICA DE FLUIDOS BIFÁSICA**

---

Dr. Tzayam Pérez Segura  
Director de tesis

---

Dr. Alan Daniel Villalobos Lara  
Co-director de tesis

Guanajuato, Gto. Noviembre de 2021

Miembros del jurado del examen de grado para obtener el título de Ingeniera Química presenta la C. Elizabeth del Rosario Salas Sandoval, con el trabajo titulado:

**DISEÑO TEÓRICO DE MAMPARAS DE FLUJO VERTICAL PARA UN  
SEDIMENTADOR DE ELECTROCOAGULACIÓN USANDO DINÁMICA  
DE FLUIDOS BIFÁSICA**

---

Dr. Jesús Isaac Minchaca Mojica  
Presidente

---

Dr. Jorge Arturo Alfaro Ayala  
Secretario

---

Dr. José de Jesús Ramírez Minguela  
Vocal

---

Dr. Carlos Enrique Alvarado Rodríguez  
Sinodal suplente

Guanajuato, Gto. Noviembre de 2021

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a todos los involucrados que me permitieron culminar este proyecto de tesis, en primer lugar, a mis padres Dagoberto y Martha Elizabeth por apoyarme en todo momento y siempre motivarme para cumplir con los objetivos que me propongo, así como a mi hermano Jesús Emmanuel por ser mi inspiración constante y ejemplo por seguir.

Gracias al Dr. Tzayam quien fue mi asesor de tesis y tutor durante la licenciatura por invitarme a realizar este proyecto, por la guía académica brindada, su confianza y paciencia durante estos meses. Gracias también al Dr. Daniel, mi co-asesor de tesis, por todo el apoyo brindado desde el 25° Verano de la Ciencia UG el cual fue mi primer acercamiento real con la investigación y por incentivarme a formar parte de otros proyectos desde ese momento.

Agradezco a mis profesores que tuve el placer de conocer durante la licenciatura por sus enseñanzas y conocimientos transmitidos que para mí fueron sumamente valiosos y me inspiraron a seguir aprendiendo e interesarme por la labor científica.

## ÍNDICE GENERAL

RESUMEN.....	I
INTRODUCCIÓN Y JUSTIFICACIÓN.....	II
HIPÓTESIS .....	VI
OBJETIVOS .....	VI
Objetivo general.....	VI
Objetivos particulares.....	VI
CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES .....	7
Problemática e importancia del agua como fuente de abastecimiento.....	7
Tratamiento de aguas residuales .....	8
Electrocoagulación para el tratamiento de aguas residuales .....	9
Operación unitaria de sedimentación .....	10
Modelado matemático y predicción de la sedimentación.....	12
Dinámica de fluidos computacional para simular la sedimentación .....	13
Ecuaciones de conservación asociadas al movimiento de fluidos .....	16
Uso de software comercial de CFD para fluidos bifásicos .....	18
CAPÍTULO 2. PLANTEAMIENTO DEL MODELO MATEMÁTICO .....	21
CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN.....	28
Diseño computacional del arreglo de mamparas para el tanque de sedimentación.....	28
Pre-procesamiento.....	28
Geometría.....	29
Condiciones de frontera.....	33
Mallado.....	39
Solución con método de elemento finito .....	41
Post-procesamiento .....	43
CAPÍTULO 4. DISCUSIÓN DE RESULTADOS .....	43

Perfiles de velocidad .....	45
Líneas de flujo.....	55
Concentración de fase dispersa .....	60
Análisis de presiones dentro del sistema.....	63
Análisis de malla .....	65
CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES.....	68
CAPÍTULO 6. PERSPECTIVAS A FUTURO.....	69
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	70

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1.</b> Descripción de las dimensiones establecidas para cada una de las geometrías propuestas.....	30
<b>Tabla 2.</b> Número de elementos generados en la malla de cada diseño. ....	40
<b>Tabla 3.</b> Resumen de variables y parámetros especificados para la simulación.....	42
<b>Tabla 4.</b> Tiempo de solución en COMSOL Multiphysics. ....	44
<b>Tabla 5.</b> Puntos de evaluación de la fracción de volumen de fase dispersa. ....	61
<b>Tabla 6.</b> Especificaciones del mallado y tiempo de simulación de la geometría j).....	65
<b>Tabla 7.</b> Resultados del análisis de malla de la geometría j). ....	66

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1.</b> Principales etapas del proceso de curtido. ....	III
<b>Figura 2.</b> Tratamiento primario: a) sedimentación primaria, b) flotación, c) filtración. ....	8

<b>Figura 3.</b> Tratamiento secundario: a) proceso biológico, b) coagulación-floculación, c) sedimentador secundario.....	9
<b>Figura 4.</b> Ejemplos de tratamiento terciario: a) ablandamiento, b) filtración por membranas. ....	9
<b>Figura 5.</b> Representación del proceso de coagulación-floculación. ....	10
<b>Figura 6.</b> Ejemplo de operación de un tanque de sedimentación. ....	11
<b>Figura 7.</b> Tipos de sedimentación: a) tipo I o discreta, donde $F_F$ es la fuerza de fricción y $F_G$ la fuerza de gravedad, b) tipo II o floculenta, c) tipo III o zonal, d) tipo IV o de compresión. ....	12
<b>Figura 8.</b> Ejemplo ilustrativo de las dos fases (lodo-agua) formadas en un proceso de... coagulación-floculación.....	14
<b>Figura 9.</b> Patrones de flujo bifásico: a) capas estratificadas, b) capas con tapones de líquido, c) dispersión de gotas finas, d) flujo anular.....	15
<b>Figura 10.</b> Geometría en 2D del tanque sedimentador sin mamparas en el plano $(r,z)$ . .	29
<b>Figura 11.</b> Geometrías propuestas para el arreglo de mamparas.....	32
<b>Figura 12.</b> Paredes fijas de las geometrías computacionales: o) representación del tanque sedimentador, j) caso de geometría con arreglo de mamparas.....	35
<b>Figura 13.</b> Paredes móviles de las geometrías computacionales: o) representación del tanque sedimentador, j) caso de geometría con arreglo de mamparas.....	36
<b>Figura 14.</b> Entrada de flujo de agua residual: o) representación del tanque sedimentador, j) caso de geometría con arreglo de mamparas. ....	37
<b>Figura 15.</b> Salida de flujo de agua residual: o) representación del tanque sedimentador, j) caso de geometría con arreglo de mamparas. ....	38
<b>Figura 16.</b> Geometrías propuestas con existencia de una purga colocada en el lado inferior o base.....	39
<b>Figura 17.</b> Ejemplo de mallado: o) geometría original del tanque sedimentador, j) geometría con disposición de mamparas.....	40
<b>Figura 18.</b> Etapas del método de elemento finito. ....	41

<b>Figura 19.</b> Vistas de las geometrías como resultado de aplicar la simetría axial: 1o) y 2o) para el tanque sedimentador original, 1j) y 2) ejemplo del tanque modificado con mamparas. .....	44
<b>Figura 20.</b> Perfil de velocidad para la geometría original o) del tanque sedimentador.....	45
<b>Figura 21.</b> Perfiles de velocidad para cada una de las geometrías diseñadas con arreglo de mamparas.....	51
<b>Figura 22.</b> Perfil de velocidad determinado justo a la mitad de la geometría o).....	52
<b>Figura 23.</b> Perfiles de velocidad determinados justo a la mitad de cada geometría diseñada. .....	54
<b>Figura 24.</b> Líneas de flujo para la geometría original o) del tanque sedimentador.....	55
<b>Figura 25.</b> Líneas de flujo para cada geometría propuesta con arreglo de mamparas. ...	57
<b>Figura 26.</b> Líneas de flujo de la geometría seleccionada.....	59
<b>Figura 27.</b> Distribución de concentración de fase dispersa a 600 s. ....	60
<b>Figura 28.</b> Resultados experimentales del tratamiento del agua de mezcla. ....	62
<b>Figura 29.</b> Perfil de presiones para la geometría original o) del tanque sedimentador.....	63
<b>Figura 30.</b> Perfil de presiones para cada geometría con arreglo de mamparas.....	64
<b>Figura 31.</b> Concentración de fase dispersa a la salida de la geometría j).....	67
<b>Figura 32.</b> Concentración de fase dispersa a la salida de la purga en la geometría j). ....	67



## RESUMEN

La actividad industrial curtidora contamina en gran medida a causa de las características de sus aguas residuales que desecha hacia el medio ambiente, por lo que se han dirigido esfuerzos para el desarrollo de procesos de tratamiento que minimicen el impacto ambiental. Dentro de la División de Ciencias Naturales y Exactas se ha diseñado y construido un prototipo de sedimentador a escala pre-piloto que forma parte de un equipo empleado como reactor de electrocoagulación para tratar y remover contaminantes de un efluente real de este tipo de industria. Sin embargo, se ha reportado que las zonas funcionales de los tanques de sedimentación presentan problemas de diseño hidráulico y de proceso que dependen del comportamiento de la materia en suspensión dentro del tanque, durante la remoción y después del depósito de lodos o espumas.

Por lo tanto, en este proyecto se logró el diseño de 10 propuestas de modificación de dicho tanque por medio de una serie de mamparas verticales que permitan el flujo descendente-ascendente de una corriente de fluido con la finalidad de incrementar la eficiencia del sedimentador circular. Con este fin se utilizó el software de dinámica de fluidos COMSOL Multiphysics donde se planteó un modelo de mezcla en dos dimensiones con simetría axial junto con el modelo de turbulencia  $k - \varepsilon$  para simular el comportamiento del flujo bifásico cuya fase dispersa está conformada por partículas sólidas en suspensión con la suposición de que mantienen un diámetro constante.

Se obtuvieron resultados cualitativos y cuantitativos representados por perfiles de velocidad, líneas de flujo, concentración de fase dispersa y perfiles de presiones, con los cuales se realizó la evaluación y comparación de los diseños. De acuerdo con sus características se seleccionó aquel diseño que presentó una combinación adecuada de zonas de turbulencia junto con regiones de flujo ordenado para favorecer los procesos de coagulación-floculación y sedimentación a través de un mejor contacto o mezclado de la corriente de agua a tratar. Tal diseño incluyó la creación de una segunda salida sobre la base del tanque, denominada como purga, cuya función es aumentar la remoción de sólidos sedimentados y permitir la obtención de agua clarificada en la salida superior del equipo.

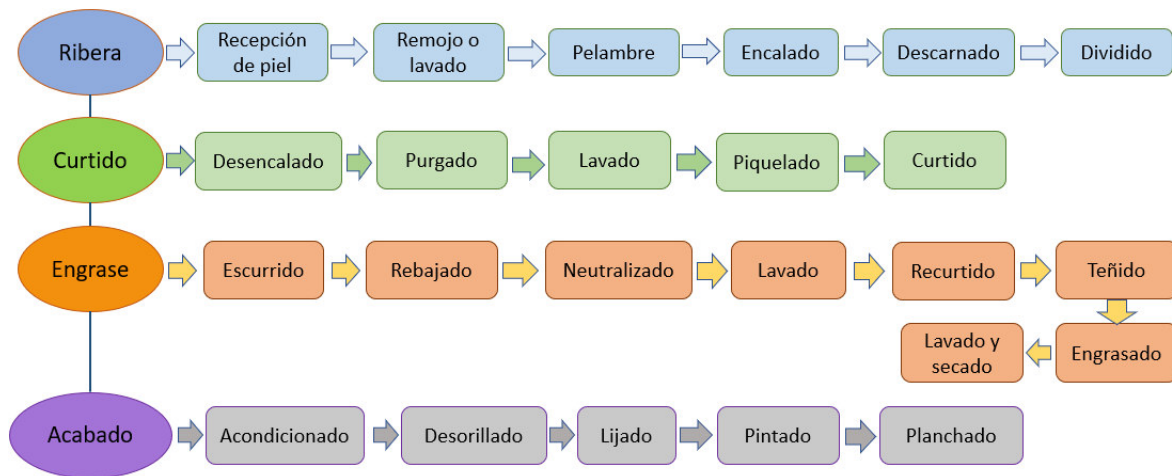
## INTRODUCCIÓN Y JUSTIFICACIÓN

La contaminación y escasez del agua es uno de los problemas más severos que aquejan a la población hoy en día tanto a nivel local como mundial. Según las Estadísticas del Agua en México de 2018 se estima que solamente el 0.77% de ésta se encuentra como agua dulce accesible al ser humano. Además, se ha determinado en años recientes que los factores más contundentes en la disminución de los recursos hídricos son el crecimiento de la población y el cambio climático, aunado a la ineficiente extracción del agua del subsuelo y la falta de infraestructura adecuada para el tratamiento de las aguas residuales. Los datos actualizados en México para el 2017 indican que el 76% de la extracción del agua en el país se distribuye para la agricultura, 9.6% se dirige a la industria y el 14.4% para uso de abastecimiento público (Conagua, 2018). Cabe resaltar que la mayor parte del territorio nacional, es decir, dos terceras partes de éste se catalogan como zonas áridas o semiáridas (Conagua, 2018) lo cual supone un problema de poca disponibilidad de agua.

La actividad industrial es la que suele contaminar en mayor medida debido a la composición de las descargas de aguas residuales hacia el medio ambiente. Entre los tipos de industria que más agua emplean dentro del país se encuentran la petroquímica, manufacturera, metálica, maderera, de alimentos y azucarera, así como la papelera. Ahora bien, el estado de Guanajuato ha presentado un incremento de sus centros industriales a la par del crecimiento y concentración de su población principalmente en los municipios de Silao, León, Salamanca, Irapuato y Celaya. Asimismo, estos municipios son los que poseen mayor contaminación del agua donde el principal problema ambiental de este tipo se encuentra en el río Lerma. Cabe mencionar que los parques industriales mantienen distintos enfoques en cada uno de los municipios, donde se realizan actividades propias de la industria automotriz, petroquímica, farmacéutica, curtidora y agroindustrial. En estas zonas hay una evidente falta de control de desechos y deficiencias en el suministro de energía eléctrica y agua; además, la afectación a la calidad del agua y su decreciente disponibilidad se origina por el uso de los hidrocarburos, solventes, cromo, agroquímicos (Caldera et al., 2020) y otros metales pesados.

La industria curtidora de León es sumamente representativa de la ciudad por el sector del calzado; sin embargo, el procesado de las pieles ha sido el origen de numerosos problemas en cuanto a la disposición de los desechos generados que pone en riesgo la disponibilidad del agua, no sólo para el consumo humano sino también de la producción. Dicho proceso

se compone de las siguientes etapas: ribera, curtido, post-curtido o engrase y el acabado. En la figura 1 se resumen los pasos que conforman cada una de las etapas del curtido.



**Figura 1.** Principales etapas del proceso de curtido.

En la fase de la ribera se hace uso del óxido de calcio, mientras que en el curtido se obtiene el wet blue interviniendo sustancias como sales de amonio, formaldehído, alumbre, bisulfito de sodio (Caldera et al., 2020), ácido fórmico, sulfúrico y sulfhídrico, tensoactivos, sulfato de cromo y/o taninos. En el post-curtido se utilizan curtientes, colorantes y aceite y en la última etapa del cuero se realiza un pintado con resinas o pigmentos, además se brinda cierto tipo de textura, brillo o color a la piel.

De acuerdo con lo anterior, el agua residual de la industria curtidora se caracteriza por altos niveles de uso de agua y contaminación con presencia de materia orgánica, sólidos suspendidos, acidez o alcalinidad, y compuestos tóxicos que ponen en riesgo la salud. La importancia de la producción de pieles es muy significativa, por lo que se busca la generación de procesos que habiliten el tratamiento del agua residual con el fin de reusarla, o bien, el empleo de sistemas de energías renovables que disminuyan dicho impacto ambiental. Este tipo de efluentes se tratan con métodos físicos y químicos como lo pueden ser la sedimentación, filtración, neutralización o coagulación-floculación. En este sentido, dentro de la Universidad de Guanajuato se ha diseñado y construido un prototipo de sedimentador a escala pre-piloto en el laboratorio de calidad del agua de la División de Ciencias Naturales y Exactas (DCNE). Este equipo se ha empleado como reactor de electrocoagulación para el tratamiento de aguas residuales de una industria curtidora de la ciudad de León, Guanajuato.

El proceso tradicional de coagulación-floculación consiste en agregar coagulantes, floculantes y coadyuvantes al agua a purificar para generar una atracción entre las partículas suspendidas y agruparlas con el fin de que se formen flóculos (partículas coloides desestabilizadas), donde luego se permite la sedimentación de estos sólidos para separar el líquido clarificado de los lodos. Si bien, este proceso es sencillo, utiliza productos químicos y procesos secundarios que puede elevar significativamente los costos de operación. Por otro lado, los tratamientos electroquímicos han demostrado tener ventajas en cuanto a la compatibilidad ambiental, seguridad, selectividad, versatilidad y eficiencia energética (El-Ashtoukhy et al., 2020). La electrocoagulación implica la ventaja de la generación del coagulante en el mismo medio acuoso a través de la electro-oxidación del ánodo metálico, ya sea de hierro o aluminio, y además la cantidad de lodos generados es mucho menor a su contraparte química. La aplicación de electricidad permite llevar a cabo las reacciones químicas que modifican el estado de equilibrio y la forma en la que se encuentran los contaminantes. De esta manera, se forman componentes hidrofóbicos que se precipitan y/o flotan (Arango, 2005), y se pueden remover mediante la sedimentación o algún otro tipo de tratamiento secundario.

La sedimentación es un proceso físico que separa los contaminantes más densos o las partículas en suspensión con un peso específico mayor que el agua, gracias a la acción de la fuerza de gravedad. Al final siempre se obtendrá un fluido clarificado y una suspensión con mayor concentración, aunque la forma en la que se desarrolle el proceso dependerá de las propiedades de las partículas presentes, ya sea que permanezcan constantes, cambien de forma, tamaño, densidad o interactúen con el agua durante la caída o que produzcan alguna zona compacta en los equipos de operación. También influyen el tamaño, disposición o configuración del equipo (generalmente tanques) ya que estos aspectos determinarán el patrón de flujo de la alimentación en el interior, así como el tipo de sedimentación de las partículas al permitir que los sólidos con mayor gravedad específica a la del líquido sedimenten y aquellas con menor gravedad específica tiendan a flotar. Además, deben de considerarse parámetros operativos como la concentración de sólidos, flujo de agua, velocidad y temperatura (Joodi y Rashid, 2014), aunado al volumen de la capa sobrenadante o los lodos espesados.

Debido a las particularidades del proceso, se han realizado estudios teóricos y experimentales sobre la evaluación de la eficiencia hidráulica de los tanques de sedimentación (Adams y Rodi, 1990). Se ha reportado que las zonas funcionales de estos

equipos presentan comúnmente problemas de diseño hidráulico y de operación que dependen, a su vez, del comportamiento de la materia en suspensión dentro del tanque, durante la remoción y después del depósito de lodos o espumas. Por ejemplo, los tanques de sedimentación primaria que preceden a procesos biológicos se suelen diseñar con el fin de reducir los tiempos de detención hidráulicos y aumentar la carga de superficie (Feres, 1999), excepto cuando existe una recirculación de lodos activados. Si se considera dentro del diseño que todos los sólidos del agua residual son partículas discretas de tamaño, densidad y gravedad específica uniformes, la eficiencia de remoción de sólidos dependería sólo del área superficial y del tiempo de retención (Feres, 1999). Mientras más corto sea el tiempo de retención menor será el porcentaje de remoción de sólidos, aunque también involucra efectos más pequeños como los ocasionados por la profundidad del equipo o la temperatura de operación, ya que a bajas temperaturas la viscosidad tiende a aumentar y reducir la eficiencia de la remoción de sólidos. En este sentido, resalta la importancia del modelado numérico para modificar los diseños y mejorar el funcionamiento de los tanques sedimentadores, al igual que una gran cantidad de equipos de procesos químicos y físicos, haciendo uso de herramientas informáticas tal como la dinámica de fluidos computacional (CFD).

La simulación en CFD de los equipos para sedimentación u otros procesos físicos requiere de una serie de pasos ejecutados a través de un software comercial, por ejemplo, ANSYS Fluent o COMSOL Multiphysics. Al inicio se debe de generar el dibujo de la geometría del objeto o equipo que puede ser en dos o tres dimensiones, en seguida es necesario crear un mallado que dividirá a dicha geometría en secciones, elementos o volúmenes, entre los que varían las formas triangulares y cuadriláteras en el caso de 2D, o bien, piramidales, tetraédricas, hexaédricas y, recientemente, poliédricas (Laleh et al., 2012) para 3D. Luego, se deben especificar las variables de interés, parámetros, condiciones iniciales y de frontera. Una vez que se ha determinado esto, el software procede a resolver el conjunto de ecuaciones del modelo que describe el flujo del fluido por medio de un proceso iterativo. Cuando se logra la convergencia de la solución se obtienen valores numéricos para las variables implicadas en cada punto en el que se ha discretizado la geometría. Finalmente, es posible realizar un post-procesamiento de estos resultados que permitan visualizarlos a través de gráficas, tablas o figuras, y de este modo, favorecer su interpretación y/o realizar modificaciones al planteamiento de la simulación en dado caso que no sean satisfactorios.

Entonces, el diseño de los tanques sedimentadores mediante CFD facilita la predicción al igual que la descripción del patrón de flujo y la remoción de sólidos en la sedimentación de acuerdo con Joodi y Rashid (2014). Por estas razones se pretende aumentar la eficiencia de este prototipo por medio de un diseño novedoso con mamparas de flujo ascendente dispuestas de manera vertical, con las que se busca romper el flujo al imponer un movimiento secuencial descendente-ascendente, así como permitir un mejor contacto y mezclado de la corriente de agua a tratar. El diseño de las mamparas para el tanque sedimentador ha sido un trabajo teórico debido a la imposibilidad de asistir de forma presencial a los laboratorios de la DCNE originada por la contingencia sanitaria de COVID-19.

## **HIPÓTESIS**

A través de un modelo de dinámica de fluidos bifásico, se logrará realizar un diseño de una serie de mamparas verticales que permitan el flujo ascendente-descendente de una corriente e incrementen la eficiencia de un sedimentador circular prototipo que se encuentra en el laboratorio de calidad de agua de la División de Ciencias Naturales y Exactas (DCNE), cuyo propósito es el tratamiento y remoción de contaminantes del agua residual de una industria curtidora.

## **OBJETIVOS**

### ***Objetivo general***

1. Diseñar mamparas de flujo vertical para un sedimentador de electrocoagulación.

### ***Objetivos particulares***

1. Plantear el modelo de flujo bifásico para el flujo dentro del sedimentador.
2. Proponer diez diseños de mamparas para el sedimentador.
3. Determinar los perfiles de velocidad, concentraciones de fase dispersa y presiones de los diferentes diseños.
4. Evaluar y comparar los resultados obtenidos para la selección del mejor diseño.

## CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES

### ***Problemática e importancia del agua como fuente de abastecimiento***

El agua es un compuesto vital e indispensable para la vida de los seres vivos, el mantenimiento y función de los ecosistemas, así como un recurso necesario para toda actividad humana desde su consumo doméstico hasta un nivel de producción industrial. Sin embargo, desde hace algunas décadas se ha resaltado que a medida que el progreso de la sociedad se incrementa, también se eleva el nivel de contaminación del medio ambiente y, por ende, se afecta la calidad del agua.

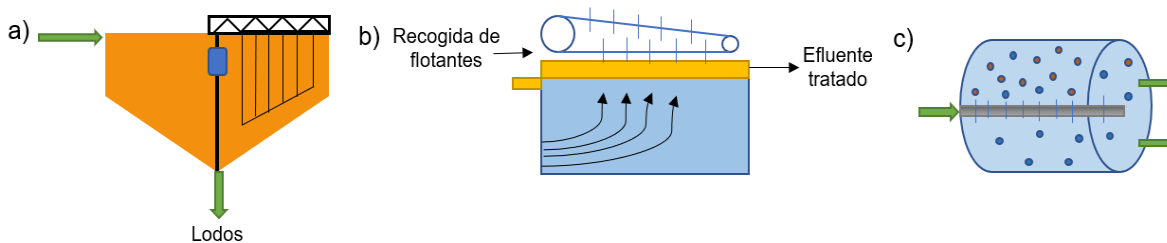
En el año 2018 se reportaba que la disponibilidad del agua en el mundo era de 1386 billones de  $\text{hm}^3$ , donde el 97.5% correspondía a agua salada y 2.5% a dulce de donde casi el 70% no está disponible para consumo humano (Conagua, 2018) por encontrarse en estado sólido en las zonas de bajas temperaturas, por ejemplo, conformando los glaciares. Debido a la creciente demanda de agua dulce para la satisfacción de las necesidades de la numerosa población mundial, se han originado problemas significativos para abastecer de agua potable y con calidad adecuada para diversos procesos, lo cual se va reflejando en un problema de escasez cada vez más preocupante. Esta situación se ha nombrado estrés hídrico, que se presenta cuando la cantidad de agua usada no se repone de manera natural y se indica con un porcentaje que relaciona el consumo total de agua que consume una región o país en comparación con la cantidad que dispone en un año.

Además, las principales vías de contaminación del agua contenida a nivel superficial y en las zonas subterráneas corresponden, en buena medida, a las descargas de aguas residuales sin tratamiento previo (Semarnat, 2009). Éstas son la combinación de residuos líquidos que provienen tanto de instituciones públicas como establecimientos industriales, comerciales (Metcalf & Eddy, 1995), al igual que de zonas con actividades agrícolas y ganaderas. Entre los efectos que ocasiona dicha contaminación, se encuentra la descomposición de la materia orgánica, disminución de oxígeno en la composición del agua, crecimiento de bacterias y otros microorganismos, eutrofización, la presencia de compuestos nocivos; por lo que resulta necesario proteger la salud pública y el medio ambiente (su fauna y flora).

## **Tratamiento de aguas residuales**

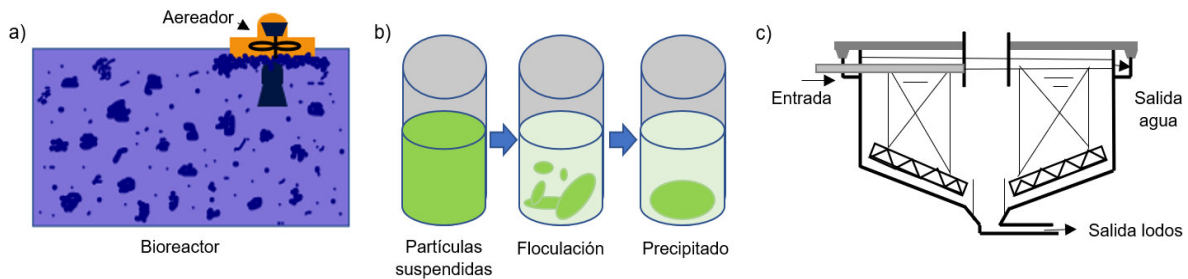
De acuerdo con los inconvenientes descritos anteriormente, es sumamente deseable que se haga una evacuación inmediata del agua residual desde sus fuentes de generación para que después se pueda llevar a cabo su tratamiento, eliminación o reutilización (Metcalf & Eddy, 1995), buscando que se pueda mejorar su calidad para que pueda volver a ser aprovechable. Este fin se realiza por medio de procesos físicos u operaciones unitarias químicas y biológicas, que por su grado de descontaminación se clasifican en pretratamientos, tratamientos primarios, secundarios y terciarios; siendo las operaciones principales el tamizado, coagulación-floculación, sedimentación, filtración y desinfección (Glynn y Heinke, 1999). La selección, análisis y diseño de un proceso u otro es una labor muy importante que depende del tipo de fuente del agua, ya sea subterránea, superficial o de mar; así como de la calidad requerida y los objetivos de eliminación de contaminantes bajo alguna circunstancia.

Entonces, según el grado de depuración en el pretratamiento se busca eliminar aquellos contaminantes suspendidos o flotantes, arena o sustancias oleosas por medio del proceso de desbaste, desengrasado, desarenado, homogenización o neutralización. El tratamiento primario consiste en eliminar los sólidos orgánicos suspendidos, empleando así la sedimentación primaria, flotación y filtración, según sea el caso (figura 2). Mientras que en el tratamiento secundario se remueve la materia orgánica disuelta y coloidal, a través de procesos biológicos, coagulación-floculación o sedimentación secundaria (figura 3). Por último, el tratamiento terciario se apoya en la purificación adicional para cumplir con ciertos criterios específicos de calidad del agua como la remoción de nitrógeno o fósforo; utilizando, por ejemplo, combinaciones de procesos (figura 4) como lo pueden ser la desinfección, ablandamiento o filtración por membranas.

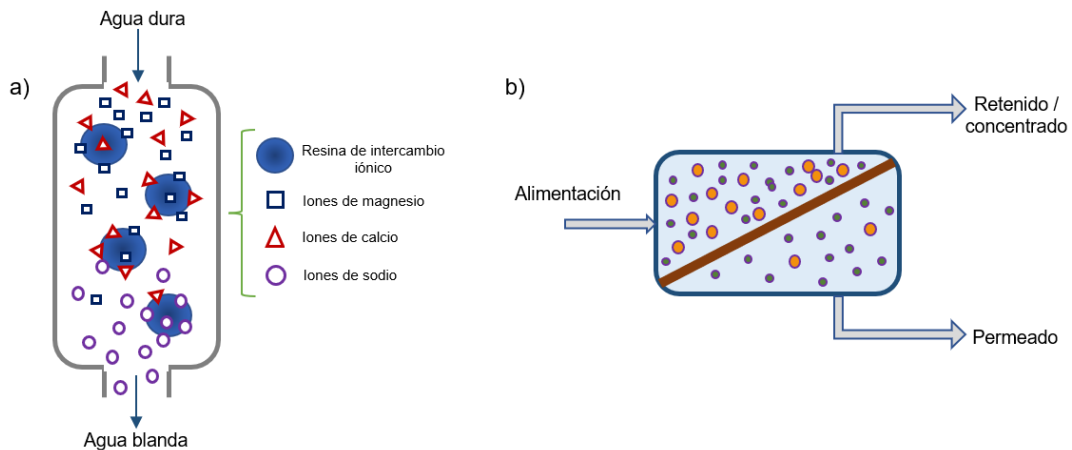


**Figura 2.** Tratamiento primario: a) sedimentación primaria, b) flotación, c) filtración.





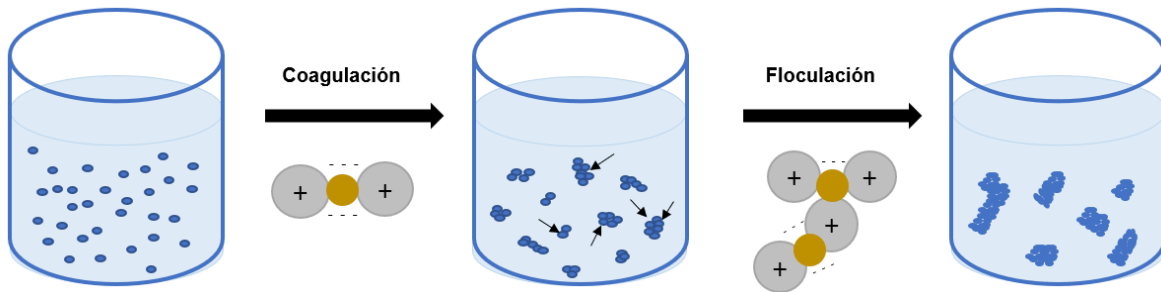
**Figura 3.** Tratamiento secundario: a) proceso biológico, b) coagulación-floculación, c) sedimentador secundario.



**Figura 4.** Ejemplos de tratamiento terciario: a) ablandamiento, b) filtración por membranas.

### **Electrocoagulación para el tratamiento de aguas residuales**

En los últimos años se ha incrementado el interés hacia el proceso electroquímico que representa la electrocoagulación, ya que se ha ubicado como una técnica con mayores ventajas en cuestión de tratamiento de aguas con respecto a las tecnologías tradicionales (Restrepo et al., 2006); además su uso es relativamente sencillo y permite una tasa alta de remoción de contaminantes orgánicos e inorgánicos, incluso en una fase de pretratamiento puede disminuir el consumo total de energía (Almukdad, 2021) del proceso. En la electrocoagulación se aplican los principios que caracterizan a la coagulación-floculación. Por un lado, la coagulación es un proceso químico que ayuda a desestabilizar partículas coloidales, las cuales tienen una doble capa eléctrica, suelen tener muy buena estabilidad en agua y son insolubles; mientras que a continuación, se efectúa la floculación mediante un mezclado suave de la suspensión para favorecer la formación de sólidos aglomerados que aumentan su masa llamados coágulos o flóculos (figura 5).



**Figura 5.** Representación del proceso de coagulación-floculación.

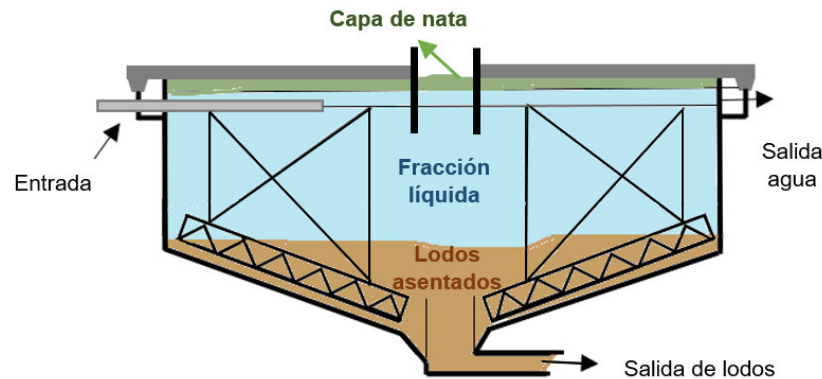
En conjunto, se llevan a cabo estos procesos gracias a la acción de una fuente de corriente eléctrica directa con bajo voltaje que se hace circular a través de varios electrodos metálicos (electrodos de sacrificio), los cuales aportan iones desestabilizadores de partículas coloidales (Gonzalo, 2002) que no se asientan por sedimentación simple, y comúnmente están hechos de aluminio y hierro.

La sedimentación puede tener lugar después de un proceso de electrocoagulación o coagulación-floculación en el caso de que se disponga de aguas muy turbias o, en caso contrario, se puede prescindir de ésta cuando las aguas tienen una turbidez moderada (Glynn y Heinke, 1999). Constituye uno de los procesos de tratamiento con mayor antigüedad y se fundamenta en la separación, por medio de la acción de la gravedad, de partículas suspendidas con un peso específico mayor al del agua (Metcalf & Eddy, 1995). De este modo, el producto será un efluente clarificado junto con un lodo o fango de una determinada concentración de sólidos, lo que permite que pueda manejarse y tener otro tipo de tratamiento subsecuente.

### ***Operación unitaria de sedimentación***

La sedimentación puede efectuarse en instalaciones en línea, con tanques combinados o independientes, o bien, en estanques (clarificadores o tanques de asentamiento) cuadrados, rectangulares o redondos; además, se pueden operar con un flujo radial o ascendente. El objetivo principal de estos equipos es separar las fracciones líquida y sólida del agua tratada, por lo regular, la alimentación entra en algún extremo de la parte superior o de forma central, el líquido clarificado sale por el otro extremo o de manera periférica, la nata flota sobre la superficie y los lodos conformados por las partículas más densas se asientan en el fondo donde se retiran también para un posible tratamiento posterior (figura

6). Asimismo, se pueden colocar deflectores al interior de los tanques para promover el control del patrón de flujo y ayudar a separar ambas fases, líquida y sólida, durante el proceso. Por lo que en el diseño de los tanques de sedimentación se toman en cuenta factores como la turbulencia que causa la aceleración del agua a la salida del sistema, o la velocidad y/o modo de sedimentación de las partículas (Davis y Masten, 2005).

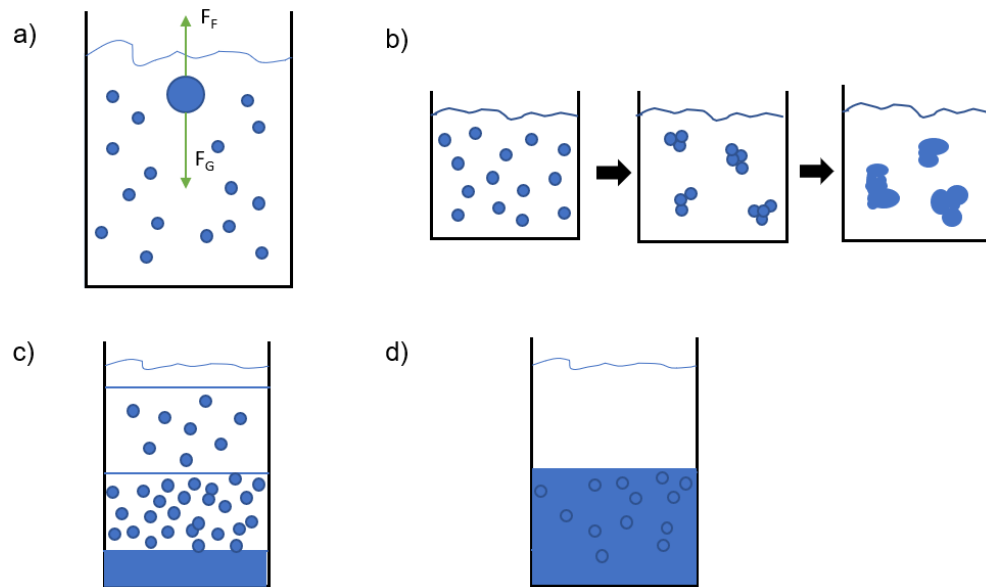


**Figura 6.** Ejemplo de operación de un tanque de sedimentación.

Se pueden distinguir cuatro tipos de sedimentación tanto para partículas discretas como floculentas (figura 7):

- Sedimentación tipo I (libre o discreta). Ocurre en suspensiones donde la concentración de las partículas es baja y se asientan a velocidad constante sin interactuar de forma significativa, es decir, no cambian de tamaño, no se floculan ni se adhieren entre sí. Una de sus aplicaciones se encuentra en la remoción de arena.
- Sedimentación tipo II (floculenta). Las partículas derivadas del proceso de coagulación pueden aglutinarse y flocular durante su asentamiento, lo que ocasiona que tanto su velocidad de sedimentación, tamaño y masa cambien constantemente.
- Sedimentación tipo III (zonal o frenada). Es representativa de las suspensiones con una gran concentración de partículas (floculadas y mayor a 500 o 1000 mg/L), de modo que tienden a sedimentarse en masa, por tanto, se identifica con una capa límite muy definida entre los fangos y el líquido sobrenadante, es decir, hay dos zonas: una transparente y otra de lodos. Dichas interacciones ocasionan una disminución en la velocidad de sedimentación.
- Sedimentación tipo IV (de compresión). Se da cuando la concentración de partículas es tan alta que se forma una estructura y sólo puede producirse un nuevo

asentamiento por compresión (Zatarain, 1988), por lo que es común identificarla en el fondo de un clarificador.



**Figura 7.** Tipos de sedimentación: a) tipo I o discreta, donde  $F_F$  es la fuerza de fricción y  $F_G$  la fuerza de gravedad, b) tipo II o floculenta, c) tipo III o zonal, d) tipo IV o de compresión.

### **Modelado matemático y predicción de la sedimentación**

En cuanto al modelado matemático de estos tipos de sedimentación, el caso de la sedimentación simple de partículas discretas se representa con la ley de Stokes (1) que relaciona las fuerzas a las que está sometida una partícula dentro del fluido en reposo y la velocidad de descenso o sedimentación con régimen laminar.

$$V = \frac{gD_p^2(\rho_p - \rho)}{18\mu} \quad (1)$$

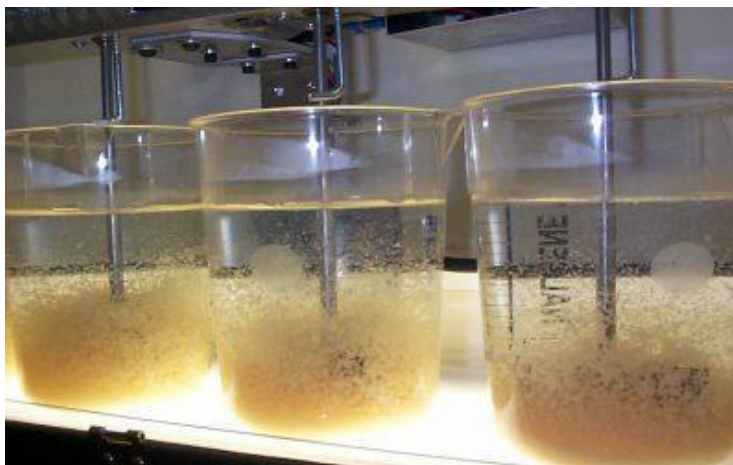
Donde  $V$  es la velocidad de sedimentación de la partícula,  $D_p$  y  $\rho_p$  el diámetro y densidad de partícula, respectivamente,  $\mu$  la viscosidad dinámica y  $\rho$  es la densidad del fluido. Con esta ley se concluye que un sedimentador debe diseñarse para la mínima temperatura esperada del agua y para un determinado tamaño mínimo de partícula (Pérez, 1981). También es posible considerar que las partículas floculadas ya definidas presentan un comportamiento similar a las discretas dentro de un sedimentador. Sin embargo, si nos enfocamos en la sedimentación tipo III, los efectos causados por la floculación, la profundidad del tanque y la carga superficial se reflejan en la eficiencia y la velocidad de sedimentación. Esta última no es constante, sino que varía e incrementa con el tiempo

haciendo que el fenómeno sea más complejo, lo que ha dificultado el desarrollo de ecuaciones matemáticas que describan adecuadamente la operación de sedimentación, por lo que se recurre a ensayos experimentales (Zarate, 1995) y, recientemente, a simulaciones computacionales.

### ***Dinámica de fluidos computacional para simular la sedimentación***

Existen investigaciones acerca del análisis y diseño de tanques de sedimentación en el tratamiento de aguas residuales basados en la cantidad o volumen de fluido a tratar, la fracción líquida a la salida, los lodos que se acumularán en el fondo del tanque, así como la nata que se formará y flotará sobre la superficie. Aunque existe una menor cantidad de trabajos que implican también el desarrollo de modelos sobre dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) que utilizan, principalmente, el método de volumen finito. Algunos de éstos se han centrado en el efecto de sólidos y cargas hidráulicas en sedimentadores circulares (McCorquodale y Zhou, 1993), en la aplicación de distintas velocidades de sedimentación y de partícula (Iman et al., 1983), sedimentadores continuos (Luna et al., 2019), sedimentadores de láminas por gravedad (Tarpagkou y Pantokratoras, 2014), simulación de modelos en dos dimensiones (Stamou, et al., 1989), flujo con flotabilidad neutra (Adams y Rodi, 1990) y modelos 2D considerando diferentes tamaños de partícula para simular la floculación (Lyn et al., 1992).

Se puede entender CFD como el campo de estudio dedicado a solucionar ecuaciones del flujo de fluidos con el uso de algoritmos numéricos (Cengel y Cimbala, 2006) implementados dentro de software computacional. Los trabajos de CFD posibilitan predecir comportamientos del sistema, realizar pruebas para analizar los efectos internos y externos de variables sin necesidad de manipularlo de manera física o tangible. La interpretación juega un rol importante en la discusión de resultados, el establecimiento de nuevas condiciones y la modificación de variables. A la par, los análisis experimentales y en CFD son complementarios permitiendo conocer así propiedades globales o particulares de los fluidos involucrados. Además, los datos que se obtienen de manera experimental son de utilidad para comparar y validar los resultados derivados de la simulación. Por consiguiente, se considera una alternativa viable y de interés la realización de simulaciones con dinámica de fluidos bifásica (líquido-líquido) para el modelado del fenómeno de sedimentación de partículas floculadas inmersas en el agua residual (figura 8).



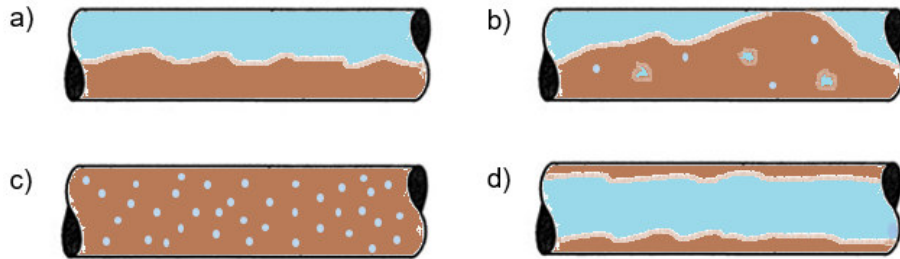
**Figura 8.** Ejemplo ilustrativo de las dos fases (lodo-agua) formadas en un proceso de coagulación-floculación.

El flujo de fluidos bifásicos ha sido ampliamente explorado para los flujos simultáneos de gas-líquido con aplicación en la industria petroquímica, donde el diseño de equipos y tuberías requiere la predicción de las características del flujo como los gradientes de presión, retención de líquido (hold up) y patrones de flujo (Brill y Dale, 1991). A pesar de los importantes usos a nivel industrial de los flujos de dos líquidos inmiscibles, por ejemplo, en las tuberías que transportan mezclas de aceite y agua; no se han estudiado mucho en comparación con los de gas-líquido. Otra diferencia que destacar es que los sistemas de gas-líquido se caracterizan por tener unas relaciones de densidad y viscosidad bajas, mientras que en los sistemas líquido-líquido la diferencia de densidad entre ambas fases es muy baja, haciendo que el papel de la gravedad disminuya y, asimismo, la relación de viscosidad se extiende sobre muchos órdenes de magnitud (Brauner, 2003).

Además, es posible aplicar el modelo para sistemas con comportamiento de fluidos newtonianos o no newtonianos. En los primeros, el esfuerzo cortante es linealmente proporcional a la razón de deformación por corte (Cengel y Cimbala, 2006), ejemplos de éstos son el agua, aire y aceites. En los fluidos no newtonianos ocurre el caso contrario, ya que el esfuerzo de corte no se relaciona linealmente, incluyendo a los fangos y suspensiones coloidales (Cengel y Cimbala, 2006).

Conforme a los distintos estudios sobre el flujo bifásico de líquidos inmiscibles, se ha reportado, por medio de fotografías, videos, observaciones visuales o mediciones de caída de presión, que los patrones de flujo se pueden dividir en cuatro tipos (Brauner, 2003), aunque en un sistema real se puede presentar una combinación (figura 9):

- Capas estratificadas con interfaz ondulada.
- Capas con una serie de tapones grandes de líquido, alargados o esféricos.
- Dispersión de gotas finas de un líquido en el otro.
- Flujo anular, donde un líquido representa el núcleo y el otro es el anillo.



**Figura 9.** Patrones de flujo bifásico: a) capas estratificadas, b) capas con tapones de líquido, c) dispersión de gotas finas, d) flujo anular.

Cabe mencionar que, en este caso, toman mayor importancia las fuerzas de tensión superficial y la unión o adherencia a la pared de los líquidos, teniendo efecto sobre el patrón de flujo. Con mucha frecuencia, se suele encontrar el flujo laminar para los sistemas de flujo bifásico y los fluidos que son muy viscosos. Para identificar el régimen de flujo se emplea el número adimensional de Reynolds e indica que éste depende de la relación entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas de un fluido, así como de la geometría del sistema (Pérez et al., 2018).

$$Re = \frac{\text{Fuerzas inerciales}}{\text{Fuerzas viscosas}} = \frac{VL}{\nu} = \frac{\rho VL}{\mu} \quad (2)$$

Donde  $V$  es la velocidad de flujo (m/s),  $L$  es una longitud característica de la geometría,  $\nu = \mu/\rho$  es la viscosidad cinemática del fluido ( $\text{m}^2/\text{s}$ ),  $\mu$  es la viscosidad dinámica y  $\rho$  es la masa específica o densidad.

El número de Reynolds crítico determina cuando un flujo se ha vuelto turbulento y será diferente, como ya se había mencionado, para cada geometría (diámetro hidráulico) y condición de flujo. En la práctica es común encontrar geometrías de tuberías circulares, por lo que se puede especificar que el flujo laminar se encuentra en  $Re \leq 2300$ , turbulento para  $Re \geq 4000$  y transicional en  $2300 \leq Re \leq 4000$  (Cengel y Cimbala, 2006).

### ***Ecuaciones de conservación asociadas al movimiento de fluidos***

El comportamiento dinámico de un fluido está regido por las ecuaciones de conservación de la masa o ecuación de continuidad, la conservación del momento cinético o de la cantidad de movimiento y la conservación de la energía (Cengel y Cimbala, 2006). De este modo, el flujo se considera continuo y se hace el análisis en escala macroscópica, lo cual implica que las propiedades involucradas sean la velocidad, presión, densidad, temperatura y las derivadas espaciales y temporales (Versteeg y Malalasekera, 2007). La conservación de alguna de las magnitudes mencionadas se analiza dentro de un volumen de control que esté previamente definido, considerando así las variaciones del flujo a través de sus fronteras y los efectos debidos a fuerzas internas o externas que actúan sobre éste. Entonces, el flujo que atraviesa las fronteras de dicho volumen o elemento puede deberse al transporte convectivo y al difusivo por consecuencia del movimiento entre capas de moléculas.

Dichas ecuaciones describen el flujo laminar gobernado también por la ley de viscosidad de Newton, entendiendo a la viscosidad como una fuerza de deslizamiento o rozamiento interno de un fluido (Bélendez, 1992). Esta ley establece la relación entre el esfuerzo ( $\tau$ ), viscosidad dinámica ( $\mu$ ) y la velocidad ( $v_x$ ) por influencia de la suma de fuerzas sobre una partícula; en coordenadas cartesianas se expresa:

$$\tau = -\mu \frac{dv_x}{dy} \quad (3)$$

Por lo tanto, es posible diferenciar dos tipos de fuerzas que actúan sobre las partículas de un fluido: superficiales como la presión, fuerzas viscosas y de gravedad; y corporales tales como fuerza centrífuga, de Coriolis o electromagnética (Versteeg y Malalasekera, 2007).

La ecuación de continuidad para un fluido compresible se presenta a continuación:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4)$$

En el primer término de la izquierda se expresa la tasa o razón de cambio de la densidad ( $\rho$ ) y el segundo corresponde al término convectivo que indica el flujo neto de masa del elemento de volumen a través de sus fronteras o contornos. Por otro lado, si se tiene un fluido incompresible la densidad será constante y la ecuación se reduce a:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5)$$



En coordenadas cartesianas está dada por:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0; \quad u, v, w = \text{velocidad en cada eje} \quad (6)$$

La ecuación de Navier-Stokes es una ecuación de transporte en derivadas parciales, de segundo orden, no lineal e inestable (Cengel y Cimbala, 2006), que expresa una cantidad de movimiento lineal en el dominio del sistema. Involucra las variables de presión ( $p$ ), la cual es una tensión normal, y la tensión viscosa ( $\tau_{ij}$ ) cuya notación de sufijo indica la dirección de las tensiones viscosas. Para estas últimas, se sabe que en muchos fluidos se expresan en función de las tasas de deformación (Versteeg y Malalasekera, 2007).

Para un fluido newtoniano incompresible y con propiedades constantes, es decir, donde la viscosidad dinámica y cinética permanecen constantes y los cambios locales de temperatura son insignificantes, se precisa que el tensor de esfuerzo viscoso será:

$$\tau_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij}; \quad \varepsilon_{ij} \text{ es el tensor de razón de deformación} \quad (7)$$

Las ecuaciones de cantidad de movimiento en coordenadas cartesianas para el desarrollo del método de volumen finito se expresan a continuación:

Componente en x:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nabla \cdot \mathbf{u} (\mu \nabla \mathbf{u}) + S_{Mx} \rightarrow \rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (8)$$

Componente en y:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nabla \cdot \mathbf{u} (\mu \nabla v) + S_{My} \rightarrow \rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y + \mu \nabla^2 v \quad (9)$$

Componente en z:

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \nabla \cdot \mathbf{u} (\mu \nabla w) + S_{Mz} \rightarrow \rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z + \mu \nabla^2 w \quad (10)$$

Ambas expresiones presentadas en cada componente son equivalentes, la contribución de las fuerzas corporales debido a la gravedad se incluye en los términos  $S_{Mx}$ ,  $S_{My}$  y  $S_{Mz}$ . Las variables  $g_x$ ,  $g_y$  y  $g_z$  son la fuerza de gravedad,  $\rho$  corresponde a la densidad,  $p$  y  $P$  son la presión, mientras que  $\frac{Du}{Dt}$ ,  $\frac{Dv}{Dt}$  y  $\frac{Dw}{Dt}$  son las derivadas materiales.

Al combinar las tres componentes en una ecuación vectorial se obtiene la ecuación en su expresión general, válida para cualquier sistema coordenado ortogonal (Cengel y Cimbala, 2006):

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\vec{\nabla}P + \rho\vec{g} + \mu\nabla^2\mathbf{u} \quad (11)$$

Donde  $\nabla^2$  es el operador laplaciano expresado como:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (12)$$

Dado que no se dispone de una solución general para estas ecuaciones y no es posible obtener una solución analítica, a menos de que se trate de casos de flujo muy específicos, se debe recurrir a métodos numéricos que permitan calcular resultados aproximados por medio de CFD.

### ***Uso de software comercial de CFD para fluidos bifásicos***

El modelado bifásico de CFD se puede llevar a cabo por medio de diferentes paquetes comerciales como el software COMSOL Multiphysics® que aplica el método numérico general de elemento finito (MEF, por sus siglas en inglés) para aproximar la solución de ecuaciones diferenciales parciales en diversos problemas ingenieriles. El método de elemento finito puede emplearse ampliamente en el modelado de sistemas con geometrías o dominios irregulares, condiciones de frontera y no linealidades (Cruz, 2015). Está conformado por la aplicación de cuatro pasos (Sadiku, 1989):

- Discretización de la región o dominio de solución en un número finito de elementos delimitados por nodos.
- Deducción de las ecuaciones que rigen un elemento.
- Enlace de todos los elementos en la región de solución.
- Solución del sistema de ecuaciones obtenido.

Se ha reportado que para un flujo con múltiples fases existen dos enfoques en el desarrollo del modelado: el método de Euler-Lagrange y el método Euler-Euler (Ahadi et al., 2020). Por lo tanto, ambos poseen un potencial de aplicación en el proceso de sedimentación. El enfoque de Euler-Lagrange resulta ser más eficaz para los modelos de deposición de partículas (Tarpagkou & Pantokratoras, 2013), la fase que es continua se desarrolla matemáticamente con la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas en el tiempo, y la fase dispersa se simula de acuerdo con la segunda ley de Newton (Laleh et al., 2012). Dentro de este enfoque se precisa el método de elemento discreto (DEM) y el de partículas discretas (DPM) (Zhong et al., 2016).

En cambio, el llamado enfoque Euler-Euler considera a las múltiples fases presentes como fases continuas que interactúan entre sí (Laleh et al., 2012) debido a que no se invaden los espacios ocupados por éstas. De forma general, este enfoque engloba los métodos del volumen de fluido (VOF), de mezcla y euleriano. En el modelo VOF las fases son inmiscibles (Badules et al., 2020) siendo de particular interés la ubicación de la interfaz que se forma entre las fases involucradas; cabe mencionar que se resuelve un solo conjunto de ecuaciones de momento, energía y fracción de volumen (Laleh et al., 2012) en las celdas computacionales en las que se haya dividido el dominio del sistema. En el modelo euleriano, las ecuaciones de continuidad y momento se resuelven para cada una de las fases y, además, el volumen total de una celda puede ser ocupado por varias fases al mismo tiempo. Es uno de los métodos más usados para los flujos multifásicos heterogéneos que comúnmente están presentes en las sedimentaciones o lechos fluidizados (ANSYS Fluent, 2014).

La simulación presentada en el desarrollo de este trabajo de investigación aborda el modelo de mezcla acoplado con el modelo de turbulencia  $k - \varepsilon$  cuya característica principal es que las fases se tratan como continuas e interpenetrantes (Zhong et al., 2016). Por lo cual se puede destinar su uso hacia flujos en los que las fases interactúan fuertemente y se disponen de forma homogénea para una mezcla de dos líquidos, un líquido o un sólido, ya sean con burbujas, gotas y sedimentación. Sin embargo, si se cuenta con burbujas de gas en un líquido, es preferible usar el modelo de flujo burbujeante (Manninen et al., 1996). El modelo de mezcla elimina la suposición básica del modelo de difusión clásico de que las partículas son esencialmente trazadoras del flujo de fluido, excepto para un asentamiento inducido por gravedad (Liang et al., 2017). Por lo que el modelo de mezcla asume que la densidad de cada fase permanece constante, resolviendo así las ecuaciones de momentum, continuidad y energía para la mezcla; asimismo, se determinan las fracciones de volumen, las velocidades relativas y de deslizamiento para las diferentes fases (Laleh et al., 2012) continuas o dispersa.

Por otro lado, los sistemas donde la turbulencia tiene lugar debido a la formación de remolinos en el flujo con diferentes tamaños, duración y tiempo de interacción representan una complejidad adicional, ya sea que se requieran eliminar o fomentar su presencia. Se han desarrollado métodos numéricos para el estudio de dicho comportamiento agrupados en: simulación de grandes remolinos (Large Eddy Simulation, LES), simulación directa numérica (Direct Numerical Simulation. DNS) y modelos de turbulencia para ecuaciones de

Navier Stokes promediadas por Reynolds (Reynolds Averaged Navier Stokes, RANS). Los modelos RANS descomponen las variables de interés como lo son la velocidad y presión en un valor promedio y uno fluctuante. Es así como las ecuaciones básicas de Navier Stokes se modifican conforme a las variables promedio, resultando en un nuevo conjunto de ecuaciones promediadas de Reynolds que incluyen un término adicional con respecto a las originales.

Los modelos de turbulencia más comunes que permiten conocer estas nuevas variables se dividen de acuerdo con el número de ecuaciones de transporte adicionales que deberán resolverse con las ecuaciones de flujo RANS (Versteeg y Malalasekera, 2007). Si este número es igual a cero entonces se usa el modelo de longitud de mezcla (conocido como mixing length model), si es uno se emplea el modelo Spalart-Allmaras, si el número es igual a dos entonces se puede emplear el modelo  $k - \varepsilon$ ,  $k - \omega$ , y el modelo de estrés algebraico; por último, el estrés de Reynolds se utiliza si se requieren siete ecuaciones extra. De acuerdo con varios trabajos reportados (Adams y Rodi, 1990; Shamber y Larock, 1981), los comportamientos de flujo y asentamiento en el proceso de sedimentación se han simulado mediante la ecuación de Navier Stokes y el modelo de turbulencia  $k - \varepsilon$ . Aunque son pocas las investigaciones (Joodi y Rashid, 2014; Tarpagkou y Pantokratoras, 2014) que han empleado el software COMSOL Multiphysics, con el uso del método de elemento finito, para el diseño de algún sedimentador en geometría 2D, con alguna implementación de elementos dispuestos dentro del equipo como lo pueden ser láminas inclinadas. De este modo resulta novedoso el diseño de sistemas compuestos por un reactor de electrocoagulación junto a dos tanques continuos de sedimentación con diferentes tamaños (Villalobos-Lara et al., 2020), donde no se ha encontrado en la literatura el reporte de algún trabajo similar que implique la modificación de un sedimentador de esta naturaleza mediante un arreglo de mamparas de flujo vertical.

Ahora bien, el modelo  $k - \varepsilon$  se centra en los mecanismos que afectan la energía cinética turbulenta. Es un modelo semi-empírico basado en las ecuaciones de transporte para la energía cinética turbulenta ( $k$ ) y para la disipación de la energía cinética turbulenta ( $\varepsilon$ ). En la derivación del modelo se asume que el flujo es totalmente turbulento y que los efectos de la viscosidad molecular son despreciables. Las expresiones del modelo estándar son:

Energía cinética turbulenta ( $k$ ):

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}k)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{v}k)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y} \right] + P_k + G_k - \rho\varepsilon - Y_M \quad (13)$$

Disipación de la energía cinética turbulenta ( $\varepsilon$ ):

$$\frac{\partial(\rho\bar{u}\varepsilon)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{v}\varepsilon)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} [P_k + C_{3\varepsilon} G_k] - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (14)$$

Donde  $P_k$  representa la generación de energía cinética turbulenta debido al gradiente de velocidad,  $G_k$  es la generación de la energía cinética turbulenta debido a las fuerzas de flotación,  $\mu_t$  es la viscosidad turbulenta,  $C_{1\varepsilon}$  y  $C_{2\varepsilon}$  son constantes,  $\sigma_k$  y  $\sigma_\varepsilon$  son los números de Prandtl turbulentos para las ecuaciones de  $k$  y  $\varepsilon$ .

En forma matemática se expresa:

$$P_k = -\rho\mu_t \left[ 2 \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (15)$$

$$G_k = -\beta g_i \frac{\mu_t}{\sigma_\theta} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (16)$$

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (17)$$

Donde  $Y_M$  representa la contribución de fluctuación de la dilatación en la turbulencia compresible debida a la tasa de disipación:

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2 \quad (18)$$

En (17),  $M_t$  indica el número de Match turbulento y se define como:

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}}; \quad a = \sqrt{\gamma R \bar{T}} \quad (19)$$

Los coeficientes del modelo son los siguientes:

$$C_\mu = 0.09; \quad C_{1\varepsilon} = 1.44; \quad C_{2\varepsilon} = 1.92; \quad \sigma_\varepsilon = 1.3; \quad C_{3\varepsilon} = \tanh \left| \frac{\bar{v}}{\bar{u}} \right|; \quad \sigma_k = 1.0$$

## CAPÍTULO 2. PLANTEAMIENTO DEL MODELO MATEMÁTICO

Se ha propuesto un modelo en dos dimensiones (2D) con simetría axial, eje  $z$  y radio  $r$  en COMSOL Multiphysics para simular el comportamiento del flujo multifásico disperso utilizando el modelo de mezcla, con la finalidad de simular el asentamiento de partículas en

el proceso de sedimentación en estado transitorio considerando un tiempo máximo de diez minutos de operación.

La simulación establecida considera, en primera instancia, el modelo de mezcla con flujo laminar resolviendo un conjunto de ecuaciones de Navier-Stokes para el momentum de la mezcla (Manninen et al., 1996) cuyos números de Reynolds son de bajos a moderados. En la interfaz de este modelo la presencia de partículas y fluido se establece como un único flujo continuo que posee propiedades macroscópicas tales como la viscosidad y la densidad dependientes de las condiciones de presión y temperatura. En este caso, la fase dispersa está representada por las partículas sólidas donde se asume que se trasladan a su velocidad terminal. Dado que se suponen los flóculos formados como partículas sólidas esféricas dicha velocidad corresponde a la que se alcanza cuando éstas se encuentran en caída libre y la fuerza de gravedad se iguala a la fuerza de arrastre, ya que es opuesta a su movimiento.

Por otro lado, se ha tomado en cuenta que el flujo de la mezcla puede presentar una transición y dirigirse hacia el régimen turbulento debido al cambio de dirección de flujo que presuponen la posición de las mamparas, traduciéndose en un número de Reynolds más alto. El modelado de turbulencia es particularmente relevante para flujos diluidos, es decir, para flujos con una fracción de volumen de fase dispersa baja (Manninen et al., 1996). Así, las características de la mezcla como la concentración de fase dispersa o la presión, entre otras propias del flujo, presentan una modificación que puede ser bastante significativa. Entonces, se ha establecido el uso de un tipo de modelos promediados de Reynolds de las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS). La resolución combina los efectos de la turbulencia con el modelo  $k - \epsilon$  para el flujo principal y el conjunto de ecuaciones de Navier Stokes para el transporte de la fase dispersa, así como la velocidad relativa de ambas fases.

Suposiciones del modelo de mezcla:

- La densidad de cada fase (continua y dispersa) se mantiene aproximadamente constante.
- Las dos fases presentes se encuentran bajo la misma acción del campo de presión.
- El tiempo de relajación (o bien, el tiempo necesario para que una partícula se ajuste o relaje su velocidad a una nueva condición de fuerza) de las partículas es corto en comparación con las escalas de tiempo del flujo macroscópico (Crowe et al., 1998).

- Sedimentación tipo I o discreta. No se considera la coalescencia o la formación de las partículas aglomeradas o flóculos, ya que estas tienen el tamaño y diámetro variable.
- La fase dispersa posee una densidad 20% mayor a la del fluido principal que es el agua residual.

A continuación, se muestran la serie de ecuaciones por resolver asumiendo el estudio temporal. La ecuación de momentum para la mezcla se indica en la ecuación (20).

$$\rho \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} + \rho(\mathbf{j} \cdot \nabla)\mathbf{j} + (\rho_d - \rho_c)(\mathbf{j}_{slip} \cdot \nabla)\mathbf{j} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] - \nabla \cdot \mathbf{K}_m + \mathbf{F}_m + \rho\mathbf{g} + \mathbf{F} \quad (20)$$

Donde las variables y sus unidades en el Sistema Internacional de Unidades (nombrada a partir de ahora como SI) son:  $\mathbf{j}$  es el vector de velocidad (m/s),  $\rho$  es la densidad (kg/m<sup>3</sup>),  $p$  es la presión (Pa),  $\mathbf{j}_{slip}$  es el flux de deslizamiento (m/s),  $\mathbf{K}$  representa la suma de las tensiones viscosas y turbulentas (kg/(m·s<sup>2</sup>)),  $\mathbf{g}$  es el vector de gravedad (m/s<sup>2</sup>) y  $\mathbf{F}$  es alguna fuerza volumétrica adicional del sistema (N/m<sup>3</sup>).

La densidad de la mezcla ( $\rho$ ) viene dada por la ecuación (21) donde los subíndices d y c indican la propiedad de la fase dispersa y continua, respectivamente. La fracción volumétrica de fase dispersa,  $\phi$ , se expresa en SI con m<sup>3</sup>/m<sup>3</sup> y la densidad,  $\rho$ , en unidades de kg/m<sup>3</sup>.

$$\rho = \rho_d\phi_d + \rho_c(1 - \phi_d) \quad (21)$$

Por otro lado, la velocidad de la mezcla se indica como la densidad de flux promediada en volumen,  $\mathbf{j}$ , que de acuerdo con SI se expresa en m/s.

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_d + \mathbf{j}_c \quad (22)$$

El flux volumétrico para la fase dispersa se expresa como:

$$\mathbf{j}_d = \phi_d\mathbf{u}_d \quad (23)$$

Mientras que para la fase continua es igual a:

$$\mathbf{j}_c = \phi_c\mathbf{u}_c \quad (24)$$

Donde  $\mathbf{u}_c$  y  $\mathbf{u}_d$  representan los vectores de velocidad para la fase continua y dispersa, respectivamente, con unidades de SI iguales a m/s.

La ecuación de continuidad de la mezcla se formula como:

$$\rho_t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (25)$$

Donde  $\mathbf{u}$  es la velocidad de la mezcla promediada en masa que posee unidades de m/s en SI. Dado que se asume en el modelo que las densidades de ambas fases son constantes, entonces se emplea la ecuación (26) en lugar de la (25), ya que es una forma más adecuada de expresar la ecuación de continuidad. Además, la tasa de transferencia de masa de la fase dispersa a la continua se indica mediante el término  $m_{dc}$  expresada en SI en kg/(m<sup>3</sup>·s).

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = m_{dc} \left( \frac{1}{\rho_c} - \frac{1}{\rho_d} \right) \quad (26)$$

La ecuación (27) muestra la ecuación de transporte para la fracción de volumen de la fase dispersa que toma en cuenta la densidad constante y la difusión debida a los remolinos formados por la turbulencia.

$$\frac{\partial \phi_d}{\partial t} + \mathbf{j} \cdot \nabla \phi_d + \nabla \cdot \mathbf{j}_{slip} = \nabla \cdot (D_{md} \nabla \phi_d) - \frac{m_{dc} \rho}{\rho_d \rho_c}; \quad \phi_d = \text{phid} \quad (27)$$

Asimismo, se utiliza el término del coeficiente de dispersión turbulenta,  $D_{md}$ , que se expresa a partir de la viscosidad turbulenta de ambas fases en unidades de SI de m<sup>2</sup>/s:

$$D_{md} = \frac{\mu_T}{\rho \sigma_T} \quad (28)$$

Donde  $\sigma_T$  es el número adimensional de Schmidt para partícula turbulenta cuyo valor generalmente oscila entre 0.35 y 0.7. En el caso de la interfaz física se considera un valor predeterminado de 0.35 (Crowe et al., 1998).

El flux de la fase dispersa en unidades SI de m/s viene dado por:

$$\mathbf{N}_{\phi_d} = \mathbf{j}_d - D_{md} \nabla \phi_d \quad (29)$$

La primera ecuación del modelo  $k - \varepsilon$  (30) corresponde al balance en derivadas parciales (ecuación de transporte) de la energía cinética del fluido turbulento,  $k$ , con unidades en SI de m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>.

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho (\mathbf{j} \cdot \nabla) k = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (30)$$

Donde el parámetro adimensional,  $\sigma_k$ , tiene el valor predeterminado de 1.0.

La segunda ecuación del modelo  $k - \varepsilon$  (31) es el balance en derivadas parciales de la tasa de disipación de la energía cinética,  $\varepsilon$ , que posee unidades en SI de m<sup>2</sup>/s<sup>3</sup>.



$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho (\mathbf{j} \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}; \quad \varepsilon = \varepsilon p \quad (31)$$

En esta última se incluyen las restricciones de realizabilidad,  $C_{\varepsilon 1}$  y  $C_{\varepsilon 2}$ , que poseen valores adimensionales de 1.44 y 1.92, respectivamente. Mientras que el parámetro  $\sigma_\varepsilon$  es igual a 1.3.

Considerando estas dos últimas ecuaciones se tiene la expresión para la determinación de la viscosidad dinámica turbulenta,  $\mu_T$ , la cual toma como referencia la densidad promedio:

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (32)$$

Donde  $C_\mu$  es una constante propia del modelo con valor de 0.09. Para calcular  $\mu_T$  y evitar indeterminaciones en las ecuaciones (30) y (31) como, por ejemplo, de división entre cero, la simulación numérica establece un límite superior de longitud de mezcla,  $l_{mix,lim}$ , que se evalúa como el lado más corto del rectángulo que delimita la geometría y la posición del tanque sedimentador. La longitud de mezcla se obtiene a partir de

$$l_{mix} = \max \left( C_\mu \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, l_{mix,lim} \right) \quad (33)$$

El término de producción  $P_k$  de las ecuaciones (30) y (31) representa la generación de la energía cinética turbulenta debido al gradiente de velocidad y queda definido en la interfaz de COMSOL por:

$$P_k = \mu_T \left[ \nabla \mathbf{j} : (\nabla \mathbf{j} + (\nabla \mathbf{j})^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{j})^2 \right] - \frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{j} \quad (34)$$

La ecuación que reúne la contribución de las tensiones viscosas y turbulentas es la siguiente:

$$\mathbf{K} = (\mu + \mu_T) (\nabla \mathbf{j} + (\nabla \mathbf{j})^T) - \frac{2}{3} (\mu + \mu_T) (\nabla \cdot \mathbf{j}) \mathbf{I} - \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \quad (35)$$

Donde  $\mu$  representa la viscosidad de la mezcla y  $\mu_T$  la viscosidad turbulenta (ambas en unidades de Pa·s), en cambio  $k$  es la energía cinética turbulenta con unidades en SI de  $\text{m}^2/\text{s}^2$ .

La suma de las tensiones viscosas y turbulentas de la mezcla incluye el término de  $\mathbf{u}_{slip}$  que se define como el vector de velocidad de deslizamiento entre las fases continua y dispersa con unidades en SI de m/s.

$$\mathbf{K}_m = (\rho_c + \rho_d - \rho) \mathbf{u}_{slip} \mathbf{j}_{slip}^T \quad (36)$$

El subíndice  $()^T$  indica la matriz transpuesta de  $\nabla \mathbf{u}$  y el flux de deslizamiento se define como:

$$\mathbf{j}_{slip} = \phi_d \phi_c \mathbf{u}_{slip} \quad (37)$$

En la ecuación (37),  $\mathbf{u}_{slip}$  indica la velocidad relativa entre las dos fases presentes. Mientras que en la ecuación (38),  $\mathbf{u}_d$ , es el vector de velocidad de fase dispersa. Además, la fracción volumétrica de la fase continua  $\phi_c$  se puede expresar como la diferencia entre la unidad y la fracción de la fase dispersa, es decir,  $1 - \phi_d$ .

$$\mathbf{u}_d = \mathbf{j} + \mathbf{u}_{slip}(1 - \phi_d) \quad (38)$$

Dentro del constructor del modelo de mezcla se ha seleccionado el modelo físico de Schiller-Naumann para describir la velocidad relativa entre las fases dispersa y continua, es decir,  $\mathbf{u}_{slip}$ . Este último modelo emplea la ecuación (39) en el cálculo de la velocidad de deslizamiento.

$$3 \frac{C_d}{4d_d} |\mathbf{u}_{slip}| \mathbf{u}_{slip} = -(\rho - \rho_d) \left( -\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} - \mathbf{j} \cdot \nabla \mathbf{j} + \mathbf{g} + \frac{\mathbf{F}}{\rho} \right) \quad (39)$$

Dicha relación se interpreta como un balance entre la resistencia viscosa y las fuerzas de flotabilidad que actúan sobre la fase dispersa (Crowe et al., 1998).  $C_d$  es el coeficiente de arrastre de partículas adimensional, el cual es una función del número de Reynolds de partícula, calculado a partir de la expresión:

$$Re_p = \frac{d_d \rho_c |\mathbf{u}_{slip}|}{\mu} \quad (40)$$

Donde se emplea la viscosidad de la mezcla,  $\mu$ , ya que de esta forma se incluyen los efectos de las partículas de ambas fases que se oponen a la velocidad de deslizamiento; por lo que también debe de resolverse una ecuación implícita adicional para ésta última:

$$|\mathbf{u}_{slip}|^2 \quad (41)$$

De este modo, la ecuación (42) muestra la expresión para el cálculo del coeficiente de arrastre cuando el número de Reynolds de partícula es menor a 1000. Mientras que la ecuación (43) es válida para un  $Re_p$  mayor a 1000.

$$C_d = \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}), \quad Re_p < 1000 \quad (42)$$

$$C_d = 0.44, \quad Re_p > 1000 \quad (43)$$

Adicionalmente, se ha establecido el modelo de viscosidad de la mezcla tipo Krieger, en éste (44) la concentración máxima de compresión,  $\phi_{max}$  (adimensional), predeterminada es igual a 0.62.

$$\mu = \mu_c \left(1 - \frac{\phi_d}{\phi_{max}}\right)^{-2.5\phi_{max}\mu^*} \quad (44)$$

Cuando la fase dispersa está formada por partículas sólidas, el parámetro  $\mu^*$  es igual a 1. En esta expresión, el término de la fracción de volumen de fase dispersa,  $\phi_d$ , se reemplaza por  $\min(\phi_d, 0.999\phi_{max})$  para mayor robustez (Crowe et al., 1998).

Las variables dependientes del modelo de mezcla (mostradas con unidades del SI) son: el campo de velocidad de la mezcla ( $j$ ), el campo de velocidad en cada una de las direcciones o componentes de la mezcla ( $j_r, j_{phi}, j_z$ ) expresadas en m/s, la presión ( $p$ ) en Pa, la fracción volumétrica de la fase dispersa ( $\phi_d = phid$ ) adimensional, la velocidad de deslizamiento cuadrática ( $slipvel$ ), la energía cinética de turbulencia ( $k$ ) y la tasa de disipación de la turbulencia ( $ep$ ).

Los valores de referencia del modelo físico son de utilidad en el cálculo de la densidad de las fases continua y dispersa, así como la presión absoluta. Debido a que en la ciudad de Guanajuato se encuentra construido el sistema de reactor de electrocoagulación y tanque de sedimentación en cuestión, el nivel de presión de referencia  $p_{ref}$  se ha indicado como la presión atmosférica igual a 80200 Pa, equivalente a 802 hPa, de acuerdo con una recopilación de datos consultados del Centro Atmosférico de la Universidad de Guanajuato. La distribución de presión se obtiene a partir de la ecuación de continuidad promediada de la mezcla (26) y la velocidad de la fase dispersa se describe mediante un modelo de deslizamiento (Manninen et al., 1996). Asimismo, la temperatura de referencia se ha establecido en el Sistema Internacional de Unidades (SI) igual a 293.15 K (20°C). Cabe mencionar que cuando la presión de referencia es distinta de cero, la interfaz del modelo en COMSOL resuelve la presión manométrica, mientras que las propiedades del material se evalúan utilizando la presión absoluta (Manninen et al., 1996).

En cuanto a las propiedades de las fases presentes en el modelo, se ha establecido para la fase continua una densidad  $\rho_c$  igual a 998.29 kg/m<sup>3</sup> y una viscosidad dinámica  $\mu_c$  de 0.001 Pa·s. Mientras que la fase dispersa posee un diámetro de partículas  $d_d$  aproximado de 0.003 m con una densidad 20% mayor que el de la fase continua, es decir,  $\rho_d$  igual a 1098.119 kg/m<sup>3</sup>.

## CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN

### ***Diseño computacional del arreglo de mamparas para el tanque de sedimentación***

Se propusieron diez diseños de mamparas para el sedimentador prototipo mediante dinámica de fluidos computacional (CFD) bifásica, incluyendo un diseño sin mamparas que servirá como punto de referencia en la selección del mejor diseño. Se hizo uso del software comercial COMSOL Multiphysics para resolver las ecuaciones del modelo de mezcla de flujo bifásico donde la fase dispersa está representada por partículas sólidas. Cuando se selecciona esta interfaz en el constructor del modelo se añaden las propiedades de la mezcla, la sección de pared, fuerzas de volumen, valores iniciales y condiciones de contorno. Por lo tanto, se identifican tres etapas generales en la resolución del problema: pre-procesamiento, resolución o procesamiento y post-procesamiento.

Los valores iniciales de las variables dependientes para la simulación en estado transitorio se han establecido de manera predeterminada:

- Componentes del campo de velocidad de la mezcla:  $j_r = 0 \frac{m}{s}$ ,  $j_z = 0 \frac{m}{s}$
- Presión:  $p = 0 Pa$
- Fracción volumétrica de fase dispersa:  $\phi_d = 0$
- Velocidad cuadrática de deslizamiento (debido al modelo de Schiller-Naumann):  
 $slipvel = 0.081 \frac{m^2}{s^2}$
- Energía cinética de turbulencia:  $k = mm.kinit \frac{m^2}{s^2}$
- Tasa de disipación de la turbulencia:  $\varepsilon = ep = mm.epinit \frac{m^2}{s^3}$

### ***Pre-procesamiento***

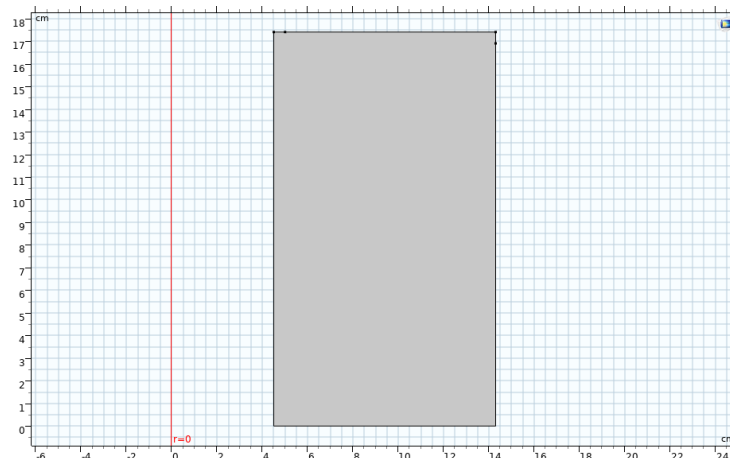
En el pre-procesamiento se hace el planteamiento del problema y se define el modelo, por lo que se debe de establecer un dominio computacional, es decir, generar la geometría en un sistema de coordenadas; luego, definir el tipo de elemento a utilizar, se crea una malla o red de nodos que permite seccionar el dominio en pequeños elementos llamados celdas. A continuación, se selecciona el fenómeno físico o químico a modelar para después definir las propiedades del fluido en los elementos (tanto materiales como geométricas). En

seguida, se especifican las restricciones físicas, es decir, las condiciones de frontera de la geometría.

### Geometría

La geometría del tanque de sedimentación se realizó en la interfaz de COMSOL Multiphysics considerando el espacio físico ocupado por el reactor de electrocoagulación y tomando como referencia las coordenadas del plano ( $r$ ,  $z$ ). Esto con el fin de obtener una geometría con simetría axial, es decir, generar un sólido de revolución cilíndrico a partir de un eje de simetría ubicado en  $r = 0$  y  $z = 0$ .

El reactor de electrocoagulación se encuentra en el centro del equipo de electrocoagulación anterior al tanque de sedimentación y tiene un radio de 4.5 cm. El primer tanque de sedimentación (nuestro sistema de interés) se construyó por medio de un rectángulo principal con ancho de 9.8 cm y una altura de 17.4 cm (figura 10). Tanto la entrada como la salida se construyeron en la interfaz de COMSOL como segmentos de línea con un ancho de 0.5 cm. La entrada corresponde al fluido que se derrama de la zona superior del reactor de electrocoagulación, entonces se colocó el punto de inicio en el vértice superior izquierdo del plano dibujado con coordenadas (4.5, 17.4) y el punto final se ubicó en las coordenadas (5, 17.4). Por otro lado, la salida se posicionó en el vértice superior derecho colocado en el punto (14.3, 17.4) y el punto final se marcó en (14.3, 16.9), de esta manera se asume que el fluido se derrama de este primer tanque hacia el segundo tanque de sedimentación de menores dimensiones. Cabe mencionar que dicho derrame de fluido se ha especificado como un dominio continuo con una elevación de 0.5 cm en la geometría computacional (Villalobos-Lara et al., 2020).



**Figura 10.** Geometría en 2D del tanque sedimentador sin mamparas en el plano ( $r,z$ ).

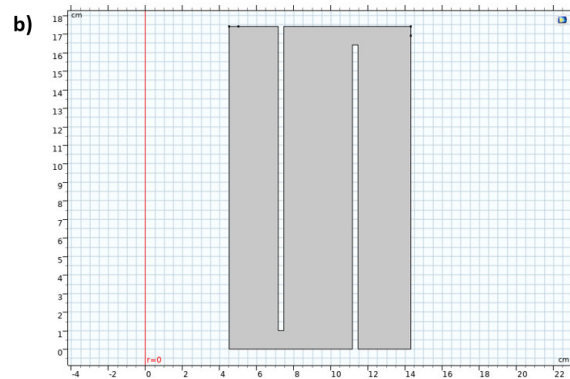
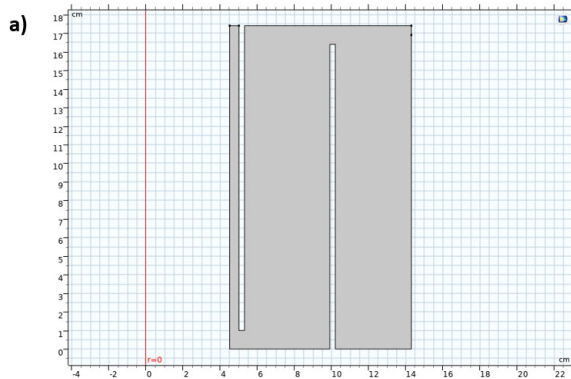
La construcción de las mamparas se realizó con rectángulos cuyo espesor es de 0.3 cm, correspondiente al ancho común de una placa de policarbonato o acrílico comercial. Se ejecutó la operación booleana de diferencia entre el rectángulo principal y los que simulan las mamparas para marcar el espacio físico que delimita las regiones de flujo de la mezcla y las zonas sólidas en la geometría. De este modo, se modificó el número de mamparas, el espacio o separación entre cada una, así como sus alturas con respecto al eje z.

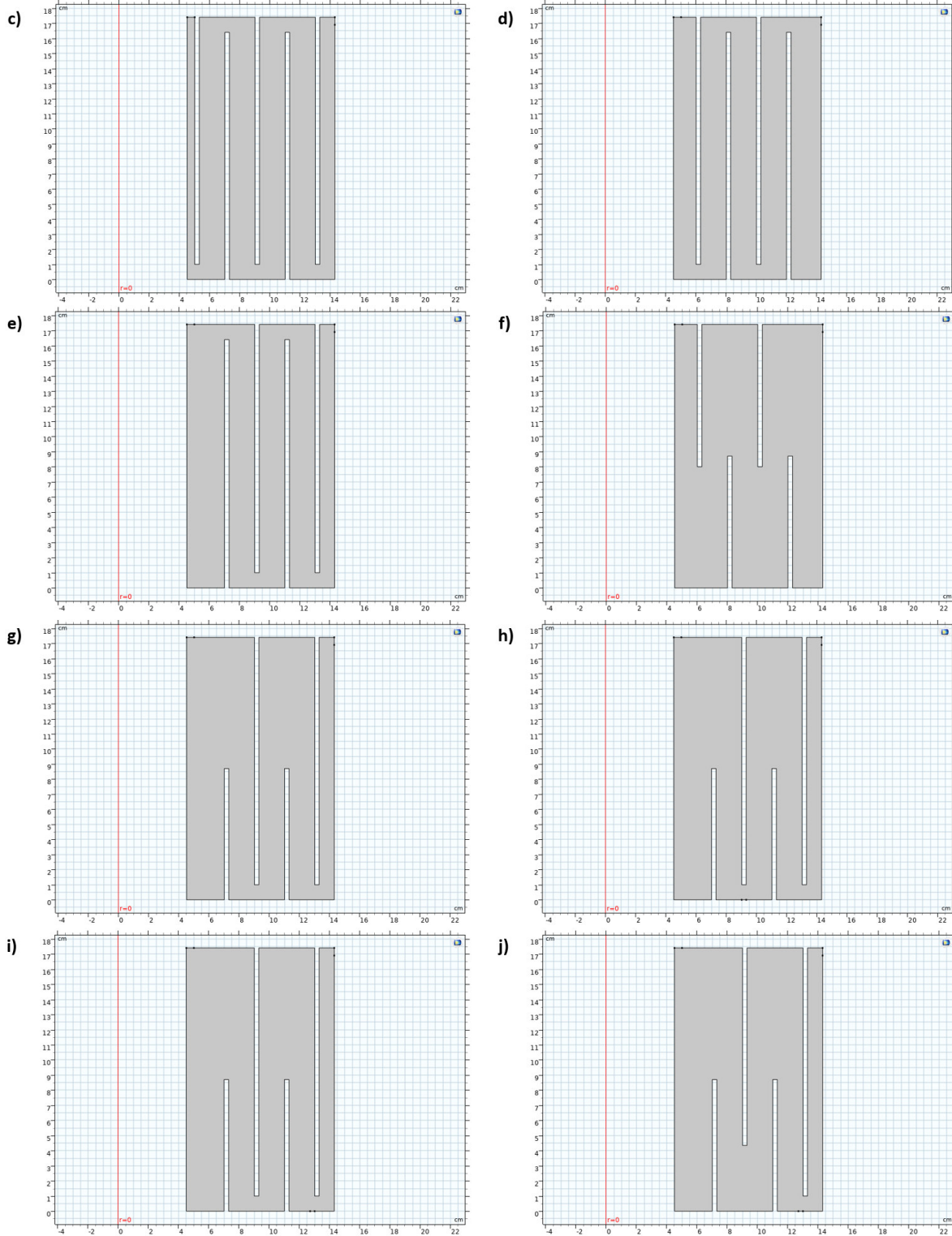
En la tabla 1 se detallan las dimensiones de cada uno de los diez diseños con mamparas dispuestas dentro del tanque sedimentador y en la figura 11 se muestran las geometrías descritas. Cabe resaltar que la numeración del orden de las mamparas se ha tomado según su colocación de izquierda a derecha, además cada geometría descrita en esta tabla conserva el mismo nombre en todas las figuras y resultados reportados a continuación dentro de los siguientes dos capítulos.

**Tabla 1.** Descripción de las dimensiones establecidas para cada una de las geometrías propuestas.

<b>Geometría</b>	<b>Número de mamparas</b>	<b>Longitud de mampara</b>	<b>Distancia de separación</b>
<b>a)</b>	2	1°: 16.4 cm 2°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 0.5 cm 1° y 2°: 4.6 cm 2° y pared derecha: 4.1 cm
<b>b)</b>	2	1°: 16.4 cm 2°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 2.65 cm 1° y 2°: 3.7 cm 2° y pared derecha: 2.85 cm
<b>c)</b>	5	1°: 16.4 cm 2°: 16.4 cm 3°: 16.4 cm 4°: 16.4 cm 5°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 0.5 cm 1° y 2°: 1.7 cm 2° y 3°: 1.7 cm 3° y 4°: 1.7 cm 4° y 5°: 1.7 cm 5° y pared derecha: 1 cm
<b>d)</b>	4	1°: 16.4 cm 2°: 16.4 cm 3°: 16.4 cm 4°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 1.5 cm 1° y 2°: 1.7 cm 2° y 3°: 1.7 cm 3° y 4°: 1.7 cm 4° y pared derecha: 2 cm
<b>e)</b>	4	1°: 16.4 cm 2°: 16.4 cm 3°: 16.4 cm 4°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 2.5 cm 1° y 2°: 1.7 cm 2° y 3°: 1.7 cm 3° y 4°: 1.7 cm 4° y pared derecha: 1 cm

<b>f)</b>	4	1°: 9.4 cm 2°: 8.7 cm 3°: 9.4 cm 4°: 8.7 cm	Pared izquierda y 1°: 1.5 cm 1° y 2°: 1.7 cm 2° y 3°: 1.7 cm 3° y 4°: 1.7 cm 4° y pared derecha: 2 cm
<b>g)</b>	4	1°: 8.7 cm 2°: 16.4 cm 3°: 8.7 cm 4°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 2.5 cm 1° y 2°: 1.7 cm 2° y 3°: 1.7 cm 3° y 4°: 1.7 cm 4° y pared derecha: 1 cm
<b>h)</b>	4	1°: 8.7 cm 2°: 16.4 cm 3°: 8.7 cm 4°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 2.5 cm 1° y 2°: 1.7 cm 2° y 3°: 1.7 cm 3° y 4°: 1.7 cm 4° y pared derecha: 1 cm Salida 2: punto de inicio: (9.3, 0), punto final: (9.6,0)
<b>i)</b>	4	1°: 8.7 cm 2°: 16.4 cm 3°: 8.7 cm 4°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 2.5 cm 1° y 2°: 1.7 cm 2° y 3°: 1.7 cm 3° y 4°: 1.7 cm 4° y pared derecha: 1 cm Salida 2: punto de inicio: (12.7, 0), punto final: (13,0)
<b>j)</b>	4	1°: 8.7 cm 2°: 13.05 cm 3°: 8.7 cm 4°: 16.4 cm	Pared izquierda y 1°: 2.5 cm 1° y 2°: 1.7 cm 2° y 3°: 1.7 cm 3° y 4°: 1.7 cm 4° y pared derecha: 1 cm Salida 2: punto de inicio: (12.7, 0), punto final: (13,0)





**Figura 11.** Geometrías propuestas para el arreglo de mamparas.



## Condiciones de frontera

Se definieron las zonas que representan el fluido, las paredes del tanque de sedimentación, la entrada y salida del fluido, así como la pared móvil del fluido; además, se toma en consideración la fuerza de gravedad sobre el sistema. Cabe resaltar que dentro de la serie de ecuaciones que describe cada una de las condiciones de fronteras, la variable  $\mathbf{n}$  denota al vector unitario que apunta hacia fuera y que es normal a la frontera (Manninen et al., 1996).

### Paredes:

Representan la existencia de algún muro sólido o contorno, su tratamiento debido a la turbulencia se lleva a cabo por medio de funciones de pared, es decir, expresiones semi-empíricas para el flujo de la capa límite en la interfaz de COMSOL Multiphysics.

### *Paredes fijas:*

La condición de contorno de mezcla seleccionada fue de no deslizamiento, ya que se encuentra en fase líquida y se despreció el valor de la rugosidad de la pared. Una condición de este tipo indica que la velocidad de la mezcla es igual a cero en la pared (Manninen et al., 1996) y se expresa en la ecuación (45).

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (45)$$

La energía cinética turbulenta está sujeta a una condición de Newman homogénea (Manninen et al., 1996):

$$\nabla k \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (46)$$

La tasa de disipación de energía cinética se expresa mediante:

$$\varepsilon = \rho \frac{C_\mu k^2}{\kappa_v \delta_w^+ \mu} \quad (47)$$

Donde  $\kappa_v$  es la constante de Von Kármán igual a 0.41 y  $\delta_w^+$  se conoce como el despegue de la pared teórico cuyo valor se conoce a través de la siguiente expresión:

$$\delta_w^+ = \max\left(\frac{h \rho C_\mu^{1/4} \sqrt{k}}{2 \mu}, 11.06\right) \quad (48)$$

El primer término resulta de la ley de la pared mientras que el segundo indica la distancia de la pared (en unidades viscosas) donde la capa logarítmica se encuentra con la subcapa viscosa (Crowe et al., 1998). Dicho límite inferior asegura que las funciones de la pared permanezcan no singulares para todos los números de Reynolds (Crowe et al., 1998).

Se considera que en las paredes fijas no hay flujo de fase dispersa y que el movimiento de la pared corresponde a la velocidad de traslación tomada automáticamente del marco.

$$[\mathbf{K} - \mathbf{K}_m]\mathbf{n} = -\rho \frac{u_\tau}{u^+} \mathbf{j}_{tang} \quad (49)$$

De la ecuación (49) las variables que no se han descrito hasta el momento son:  $u^+$  que representa el perfil de velocidad cerca de las paredes,  $u_\tau$  la velocidad de fricción y  $\mathbf{j}_{tang}$  es la velocidad tangencial.

Por lo tanto, la velocidad de fricción se calcula mediante:

$$u_\tau = \max\left(C_\mu^{1/4} \sqrt{k}, \frac{\|u\|}{u^+}\right) \quad (50)$$

El componente de velocidad normalizado dentro de la capa límite logarítmica (Villalobos-Lara et al., 2020) turbulenta, se describe por:

$$u^+ = 2.5 \ln y^+ + 5.5 \quad (51)$$

Donde  $y^+$  representa la distancia adimensional de la pared. Ésta a su vez se determina por:

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau y}{\mu} \quad (52)$$

En la ecuación (52)  $y$  significa el espesor de la pared.

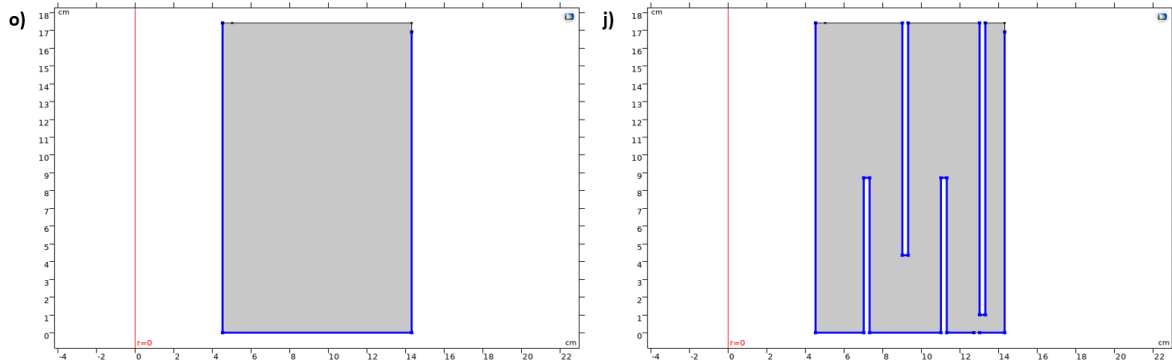
En tanto que la velocidad tangencial a la pared viene expresada por:

$$\mathbf{j}_{tang} = \mathbf{j} - (\mathbf{j} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} \quad (53)$$

Asimismo, el flux de fase dispersa se define en este tipo de frontera como:

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{N}_{\phi_d} = 0 \quad (54)$$

En la figura 12 se muestran dos ejemplos de selección de paredes fijas, en el caso de la geometría que representa el estado inicial del tanque de sedimentación y con la última geometría realizada con un arreglo de cuatro mamparas que se ha descrito anteriormente en la tabla 1.



**Figura 12.** Paredes fijas de las geometrías computacionales: o) representación del tanque sedimentador, j) caso de geometría con arreglo de mamparas.

#### *Paredes móviles:*

Son aquellas que corresponden al límite o borde del fluido en movimiento, reciben el efecto de la presión atmosférica al estar en contacto con el ambiente durante en el proceso de llenado del tanque hasta la parte superior del tanque sedimentador.

Algunas de las expresiones que se han descrito para las paredes fijas también se aplican para este tipo de fronteras asumiendo el estudio temporal, como los son las ecuaciones (45), (46) y (54) que describen la velocidad de la mezcla en la pared, la ecuación cinética mediante una condición de Newman y el flux de la fase dispersa, respectivamente.

La condición límite de la suma de las tensiones viscosas y turbulentas viene dada por:

$$\mathbf{K}_n - (\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} = \mathbf{0} \quad (55)$$

De donde la variable  $\mathbf{K}_n$  se define, a su vez, como:

$$\mathbf{K}_n = [\mathbf{K} - \mathbf{K}_m]\mathbf{n} \quad (56)$$

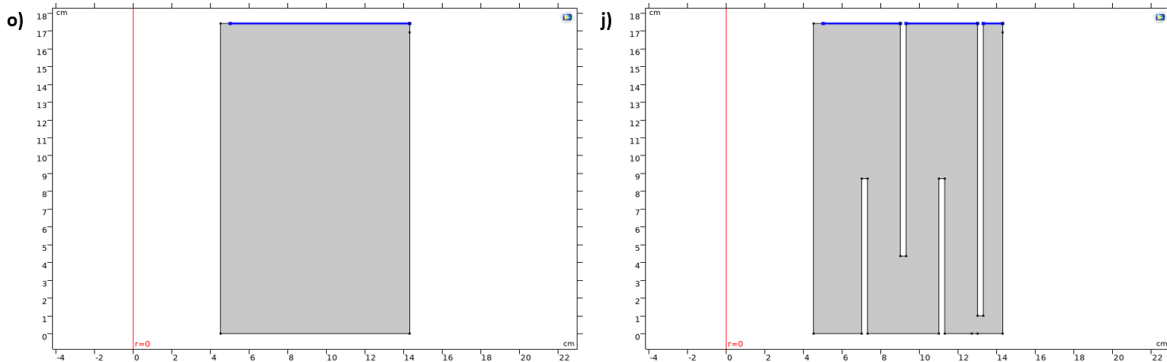
En este caso se toma en cuenta la tasa de disipación de turbulencia sujeta a una condición de Newman homogénea:

$$\nabla \varepsilon \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (57)$$

Otras especificaciones realizadas en la interfaz de COMSOL es que la condición de contorno de mezcla se trata con deslizamiento, no hay flujo de fase dispersa y la velocidad de traslación se toma automáticamente del marco.

Asimismo, en la figura 13 se presentan dos ejemplos de selección de paredes con deslizamiento o móviles, del lado izquierdo se observa la geometría inicial del tanque de sedimentación y del lado derecho se tiene la última geometría con arreglo de mamparas

reportadas en la tabla 1. Cabe señalar que todos los diseños con mamparas poseen este tipo de fronteras en posiciones similares.



**Figura 13.** Paredes móviles de las geometrías computacionales: o) representación del tanque sedimentador, j) caso de geometría con arreglo de mamparas.

#### A la entrada:

El punto inicial y final de la entrada en cada uno de los diseños computacionales se ubicó exactamente en las mismas coordenadas. Las expresiones que describen esta condición de frontera, asumiendo el estudio en el tiempo, se enumeran en seguida.

La estimación del campo de velocidad de la mezcla se describe utilizando la velocidad normal de entrada  $J_0$  cuyo valor se estableció igual a 0.001 m/s y se utiliza como referencia.

$$\mathbf{j} = -J_0 \mathbf{n} ; \quad J_{ref} = J_0 \quad (58)$$

Aunado a esto, se ha supuesto un valor relativamente pequeño para la fracción de volumen de fase dispersa que entra al sistema:

$$\phi_d = \phi_{d,0} = 0.1$$

La energía cinética turbulenta se calcula a partir de la ecuación (59) e incluye el término de la intensidad de turbulencia,  $l_T$ , que en la interfaz de COMSOL se indica con la variable *mm.lT\_init* y posee un valor predeterminado igual a 1.

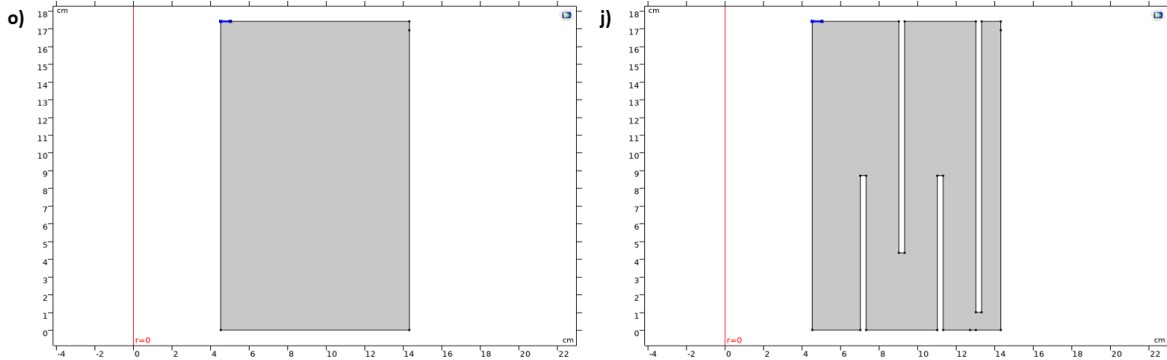
$$k = \frac{3}{2} (J_{ref} l_T)^2 \quad (59)$$

La tasa de disipación de energía turbulenta se describe mediante:

$$\varepsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{L_T} \quad (60)$$

Donde  $L_T$  denota la escala de longitud de turbulencia representada por la variable  $mm.LT_{init}$  con unidades en SI de m.

En la figura 14 se muestra la ubicación del segmento de línea que indica la entrada de flujo al sistema. En todas las geometrías permanece constante, lo cual se ejemplifica con la comparación entre la geometría inicial del tanque de sedimentación y la última geometría con arreglo de mamparas reportada en la tabla 1.



**Figura 14.** Entrada de flujo de agua residual: o) representación del tanque sedimentador, j) caso de geometría con arreglo de mamparas.

#### A la salida:

El segmento de línea que marca la salida de la geometría se mantuvo siempre en la misma posición en cada una de las geometrías diseñadas. Las ecuaciones que la describen, asumiendo el estudio temporal son las siguientes.

$$\mathbf{n}^T [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}]\mathbf{n} = -\widehat{p}_0 \quad (61)$$

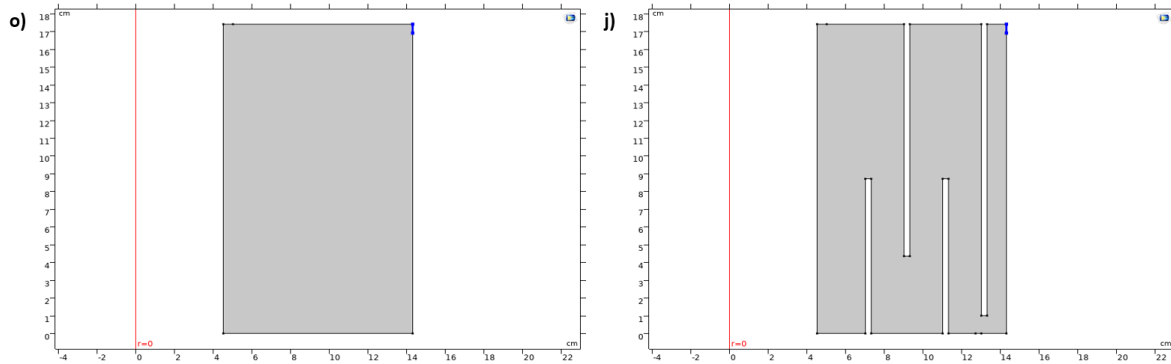
Por lo que  $\widehat{p}_0 \leq p_0$ , donde se interpreta  $p_0$  como el valor de la presión equivalente a 0 Pa considerando el flujo normal y suprimiendo el reflujos.

Por otro lado, se ha especificado que existe salida de fase dispersa y la condición del campo de velocidad en esta ubicación queda determinada por:

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{t} = 0 \quad (62)$$

También se indican las mismas ecuaciones (46) y (57) que establecen las condiciones homogéneas de Newman para la energía cinética y la tasa de disipación de la turbulencia.

En la figura 15 se presentan ambos ejemplos donde se observa que la posición de la salida permanece constante entre la geometría del diseño inicial del tanque de sedimentación y la modificación propuesta con la adición de mamparas a diferentes alturas y distancias.



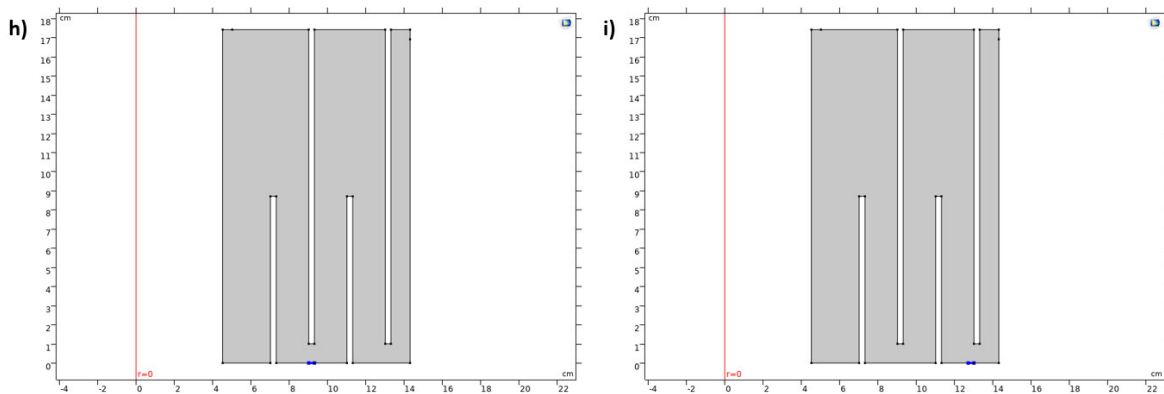
**Figura 15.** Salida de flujo de agua residual: o) representación del tanque sedimentador, j) caso de geometría con arreglo de mamparas.

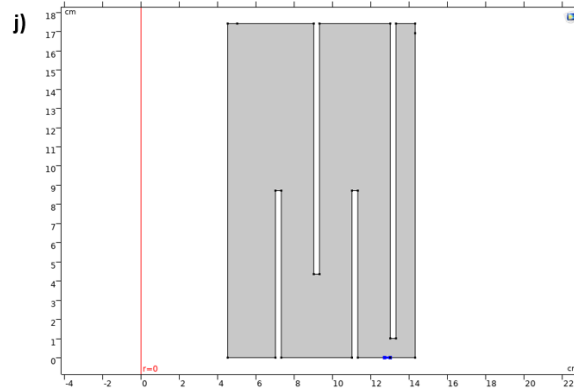
#### Purga:

En las geometrías h), i) y j) se añadió una segunda salida de flujo de mezcla por medio de la construcción de un nuevo segmento de línea (figura 16), cuyas coordenadas se describen en la tabla 1. Esta condición de frontera comparte alguna de las expresiones en el estudio temporal que se han determinado anteriormente en la salida del sistema, es decir, las ecuaciones (46) y (57). Dado que no se marcó la existencia de flujo normal, la ecuación (61) se modificó obteniendo la siguiente expresión:

$$[-pI + K]\mathbf{n} = -\widehat{p}_0 \mathbf{n} \quad (63)$$

Del mismo modo, se indicó una presión  $p_0$  igual a 0 Pa, sin considerar reflujos y con salida de fase dispersa.





**Figura 16.** Geometrías propuestas con existencia de una purga colocada en el lado inferior o base.

### Gravedad:

Se ha considerado el efecto de la fuerza de gravedad y se incluye dentro de la ecuación de transporte (20) del lado derecho de la igualdad con el término  $\rho \mathbf{g}$ . Dado que la geometría es en 2D, la gravedad actuará únicamente en la dirección  $z$  negativa. Por lo tanto, los vectores de gravedad determinados son:  $g_r = 0 \frac{m}{s^2}$  y  $g_z = -g_{const} \frac{m}{s^2}$  donde  $g_{const}$  representa el valor  $9.8066 \text{ m/s}^2$  dado que es la constante física estándar.

### **Mallado**

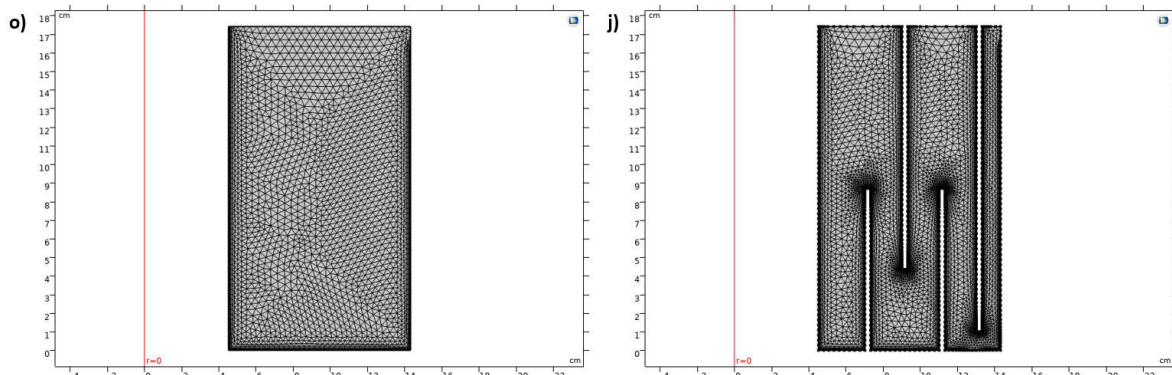
En cada uno de los diseños se construyó un mallado no estructurado en 2D sobre la geometría del sistema; es decir, se generaron celdas o elementos finitos que no mantuvieron un orden específico, sino que se trató de una combinación aleatoria entre triángulos y cuadriláteros (rectángulos) siendo así diferente la distancia entre cada uno de sus nodos o vértices.

La exactitud de los resultados depende directamente de la cantidad y dimensión de los elementos generados, por lo cual en cada uno de los diseños propuestos se construyó un número diferente de elementos finitos de forma automática de acuerdo con el tamaño de elemento (desde extremadamente gruesa hasta extremadamente fina) mismos que son reportados en la tabla 2, usando el tipo de secuencia de malla controlada por la física.

**Tabla 2.** Número de elementos generados en la malla de cada diseño.

Geometría	Número de elementos	Área de mallado (cm <sup>2</sup> )	Vértices de malla	Número de triángulos	Número de cuadriláteros
o)	24815	170.5	14458	21464	3351
a)	19237	160.7	12382	14713	4524
b)	20956	160.7	13228	16457	4499
c)	31387	145.9	20983	22696	8691
d)	28965	150.8	18910	21698	7267
e)	28609	150.8	18735	21337	7272
f)	23496	159.7	14746	18594	4902
g)	25496	155.5	16435	19444	6052
h)	25543	155.5	16445	19519	6024
i)	25575	155.5	16458	19556	6019
j)	25015	156.5	16007	19281	5734

En la figura 17 se ejemplifica la construcción de mallas no estructuradas para el caso de la primer geometría original o inicial del tanque sedimentador y la última geometría reportada en la tabla 2, conservando un comportamiento similar con el resto de los diseños.



**Figura 17.** Ejemplo de mallado: o) geometría original del tanque sedimentador, j) geometría con disposición de mamparas.

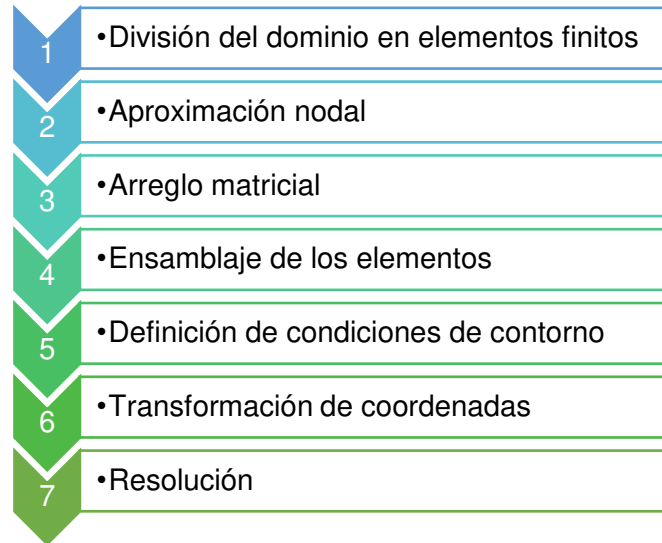
Además, se realizó un análisis de independencia de la malla con el mejor diseño seleccionado para determinar el número de elementos requeridos donde la solución se mantiene sin una variación significativa. La variable medida en dicho análisis ha sido la concentración de fase dispersa a la salida del sistema y los resultados se reportan con mayor detalle en el capítulo 4.



### ***Solución con método de elemento finito***

Se trata de la fase de mayor importancia en la dinámica de fluidos computacional, ya que permite desarrollar la solución numérica de todas las ecuaciones enlistadas dentro del modelo y las condiciones de frontera.

Se utilizó el método de discretización del elemento finito y en la figura 18 se presentan las etapas principales que se desarrollan en éste, de acuerdo con Villar (2016).



**Figura 18.** *Etapas del método de elemento finito.*

Es así como el algoritmo numérico que se desarrolla consiste en la integración de las ecuaciones gobernantes del flujo bifásico sobre todos los nodos de los elementos del dominio, ya que éstos son los puntos de unión entre elementos vecinos o adyacentes. Para esto, se hace una discretización del dominio del sistema, es decir, la conversión de las ecuaciones integrales en un conjunto de ecuaciones algebraicas, con lo que se pretende obtener una aproximación numérica de las variables de interés en cada punto de la malla, como lo son la concentración de fase dispersa, la velocidad y presión a la entrada y salida del tanque sedimentador. Existen tres opciones de discretización para las funciones básicas dentro de la interfaz de COMSOL que representan funciones de base de Lagrange en distintos órdenes, la opción predeterminada y que se ha manejado en este modelo es P1+P1. Ésta representa funciones de base o elementos lineales para todos los grados de libertad (Manninen et al., 1996), usando interpolación lineal por partes en el caso de la velocidad y presión, siendo adecuada en la mayoría de los problemas de flujo.

El comportamiento al interior de cada elemento se define por el patrón seguido en los nodos a través de funciones de interpolación o de forma, que comúnmente se representan por:

$$u^e = \sum_{i=1}^n N_i u_i^e = N\{u^e\} \quad (64)$$

En este caso,  $u$  denota cualquier incógnita,  $n$  el número de nodos de tal elemento,  $N$  es el vector de función transpuesta, el subíndice  $e$  indica el elemento en cuestión y el término entre corchetes  $\{u^e\}$  es un vector con el valor de la función de interpolación.

De acuerdo con el comportamiento anterior, se establecen las matrices y en seguida se realiza su ensamblaje que consigue, a su vez, una matriz global para representar el sistema completo. Resulta necesario transformar las coordenadas con el fin de unificar el resultado, debido a que las matrices y las funciones de forma pueden estar referenciadas a ejes globales y locales. Finalmente, se solucionarán las ecuaciones algebraicas mediante un proceso iterativo donde éstas se congregaron en forma matricial para el cálculo de los valores desconocidos de las variables.

El resolvidor empleado para la solución de numérica de las ecuaciones diferenciales algebraicas fue el método de diferencias finitas regresivas de Newton (BDF), donde en el estudio temporal se especificó una tolerancia relativa de 0.005. En la tabla 3 se reportan, a manera de resumen, el conjunto de variables y parámetros que se han especificado en los apartados del constructor del modelo de la interfaz en COMSOL Multiphysics, ya que son útiles e indispensables para obtener la solución numérica de la simulación del flujo de fluido bifásico a través del tanque de sedimentación.

**Tabla 3.** Resumen de variables y parámetros especificados para la simulación.

Variable	Símbolo	Valor
Presión de referencia	$p$	80200 Pa
Temperatura de referencia	$T_{ref}$	293.15 K
Densidad de fase continua	$\rho_c$	998.29 kg/m <sup>3</sup>
Densidad de fase dispersa	$\rho_d$	1098.119 kg/m <sup>3</sup>
Diámetro de partículas	$d_d$	0.003 m
Viscosidad dinámica de la fase continua	$\mu_c$	0.001 Pa·s
Fracción de volumen de fase dispersa a la entrada	$\phi_{d,0}$	0.1
Concentración máxima de compresión	$\phi_{max}$	0.62
Velocidad cuadrática de deslizamiento	$slipvel$	0.081 m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
Velocidad normal de entrada	$J_0$	0.001 m/s
Presión a la salida	$p_0$	0 Pa

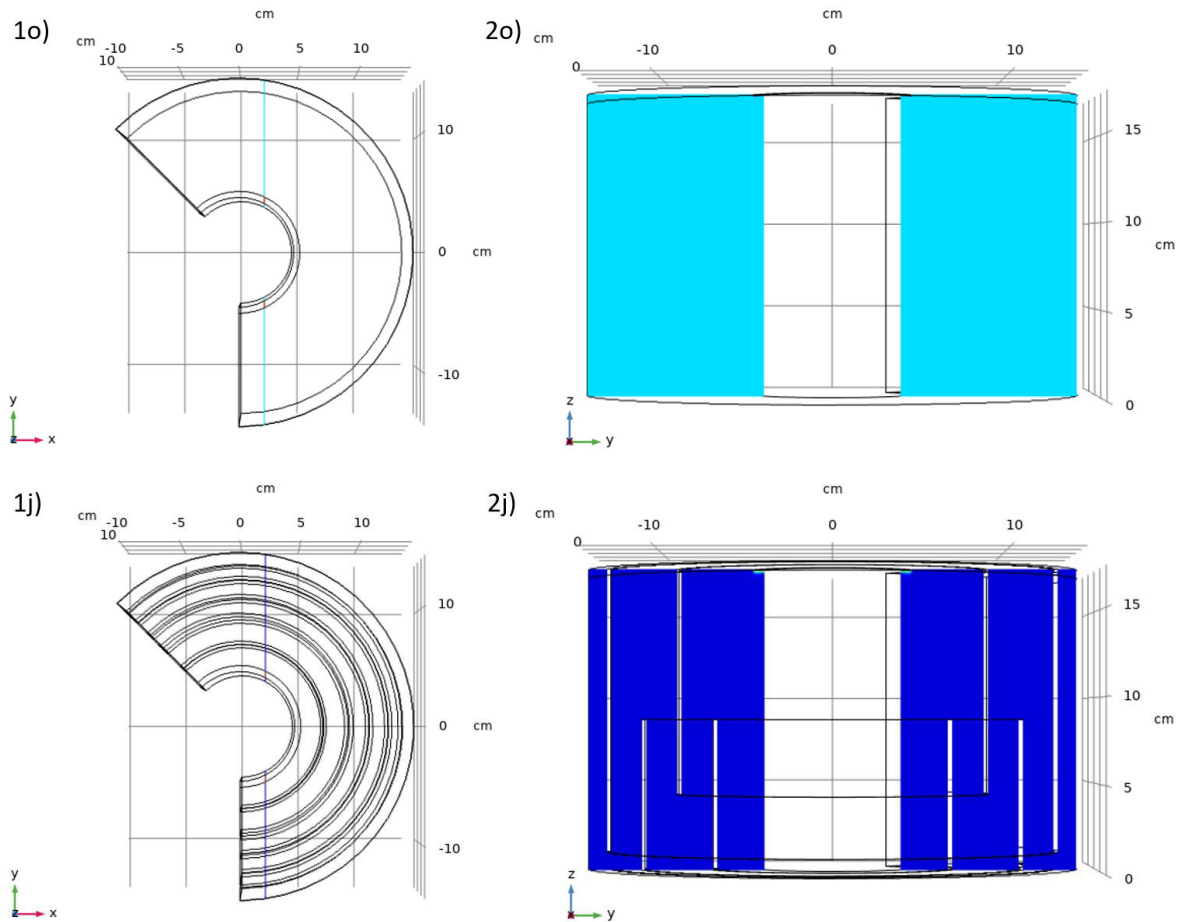
### ***Post-procesamiento***

La etapa final de la metodología contiene el análisis y manipulación de la presentación de resultados, ya sea con gráficos, tablas de datos y animaciones en 2D o 3D que permitan ordenar, imprimir y trazar los resultados seleccionados. Después de que se han interpretado dichos resultados puede llevarse a cabo un refinamiento del análisis, es decir, una mejora del diseño que se reflejará en una serie de cambios dentro del modelo matemático o en el planteamiento del problema.

## **CAPÍTULO 4. DISCUSIÓN DE RESULTADOS**

Una vez que se ha llevado a cabo la etapa de post-procesamiento de las simulaciones, en este rubro se incluyen los resultados principales derivados de la determinación de los perfiles de velocidad, líneas de flujo, concentraciones de fase dispersa y perfiles de presión en el diseño del tanque de sedimentación. El análisis y discusión de los resultados se efectúa tanto de manera cualitativa como cuantitativa para cada uno de los diez diseños propuestos incluyendo la simulación del tanque sedimentador original, así como la determinación del mejor diseño del tanque circular modificado por medio de una serie de mamparas de flujo vertical.

La geometría del modelo con simetría rotacional o cilíndrica para cada diseño da como resultado la generación de un sistema con semiplanos tomados a partir de cierto eje vertical que poseen características idénticas y cualquiera de los puntos de éstos son homólogos a aquellos de la geometría creada en la interfaz de COMSOL descritas en el capítulo 3. En la figura 19 se presentan las vistas de las geometrías con simetría axial para las cuales se ha solucionado el modelo de mezcla con partículas sólidas formando la fase dispersa. En las subfiguras 1o) y 2o) se muestran el resultado del diseño original del tanque sedimentador, con una vista superior en el plano  $xy$  y una vista lateral del plano  $yz$ . Mientras que en las subfiguras 1j) y 2j) se observan las mismas vistas de los planos  $xy$  y  $yz$  para la última geometría reportada en la tabla 1 a manera de ejemplo sobre cómo se observa la geometría con alguna disposición de mamparas propuesta.



**Figura 19.** Vistas de las geometrías como resultado de aplicar la simetría axial: 1o) y 2o) para el tanque sedimentador original, 1j) y 2) ejemplo del tanque modificado con mamparas.

En general, el dominio computacional establecido por la construcción de la malla en todas las simulaciones tuvo 25372 elementos en promedio y las diferencias del mallado se han descrito en la tabla 2 anteriormente. En la tabla 4 se muestran los tiempos de simulación de cada uno de los diseños propuestos, cabe mencionar que se utilizó un paso temporal de 0.1 en todas las simulaciones, excepto en la geometría del tanque de sedimentación original ya que se especificó de 0.05.

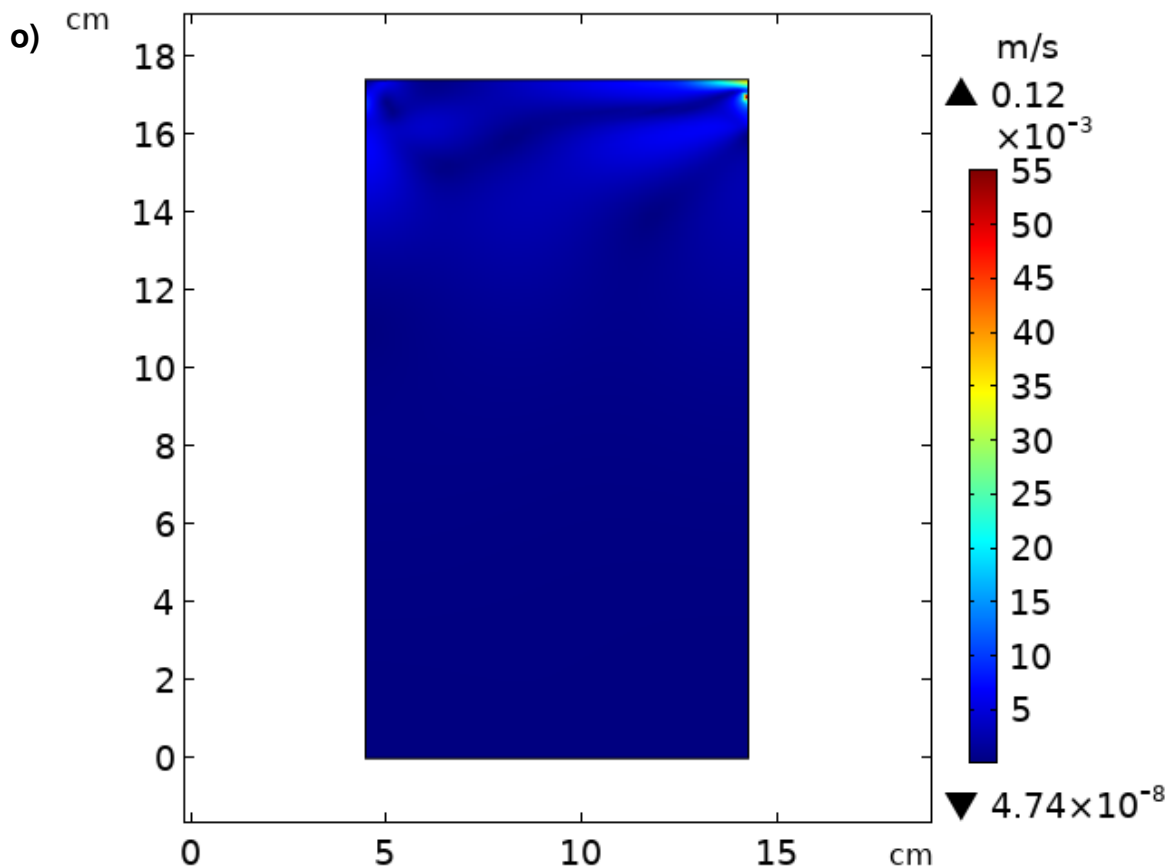
**Tabla 4.** Tiempo de solución en COMSOL Multiphysics.

Geometría	Tiempo de solución (s)	
<b>o)</b>	4972	1 h 22 min 52 s
<b>a)</b>	2086	34 min 46 s
<b>b)</b>	2799	46 min 39 s
<b>c)</b>	3358	55 min 58 s
<b>d)</b>	3116	51 min 56 s
<b>e)</b>	4334	1 h 12 min 14 s
<b>f)</b>	2975	49 min 35 s
<b>g)</b>	6029	1 h 40 min 29 s

h)	3352	55 min 52 s
i)	9425	2 h 37 min 5 s
j)	6813	1 h 53 min 33 s

### Perfiles de velocidad

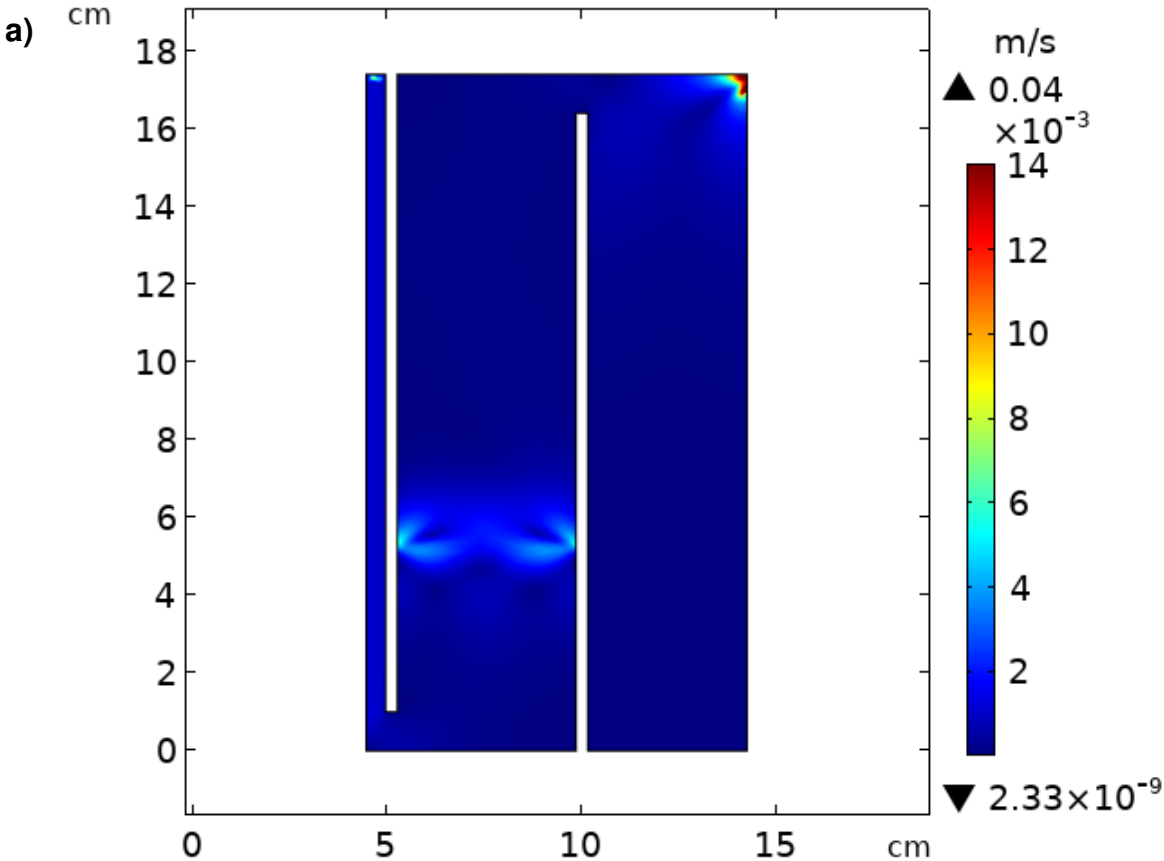
El estado estacionario en la simulación del tanque sedimentador original (o) se alcanzó en un tiempo de solución aproximado de 600 s, en la figura 20 se muestra el perfil de velocidad del flujo bifásico para este tiempo. Se puede observar que el mayor incremento de velocidad se alcanza justo a la salida del tanque llegando a un valor de 0.12 m/s, en la parte superior se generan zonas de mayor velocidad abarcando el radio total con una velocidad aproximada de 0.02 m/s, mientras que en la mayor parte del tanque el flujo se mantiene a una velocidad constante igual o menor a 0.01 m/s.

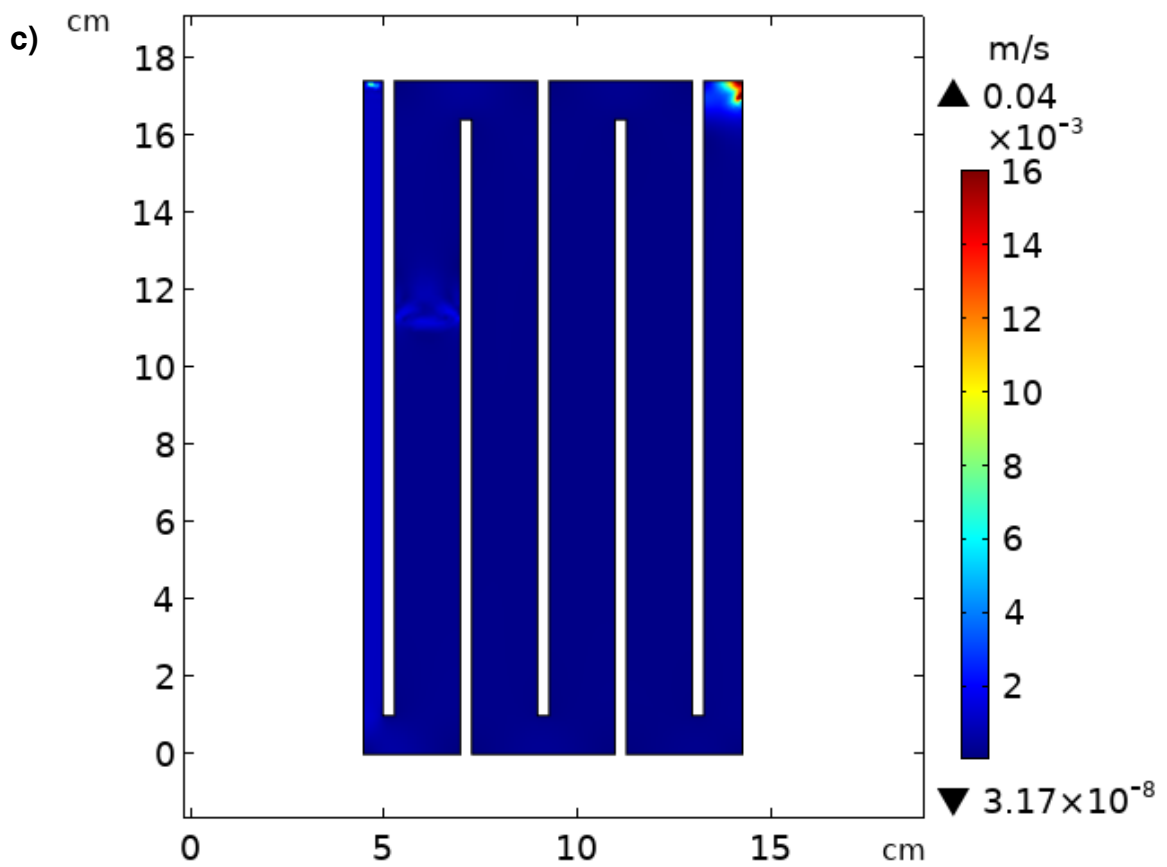
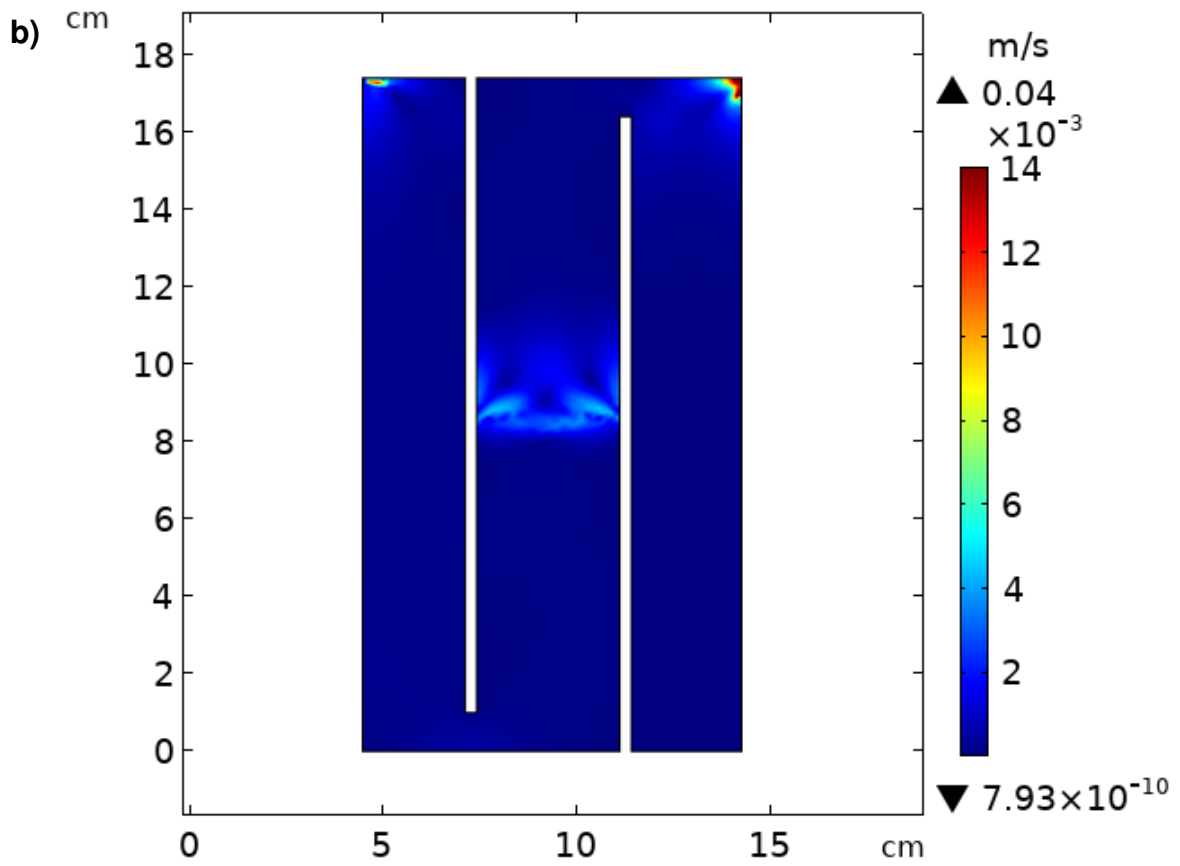


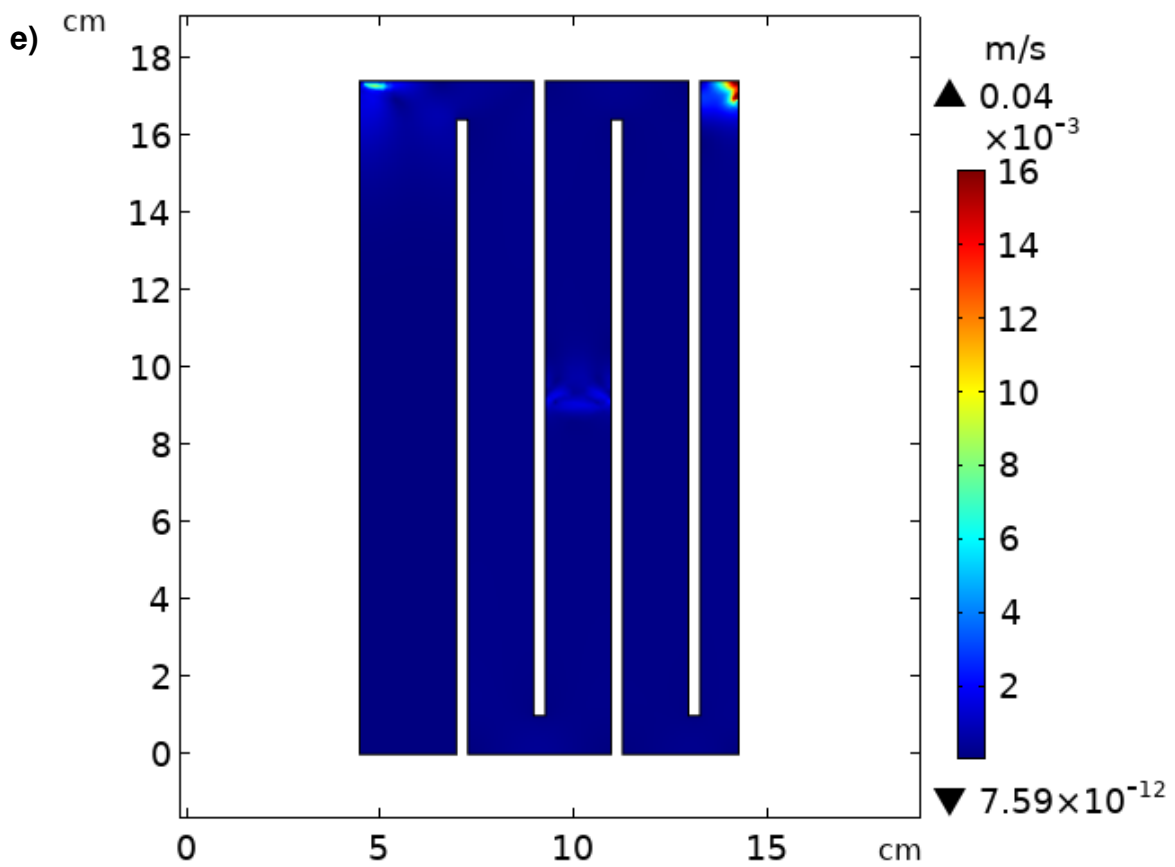
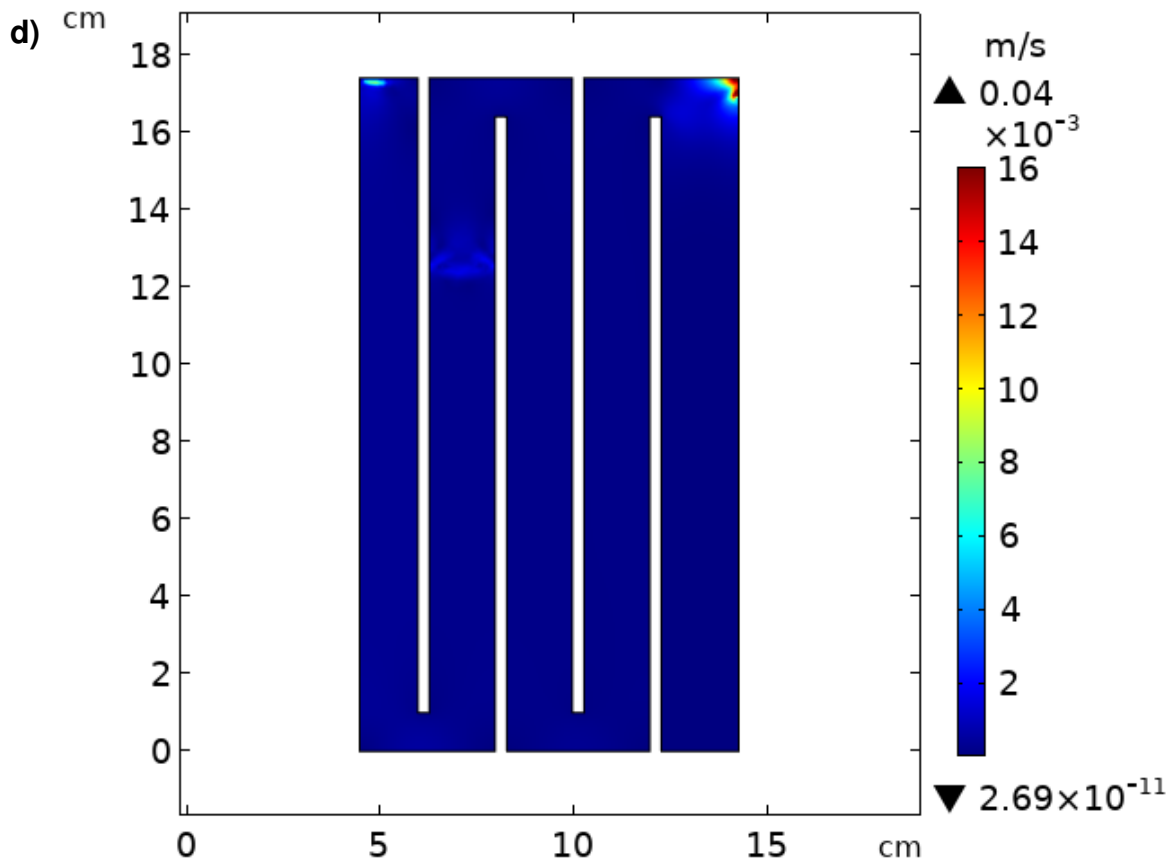
**Figura 20.** Perfil de velocidad para la geometría original o) del tanque sedimentador.

El comportamiento del flujo bifásico a través del tanque de sedimentación depende completamente de la geometría y la disposición de las mamparas verticales dentro del tanque, influyendo así su ubicación radial, separación y altura, aunado a la creación de una

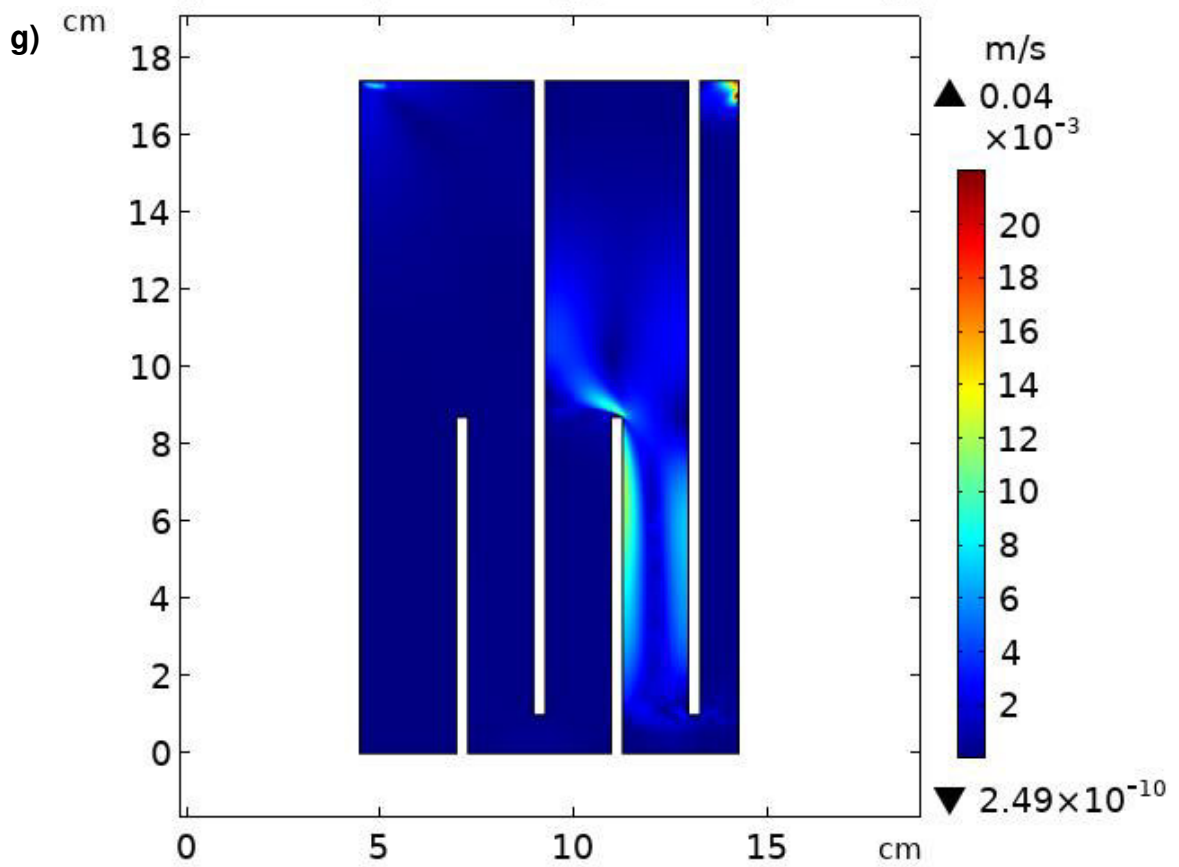
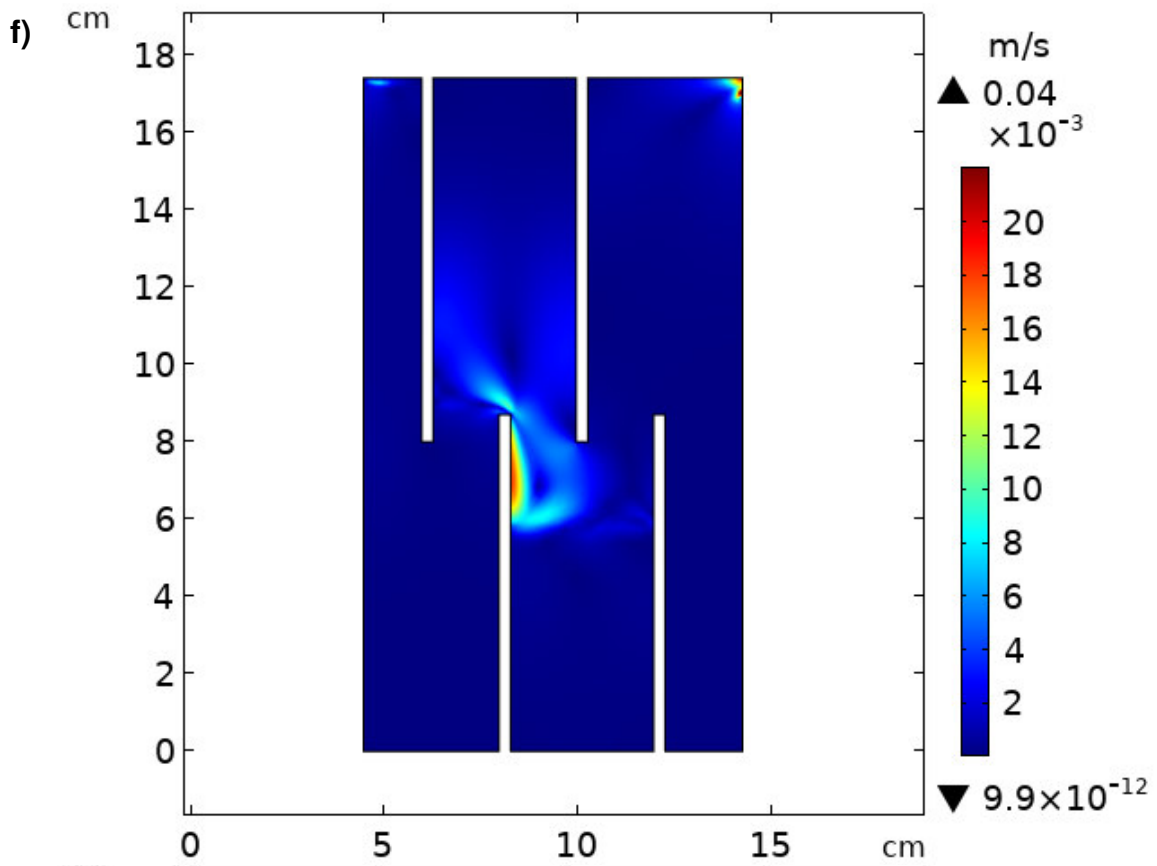
segunda salida cuya función es purgar los sólidos sedimentados durante la operación. En la figura 21 se muestran los perfiles de velocidad para cada diseño del tanque sedimentador con distintas configuraciones de mamparas. En todos los casos, el límite inferior de la escala de velocidad reportada oscila en el orden de  $10^{-12}$  a  $10^{-8}$ , por lo que se considera prácticamente igual a 0. El límite superior de velocidad más alto se presenta en las configuraciones donde se incluyó la segunda salida inferior (purga de lodos) del tanque (geometrías h, i, j) con una velocidad máxima de 1.47 m/s. Cabe mencionar que los diez diseños se simularon en un tiempo de solución de 300 s; sin embargo, se optó por obtener los perfiles de las geometrías h), i) y j) a 600 s para compararlos con el diseño de referencia original del tanque sedimentador, debido a que en este tiempo se alcanza el estado estacionario con proximidad.

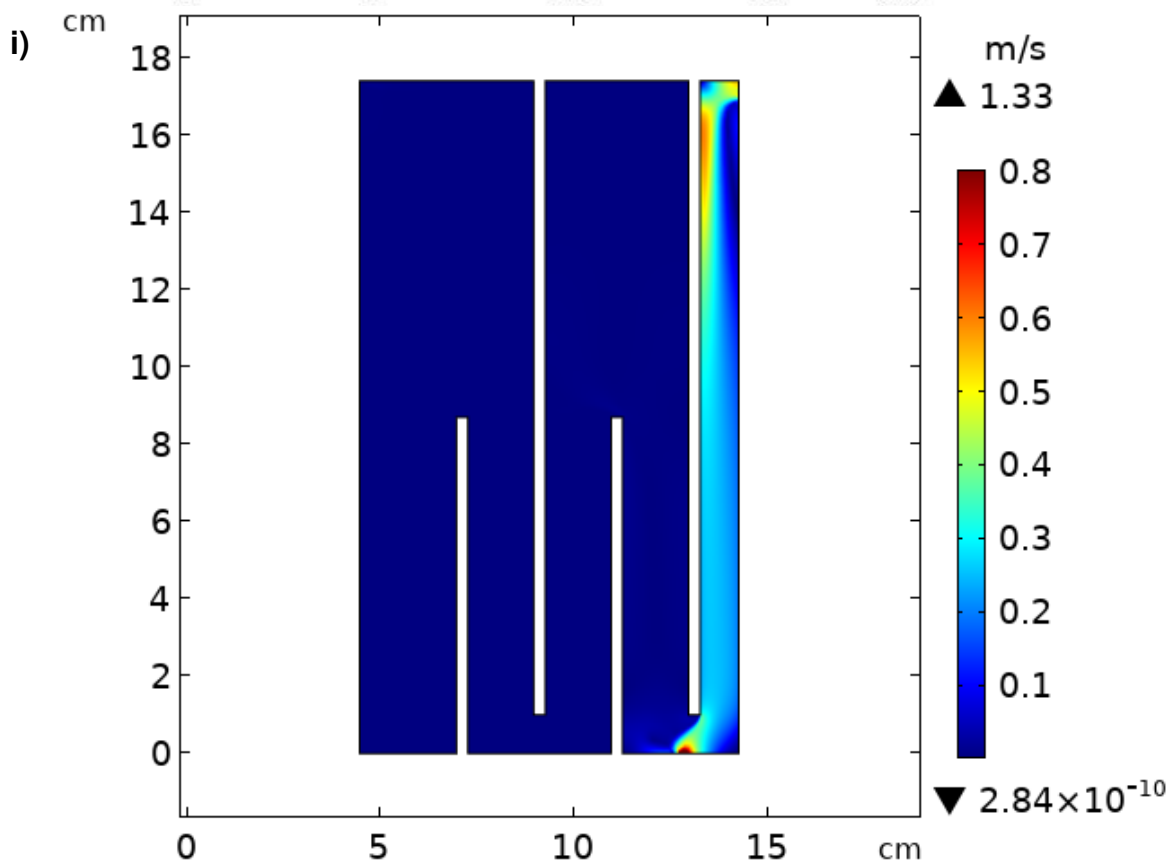
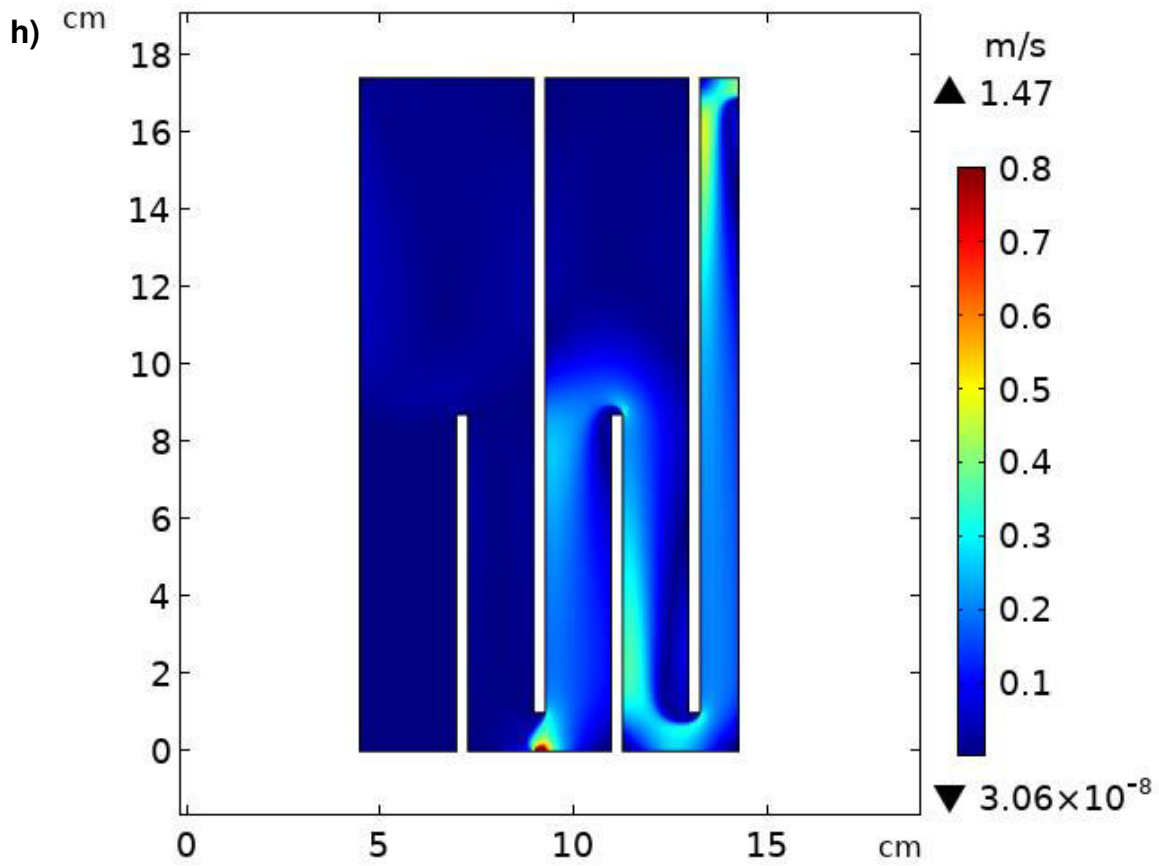


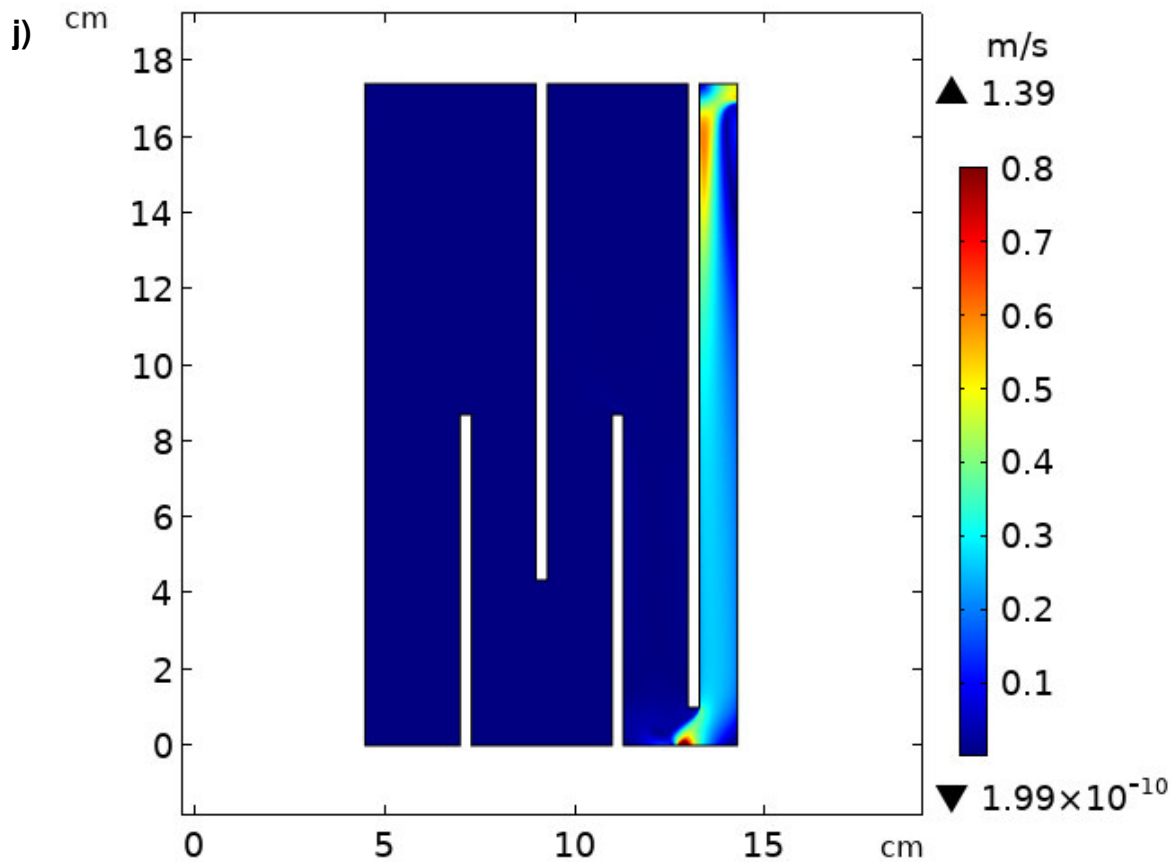












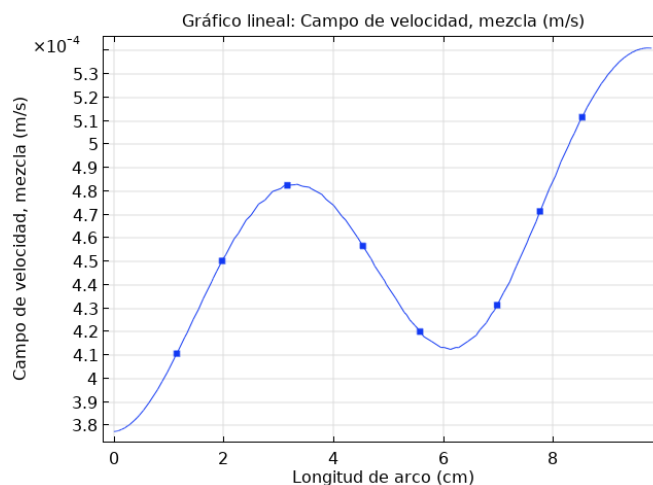
**Figura 21.** Perfiles de velocidad para cada una de las geometrías diseñadas con arreglo de mamparas.

En los diseños a) y b) se pueden observar pequeñas zonas de mayor velocidad en el espacio entre las dos mamparas alcanzando el fluido una velocidad de 0.007 m/s. Asimismo, en los diseños c) y d) se presenta un ligero aumento en la velocidad de flujo entre la 1° y 2° mampara, manteniéndose una velocidad similar de 0.002 m/s en casi todo el espacio del tanque simulado dado que las mamparas tienen la misma distancia de separación. El diseño e) posee un comportamiento similar a los dos previos con un aumento en la velocidad de 0.005 m/s entre la mayor parte del tanque y el flujo a través de la 2° y 3° mampara. En el diseño f) se muestra un aumento abrupto en la velocidad del flujo igual a 0.02 m/s en el espacio existente entre las cuatro mamparas junto a la superficie superior de la 2° mampara. De igual forma, el diseño g) tiene un perfil semejante al anterior, ya que la velocidad tiende a aumentar en el espacio que se genera entre la 2°, 3° y 4° mampara, así como en la pared de la 3° mampara logrando en esta parte una variación entre 0.008 m/s y 0.014 m/s. Por otro lado, en el diseño h) se distinguen dos zonas divididas por la presencia de la segunda salida ubicada a la mitad de la geometría donde se escapa principalmente la fase dispersa, que al poseer un diámetro menor que la entrada y salida principal provoca

un aumento en la velocidad del flujo. El flujo que continúa enseguida de la purga se traslada de manera ordenada (ascendente y descendente) con una velocidad entre 0.2 m/s y 0.5 m/s. La mayor velocidad de flujo en los diseños h), i) y j) se presenta en la salida de purgado con valores de 1.47 m/s, 1.33 m/s y 1.39 m/s, respectivamente. Finalmente, los diseños i) y j) comparten perfiles de velocidad muy parecidos debido a que la única diferencia es la altura de la 2ª mampara. En éstos, el flujo en la mayor parte del tanque tiene una velocidad de 0.1 m/s, mientras que en el espacio entre la última mampara y la pared derecha del tanque la velocidad se incrementa en un rango de 0.2 m/s a 0.7 m/s.

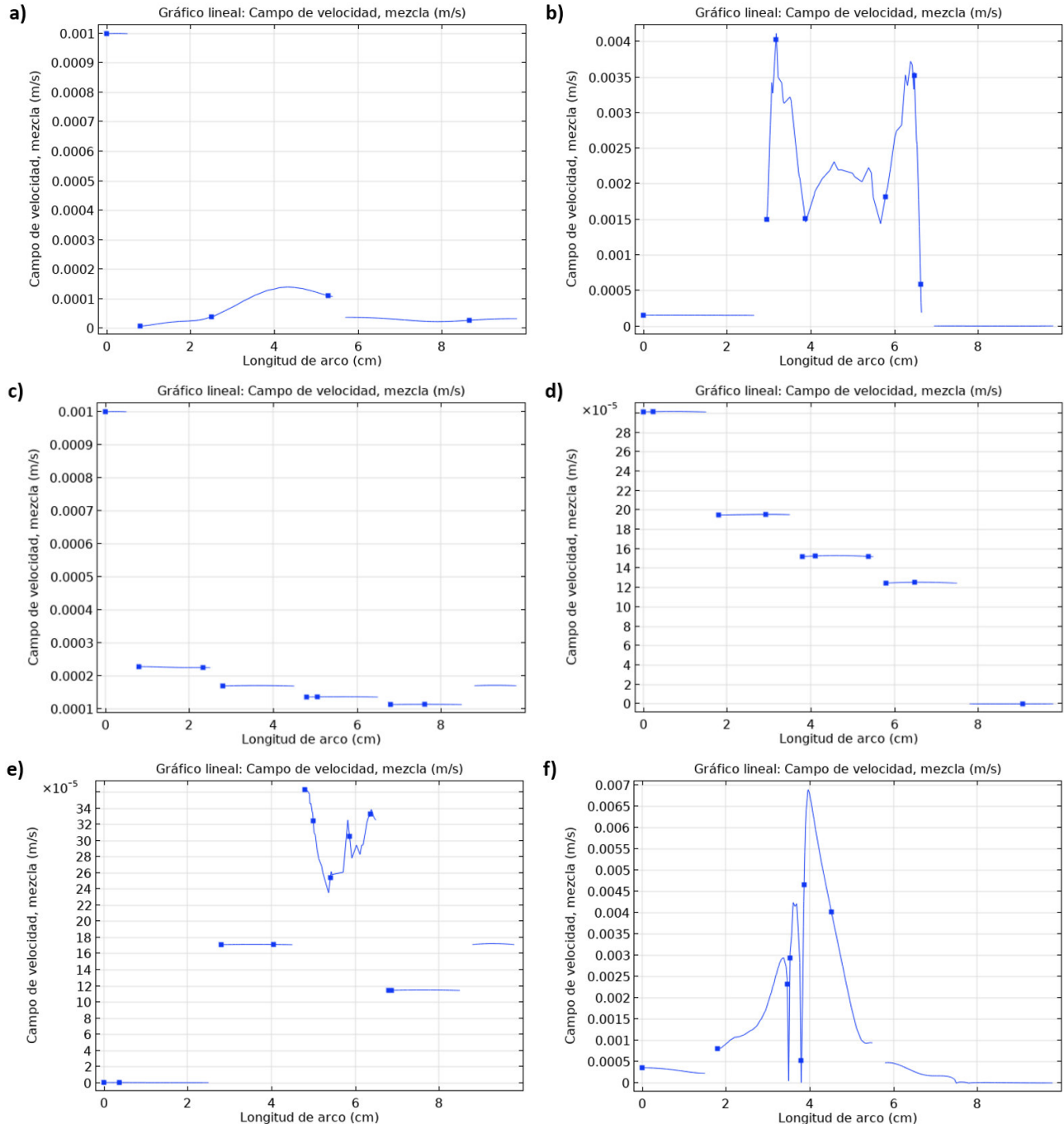
La velocidad de flujo mantiene una relación directa con el proceso de mezclado porque si es lo suficientemente lenta puede favorecer a la etapa de floculación al influir en la interacción que se da entre los flóculos formados y la fase dispersa. Sin embargo, si la velocidad del fluido es muy alta se pueden crear zonas de turbulencia o cambios repentinos en el patrón de flujo ocasionando que los flóculos sufran daños, se fragmenten y disminuyan de tamaño, lo cual es muy desfavorable para el proceso de electrocoagulación y se debe evitar en la medida de lo posible. Ejemplos de este efecto negativo se muestran en los diseños f) y g) debido a la alteración de la velocidad en el espacio entre mamparas, por lo que el mejor diseño será aquel que permita un adecuado mezclado entre los flóculos gracias a la existencia de zonas de recirculación del flujo bifásico.

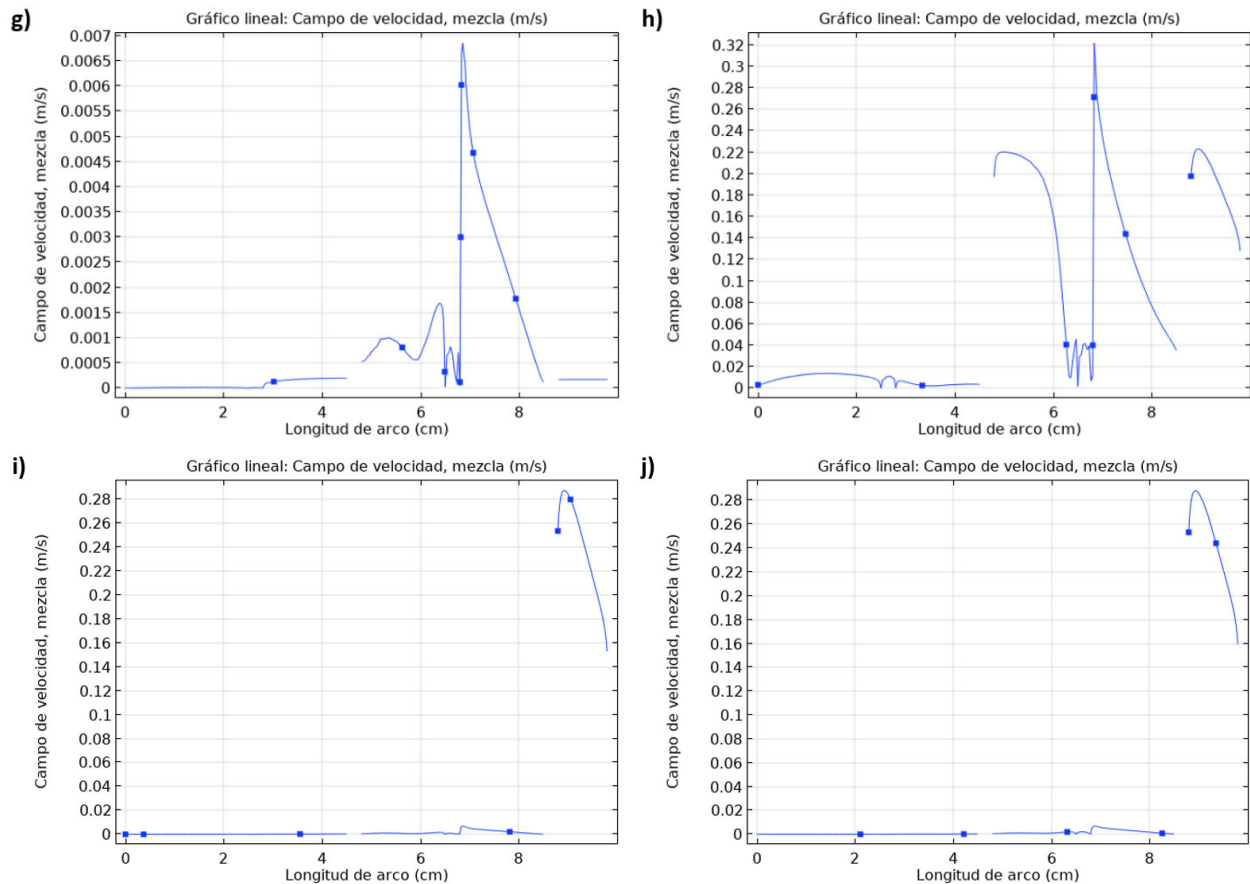
Ahora bien, en la figura 22 se observa el perfil de velocidad con un gráfico lineal del campo de velocidad de la mezcla vs la longitud del arco o posición en el eje r para el diseño original del tanque sedimentador. Dicho perfil se obtuvo con la construcción de una línea de corte en 2D justo a la mitad de la geometría, el punto inicial se ubicó en (4.5, 8.7) y el punto final en (14.3, 8.7).



**Figura 22.** Perfil de velocidad determinado justo a la mitad de la geometría o).

En esta figura se puede observar que la velocidad en la línea horizontal que divide a la mitad a la geometría es variable y menor a la velocidad normal de entrada (0.001 m/s), lo cual refleja el comportamiento descendente-ascendente del flujo, siendo mayor cuando se acerca a la pared derecha del tanque. De igual forma, se construyeron líneas de corte con las mismas coordenadas para los diez diseños del tanque sedimentador modificado con mamparas (figura 23) con el fin de obtener un perfil de velocidad unidimensional en cada caso.





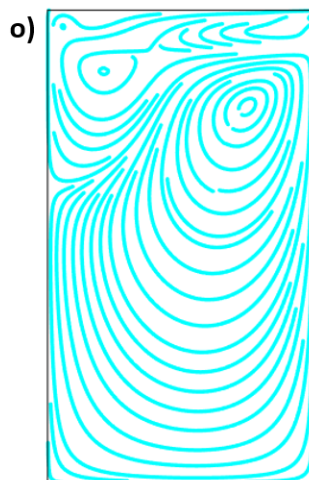
**Figura 23.** Perfiles de velocidad determinados justo a la mitad de cada geometría diseñada.

En el perfil de velocidad a) que corresponde al diseño nombrado con la misma letra, se observa una velocidad relativamente constante y pequeña en comparación con la que posee la entrada al tanque, lo cual indica que el flujo se mantiene bastante ordenado. En el perfil b) ocurre una mayor variación de velocidad en la zona central del tanque con un límite máximo de 0.004 m/s, superior a la velocidad normal de entrada, que se traduce en la presencia de vórtices o remolinos de flujo. Por otro lado, en el perfil c) se distingue la velocidad alcanzada a la mitad de cada uno de los espacios que quedan libres entre las mamparas, la cual disminuye conforme el fluido sigue la trayectoria entre las mamparas. Lo mismo se visualiza en los perfiles d) y e) donde en ambos la velocidad es muy pequeña en comparación con el diseño anterior; sin embargo, en el diseño e) hay una mayor fluctuación de la velocidad entre los espacios libres, siendo muy notoria en medio de la 2° y 3° mampara al ser la velocidad más variable. En el perfil f) se muestra un incremento significativo de la velocidad en la zona media del tanque hasta siete veces mayor que la velocidad de entrada; por consiguiente, estos diseños son candidatos para descartarse por su potencial daño hacia los flóculos que se han comenzado a formar en el flujo bifásico.

Un efecto semejante se obtiene en los perfiles g) y h), ya que se presenta una gran alteración de la velocidad de flujo hacia la mitad derecha del tanque, siendo mucho mayor en el diseño h). Cabe destacar que los perfiles h), i) y j) son los que exhiben una velocidad 300 veces mayor que la velocidad de entrada en la zona central del tanque sedimentador. Los perfiles i) y j) son muy similares, en el último tiempo de simulación se observa que la velocidad en la zona central es muy pequeña a consecuencia de la saturación del sistema y se presenta un aumento abrupto de la velocidad del fluido en el espacio entre la 4° mampara y la pared derecha, reflejándose así lo que ocurre en los mismos diseños de la figura 22.

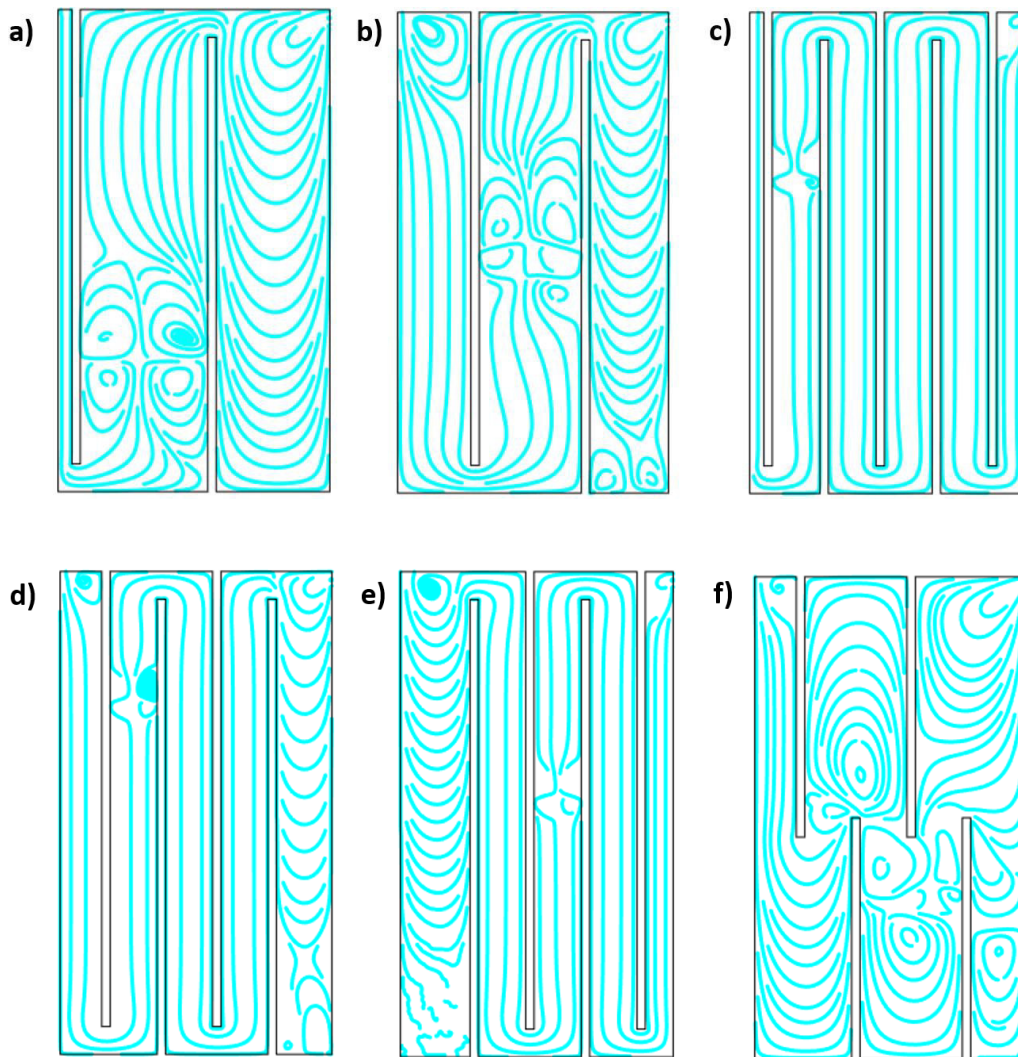
### ***Líneas de flujo***

Las líneas de flujo permiten visualizar la trayectoria del fluido en un tiempo dado al representar cantidades vectoriales por medio de curvas que fluyen tangentes a un campo vectorial instantáneo (COMSOL, 2018). En la figura 24 se presentan las líneas de flujo bifásico correspondiente al diseño original del tanque sedimentador, establecido como el marco de referencia para el análisis de los diseños modificados cuando se alcanza el estado estacionario. Se puede observar que este patrón de flujo se caracteriza por un gran remolino de recirculación ubicado cerca de la pared derecha que se extiende conforme se acerca al fondo del tanque donde finalmente se espera que se depositen los flóculos de mayor tamaño; además, posee un vórtice más pequeño que envuelve el fluido por debajo de la entrada y se alarga desde el extremo derecho del tanque.

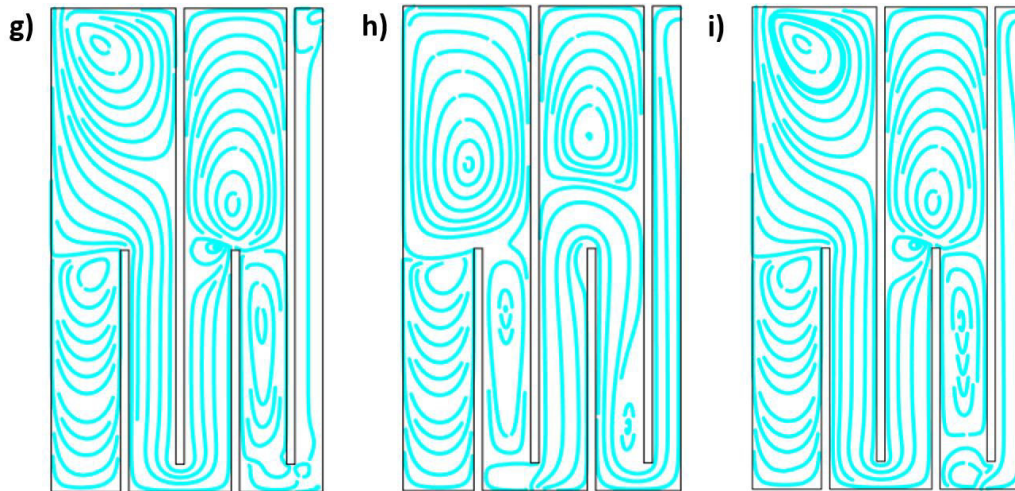


**Figura 24.** *Líneas de flujo para la geometría original o) del tanque sedimentador.*

Asimismo, en la figura 25 se pueden observar las líneas de flujo que corresponden a cada uno de los diseños del tanque de sedimentación modificado con mamparas. Éstos han sido determinados en el tiempo final de simulación con el objetivo de obtener el patrón de flujo completamente desarrollado y poder apreciar las regiones de recirculación entre las mamparas. Del mismo modo que se ha mencionado en la sección anterior, las líneas de flujo de los diseños h), i) y j) se obtuvieron a los 600 s de solución, mientras que el resto se especificó a los 300 s. Dichas zonas de turbulencia o de remolinos favorecen el mezclado y la interacción entre partículas, pero una velocidad de flujo más rápida junto con un movimiento caótico mayor tiene un efecto desfavorable en la coalescencia de la fase dispersa.







**Figura 25.** Líneas de flujo para cada geometría propuesta con arreglo de mamparas.

En los diseños a) y b) existe semejanza en cuanto a la generación de vórtices en el espacio entre las dos mamparas siendo mayores en el primero. Mientras que los diseños a) y c) comparten que el fluido tiene una trayectoria ordenada cuando fluye de manera descendente en el espacio entre la pared izquierda y la primera mampara, ya que es del ancho aproximado de la entrada de película del fluido que se derrama desde el reactor de electrocoagulación. Cuando la primera mampara se coloca más separada de la entrada de flujo como en el diseño b) entonces se genera un pequeño vórtice en esta zona superior. El diseño a) puede descartarse debido a que predomina un patrón de flujo ordenado en la mayor parte del tanque y la zona de turbulencia podría tener un efecto muy limitado para promover la interacción entre las partículas. En el diseño b) ocurre un comportamiento muy parecido, aunque presente dos zonas de vórtices más pequeños justo en la entrada y fondo del tanque enseguida de la última mampara. Las líneas de flujo del diseño c) muestran que las 5 mamparas equidistantes promueven un flujo laminar casi en su totalidad que junto con una velocidad muy lenta (menor a 0.002 m/s) no favorecen el proceso de coagulación-floculación, por lo que quedan descartados aquellos diseños con 5 o más mamparas.

Los diseños c), d) y e) exhiben patrones de flujo semejantes debido a que el espaciamiento entre mamparas permite que la trayectoria del flujo sea ordenada y mayormente uniforme. También comparten la existencia de una zona de turbulencia leve donde el flujo forma una obstrucción o tapón, lo cual genera un ligero aumento en la velocidad del fluido. En los diseños c) y d) se presenta en el espacio entre la 1° y 2° mamparas, mientras que en el d) se ubica entre la 2° y 3° mampara. De este modo, el diseño d) se ha descartado por casi inexistencia de remolinos o regiones de recirculación. En el diseño e) queda ejemplificado

el comportamiento indeseable que se produce por un inadecuado mezclado entre las partículas en la parte inicial del tanque, es decir, entre la pared izquierda y la primera mampara.

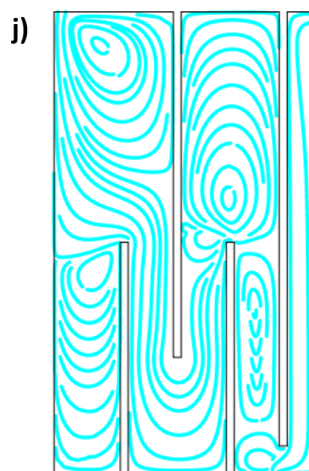
Ahora bien, tomando con referencia la distancia de separación entre mamparas del diseño d) es como se construyó el diseño f) cuya longitud es la mitad de la altura del tanque de sedimentación. Se puede observar que el flujo mantiene un patrón ordenado hasta antes de salir de la 2° mampara, a partir de ésta se generan tres zonas de vórtices grandes y pequeños que reflejan un flujo caótico donde es difícil distinguir el flujo descendente-ascendente esperado. Lo cual puede repercutir de manera desfavorable para la floculación, ya que los flóculos de mayor tamaño pueden romperse y evitar que sedimenten en el fondo del tanque como producto de un mezclado lento.

Por otro lado, con base en el espaciamiento dado a las mamparas en el diseño e) se crearon los diseños g), h) y i) que tienen la misma disposición de cuatro mamparas donde la altura de las impares corresponde a la mitad de la altura del tanque y las pares poseen 1 cm de elevación sobre el fondo del tanque. Éstos se diferencian por la presencia de la segunda salida, el diseño g) no dispone de una purga, el h) tiene colocada la purga entre la 1° y 3° mampara, y en el i) la purga se creó entre la 3° mampara y la pared derecha del tanque. Las líneas de flujo entre los diseños g) y i) son muy similares porque en ambos se observa un vórtice creado por el flujo que entra al tanque en la parte superior izquierda luego conforme se acerca a la 1° mampara el flujo se va ordenando a la par que se deposita en el primer espacio a la izquierda de esta mampara. El flujo ordenado y uniforme fluye de manera descendente desde  $\frac{3}{4}$  partes de la altura del tanque hasta el fondo atravesando el espacio entre la 1° y 3° mampara. Cuando llega al borde de ésta, el flujo vuelve a producir turbulencia que se mantiene con un vórtice más alargado al cruzar por el espacio entre la 3° y 4° mampara. Finalmente, en el último espacio del lado de la pared derecha se vuelve a ordenar al fluido, siendo más notorio en el diseño i) donde incluso la velocidad aumenta significativamente considerando que la velocidad de entrada es de 0.001 m/s.

El patrón de flujo obtenido en el diseño g) resulta ser bastante adecuado al tener zonas de recirculación que favorecerán el mezclado y la interacción entre las partículas de ambas fases, así como zonas de ordenamiento del fluido que permitirá un mayor crecimiento de los flóculos y su sedimentación en el fondo del tanque. Sin embargo, de acuerdo con el comportamiento de la fase dispersa que se describirá más adelante, el sistema se satura por lo que resulta necesario la ubicación de una segunda salida que desempeñe la función

de purgado de los sólidos sedimentables. De esta manera, en el diseño h) se puede observar que la purga colocada en la parte central del fondo del tanque modifica la forma de los remolinos de fluido, sólo se tendría fase dispersa hacia la mitad izquierda del tanque ya que saldría por la purga. Por lo que el vórtice más grande generado en la parte superior y entrada del tanque junto con el vórtice más pequeño entre la 1° y 2° mampara serían insuficientes para promover el mezclado y permitir que los flóculos obtengan un mayor tamaño logrando una adecuada separación. En la mitad derecha del tanque se tendría casi en su totalidad la fase continua representada por el líquido clarificado con una velocidad mucho más alta en comparación con la primera parte del tanque. Los vórtices y ordenamientos producidos por la fase continua ya no son de interés al estar libres de los flóculos. En cambio, el diseño i) sí posibilita que el flujo bifásico tenga zonas de interacción rápidas y zonas de calma o estratificación del fluido debido a que la purga se sitúa al lado izquierdo de la última mampara. No obstante, resulta necesario tener una mayor área hacia el fondo del tanque para que se lleve de mejor manera la sedimentación de las partículas, tomando en cuenta que su diámetro aproximado es de 3 mm.

En la figura 26 se observan las líneas de flujo para el diseño que ha sido seleccionado como el más adecuado por su disposición de mamparas y patrón de flujo, después de haber comparado las diez geometrías creadas, éste corresponde a la nombrada geometría j) en la tabla 1. En esta figura se visualiza un patrón de flujo bastante similar al diseño i) con la diferencia de que la 2° mampara se ha elevado para generar una mayor zona de calma y de mezclado suave que logre que los flóculos decanten en parte inferior central del tanque. Además, el flujo de fase dispersa comenzará a salir por la purga antes de que el tanque se sature, evitando que ocurra un derrame indeseable por encima de la 2° mampara.

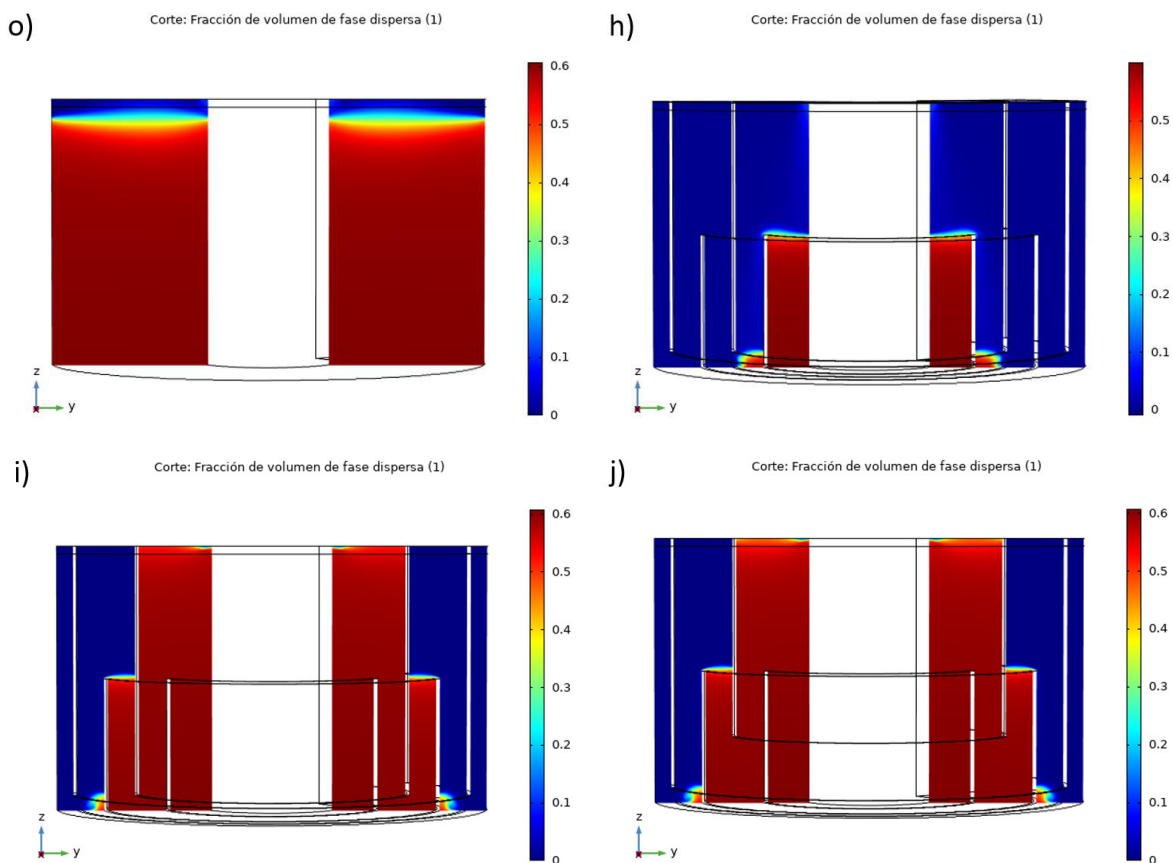


**Figura 26.** Líneas de flujo de la geometría seleccionada.

De esta manera, se ha determinado que las mamparas de menor tamaño promueven el flujo laminar u ordenado, mientras que las mamparas más largas facilitan la turbulencia, además de que en éstas es mayor el espacio libre para la creación de vórtices más grandes.

### **Concentración de fase dispersa**

De acuerdo con el comportamiento de las líneas de flujo y los resultados cualitativos es posible predecir que una mayor concentración de partículas se mueve hacia el fondo del tanque y consecuentemente al orificio de la purga del tanque hacia una nueva zona de recolección. En la figura 27 se proporcionan las distribuciones de la concentración de fase dispersa tanto del tanque sedimentador original como de los diseños en los que fue incorporado una segunda salida en la parte inferior (h, i, j) durante el tiempo final de simulación, es decir, a los 600 s.



**Figura 27.** Distribución de concentración de fase dispersa a 600 s.

El límite máximo de la fracción volumétrica es 0.6, en el diseño o) se evidencia que el tanque se satura de fase dispersa a diferencia del diseño h) donde no se alcanza dicha saturación

ya que la segunda salida central provoca que la fase dispersa abandone el tanque con muy poca interacción. En cambios en los diseños i) y j) se observa que hay fase dispersa en una mayor área del tanque antes de que ésta salga por la purga. En éstos últimos diseños se calculó que las partículas comienzan a salir por la salida de la base del tanque después de 60 s, 270 s y a los 240 s, respectivamente.

Para validar la predicción de sedimentación de las partículas se midió la concentración de la fase dispersa a través de un punto de evaluación en COMSOL Multiphysics cerca de la parte superior de la salida principal y la parte inferior de la purga en el diseño o) (sin mamparas) después de 600 s de simulación. Además, se evaluó también esta fracción volumétrica de fase dispersa en otros puntos del tanque (tabla 5) en los diseños seleccionados de la figura anterior con el objetivo de comparar el efecto ocasionado por las diferentes configuraciones de mamparas.

**Tabla 5.** *Puntos de evaluación de la fracción de volumen de fase dispersa.*

	<b>Diseño</b>	<b>Coordenadas (r,z)</b>	<b>Fracción de volumen de fase dispersa</b>
<b>Entrada</b>	<b>o)</b>	(4.7, 16.5)	0.09252
	<b>h)</b>	(4.7, 17)	0.09056
	<b>i)</b>	(4.7, 17)	0.55951
	<b>j)</b>	(4.7, 17)	0.54536
<b>Purga</b>	<b>o)</b>	(9, 0.2)	0.60479
	<b>h)</b>	(8, 0.2)	0.52542
	<b>i)</b>	(11.6, 0.2)	0.45777
	<b>j)</b>	(11.6, 0.2)	0.48950
<b>Salida</b>	<b>o)</b>	(14.1, 16.5)	0.00964
	<b>h)</b>	(14.1, 16.9)	-7.2169E-48
	<b>i)</b>	(14.1, 16.9)	-2.2479E-31
	<b>j)</b>	(14.1, 16.9)	-3.8403E-22

A partir de la tabla 5 se comprueba que en los diseños o) y h) los puntos de evaluación próximos a la entrada comparten una fracción volumétrica de fase dispersa aproximada de 0.09, una diferencia mínima en cuanto al valor de dicha variable igual a 0.01 especificada dentro de las condiciones de frontera. Lo anterior se visualiza en la figura 26 ya que a 600 s aún no hay saturación de fase dispersa en estos dos diseños, en cambio en los diseños i) y j) sí hay concentración de partículas casi sobre la superficie del tanque. En los puntos de evaluación de estos últimos diseños casi se alcanza el límite máximo de fracción siendo menor a 0.56, habiendo una diferencia muy pequeña entre ambos sitios de 0.01415.

Dado que el diseño o) no posee purga, en la tabla 5 se reportó un punto de evaluación cercano a las coordenadas de la zona de la salida inferior del diseño h) donde se evaluó una concentración de fase dispersa de hasta 0.60479, mientras que en los otros diseños no fue posible lograr un valor tan alto. En el diseño h) se evaluó un punto dentro del tanque muy próximo a la purga en la zona central de la base del tanque, en tanto que en los diseños i) y j) los puntos se ubicaron contiguos a la 3° mampara; de esta forma, se comprobó que existe una alta concentración de fase dispersa justo antes de abandonar el equipo. Debido a lo desarrollado en la sección anterior, se confirma que el diseño j) sería el más adecuado por concentrar una mayor fracción de partículas justo antes de abandonar el tanque en contraste con el diseño i).

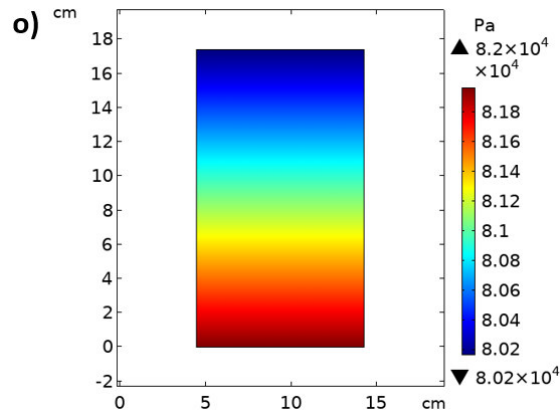
Por último, en la salida principal se obtuvieron fracciones volumétricas de fase dispersa muy insignificantes, es decir, prácticamente igual a cero para los cuatro diseños seleccionados; lo cual comprueba que la agrupación de partículas se da hacia el fondo del tanque cumpliendo así con su objetivo de lograr la sedimentación de los flóculos una vez que han interactuado e incrementado su tamaño. De éste, también se confirma que es adecuada la creación de una purga en la base del tanque que permita separar los sólidos sedimentados y obtener a la salida principal un líquido clarificado sin fase dispersa. De acuerdo con los experimentos reportados por Villalobos-Lara et al. (2020) se ha demostrado que el sistema se satura y que efectivamente el agua tratada proveniente de los tanques decantadores posee una gran cantidad de lodos que en la práctica se recirculaban y, posteriormente, sedimentaban fuera del equipo de tratamiento tal como se muestra en la figura 28.



**Figura 28.** Resultados experimentales del tratamiento del agua de mezcla.

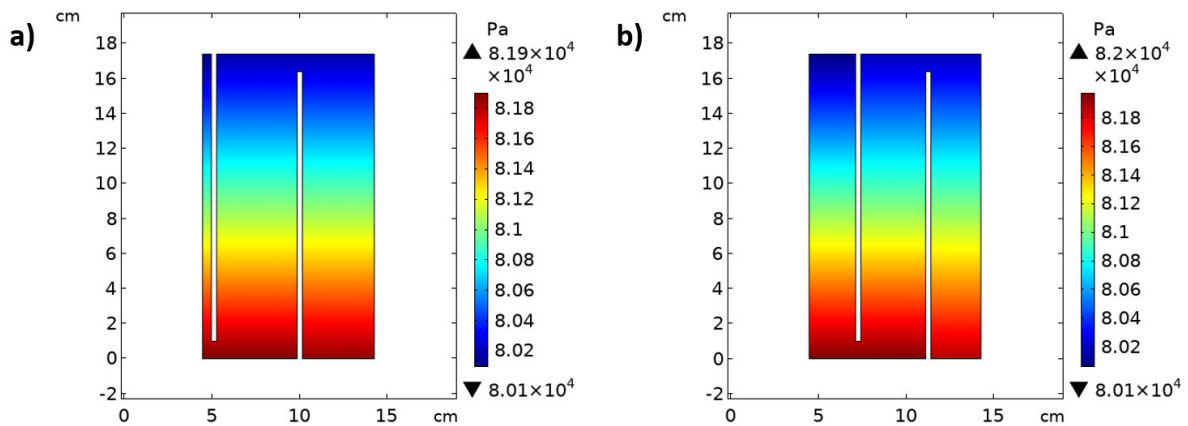
### **Análisis de presiones dentro del sistema**

En la figura 29 se muestra el perfil de presiones en Pa (Pascuales, unidades en SI) en el diseño del tanque de sedimentación original. Se presenta una ligera variación ya que en el fondo se calculó una presión de  $8.2 \times 10^4$  Pa y en la superficie superior igual a  $8.02 \times 10^4$ , es decir, una diferencia de 1800 Pa. Estos valores se obtuvieron considerando la presión atmosférica aproximada de 80200 Pa correspondiente a la ciudad de Guanajuato.



**Figura 29.** Perfil de presiones para la geometría original o) del tanque sedimentador.

De la misma manera, en la figura 30 se muestra cada perfil de presiones de los diez diseños propuestos del tanque de sedimentación modificados por medio de mamparas. Es importante recalcar que el tanque se encuentra abierto a la atmósfera y, de acuerdo con su profundidad, el fluido bifásico está sometido a cierta presión hidrostática que junto a la fuerza de gravedad tienen un efecto positivo en la coalescencia de las partículas.



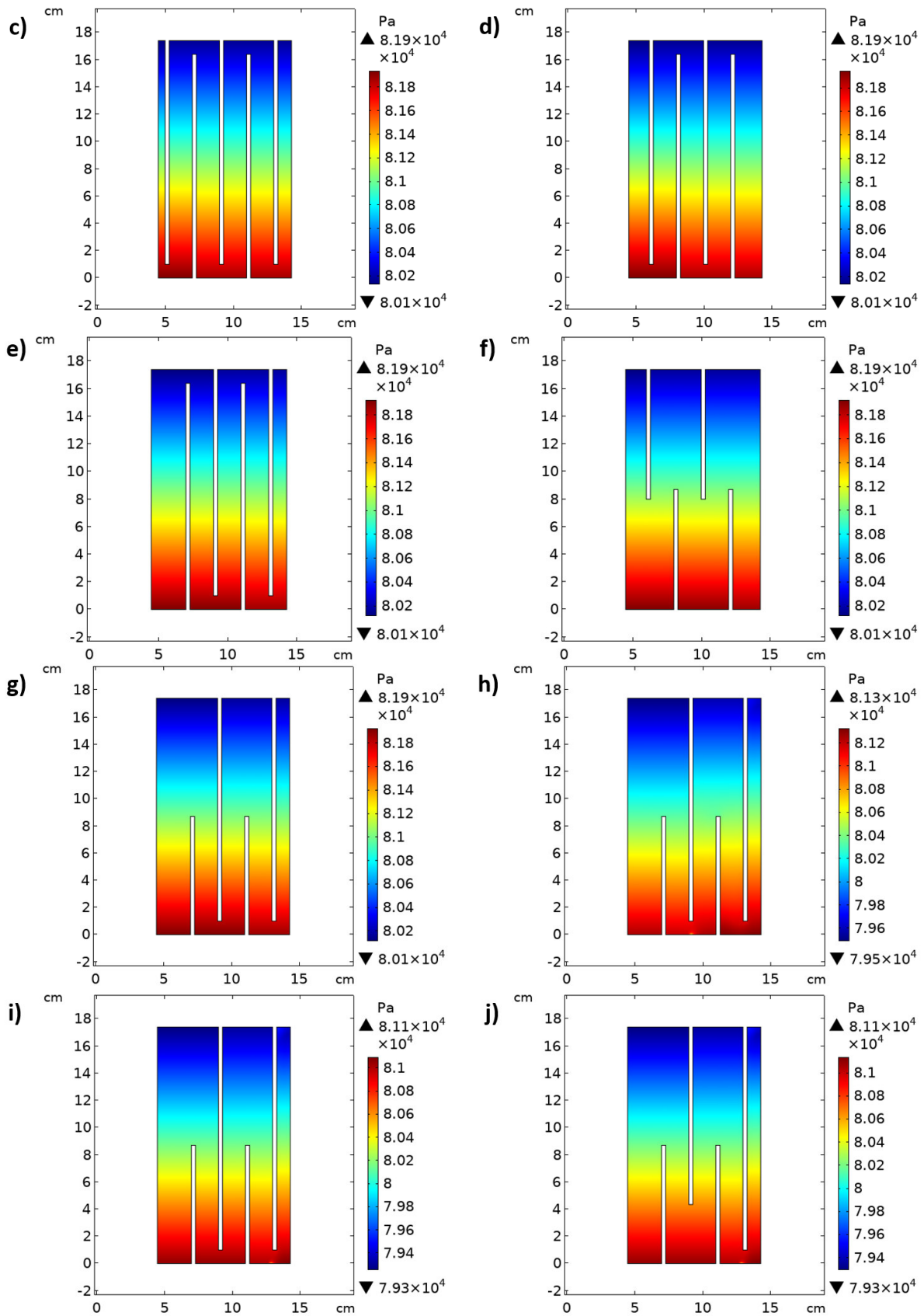


Figura 30. Perfil de presiones para cada geometría con arreglo de mamparas.



En casi todos los diseños la superficie del tanque está sometida aproximadamente al valor especificado de la presión atmosférica (igual o menor a 80200 Pa) cuyo valor es el límite inferior, con excepción de las geometrías h), i) y j) donde hay una ligera disminución con valores menores a 79300 Pa, probablemente a causa del proceso iterativo y el criterio de convergencia aplicado para la solución. Los diseños a), b), c), d), e), f) y g) muestran un límite máximo de presión en el fondo del tanque cercano a 82000 Pa, lo cual significa un incremento de casi 1800 Pa con respecto a la superficie. Por su parte, en los diseños h), i) y j) la presión en el fondo del tanque disminuye levemente hasta 81100 Pa manteniendo también cerca de 1800 Pa de diferencia entre la superficie y la base del tanque de sedimentación. Como la segunda salida en estos diseños se encuentra abierta al ambiente circundante, entonces se observa que justo en el área de la purga la presión varía entre  $8.04 \times 10^4$  Pa y  $8.06 \times 10^4$  Pa. A pesar de estas diferencias examinadas, en todos los diseños se presenta un incremento de la presión conforme aumenta la profundidad de la posición del fluido, siendo una característica favorable para el crecimiento de los flóculos y, por ende, de su sedimentación.

### **Análisis de malla**

Una vez que se ha seleccionado el diseño j) conforme a los resultados del perfil de velocidad, líneas de flujo, concentración de fase dispersa y presión, se realizó un análisis de malla para revisar la independencia de los resultados en cuanto al número de elementos del mallado y la convergencia en la resolución del conjunto de ecuaciones del modelo planteado. La variable que se midió para este fin fue la concentración o fracción de volumen de la fase dispersa en el último tiempo simulado (600 s).

En la tabla 6 se presentan las características a detalle de los siete tipos de malla disponibles en COMSOL Multiphysics en los cuales se logró la convergencia de la simulación del diseño j), incluyendo el número de vértices de cada malla creada, el número de triángulos y cuadriláteros manteniendo constante el área de mallado igual a  $156.5 \text{ cm}^2$ , así como el tiempo de resolución empleado por el software COMSOL Multiphysics.

**Tabla 6.** Especificaciones del mallado y tiempo de simulación de la geometría j).

<b>Tipo de malla</b>	<b>Vértices de malla</b>	<b>Número de triángulos</b>	<b>Número de cuadriláteros</b>	<b>Tiempo de solución (s)</b>
<b>Más gruesa</b>	3262	2688	1709	937
<b>Gruesa</b>	4495	4102	2184	1413

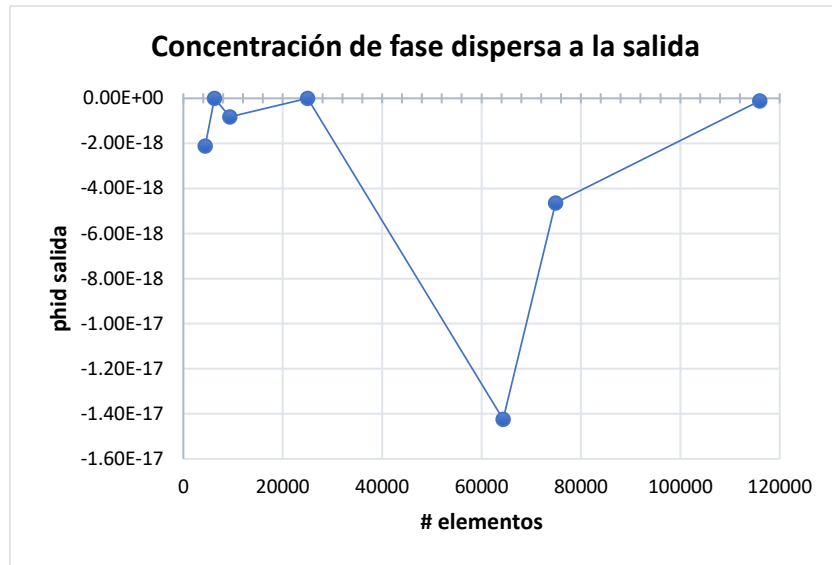
<b>Normal</b>	6397	6615	2767	1806
<b>Fina</b>	16007	19281	5734	6813
<b>Más fina</b>	38921	53262	11099	48536
<b>Extra fina</b>	44207	63830	11099	45170
<b>Extremadamente fina</b>	64772	104910	11099	257123

El tiempo de cálculo y los recursos informáticos empleados dependen de la precisión del mallado, por lo que estos factores se incrementan si la geometría se divide en una mayor cantidad de elementos. Por su parte, en la tabla 7 se muestran los resultados del análisis de malla del diseño seleccionado con respecto a la concentración de la fase dispersa justo en los segmentos de línea que indican la salida principal y la salida inferior que representa la purga del tanque de sedimentación, lo cual se llevó a cabo mediante el promedio de línea de cada segmento seleccionado.

**Tabla 7.** Resultados del análisis de malla de la geometría j).

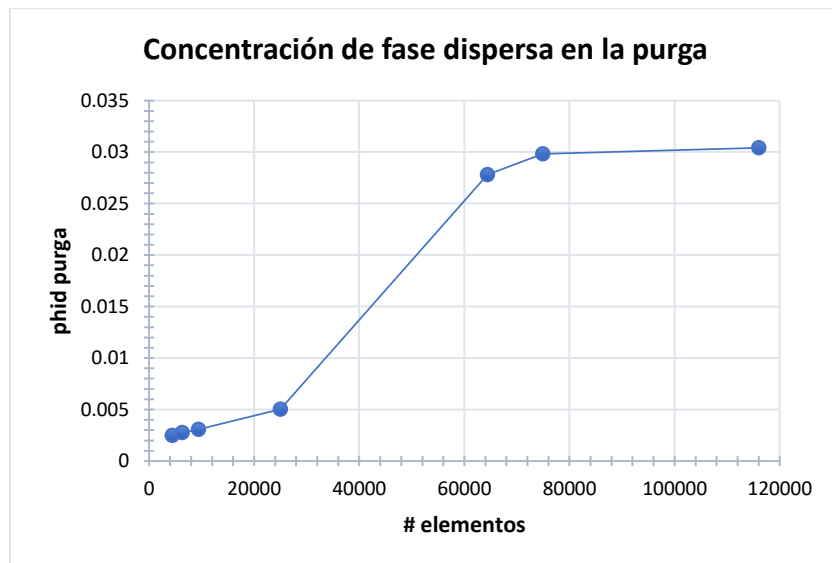
<b>Tipo de malla</b>	<b>Número de elementos</b>	<b>Fracción volumétrica <math>\Phi</math> a la salida principal</b>	<b>Fracción volumétrica <math>\Phi</math> a la salida de purga</b>
<b>Más gruesa</b>	4397	-2.12E-18	0.002483
<b>Gruesa</b>	6286	-1.20E-21	0.002758
<b>Normal</b>	9382	-8.27E-19	0.003086
<b>Fina</b>	25015	-3.84E-22	0.005030
<b>Más fina</b>	64361	-1.42E-17	0.027805
<b>Extra fina</b>	74929	-4.65E-18	0.029819
<b>Extremadamente fina</b>	116009	-1.05E-19	0.030413

El estudio de independencia del mallado permite eliminar errores en el cálculo de la solución y es un proceso de refinamiento sucesivo que se siguió hasta que el valor de la concentración de la fase dispersa en la salida inferior del tanque no se modificó significativamente. Entonces, en la figura 31 se han graficado los resultados de obtenidos en la salida principal, aunque no se aprecia una tendencia lineal se consideran que los resultados cuantitativos son iguales a cero; por lo que se demuestra que en esta sección se obtiene un flujo tratado libre de fase dispersa lo que equivale a tener agua clarificada.



**Figura 31.** Concentración de fase dispersa a la salida de la geometría j).

En la figura 32 se observan los resultados de la fase dispersa en la salida de la purga, se puede distinguir que existe una tendencia lineal hasta que se alcanza el número de elementos del mallado más fino y, finalmente, hay una diferencia mínima entre los resultados de la simulación con malla extra fina y extremadamente fina donde se logra la independencia. Cabe mencionar que existe una diferencia relevante de aproximadamente el 91.8% entre los resultados de las mallas gruesa y extremadamente fina.



**Figura 32.** Concentración de fase dispersa a la salida de la purga en la geometría j).

## CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES

En este proyecto se llevó a cabo el mejoramiento teórico del tanque de sedimentación circular prototipo que forma parte de un sistema de tratamiento del agua residual de una industria curtidora mediante electrocoagulación dentro de la División de Ciencias Naturales y Exactas. Se realizó la simulación de diez diseños del tanque sedimentador modificado con diferentes configuraciones de series entre 2 y 5 mamparas utilizando el software COMSOL Multiphysics; además de simular el tanque sedimentador original con el fin de comparar y verificar la validez de los resultados obtenidos, debido a que éste ya se ha puesto en operación para otros procesos experimentales de acuerdo con Villalobos-Lara et al. (2020).

Se planteó un modelo de mezcla de flujo bifásico (líquido-sólido) en dos dimensiones con simetría axial en el eje  $z$  y radio  $r$ , obteniendo así una geometría de revolución que simula el tanque cilíndrico y comparte las mismas características en cada uno de los puntos que poseen las mismas coordenadas en los semiplanos generados. También se propuso y comprobó la presencia de turbulencia generada a partir de la disposición de las mamparas usando el modelo  $k - \varepsilon$  para simular el comportamiento del flujo dentro del sedimentador. Se supuso que la fase dispersa se comporta como un grupo de partículas discretas, aunque en el sistema real siempre habrá interacción entre los sólidos y estará presente el fenómeno de la coalescencia en la floculación.

Entonces, para la selección del mejor diseño se analizaron los resultados representados por los perfiles de velocidad, líneas de flujo, evaluaciones de la concentración de fase dispersa y presiones a lo largo del tanque. Se determinó que la combinación de zonas de turbulencia y de flujo ordenado uniforme con menor velocidad favorecen el mezclado, la interacción entre las partículas y el proceso de coagulación-floculación. Adicionalmente, se ha establecido que la colocación de una zona de purgado sobre la base del tanque influye directamente en la cantidad de sólidos sedimentados que se separan de la fase continua.

Por lo tanto, el denominado diseño j) (tabla 1) se seleccionó como aquel con la mejor configuración de mamparas verticales. De este modo, se incrementó la eficiencia del tanque sedimentador por medio de la incorporación de una serie de 4 mamparas verticales diseñadas para promover el flujo descendente-ascendente y, por consiguiente, el proceso de floculación y la sedimentación de las partículas cuando aumentan su tamaño. Logrando

entonces la remoción de dichos sólidos por la parte inferior del tanque; con el fin de obtener agua residual tratada y clarificada en la salida superior del tanque.

## **CAPÍTULO 6. PERSPECTIVAS A FUTURO**

El estudio numérico de la modificación del tanque de sedimentación principal del sistema de electrocoagulación por medio de una serie de 4 mamparas verticales con diferentes longitudes aplicando la dinámica de fluidos computacional bifásica permitió obtener un diseño funcional y eficiente del tanque. Dicho estudio permitió predecir la remoción aproximada del 60% de la concentración de fase dispersa de un efluente real bifásico proveniente de una industria curtidora real de la ciudad de León. Sin embargo, a lo largo del desarrollo del proyecto se ha identificado que existen diversos elementos de la metodología de diseño y simulación que pueden examinarse a futuro:

- i) Validar experimentalmente los resultados producto de la simulación numérica.
- ii) Considerar dentro del modelo la interacción de los flóculos con el fluido bifásico, ya que su tamaño es variable con el transcurso del tiempo.
- iii) Variar el ángulo de posición de las mamparas.
- iv) Probar diseños con mamparas que posean alguna otra geometría diferente a la rectangular, como lo puede ser la forma de arco.
- v) Analizar la factibilidad de cambiar el tamaño de los decantadores.
- vi) Realizar experimentos computacionales con diámetros variables de las partículas sólidas de la fase dispersa.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Adams, E. y Rodi, W. (1990). Modeling flow and mixing in sedimentation tanks. *J. Hydraul. Eng.*, 116, 895-913.
- Ahadi, M., Bergstrom, D. y Mazurek, K. (2020). Computational fluid-dynamics modeling of the flow and sediment transport in stormwater retention ponds: a review. *J. Environ. Eng.* 146(9), 03120008-1 – 03120008-14.
- Almukdad, A., Hafiz, M., Yasir, A., Alfahel, R. y Hawari, A. (2021). Unlocking the application potential of electrocoagulation process through hybrid processes. *Journal of Water Process Engineering*, 40.
- ANSYS Fluent. (2014). ANSYS Fluent Documentation 15.0; ANSYS, Inc.: Canonsburg, PA, USA.
- Arango, A. (2005). La electrocoagulación: una alternativa para el tratamiento de aguas residuales. *Revista Lasallista de Investigación*, 2(1), 49-56.
- Badules, J., Vidal, M., Boné, A., Gil, E. y García-Ramos, F. (2020). Biphasic computational fluid dynamics modelling of the mixture in an agricultural sprayer tank. *Molecules*, 25(1870), 3-15.
- Bélendez, A. (1992). Acústica, fluidos y termodinámica. Capítulo 3. Dinámica de fluidos y fluidos reales. Universidad de Alicante. Recuperado de <https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/11348/1/Dinamica%20de%20fluidos%20y%20fluidos%20reales.pdf>
- Brauner, N. (2003). Liquid-liquid two-phase flow systems. *International Centre for Mechanical Sciences (Courses and Lectures)*, vol. 450. Vienna: Springer.
- Brill, J. y Dale, H. (1991). *Two-phase flow in pipes*. (6th. Ed.).
- Caldera, A. et al. (2020). Agua en el bajío guanajuatense. 1ra. ed. Universidad de Guanajuato. p. 229-250.
- Cengel, Y. y Cimbala, J. (2006). *Mecánica de fluidos. Fundamentos y aplicaciones*. México: McGraw-Hill.
- COMSOL. (2018). *Essentials of Postprocessing and Visualization in COMSOL Multiphysics*. COMSOL Handbook Series.
- Conagua. (2018). *Estadísticas del agua en México*. Edición 2018. México. p. 200.
- Crowe, C., Sommerfeld, M. y Tsuji, Y. (1998). *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press.

- Cruz, G. (2015). Cálculo de parámetros mediante el método del elemento finito para el análisis de transitorios electromagnéticos en cables de alta tensión. Tesis de maestría. Instituto Politécnico Nacional.
- Davis, M. y Masten, S. (2005). Ingeniería y ciencias ambientales. México: McGraw-Hill. p. 366-368.
- El-Ashtoukhy, E., Amin, N., Fouad, Y. y Hamad, H. (2020). Intensification of a new electrocoagulation system characterized by minimum energy consumption and maximum removal efficiency of heavy metals from simulated wastewater. *Chemical Engineering and Processing – Process Intensification*, 154, 1-12.
- Feres, M. (1999). Diseño de planta de tratamiento de aguas residuales para el área urbana del municipio de Altamira, Tamaulipas. Tesis de maestría. Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey.
- Glynn, J. y Heinke, G. (1999). Ingeniería Ambiental. (2a. Ed). México: Prentice Hall.
- Gonzalo, G. (2002). Electrocoagulación de aguas residuales. *Revista colombiana de física*, 34(2), 484-487.
- Iman, E., McCorquodale, J. y Bewtra, J. (1983). Numerical modeling of sedimentation tanks. *J. Hydr. Eng.* 109, 1740-1754.
- Joodi, A. y Rashid, M. (2014). Numerical model for water flow and settling behavior in the sedimentation basin of Al-Karamah treatment plant. *International Journal of Engineering Sciences & Research Technology*, 3(10), 430-437.
- Laleh, A., Svrcek, W. y Monnery, W. (2012). Design and CFD studies of multiphase separators – a review. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 90, 1547-1560.
- Liang, L., Yu, X. y Bombardelli, F. (2017). A General Mixture Model for Sediment Laden Flows. *Advances in Water Resources*, 1-59.
- Luna, F., Silva, A., Fukumasu, N., Bazan, O., Gouveia, J., Moraes, D., Yanagihara, A. y Vianna, A. (2019). Fluid dynamics in continuous settler. *Chemical Engineering Journal*, 362, 712-720.
- Lyn, D., Stamou, A. y Rodi, W. (1992). Density currents and shear induced flocculation in sedimentation tanks. *J. Hydr. Eng. ASCE*, 118(6), 849-867.
- Manninen, V., Taivassalo, V. y Kallio, S. (1996). On the Mixture Model for Multiphase Flow. Finland.

- McCorquodale, J. y Zhou, S. (1993). Effects of hydraulic and solids loading on clarifier performance. *J. Hydr. Res.* 31, 461-477.
- Metcalf & Eddy, Inc. (1995). *Ingeniería de aguas residuales. Tratamiento, vertido y reutilización.* (3ra. Ed). España: McGraw-Hill.
- Pérez, J. (1981). *Manual de tratamiento de agua.* p. 96-135.
- Pérez, J., García, A., Herrero, R. y Solano, J. (2018). Experimental correlations on critical Reynolds numbers and friction factor in tubes with wire-coil inserts in laminar, transitional and low turbulent flow regimes. *Exp. Therm. Fluid Sci.* 91, 64–79.
- Restrepo, A., Arango, A. y Garcés, L. (2006). La electrocoagulación: retos y oportunidades en el tratamiento de aguas. *Producción + Limpia*, 1(2), 58-77.
- Sadiku, M. (1989). A simple introduction to finite element analysis of electromagnetic problems. *IEEE Transactions on Education*, 32 (2), 85-93.
- Semarnat, Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2009). *Agua Capítulo 6. Semarnat, México.* Recuperado de [https://apps1.semarnat.gob.mx:8443/dgeia/informe\\_12/pdf/Cap6\\_agua.pdf](https://apps1.semarnat.gob.mx:8443/dgeia/informe_12/pdf/Cap6_agua.pdf)
- Stamou, A., Adams, E. y Rodi, W. (1989). Numerical modelling of flow and settling in primary rectangular clarifiers. *J. Hydraul. Res. IAHR*, 27(5), 665-682.
- Tarpagkou, R. y Pantokratoras, A. (2013). CFD methodology for sedimentation tanks: the effect of secondary phase on fluid using DPM coupled calculations. *Appl. Math. Model.*, 37, 3478-3494.
- Tarpagkou, R. y Pantokratoras, A. (2014). The influence of lamellar settler in sedimentation tanks for potable water treatment – a computational fluid dynamic study. *Powder Technology*, 268, 139-149.
- Versteeg, H. y Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics.* 2nd. Edition. Pearson Education: United Kingdom.
- Villalobos-Lara, A., Pérez, T., Uribe, A., Alfaro-Ayala, J., Ramírez-Minguela, J. y Minchaca-Mojica, J. (2020). CFD simulation of biphasic flow, mass transport and current distribution in a continuous rotating cylinder electrode reactor for electrocoagulation process. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 858, 1-9.
- Villar, C. (2016). *Modelado y simulación acústica 3D mediante COMSOL de dispositivos de la línea de escape en vehículos. Aplicación a catalizadores.* Tesis de maestría. Universitat Politècnica de València.



- Zarate, V. (1995). Estudios de sedimentación de lodos secundarios de plantas de tratamiento de aguas residuales municipales del estado de Nuevo León. Tesis de maestría. Universidad Autónoma de Nuevo León.
- Zatarain, M. (1988). Teoría de la sedimentación. Tesis. Universidad de Sonora.
- Zhong, W., Yu, A., Zhou, G., Xie, J. y Zhang, H. (2016). CFD simulation of dense particulate reaction system: approaches, recent advances and applications. *Chemical Engineering Science*, 140, 16-43.