



**UNIVERSIDAD JUÁREZ AUTÓNOMA DE TABASCO**  
**DIVISIÓN ACADÉMICA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS**



**Diagnóstico de Operación para un Clarificador-Floculador  
de una Planta Potabilizadora de Tabasco a partir del  
Análisis de Dinámica de Fluidos por Computadora**

TESIS COMO REQUISITO PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
**MAESTRO EN CIENCIAS AMBIENTALES**

PRESENTA

**Omar Antonio Celaya López**

DIRECTOR DE TESIS

**Dr. José Roberto Hernández Barajas**

VILLAHERMOSA, TABASCO

AGOSTO DE 2017



**UNIVERSIDAD JUÁREZ  
AUTÓNOMA DE TABASCO**

“ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE”

**DIVISIÓN ACADÉMICA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS  
DIRECCIÓN**



Villahermosa, Tab., a 04 de Agosto de 2017

**ASUNTO:** Autorización de Modalidad de Titulación

**C. LIC. MARIBEL VALENCIA THOMPSON  
JEFE DEL DEPTO. DE CERTIFICACIÓN Y TITULACION  
DIRECCIÓN DE SERVICIOS ESCOLARES  
P R E S E N T E**

Por este conducto y de acuerdo a la solicitud correspondiente por parte del interesado, informo a usted, que en base al reglamento de titulación vigente en esta Universidad, ésta Dirección a mi cargo, autoriza al **C. OMAR ANTONIO CELAYA LÓPEZ** egresado de la Maestría en **CIENCIAS AMBIENTALES** de la División Académica de **CIENCIAS BIOLÓGICAS** la opción de titularse bajo la modalidad de Tesis de Maestría denominado: **“DIAGNÓSTICO DE OPERACIÓN PARA UN CLARIFICADOR-FLOCULADOR DE UNA PLANTA POTABILIZADORA DE TABASCO A PARTIR DEL ANÁLISIS DE DINÁMICA DE FLUIDOS POR COMPUTADORA”**.

Sin otro particular, aprovecho la ocasión para saludarle afectuosamente.

A T E N T A M E N T E

**M. EN C. ROSA MARTHA PADRON LOPEZ  
DIRECTOR DE LA DIVISIÓN ACADÉMICA  
DE CIENCIAS BIOLÓGICAS**

**UJAT  
DIVISIÓN ACADÉMICA  
DE CIENCIAS BIOLÓGICAS**



**DIRECCIÓN**

C.c.p. - Expediente Alumno de la División Académica  
C.c.p.- Interesado



**UNIVERSIDAD JUÁREZ  
AUTÓNOMA DE TABASCO**

“ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE”

DIVISIÓN ACADÉMICA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS  
DIRECCIÓN



AGOSTO 04 DE 2017

**C. OMAR ANTONIO CELAYA LÓPEZ  
PAS. DE LA MAESTRIA EN CIENCIAS AMBIENTALES  
P R E S E N T E**

En virtud de haber cumplido con lo establecido en los Arts. 80 al 85 del Cap. III del Reglamento de titulación de esta Universidad, tengo a bien comunicarle que se le autoriza la impresión de su Trabajo Recepcional, en la Modalidad de Tesis de Maestría en Ciencias Ambientales titulado: **“DIAGNÓSTICO DE OPERACIÓN PARA UN CLARIFICADOR-FLOCULADOR DE UNA PLANTA POTABILIZADORA DE TABASCO A PARTIR DEL ANÁLISIS DE DINÁMICA DE FLUIDOS POR COMPUTADORA”**, asesorado por el Dr. José Roberto Hernández Barajas sobre el cual sustentará su Examen de Grado, cuyo jurado está integrado por el MIPA. Sergio Ramos Herrera, Dr. Agustín Ramón Uribe Ramírez, Dr. José Roberto Hernández Barajas, M. en C. Carlos Alberto Torres Balcázar y M. en C. Verónica Hernández Suárez.

Por lo cual puede proceder a concluir con los trámites finales para fijar la fecha de examen.

Sin otro particular, me es grato enviarle un cordial saludo.

**ATENTAMENTE**  
ESTUDIO EN LA DUDA. ACCIÓN EN LA FE

**M. EN C. ROSA MARTHA PADRON LOPEZ**  
**DIRECTORA**

UJAT  
DIVISIÓN ACADÉMICA  
DE CIENCIAS BIOLÓGICAS



DIRECCIÓN

C.c.p.- Expediente del Alumno.  
C.c.p.- Archivo

## CARTA AUTORIZACIÓN

El que suscribe, autoriza por medio del presente escrito a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco para que utilice tanto física como digitalmente el Trabajo Recepcional en la modalidad de Tesis de Maestría denominado: **“DIAGNÓSTICO DE OPERACIÓN PARA UN CLARIFICADOR-FLOCULADOR DE UNA PLANTA POTABILIZADORA DE TABASCO A PARTIR DEL ANÁLISIS DE DINÁMICA DE FLUIDOS POR COMPUTADORA”**, de la cual soy autor y titular de los Derechos de Autor.

La finalidad del uso por parte de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco el Trabajo Recepcional antes mencionada, será única y exclusivamente para difusión, educación y sin fines de lucro; autorización que se hace de manera enunciativa más no limitativa para subirla a la Red Abierta de Bibliotecas Digitales (RABID) y a cualquier otra red académica con las que la Universidad tenga relación institucional.

Por lo antes manifestado, libero a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco de cualquier reclamación legal que pudiera ejercer respecto al uso y manipulación de la tesis mencionada y para los fines estipulados en éste documento.

Se firma la presente autorización en la ciudad de Villahermosa, Tabasco el Día 04 de Agosto de 2017.

AUTORIZO



---

OMAR ANTONIO CELAYA LÓPEZ



| Índice  | Pág. |
|---|------|
| <b>1. Introducción</b>  | 1    |
| <b>2. Marco Teórico</b>   | 4    |
| 2.1. El tratamiento de agua   | 4    |
| 2.2. La operación unitaria de sedimentación por gravedad                              | 4    |
| 2.3. El proceso unitario de coagulación-floculación                                   | 4    |
| 2.4. Tanques floculadores   | 6    |
| 2.4.1. Floculadores convencionales  | 6    |
| 2.4.2. Clarifloculadores  | 8    |
| 2.4.2.1. Clarificador ACCELATOR®  | 8    |
| 2.5. La dinámica de fluidos por computadora   | 10   |
| 2.6. Ecuaciones de Continuidad y Momentum   | 12   |
| 2.6.1. Ecuación de Conservación de Masa   | 13   |
| 2.6.2. Ecuación de Conservación de Momentum   | 13   |
| 2.6.3. Ecuación de Conservación en su Forma General                                   | 13   |
| 2.7. Modelos de turbulencia   | 15   |
| 2.7.1. El Modelo $k-\varepsilon$  | 16   |
| 2.7.2. El Modelo $k-\varepsilon$ estándar   | 17   |
| 2.7.3. El Modelo $k-\varepsilon$ RNG  | 18   |
| 2.7.4. Sistemas con flujo turbulento  | 19   |
| 2.8. Clasificación de métodos numéricos en CFD  | 20   |
| 2.9. Flujos multifase   | 22   |
| 2.9.1. El Modelo VOF  | 23   |
| 2.9.2. El Modelo de Mezcla  | 23   |
| 2.9.3. El Modelo Euleriano  | 24   |
| 2.10. Modelo de balance de población  | 25   |
| 2.10.1. El vector de estado de la partícula   | 26   |
| 2.10.2. La Ecuación de Balance de Población   | 27   |
| 2.10.3. Agregación  | 28   |
| 2.10.4. Ruptura   | 29   |
| 2.10.5. El método discreto  | 31   |
| 2.10.6. El método discreto no homogéneo   | 34   |
| 2.10.7. El método estándar de momentos  | 37   |
| 2.10.8. El método de cuadratura de momentos   | 37   |
| <b>3. Antecedentes</b>  | 38   |
| 3.1. Modelos matemáticos para la dinámica de fluidos en la sedimentación por gravedad | 38   |
| 3.2. Modelos matemáticos para la dinámica de fluidos en la coagulación-floculación    | 40   |
| 3.3. Modelos de balance de población en tratamiento de aguas                          | 42   |
| <b>4. Justificación</b>   | 43   |
| <b>5. Objetivo e Hipótesis</b>  | 44   |
| <b>6. Métodos</b>   | 45   |



|           |  |           |
|-----------|--|-----------|
| 6.1.      | Descripción de la Unidad de Clarificación-Floculación                        | 45        |
| 6.2.      | Diseño de la geometría tridimensional del clarificador-floculador            | 47        |
| 6.3.      | Selección de técnicas, modelos, submodelos y parámetros para el análisis CFD | 48        |
| 6.4.      | Efecto de condiciones de operación en la unidad de clarificación-floculación | 50        |
| <b>7.</b> | <b>Resultados y Discusión</b>  | <b>51</b> |
| 7.1.      | Geometría del tanque Clarificador-Floculador y generación de malla numérica  | 51        |
| 7.1.1.    | Diseño de la geometría tridimensional  | 51        |
| 7.1.2.    | Generación de la malla numérica  | 52        |
| 7.2.      | Selección del modelo CFD   | 53        |
| 7.2.1.    | Materiales, fases y condiciones de frontera                                  | 55        |
| 7.2.2.    | Pruebas preliminares en 3D   | 55        |
| 7.3.      | Simulaciones empleando el modelo CFD   | 62        |
| 7.3.1.    | Efectos de las condiciones de operación                                      | 64        |
| 7.3.2.    | Comportamiento de las partículas de la fase sólida                           | 68        |
| <b>8.</b> | <b>Conclusiones y Recomendaciones</b>  | <b>73</b> |
| 8.1.      | Conclusiones   | 73        |
| 8.2.      | Recomendaciones  | 74        |
| <b>9.</b> | <b>Referencias</b>   | <b>75</b> |



| <b>Índice de Figuras</b> |  | Pág. |
|--------------------------|--|------|
| <b>Fig. 1.</b>           | Tipos de tanques floculadores hidráulicos.   | 7    |
| <b>Fig. 2.</b>           | Clarificador Accelerator®  | 10   |
| <b>Fig. 3.</b>           | Distribución del tamaño de partículas mediante el método discreto  | 32   |
| <b>Fig. 4.</b>           | Método discreto homogéneo  | 36   |
| <b>Fig. 5.</b>           | Método discreto no homogéneo   | 36   |
| <b>Fig. 6.</b>           | Componentes de una unidad de clarificación-floculación.  | 46   |
| <b>Fig. 7.</b>           | Descripción del funcionamiento de un clarifloculador de tipo Accelerator®.   | 46   |
| <b>Fig. 8.</b>           | Generación de la geometría tridimensional del tanque clarifloculador.  | 52   |
| <b>Fig. 9.</b>           | Mallado numérico del tanque clarifloculador.   | 53   |
| <b>Fig. 10.</b>          | Contorno de velocidad del flujo (en $m s^{-1}$ ) en régimen turbulento con agitador apagado. Velocidad del flujo a la entrada igual a $0.77 m s^{-1}$  | 57   |
| <b>Fig. 11.</b>          | Contorno de velocidad (corte vertical) en función del tiempo. Velocidad de entrada $v = 0.77 m s^{-1}$   | 59   |
| <b>Fig. 12.</b>          | Contorno de velocidad en un corte vertical del tanque clarifloculador a $t = 20 s$ .   | 60   |
| <b>Fig. 13.</b>          | Vectores de velocidad del agua en un corte horizontal, a $t = 30 s$ y a la altura de la paleta ( $h = 0.9 m$ sobre la superficie del nivel de agua)  | 60   |
| <b>Fig. 14.</b>          | Vectores de la velocidad del agua en un corte vertical, a $t = 30 s$   | 61   |
| <b>Fig. 15.</b>          | Contorno vertical longitudinal de la fracción volumen de sólidos a diferentes tiempos de simulación, fracción volumétrica inicial de $\epsilon_s = 2 \times 10^{-4}$ en todo el tanque (aprox. 200 NTU). | 65   |
| <b>Fig. 16.</b>          | Contorno horizontal de la fracción volumen de sólidos a la altura de la paleta ( $h = 0.9 m$ sobre la superficie del nivel de agua).   | 65   |
| <b>Fig. 17.</b>          | Vectores de la velocidad de sólidos  | 66   |
| <b>Fig. 18.</b>          | Contorno vertical longitudinal de la energía de disipación   | 67   |
| <b>Fig. 19.</b>          | Contorno de la distribución de la tasa de disipación turbulenta ( $\epsilon$ , $m^2/s^3$ ) a la altura de los canales  | 68   |
| <b>Fig. 20.</b>          | Contorno de fracción volumen de la partícula de mayor tamaño (0.69 mm, Intervalo 0)  | 69   |
| <b>Fig. 21.</b>          | Contorno de fracción volumen de la partícula de diámetro promedio de 0.36 mm (Intervalo 1)   | 70   |
| <b>Fig. 22.</b>          | Contorno de fracción volumen de la partícula de diámetro promedio de 0.19 mm (Intervalo 2)   | 71   |
| <b>Fig. 23.</b>          | Contorno de fracción volumen de la partícula de menor tamaño (0.09 mm, Intervalo 3)  | 72   |
| <b>Índice de Tablas</b>  |  | Pág. |
| <b>Tabla 1.</b>          | Dimensiones de diseño de un clarifloculador a escala real (Planta Potabilizadora de Dos Montes-El Tintillo)  | 47   |
| <b>Tabla 2.</b>          | Selección de Modelos disponibles en Fluent   | 54   |
| <b>Tabla 3.</b>          | Características seleccionadas en Fluent  | 56   |
| <b>Tabla 4.</b>          | Condiciones de operación del sistema   | 58   |
| <b>Tabla 5.</b>          | Condiciones de operación del sistema y características del modelo y la simulación  | 62   |
| <b>Tabla 6.</b>          | Comparación de resultados del modelo CFD con estudios previos  | 63   |



## Introducción

En la actualidad Tabasco enfrenta un gran reto en la potabilización de aguas para el consumo humano, algunos de ellos son satisfacer la demanda de la ciudadanía, realizar remodelaciones a las plantas existentes para ampliar su capacidad de potabilización y sobre todo proveer un efluente de calidad. En su mayoría las potabilizadoras en el estado utilizan la clarificación convencional como tecnología para tratar el agua cruda captada de los ríos que atraviesan el estado.

De acuerdo con el Inventario Nacional de Plantas Municipales (CONAGUA, 2014) y al Censo de Población y Vivienda (INEGI, 2015) la capacidad instalada nacional es de 138,045 L/s con una capacidad real de potabilización de 96,275 L/s. De acuerdo a esta información de 2014, el Sistema Nacional de Potabilización es capaz de ofrecer una dotación promedio diaria de 70 L per cápita, una dotación mucho menor a la dotación promedio de 180 L per cápita de los países de la OECD. Por su parte, en Tabasco operan 39 plantas potabilizadoras con una capacidad instalada de 9,960 L/s y una capacidad de procesamiento real de 8,465 L/s. Tomando como punto de referencia a esta capacidad de procesamiento, la dotación promedio es de 305 L per cápita, un valor que contrasta con la proporción de viviendas particulares habitadas con disponibilidad de agua entubada en Tabasco que es de 73.5%. Considerando que estas cifras estadísticas sean correctas, lo anterior implica que una porción de la población tabasqueña recibe más de 300 L de agua potable per cápita diariamente mientras que la cuarta parte de la población no tiene acceso a agua entubada, mucho menos a agua potable.

En Tabasco, el problema de acceso al agua potable no sólo se debe a una gestión inadecuada de este recurso sino a que las fuentes de agua disponibles están siendo contaminadas por las



propias aguas residuales domésticas, agrícolas e industriales. En adición, la infraestructura para el tratamiento de agua potable posee una cobertura limitada de la población, debida, entre otros factores importantes, al presupuesto restringido de las instancias gubernamentales para la operación y mantenimiento de los sistemas de potabilización de agua. Del total de plantas potabilizadoras nacionales, el 31% emplea la tecnología de clarificación convencional. En Tabasco, la proporción de plantas potabilizadoras con dicha tecnología es aún mayor: el 63% (CONAGUA, 2014). Una de las etapas clave en la tecnología de clarificación y potabilización del agua es el proceso unitario de coagulación-floculación, cuyo propósito es disminuir la turbiedad y el color del agua empleando agentes químicos para neutralizar las cargas electrostáticas que impiden que la materia suspendida, principalmente de tipo coloidal, pueda formar aglomerados llamados flocúlos que sean capaces de sedimentar por la acción de la gravedad (Sincero y Sincero, 2003).

Por lo anterior, se requiere de una evaluación de su desempeño bajo condiciones climatológicas y meteorológicas de Tabasco, Estado que se caracteriza por sus temperaturas cálidas y lluvias abundantes durante todo el año.

La clarificación y floculación del agua es fundamental en la remoción de los sólidos suspendidos; su principio de operación se establece por la acción de la gravedad para el asentamiento de las partículas, así como en la aglomeración de éstas para la formación de flocúlos, cuyo gran tamaño permite una velocidad de sedimentación mayor y, como resultado, una clarificación mejorada del agua tratada. Sin embargo, la comprensión de los aspectos fluidodinámicos y fenomenológicos que ocurren dentro del tanque de floculación se vuelve complejo debido a la interacción entre los agentes coagulantes (metálicos y polímeros) utilizados para desestabilizar la materia coloidal presente en el agua y el movimiento del agua dentro del tanque.



Aunado a lo anterior, el desempeño del tratamiento se ve reflejado en las lecturas de turbiedad que presenta el agua tratada al final del proceso. De acuerdo con la normatividad mexicana (NOM-127-SSA-1994), el agua tratada no debe contener turbiedades mayores a 5 unidades nefelométricas de turbiedad (UNT). La turbiedad es un parámetro de caracterización de la calidad del agua que puede correlacionarse directamente con la concentración de sólidos suspendidos en el agua, una variable que puede estimarse con un balance de masa acoplado a un balance de cantidad de movimiento.

En esta investigación se empleó una herramienta computacional conocida como Dinámica de Fluidos por Computadora (mejor conocido como CFD, del inglés *Computational Fluid Dynamics*) con el objetivo de diagnosticar la operación de un tanque de clarificación-floculación con tecnología de vanguardia. Para ello se utilizará el software ANSYS® Fluent, con el cual se realizarán tres funciones principales: *i*) diseñar una geometría precisa del tanque clarifloculador, *ii*) generar una malla numérica tridimensional para la solución de las ecuaciones de conservación empleando métodos de volumen finito, y *iii*) establecer las características del modelo, tales como: sistema de coordenadas del modelo, número de fases, materiales o especies químicas involucradas, propiedades termofísicas, condiciones de operación, particularidades de los fenómenos de transferencia de masa, calor y cantidad de movimiento, así como diversos parámetros numéricos requeridos. Los modelos CFD permiten representar los fenómenos de transporte (masa, energía y cantidad de movimiento) en estado no estacionario, en dos o tres dimensiones espaciales, considerando una o más fases de materia y con la posibilidad de incluir la cinética química de un sistema reactivo. Un análisis CFD de esta naturaleza permitiría establecer el efecto de variaciones en el caudal, la concentración de sólidos suspendidos, así como el tamaño promedio de partícula del agua empleada como materia prima para potabilización. Como resultado de este análisis será posible determinar una región de operación que optimice el desempeño de la unidad de clarificación-floculación en función de las condiciones ambientales del Estado y con el objetivo final de mejorar la calidad del agua potable.



## 2

## Marco Teórico

### 2.1. El tratamiento de agua

El tratamiento del agua es el conjunto de operaciones y procesos que se realizan sobre el agua cruda con el fin de remover o reducir sus contaminantes y lograr que sus características organolépticas, físicas, químicas y microbiológicas cumplan con las especificaciones contenidas en las normas que regulan la materia (Cartwright, 2009).

### 2.2. La operación unitaria de sedimentación por gravedad

La sedimentación por gravedad es una operación unitaria que consiste en la separación de partículas sólidas suspendidas en el agua por medio de la acción de la gravedad y la diferencia de densidades entre estas partículas y el agua. Esta separación se produce porque las partículas que tienen mayor densidad que el agua, son atraídas en dirección al centro de la Tierra debido a la fuerza de gravedad, depositándose en el fondo del cuerpo de agua o recipiente que las contenga (Metcalf y Eddy, 1996).

### 2.3. El proceso unitario de coagulación-floculación

Se denomina coagulación-floculación al proceso por el cual las partículas se aglutinan en pequeñas masas con peso específico superior al del agua llamadas floculo. Dicho proceso se usa con varios propósitos tales como: *i)* remover la turbiedad orgánica o inorgánica que no puede sedimentar rápidamente, *ii)* remover el color, tanto verdadero como aparente, *iii)* eliminar bacterias, virus y organismos patógenos susceptibles de ser separados por coagulación, *iv)* destruir algas y plancton en general, *v)* eliminar sustancias productoras de sabor y olor en algunos casos y de precipitados químicos suspendidos o compuestos orgánicos (Arboleda, 2000).



Deben distinguirse dos aspectos fundamentales en la coagulación-floculación del agua (Ghafari *et al.*, 2008); primero, la desestabilización de las partículas suspendidas; es decir, la neutralización de las cargas electrostáticas que las mantienen separadas (proceso de coagulación) y segundo, el transporte de ellas dentro del líquido para que hagan contacto, generalmente estableciendo puentes entre sí y formando una malla tridimensional de coágulos porosos los cuales son promovidos con la agitación leve del agua (proceso de floculación).

La coagulación es el proceso que consiste en la adición de sustancias químicas al agua y tiene como función principal desestabilizar las cargas electrostáticas de los sólidos suspendidos, permitiendo así la formación de flóculos. La dosis de agente coagulante condiciona el funcionamiento de las unidades de sedimentación y es imposible realizar una buena clarificación si la cantidad de coagulante no es la adecuada (Andía, 2000).

La floculación es el proceso mediante el cual, una vez que las cargas de los coloides se han neutralizado, se propicia el contacto entre partículas mediante un mezclado suave que incrementa la tasa de encuentros o colisiones entre ellas, aglomerándose para formar flóculos y de esta manera facilitar su precipitación (Romero, 2006). El mecanismo presenta dos etapas: pericinética y ortocinética; en la primera etapa, las partículas colisionan y permanecen juntas mientras se mueven bajo la influencia del movimiento browniano, las partículas crecen tan grandes que posteriormente dejan de ser afectadas por el movimiento browniano; en la segunda etapa las partículas se mueven juntas bajo la influencia del movimiento del agua (Bratby, 2008).

La resistencia de los flóculos depende de una serie de factores:

- De su tamaño, forma y compactación
- Del tamaño, forma y naturaleza de las micropartículas
- Del número y forma de los ligamentos que unen las partículas.



## 2.4. Tanques floculadores

Los tanques floculadores son unidades que tienen como objetivo proporcionar a la masa de agua una agitación lenta aplicando velocidades decrecientes para promover el crecimiento de flocúlos y su conservación, hasta que la suspensión de agua abandone la unidad. La energía que produce la agitación puede ser de origen mecánica o hidráulica. Los floculadores mecánicos son aquellos que requieren una fuente de energía externa que mueva un agitador (rotores) y los hidráulicos son los que utilizan la energía del agua a través de una pérdida de carga hidráulica.

A continuación, se mencionan algunos de los diseños más usados en la potabilización, entre los que se encuentran los clarifloculadores.

### 2.4.1. Floculadores convencionales

Entre los floculadores más conocidos se pueden citar, en primer lugar, las unidades de pantallas de flujo horizontal y vertical, las de medios porosos, el tipo Alabama y Cox, así como los floculadores de mallas.

Los floculadores hidráulicos más comunes son los de flujo horizontal y los de flujo vertical (**Figura 1a**). El floculador de flujo horizontal consiste en un tanque de concreto dividido por tabiques, deflectores o pantallas de concreto u otro material adecuado, dispuestos de manera que se propicie un recorrido de ida y vuelta alrededor de los extremos libres. En general, los floculadores hidráulicos con una velocidad de flujo apropiada y un número adecuado de deflectores para asegurar suficientes curvas, proveen de una floculación efectiva. En la práctica, los floculadores hidráulicos de flujo horizontal se usan para plantas pequeñas, con caudales menores de 50 L/s; los de flujo vertical, que se construyen más profundos (2-3 m), se usan para plantas con caudales mayores a 50 L/s. En comparación con los floculadores mecánicos, se pueden señalar como desventajas de los floculadores hidráulicos la alta pérdida de carga (30-150 cm) y la poca flexibilidad de control en el grado de mezcla para caudal variable. Entre las ventajas



se destacan la inexistencia de equipo mecánico y requerimiento mínimo de mantenimiento (Romero, 2006).

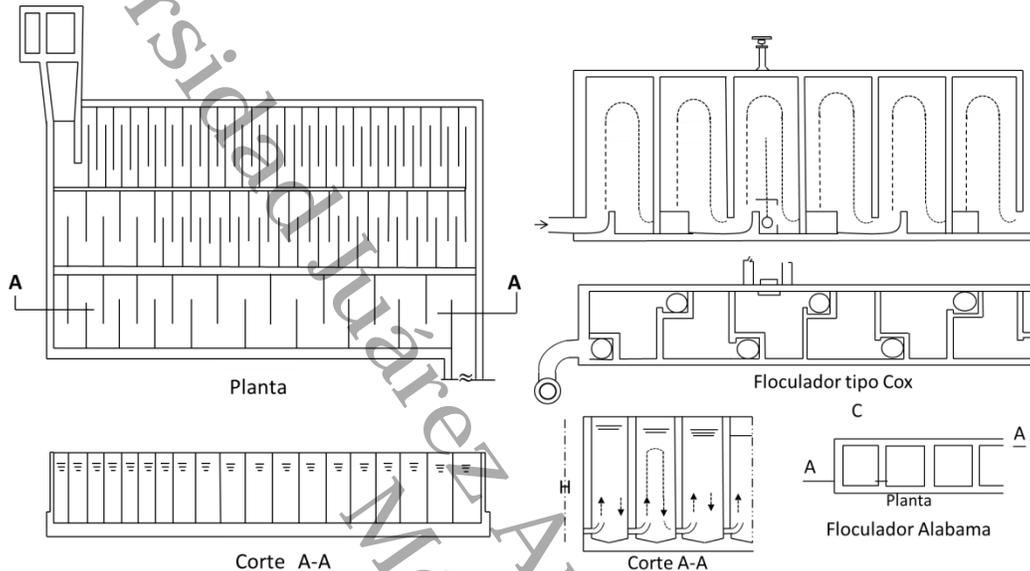


Figura 1. Tipos de tanques floculadores hidráulicos.

Por su parte, en los floculadores mecánicos se introduce potencia al agua para asegurar una mezcla lenta mediante agitadores externos. El tipo de agitador mecánico más usado es el de paletas, ya sean de eje horizontal o vertical, las paletas imparten un movimiento rotatorio al agua, así como una turbulencia interna. Como el grado de mezcla óptimo es variable según la calidad del agua, se recomienda que el equipo sea también de velocidad variable. Tanto en floculadores hidráulicos como mecánicos se emplea a menudo la floculación gradual; es decir, que la mezcla se reduzca progresivamente, de tal manera que al final del periodo de floculación el esfuerzo cortante sobre el flóculo preformado sea mínimo y se facilite la formación de partículas más grandes, con mayor capacidad de sedimentación. En floculadores mecánicos se recomienda proveer por lo menos tres compartimentos sucesivos, separados por pantallas difusoras permeables, para minimizar el cortocircuito (Romero, 2006).



En los floculadores tipo Alabama o Cox (**Figura 1b**) el agua fluye de forma ascendente-descendente, por lo que es importante mantener la velocidad del agua constante, para que este comportamiento se lleve a cabo. La velocidad será constante mientras el caudal sea constante; por esta razón, estas unidades son muy vulnerables a las variaciones de caudal. Si el caudal de operación baja, el agua ya no realiza su recorrido ascendente y solamente pasará por el fondo de la unidad de una boquilla a la otra, lo que generará un cortocircuito en esta zona y un gran espacio muerto en toda la parte superior. El gradiente de velocidad se produce casi exclusivamente en los puntos de paso (niples, codos, boquillas, etcétera), los cuales están localizados en el fondo de la unidad y distribuidos alternadamente en uno y otro extremo; la profundidad total de la unidad debe ser de 3 a 3.5 metros (Richert y Canepa, 1992).

#### 2.4.2. Clarifloculadores

En un clarificador de contacto sólido, los productos químicos se introducen en la mezcla de reacción y zona primaria. Los reactivos se mezclan mediante la acción del remolino generado por el rotor impulsor y también mezclado con un lodo de retorno que se introduce debajo de la campana de la zona de clarificación. El propósito del lodo de retorno es proporcionar núcleos que son importantes para la iniciación de la reacción química. Posteriormente, la mezcla fluye hacia arriba a través del lecho de lodo donde se produce la mezcla y una reacción secundaria. Los productos de la reacción se desbordan en la zona de clarificación, donde el agua clarificada se separa debido a la sedimentación de los sólidos producidos en la reacción. El agua clarificada finalmente se desborda en la zona de descarga de efluentes. El lodo sedimentado se extrae a través de la tubería de descarga de lodos (Sincero y Sincero, 2003).

##### 2.4.2.1. Clarificador *ACCELERATOR*®

El clarificador *Accelerator*® proporciona la capacidad de alta velocidad en menos de la mitad del espacio requerido por la sedimentación convencional y que utiliza el principio de recirculación de la suspensión interna para acelerar las reacciones químicas y el crecimiento de partículas



densas (**Figura 2**). En este clarificador, las etapas de mezclado, reacción, el flujo de retorno y la remoción de lodos son llevadas a cabo en una sola unidad que requiere menos de la mitad del volumen que los sistemas multi-tanques convencionales. El principio clave detrás de la operación de *Accelerator*<sup>®</sup> es su rotor impulsor de bajo esfuerzo cortante, el cual controla el mezclado y la recirculación de lodos a ritmos independientes para manejar cambios bruscos en la calidad del agua. El *Accelerator*<sup>®</sup> emplea separación dinámica de la suspensión de agua clarificada que permite el aumento de las tasas de carga frente a las tecnologías de la competencia. El proceso inicia con la entrada de agua bruta a través de las tuberías en el mezclado primario y zona de reacción, donde se mezcla con la suspensión previamente formada con un tratamiento con productos químicos. A continuación, se describe el proceso por etapas (Infilco, 2009):

- *Etapas 1:* El rotor impulsor proporciona un mezclado con velocidades controladas del agua cruda y los productos químicos en presencia de un gran volumen de suspensión en la mezcla de reacción y zona primaria. La combinación del flujo de la suspensión y la mezcla que regresa del rotor impide colocar los sólidos en el suelo del equipo. La precipitación tiene lugar con la presencia de precipitados previamente formados, resultado del crecimiento de una partícula densa. El ajuste en la circulación de manera independiente del rotor impulsor entre dos y cuatro veces el caudal de diseño en la mezcla primaria y la zona de reacción a la zona de mezcla secundaria donde hacen contacto la suspensión y esto permite las reacciones del tratamiento y para alcanzar el equilibrio.
- *Etapas 2:* La recirculación interna, cuando la suspensión sale de la mezcla secundaria y zona de reacción, se descarga hacia abajo entre el interior y exterior de tubos en movimientos controlados, hacia el exterior a lo largo del capó inclinado y sobre la superficie de la piscina en suspensión, donde el agua tratada es desplazada hacia arriba y se recoge en arquetas. La suspensión se extrae hacia abajo y hacia atrás bajo la estructura de campana de la mezcla primaria y zona de reacción por la succión producida por el impulsor.



- *Etapa 3:* La separación dinámica, la recirculación de la suspensión es independiente de la tasa del flujo. Esta característica única permite cambios rápidos en la velocidad de flujo para ser manejado. La operación del *Accelerator*<sup>®</sup> se caracteriza por el flujo dirigido y la separación dinámica del agua tratada a partir de una masa de lodo con bajo movimiento.
- *Etapa 4:* Los concentradores de lodos internos proporcionan un mejor funcionamiento, la concentración de sólidos en la suspensión de recirculación se mantiene en un valor óptimo para cada proceso del tratamiento. Mientras el volumen del lodo de recirculación aumenta, el exceso se acumula en los concentradores de lodos. El lodo en los concentradores se espesa y vacía periódicamente. Una válvula de purga de lodos se proporciona para cada concentrador y opera en un ciclo controlado de tiempo. La frecuencia de purga de lodos depende de la cantidad de lodo producido y puede ajustarse fácilmente para adaptarse a cambios en las condiciones de operación.

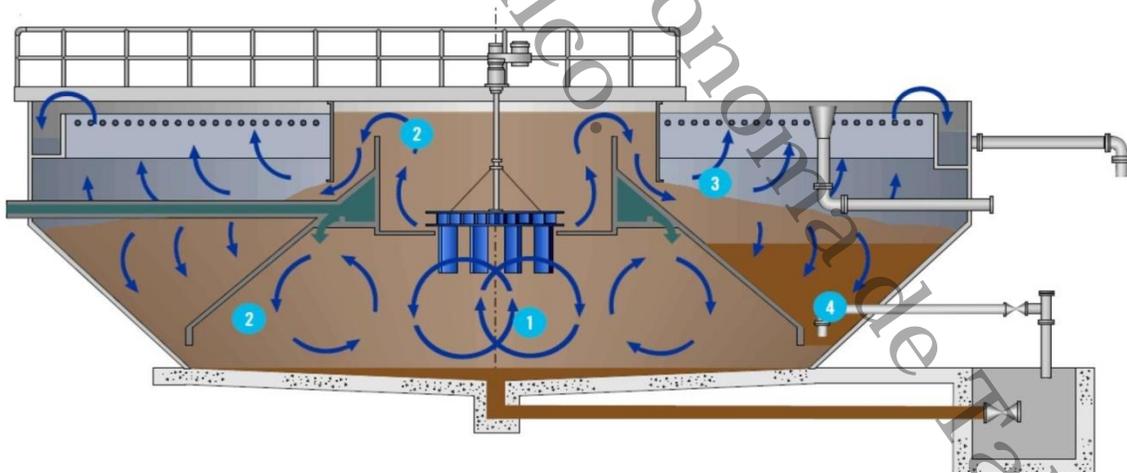


Figura 2. Clarificador Accelerator<sup>®</sup> (tomado de Infilco, 2009).

## 2.5. La dinámica de fluidos por computadora

La dinámica de fluidos por computadora (mejor conocido como CFD, del inglés *Computational Fluid Dynamics*) es el análisis numérico de la dinámica de fluidos de un sistema con la



consideración adicional de los fenómenos de transferencia de masa y de energía asociados a éste, así como el acoplamiento de otros submodelos tales como la cinética química en el caso de sistemas reactivos, así como la representación de sistemas multifásicos. El análisis CFD posee una popularidad creciente debido a que los códigos de solución numérica ya están disponibles a un costo razonable que, por lo general, incluye algún tipo de soporte al usuario, tanto en el uso general del código, como en la aplicación del código a las necesidades específicas del usuario.

Otro cambio es que los códigos CFD modernos poseen interfaces de configuración y visualización mucho más amigables. En la actualidad, las interfaces gráficas de usuario son mucho más potentes y se pueden utilizar para configurar rápidamente el flujo en geometrías muy complejas e irregulares. Los resultados del modelado se pueden ver rápida y fácilmente. Otro factor importante en la adopción de CFD es la mejora en el número de submodelos que están disponibles para el usuario. Ahora es posible seleccionar entre modelos predefinidos de acuerdo a si el fluido es compresible o incompresible, no viscoso o viscoso, laminar o turbulento, de alta o baja presión, reactivos o no reactivos, homogéneos o heterogéneos, entre otros. Otro factor importante que ha acelerado el uso de CFD es que sus predicciones han sido validadas exitosamente con información experimental. En aquellos casos en que la correlación entre las predicciones y los datos experimentales fue deficiente, se han realizado cambios en el código para mejorar sus puntos débiles.

Como con la mayoría de las herramientas numéricas, el aumento de adopción de nuevos submodelos ha llevado a una mayor aceptación de los modelos CFD por parte de la comunidad de ingeniería. Este crecimiento de la popularidad se espera que siga aumentando a medida que un mayor número de profesionistas estén capacitados en su uso (Baukal *et al.*, 2000).

En referencia a la aplicación de análisis CFD en sistemas de tratamiento de agua, Colic *et al.* (2005) consideran que el análisis CFD es una de las técnicas de diseño avanzado aplicable a



unidades de mezclado, floculación y flotación de sistemas de tratamiento de agua. Por su parte, Bridgeman *et al.* (2010) propuso una serie de estrategias para el modelado y simulación de flujos turbulentos en tanques de floculación a escala de laboratorio y escala industrial, enfatizando en los beneficios que se pueden obtener en el empleo de CFD para el diseño, reconfiguración y optimización de las condiciones de operación en floculadores.

## 2.6. Ecuaciones de Continuidad y Momentum

En esta investigación se emplea ANSYS Fluent, el software más usado para estudios de dinámica de fluidos computacional disponible (CFD). Fluent incluye capacidades de modelado físico validadas para ofrecer resultados rápidos y precisos en la más amplia gama de aplicaciones CFD y multifísicas, incluyendo los modelos especiales con capacidad para modelar la combustión en cilindros, aeroacústica, turbomáquinas y sistemas multifásicos. A través de una aproximación de volumen finito, Fluent permite construir una geometría de un sistema o proceso en dos o tres dimensiones para después generar una malla numérica que puede adaptarse y optimizarse. Posteriormente, Fluent posee una serie de modelos matemáticos que el usuario seleccionará en función de las necesidades y condiciones del sistema en estudio (i. e. sistema compresible, incompresible, a baja velocidad, a alta velocidad, laminar, turbulento, entre otros), seleccionar materiales involucrados en el sistema, definir condiciones de frontera y especificar parámetros de control con el fin de obtener la solución. Entonces, Fluent resuelve las ecuaciones de conservación y finalmente muestra los resultados en forma de reportes, diagramas y figuras (i. e. de contorno, vectores, u otros) para su análisis posterior (ANSYS-Fluent, 2013a).

En ANSYS-Fluent para todos los flujos se resuelven ecuaciones de conservación de la masa y el momentum. En el caso de los flujos relacionados con la transferencia de calor o de compresión se considera a la ecuación de conservación de la energía como una ecuación adicional. Para los flujos donde se realiza mezclado y reacción química se considera satisfacer la ecuación de conservación de las especies, a su vez si se utiliza un modelo de combustión no mezclado



previamente, para ello se consideran las ecuaciones de conservación de la fracción de mezcla y su varianza, en el caso de los flujos turbulentos se solucionan ecuaciones de transporte (ANSYS-Fluent, 2013a). Se presentan a continuación las ecuaciones que se consideran para el sistema y la descripción de cada una de ellas:

### 2.6.1. Ecuación de Conservación de Masa

La ecuación de conservación de la masa o ecuación de continuidad, se describe de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (1)$$

Es la forma general de la ecuación de conservación de la masa y es aplicable tanto para flujos incompresibles como compresibles, donde  $S_m$  es la masa añadida a la fase continua de la segunda fase dispersa (por ejemplo, debido a la vaporización de las gotas de un líquido) este es definido por el usuario (ANSYS-Fluent, 2013a).

### 2.6.2. Ecuación de Conservación del Momentum

La conservación del Momentum en un sistema sin movimiento está descrita de la siguiente forma:

$$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2)$$

Donde  $p$  es la presión estática,  $\bar{\tau}$  es el tensor de esfuerzos, y  $\rho \vec{g}$  son fuerza gravitacional del cuerpo y las fuerzas externas del cuerpo (por ejemplo, que surgen de la interacción con la fase dispersa), respectivamente. También contiene otros términos  $\vec{F}$  que depende del modelo, tales como la porosidad media y parámetros definidos por el usuario.

### 2.6.3. Ecuaciones de Conservación en su Forma General



### Transferencia de masa

La ecuación de continuidad para la fase  $q$  es

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q \quad (3)$$

Donde  $\vec{v}_q$  es la velocidad de la fase  $q$  y  $\dot{m}_{pq}$  caracteriza la transferencia de masa desde la fase  $p^{th}$  a la fase  $q^{th}$ , y  $\dot{m}_{qp}$  caracteriza la transferencia de masa desde la fase  $q$  a la fase  $p$ , y son disponibles para especificar estos mecanismos por separado. De forma predeterminada, el término  $S_q$  es cero, pero también puede ser especificado en ANSYS-Fluent como un valor constante o usando funciones definidas por el usuario para cada fase. Un término similar aparece en la ecuación de *momentum*.

### Transferencia de momentum

El balance de *momentum* para la fase  $q$  es

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{lft,q} + \vec{F}_{vm,q}) \quad (4)$$

Donde  $\bar{\tau}_q$  es el  $q$ -ésimo tensor esfuerzo-deformación de la fase:

$$\tau_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \vec{v}_q + \nabla \vec{v}_q^T) + \alpha_q (\lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q) \nabla \cdot \vec{v}_q I \quad (5)$$

Donde  $\mu_q$  y  $\lambda_q$  son la viscosidad y la fuerza cortante global de la fase  $q$ ,  $F_q$  es un esfuerzo de cuerpo externo,  $\vec{F}_{lft,q}$  es una fuerza de arrastre,  $\vec{F}_{vm,q}$  es un esfuerzo de cuerpo virtual,  $\vec{R}_{p,q}$  es una interacción de fuerzas entre fases, y  $p$  es la presión compartida por todas las fases. Además,  $\vec{v}_{p,q}$  es la velocidad en la interfase, como a continuación se define: i) Si  $\dot{m}_{q,p} > 0$  (por ejemplo, la masa de la fase  $p$  es inicialmente transferida a la fase  $q$ ),  $\vec{v}_{p,q} = \vec{v}_p$ ; ii) si  $\dot{m}_{q,p} < 0$  (por ejemplo, la masa de la fase  $q$  es inicialmente transferida a la fase  $p$ ),  $\vec{v}_{p,q} = \vec{v}_q$  y iii) si  $\dot{m}_{q,p} > 0$  entonces  $\vec{v}_{p,q} = \vec{v}_p$ . La Ec. (4)



debe cerrarse con expresiones apropiadas para la fuerza en la interfase  $\vec{R}_{pq}$ . Esta fuerza depende de la fricción, presión, cohesión y de otros efectos, y está sujeta a las condiciones de  $\vec{R}_{pq} = -\vec{R}_{qp}$  y  $\vec{R}_{qq} = 0$ . ANSYS-Fluent utiliza un término simple de interacción entre fases de la siguiente forma:

$$\sum_{p=1}^n \vec{R}_{pq} = - \sum_{p=1}^n K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) \quad (6)$$

### Transferencia de energía

Para describir la conservación de energía en aplicaciones multifásicas en modelos eulerianos, una ecuación de entalpía puede ser escrita para cada fase:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q h_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q h_q) = -\alpha_q \frac{\partial p_q}{\partial t} + \bar{\tau}_q \cdot \nabla \vec{v}_q - \nabla \cdot \vec{q}_q + S_q + \sum_{p=1}^n (Q_{pq} + \dot{m}_{pq} h_{pq} - \dot{m}_{pq} h_{qp}) \quad (7)$$

donde  $h_q$  es la entalpía específica de la fase  $q^{th}$ ,  $\vec{q}_q$  es el flujo de calor,  $S_q$  es el término fuente que incluye fuentes de entalpía (por ejemplo, debido a la reacción química o radiación),  $Q_{pq}$  es la intensidad del intercambio de calor entre las fases  $p$ -ésima y  $q$ -ésima, y  $h_{pq}$  es la entalpía en la interfase (por ejemplo, la entalpía del vapor a la temperatura de las gotas, en el caso de evaporación). El intercambio de calor entre las fases debe cumplir con las condiciones del balance local  $Q_{pq} = -Q_{qp}$  y  $Q_{qq} = 0$ .

## 2.7. Modelos de turbulencia

Los flujos turbulentos son caracterizados por la fluctuación de los campos de velocidad. Estas fluctuaciones mezclan cantidades transportadas, tales como movimiento, energía y concentración de especies, ocasionando que las cantidades transportadas fluctúen también. Dado que estas fluctuaciones pueden ser de pequeña escala y de alta frecuencia, son demasiado costosas



computacionalmente para simular directamente en cálculos prácticos de ingeniería. Por el contrario, las ecuaciones instantáneas (exactas) que gobiernan pueden ser promediadas con respecto al tiempo, o manipuladas de alguna otra forma para eliminar las pequeñas escalas, dando lugar a un conjunto modificado de ecuaciones que son computacionalmente menos costosas de resolver. Sin embargo, las ecuaciones modificadas contienen otras variables desconocidas, y es por ello que los modelos de turbulencia son necesarios para determinar estas variables en términos de cantidades conocidas (ANSYS-Fluent, 2013a).

Para describir los efectos de las fluctuaciones turbulentas de velocidades y cantidades escalares en una sola fase, ANSYS-Fluent utiliza varios tipos de modelos de cierre para considerar las fluctuaciones turbulentas. En comparación con los flujos monofásicos, el número de términos que se modela en las ecuaciones de Momentum en los flujos multifase es grande, y esto hace que el modelado de la turbulencia en las simulaciones de múltiples fases sea muy complejo. ANSYS-Fluent proporciona tres métodos para modelar la turbulencia en los flujos multifásicos del tipo  $k-\varepsilon$  y  $k-\omega$ . Además, proporciona dos opciones de modelos de tipo estrés de Reynolds (RSM). En suma, las opciones de modelos de turbulencias son *i*) Modelo de mezcla de turbulencia, *ii*) Modelo de turbulencia dispersa, *iii*) Modelo de turbulencia para cada fase.

### 2.7.1. El Modelo $k-\varepsilon$

El modelo  $k-\varepsilon$  se ha caracterizado por su robustez, economía y una precisión razonable para un amplio intervalo de flujos turbulentos y esto explica su popularidad en las simulaciones de flujo industrial y transferencia de calor. En el caso de modelos viscosos ANSYS-Fluent ofrece tres modelos de tipo  $k-\varepsilon$ : el modelo estándar, el modelo basado en la teoría de renormalización de grupos (RNG) y el modelo *realizable*. Los tres modelos tienen formas similares y sus ecuaciones de transporte se basan en el cálculo de los parámetros  $k$  y  $\varepsilon$ . Las diferencias entre los modelos son: *i*) el método para calcular la viscosidad turbulenta, *ii*) los números de Prandtl turbulentos



que rigen la difusión turbulenta de  $k$  y  $\varepsilon$ , y *iii*) los términos de generación y destrucción en la ecuación de  $\varepsilon$ .

### 2.7.2. El Modelo $k-\varepsilon$ estándar

Los “modelos completos” más simples de turbulencia son modelos de dos ecuaciones constituidos por dos ecuaciones de transporte que permiten determinar la velocidad turbulenta y la longitud de escala de forma independiente. El modelo estándar  $k-\varepsilon$  estándar es uno de los más aplicados en cálculos de flujo de problemas prácticos de ingeniería desde que fue propuesto por Launder y Spalding. Este modelo semi-empírico considera los cambios en la energía cinética turbulenta ( $k$ ) así como la tasa de disipación ( $\varepsilon$ ). Debido a su amplia aceptación, el modelo  $k-\varepsilon$  estándar ha sido validado en múltiples aplicaciones y escenarios, por lo que sus ventajas y desventajas han permitido mejorar su desempeño empleando variantes del mismo modelo, tales como el modelo RNG y el modelo *realizable*. El modelo de la ecuación de transporte para  $k$  es derivada de una ecuación exacta, mientras que la ecuación de transporte para  $\varepsilon$  fue obtenida usando razonamientos físicos y sostiene un pequeño parecido a su ecuación matemática original.

En la derivación del modelo  $k-\varepsilon$  se supone que el flujo es completamente turbulento, y los efectos de la viscosidad molecular son despreciables. El modelo estándar es sin embargo válido sólo para flujos completamente turbulentos. La energía cinética turbulenta  $k$  y la tasa de disipación  $\varepsilon$  son obtenidas a partir de la siguiente ecuación de transporte:

$$\frac{\partial t}{\partial}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (8)$$

$$\frac{\partial t}{\partial}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (9)$$



En estas ecuaciones,  $G_k$  representa la generación de la energía cinética turbulenta debido al principal gradiente de velocidad, como se describe a continuación:

$$G_k = -\rho v'_i v'_j \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (10)$$

Para evaluar  $G_k$  de forma similar a la hipótesis de Boussinesq:

$$G_k = \mu_t S^2 \quad (11)$$

donde  $S$  es el tensor de la velocidad de deformación, definida como:

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (12)$$

En estas ecuaciones,  $G_k$  representa la generación de la energía cinética turbulenta debido a los principales gradientes de velocidad,  $G_b$  es la generación de la energía cinética turbulenta debido a la flotabilidad,  $Y_M$  representa la contribución de la dilatación fluctuante en una turbulencia de flujo compresible a la capacidad de disipación general,  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$  y  $C_{3\varepsilon}$  son constantes,  $\sigma_k$  y  $\sigma_\varepsilon$  son los números de Prandtl turbulentos para  $k$  y  $\varepsilon$  respectivamente.  $S_k$  y  $S_\varepsilon$  son términos definidos por el usuario. En floculación el gradiente de velocidad es un parámetro que se utiliza para caracterizar el mezclado de una amplia gama de aplicaciones de la ingeniería (Crittenden *et al.*, 2005).

### 2.7.3. El Modelo $k-\varepsilon$ RNG

El modelo  $k-\varepsilon$  RNG fue derivado usando una técnica estadística llamada teoría de renormalización de grupos. Es similar en forma al modelo estándar, pero incluye los siguientes refinamientos:

- Mejora la precisión de los flujos de tensión rápida con un término adicional.
- Aumenta la precisión de los flujos de remolino.
- Proporciona una fórmula analítica para los números turbulentos de Prandtl, mientras que el modelo estándar utiliza valores constantes especificados por el usuario.



- Mientras que el modelo estándar es un modelo de número de Reynolds altos, el modelo RNG proporciona una fórmula diferencial derivada analíticamente para la viscosidad efectiva que explica los efectos de los números de Reynolds bajos. Sin embargo, el uso efectivo de esta característica depende de un tratamiento apropiado de la región cercana a la pared.

Estas características hacen que el modelo RNG sea más preciso y fiable para una clase más amplia de flujos que el modelo estándar. La derivación analítica del modelo RNG da como resultado un modelo con constantes diferentes de las del modelo estándar, y términos y funciones adicionales en las ecuaciones transporte. El Modelo RNG tiene una forma similar al modelo estándar, como se describe a continuación:

$$\frac{\partial t}{\partial}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( a_k \mu_{eff} + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (13)$$

y

$$\frac{\partial t}{\partial}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \epsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( a_\epsilon \mu_{eff} + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k} + S_\epsilon \quad (14)$$

En estas ecuaciones,  $G_k$  representa la generación de energía cinética de turbulencia debido a los valores de gradientes de velocidad,  $G_b$  representa la generación de energía cinética turbulenta debido a la flotabilidad,  $Y_m$  representa la contribución de la dilatación fluctuante en la turbulencia compresible a la tasa de disipación global, las cantidades  $a_k$  y  $a_\epsilon$  son los números de Prandtl efectivos inversos para  $k$  y  $\epsilon$ , respectivamente, y  $S_k$  y  $S_\epsilon$  son términos de origen que pueden ser definidos por el usuario o predeterminados por Fluent.

#### 2.7.4. Sistemas con flujo turbulento

La mayoría de los flujos estudiados en la ingeniería son turbulentos. Los flujos turbulentos son caracterizados por las siguientes propiedades:



- Son altamente inestables, existen cambios abruptos en la velocidad y se caracteriza por la formación de remolinos.
- Las propiedades del flujo cambian en las tres direcciones espaciales.
- La vorticidad (capacidad para formar remolinos) se incrementa notablemente.
- La tasa de turbulencia se incrementa, pero conserva su masa.
- La mezcla real está dominada por la dispersión.
- Existe reducción del gradiente de velocidad debido a la reducción de la energía cinética del flujo; *i. e.* la mezcla es un proceso disipativo.
- Los flujos turbulentos fluctúan sobre un amplio rango de longitud y tiempos de escala.

En un principio, la aproximación primaria para estudiar los flujos turbulentos fue de tipo experimental. Los parámetros generales tales como el tiempo promedio de arrastre o de transferencia de calor son relativamente fáciles de medir; sin embargo, las exigencias en la ingeniería aumentan, los niveles de detalle y precisión que se requiere también aumentan, así como el costo y la dificultad de realizar mediciones experimentales. Para optimizar un diseño, la experimentación es usualmente necesaria para entender la fuente de los efectos indeseables; esto requiere mediciones costosas y una mayor inversión de tiempo. Algunos tipos de mediciones, como por ejemplo la fluctuación de la presión dentro de un flujo, es casi imposible de llevarlas a cabo en la práctica. Otras mediciones no se pueden realizar con la precisión requerida. Como resultado, los métodos numéricos tienen un papel importante en la estimación de estos parámetros no medibles (ANSYS-Fluent, 2013a).

## 2.8. Clasificación de métodos numéricos en CFD

Es de utilidad tener en cuenta un sistema de clasificación de los enfoques para la predicción de flujos turbulentos en simulaciones CFD.

- El primer enfoque involucra el uso de *correlaciones* tales como los que ofrece el factor de fricción en función del número de Reynolds o del número de Nusselt de transferencia de



masa como una función de los números de Reynolds y Prandtl. Este método, que es usualmente enseñado en cursos introductorios, es muy útil pero su uso está limitado a tipos de flujos simples, los que pueden ser caracterizados por unos cuantos parámetros.

- El segundo enfoque usa *ecuaciones integrales* que pueden ser derivadas desde las ecuaciones de movimiento por integración sobre una o más coordenadas. Usualmente esto reduce el problema a una o más ecuaciones diferenciales ordinarias que son fáciles de resolver.
- El tercer enfoque está basado sobre *ecuaciones obtenidas por promedios* de ecuaciones de movimiento sobre el tiempo (si el flujo es estadísticamente estable), sobre una coordenada en el que el flujo no varía, o sobre un conjunto de corrientes (una serie imaginaria de flujos en el que todos los factores controlables se mantienen fijos). Esta aproximación es llamada cierre de un punto (*one-point closure*) y conduce a una serie de ecuaciones diferenciales parciales llamadas Ecuaciones de Navier-Stokes de Reynolds Promediado (RANS). Estas ecuaciones no forman una serie cerrada por lo que se requiere de la introducción de aproximaciones a la turbulencia (modelos de turbulencia).
- El cuarto tipo de enfoque es llamado *cierre de dos puntos*. Utiliza ecuaciones para la correlación de los componentes de velocidad en dos puntos espaciales o más frecuentemente, la transformada de Fourier de estas ecuaciones. Estos métodos son raramente usados excepto para turbulencia homogénea.
- El quinto enfoque es la *simulación de grandes escalas turbulentas* (o también conocido como simulación de grandes remolinos del inglés LES, *Large Eddy Simulation*) y resuelve las regiones en donde ocurren las mayores escalas de movimiento mientras que, por otra parte, sólo aproximan los movimientos de flujo de escala pequeña. Este método puede considerarse como un compromiso entre métodos de cierre de un punto y la simulación numérica directa.



- La simulación numérica directa del inglés DNS (*Direct Numerical Simulation*) en el cual las ecuaciones de Navier-Stokes (ecuaciones de *momentum*) son resueltas formalmente para todos los movimientos en el flujo turbulento.

De acuerdo con la tendencia en el modelado CFD, los progresos en la potencia de cómputo, en la medición precisa de parámetros físicos y en la comprensión de la dinámica de fluidos de problemas específicos permitirá disminuir e incluso evitar el uso de modelos de turbulencia o aproximaciones a la solución de las ecuaciones de conservación. Por ello, se espera que la simulación numérica directa sea el método más empleado en las décadas siguientes (ANSYS-Fluent, 2013a).

## 2.9. Flujos multifase

Actualmente existen dos métodos para el cálculo numérico de flujos multifase (sistemas multifase continua-discreta; *v. gr.* Sistema gas-sólido): el Euleriano-Lagrangiano y el Euleriano-Euleriano. Ambos métodos son nombrados dependiendo del tipo de sistema de coordenadas. En el método Euleriano-Lagrangiano, la fase diluida es tomada como un continuo por la solución de las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas con el tiempo, mientras que la fase dispersa es resuelta siguiendo un gran número de partículas, burbujas o gotas, a través del campo de flujo calculado. En este modelo se supone que la segunda fase dispersa ocupa una pequeña fracción de volumen. La trayectoria de las partículas o gotas están calculadas individualmente a intervalos específicos durante el cálculo de la fase diluida. Esto hace que el modelo sea apropiado para modelar secadores de rocío, combustión de gasolina y carbón y otros fluidos con partículas en flotación, pero inapropiado para modelar mezclas líquido-líquido, lechos fluidizados o cualquier otra aplicación donde la fracción volumen de la segunda fase no pueda ser despreciada.

En el método Euleriano-Euleriano, las diferentes fases son tratadas matemáticamente como un continuo interpenetrado. Debido a que el volumen de una fase no puede ser ocupado por otra, se



introduce el concepto de fracción volumétrica de la fase; estas fracciones volumétricas son consideradas como funciones continuas en el espacio y se derivan para obtener un conjunto de ecuaciones, el cual tiene una estructura similar para todas las fases.

### 2.9.1. El Modelo VOF

El modelo VOF (del inglés *Volume of Fluid*) es una técnica de rastreo de superficie aplicado a arreglos de mallas eulerianas. El modelo fue diseñado para dos o más fluidos inmiscibles donde los fenómenos en la interfase son significativos. Este modelo se basa en el hecho de que dos o más fluidos no son interpenetrables y cada fase que se agregue genera una variable adicional la cual es su fracción volumétrica de la fase en la celda en que se calcula. Los campos para todas las variables y propiedades son compartidos por las fases y los valores representativos de los volúmenes son promediados, siempre y cuando la fracción volumétrica de cada fase sea conocida en cada locación.

La ventaja principal del modelo VOF es que se pueden describir sistemas en los que la tensión superficial y la adhesión a las paredes de los fluidos tengan gran importancia, ya que incluye modelos especiales para ello. Algunas de las aplicaciones del modelo VOF son los flujos estratificados, flujos de superficie libre, llenado, movimiento de burbujas largas en un líquido, movimiento de un líquido después de la ruptura de una presa, predicción del esparcimiento de un chorro y la trayectoria estática o transitoria de cualquier interfase líquido-gas.

### 2.9.2. El Modelo de Mezcla

El modelo de mezcla está diseñado para dos o más fases (fluidas o partículas) las cuales son tratadas como fluidos interpenetrables. Este modelo, al igual que el VOF, usa el tratamiento de un fluido simple; sin embargo, posee dos diferencias:



- El modelo de mezcla permite la penetración de las fases. Las fracciones volumétricas para un volumen de control pueden ser igual a cualquier valor entre 0 y 1, dependiendo del espacio ocupado por cada fase.
- El modelo de mezcla permite que las fases se muevan a diferentes velocidades, usando el concepto de deslizamiento de fases.

Este modelo resuelve las ecuaciones de continuidad, *momentum*, y energía para la mezcla, y la ecuación de fracción volumétrica para las fases secundarias, así como las expresiones algebraicas para las velocidades relativas.

### 2.9.3. El Modelo Euleriano

El modelo euleriano es el más complejo de los modelos multifase disponibles en ANSYS-Fluent. En este modelo se resuelven una serie de  $n$  ecuaciones de continuidad, calor y *momentum* para cada fase individual. La derivación de estas ecuaciones puede realizarse promediando el conjunto de los balances instantáneos locales para cada fase o usando el tratamiento de teoría de mezclas. Para flujos multifase, ANSYS-Fluent puede incluir efectos de las fuerzas en las partículas de la fase secundaria, estas fuerzas actúan en una partícula principalmente debido a los gradientes de velocidad en el campo de flujo de la fase primaria. La fuerza de empuje es más significativa para partículas grandes, sin embargo, el modelo implementado en ANSYS-Fluent considera que el diámetro de la partícula es mucho más pequeño que el espacio entre una y otra partícula, por lo tanto, no es apropiado incluir las fuerzas de empuje en sistemas donde las partículas se encuentren muy empaçadas o sean muy pequeñas. Las aplicaciones del modelo multifase euleriano incluyen columnas burbujeantes, partículas en suspensión y lechos fluidizados.

El modelo multifásico euleriano en ANSYS-Fluent permite el modelado de múltiples fases separadas, pero interactuando. Las fases pueden ser líquidos, gases o sólidos en cualquier combinación. Para cada fase se utiliza un tratamiento euleriano, en contraste con el tratamiento



euleriano-lagrangiano se utiliza para el modelo de fase discreta. Con el modelo multifásico euleriano, el número de fases secundarias está limitado únicamente por los requisitos en la memoria del equipo y el comportamiento de convergencia. Se puede modelar cualquier número de fases secundarias, dependiendo de la memoria disponible. Sin embargo, para flujos multifase complejos, se puede encontrar que su solución está limitada por el comportamiento de convergencia (ANSYS-Fluent, 2013a).

## 2.10. Modelo de balance de población

Cuando se modela una población de individuos, se pueden elegir dos enfoques diferentes:

- Enfoque continuo: la población se considera como una entidad de agrupamientos (aglomerados). Todas las propiedades de la población son distribuidas de forma homogénea, o un valor medio de una distribución heterogénea. En ambos casos las propiedades están representadas por un número. Por ejemplo, una población de partículas tendría una velocidad promedio de sedimentación, independiente del tamaño de partícula o densidad.
- Enfoque segregado: la población se considera como una población de objetos individuales. Todas las propiedades de la población son distribuciones. En este caso la población antes mencionada de las partículas tendría una distribución de velocidades de asentamiento en función del tamaño o densidad.

El enfoque continuo es más factible en el uso, sin embargo, conduce a una pérdida de realidad. En algunos casos, el enfoque continuo puede derivarse de la aproximación segregada realizando algunas suposiciones. Por lo tanto, el enfoque segregado conduce a una mejor comprensión de las limitaciones del enfoque continuo, cabe mencionar que el modelo de proceso continuo se ha utilizado ampliamente debido a la falta de técnicas de medición para recopilar los datos necesarios para alimentar a los modelos segregados (Nopens, 2005).



En ANSYS-Fluent el modelo de balance de población se proporciona como un complemento en el módulo del software con la licencia estándar. Diversas aplicaciones de flujo de fluido en la industria implican una fase secundaria con una distribución de tamaño de partícula. La distribución del tamaño de partícula, incluyendo partículas sólidas, burbujas o gotas, puede evolucionar en conjunto con el transporte y la reacción química en un sistema multifase (ANSYS-Fluent, 2013b).

Los procesos evolutivos pueden ser una combinación de diferentes fenómenos como la nucleación, crecimiento, dispersión, disolución, agregación y la producción a través de la ruptura. Así, en flujos multifásicos que implican una distribución de tamaño, se requiere de una ecuación de equilibrio para describir los cambios en la población de partículas, además de los balances de impulso, masa y energía. Este equilibrio se denomina generalmente como el balance de la población. Como ejemplos donde podría aplicarse un balance de población se tiene a la cristalización, las reacciones de precipitación de una fase gaseosa o líquida, columnas de burbujas, burbujeo de gas, aerosoles, polimerización en lecho fluidizado, granulación, emulsión líquido-líquido y los flujos de aerosoles.

Para hacer uso de este tipo de modelado, se introduce la función de densidad de probabilidad para tener en cuenta la población de la partícula. Con la ayuda de las propiedades de la partícula (p. ej. tamaño de partícula, porosidad, composición), se pueden distinguir diferentes poblaciones de partículas y su comportamiento puede ser descrito (ANSYS-Fluent, 2013). En ANSYS-Fluent se ofrecen tres métodos de solución a la ecuación de equilibrio de la población: método de equilibrio de población discretizada, método estándar de momentos, y el método de cuadratura de momentos.

### 2.10.1. El vector de estado de la partícula

El vector de estado de la partícula se caracteriza por un conjunto de “coordenadas externas” ( $\vec{x}$ ), que detonan la posición espacial de la partícula, y “coordenadas internas” ( $\phi$ ), que podrían incluir



tamaño de partícula, composición y temperatura. A partir de estas coordenadas, se puede postular una función de densidad numérica  $n(\vec{x}, \phi, t)$  donde  $\phi \in \Omega_\phi, \vec{x} \in \Omega_{\vec{x}}$ . Por lo tanto, el número medio de partículas en el volumen infinitesimal  $dV_{\vec{x}}dV_\phi$  es  $n(\vec{x}, \phi, t)dV_{\vec{x}}dV_\phi$ . En contraste, el vector de estado de fase continua está dado por  $\vec{Y} \equiv [Y_1(\vec{x}, t), Y_2(\vec{x}, t), \dots, Y_C(\vec{x}, t)]$ . El número total de partículas en todo el sistema es entonces:

$$\int_{\Omega_\phi} \int_{\Omega_{\vec{x}}} n dV_{\vec{x}}dV_\phi \quad (15)$$

La densidad de número promedio local en el espacio físico (es decir, el número total de partículas por unidad de volumen) está dada por:

$$N(\vec{x}, t) = \int_{\Omega_\phi} n dV_\phi \quad (16)$$

La fracción de volumen total de todas las partículas está dada por:

$$a(\vec{x}, t) = \int_{\Omega_\phi} n V(\phi) dV_\phi \quad (17)$$

donde  $V(\phi)$  es el volumen de una partícula en estado  $\phi$ .

### 2.10.2. La Ecuación de Balance de Población

Suponiendo que  $\phi$  es el volumen de partículas, la ecuación de transporte para la función de densidad numérica se da como:



$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [n(V, t)] + \nabla \cdot [\bar{u}n(V, t)] + \nabla_V \cdot [G_V n(V, t)] \\ = \frac{1}{2} \int_0^V a(V - V', V') n(V - V', t) n(V', t) dV' \\ - \int_0^\infty a(V, V') n(V, t) n(V', t) dV' \\ + \int_{\Omega_v} pg(V') \beta(V|V') n(V', t) dV' - g(V) n(V, t) \end{aligned} \quad (18)$$

El límite y las condiciones iniciales están dados por

$$n(V, t = 0) = n_v; n(V = 0, t) G_n = \dot{n}_0 \quad (19)$$

donde  $\dot{n}_0$  es la tasa de nucleación de partículas  $m^3 s^{-1}$  (ANSYS-Fluent, 2013b).

### 2.10.3. Agregación

El núcleo de agregación (*aggregation kernel*) (Luo and Svendsen, 1996, tomado de Ansys-Fluent, 2003b) se expresa como  $a(V, V')$  tiene unidades de  $m^3 s^{-1}$  y se define por lo regular como un producto de dos cantidades (Fluent, 2013): *i*) La frecuencia de colisiones entre partículas de volumen  $V$  y partículas de volumen  $V'$ , y *ii*) La “eficiencia de agregación”; es decir, la probabilidad de las partículas de volumen  $V$  coalesciendo con las partículas de volumen  $V'$ .

La tasa de natalidad de las partículas de volumen  $V$  debido a la agregación está dada por:

$$B_{ag} = \frac{1}{2} \int_0^V a(V - V', V') n(V - V') n(V') dV' \quad (20)$$

Donde partículas de volumen  $V - V'$  se agregan con partículas de volumen  $V'$  para formar partículas de volumen  $V$ . El factor  $\frac{1}{2}$  se incluye para evitar contabilizar cada evento de colisión dos veces.

La tasa de mortalidad de las partículas de volumen  $V$  debido a la agregación está dada por:



$$D_{ag} = \int_0^{\infty} a(V, V') n(V) n(V') dV' \quad (21)$$

Es importante tener en cuenta que los núcleos de ruptura y agregación dependen de la naturaleza de aplicación física. Por ejemplo, en la dispersión gas-líquido, los granos son funciones de la disipación turbulenta en fase líquida local (ANSYS-Fluent, 2013b).

En ANSYS-Fluent las funciones de agregación disponibles son las siguientes:

- Valor constante, definido por el usuario
- Modelo de Luo
- Modelo molecular libre
- Modelo turbulento
- Modelo definido por el usuario

#### 2.10.4. Ruptura

La expresión de la tasa de ruptura (Luo and Svendsen, 1996), se expresa como  $g(V')\beta(V|V')$ , donde  $g(V')$  es la frecuencia de ruptura; es decir, la fracción de partícula de ruptura de volumen  $V'$  por unidad de tiempo ( $s^{-1}$ ), y  $\beta(V|V')$  es la función de densidad de probabilidad (PDF) de partículas que se rompen de volumen  $V'$  a una partícula de volumen  $V$ .

La tasa de natalidad de las partículas de volumen  $V$  debido a la ruptura es dada por:

$$B_{br} = \int_{\Omega_v} p g(V') \beta(V|V') n(V') dV' \quad (22)$$

donde  $g(V') n(V') dV'$  partículas de volumen  $V'$  se rompen por unidad de tiempo, produciendo  $p g(V') n(V') dV'$  partículas, de las cuales una fracción  $\beta(V|V') dV$  representa partículas de



volumen  $V$ .  $p$  es el número de partículas pequeñas producidas por una partícula mayor (por ejemplo, dos partículas para ruptura binaria) (Ansys-Fluent, 2013b).

La tasa de mortalidad de las partículas de volumen debido a la ruptura está dada por:

$$D_{br} = g(V)n(V) \quad (23)$$

La PDF  $\beta(V|V')$  también se conoce como la función de distribución de fragmentación de partículas, o la distribución “hija” de tamaño (*daughter size distribution*). Se han propuesto varias formas funcionales de la función de distribución de la fragmentación, aunque deben cumplirse las siguientes limitaciones físicas: el número normalizado de partículas de ruptura deben sumar la unidad, las masas de los fragmentos deben sumar la masa de la partícula original y el número de fragmentos formado tiene que estar correctamente representada (ANSYS-Fluent, 2013b).

Matemáticamente, estas restricciones pueden ser escritas como sigue:

- Para la condición de normalización:

$$\int_0^{V'} \beta(V|V') dV = 1 \quad (24)$$

- Para la conservación de la masa:

$$p \int_0^{V'} m(V)\beta(V|V') dV = m(V') \quad (25)$$

- Para la ruptura binaria,  $\beta$  es simétrico acerca  $V/V'=0.5$  de que es:

$$\beta(V' - V|V') = \beta(V|V') \quad (26)$$



En la siguiente lista de modelos disponibles en ANSYS-Fluent para calcular la frecuencia de ruptura:

- Valor constante, definido por el usuario
- Modelo de Luo
- Modelo de Lehr
- Modelo de Ghadiri
- Modelo de Laakkonen
- Modelo definido por el usuario.

Además, ANSYS-Fluent proporciona los siguientes modelos para calcular la PDF de la ruptura:

- PDF Parabólica
- PDF de Laakkonen
- PDF generalizada para múltiples fragmentos de ruptura
- Modelo definido por el usuario.

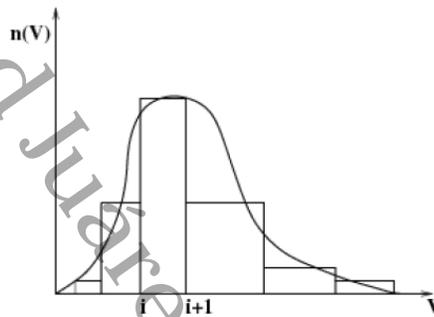
### 2.10.5. El método discreto

En este método, la población de partículas se discretiza en un número finito de intervalos de tamaño. Este enfoque tiene la ventaja de calcular la distribución de tamaño de partículas (PSD) directamente. Este enfoque también es particularmente útil cuando el rango de tamaños de partículas se conoce *a priori* y no abarca más de dos o tres órdenes de magnitud. En este caso, la población puede ser discretizada con un número relativamente pequeño de intervalos de tamaño y la distribución del tamaño que se acopla con la dinámica de fluidos se puede calcular. La desventaja del método discreto que es computacionalmente caro y se necesita de un gran número de intervalos.

El método discreto (también conocido como método de sección) fue desarrollado por Hounslow, Litster y Ramkrishna. Se basa en la representación de la distribución del tamaño de partícula



(PSD) en términos de un conjunto de clases de tamaños discretos o intervalos, como se ilustra en la **Figura 3**. Las ventajas de este método son su solución numérica robusta y que produce directamente la PSD. Las desventajas son que los intervalos deben ser definidos *a priori*, y que se pueden requerir un gran número de clases (ANSYS-Fluent, 2013b).



**Figura 3.** Distribución del tamaño de partículas mediante el método discreto

Los métodos de solución para el método discreto no homogéneo se basan en el método discreto y por lo tanto comparten muchos fundamentos. En ANSYS-Fluent, la Ecuación de Balance de Población está escrita en términos de fracción de volumen del tamaño de partícula  $i$ :

$$\frac{\partial(\rho_s a_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_s u_i a_i) + \frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{G_v \rho_s a_i}{V} \right) = \rho_s V_i (B_{ag,i} - D_{ag,i} + B_{br,i} - D_{br,i}) + 0^i \rho_s V_0 \dot{n}_0 \quad (27)$$

donde  $\rho_s$  es la densidad de la fase secundaria y  $a_i$  es la fracción de volumen de tamaño de partícula  $i$ , definida como:

$$a_i = N_i V_i \quad i = 0, 1, \dots, N - 1 \quad (28)$$

donde

$$N_i(t) = \int_{V_i}^{V_{i+1}} n(V, t) dV \quad (29)$$

$V_i$  es el volumen del tamaño de partícula  $i$ . En ANSYS-Fluent, una fracción de  $a$ , llamada  $f_i$ , se introduce como la variable de solución. Esta fracción se define como:

$$f_i = \frac{a_i}{a} \quad (30)$$



donde  $a$  es la fracción del volumen total de la fase secundaria. La velocidad de nucleación  $\dot{n}_0$  aparece en la ecuación discretizada para la fracción de volumen de tamaño más pequeño. La notación  $0^i$  significa que este es un término particular, en este caso  $\rho_s V_0 \dot{n}_0$ , aparece en la ecuación (27) solo en el caso del tamaño de partículas más pequeñas (ANSYS-Fluent, 2013b).

La tasa de crecimiento en que se discretiza se describe en la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial V} \left( \frac{G_V \rho_s a_i}{V} \right) = \rho_s V_i \left[ \left( \frac{G_{V,i-1} N_{i-1}}{V_i - V_{i-1}} \right) - \left( \frac{G_{V,i} N_i}{V_{i+1} - V_i} \right) \right] \quad (31)$$

El volumen de coordenadas es discretizado como  $V_{i+1}/V_i = 2^q$  donde  $q = 1, 2, \dots$  se conoce como el "factor de relación". Por su parte, las tasas de natalidad y mortalidad de las partículas se definen como sigue:

$$B_{ag,i} = \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N a_{kj} N_k N_j x_{kj} \xi_{kj} \quad (32)$$

$$D_{ag,i} = \sum_{j=1}^N a_{ij} N_i N_j \quad (33)$$

$$B_{br,i} = \sum_{j=i+1}^N g(V_j) N_j \beta(V_i | V_j) \quad (34)$$

$$D_{br,i} = g(V_i) N_i \quad (35)$$

donde  $a_{ij} = a(V_i, V_j)$  y

$$\xi_{kj} = \begin{cases} 1 & \text{para } V_i < V_{ag} < V_{i+1}, \text{ donde } i \leq N - 1 \\ 0 & \text{otra forma} \end{cases} \quad (36)$$

donde  $V_{ag}$  es el volumen de la partícula resultante de la acumulación de partículas:

$$V_{ag} = [x_{kj} V_i + (1 - x_{kj}) V_{i+1}] \quad (37)$$

y



$$x_{kj} = \frac{V_{ag} - V_{i+1}}{V_i - V_{i+1}} \quad (38)$$

Si  $V_{ag}$  es mayor o igual que el tamaño de partícula más grande  $V_N$ , entonces la contribución a la clase  $N-1$  es:

$$x_{kj} = \frac{V_{ag}}{V_N} \quad (39)$$

Es importante tener en cuenta que no hay ruptura para la clase de partícula más pequeña.

#### 2.10.6. El método discreto no homogéneo

Una de las limitaciones que existen en el método discreto homogéneo es que todos los intervalos están asignados a la misma fase secundaria y por lo tanto los efectos de advección son los mismos. Esto no es recomendable para los casos de modelado donde es probable que segreguen grandes y pequeñas partículas debido a los diferentes campos de *momentum*. El método discreto no homogéneo supera esta limitación al permitir que grupos de intervalos sean afectados por diferentes velocidades de fase. Por lo tanto, cuando se activa el modelado discreto no homogéneo, el modelo de balance de población se puede aplicar a más de una fase secundaria. La ecuación de transporte general para describir el comportamiento de la fracción discreta puede escribirse como (ANSYS-Fluent, 2013):

$$\frac{\partial(\rho\alpha f_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}_p \alpha f_i) = S_{bi} \quad (40)$$

Dado que todos los intervalos pertenecen a una sola fase en el método discreto homogéneo, la masa neta para la fase en caso de ruptura y aglomeración es cero y se puede expresar como:

$$\sum_{i=1}^M S_{bi} = 0 \quad (41)$$



Esto se muestra esquemáticamente en la **Figura 4**. En el método homogéneo discreto todos los compartimientos se ven afectados por la misma velocidad de fase  $u_p$ . En cambio, el método no homogéneo discreto que se muestra en la **Figura 5** permite que los intervalos se les asignen a múltiples fases. Aquí  $M$  compartimientos de fases se distribuyen sobre  $N$  fases para un total de  $M \times N$ . Los compartimientos  $f_1$  y  $f_M$  se ven afectados por la velocidad de la fase  $u_{p1}$  y su fuerza. La suma de las fuentes de impurezas en cualquier fase dada no es necesariamente igual a cero pueden emigrar desde contenedores de una fase a otra fase por ruptura o aglomeración creando así una masa neta para esa fase (Fluent, 2013b).

La fuente de masa neta para una fase dada se puede expresar como la suma de las fuentes de impureza que pertenece a esa fase.

$$S_i = \sum_{i=1}^M S_{bi} \quad (42)$$

Para la ruptura y coalescencia la suma sobre todas las fuentes de fase es cero.

$$\sum_{i=1}^M S_i = 0 \quad (43)$$

y por lo tanto:

$$\sum_{i=1}^M f_i = 1 \quad (44)$$

Es importante mencionar que actualmente el método discreto no homogéneo se limita únicamente a la ruptura y a la coalescencia.

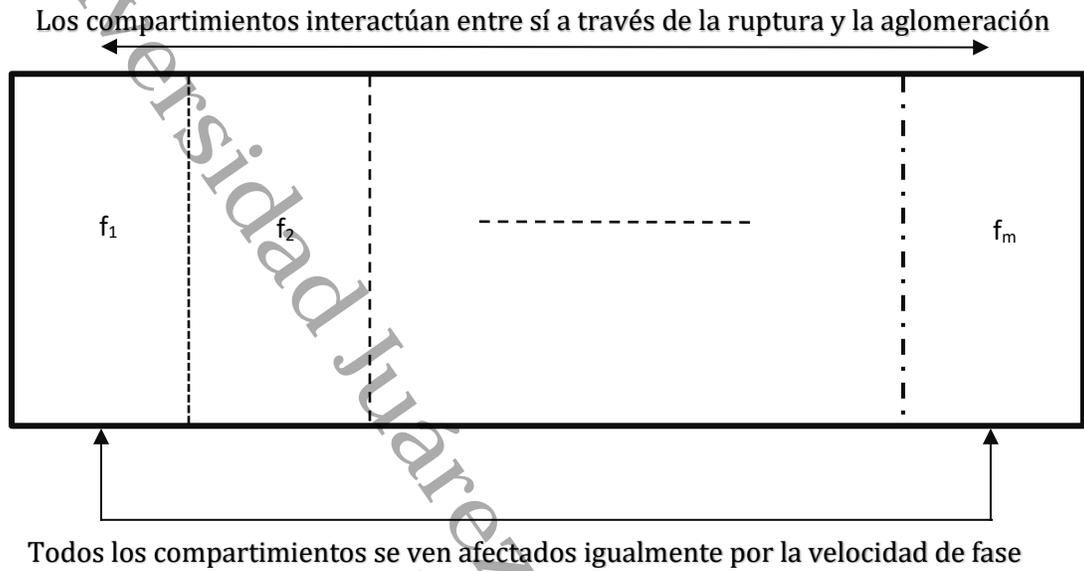


Figura 4. Método discreto homogéneo

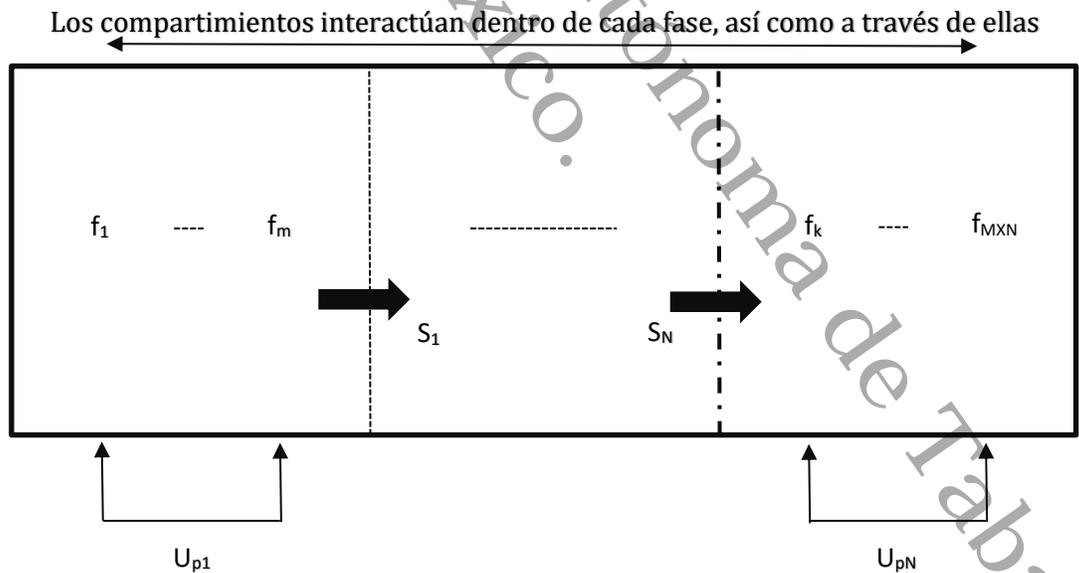


Figura 5. Método discreto no homogéneo



### 2.10.7. El método estándar de momentos

El método estándar de momentos (SMM) es una alternativa eficiente para el planteamiento de balance de población discreta. En este enfoque, la ecuación de balance de población se transforma en un conjunto de ecuaciones de transporte para los momentos de distribución. El momento se define mediante la integración de la densidad del número de partículas en todo el espacio ponderada con la propiedad de las partículas elevada a su enésima potencia. En general, es suficiente para resolver sólo unas pocas ecuaciones de momento, típicamente de tres a seis. Este puede proporcionar una reducción significativa en el número de ecuaciones a resolver en comparación con el enfoque discreto. Además de la ventaja computacional, este enfoque es útil cuando no se necesita toda la distribución y cierta media y cantidades totales son suficientes para representar la distribución de partículas. Típicamente, el momento cero representa la densidad total, el segundo momento representa la superficie total por unidad de volumen, y el tercer momento representa la densidad de masa total (ANSYS-Fluent, 2013b).

En el enfoque SMM, no se toman suposiciones acerca de la distribución de tamaño y las ecuaciones de momento se formulan en una forma cerrada. Sin embargo, este requisito de cierre posee una limitación grave ya que la agregación (con la excepción del núcleo de agregación constante) y los fenómenos de ruptura no se pueden escribir como funciones de momentos.

### 2.10.8. El método de cuadratura de momentos

El método de cuadratura de momentos (MOM) tiene una ventaja similar a la del SMM en términos de costos computacionales, pero sustituyendo el cierre exacto necesario por SMM con un cierre aproximado. Esto permite la aplicación de MOM a una amplia gama de aplicaciones sin ningún tipo de limitaciones (ANSYS-Fluent, 2013b).



## 3

## Antecedentes

### 3.1. Modelos matemáticos para la dinámica de fluidos en la sedimentación por gravedad

A mediados de la década de los noventa, Matko *et al.* (1996) revisaron los modelos existentes para la simulación de tanques de sedimentación empleados en tratamiento de aguas. Como resultado, encontraron desde modelos muy simples de carácter empírico y poca generalidad, hasta modelos sofisticados basados en CFD. En concordancia con el trabajo de Matko *et al.*, los modelos matemáticos para el asentamiento de partículas en un clarificador pueden clasificarse de acuerdo al tipo de sedimentación que ocurre en él. Los modelos más simples de sedimentación son los modelos empíricos (por ejemplo, el modelo de Giokas *et al.*, 2002) pero estos modelos no son recomendables por su limitado rango de aplicabilidad y su escaso poder de extrapolación. Debido a la simplicidad de la sedimentación primaria (sedimentación predominantemente de tipo I o sedimentación discreta), ésta puede modelarse directamente con un equilibrio de fuerzas actuando sobre una partícula moviéndose en caída libre en el seno del fluido. Como resultado de dicho equilibrio, la velocidad de asentamiento de una partícula se conoce como velocidad terminal de sedimentación. Ozer (1994) demostró que la sedimentación de partículas en un clarificador primario procesando agua con baja turbiedad puede modelarse satisfactoriamente con el concepto de velocidad terminal de sedimentación. Recientemente, Sansalone *et al.* (2009) mostró que el concepto de velocidad terminal es suficiente para representar la sedimentación discreta en un sedimentador primario empleado para el tratamiento de escurrentías urbanas.

Por el contrario, si el tipo de sedimentación es diferente a la sedimentación discreta, existen modelos más complejos para representar al proceso de asentamiento de partículas. En el caso de sedimentadores secundarios, como los que operan en un sistema de lodos activados, se han propuesto diversos modelos. Los primeros modelos matemáticos mecánicos de sedimentación secundaria fueron modelos unidimensionales, esto es, modelos dinámicos que calculan la



concentración de partículas en función de la altura de un sedimentador con base en principios fundamentales como la Ley de la Conservación de Masa (Takács, 1991; Grijspeerdt *et al.*, 1995; Diehl y Jepsón, 1998; deClercq *et al.*, 2003; Zhang *et al.*, 2006; Holenda *et al.*, 2006).

El estado del arte en modelos matemáticos de sedimentación son los modelos bidimensionales y tridimensionales, los cuales emplean técnicas numéricas avanzadas como elemento o volumen finitos para representar la concentración espacial de partículas dentro de un clarificador. Los modelos más complejos suelen resolverse por técnicas de CFD. Entre las aplicaciones de CFD más relevantes en sedimentación se encuentran los trabajos de Flamant *et al.* (2004), Burt y Ganeshalingam (2005), Plósz *et al.* (2007) y Park *et al.* (2008) quienes propusieron mejoras en el diseño y operación de sedimentadores secundarios. Entre los trabajos más recientes, las técnicas de CFD han sido empleadas anteriormente para conocer el efecto de cambios potenciales en condiciones de operación sobre el desempeño de los tanques sedimentadores. Stamou *et al.* (2009) aplicaron CFD para estudiar la fluido-dinámica de un tanque secundario de tipo rectangular asistido por floculación que sería construido en una planta de tratamiento en Grecia. Los resultados permitieron estimar la concentración de sólidos suspendidos en el efluente, así como las alturas de las columnas de agua, lodo y de la zona de clarificación. Los resultados correlacionaron satisfactoriamente con el número de Hazen, un número adimensional empleado como parámetro de escalamiento. Tamayol *et al.* (2010) emplearon técnicas de CFD para estudiar el efecto de la posición y número de deflectores en un tanque secundario rectangular. El empleo de deflectores para evitar el corto-circuito del flujo dentro del tanque permitió mejorar el desempeño del mismo en la remoción de sólidos. En dos contribuciones seriadas, Al-Sammarræe *et al.* (2009) y Al-Sammarræe y Chan (2009) emplearon CFD para modelar el desempeño de un tanque de sedimentación empleando una distribución de tamaño de las partículas. Con ello, se representan los patrones de flujo, las velocidades terminales y la eficiencia de remoción de 13 tamaños de partícula empleando la técnica de flujo turbulento conocida como simulación de grandes remolinos (LES, *Large Eddy Simulation*). Con este modelo, los autores



estudiaron el efecto de los deflectores en un tanque rectangular demostrando que el diseño puede ser optimizado.

Por su parte, Goula *et al.* (2008) emplearon el análisis CFD para evaluar el efecto de la adición de un deflector vertical en la sección de alimentación de un tanque de sedimentación a escala industrial para la mejora de la sedimentación de sólidos en el tratamiento de agua potable. En ese estudio, los autores comparan las simulaciones de un tanque convencional con las de un tanque equipado con el deflector vertical propuesto. De acuerdo con los resultados, se ha encontrado que el deflector disminuye la zona de recirculación de entrada y mejora la sedimentación de sólidos, dirigiéndolos hacia la parte inferior del tanque con altas velocidades de sedimentación. También destacaron que incluso pequeñas diferencias en la velocidad de las partículas pueden provocar grandes cambios en el porcentaje de partículas sedimentadas; en este trabajo, la eficiencia global de eliminación de sólidos aumentó cuando se utiliza el deflector de 90.4 a 98.6% que conduce a una reducción de la concentración de sólidos del efluente en aproximadamente el 85%.

### 3.2. Modelos matemáticos para la dinámica de fluidos en la coagulación-floculación

En referencia a los estudios de la dinámica de fluidos en el proceso de coagulación-floculación, se han publicado diversas contribuciones. Somasundaran y Runkana (2003) revisan el empleo de modelos de balance de población para representar la formación y rompimiento de aglomerados de partícula (en tratamiento de agua, denominados flóculos). Los autores clasifican a estos modelos en tres tipos: modelos de agregación, modelos de fragmentación, y modelos de agregación-fragmentación. En su revisión, ellos reconocen que los dos parámetros más importantes en un modelo de balance de población son la frecuencia de colisión y el factor de eficiencia de colisión. Además, revisan algunas suposiciones comunes en el modelado de fluidos heterogéneos (sistemas multifásicos).

Posteriormente, Samaras *et al.* (2010) analizaron la fluidodinámica de un tanque de floculación para el tratamiento de agua potable en la presencia de una concentración muy baja de sólidos. El



propósito principal de la simulación está dedicado a la representación detallada de la geometría del sistema, mientras que los procesos fisicoquímicos a escala partícula son tratados de una manera simplificada para reducir el esfuerzo computacional. Como caso de estudio, Samaras y colaboradores examinaron uno de los tanques de floculación de la planta potabilizadora de la ciudad de Tesalónica (Grecia). Los resultados mostraron que, para el caso de baja concentración de sólidos en la corriente de alimentación, la floculación es muy débil para dar lugar a partículas lo suficientemente grandes como para asentarse en la etapa posterior de sedimentación. En este caso, la floculación necesita ser mejorada mediante el aumento de la concentración de sólidos en el tanque de floculación por lo que se propone la recirculación de los lodos desde el depósito de sedimentación. Además, los autores proporcionan directrices sobre cómo la herramienta computacional presente se puede utilizar para la optimización del diseño y funcionamiento de los tanques de floculación para el tratamiento de agua potable a partir de fuentes relativamente limpias. Donde realiza un estudio de un tanque floculador en la potabilización de agua utilizando el modelo CFD, el tanque tiene una altura de 5.65 m y un diámetro de 9.57 m, el tamaño promedio de su partícula es de 3  $\mu\text{m}$ , el diámetro de la paleta es de 3.88 m, la malla obtenida tiene 825,000 celdas y 210,000 nodos, se realizan seis estudios llamados caso con diferentes concentraciones de sólidos.

Recientemente, Gheshlaghi *et al.* (2013) propusieron un modelo CFD aplicable a tanques de espesamiento de lodos. El modelo bifásico, sólido-líquido, es de tipo euleriano-euleriano con un modelo de turbulencia  $k-\varepsilon$  estándar y un submodelo de balance de población para la descripción de la formación y rompimiento de flóculos. Los resultados de la simulación fueron comparados con información experimental para validar la precisión del modelo. Los resultados demostraron que la operación del tanque de espesamiento depende principalmente de tres variables de la corriente de alimentación: el flujo, el porcentaje de sólidos y el tamaño de las partículas.



### 3.3. Modelos de balance de población en tratamiento de aguas

Con referencia al estudio de la distribución de partículas en un medio turbulento destacan las investigaciones realizadas por Biggs y Lant (2002) quienes utilizaron un modelo de balance de población en lodos activados, obteniendo una aproximación del tamaño medio del floculo con el tiempo, así como efectos del gradiente de velocidad en el coeficiente de ruptura y colisión. Por su parte, Heath y Koh (2003) combinaron un modelo de balance de población y CFD en la agregación de partículas utilizando un agente floculante polimérico. Posteriormente, Paschedag (2004) estudió los modelos de mezclado y precipitación utilizando CFD y Balance de Población, encontrando que el balance no puede ser directamente resuelto en los flujos turbulentos; en estos casos el autor recomienda aplicar modelos RANS o LES. En un estudio más reciente Nopens (2007) realizó un estudio acoplado un modelo CFD con un modelo de balance de población en un clarificador de aguas residuales.

Dubbelboer *et al.* (2014) realizaron un enfoque de modelado para la mezcla dispersiva de un homogeneizador de alta presión de alta presión utilizando balance de población combinado con la dinámica computacional de fluidos. La turbulencia se modeló con un modelo RANS  $k-\varepsilon$ , se dividió en cuatro compartimientos con la finalidad de predecir el aumento de la partícula y la población de la misma, con ello se obtuvo un 65% de mejora en la predicción en comparación de un compartimiento. Por otra parte, Attarakih *et al.* (2015) realizan un modelado de balance de población con CFD y simulaciones de hidrodinámica acoplada a la transferencia de masa en columnas de extracción líquida. Recientemente, Wodołażski (2017) realizó un modelado del equilibrio de la población en CFD de las partículas de un catalizador sólido-líquido en un reactor de tanque agitado con una turbina Rushton en un estudio ampliado, en el trabajo se realizaron simulaciones utilizando Lagrangiano-Euleriano acoplado a un modelo de turbulencia  $k-\varepsilon$ , encuentra que la coalescencia y el mecanismo de ruptura de las partículas aumenta con la velocidad del agitador, consideran que la presión y la temperatura tiene un impacto significativo en el equilibrio de la población.



## 4

## Justificación

La calidad del agua potable es una preocupación en materia de salud pública y que concierne tanto a autoridades gubernamentales como a la sociedad en general. En Tabasco existe un rezago en cobertura del servicio de agua potable y, en aquellas comunidades con cobertura, la calidad del agua potable suele ser cuestionable, particularmente durante la época de lluvia. Esto se debe a que el agua empleada como materia prima proviene de cuerpos de agua superficial, especialmente de ríos, y debido a las lluvias, los ríos arrastran una concentración significativamente mayor de sólidos suspendidos en comparación con la época de estiaje.

Por lo general, la tendencia actual en el diseño y construcción de nuevas plantas potabilizadoras es el empleo de tecnologías y equipos de tratamiento patentados, cuyos diseños están basados en intervalos de operación que son aplicables y válidos bajo las condiciones de los países exportadores de dichas tecnologías. Sin embargo, Tabasco es un estado que posee los niveles más elevados de precipitación pluvial por lo que la concentración de sólidos suspendidos y la naturaleza de los mismos puede cambiar abruptamente, en términos del número e intensidad de los eventos pluviales.

En este estudio se propone realizar un diagnóstico del desempeño de unidades de clarificación-floculación con uso creciente en el Estado a partir de un análisis de la dinámica de fluidos por computadora. Este análisis es la representación matemática más sofisticada y confiable para la descripción de sistemas multifásicos en donde ocurren diversos fenómenos de transporte de masa y de cantidad de movimiento. Como resultado final del análisis, se aspira a obtener una región de operación que permita la optimización del desempeño de estas unidades clarifloculadoras con el propósito de asegurar la mejor calidad posible del agua potable.



## 5 Objetivos e Hipótesis

### 5.1. Objetivos

#### *Objetivo general*

Diseñar y evaluar el efecto de las condiciones de operación sobre la remoción de sólidos suspendidos en un tanque clarificador-floculador de uso extendido en las plantas potabilizadoras de Tabasco.

#### *Objetivos particulares*

- Examinar la geometría tridimensional del clarificador-floculador para la generación de una malla numérica óptima para las simulaciones CFD.
- Seleccionar las técnicas y modelos CFD pertinentes en la representación del comportamiento fluido-dinámico de sistemas sólido-líquido considerando el balance de población de los flóculos.
- Emplear el modelo CFD seleccionado para realizar simulaciones del efecto de las condiciones de operación y calidad del influente sobre la eficiencia de sedimentación y floculación.

### 5.2. Hipótesis

Un análisis de la dinámica de fluidos por computadora permitirá establecer una región de operación para el desempeño óptimo de una unidad de clarificación-floculación perteneciente a una planta potabilizadora de Tabasco.



## 6

## Métodos

### 6.1. Descripción de la Unidad de Clarificación-Floculación

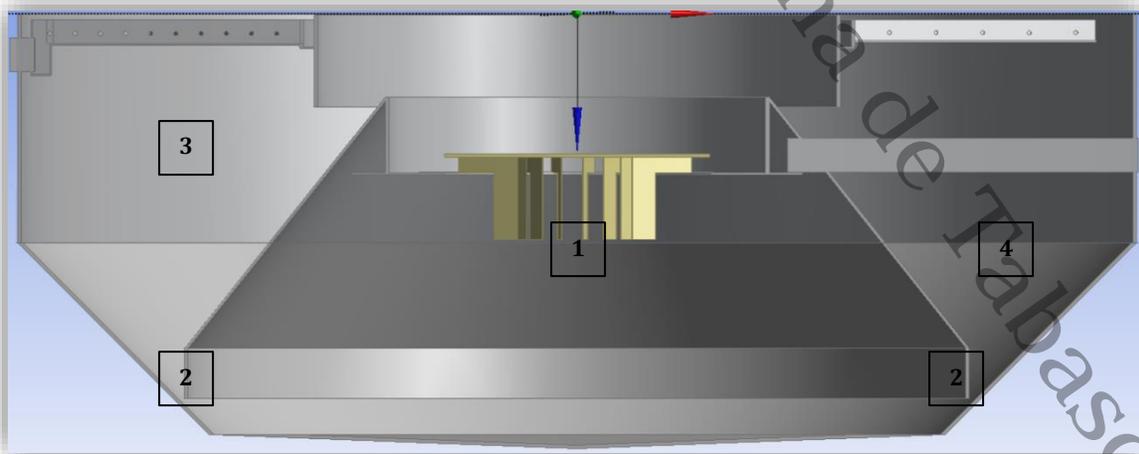
El tipo de unidad de clarificación-floculación que fue objeto de estudio se encuentra operando en la Planta Potabilizadora de Dos Montes-El Tintillo, situada en la Carretera Estatal a los Aztlanes, Ranchería Barranca y Guanal Segunda Sección, El Tintillo, alrededor del km 1.8. En esta planta potabilizadora, el proceso inicia en captación donde bombean el agua cruda proveniente del Río Grijalva con ayuda de bombas con una potencia de 5 hp, obteniéndose un caudal promedio diario de 100 L/s. Posteriormente, el agua llega a una caja de reparto o de distribución en donde existe instalado un desarenador que, como su nombre lo indica, elimina el excedente de arena o algún residuo que pueda afectar al tratamiento posterior. En esta caja de reparto se realiza una dosificación de hipoclorito de sodio (10 mg/L), así como la adición de los agentes coagulantes (dosis de diseño de 90 mg/L de una solución de sulfato de aluminio con 7.5% Al, y el polímero (poliacrilamida) a una dosis de 2 mg/L). Después, el agua es transportada a las unidades de clarificación-floculación, conocidos comúnmente como *clarifloculadores* (en este estudio un clarificador Accelator® de Degremont Technologies, Francia). En estos equipos ocurren tres operaciones unitarias: floculación, sedimentación y decantación. En el fondo se forma un lecho de lodos el cual filtra el agua (decantación) y forma flóculos de mayor tamaño que van al fondo del tanque (floculación) y en la tercera operación se obtiene el líquido clarificado con un mínimo contenido de sólidos en suspensión (clarificación). Después de estos equipos clarifloculadores, el agua tratada, con bajo contenido de sólidos suspendidos, se envía a un equipo de filtración en el cual se utiliza como medio filtrante a una capa de arena y una capa de antracita activada. El agua filtrada es dirigida después hacia la etapa final del proceso, la desinfección por cloración. En esta etapa se dosifica por medio de goteo una solución de hipoclorito de sodio y después pasa a una cisterna donde se almacena para distribuirla a las poblaciones cercanas.



En particular, la unidad de clarificación-floculación de la Planta Potabilizadora de Dos Montes-El Tintillo se presenta en la **Figura 6**. Por su parte, en la **Figura 7** se muestra una descripción general del funcionamiento de los clarifloculadores y en la **Tabla 1** se describen las características de la unidad.



**Figura 6.** Componentes de una unidad de clarificación-floculación.



**Figura 7.** Descripción del funcionamiento de un clarifloculador de tipo *Accelerator*®. 1. Mezclado con Rotor-impulsor (paleta de 18 hojas), 2. Recirculación interna de lodos, 3. Separación dinámica de sólidos suspendidos, 4. Área de espesamiento de lodos.



**Tabla 1.** Dimensiones de diseño de un clarifloculador a escala real (Planta Potabilizadora de Dos Montes-El Tintillo).

|   |  |
|---|--|
| Modelo                                  | Accelerator DA-44  |
| Fabricante                              | Infilco Degrémont Inc.                                       |
| Constructor de la Planta Potabilizadora | EDYCSA (Electro Distribuciones y Construcción, S.A. de C.V.) |
| Flujo total (L/s)                       | 100  |
| Caudal medio por unidad (L/s)           | 50   |
| Caudal máximo por unidad (L/s)          | 60   |
| Diámetro (m)                            | 13.40  |
| Altura total (m)                        | 5.03   |
| Carga hidráulica ( $m^3/(m^2 d)$ )      | 30.63  |
| Tiempo de residencia (h)                | 3.16   |

Fuente: SAS, 2012.

## 6.2. Diseño de la geometría tridimensional del clarificador-floculador

La primera etapa en un análisis CFD es conocida como **pre-procesamiento**. Esta etapa consiste en establecer una malla numérica del sistema de estudio y que debe representar con precisión las dimensiones y dispositivos del clarifloculador tipo *Accelerator* (Ver **Figura 2**). Para esta etapa de pre-procesamiento se emplea el programa *Design Modeler* (ANSYS 13, ANSYS Inc., USA), el cual permite el diseño geométrico en dos o tres dimensiones de la malla numérica y, de ser requerido, es capaz de importar diseños tipo CAD. Una vez que el diseño geométrico está terminado, se genera una malla numérica empleando la herramienta *Meshing* (ANSYS 13, ANSYS Inc., USA) que contiene los elementos o volúmenes finitos que empleará el código CFD para la solución de los modelos y submodelos seleccionados. El programa *Meshing* no sólo genera una malla numérica, sino que permite examinar la calidad de la misma, así como definir las condiciones de frontera. Los elementos de la malla pueden ser de figuras geométricas diversas, entre las más comunes se encuentran los elementos rectangulares, triangulares, tetraédricos y hexaédricos. Los elementos rectangulares se emplean con poca frecuencia ya que se requiere que la geometría y dimensiones del sistema en estudio sean regulares y lineales. Por su parte, los elementos triangulares son los elementos más versátiles para la generación de mallas ya que se ajustan a prácticamente todo tipo de geometrías del sistema, pero podrían requerir de un mayor esfuerzo computacional. Finalmente, los elementos tetraédricos y hexaédricos permiten optimizar la malla numérica pues



se requiere menor número de estos elementos en comparación con los elementos triangulares. Además, poseen la ventaja de que se ajustan a todo tipo de geometrías bi y tridimensionales. En el diseño de la geometría de malla resulta práctico y deseable emplear una combinación de elementos. Por ejemplo, pueden emplearse elementos triangulares en regiones del sistema en el que no se esperen cambios abruptos de las variables del sistema (concentración, temperatura, presión, velocidad de flujo, entre otros) y combinarse con elementos tetraédricos en regiones donde se esperen cambios significativos de las mismas.

Una vez que se define el tipo de elementos o volúmenes finitos, se requiere establecer también el tamaño de éstos. Una malla con elementos demasiado pequeños generará un gran número de nodos y elementos que deberá solucionarse numéricamente, incrementando el tiempo de ejecución de las simulaciones. Por el contrario, una malla con elementos demasiado grandes podría causar problemas de convergencia numérica, o bien, generar resultados de simulación poco satisfactorios. Como en el caso de la selección del tipo de elementos finitos, en el diseño de geometrías suelen combinarse elementos finos con gruesos, de tal manera que se puedan representar óptimamente un sistema de estudio. El paso final en el diseño de la geometría de la malla es la definición de las condiciones de frontera. Estas condiciones surgen a partir de un límite en el dominio las cuales son usadas para refinar localmente la malla en la dirección normal a una cara o un eje. Las condiciones de frontera son usadas para mejorar la densidad de la malla alrededor de las paredes o caras establecidas en la geometría.

### 6.3. Selección de técnicas, modelos, submodelos y parámetros para el análisis CFD

La etapa de selección de las técnicas, modelos, submodelos, propiedades termofísicas, otros parámetros físicos, condiciones de operación y criterios de convergencia numérica es conocida como modelado. En el **modelado** se emplea FLUENT® (ANSYS Inc., USA), el programa CFD de propósito general basado en el método de volúmenes finitos sobre una malla colocada. FLUENT posee una serie de opciones para el modelado de un problema. Entre las opciones más



importantes aplicables al modelado de tanques de clarificación-floculación, FLUENT permite seleccionar el tipo de fluido (incompresible), el modelo de turbulencia (en clarificadores floculadores la turbulencia es considerablemente menor a otros equipos de proceso), la posibilidad de incluir un sistema reactivo escogiendo a los componentes del mismo (el caso de un sedimentador asistido por coagulación/floculación, y la inclusión de sistemas multifásicos, como el caso del sistema bifásico sólido-líquido (sólidos suspendidos moviéndose en el seno del agua residual). Además, es posible seleccionar también si el sistema se encuentra sometido a presión (los tanques de clarificación-floculación se encuentran abiertos a la atmósfera; *i.e.* la presión del sistema es la presión atmosférica), si la densidad de una o más fases es constante, si el flujo es viscoso o no viscoso, si existen efectos difusivos de una especie en una fase y si el sistema es adiabático o isotérmico, entre otros.

Uno de los submodelos más importantes que deben considerarse en el modelado de la clarificación-floculación es el balance de población de sólidos suspendidos, el cual permite modelar la aglomeración de partículas y la fragmentación de los flóculos dentro del sistema. En referencia a las propiedades termofísicas de las fases sólida y líquida, éstas fueron consideradas como valores constantes debido a que el sistema de tratamiento de agua puede considerarse esencialmente de naturaleza isotérmica. Además, el modelo requiere del conocimiento de las condiciones de operación. Para ello se empleó la información de los parámetros de diseño de la Planta Potabilizadora de Dos Montes-El Tintillo como base para el diseño geométrico de la unidad estudiada en esta investigación.

Finalmente, durante el modelado se seleccionaron controles de solución, residuales máximos para cada modelo y submodelo (ecuación general de *Momentum* y ecuación general de masa, balance de población y modelo de turbulencia) así como los factores de convergencia numérica.



#### 6.4. Efecto de condiciones de operación en la unidad de clarificación-floculación

El desempeño de la unidad de clarificación-floculación es una función de su configuración mecánica y de sus condiciones de operación. En este caso, dado que el clarifloculador que fue el objeto de estudio es un diseño patentado (Decantador *Accelerator*®, Infilco Degremont Technologies, Francia), sólo se consideró el efecto de las condiciones de operación para el diagnóstico de su desempeño. En este estudio se analizó el efecto de algunas variables de operación y todas ellas corresponden a condiciones de la alimentación: el caudal de entrada al clarificador-floculador, la concentración de sólidos suspendidos y el tamaño promedio o la distribución de tamaño de partículas. Sobre el tamaño de partícula, Zapata del Ángel (2017) realizó experimentación de laboratorio y empleó análisis de procesamiento de imágenes 2D para conocer la función distribución del tamaño de partícula de las partículas suspendidas antes y después de la floculación. Al respecto, en este estudio se empleó la distribución inicial del tamaño de partícula reportada por Zapata del Ángel (2017)



## Resultados y Discusión

### 7.1. Geometría del tanque Clarificador-Floculador y generación de malla numérica

La geometría del tanque se creó en *Geometry-DesignModeler* (ANSYS 15, ANSYS Inc., USA), consiste en la generación de un modelo tridimensional tipo CAD (*Computer Aided Design*) de la geometría del dominio fluido, este es el primer paso del análisis CFD y se hace a partir de planos en 3D. Posteriormente se construye la geometría en *Geometry* usando operaciones lógicas y comandos complejos para definir la geometría mediante ejes, caras y volúmenes; logrando obtener el diseño tamaño escala del tanque. A continuación, se muestran las diferentes geometrías diseñadas para la simulación del tanque.

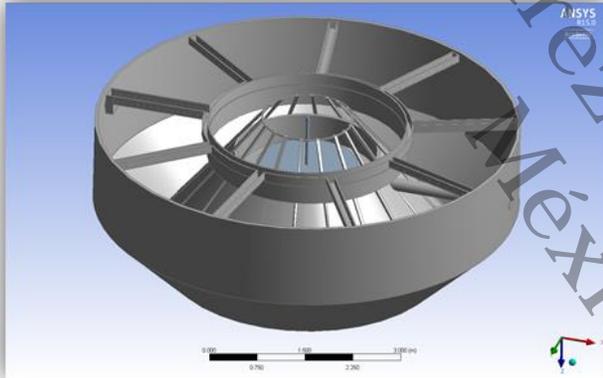
#### 7.1.1. Diseño de la geometría tridimensional

Primero se abre *Workbench 15.0* para elegir la opción de *Geometry* la cual puede ser nombrada a libre criterio. Consecutivamente se comienza la construcción de tanque utilizando los comandos en función de los planos XY, YZ y XZ, a su vez se crean planos derivados de los originales para construir los componentes del clarificador-floculador, se manejan unidades de medición del Sistema Internacional (metro, grado,  $\text{rad s}^{-1}$ , entre otras). En la **Tabla 1** se mostraron las dimensiones de la unidad de clarifloculación; sin embargo, para la realización de la geometría en 3D se emplearon dimensiones menores, esto es, un diámetro de 6.7 m, la altura de 2.5 m y un flujo de 25 L/s, esto a que es un tamaño escala. En la **Figura 8a** se muestra la geometría del tanque obtenida. Posteriormente, se emplea la función BOOLEANA con el propósito de extraer el volumen de un cuerpo dentro de otro; antes de aplicar la función se debe generar un cuerpo, en modo FROZEN, y este debe cubrir complemente el tanque y de preferencia que esté muy cercano al mismo para no crear cuerpos que no tengan algún uso o que el programa pueda interpretar como parte del sistema. De esta manera se generó el volumen al sistema con el objetivo de establecer la región de fluido, así como la entrada y salida del fluido, como se observa en la

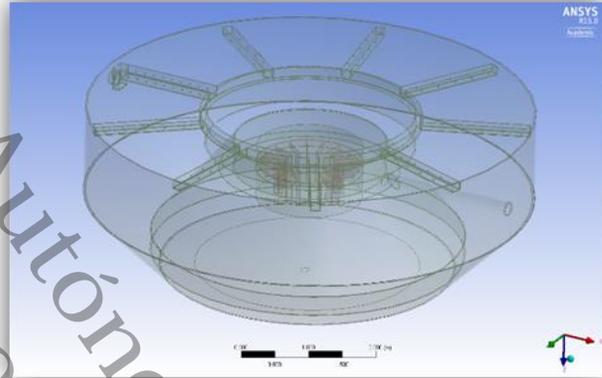


**Figura 8b.** Esta zona simula el movimiento del fluido en el tanque al entrar y salir del mismo: Utilizando la misma función booleana se creó la región de contacto extrayendo de ella la paleta (compuesta de 18 paletas, con 20° de separación), esta región quedó definida como una interfase; es decir, ésta se moverá sobre la región de fluido misma que ocupa un volumen de 146 m<sup>3</sup> y la zona de contacto de 3.12 m<sup>3</sup>. Estas zonas son muy importantes para el mallado y la simulación en FLUENT® (ANSYS Inc., USA), es muy importante analizar cada sección y cuerpos generados en la geometría, esto permite obtener un mallado y una simulación óptima.

a)



b)



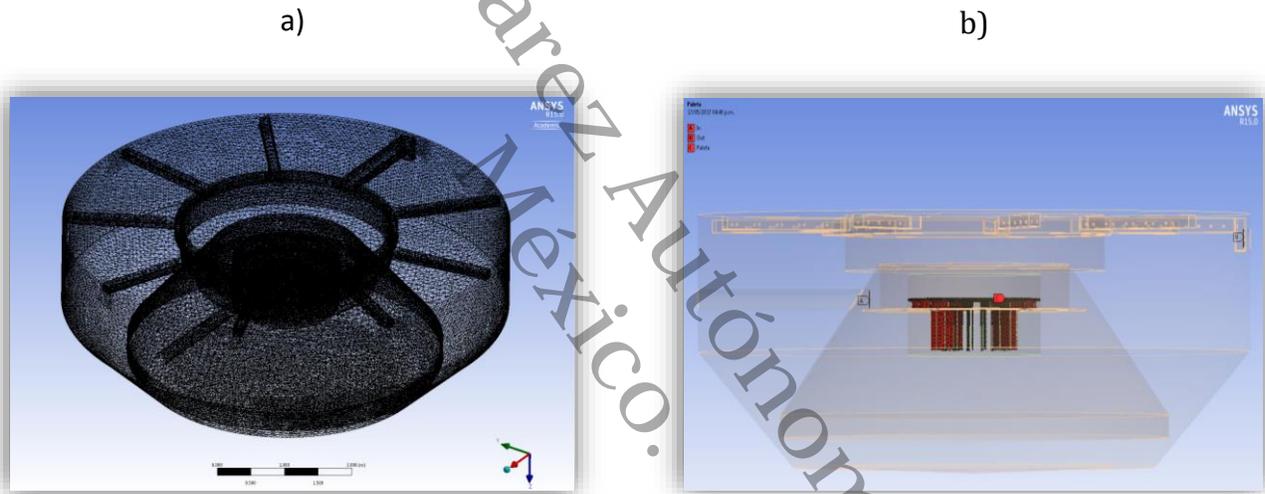
**Figura 8.** Generación de la geometría tridimensional del tanque clarifloculador, a) Geometría 3D del tanque, b) Generación de volumen de fluido con la función *BOOLEANA*

### 7.1.2. Generación de la malla numérica

Para llevar a cabo el mallado del tanque, usamos *Meshing* (ANSYS 13, ANSYS Inc., USA) desde *Workbench 15.0* y seleccionamos la técnica adecuada para obtener el mallado óptimo para el sistema. Como se mencionó anteriormente, en *Geometry* se establecen dos cuerpos o regiones que son detectadas en *Meshing*, estas zonas son útiles para mallar el tanque por secciones y éste sea más rápido; la técnica consiste en establecer un tamaño óptimo de elementos para el sistema el cual resultó con un tamaño de 0.054 m, como preferencia física se selecciona “CFD” y preferencia de solución a “Fluent”. Con lo anterior, se obtuvo una malla con 482,496 elementos y 119,458 nodos, este mallado tiene una calidad de 0.05% analizándola en FLUENT® (ANSYS Inc.,



USA), donde los elementos que conforman la malla numérica son tetraedros con un ángulo establecido de manera predeterminada por Fluent. En la **Figura 9a** se puede observar el mallado obtenido, la zona donde se encuentra la paleta es la que consume mayor número de elementos, así también la zona de contacto, debido a que serán las zonas donde se presentarán los flujos turbulentos al iniciar la simulación. Por otra parte, una vez obtenido el mallado se establecen las condiciones de frontera y regímenes de simulación, estas condiciones fueron el flujo de entrada, el flujo de salida, la zona (región de contacto) y la paleta como puede observarse en la **Figura 9b**, es importante establecerlas en *Meshing* para establecer condiciones de frontera en Fluent.



**Figura 9.** Mallado numérico del tanque clarifloculador, a) Malla fina de 482,496 elementos, b) Definición de condiciones de frontera.

## 7.2. Selección del modelo CFD

En esta sección se analizan los modelos disponibles en Fluent, las técnicas en este caso los materiales (agua y sólidos), fases (líquida y sólida), condiciones de zona, las condiciones de operación, métodos de solución, los controles de solución, soluciones iniciales y los criterios de convergencia numérica. En la **Tabla 2** se describen brevemente las opciones seleccionadas para llevar a cabo la simulación del sistema, permiten describir los fenómenos que se llevan a cabo dentro del mismo, además de revisar las bibliografías más cercanas a la fluido-dinámica del tanque.



Tabla 2. Selección de Modelos disponibles en Fluent

| Modelos disponibles                             | Selección            | Justificación   |
|---|----------------------|---|
| Basado en la Presión vs Basado en la Densidad   | Presión              | Para este sistema el modelo basado en la presión es el idóneo debido a la incompresibilidad del flujo y porque se considera la presión constante en cualquier punto del tanque.   |
| Estacionario vs Transitorio                     | Transitorio          | El modelo estacionario es descartado debido al interés por conocer los cambios de las variables con respecto al tiempo, así como los cambios en el flujo debido a la turbulencia del sistema.   |
| Euleriano vs Lagrangiano                        | Euleriano            | El modelo Euleriano resuelve un conjunto de $n$ ecuaciones de <i>momentum</i> y continuidad para cada fase, este acoplamiento se logra con la presión y coeficientes de intercambio de interfaces por ello resulta ser más útil permite modelar múltiples fases por separado, pero interactuando, en el caso del modelo Lagrangiano su utilidad está guiada a conocer la trayectoria de la partícula. |
| 2D vs 3D  | 3D                   | El sistema carece de simetría por lo que un modelo 2D no es recomendable, el modelo 3D permite observar un comportamiento cercano a la realidad, así como el funcionamiento de sus componentes (flujo de entrada, rotación de la paleta y flujo de salida).   |
| Homogénea vs Heterogénea                        | Multifase            | El modelo heterogéneo fue el indicado debido a que el sistema presenta dos fases, el agua como fase líquida y los sólidos suspendidos como fase sólida.   |
| Laminar vs Turbulento                           | Turbulento           | El modelo turbulento se seleccionó debido a la turbulencia que existe en el sistema (presenta flujos turbulentos en 90% del volumen); es altamente inestable ya que existen cambios abruptos en la velocidad.   |
| $k-\varepsilon$ estándar vs $k-\varepsilon$ RNG | $k-\varepsilon$ RNG  | Ambos modelos son muy completos, es decir resuelven ecuaciones en un régimen turbulento donde se presenta energía cinética turbulenta y tasa de disipación, pero en este sistema el modelo $k-\varepsilon$ RNG tiene un término adicional en su ecuación que mejora la precisión en flujos con turbulencia. Además, este modelo resultó más estable que el modelo estándar.                           |
| Balance de Población vs VOF                     | Balance de Población | El modelo VOF es una técnica de rastreo muy eficiente para sistemas multifásicos, pero no permite evaluar un sistema donde existe aglomeración de partículas, el modelo de Balance de Población es el idóneo para el sistema y describe mejor los procesos que se llevan a cabo en el tanque.   |
| Modelo de agregación                            | Modelo de Luo        | Este modelo según Luo (1993) nos da una tasa de formación de volúmenes de partículas como resultado de colisiones binarias de partículas. Además, la frecuencia de colisión y la probabilidad de que la colisión da lugar a la coalescencia, este modelo fue más cercano para la formación de flóculos en el tanque.  |
| Modelo de Ruptura-Frecuencia                    | Modelo de Luo        | Este modelo abarca tanto la frecuencia de ruptura como la función distribución de partículas de ruptura; por otra parte, su efectividad ante remolinos en el sistema representó ser idóneo para la simulación.  |



Los modelos seleccionados para la simulación del tanque coinciden con otras investigaciones realizadas como es el caso de Bridgeman *et al.* (2010) quienes utilizaron en modelo 3D y el modelo de turbulencia  $k-\varepsilon$  RNG para evaluar la trayectoria del flóculo en una jarra de un equipo de agitación múltiple, encontraron que 30 rpm son suficientes para producir flóculos, evaluando diferentes gradientes de velocidad. Por su parte, Nopens (2007) utiliza CFD con un modelo 3D acoplado a un modelo de Balance de Población (QMOM, cuadratura de momentos) para un clarificador de aguas residuales. De manera similar, Prat and Ducoste (2007) evaluaron los enfoques de los modelos Euleriano contra Lagrangiano combinado con QMOM y Balance de Población en la simulación de la floculación en tanques bien mezclados en un modelo 3D. En comparación, ambos enfoques mostraron similitudes en la sensibilidad de la dinámica de agregación y ruptura de partículas con diferentes gradientes de velocidad, la misma tendencia en el tamaño medio de partículas en estado estacionario, siendo el enfoque Euleriano quien mostró mayores tasas de esfuerzos cortantes.

### 7.2.1. Materiales, fases y condiciones de frontera

Fluent permite seleccionar los materiales involucrados en el sistema, fases (fluido y sólido) condiciones de frontera e interfases. En la **Tabla 3** se muestran las propiedades de los materiales y características de las fases, así como las zonas de contacto entre ellas.

### 7.2.2. Pruebas preliminares en 3D

Las pruebas preliminares tienen como objetivo verificar el comportamiento del flujo en el sistema y la zona de contacto (rotación de la paleta), así como para detectar errores en la geometría y optimización del mallado. Para ello, se realizó una simulación preliminar considerando una sola fase (agua como fluido) estableciendo un modelado en 3D, con un flujo laminar, en un sistema transitorio y con solución basada en la presión, una velocidad de entrada de flujo de  $0.77 \text{ m s}^{-1}$ , usando el método del incremento del tiempo fijo, un tamaño de paso  $0.05 \text{ s}$ , con un número de paso de 50 y 100 iteraciones, encontrando convergencia en la ecuación de



continuidad como puede observarse en la **Figura 9a**. Además, se efectuó un corte vertical del tanque donde puede observarse la entrada, salida del flujo y contorno de la zona de contacto, posteriormente se consideró un flujo turbulento  $k-\epsilon$  estándar, manteniendo el tamaño de paso y el flujo de entrada. En algunas ecuaciones se redujo el factor de relajación que regula la rapidez de convergencia numérica; por ejemplo, en el caso de la ecuación de *momentum* y la ecuación de presión, el factor se fijó en 0.5 mientras que el factor de relajación para la turbulencia fue de 0.8. Con esta estrategia se logró mantener la solución más estable y los valores residuales de la ecuación de continuidad, turbulencia y disipación convergieron satisfactoriamente. En la **Figura 10** se muestra el contorno de velocidad del fluido con el modelo turbulento, pero sin rotar las paletas dentro del floculador; esto es, la turbulencia provenía exclusivamente del flujo de agua dentro del tanque.

**Tabla 3.** Características seleccionadas en Fluent

|                         |  |
|-------------------------|--|
| Materiales              | Fluido: <ul style="list-style-type: none"><li>• Agua líquida a 25 °C, densidad de <math>998.2 \text{ kg m}^{-3}</math> y viscosidad de <math>0.001 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}</math>.</li><li>• Sólidos este material fue creado, teniendo una densidad de <math>1600 \text{ kg m}^{-3}</math> y una viscosidad granular de <math>0.0001 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}</math></li></ul>   |
| Fases                   | Fase primaria (Agua)<br>Fase secundaria (Sólidos)  |
| Condiciones de la zona  | Fluido: zona de mezclado<br>Zona: zona de mezclado y de rotación (malla en movimiento)   |
| Condiciones de frontera | Entrada: <ul style="list-style-type: none"><li>• Agua líquida</li><li>• Fracción volumétrica <math>5 \times 10^{-6}</math>, equivalente a aprox. 50 NTU, la turbiedad promedio de la planta en época de estiaje.</li><li>• Intervalos de tamaño de partícula, en este caso se consideran cuatro tamaños promedio de partículas las cuales se obtuvieron con pruebas experimentales.</li></ul> Paleta: <ul style="list-style-type: none"><li>• Compuesta de 18 paletas y una mesa rotatoria</li></ul> Zona: <ul style="list-style-type: none"><li>• Cubre completamente la paleta</li></ul> Salida: <ul style="list-style-type: none"><li>• Agua líquida con concentración de sólidos</li><li>• Presión a 101325 Pa</li></ul> |
| Interfase               | En este caso se generan dos interfases: <ul style="list-style-type: none"><li>• Zona de interfase 1 (zona de contacto)</li><li>• Zona de interfase 2 (zona de contacto-zona periférica)</li></ul>  |

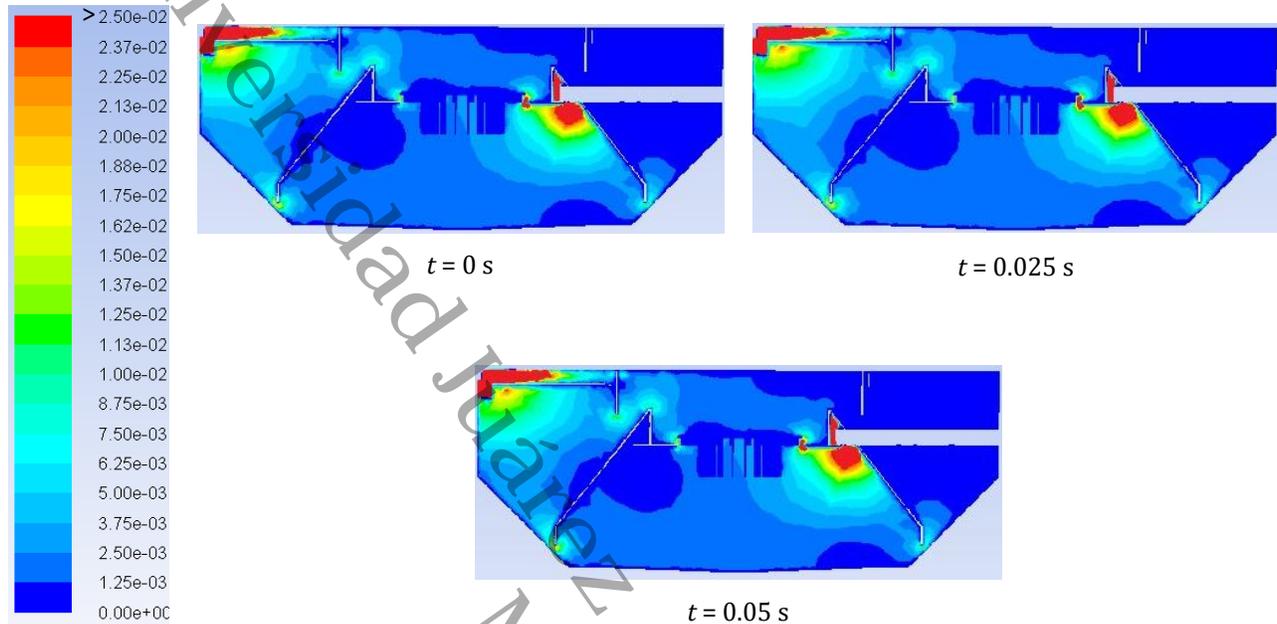


Figura 10. Contorno de velocidad del flujo (en  $\text{m s}^{-1}$ ) en régimen turbulento con agitador apagado. Velocidad del flujo a la entrada igual a  $0.77 \text{ m s}^{-1}$

Esta prueba preliminar tuvo como propósito evaluar el movimiento del fluido a través del tanque. Finalmente, se realizó un modelado considerando un régimen turbulento y haciendo rotar la paleta a 3 rpm, tal y como opera una unidad de clarifloculación típica, con el objetivo de evaluar el comportamiento del flujo y del sistema con un régimen de mayor turbulencia y a su vez analizar la variación en el tamaño de paso, parámetros de convergencia y modelos adecuados para el sistema. En la **Tabla 4** se establecen los parámetros que se consideraron para esta simulación.

El tamaño de paso fue variando debido que las turbulencias generadas durante la simulación fueron aumentando conforme se estabilizaban las ecuaciones, alrededor de la paleta se observó la mayor turbulencia como puede verse en la **Figura 11**. Se capturaron imágenes con un rango de 0 a  $0.03 \text{ m s}^{-1}$  de contorno de velocidad. Durante la simulación se cambió el modelo de turbulento  $k-\epsilon$  estándar a RNG, esto debido a las turbulencias generadas en las paredes, este modelo estabilizó un poco más el sistema, solo se redujo el factor de relajación de la ecuación de



momentum de 0.5 a 0.3. Con ello, el comportamiento del flujo fue aceptable, el cual recorre el sistema como se esperaba, es decir, el fluido entra. Para su análisis se realizaron dos cortes al tanque: uno horizontal y otro vertical. El fluido se mueve alrededor de la paleta (**Figura 12**, corte vertical), es captado en los canales (**Figura 13**) y sale de tanque. A su vez, se observa el movimiento del flujo alrededor de la paleta y la turbulencia causada por la interacción. En la **Figura 13** se observa un corte visto desde arriba y a la altura de la paleta.

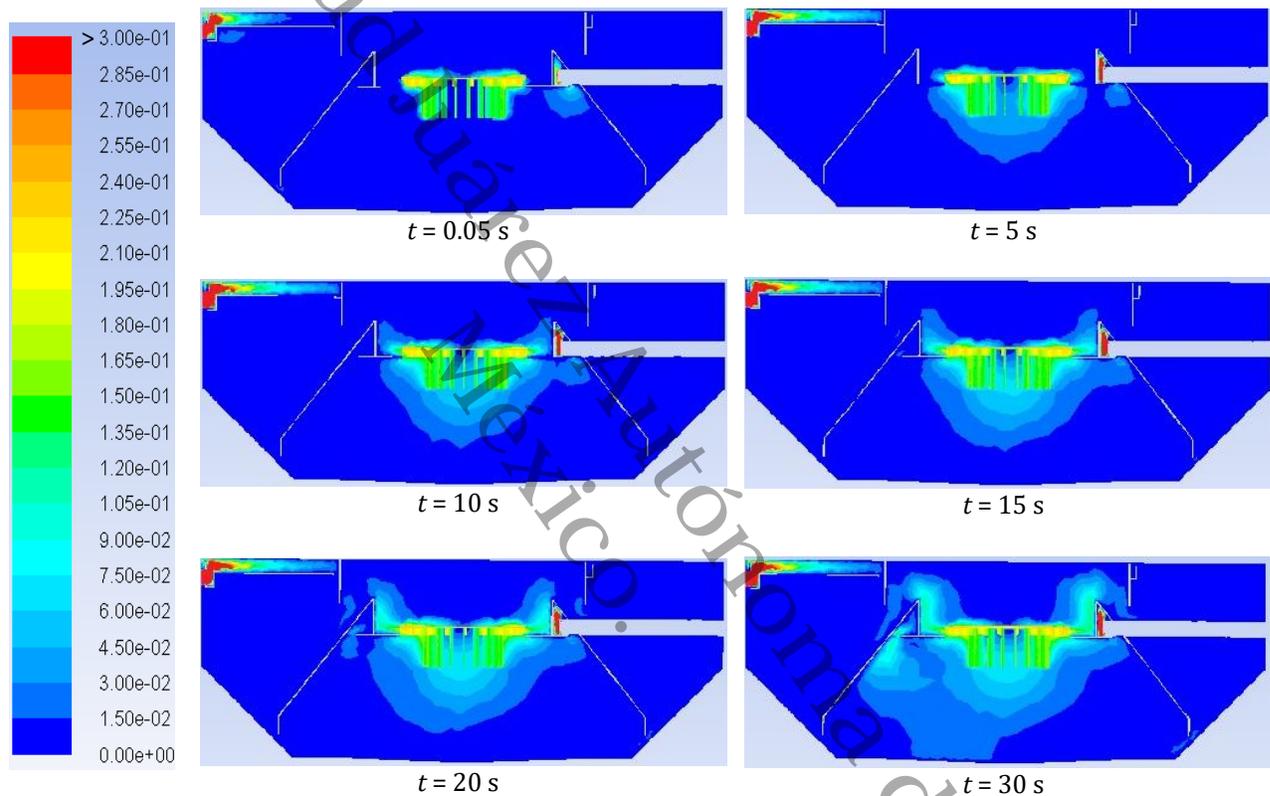
Tabla 4. Condiciones de operación del sistema

|  |   |
|--|---|
| Características de la Fase (Fluido)  |   |
| <ul style="list-style-type: none"><li>Densidad a 298 K (<math>\text{kg m}^{-3}</math>)</li><li>Viscosidad a 298 K (<math>\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}</math>)</li></ul>  | 998.2<br>0.001  |
| Condiciones de operación   |   |
| <ul style="list-style-type: none"><li>Presión (atm)</li><li>Velocidad de entrada del fluido (<math>\text{m s}^{-1}</math>)</li></ul>   | 1<br>0.77   |
| Características de Modelado  |   |
| <ul style="list-style-type: none"><li>Estado del modelo</li><li>Número de fases</li><li>Régimen de flujo</li></ul>   | Transitorio<br>1<br>Turbulento ( $k-\varepsilon$ - RNG)                                     |
| Características Numéricas  |   |
| <ul style="list-style-type: none"><li>Tipo de aproximación de las ecuaciones de momentum</li><li>Aproximaciones numéricas</li><li>Convergencia</li><li>Tipo de paso</li><li>Tamaño mínimo de paso (s)</li><li>Tamaño máximo de paso (s)</li><li>Tiempo de simulación (s)</li></ul> | Basado en la presión<br>Primer orden<br>$1 \times 10^{-3}$<br>Fijo<br>0.0001<br>0.005<br>30 |

De la **Figura 11**, la simulación muestra el comportamiento del flujo cuando la paleta está en movimiento a una velocidad angular de 3 rpm. Además de los gradientes de velocidad generados por los flujos de entrada y de salida, nótese que a medida que incrementa el tiempo de simulación, se puede apreciar un aumento en la velocidad del fluido debido a la turbulencia generada por la paleta, alrededor de la paleta las velocidades tienen un promedio de 0.255 a 0.225  $\text{m s}^{-1}$ . Estos gradientes de velocidad alrededor de la paleta pueden observarse claramente con los vectores de velocidad mostrados en la **Figura 12**. Por su parte, un corte horizontal de todo el tanque clarifloculador muestra los perfiles radiales característicos de las paletas (**Figura 13**) donde se observa el movimiento de los vectores alrededor de la paleta, mismos movimiento



observados en el trabajo reportado por Samaras *et al.* (2010) donde siguen el movimiento promovido por la paleta y puede notarse que la velocidad de flujo disminuye en dirección del radio del tanque, induciendo así a la sedimentación dinámica de sólidos en la Zona 3 de la unidad mostrada en la **Figura 7**.



**Figura 11.** Contorno de velocidad (corte vertical) en función del tiempo. Velocidad de entrada  $v = 0.77 \text{ m s}^{-1}$

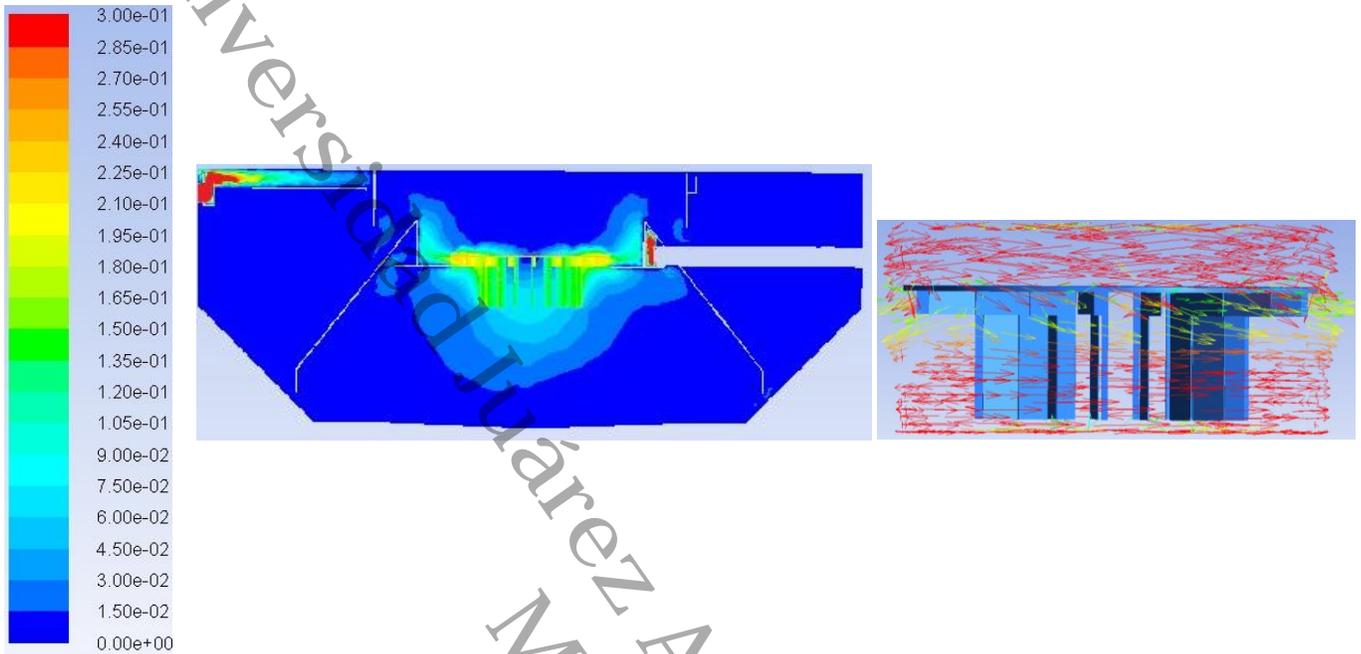


Figura 12. Contorno de velocidad en un corte vertical del tanque clarifloculador a  $t = 20$  s.

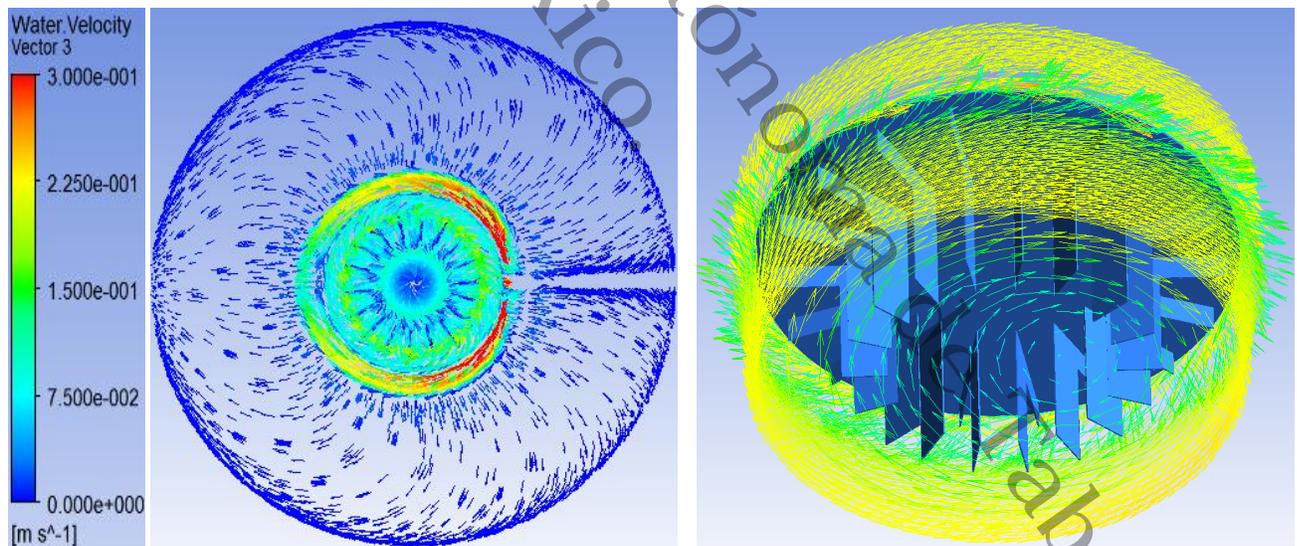
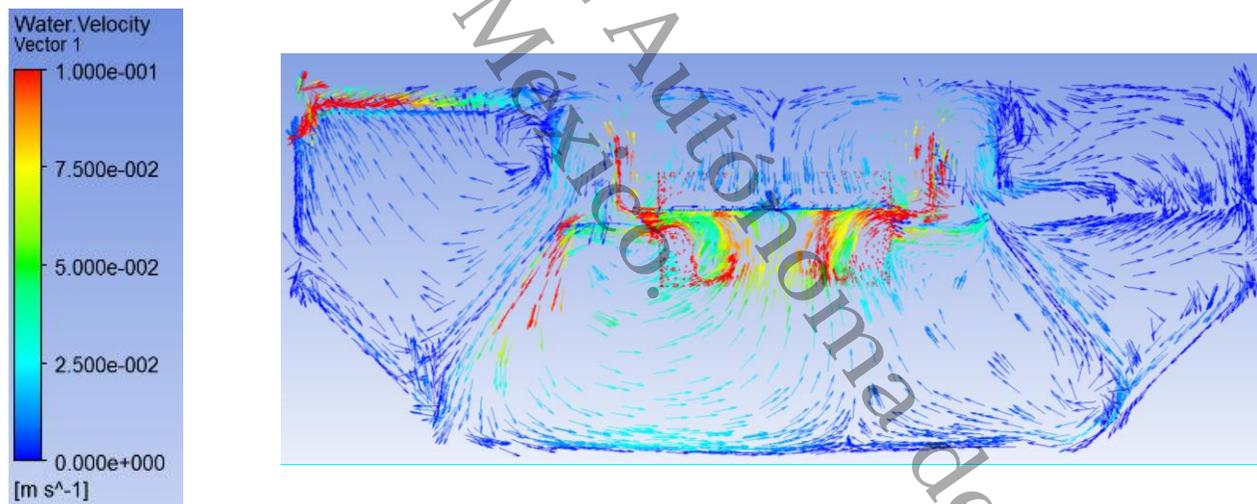


Figura 13. Vectores de velocidad del agua en un corte horizontal, a  $t = 30$  s y a la altura de la paleta ( $h = 0.9$  m sobre la superficie del nivel de agua)



En la **Figura 14** se analiza el comportamiento fluidodinámico del agua utilizando vectores de velocidad; es notable el movimiento del fluido alrededor de la paleta denotada por el encuentro de líneas de corriente en la zona de sedimentación: Las velocidades altas se observan también en la entrada y la salida del tanque y son mayores a  $7.5 \times 10^{-2} \text{ m s}^{-1}$ , esta representación es comparable con la obtenida por Samaras *et al.* (2010) donde la velocidad del agua de entrada crea un impulso hacia abajo en el campo de flujo de la velocidad y la velocidad generada por la paleta crean pequeños vórtices. Puede observarse también turbulencia en las paredes internas y fondo de la zona del rotor-impulsor. Los resultados del gradiente de velocidad se muestran en la **Tabla 5** tomando como referencia el volumen total del tanque y los valores máximos y mínimos de ambas zonas de interfase, fueron calculados utilizando la función en CFD-Post.



**Figura 14.** Vectores de la velocidad del agua en un corte vertical, a  $t = 30 \text{ s}$

### 7.3. Simulaciones empleando el modelo CFD

En esta sección se muestran los resultados obtenidos utilizando el modelo de balance de población, considerando la interacción de ambas fases. En la técnica numérica del balance de población óptima, se consideraron cuatro diferentes tamaños de partículas, los cuales son llamados intervalos de tamaño de partícula. En la **Tabla 5** se mencionan las características



seleccionadas en FLUENT® (ANSYS Inc., USA), además los valores de gradiente de velocidad obtenidos con el software.

**Tabla 5.** Condiciones de operación del sistema y características del modelo y la simulación

| Características de la Fase (Fluido)                                |  |                                   |                      |                      |                       |                      |
|--|--|-----------------------------------|----------------------|----------------------|-----------------------|----------------------|
| • Densidad a 298 K ( $\text{kg m}^{-3}$ )                          |  | 998.2                             |                      |                      |                       |                      |
| • Viscosidad a 298 K ( $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ )          |  | 0.001                             |                      |                      |                       |                      |
| Características de la Fase (sólido)                                |  |                                   |                      |                      |                       |                      |
| • Densidad a 298 K ( $\text{kg m}^{-3}$ )                          |  | 1,600                             |                      |                      |                       |                      |
| • Viscosidad granular a 298 K ( $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ) |  | 0.0001                            |                      |                      |                       |                      |
| Condiciones de operación   |  |                                   |                      |                      |                       |                      |
| • Presión (atm)  |  | 1                                 |                      |                      |                       |                      |
| • Velocidad de entrada del fluido ( $\text{m s}^{-1}$ )            |  | 0.77                              |                      |                      |                       |                      |
| • Turbiedad del flujo de entrada (NTU)                             |  | 50                                |                      |                      |                       |                      |
| • Paleta (rpm)   |  | 3                                 |                      |                      |                       |                      |
| • Fracción volumen de sólidos ( $\varepsilon$ )                    |  | $5 \times 10^{-6}$                |                      |                      |                       |                      |
| • Gradiente de velocidad ( $\text{s}^{-1}$ )                       |  | Zona                              |                      |                      | Fluido                |                      |
|  |  | Mín                               | Máx                  |                      | Mín                   | Máx                  |
| $G_x$  |  | 0.013                             | 21.74                | $G_x$                | $4.47 \times 10^{-5}$ | 24.28                |
| $G_y$  |  | 0.029                             | 19.79                | $G_y$                | $1.87 \times 10^{-5}$ | 14.21                |
| $G_z$  |  | 0.0014                            | 15.04                | $G_z$                | $1.91 \times 10^{-5}$ | 58.80                |
| Características de Modelo  |  |                                   |                      |                      |                       |                      |
| • Estado del modelo  |  | Transitorio                       |                      |                      |                       |                      |
| • Número de fases  |  | 2                                 |                      |                      |                       |                      |
| • Multifásico  |  | Euleriano                         |                      |                      |                       |                      |
| • Modelo turbulento  |  | $k-\varepsilon$ - RNG             |                      |                      |                       |                      |
| • Balance de Población   |  | Discreto                          |                      |                      |                       |                      |
| • Distribución del tamaño de partícula (Zapata del Ángel, 2017)    |  | Intervalo                         | 0                    | 1                    | 2                     | 3                    |
|  |  | $d_p$ (m)                         | $6.9 \times 10^{-4}$ | $3.6 \times 10^{-4}$ | $1.9 \times 10^{-4}$  | $9.0 \times 10^{-5}$ |
|  |  | $x_i$ (-)                         | 0.022                | 0.055                | 0.129                 | 0.795                |
| • Modelo de agregación ( $\text{m}^3 \text{s}^{-1}$ )              |  | Modelo de Luo                     |                      |                      |                       |                      |
| • Modelo de Ruptura-Frecuencia ( $\text{s}^{-1}$ )                 |  | Modelo de Luo                     |                      |                      |                       |                      |
| • Régimen de flujo   |  | Turbulento ( $k-\varepsilon$ RNG) |                      |                      |                       |                      |
| Características Numéricas  |  |                                   |                      |                      |                       |                      |
| • Tipo de resolovedor  |  | Basado en la presión              |                      |                      |                       |                      |
| • Aproximaciones numéricas   |  | Primer orden                      |                      |                      |                       |                      |
| • Método de iniciación   |  | Híbrido                           |                      |                      |                       |                      |
| • Parche (Patch) de la fracción volumétrica                        |  | $1.25 \times 10^{-4}$             |                      |                      |                       |                      |
| • Valor del residual para convergencia                             |  | $1 \times 10^{-3}$                |                      |                      |                       |                      |
| • Tipo de paso   |  | Fijo                              |                      |                      |                       |                      |
| • Tamaño mínimo de paso (s)  |  | 0.0001                            |                      |                      |                       |                      |
| • Tamaño máximo de paso (s)  |  | 0.005                             |                      |                      |                       |                      |
| • Tiempo de simulación (s)   |  | 30                                |                      |                      |                       |                      |



Para demostrar la capacidad del modelo CFD propuesto, los resultados de la simulación pueden compararse con resultados reportados en literaturas, como es el caso de los gradientes de velocidad, el número de Reynolds y la remoción de turbiedad. En la **Tabla 6** se compara los resultados obtenidos contra los reportados por otros investigadores.

**Tabla 6.** Comparación de resultados del modelo CFD con estudios previos

| Fuente                      | Resultados reportados   | Resultados encontrados con el modelo   |
|-----------------------------|---|--|
| Armal y Bhole (1998)        | En clarificación convencional obtiene un porcentaje de 76% con una turbiedad inicial de 125 NTU, además obtienen un gradiente de velocidad que de 13.7 a 47.5 s <sup>-1</sup> en los compartimientos de mezclado.   | Los gradientes de velocidad promedio obtenidos por el modelo fueron en la zona de mezclado es de 18.85 s <sup>-1</sup> y fuera de la zona de mezclado de 32.43 s <sup>-1</sup> . El número de Reynolds máximo en la zona de la paleta es de 411,800 y el porcentaje de remoción de turbiedad fue de 87.4%. |
| Sincero y Sincero (2003)    | Para turbiedades y colores bajo, menciona que se requiere de un rango de gradiente de velocidad de 20-70 s <sup>-1</sup> para una floculación efectiva con un número de Reynolds >10,000  |  |
| Biggs y Lant (2002)         | Con un 94.9% de bondad de ajuste (es decir, los resultados se ajustan a un conjunto de observaciones), ellos obtuvieron un promedio de 19.4 s <sup>-1</sup> . Con ello se promueve una distribución de partículas aceptable. El número de Reynolds no es reportado. |  |
| Robert Alley (2007)         | Para floculación el gradiente de velocidad debe estar entre 30-50 s <sup>-1</sup> y para suspensión de sólidos entre 100-250 s <sup>-1</sup> dependiendo las características de los sólidos.  |  |
| Rashed <i>et al.</i> (2013) | En un tratamiento primario evalúan el gradiente de velocidad dependiendo la profundidad del floculador, con una profundidad de 1.25 a 1.5 el gradiente está en 10 y 20 s <sup>-1</sup>  |  |

### 7.3.1. Efectos de las condiciones de operación

En esta sección se muestran los resultados obtenidos con la interacción de la fase sólida con la fase líquida, donde destacan el comportamiento de la fracción de volumen y la disipación de la energía en el tanque.



En la **Figura 15** se muestra el contorno de la fracción volumen de sólidos. La simulación mostró la disminución de la concentración de sólidos en la parte superior del tanque en función del tiempo, a su vez el efecto de la aglomeración de las partículas suspendidas mediante la sedimentación de las mismas en el fondo del tanque formando un manto de lodo mismo que es característico de este tipo de unidades. La velocidad de los sólidos varía de  $1.22 \times 10^{-4}$  a  $1.51 \times 10^{-4}$  m s<sup>-1</sup>. Para considerar una concentración inicial de sólidos en el tanque, se empleó la opción de *patch* (parche) en ambas zonas (región de contacto y zona de fluido), estableciéndose una turbiedad de 200 NTU, misma que disminuyó durante la simulación en estado transitorio a medida que los fenómenos de dilución (flujo de entrada con turbiedad de 50 NTU) y sedimentación tuvieron efecto sobre la concentración de sólidos. Por su parte, debido a la naturaleza turbulenta y la interacción de fases, fue necesario disminuir los factores de relajación, particularmente de la ecuación de *momentum*, permitiendo así la convergencia numérica del modelo.

En la **Figura 16**, a un tiempo de 30 s, se puede apreciar el efecto del movimiento de la paleta en la fracción volumen, esto es considerando que la paleta en este tiempo simulado ha realizado un giro completo (velocidad angular de 3 rpm). El vórtice formado por este movimiento reduce la concentración de sólidos alrededor de la paleta y bajo estas condiciones la concentración de salida de sólidos equivale a 25.2 NTU (un 87.4% de remoción con respecto a la turbiedad inicial). Estos resultados pueden compararse con los obtenidos por Neamatil *et al.* (2013) quienes estudiaron el rendimiento de un sistema *Accelator* escala piloto en condiciones controladas (temperatura 25°C y pH=7.2), alcanzando remociones de 95% y 92% con una turbiedad inicial de 100 NTU utilizando los agentes coagulantes químicos FeCl<sub>3</sub> y PAC, respectivamente. Por su parte, Samaras *et al.* (2010) encuentra una eficiencia de eliminación de 99% en los sólidos.

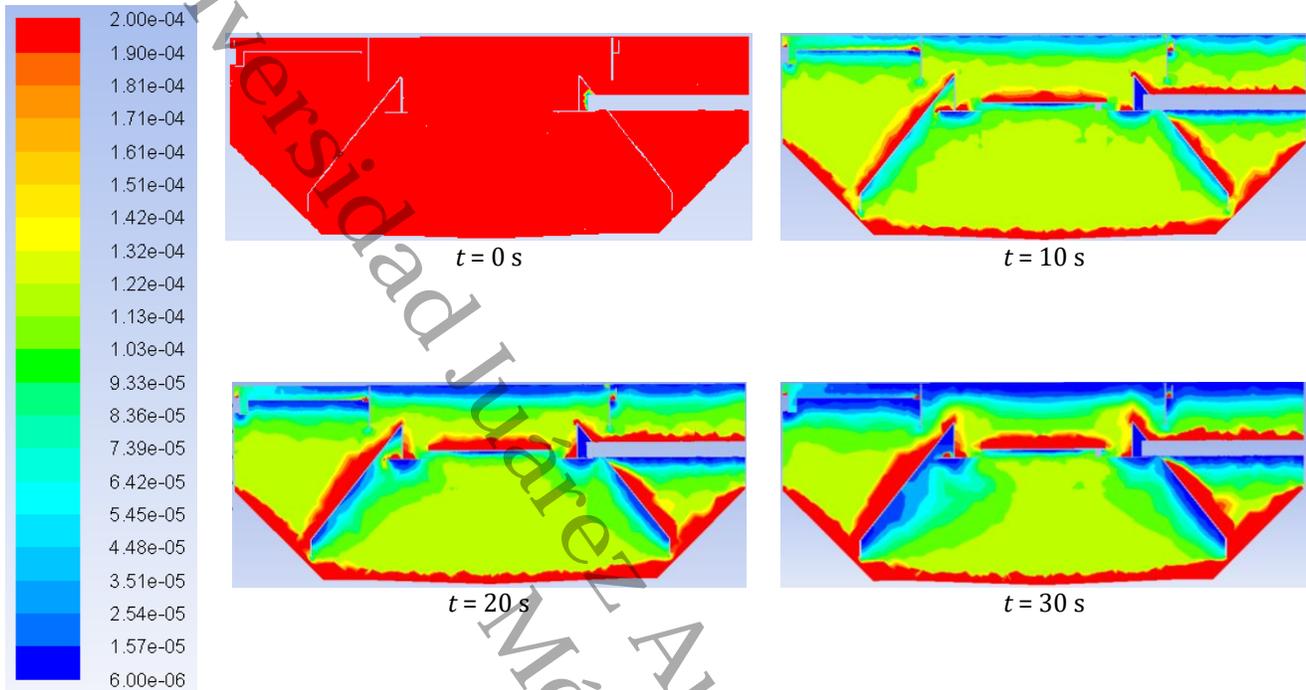


Figura 15. Contorno vertical longitudinal de la fracción volumen de sólidos a diferentes tiempos de simulación, fracción volumétrica inicial de  $\epsilon_s = 2 \times 10^{-4}$  en todo el tanque (aprox. 200 NTU).

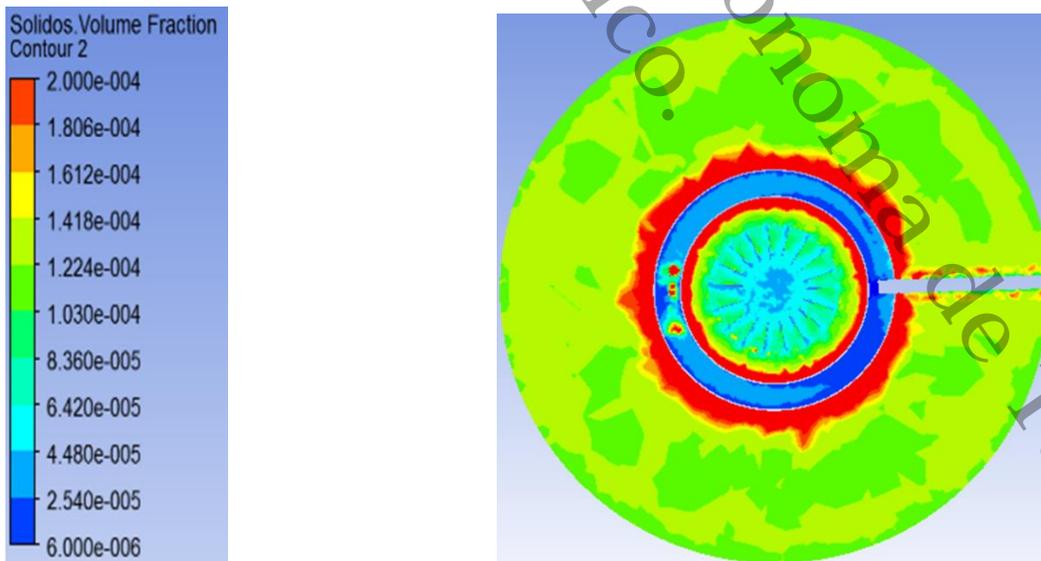
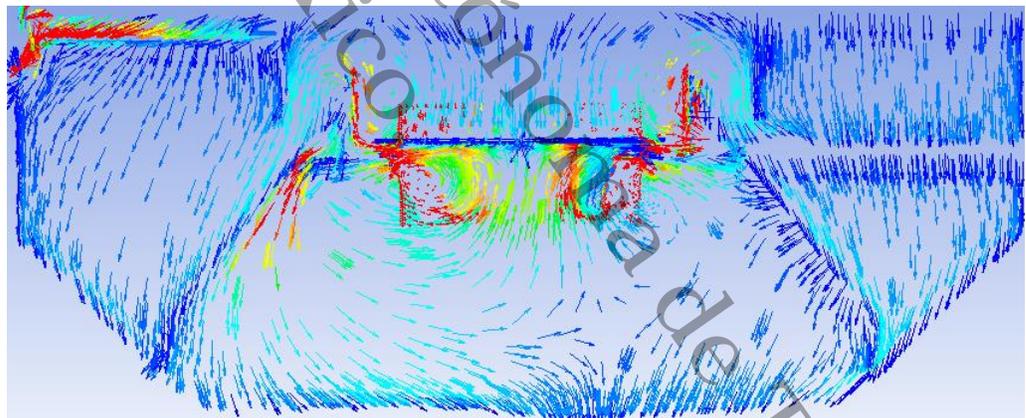
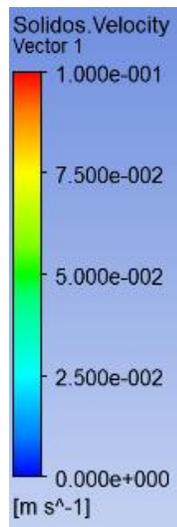


Figura 16. Contorno horizontal de la fracción volumen de sólidos a la altura de la paleta ( $h = 0.9$  m sobre la superficie del nivel de agua).



El movimiento inducido por el mezclador rotacional es de tipo radial, esto es característico de un rotor tipo paleta, en el que el fluido ingresa por la parte inferior del mezclador y es impulsado hacia las paredes de la zona de mezclado. Como resultado, los sólidos suspendidos presentes en el fluido impulsado se desplazan hacia el fondo del tanque, debido a la fuerza de gravedad y a su densidad mayor al agua. En la **Figura 17** se observa el comportamiento de los sólidos en forma de vectores de velocidad, las velocidades más altas son notables en la entrada y en la salida, así como en la zona de influencia de la paleta. Las velocidades encontradas alrededor de la paleta fueron de 0.05 a .075 m s<sup>-1</sup>, mientras en la parte de sedimentación se encontraron velocidades menores (0.025 m s<sup>-1</sup>). Cabe mencionar que el fenómeno de sedimentación por gravedad es significativo y, por otro lado, existen zonas del tanque donde la velocidad no es suficiente para generar alta turbulencia por lo que en estas zonas se lleva a cabo la acumulación de sólidos sedimentados.



**Figura 17.** Vectores de la velocidad de sólidos

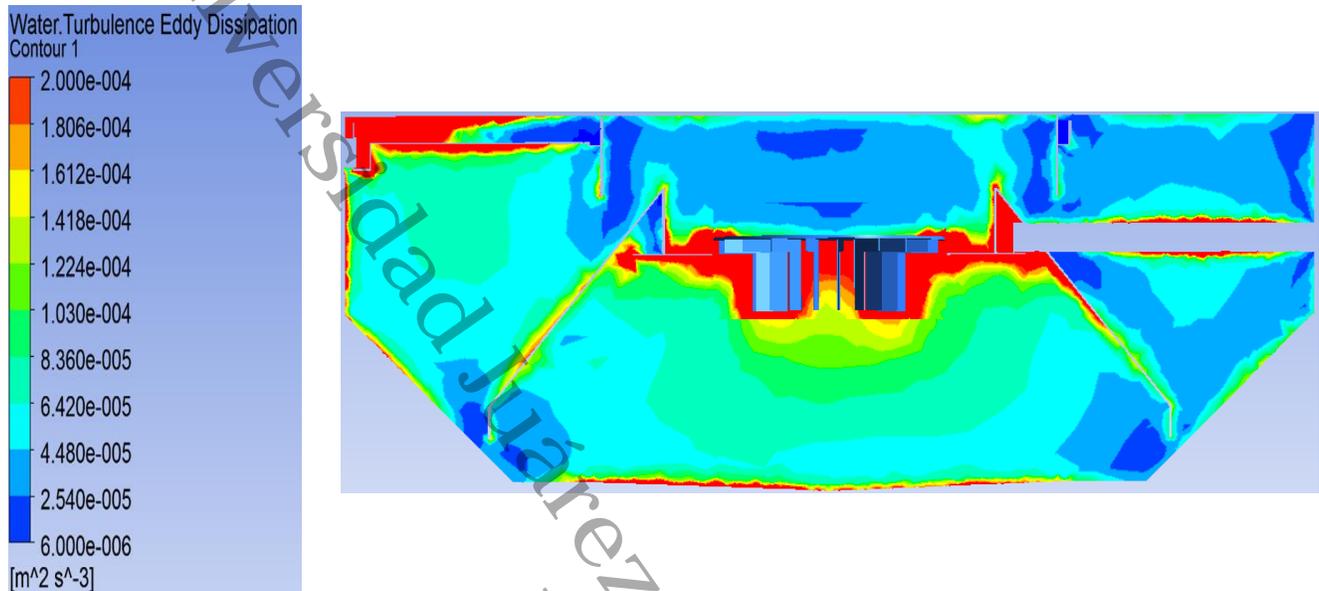


Figura 18. Contorno vertical longitudinal de la energía de disipación

Estos resultados se pueden compararse con los aquellos obtenidos por Samaras *et al.* (2010) quienes estimaron los gradientes de velocidad, la energía de disipación y la eficiencia de remoción de sólidos en un tanque floculador. Al respecto, en la **Figura 18** se muestra cómo se distribuye la energía de disipación turbulenta en el tanque; en particular, alrededor de la paleta se encontraron disipaciones turbulentas mayores a  $2 \times 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$  cuando la paleta gira a 3 rpm, mientras que Samaras y colaboradores reportaron turbulencias de  $5.3 \times 10^{-2} \text{ m}^2 \text{ s}^{-3}$  alrededor de la paleta girando a una velocidad angular de 9 rpm. En la **Figura 19** se observa un corte horizontal a la altura de los canales de salida. Es notable la energía disipada en el canal de salida debido a las mayores velocidades de flujo, así como alrededor de los orificios de los canales. Debe recordarse que la disipación turbulenta es la tasa de rapidez a la cual la energía cinética turbulenta se transforma en energía interna térmica.

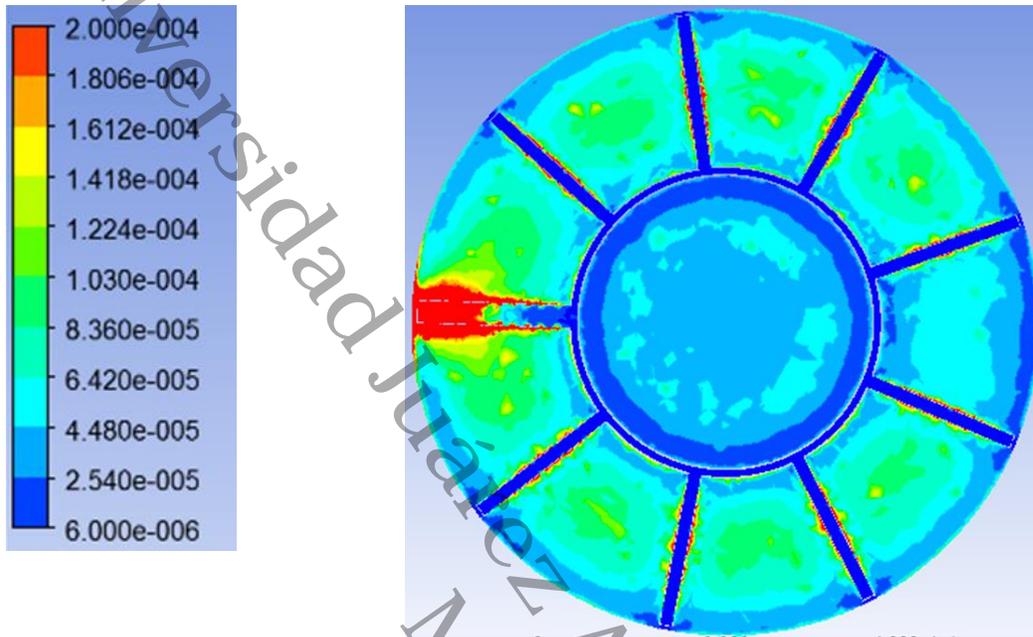


Figura 19. Contorno de la distribución de la tasa de disipación turbulenta ( $\epsilon$ ,  $m^2/s^3$ ) a la altura de los canales

### 7.3.2. Comportamiento de las partículas de la fase sólida

En este apartado se describen los resultados obtenidos por las simulaciones con el modelo de balance de población y el comportamiento de los tamaños de partícula propuestas para este modelo. Como se indicó en el capítulo de Métodos, la distribución inicial de partículas (antes de la floculación) fue reportada por Zapata del Ángel (2017) y se presenta en la **Tabla 5**. De acuerdo a lo anterior, el 2.2% de las partículas son del mayor tamaño promedio (0.69 mm) mientras que las partículas de menor tamaño (0.09 mm) representan el 79.5% del total de partículas.

Sobre el comportamiento de la distribución de la partícula de mayor tamaño dentro del clarifloculador (**Figura 20**), la sedimentación por gravedad es claramente significativa. A los diez segundos de simulación se puede notar un aumento de la concentración de esta partícula en el fondo del tanque, además de cómo se desplaza por las paredes inclinadas de la zona de sedimentación. Entre los 20 y 30 segundos, el efecto de turbulencia generada por la paleta



provoca que la concentración de esta partícula en la zona de recirculación disminuya y en la parte superior del tanque la concentración de la misma disminuye considerablemente. Alrededor de la paleta su fracción volumen varía entre 0.17 y 0.20, mientras que en el fondo de tanque varía entre 0.26 y 0.44.

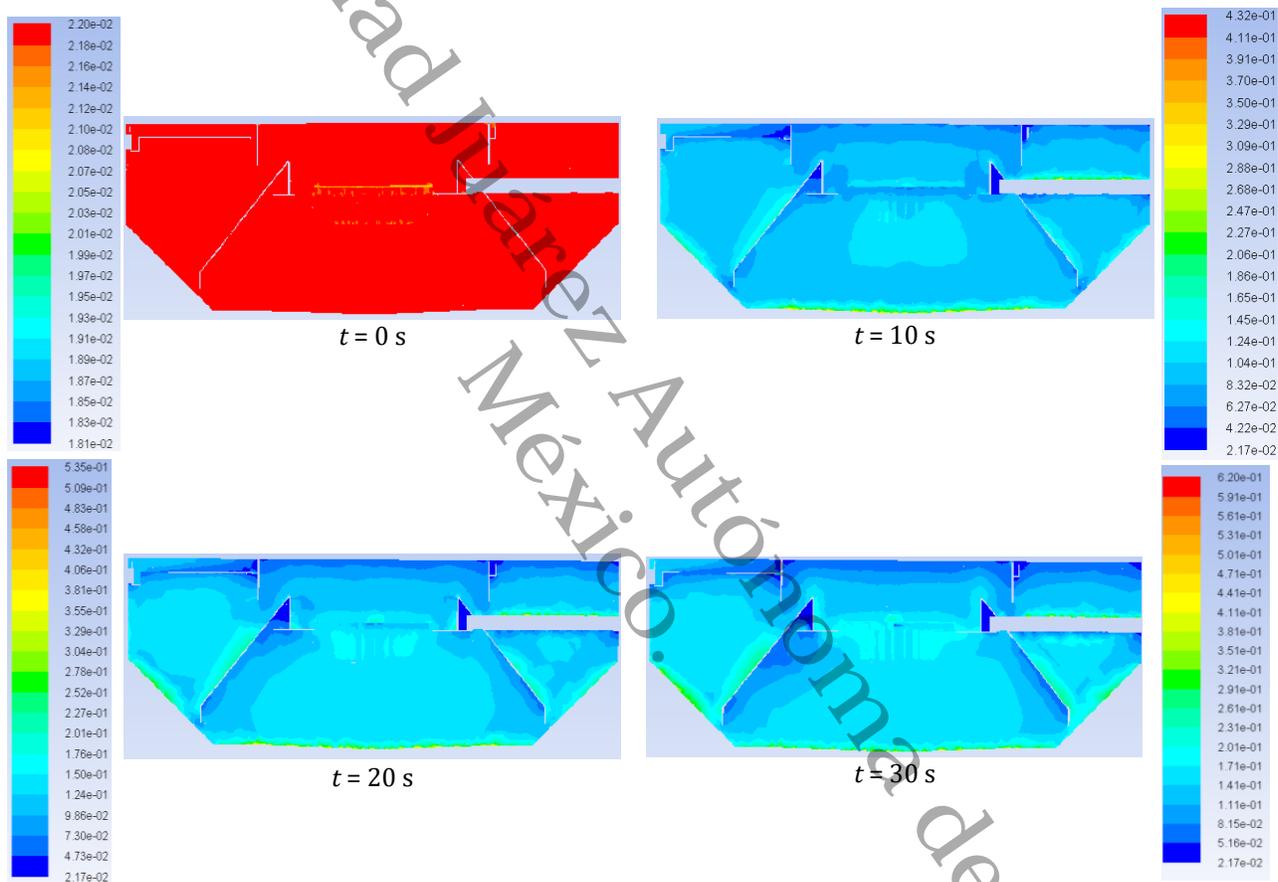


Figura 20. Contorno de fracción volumen de la partícula de mayor tamaño (0.69 mm, Intervalo 0)

Así mismo, en la **Figura 21** se muestra el comportamiento de la partícula con tamaño promedio de 0.36 mm (Intervalo 1). Después de diez segundos de simulación se puede observar sedimentación en el fondo del tanque y una reducción de concentración en la parte superior; después, a los 20 segundos, puede notarse el movimiento alrededor de la paleta, así como zonas de concentración en las paredes y en la zona de sedimentación. A los 30 segundos se observa una reducción de esta partícula en la parte superior del tanque y ligera sedimentación de la misma.



Estas partículas de tamaño promedio de 0.36 mm son arrastradas por la turbulencia generada por la paleta, a diferencia de la partícula de mayor tamaño la cual por su mayor tamaño, posee una mayor velocidad de sedimentación.

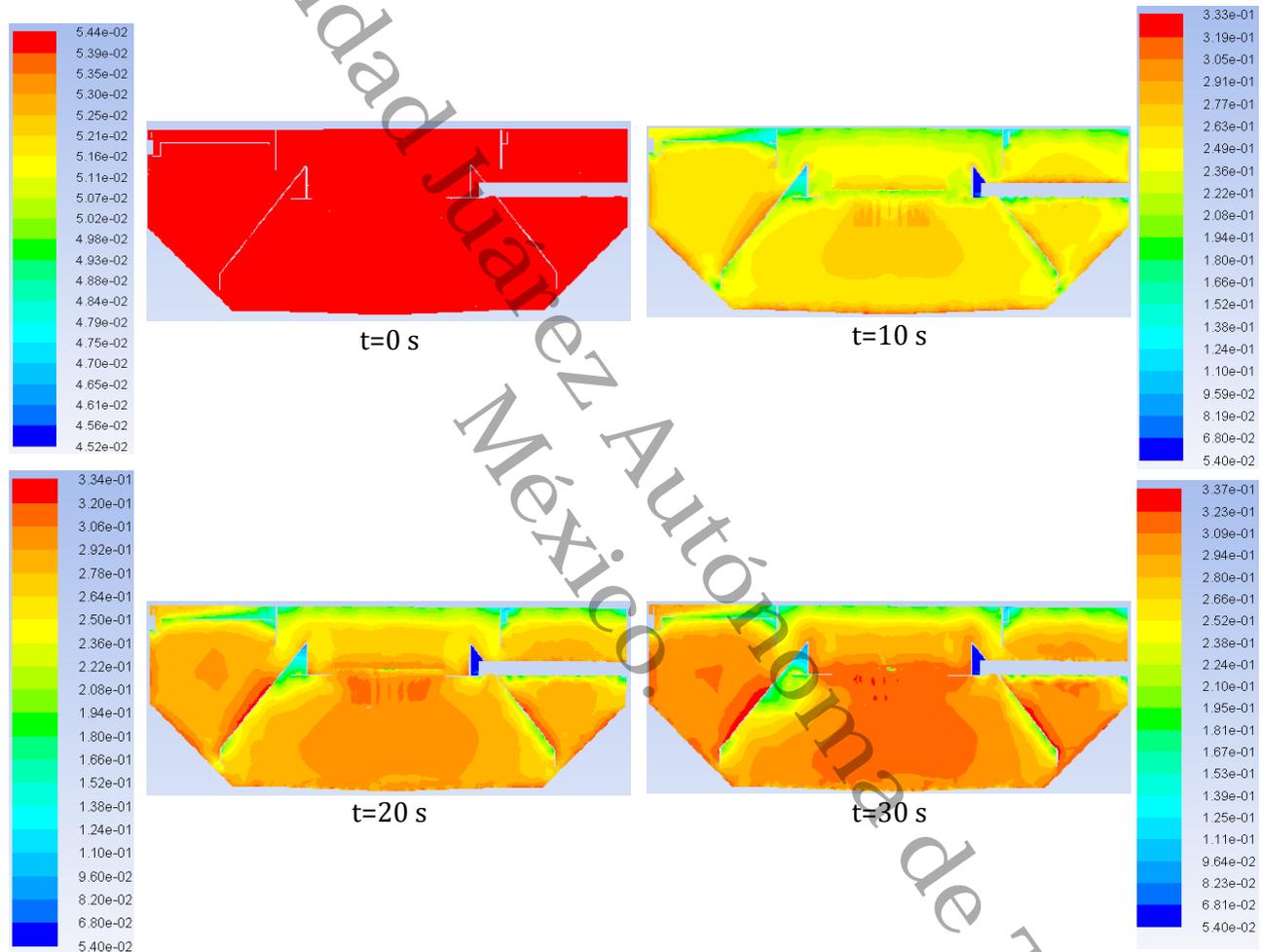


Figura 21. Contorno de fracción volumen de la partícula de diámetro promedio de 0.36 mm (Intervalo 1)

En la **Figura 22** se puede observar la distribución de la partícula con tamaño promedio de 0.19 mm (Intervalo 2). Debido a su menor tamaño, este intervalo de partículas sufre menor efecto de la gravedad por lo que su velocidad de sedimentación es menor. Como consecuencia, estas partículas se concentran en la parte superior del tanque clarifloculador, especialmente en zonas de poca turbulencia. En los primeros segundos de simulación se puede observar un ligero



aumento en las paredes y en el fondo del tanque. Después a los 20 segundos se observa cómo alrededor de la paleta existe poca concentración debido a la turbulencia generada por la velocidad de la paleta; sin embargo, a los 30 segundos se puede observar presencia de esta partícula en el fondo del tanque e incremento en la parte cónica del tanque. Aunque puede existir resuspension de esta partícula debido al movimiento del flujo y el movimiento axial generado por la paleta. A medida que se alcanza el estado estacionario, la fracción volumen de este intervalo de partícula en la parte superior del tanque llega a ser tan alta como 0.358.

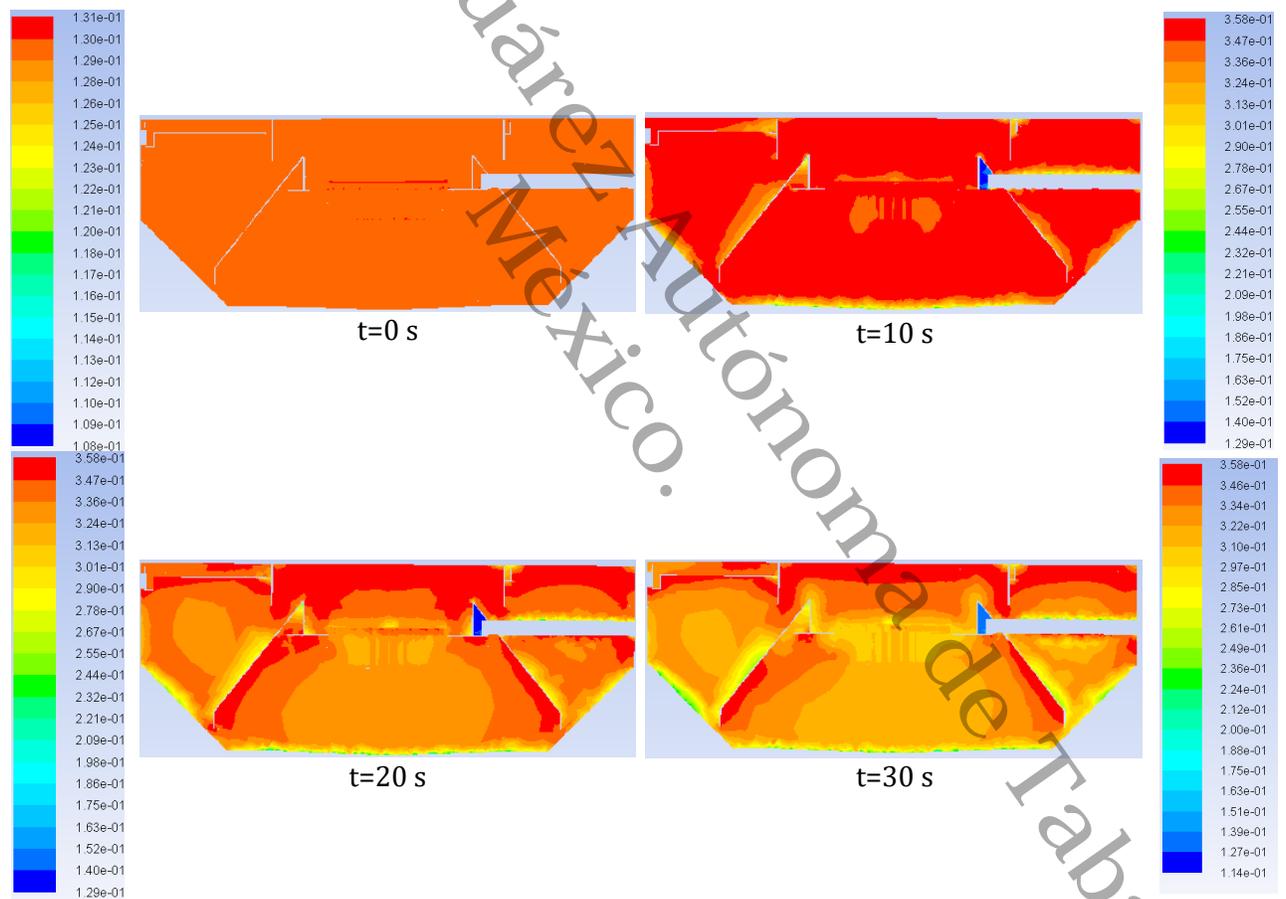


Figura 22. Contorno de fracción volumen de la partícula de diámetro promedio de 0.19 mm (Intervalo 2)

En la **Figura 23** se puede observar la distribución de la partícula con tamaño promedio de 0.09 mm (Intervalo 3). Este intervalo de partícula es la de menor tamaño distribuido en el tanque por



lo que la gravedad produce un efecto poco significativo sobre ellas y se encuentra distribuida en todo el tanque, aunque particularmente se mantiene suspendida en la zona superior del mismo. En los primeros segundos es notable el ligero aumento de concentración en algunas zonas (paredes y fondo del tanque). Sin embargo, la concentración en la parte superior es de 0.427 y 0.357 a los 30 segundos, debido a su tamaño se encuentra en varias zonas del tanque, entre los 20 y 30 segundos alrededor de la paleta su concentración disminuye debido al movimiento de arrastre generado por la paleta.

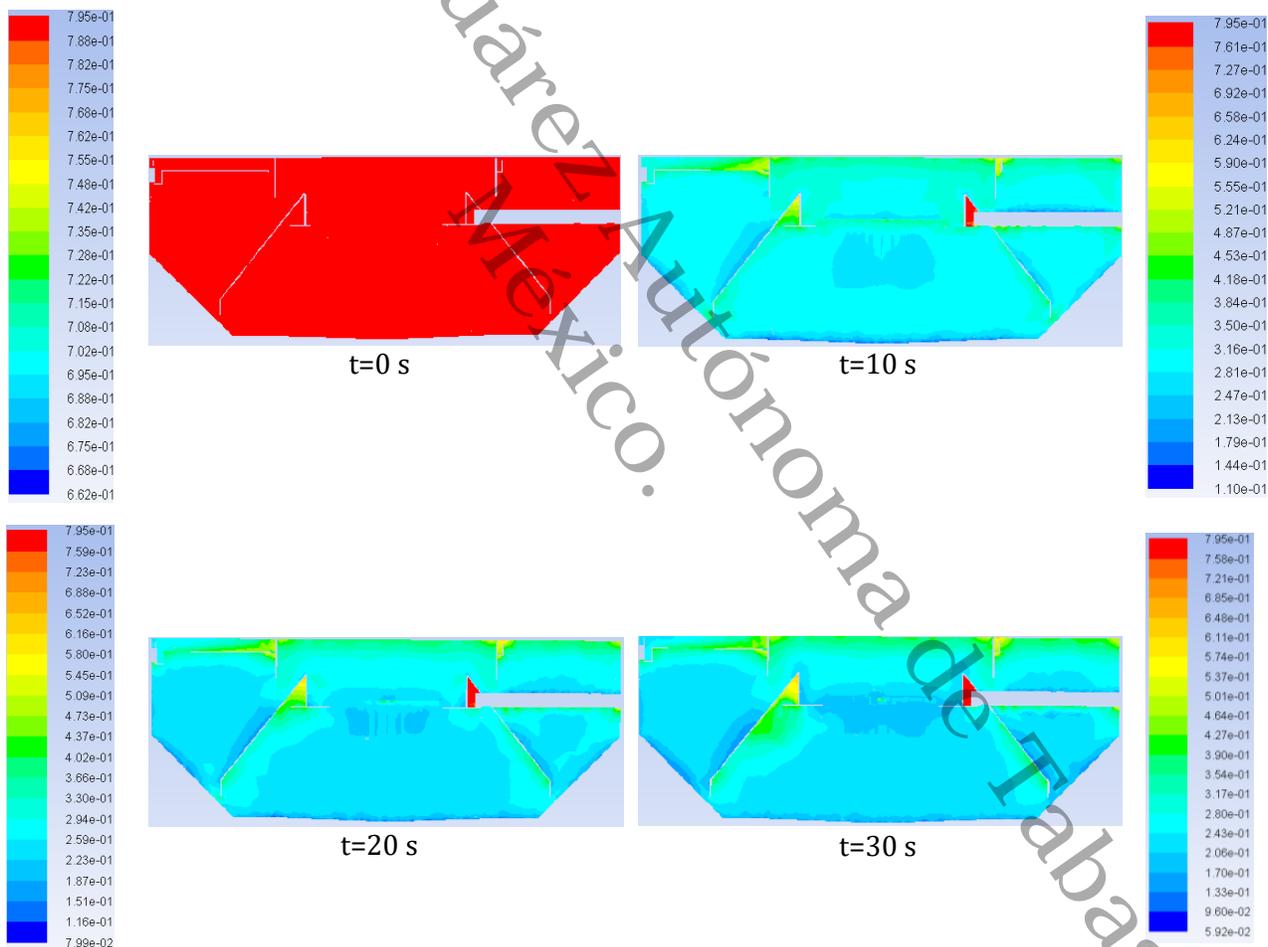


Figura 23. Contorno de fracción volumen de la partícula de menor tamaño (0.09 mm, Intervalo 3)



## 8 Conclusiones y Recomendaciones

### 8.1. Conclusiones

En este trabajo se propone un modelo CFD para clarifloculadores comerciales (tipo capa de contacto de sólidos) empleado en potabilización de agua. Para tal propósito, se diseñó de la geometría tridimensional del clarificador-floculador, se generó una malla numérica y se seleccionaron los modelos matemáticos y los métodos numéricos necesarios para la simulación CFD.

El análisis de dinámica de fluidos por computadora aquí propuesto permite identificar el comportamiento del fluido dentro del tanque, su interacción con las paredes y otros componentes del clarifloculador, los gradientes de velocidades en todo el tanque, las velocidades más altas y bajas durante el proceso, la sedimentación de floculos y la distribución de partículas en función de su tamaño promedio. Considerando los resultados obtenidos, el modelo CFD acoplado a un modelo de Balance de Población logra cumplir con lo establecido en la hipótesis, de acuerdo a la comparación de los resultados el modelo con los reportados por otros autores.

El modelo de balance de población utilizando el método discreto permitió observar el comportamiento de los intervalos de partículas; sin embargo, la convergencia en las ecuaciones es muy lenta. Se observó el efecto del gradiente en el proceso sedimentación coincidiendo con otras investigaciones, en la que un gradiente óptimo promueve una mejor producción de floculos.



De acuerdo con los resultados del análisis de la dinámica de fluidos, es posible establecer condiciones de operación para el desempeño óptimo de una unidad de clarifloculación en el tratamiento de agua potable; sin embargo, debido al excesivo esfuerzo computacional, que se traduce en elevados tiempos de simulación (en el orden de semanas a meses), es muy poco factible comprobar los intervalos de operación de una región óptima para lo que se requeriría de computadoras con mayor capacidad de procesamiento o mayor número de licencias comerciales conectadas en paralelo.

## **8.2. Recomendaciones**

Para mejorar el modelo CFD propuesto se recomienda lo siguiente:

- Realizar simulaciones con una malla más fina y seleccionar diversos métodos de solución del modelo de balance de población; por ejemplo, es probable que el modelo de cuadratura de momento, el cual podría disminuir el gasto computacional debido a una mayor rapidez en convergencia numérica.
- Comparar los resultados del modelo CFD con aquellos provenientes del monitoreo de un clarificador de dimensiones y condiciones de operación similares; es decir, obtener una base de datos sobre el comportamiento de la turbiedad inicial y final del tanque, el flujo de entrada, entre otros.



## 9

## Referencias

- Al-Sammarrae M, Chan A (2009) Large-eddy simulations of particle sedimentation in a longitudinal sedimentation basin of a water treatment plant. Part 2: The effects of baffles, *Chemical Engineering Journal*, 152: 315–321.
- Alley Roberts E. (2007) Water Quality Control. McGraw-Hill Handbook. Second Edition.
- Andía Y (2000) *Tratamiento de agua: coagulación y floculación*. Documento técnico. Planta de Tratamiento de Agua Sedapal, Lima, Perú.
- ANSYS-Fluent (2013a). ANSYS Academic Research, Release 15, Fluent User's Guide.
- ANSYS-Fluent (2013b). Population Balance Module Manual. ANSYS Academic Research, Release 15, Fluent User's Guide. 275 Technology Drive. Canonsburg, PA.
- Arboleda J (2000) *Teoría y práctica de la purificación del agua*, Tercera edición. McGraw Hill. Santa Fe. España.
- Armal SD, Bhole AG (1998) Perihelal Inlet tapered velocity gradient flocculator. *Indian Journal of Engineering and Materials Sciences*. Vol. 5. Pág. 240-248.
- Attarakih M, Hlawitschka MW, Abu-Khader M, Al-Zyod S, Hans-Jörg B (2015) CFD-population balance modeling and simulation of coupled hydrodynamics and mass transfer in liquid extraction columns, *Applied Mathematical Modelling*, 39: 5105–5120.



- Baukal CE, Gershtein V, Li XJ (2000) *Computational Fluid Dynamics in Industrial Combustion*, CRC Press, 1<sup>st</sup> ed., United States of America.
- Biggs CA, Lant PA (2002) Modelling activated sludge flocculation using population balances, *Powder Technology*, 124: 201– 211.
- Bratby J (2008). *Coagulation and Flocculation in water and wastewater treatment*: IWA Publishing.
- Bridgeman J, Jefferson B, Parsons SA (2010) The development and application of CFD models for water treatment flocculators. *Advances in Engineering Software*, 41: 99–109.
- Burt DJ, Ganeshalingam J (2005) *Design and optimisation of final Clarifier performance with CFD modelling*, Presented at the CIWEM Chartered Institution of Water and Environmental Management/Aqua Enviro-joint conference Design and Operation of Activated Sludge Plants, 19th April, Wakefield, United Kingdom.
- Cartwright P (2009) Tratamiento y reuso del agua en aplicaciones comerciales e industriales. *Agua Latinoamérica*, 9 (1): 20–24.
- Colic M, Morse D, Morse W, Miller JD (2005) *New developments in mixing, flocculation and flotation for industrial wastewater pretreatment and municipal wastewater treatment*. WEFTEC 2005, Washington DC, USA.
- CONAGUA, Comisión Nacional del Agua (2014) *Inventario Nacional de Plantas Municipales de Potabilización y de Tratamiento de Aguas Residuales en Operación*: diciembre 2014. CONAGUA, Ciudad de México, México.
- Crittenden JC, Trussell RR, Hand DW, Howe KJ, Tchobanoglous G (2005) *Water Treatment: Principles and Design*. 2<sup>nd</sup> Ed., John Wiley and Sons. United States of America.



- de Clercq J, Devisscher M, Boonen I, Vanrolleghem PA, Defrancq J (2003) A new one-dimensional clarifier model – verification using full-scale experimental data, *Water Science and Technology*, 47(12): 105 – 112.
- Diehl S, Jepsson U (1998) A model of the settler coupled to the biological reactor, *Water Research*, 32(2): 331 – 342.
- Dubbelboer A, Janssen J, Hoogland H, Mudaliar A, Maindarkar S, Zondervan E, Meuldijk J, (2014) Population balances combined with Computational Fluid Dynamics: A modeling approach for dispersive mixing in a high-pressure homogenizer, *Chemical Engineering Science*, 117: 376–388.
- Flamant O, Cockx A, Guimet V, Doquang Z (2004) Experimental analysis and Simulation of settling process, *Process Safety and Environmental Protection*, 82(B4): 312–318.
- Gallardo-Correa DI (2011) *Análisis por Fluidodinámica Computacional de un Prototipo Experimental de Lecho Fluidizado de Incineración de Residuos Sólidos Lignocelulósicos*. Tesis de Maestría en Ciencias Ambientales. Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, México.
- Ghafari S, Abdul H, Hasnain M and Akbar A (2008) Application of response surface methodology (RSM) to optimize coagulation–flocculation treatment of leachate using poly-aluminum chloride (PAC) and alum. *Journal of Hazardous Materials*, 163: 650–656.
- Gheshlaghi ME, Goharrizi AS, Shahrivar AA (2013) Simulation of a semi-industrial pilot plant thickener using CFD approach. *International Journal of Mining Science and Technology*, 23: 63–68.
- Giokas DL, Kim Y, Paraskevas PA, Paleologos EK, Lekkas TD (2002) A simple empirical model for activated sludge thickening in secondary clarifiers, *Water Research*, 36: 3245–3252.



- Goula AM, Kostoglou M, Karapantsios TD, Zouboulis AI (2008) A CFD methodology for the design of sedimentation tanks in potable water treatment Case study: The influence of a feed flow control baffle. *Chemical Engineering Journal*, 140: 110–121.
- Grijpspeerdt K, Vanrolleghem P, Verstreete W (1995) Selection of one-dimensional sedimentation: models for on-line use, *Water Science and Technology*, 31(2): 193–204.
- Heath AR, Koh PTL (2003) Combined population balance and CFD modelling of particle aggregation by polymeric flocculant. *Third International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries* CSIRO, Melbourne, Australia.
- Holenda B, Pásztor I, Kárpáti Á, Rédey Á (2006) Comparison of one-dimensional secondary settling tank Models, *E-Water, Official Publication of the European Water Association*.  
Recurso electrónico: [www.ewaonline.de](http://www.ewaonline.de).
- INEGI, Instituto Nacional de Geografía y Estadística (2015) *Censo de Población y Vivienda*, recurso electrónico: [www.inegi.gob.mx](http://www.inegi.gob.mx), fecha de última consulta: 12 de junio de 2016.
- Infilco (2009) ACCELATOR® Clarifier/Softener. Infilco Degremont Technologies. Technical Report Number SEP03202EN-V2-03/2009, Richmond, United States of America.
- Matko T, Fawcett N, Sharp A, Stephenson T (1996) Recent Progress in the Numerical Modelling of Wastewater Sedimentation Tanks, *Trans IChemE Part B*, 74: 245–258.
- Metcalf y Eddy (1996). *Ingeniería de Aguas Residuales, Tratamiento y Reutilización*. McGraw Hill, México.
- Neamatil B, Cholichéh MH, Farrokhzadeh H, Hajian M, Khanjani N, (2013) Evaluating the Performance of Accelator Clarifier in Eliminating Turbidity by Using Chemical Coagulants, *American-Eurasian Journal of Agricultural and Environmental Sciences*, 13 (4): 565–569.



- Nopens I (2005) *Modelling the activated sludge flocculation process: a population balance approach*. Doctoral dissertation. Ghent University, Faculty of Bioscience Engineering, Belgium.
- Nopens I (2007) *Improved Prediction of Effluent Suspended Solids in Clarifiers Through Integration of a Population Balance Model and a CFD Model*. PS-IWA: Particle Separation, Toulouse, France.
- Ozer A (1994) Simple equations to express settling column data, *Journal of Environmental Engineering*, 120(3): 677–682.
- Park N, Kim S, Jung N (2008) Remodeling a Sedimentation Basin Outlet Structure for Improving Performance, *Environmental Engineering Science*, 25(6): 887–894.
- Paschedag, AR. (2004) Modeling of Mixing and Precipitation using CFD and Population Balance, *Chemical Engineering and Technology*, 27(3): 232–236.
- Plósz BG, Weiss M, Printemps C, Essemiani K, Meinhold J (2007) One-dimensional modelling of the secondary clarifier factors affecting simulation in the clarification zone and the assessment of the thickening flow dependence, *Water Research*, 41: 3359–3371.
- Prat OP and Ducoste JJ. (2007) Simulation of Flocculation in Stirred Vessels. Lagrangian Versus Eulerian, *Chemical Engineering Research and Design*, 85 (2): 207–219.
- Rashed Al-Alm GI, El-Morsy A, Ayoub M (2013) Hydraulic Clari-flocculation for Chemically enhanced Primary Treatment of Sewage. *International Water Technology Journal, IWTJ*. Vol. 3. Issue 2.
- Romero JA (2006). *Purificación del agua*. Editorial Escuela Colombiana de Ingeniería. Bogotá, Colombia.



- Richter C y Canepa L. (1992). *Criterios de diseño para floculadores y decantadores. Tratamiento filtración rápida. Manual V: Criterios de diseño*. Centro Panamericano de Ingeniería Sanitaria y Ciencias del Ambiente (CEPIS), Lima, Perú.
- Samaras K, Zouboulis A, Karapantsios T, Kostoglou M (2010) A CFD-based simulation study of a large scale flocculation tank for potable water treatment, *Chemical Engineering Journal* 162: 208–216.
- Sansalone J, Lin H, Ying G (2009) Experimental and Field Studies of Type I Settling for Particulate Matter Transported by Urban Runoff, *Journal of Environmental Engineering*, 135(10): 953–963.
- SAS, Sistema de Agua y Saneamiento (2012) *Planta Potabilizadora de Dos Montes*. H, Ayuntamiento del Municipio de Centro y Grupo Juabet S.A. de C.V., Tabasco, México.
- Sincero AP, Sincero GA (2003) *Physical-chemical Treatment of Water and Wastewater*, CRC Press, First Ed., Boca Raton, USA.
- Somasundaran PY, Runkana V. (2003) Modeling flocculation of colloidal mineral suspensions using population balances. *International Journal of Mineral Processing* 72: 33–55.
- Stamou AI, Theodoridis G, Xanthopoulos K (2009) Design of Secondary Settling Tanks Using a CFD Model, *Journal of Environmental Engineering*, 135 (7): 551–561.
- Takács I, Patry GG, Nolasco D (1991) A Dynamic Model of the Clarification-Thickening Process. *Water Research*, 25(10): 1263–1271.
- Tamayol A, Firoozabadi B, Ashjari MA (2010) Hydrodynamics of Secondary Settling Tanks and Increasing Their Performance Using Baffles, *Journal of Environmental Engineering*, 136(1): 32–39.



Wodołażski A. (2017) CFD-Population Balance Modelling of Catalyst Particles in Solid-Liquid Rushton Turbine-Agitated Tank Reactor in scale-up Study, *Powder Technology*, 313: 312–322.

Zhang D, Li S, Lu P, Zhang T, Xu D (2006) A method for characterizing the complete settling process of activated sludge, *Water Research*, 40: 2637–2644.

Zapata del Ángel M (2017) *Evaluación Experimental y Análisis de Dinámica de Fluidos Computacional de la Coagulación-Floculación en Tratamiento de Agua*. Tesis de Licenciatura en Ingeniería Ambiental. Universidad Juárez Autónoma de Tabasco. México.

Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.  
México.