



UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE LA MIXTECA

INSTITUTO DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS

MODELADO COMPUTACIONAL DE UN FOTOBIORREACTOR EN MODO
CONTINUO MEDIANTE ELEMENTO FINITO PARA EL CRECIMIENTO DE UNA
MICROALGA USADA PARA GENERAR BIOCOMBUSTIBLE

TESIS

PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO EN FÍSICA APLICADA

PRESENTA:

MIGUEL DIVANNI VAZQUEZ RAYMUNDO

DIRECTOR:

M. C. MAXVELL GUSTAVO JIMÉNEZ ESCAMILLA

CODIRECTOR:

ING. BRENDA IRIS GUADALUPE LICONA MORÁN

Heroica Ciudad de Huajuapán de León Oaxaca, Febrero 2019

Agradecimientos:

A mi familia quienes siempre me apoyaron aun estando lejos de casa durante todo este tiempo.

A la Universidad Tecnológica de la Mixteca, la Jefatura de Ing. en Física Aplicada y profesores por su aportación a mi formación profesional.

A la Universidad del Mar y a la Dra. Darla Alejandra Torres Ariño por su apoyo brindado, por todas sus enseñanzas y aportes para la realización de este trabajo.

A mis asesores M.C. Maxvel G. Jiménez Escamilla e Ing. Brenda Iris Licona Morán, por su apoyo y por mostrarme el camino hacia donde enfocar mis conocimientos, a la Ing. Irma González Cruz y la Q.F.B. Griselda Bravo Villa de quienes también tuve soporte de para la realización de este trabajo.

A mis sinodales M.C. Corina Cisneros Cisneros, Dr. Álvaro Jesús Mendoza Jasso y L.F.M Gustavo Jiménez Santana, por sus observaciones y aportaciones en sus distintos campos para la revisión y mejoramiento de éste trabajo.

A Todos Gracias

Contenido

Introducción	8
Objetivo	9
Objetivo general:.....	9
Objetivos específicos:.....	9
1. Biocombustibles	10
1.1 Primera y segunda generación de biocombustibles	10
1.2 Tercera generación de biocombustibles	11
2. Las microalgas	12
2.1 Eficiencia microalgas	13
2.2 Proceso de cultivo y producción de Microalgas.....	13
2.3 Metabolismo, crecimiento y crecimiento autótrofo.....	15
3. Requerimientos de las microalgas	17
3.1 Luz	17
3.2 CO ₂	18
3.3 Temperatura.....	19
3.4 pH	20
4. Elección de especie de microalga.....	21
4.1 Aspectos básicos	21
4.2 Nannochloropsis Oculata	21
5. Cultivo microalgas	24
5.1 Tipos de Fotobiorreactores	24
5.1.1 Pista abierta.....	24
5.1.2 Columna de aireación.....	25
5.1.3 Placa plana	25
5.1.4 Tubular	26
5.2 Tipos de cultivos	27
5.3 Modelado del fotobiorreactor	27
5.3.1 Determinando producción máxima de biomasa.....	28
5.4 Criterio biológico de crecimiento.....	28
5.5 Balance flujo másico en el fotobiorreactor	29
6. Mecánica de Fluidos.....	32
6.1 Descripción Euleriana y Lagrangiana.....	32

6.2 Características de un fluido.....	33
6.2.1 Viscosidad.....	33
6.2.2 Número de Reynolds.....	34
6.2.3 Volumen de control.....	34
6.2.4 Fuerzas sobre un volumen de control.....	35
6.3 Ecuaciones de conservación.....	36
6.3.1 Conservación de la masa: ecuación de continuidad	36
6.3.2 Conservación del momento	37
6.4 Ecuación de Navier Stokes	39
7. Método del elemento finito.....	42
7.1 Características principales:.....	42
7.2 Método de Residuos Ponderados	43
7.3 Discretización espacial del dominio	44
7.3.1 Elemento	44
7.3.2 Nodo.....	44
7.4 Formulación débil y derivación de las ecuaciones de elemento Finito	44
7.5 Aproximaciones de la solución.....	47
8. Dinámica de fluidos computacional	49
8.1 Método de Volumen finito.....	49
8.2 Desarrollo de flujo estacionario	50
8.3 Discretización del sistema	52
8.4 Solver Basado en presión	53
8.5 Residuales.....	55
9. Modelos Físicos en ANSYS Fluent®	56
9.1 Modelo Volume of Fluid (VOF).....	56
9.1.1 Conservación de masa.....	56
9.1.2 Conservación de momento	57
9.2 Modelo Mixture	57
9.2.1 Ecuación de Continuidad.....	58
9.2.2 Conservación de Momento	58
9.3 Modelo Eulerian	59
9.3.1 Ecuación de continuidad	60
9.3.2 Ecuación de momento	60

9.4 Resumen modelos multifase	61
9.4.1 Modelo VOF.....	61
9.4.2 Modelo Mixture	61
9.4.3 Modelo Eulerian	61
9.4.4 Selección del modelo Multifase	61
9.5 Fuerza Drag	62
9.6 Fuerza Lift.....	63
9.7 Modelación de la turbulencia	63
9.7.1 Escala de longitud temporal:.....	64
9.7.2 Escala de longitud espacial:.....	65
9.7.3 Intensidad turbulenta.....	65
9.7.4 Modelo $k - \varepsilon$	66
9.7.5 Modelo $k - \varepsilon$ RNG	66
9.7.6 Modelo $k - \omega$ SST.....	67
9.8 Discrete Phase Model (DPM)	68
9.9 Tipos de elementos	69
9.10 Calidad de la malla	70
10. Metodología del Cultivo de Microalga	72
10.1 Cultivo de la microalga	72
10.2 Cinéticas de crecimiento	74
10.2.1 Conteo celular	74
10.2.2 Densidad óptica.....	75
10.2.3 Peso seco.....	76
10.2.4 pH	77
11. Resultados (cultivo microalga)	78
11.1 Recuento celular	78
11.2 Densidad óptica.....	79
11.3 Peso seco.....	81
11.4 pH	81
11.5 Cálculo de μ_a	82
12. Metodología de Simulación en ANSYS Fluent®	85
12.1 Modelos físicos.....	85
12.2 Modelado y Mallado	86

12.3 Consideraciones geométricas	87
12.4 Convergencia de los resultados	88
12.5 Exactitud y Tolerancia máxima.....	88
12.6 Comprobación de resultados	89
12.7 Parámetros de optimización	91
12.7.1 Zonas muertas.....	92
12.7.2 Turbulencia.....	92
12.7.3 Tiempo de circulación promedio	92
13. Análisis de Resultados (Simulación)	94
13.1 Modelado sistema UMAR	94
13.1.1 Velocidades	94
13.1.2 Intensidad turbulenta.....	95
13.1.3 Zonas muertas.....	95
13.3.4 Observaciones.....	96
13.2 Columna de aireación.....	97
13.2.1 Velocidad dentro del fotobiorreactor	97
13.2.2 Intensidad turbulenta.....	99
13.2.3 Zonas muertas.....	100
13.3 Placa plana	102
13.3.1 Velocidad dentro del fotobiorreactor	102
13.3.2 Intensidad turbulenta.....	104
13.3.3 Zonas muertas.....	105
13.4 Diferencias de los flujos debido a la topología	107
13.5 Comparación de los modelos	107
13.5 Tiempo de circulación promedio	108
13.6 Comparación del Fotobiorreactor optimizado.....	110
Conclusión	112
Trabajos a futuro	113
Apéndice a.....	114
Cámara de Neubauer	114
Apéndice b.....	118
Preparación filtros.....	118
Consideraciones para la realización de las mediciones	118

Filtrado de la biomasa	118
Medición de los filtros.....	119
Referencias.....	120

Introducción

El ritmo de vida actual del ser humano demanda el uso de una gran cantidad de energía, lo que se refleja en la necesidad del incremento en la producción de energéticos. (EIA, 2017) La fuente principal de esta energía proviene de los combustibles fósiles (petróleo y gas natural), sin embargo, el uso de estos recursos es insostenible debido su agotamiento con el paso de los años, y más aún, con el incremento de su uso en la industrialización de los países.

Uno de los productos del uso de los combustibles fósiles es el CO₂ el cual es uno de los principales gases de efecto invernadero (IPCC, 2018). Además, la quema de estos combustibles también libera otros compuestos nocivos para la salud humana y medioambiental tales como: SO₂, NO_x, Pb (Zhao B. et al. 2014, CMNUCC Río de Janeiro 1992, Protocolo de Kyoto 1998, PNUMA, EIA, IPCC). Por ello se están considerando fuentes de generación de energía alterna, tal como la energía solar, eólica, nuclear, biomasa, etc. (EIA, 2017). La utilización de biomasa a partir de cultivos para la producción de energía ha ganado importancia, ya que tienen la capacidad de aprovechar el CO₂ en el aire como nutriente y así evitar el daño causado al medioambiente debido a este compuesto.

Una propuesta inicial es generar biocombustibles a partir de cultivos como la soya, canola, coco, maíz y caña de azúcar, entre otros. (Simionato D. et al. 2013, Brennan L. et al. 2010, Huang G. et al. 2010, Chisti Y. 2007). Sin embargo, el uso de éstos es poco viable debido a que son usados como alimentos, además de que implica un gran uso de tierras para cultivo y agua potable, lo que hace a esta propuesta poco factible (Il-hwan S. et al. 2012, Brennan L. et al. 2010, Huang G. et al. 2010, Chisti Y. 2007).

En los últimos años se han realizado estudios sobre otro tipo de cultivos; las microalgas, ya que tienen un gran potencial para la obtención de biocombustible. El avance en la investigación de los distintos campos que contribuyen al desarrollo de este nuevo tipo de biocombustible ha permitido crecer a compañías como Renewable Algal Energy®, Live fuels® y Algenol biotech® ofreciendo biocombustibles con una producción de 8,000 galones de combustible líquido por acre al año en el caso de Algenol biotech®. (Greentechmedia, Algenol 2017)

En la estructura celular interna de la microalga se encuentran lípidos los cuales son transformados mediante procesos fisicoquímicos en biocombustible (Janaun J. et al. 2010, Demirbas A. 2010, Huang G. et al. 2010, Chisti Y. 2007, Sheehan J. et al. 1998). Dependiendo de la especie de microalga, ésta puede contener diversos tipos de lípidos, carbohidratos, y aceites complejos. Algunas especies tales como: *Arthrospira platensis*, *Arthrospiraplatensis*, *Nannochloropsis sp*, *Chlorococcum sp*, *Rsemsu*, *Chlorella vulgaris*, contienen de un 20% a 50% de biomasa para ser convertida en biocombustible (Kleinová A. 2012).

Los sistemas de producción de microalga aún son poco eficientes, por tanto, se sigue haciendo investigación sobre cómo mejorar este proceso. Para poder optimizar la producción de biomasa a partir del cultivo de microalgas se propondrá el diseño de un nuevo fotobiorreactor mediante la optimización por mecánica de fluidos computacional maximizando el aprovechamiento de los nutrientes en el desarrollo del cultivo.

Objetivo

Objetivo general:

Desarrollar el modelo computacional de un fotobiorreactor en modo continuo que maximice el crecimiento de una microalga utilizada para producir biodiesel, mediante un aprovechamiento de nutrientes a partir de la hidrodinámica dentro del fotobiorreactor.

Objetivos específicos:

- Investigar diferentes especies de microalgas para su modelado en un fotobiorreactor.
- Seleccionar el medio de crecimiento adecuado para la microalga elegida en modo batch y así obtener su constante de crecimiento μ_a
- Simular la hidrodinámica en distintos fotobiorreactores a analizar mediante Fluent de ANSYS[®] sin considerar análisis termodinámico o químico.
- Simular la hidrodinámica del fotobiorreactor y encontrar el diseño más adecuado para el crecimiento de microalgas en base a parámetros de intensidad turbulenta y velocidad de flujos en el fotobiorreactor.

1. Biocombustibles

Los biocombustibles son combustibles (sólidos, líquidos o gaseosos) derivados de materia orgánica. Estos se clasifican en biocombustibles primarios y biocombustibles secundarios, ejemplos de biocombustibles naturales son desechos animales, gas natural debido a descomposición de materia orgánica. (Firoz A. et al. 2012)

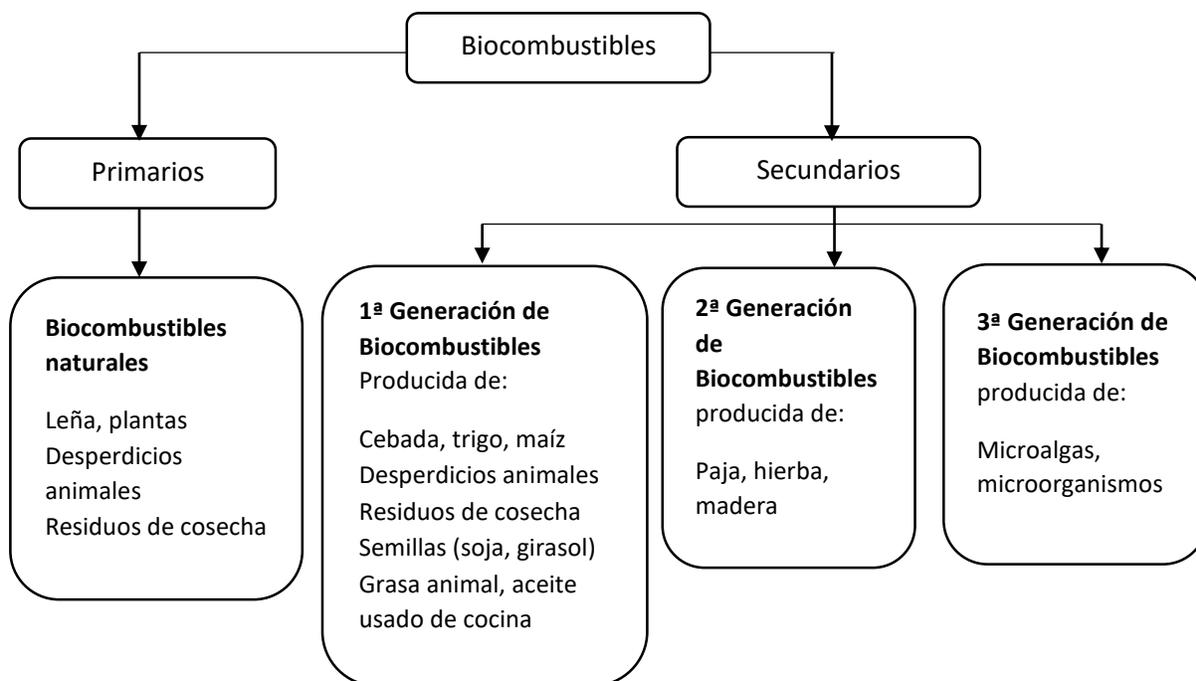


Figura 1.1. Algunos ejemplos de las fuentes de biocombustibles (Firoz A. et al. 2012, Demirbas A. 2010)

1.1 Primera y segunda generación de biocombustibles

Los biocombustibles secundarios son subdivididos en tres generaciones, basadas en características como tecnología de procesado, materia prima o su nivel de desarrollo. En la figura 1.1 se muestran algunos ejemplos de biocombustibles. (Firoz A. et al. 2012)

La primera generación de biocombustibles consta básicamente de cultivos para consumo alimenticio y otros productos secundarios, sin embargo, su principal inconveniente es que el incremento de la capacidad de producción implicaría más espacios para la producción de materia prima, así también como el incremento en el uso de tierras fértiles y agua dulce (tabla 1.1). (Firoz A. et al. 2012)

La segunda generación por su parte utiliza como materia prima residuos de agricultura, hojas, paja, ramas y componentes no comestibles de maíz, azúcar, etc. A pesar de tener esta ventaja sobre la primera generación de biocombustibles convertir esta biomasa requiere enzimas especiales

haciendo que la segunda generación sea económicamente no viable para su producción comercial. (Firoz A. et al. 2012)

1.2 Tercera generación de biocombustibles

La materia prima principal de la tercera generación de biocombustibles son las microalgas, actualmente se consideran como una alternativa factible de energía renovable, la cual sobrelleva las desventajas de la primera y segunda generación de biocombustibles. Inicialmente las microalgas fueron cultivadas como una fuente de alimentos a inicios de la década de los 40's. Sin embargo, la idea de generar combustibles a partir de microalgas es relativamente nueva iniciando a principios de los años 80. (Demirbas A. 2010)

Estos microorganismos son capaces de acumular grandes cantidades de lípidos que pueden ser procesados y refinados en biocombustible, además de producir otros compuestos útiles para alimentos funcionales o la industria cosmética. (Simionato D. et al. 2013, Suali E. et al. 2012, Bigot J. et al. 2011, Demirbas 2010)

Microalgas	Cultivos terrestres
No es necesario suelo fértil para su producción	Hacen uso de extensiones de terreno fértil para su cultivo
Como medio de crecimiento se usa agua marina o dulce	Es necesario al uso de agua dulce para su mantenimiento
Su producción no compromete cultivos para alimentación	Compiten con cultivos destinados a la alimentación como maíz o soja

Tabla 1.1. Principales diferencias entre las microalgas y otros cultivos para producción de combustible (Bigot J. et al. 2011, Chisti Y. 2007)

2. Las microalgas

Las microalgas son organismos fotosintéticos, que tienen una tasa de crecimiento alrededor de 50 veces más rápida que las plantas terrestres. Estos organismos unicelulares eucariotas (tienen un núcleo celular definido) se encargan de fijar la mayor fracción de CO₂ que se produce en la tierra. (Suali E. et al. 2012)

Estos microorganismos son una de las formas más antiguas de vida, por lo cual su morfología es simple, ya que carecen de raíces, tallo y hojas. Al ser microorganismos muy primitivos tienen una alta eficiencia fotosintética, una conversión efectiva de energía debido a las bajas demandas de funciones metabólicas y por tanto una producción eficiente de biomasa (figura 2.1). (Kleinová A. 2012, Singh R. N. et al. 2012, Huang G. et al. 2010, Brennan L. et al. 2010)

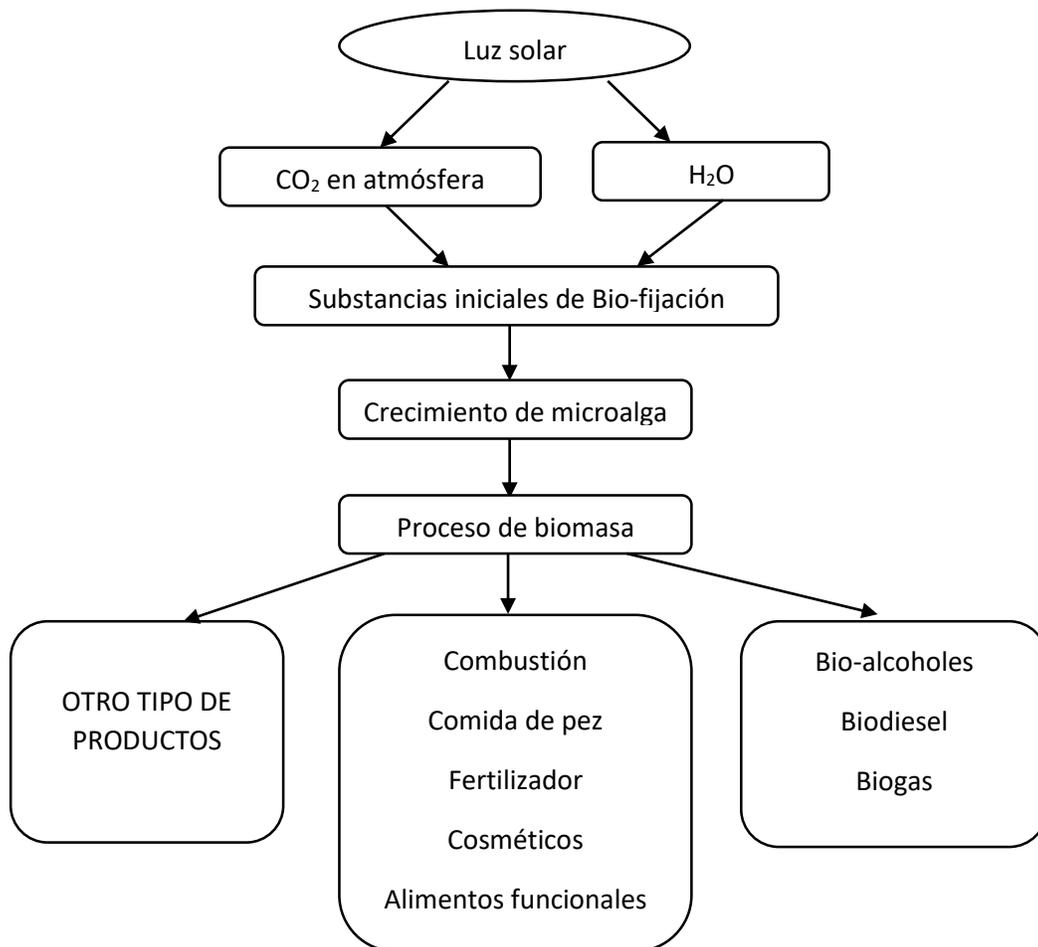


Figura 2.1. Nutrientes necesarios para la microalga y los productos obtenidos de su cultivo

2.1 Eficiencia microalgas

Estas tienen un tiempo de crecimiento aproximadamente de 20 días, en general corto en comparación a cultivos de la primera y segunda generación como el maíz y la soya que se siembran 1 y 2 veces al año respectivamente. Dependiendo de la especie las microalgas son capaces de producir entre un 20% a 70% de biomasa útil para ser transformada a biocombustible, además de que es posible incrementar esta cifra mediante la optimización de los factores de crecimiento de la microalga. (Il-hwan S. et al. 2012, Kleinová A. 2012, Chisti Y. 2007) Cuando se compara con cultivos convencionales (Tabla 2.1), se observa que la microalga proporciona más biomasa por hectárea de cultivo. (Tracey A. et al. 2014)

Cultivo	Producción de biomasa utilizable (L/ha)	Área necesaria (M ha)
Maíz	172	1540
Soya	446	594
Canola	1190	223
Coco	2689	99
Palma	5950	45
Microalga [a] (extrapolado)	136,900	2
Microalga [b] (extrapolado)	58,700	4.5

Tabla 2.1. Comparación de algunas fuentes de Biocombustible (Liu J. et al. 2017, Chisti Y. 2007)

[a] Para microalga con un 70% de biomasa convertible a biocombustible.

[b] Para microalga con un 30% de biomasa convertible a biocombustible.

2.2 Proceso de cultivo y producción de Microalgas

Para el aprovechamiento de la biomasa de microalgas como energético existen diferentes métodos de conversión los cuales varían en función de los productos requeridos. Las técnicas de conversión de biomasa a combustible pueden clasificarse en dos categorías: Métodos termoquímicos y Métodos bioquímicos. Los factores que influyen en los métodos utilizados son el tipo, la cantidad de biomasa, o la forma deseada del producto final. (Suali E. et al. 2012, Firoz A. et al. 2012, Brennan L. et al. 2010, Demirbas A. 2010)

Métodos de conversión termoquímicos: Trata de la descomposición de componentes orgánicos para producir combustible, y es llevado a cabo mediante procesos como la combustión directa, gasificación, licuefacción termoquímica y pirólisis.

Métodos de Conversión Bioquímica: Estos procesos de conversión de biomasa en combustible son: digestión anaeróbica fermentación alcohólica y la producción de hidrógeno fotobiológico.

En la figura 2.2 se esquematizan los procesos de conversión mencionados:

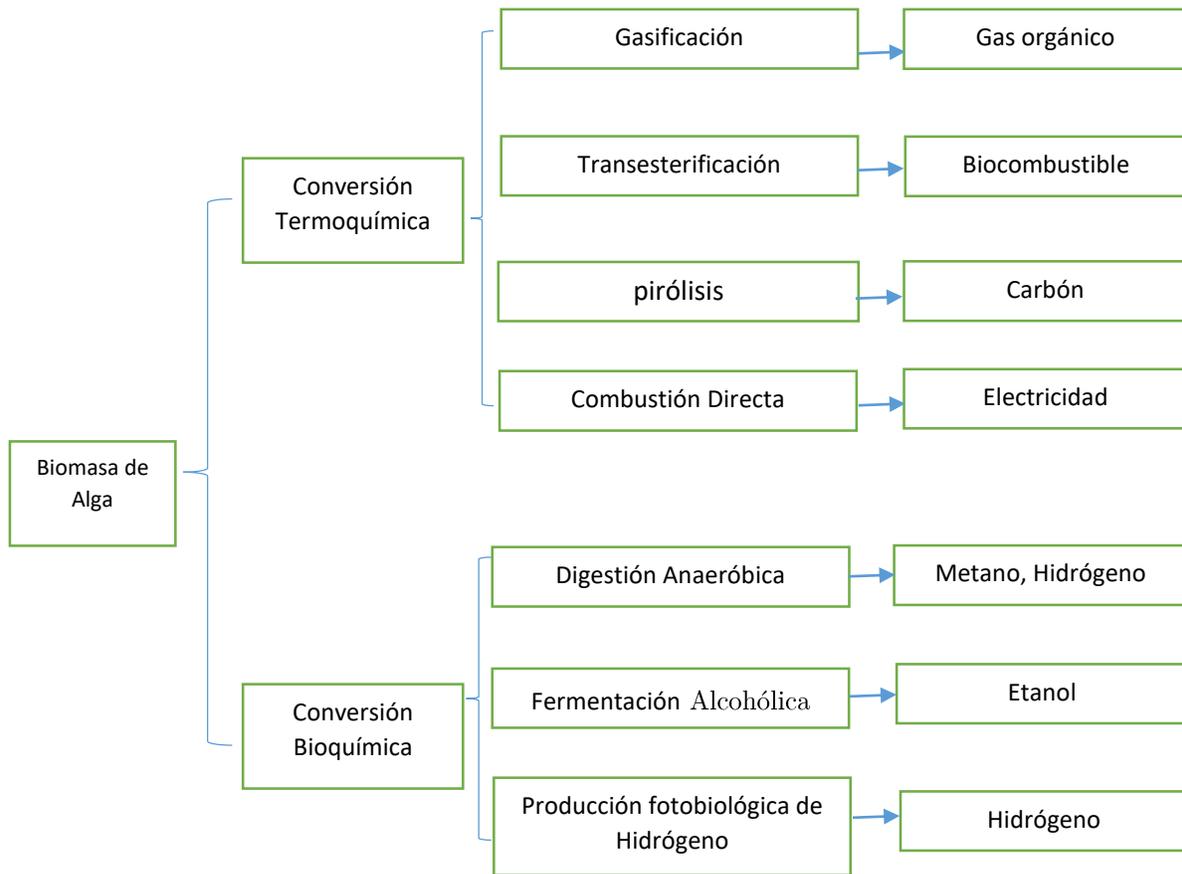


Figura 2.2. Diagrama de conversión energética (Firoz A. et al. 2012, Brennan L. et al. 2010)

Debido a los distintos compuestos de interés que generan las microalgas, su biomasa puede ser utilizada de muchas formas, ya sea para la industria cosmética o en alimentos funcionales. Para la obtención de biodiesel el compuesto buscado son los triglicéridos (TAG), que están constituidos principalmente por cadenas de carbonos e hidrógeno, estos pertenecen al grupo de los lípidos y son moléculas orgánicas que se encuentran en plantas y animales. (Suali E. et al. 2012)

El proceso para convertir los triglicéridos a biocombustible es mediante la transesterificación. Sin embargo, se tienen que efectuar ciertos procesos previos a la conversión de la biomasa para obtener el producto final (Firoz A. et al. 2012). En la figura 2.3 se muestra el proceso previo al aprovechamiento de la biomasa mediante el proceso de transesterificación. (Ma Y. et al. 2014)

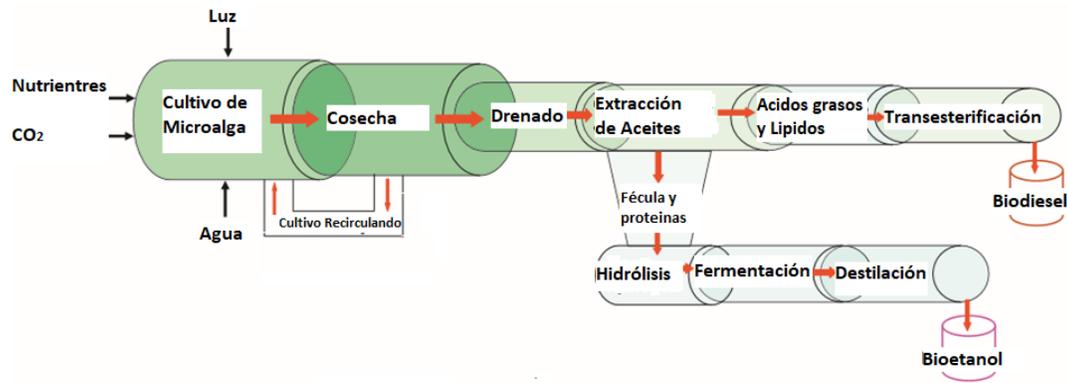


Figura 2.3. Proceso transesterificación (Ma Y. et al. 2014, Firoz Alam et al. 2012)

Como se muestra en la figura 2.3, la producción de biocombustible es un proceso complejo. El cual se divide en los siguientes pasos:

1. Cultivo microalga
2. Cosecha de cultivo (floculación y filtración)
3. Rompimiento de células (extracción de productos)
4. Extracción de lípidos (refinamiento)
5. Transesterificación

La conversión mediante transesterificación está dada bajo la reacción química general:

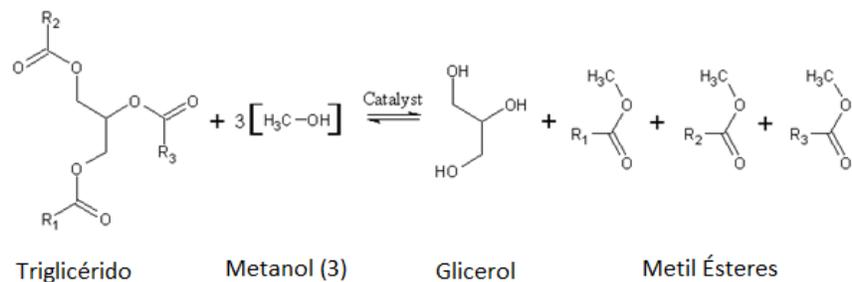


Figura 2.4. Reacción de Transesterificación (Suali E. et al. 2012)

El proceso ocurre cuando el metanol y un catalizador reaccionan con los triglicéridos presentes en el aceite vegetal (figura 2.4). El producto de esta reacción química son metil-ésteres, los cuales son utilizados para la reacción química de combustión, estos pueden ser mezclados entre 10 y 15 % con diesel aunque pueden ser usados al 100% por motores adaptados. (Suali E. et al. 2012)

2.3 Metabolismo, crecimiento y crecimiento autótrofo

El desarrollo típico un cultivo de microalgas a través del tiempo puede ser dividida en 4 partes (figura 2.5):

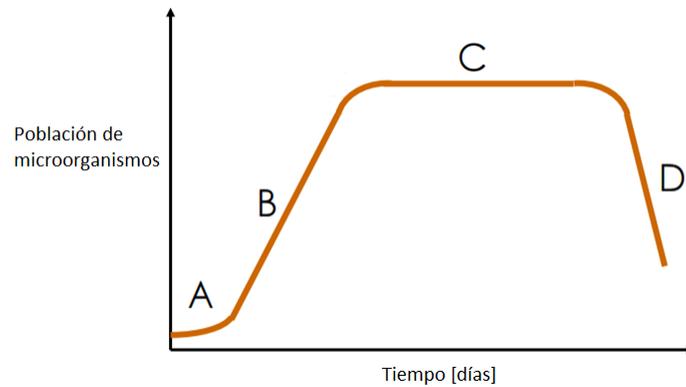


Figura 2.5. Comportamiento típico de la población de microalgas (Ghasem D. 2007)

Una vez el inóculo entra en el fotobiorreactor comienza la fase lag A, que es el periodo en que la microalga se adapta a su nuevo medio, la fase de crecimiento exponencial B inicia cuando una vez adaptadas las células del cultivo comienzan su desarrollo, en donde la microalga aprovecha los nutrientes en su medio, esta es la etapa reproductiva, en esta etapa la tasa de crecimiento del cultivo μ_a llega a tener un valor máximo $\mu_{a_{max}}$ en donde la microalga está en su máxima capacidad reproductiva, hasta la fase C la fase estacionaria, en la cual el microorganismo ha agotado todos los reactivos necesarios para su reproducción y comienza D, la fase de muerte celular. (Ghasem D. 2007)

Durante la fase de crecimiento exponencial la cantidad μ_a [día^{-1}] puede medirse directa o indirectamente a través de distintos métodos como: recuento celular, peso seco, o densidad óptica.

A lo largo del desarrollo del cultivo es necesario que existan ciertos parámetros fisicoquímicos de importancia, ya que son vitales para el desarrollo y calidad de biomasa final, los más importantes son: una fuente de luz, fuente de CO_2 , temperatura adecuada y niveles de pH óptimos. (Soman A. et al. 2015)

3. Requerimientos de las microalgas

3.1 Luz

Para organismos fotosintéticos la intensidad de luz es uno de los factores más importantes para su desarrollo, la región del espectro electromagnético que aprovechan estos microorganismos para obtención de energía PAR (por sus siglas en inglés) está entre las longitudes de 400nm a 700nm. Esta radiación es aprovechada mediante pigmentos naturales de la microalga como la clorofila α y los pigmentos accesorios. (Murphy T. et al. 2011)

La energía absorbida es transferida a los fotosistemas y es utilizada para oxidar un mol de agua y generar energía. Los portadores de electrones son llamados ATP y NADPH que son usados para convertir dióxido de carbono en azúcares. (Murphy T. et al. 2011)

Sin embargo, es necesaria cierta potencia de luz la cual no exceda o limite la capacidad fotosintética del cultivo, ya que una alta densidad de luz puede generar fotoinhibición a las células. Es importante respetar los periodos de luz/oscuridad de estos organismos, lo más natural es utilizar periodos 16:8 (16 horas de iluminación y 8 horas de oscuridad) para evitar alteraciones en el ciclo fotosintético. Sin embargo estos periodos pueden ser modificados. (Ma Y. et al. 2014, Simionato et al. D. 2013)

El cultivo por sí mismo también puede perder capacidad de fotosíntesis debido a una alta densidad celular, o a gradientes de concentración, ya que las células en la parte externa absorben cierta cantidad de luz y provocan que las células en zonas más internas del sistema de cultivo tengan poco aprovechamiento de luz incidente (Figura 3.1). (Vasumathi K. et al. 2012, Bitog J. P. et al. 2011)

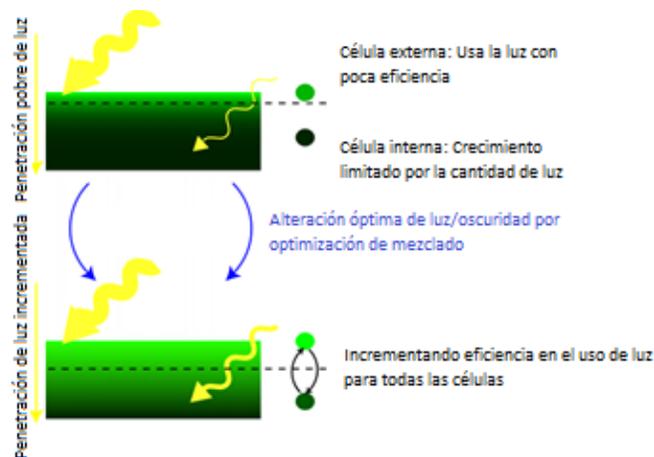


Figura 3.1 Aprovechamiento de la luz mediante la homogeneización del cultivo (Simionato D. et al. 2013)

Para modelar esto comúnmente se utiliza la ley de Beer-Lambert, la cual sigue que la intensidad de luz decrece exponencialmente conforme se adentra en el cultivo:

$$I = I_0 e^{-Kz}$$

Ec. 3.1

Donde:

I : Intensidad de luz [$\mu E/m^2 s$]

I_0 : Intensidad de luz que entra al sistema [$\mu E/m^2 s$]

z : Profundidad a la que se adentra la luz [m]

K : Tasa de atenuación [$1/m$]

Aunque es una relación ampliamente usada los investigadores tienen definiciones diferentes para K y cómo es calculada, algunos sugieren que puede ser descrita por una función lineal que depende de la concentración de la biomasa, mientras que otros contemplan las variaciones por dispersión y las longitudes de onda en el espectro que se maneje. Darvehei P. y colaboradores (2018) hacen un recuento de posibles modelos que describen los efectos de la luz en el crecimiento de las microalgas, un ejemplo es el de *Nannochloropsis Oseanica*:

$$\mu_a = \mu_{max} \frac{I}{I + \frac{\mu_{max}}{\alpha} \left(\frac{I}{I_{opt}} - 1 \right)^2}$$

Ec. 3.2

Donde:

I : Intensidad de luz [$\mu E/m^2 s$]

I_{opt} : Intensidad de luz óptima para el crecimiento del cultivo [$\mu E/m^2 s$]

μ_a : Tasa de crecimiento del cultivo [$1/día$]

μ_{max} : Tasa de crecimiento máxima del cultivo [$1/día$]

α : Constante [$\mu m^2 s/Edía$]

El comportamiento del crecimiento del cultivo debido a su interacción con la luz puede modelarse con una ecuación similar a lo propuesto por la ec. de Monod, la exposición de las células a la fuente de luz en efecto es de vital importancia ya que determina cuanta luz puede absorber cada célula, y a subes está determinado por la hidrodinámica del cultivo.

3.2 CO₂

El CO₂ empleado en el cultivo de microalgas es ingresado comúnmente mediante la introducción de aire del ambiente (que contiene una concentración de CO₂ menor al 1%), la cantidad de aireación

se mide en vvm (volúmenes de aire por volumen de líquido por minuto) en fotobiorreactores los valores típicos son menores a 1. El dióxido de carbono es la principal fuente de carbono para un cultivo de microalgas. Cuando el carbono es consumido, el oxígeno es producido por fotosíntesis, por cada mol de CO₂ fijado una mol de O₂ es generado en el cultivo. (Nauha E. et al, 2015, Singhn S. et al 2014, Murphy T. et al. 2011)

La microalga almacena CO₂ mediante una reacción redox la cual se lleva a cabo en los cloroplastos de estos microorganismos. (Zhao B. et al. 2014) El requerimiento de CO₂ para el desarrollo del cultivo depende de cada especie de la microalga, ya que usualmente es necesaria cierta concentración de CO₂ en su medio para un crecimiento óptimo. (Bitog J. P. et al. 2011)

La utilización del CO₂ para el crecimiento de la microalga tiene dos etapas: la absorción de éste mediante transferencia de masa (transferencia de la fase líquida a la microalga) y la fijación de CO₂ por fotosíntesis. La absorción de CO₂ del flujo de gas mediante el mezclado dentro del medio de cultivo es uno de los factores clave en el desarrollo de organismos fotosintéticos. (Vasumathi K. et al. 2012)

3.3 Temperatura

La temperatura es importante para la disociación de moléculas contenedoras de carbón, haciendo que el carbono esté disponible para la fotosíntesis. En general la temperatura óptima para cultivos está entre 20 y 24 grados.

También hay rangos más grandes como 16 a 27 grados, sin embargo, más bajos que 16 grados puede producir aumento en el tiempo de desarrollo del cultivo y mayor a 35 grados puede ser letal para un gran número de especies. (Kleinová A. 2012, Bitog J. et al. 2011)

Un modelo que trata de predecir los efectos de los nutrientes en la tasa de crecimiento de las microalgas (μ_a) es el modelo de Monod, éste asume que el crecimiento de la microalga está dado en función de un reactivo limitante particular. Es posible escribir una expansión de este modelo a la siguiente manera (Joel C. et al. 1973):

$$\mu_a = Ae^{-E/RT} \left[\frac{S}{K_s + S} \right]$$

Ec. 3.3

Donde:

A : Constante [$día^{-1}$]

E : Energía de activación [cal/mol]

R : Constante de los gases ideales [$cal/mol K$]

T : Temperatura [K]

S : Concentración de nutriente limitante [mg/L]

K_s : Constante de media velocidad (adimensional)

En este modelo propuesto por Joel C. y colaboradores (1973) la tasa de crecimiento ahora está dada en función de la temperatura y de la concentración de un nutriente limitante (figura 3.2). Esta ecuación modificada de Monod además de considerar un nutriente limitante toma en cuenta un segundo factor limitante en este caso la temperatura.

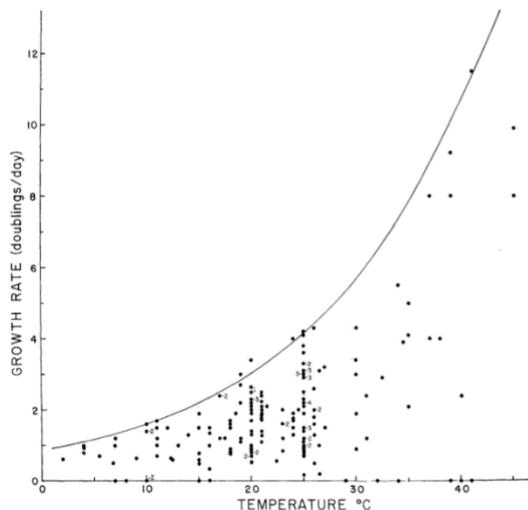


Figura 3.2 Variación de la tasa de crecimiento μ_a de algas unicelulares en función de la temperatura (Joel C. et al. 1973)

Conforme la temperatura del agua se incrementa el crecimiento de algunas especies se puede hacer más lento o inhibirse. En estudios posteriores también se han realizado más estudios para determinar temperaturas óptimas para el crecimiento de estos microorganismos (Carolann M. et al. 2018, Jakob O. et al 2018)

3.4 pH

Los niveles óptimos de temperatura y concentración de CO_2 cambian de especie a especie ya que cada una tiene distintos requerimientos de pH debido a su metabolismo. Sin embargo, en general, los niveles de pH altos implican una baja disponibilidad de CO_2 lo que limita la capacidad fotosintética de estos microorganismos y por tanto el desarrollo del cultivo.

El rango de pH necesario para el desarrollo de la mayoría de las especies de microalgas está entre 7 y 9 con un rango óptimo de 8.2 y 8.7. Un pH apropiado puede ser alcanzado mediante la aireación del cultivo (Bitog J. et al. 2011).

4. Elección de especie de microalga

4.1 Aspectos básicos

En los años recientes la eliminación de las barreras técnicas y económicas que involucran la producción de biocombustible a partir de microalgas se debe al impulso de la industria privada y el apoyo gubernamental a la investigación (Tracey A. et al. 2014), con estos avances se han visto grandes mejoras en la eficiencia de la producción de biomasa, poco a poco se han estado reduciendo los costos de filtración, floculación, extracción de productos y refinamiento. Sin embargo, una gran condicionante es que se debe generar una buena calidad de biomasa bajo condiciones de cultivo flexibles, lo que se traduce en un fácil escalamiento debido a la reducción de energía necesaria para el proceso de cultivo y así hacer más rentable la producción. En consecuencia, es importante encontrar una cepa de microalga lo suficientemente robusta y que genere biomasa de buena calidad para su conversión a biocombustible. (El- Sheekh M. M. et al. 2015, Suali E. et al. 2012, Demirbas A. 2010)

Cabe aclarar que existe un estudio amplio de muchas cepas de microalgas las cuales son aptas para ser usadas para propósitos de biocombustible, sin embargo, no es posible realizar cultivos de la misma microalga para zonas con diferente clima, por tanto, para cada lugar donde se realice un cultivo a gran escala se requiere una microalga diferente. Existe un amplio catálogo de microalgas propuestas, sin embargo, algunas suelen tener medios a base de agua dulce, las cuales no son viables para una producción a gran escala debido a lo mencionado respecto a cultivos de primera generación. El análisis de algunos autores sugiere que el género *Nannochloropsis* muestra un gran potencial como materia prima para producción de biocombustible para climas templados- cálidos. (El- Sheekh M. M. et al. 2015, Tracey A. et al. 2014)

4.2 *Nannochloropsis Oculata*

En la producción a gran escala es importante elegir una cepa la cual pueda ser cultivada a temperatura ambiente dependiente de la zona geográfica:

- Se seleccionó la microalga *Nannochloropsis Oculata*, ya que para generar altos contenidos de biomasa es suficiente aire del ambiente para obtener buenos rendimientos, y no es necesario saturar con alguna otra fuente de CO₂, lo que implica un ahorro de energía. (Singh S. et al 2014)
- Es cultivada en agua salada, a una salinidad “típica” en zonas como el Océano Pacífico así que no existe la necesidad de saturar o diluir aún más la sal del medio. (Ma Y. et al 2014)
- Es resistente a cambios de salinidad lo que permite ser flexibles en el medio de crecimiento. (El- Sheekh M. et al. 2015)

Existen muchas referencias que consideran a *Nannochloropsis* como apta para su producción a gran escala por estas propiedades. Los aceites o lípidos representan un porcentaje alto de biomasa de la microalga (tabla 4.1). (Liu J. et al. 2017, Tracey A. et al. 2014, Ma Y. et al. 2014, Chisti Y. 2007)

Nombre de la microalga	% peso seco
<i>Botryococcus branii</i>	25-75
<i>Chollera sp.</i>	28-32
<i>Crypthecondinium cohnii</i>	20
<i>Cylindrotheca sp.</i>	16-37
<i>Dunaliella primolecta</i>	23
<i>Isochrysis sp.</i>	25-33
<i>Monallanthus salina</i>	20
<i>Nannochloris sp.</i>	20-35
<i>Nannochloropsis sp.</i>	31-68
<i>Neochoris oleabundans</i>	35-54
<i>Nitzshia sp.</i>	45-47
<i>Phaedactylum tricomutum</i>	20-30
<i>Schizochytrium sp.</i>	50-77
<i>Tetraselmis sueica</i>	15-23

Tabla 4.1. Algunas microalgas y sus respectivas concentraciones de biomasa producida (Firoz A. et al. 2012, J. Liu et al. 2017)

Como se mencionó en el capítulo anterior los TAG son de importancia en la producción de biocombustible según Ma Y. y colaboradores (2014) la especie *Nannochloropsis* son las más altas productoras de TAG ya que cuentan con peso seco utilizable de alrededor de 30 y 50 %.

Nannochloropsis Oculata ofrece una producción de 263.64 mgL/día de biomasa bajo las condiciones de cultivo en la tabla 4.2, los triglicéridos producidos son equivalentes a un 52% de su biomasa total. (Liu J. et al. 2017, Montalescot V. et al. 2015, Ma. Y. et al 2014, Khatoon H. et al. 2014)

Volumen de cultivo	0.4 L columna de burbujeo
Aireación	2% de CO ₂ , 0.05 vvm (0.08 L/min)
Temperatura	25°C
Medio	f/2 Guillard (Agua salada)
Tiempo de cultivo	22 días
Luz	80 -120 $\frac{\mu\text{mol fotones}}{\text{m}^2\text{s}}$

Tabla 4.2. Condiciones de cultivo comunes de *Nannochloropsis*. (Liu J. et al. 2017, Montalescot V. et al. 2015, Ma. Y. et al 2014, Khatoon H. et al. 2014)

4.3 Medio de crecimiento de la microalga

El costo asociado al medio de crecimiento de la microalga es una limitante en la producción a gran escala, ya que requieren de fuentes de carbono, hidrógeno, oxígeno, nitrógeno y fósforo, estos

compuestos son proporcionados a través de distintos medios de cultivo que han sido desarrollados e investigados con el paso de los años. Algunos son: (Ma Y. et al. 2014, Tracey A. et al. 2014, Zhu B. et al. 2014, Kleinová A. 2012, Moazami N. et al. 2012, Brennan L. et al. 2010).

- Yashima (1964)
- Yanase & Imai (1968)
- f/2 Guillard (1975)

Los investigadores se han centrado también en reducir costos manteniendo la calidad en la biomasa, así también en la búsqueda de fuentes de nitrógeno y de fósforo más baratas (Liu J. et al. 2017, El-Sheekh M. et al. 2015). Se ha mostrado que los reactivos más importantes en el desarrollo de *Nannochloropsis* son NO_3 y PO_4 . Es posible manipular los volúmenes en la composición bioquímica de *Nannochloropsis* (como los lípidos) mediante el incremento o disminución de los reactivos que componen su medio de crecimiento (f/2 Guillard). (El-Sheekh M. et al. 2015)

Estos medios de cultivo en conjunto a una buena distribución del uso de la luz, CO_2 , y niveles adecuados de pH, son necesarios para lograr una producción adecuada de biomasa, estas características son conjuntadas en sistemas para su cultivo llamados fotobiorreactores (PBR por sus siglas en inglés).

5. Cultivo microalgas

Los fotobiorreactores pueden ser iluminados por luz artificial, luz solar o ambos, se dividen en dos tipos: sistemas abiertos y sistemas cerrados. Cada uno de ellos tiene ciertas ventajas y desventajas, debido a esto existe una gran variedad de estos sistemas. Algunas diferencias principales pueden visualizarse en la tabla 5.1. (Sing R. et al. 2012, Bitog J.P. et al. 2011, Demirbas A. 2010)

Sistemas cerrados	Sistemas abiertos
Tienen un mantenimiento difícil debido a la formación de biopelículas dentro de las paredes del PBR	Tienen más facilidad de mantenimiento debido a los materiales usados y diseño
Tienen mejor aprovechamiento de la luz solar	Tienen facilidad de escalamiento debido a su diseño simple
Generan más biomasa por metro cuadrado	Pueden permitir la entrada de organismos ajenos al cultivo

Tabla 5.1. Comparativa entre sistemas abiertos y cerrados, para producción de microalgas (Sing R. et al. 2012, Bitog J. et al. 2011, Demirbas A. 2010)

5.1 Tipos de Fotobiorreactores

5.1.1 Pista abierta

Es conocido como uno de los más económicos principalmente por su facilidad de mantenimiento. Sin embargo, es poco eficiente en el control de temperatura y mezclado, además de no poder mantener condiciones que limiten la entrada de microorganismos ajenos al cultivo. Es necesario que sean poco profundos para que exista buen aprovechamiento de la luz en el cultivo. La profundidad del estanque dependerá de la transmitancia del tipo de microalga (figura 5.1). (Demirbas A. 2010, Moazami N. et al. 2012)



Figura 5.1 Fotografía de un fotobiorreactor de pista abierta, se aprecian sus distintos tamaños (Bitog J.P. et al. 2011)

El mezclado y transferencia de CO_2 es a través del movimiento de paletas que recirculan el cultivo, debido a estas características su tamaño puede ser muy variable siempre y cuando se pueda mantener en circulación el cultivo. (Suali E. et al. 2012)

5.1.2 Columna de aireación

Es un tipo de fotobiorreactor cerrado el cual está construido de acrílico o materiales transparentes para el aprovechamiento de la luz solar, debido a su tamaño reducido se tiene un mayor control de temperatura, el aprovechamiento de luz está en base al diámetro del tubo contenedor. El mezclado y transferencia de CO_2 es mediante el burbujeo desde la base del biorreactor, el cual puede ser regulado (figura 5.2). (Wang L. et al, 2014, Bitog J. et al. 2011)



Figura 5.2 Fotografía de un fotobiorreactor columna de burbujeo (Bitog J.P. et al. 2011)

5.1.3 Placa plana

Así como la columna de aireación este fotobiorreactor cerrado está hecho de partes transparentes, sin embargo, éste está construido especialmente para el mayor aprovechamiento de la luz solar mediante su poco grosor y grandes áreas en sus placas. Éste realiza la recirculación mediante aireación desde su base, usualmente se utilizan 3 a 10 cm de distancia entre las placas para un buen aprovechamiento de la luz (figura 5.3). (Wang L. et al. 2014, Bitog J. et al. 2011)



Figura 5.3 Fotografía de un fotobiorreactor de placas planas. Se muestra un arreglo en serie de varios fotobiorreactores (Bitog J.P. et al. 2011)

5.1.4 Tubular

Este tipo de fotobiorreactor está hecho de tubos estrechos además de tener unas longitudes de alrededor de 100 metros de largo (figura 5.4). Estos están contruidos con un diámetro entre 0.03m y 0.1m para obtener un mayor aprovechamiento de la luz. (Suali E. et al. 2012, Demirbas A. 2010, Sheehan J. et al. 1998, Campbell M.N. 2008, Soman A. et al. 2015)



Figura 5.4 Fotografía de un fotobiorreactor tubular (Bitog J.P. et al. 2011)

La principal diferencia entre los sistemas cerrados y abiertos es la hermeticidad y el control en temperatura y niveles de aireación, en consecuencia, en fotobiorreactores cerrados la concentración de biomasa es mayor en comparación al de pista abierta. (San Pedro at al. 2014)

Además de estos fotobiorreactores existen muchos con tantas formas y tamaños como se desee, lo que se busca en particular es el máximo aprovechamiento de la luz solar y transferencia de CO₂. Se han creado muchos diseños mejorados mediante datos empíricos regulando de mejor manera los flujos dentro de un fotobiorreactor usando baffles o paredes para recircular, sin embargo, es

necesario un estudio riguroso para determinar y evitar zonas de estancamiento, o zonas que pudieran afectar el crecimiento del cultivo.

5.2 Tipos de cultivos

El tipo de cultivo está determinado por la forma en que se extraiga la biomasa del fotobiorreactor, la concentración de biomasa generada, la adición de nuevo medio de crecimiento y el tiempo de reinicio del cultivo.

Un cultivo por lotes (batch) es aquel en donde el volumen inicial de medio de crecimiento es igual al final, y los reactivos que lo componen no son sustituidos por nuevo material, la microalga consumirá el total de los nutrientes en su medio y llegará a la fase de muerte (figura 5.5a).

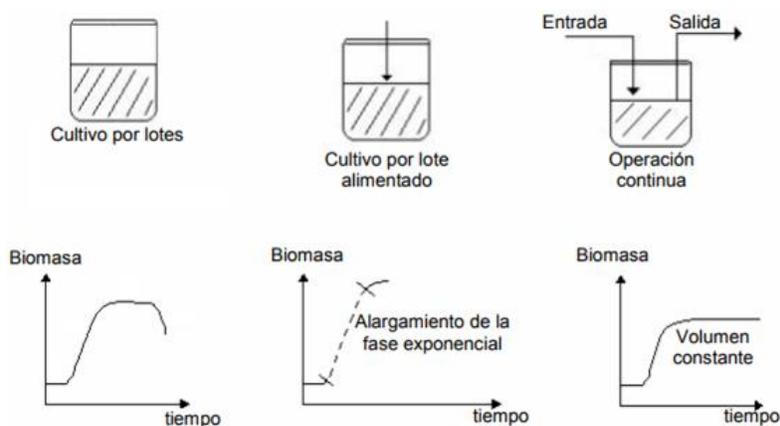


Figura 5.5 Tipos de modos de cultivos. a) Cultivo por lotes (Izquierda) b) Cultivo por lote alimentado (Centro) c) Cultivo continuo (Derecha) (M. Guzmán et al. 2003)

En un cultivo por lotes es necesario esperar a la fase estacionaria, extraer la biomasa y reanudar la producción desde la fase lag, esto hace que existan pérdidas debido a la reincorporación de las células del cultivo. Se puede alargar el tiempo de producción de biomasa adhiriendo más medio de crecimiento al cultivo (cultivo por lote alimentado), sin embargo, existirá un desaprovechamiento de luz solar al incrementar la densidad del cultivo (figura 5.5b). En cambio, un cultivo continuo tiene una concentración más baja que un cultivo por lotes, pero la producción de biomasa no se detiene, ya que se proporciona continuamente medio de crecimiento a las microalgas y se extrae una parte para mantener un volumen dentro del fotobiorreactor (figura 5.5c). (Guzmán M. et al. 2003)

5.3 Modelado del fotobiorreactor

Para tener una producción comercial viable se requiere mantener un cultivo semicontinuo o continuo para no detener la producción de biomasa en ningún momento, además de que esta característica ayuda a que exista un mayor aprovechamiento de luz y menos sedimentación en el fotobiorreactor. (Liu J. et al. 2017, Tracey A. et al. 2014, Vasumathi K. et al. 2012)

5.3.1 Determinando producción máxima de biomasa

Analizando la curva de crecimiento en modo batch durante la fase de crecimiento exponencial (figura 5.6a) en el mismo tiempo t donde la curva de concentración de biomasa (figura 5.6a) tiene un valor de pendiente máxima $\mu_{a_{max}}$ la curva de la tasa de crecimiento (figura 5.6b) tiene un valor máximo. Este punto en el desarrollo del cultivo es crucial ya que da una pauta para hallar la máxima producción de biomasa. (Vasumathi K. et al. 2012)

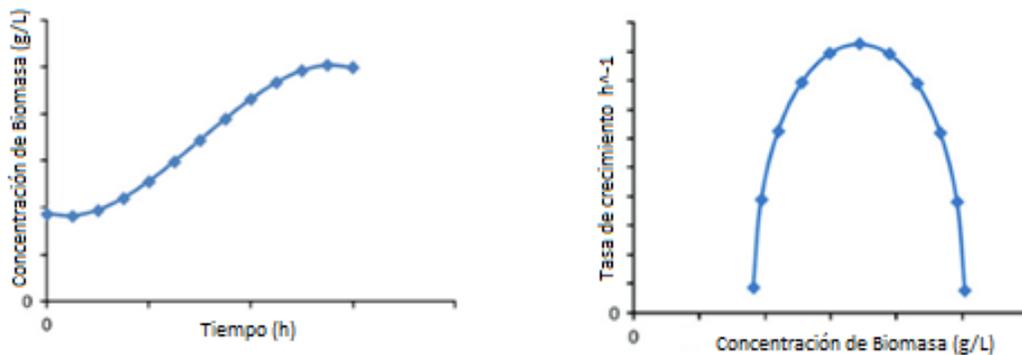


Figura 5.6. a) Gráfica concentración de microalga vs tiempo (Izquierda), b) Gráfica de tasa de crecimiento μ_a vs concentración de biomasa (Derecha) (Vasumathi k. et al. 2012)

La concentración óptima para una tasa de crecimiento máxima es cuando $\mu_a = \mu_{a_{max}}$. Por tanto para obtener una máxima producción de biomasa la concentración de la microalga debe de mantenerse en ese punto máximo. Esto permite que no exista sobrepoblación por tanto un equilibrio entre los nutrientes que pueden ser aprovechados de mejor manera por el cultivo. (Vasumathi K. et al. 2012)

5.4 Criterio biológico de crecimiento

El ritmo de crecimiento μ_a está directamente relacionado con la concentración celular, disponibilidad de CO_2 , nutrientes, el aprovechamiento de la luz y la reproducción celular, por eso es importante contemplar estos puntos para la construcción de un fotobiorreactor (Vasumathi K. et al. 2012):

1. Incrementar la transferencia de CO_2 mediante el correcto mezclado, ya que es necesario para la fotosíntesis, esto se refleja en la generación de lípidos en las microalgas.
2. Permitir una exposición a la luz uniforme para todas las células en el cultivo.
3. Una concentración óptima debe de ser mantenida mediante la extracción del exceso de microalgas. Esto para maximizar la transmitancia de luz en el cultivo.

- Mantener el suficiente nivel de nutrientes en el medio de crecimiento ya que bajas concentraciones de algunos nutrientes (NO_3 y PO_4) pueden disminuir la calidad de la biomasa.

5.5 Balance flujo másico en el fotobiorreactor

Como dice Vasumathi K. y colaboradores (2012) se llega a una máxima producción de biomasa en modo continuo cuando el periodo de fase exponencial llega a $\mu_a = \mu_{a_{max}}$, y se extrae el excedente de biomasa de manera que el cambio en la concentración de la microalga es constante (figura 5.6b), esto es que la concentración de microalga en el sistema no cambia en el tiempo:

$$\frac{dX}{dt} = 0$$

Ec. 5.1

X : Concentración de microalga al tiempo t .

Así se asegura que se suplirán los requerimientos necesarios a la microalga de una manera eficiente obteniendo máximo rendimiento de biomasa

- Máximo aprovechamiento de luz
- Se evitará la sobrepoblación y la sedimentación
- Control de pH y se asegura la disponibilidad de nutrientes al ingresar nuevo medio de crecimiento

En el esquema de la figura 5.7 se muestra el funcionamiento típico de un fotobiorreactor continuo en operación para obtener la generación neta de microalga a lo largo del tiempo.

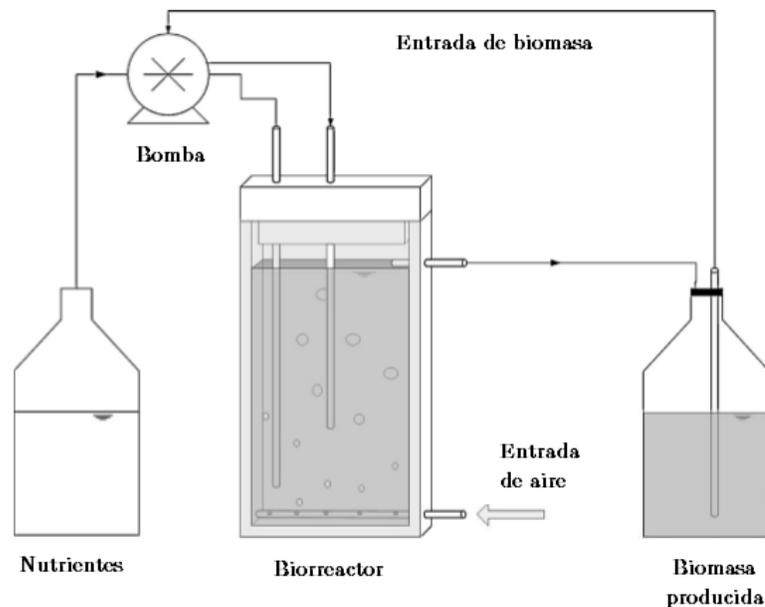


Figura 5.7. Esquema de funcionamiento de un fotobiorreactor continuo.

Así la velocidad de flujo para mantener la fase estacionaria dentro del fotobiorreactor está dada por el siguiente balance:



Figura 5.8. Balance de masa en un fotobiorreactor en modo continuo

Donde:

V : Velocidad de entrada de fluido en el fotobiorreactor

X_e : Concentración de microalga a la entrada [g/L]

X_s : Concentración de microalga a la salida [g/L]

V_{ol} : Volumen del fotobiorreactor [L]

Q : Caudal [L/s]

$$QX_e - QX_s + \mu_a X_s V_{ol} = \frac{dX}{dt} V_{ol}$$

Ec.5.2

Si $\mu_a = \mu_{a_{max}}$ se mantiene para todo t :

$$\frac{dX}{dt} = 0$$

Ec. 5.3

Así

$$QX_e - QX_s + \mu_{a_{max}} X_s V_{ol} = 0$$

Ec. 5.4

$$\frac{Q}{V_{ol}} = \mu_{a_{max}} \frac{X_s}{X_s - X_e}$$

Ec. 5.5

Si se sigue suministrando de medio nuevo al cultivo sin tener en cuenta la introducción de inóculo nuevo entonces la concentración $X_e = 0$

$$\frac{Q}{V_{ol}} = \mu_{a_{max}}$$

Ec. 5.6

De esta manera el volumen del fotobiorreactor continuo para una producción máxima está dado por la velocidad de crecimiento de la microalga:

$$\frac{Q}{\mu_{a_{max}}} = V_{ol}$$

Ec. 5.7

Sin importar la geometría, volumen, o forma del fotobiorreactor, la característica de un fotobiorreactor continuo es que la producción de biomasa no se detiene, por tanto, los parámetros volumétricos a modelar son los flujos de entrada, salida y de generación de biomasa.

La ecuación 5.7 relaciona las velocidades de flujo de entrada - salida del fotobiorreactor, el volumen de sistema, y velocidad de crecimiento de la microalga (dependiente de la especie). Un punto importante que aclarar es que la velocidad máxima de crecimiento ($\mu_a = \mu_{a_{max}}$) se tendrá que asegurar mediante ciertos parámetros hidrodinámicos que ya han sido establecidos por otros autores. Por lo anterior es importante en el estudio de los fotobiorreactores para optimizar las variables hidrodinámicas dentro del sistema mediante de la mecánica de fluidos. (Wang L. et al, 2014, Prussi M. et al, 2014, Pascual J. et al. 2014, Singh R. et al. 2012. Bitog J. et al. 2011, Xu L. et al. 2012).

En las secciones 3 y 4 se mencionaron cantidades como intensidad de luz, CO₂ y nutrientes, además que existen muchos estudios acerca de su modelado, estas cantidades son de gran importancia para el desarrollo del cultivo, sin embargo dada su dinámica y su complejidad el modelado de estas cantidades se propone a estudios posteriores. Un punto importante es el buen mezclado para el funcionamiento óptimo del fotobiorreactor, por eso el interés de este trabajo meramente hidrodinámico, las cantidades como intensidad de luz, distribución de nutrientes y CO₂ no se aprovecharían adecuadamente si no se tiene un buen mezclado. Por ello esta simulación no contempla variables como temperatura, pH, luz, o algún reactivo limitante como alguna fuente de sulfatos o fosfatos.

6. Mecánica de Fluidos

Desde el punto de vista de la mecánica de fluidos, la materia sólo puede presentarse en dos estados: sólido y fluido, la principal diferencia entre estos dos es la reacción que tienen a un esfuerzo cortante. (Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

Un fluido se define como un conjunto de partículas las cuales se mantienen unidas entre sí por fuerzas cohesivas débiles, y éste se deforma cuando se somete a un esfuerzo cortante o esfuerzo tangencial sin importar que tan pequeño sea, un sólido puede resistir a este esfuerzo sin deformarse, mientras que el fluido se seguirá deformando continuamente mientras se aplica el esfuerzo cortante. Existen dos maneras de analizar el comportamiento de un fluido; la descripción euleriana y la lagrangiana. (Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

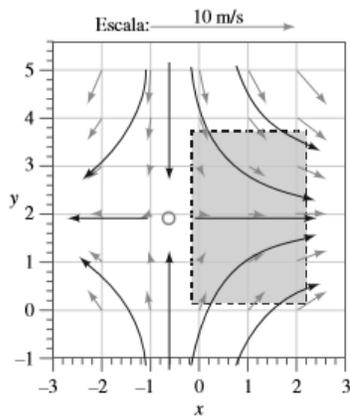


Figura 6.1 Campo de velocidades a un tiempo t representado dentro un volumen de control (Cengel Y. et al. 2006).

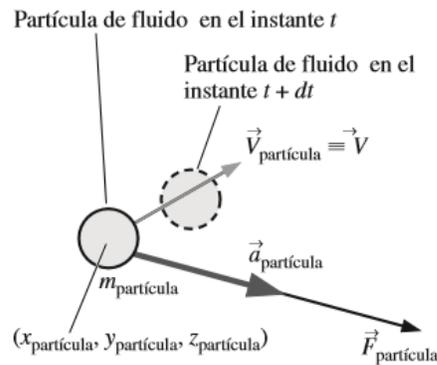


Figura 6.2 Partícula en la posición y tiempo (x, y, z, t) con propiedades $V(x, y, z, t)$, $P(x, y, z, t)$ etc. (Cengel Y. et al. 2006)

6.1 Descripción Euleriana y Lagrangiana

El método euleriano trata del comportamiento del campo del flujo, para la descripción de un problema se calcula ya sea el campo de velocidades, presiones etc. (figura 6.1) del flujo del fluido. Mientras que en la descripción lagrangiana como en mecánica de sólidos, se estudia una única partícula en su movimiento a través del dominio que se desea estudiar, calculando las propiedades de dicha partícula a través de su posición en el dominio, y por tanto sus propiedades estarán en función de las variables de posición y tiempo (figura 6.2): x, y, z, t (Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

6.2 Características de un fluido

Un fluido tiene propiedades distintas a las que se manejan en mecánica de sólidos. Estas propiedades se enuncian a continuación, dejando de lado las propiedades termodinámicas puras, ya que no serán contempladas en este modelo.

6.2.1 Viscosidad

La viscosidad es una medida cuantitativa de la resistencia de un fluido a fluir, en otras palabras, es la propiedad de cada fluido a resistirse un esfuerzo cortante. (Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

La viscosidad relaciona el esfuerzo o tensión local en un fluido en movimiento con la velocidad de deformación de las partículas fluidas con la relación (figura 6.3):

$$\tau = \mu \frac{du}{dy} \quad \text{Ec. 6.1}$$



Figura 6.3. Deformación de un fluido al aplicar esfuerzo cortante (White F. 2003)

Dónde:

τ : Esfuerzo

μ : Viscosidad cinemática [PaS]

$\frac{du}{dy}$: Deformación del fluido [$(m/s)/(m/1)$]

La viscosidad es la constante de proporcionalidad entre el esfuerzo aplicado y el gradiente de velocidad del fluido debido a la deformación.

Otro detalle importante de la viscosidad es que es una propiedad termodinámica ya que varía con la temperatura y la presión. Por ello existen diferencias en el comportamiento de un fluido sometido a los mismos esfuerzos con condiciones ambientales diferentes. (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

6.2.2 Número de Reynolds

El número de Reynolds es un número adimensional empírico el cual “mide” que tan turbulento es el flujo de un fluido, está descrito por tres regímenes, laminar, turbulento y en transición, que es la región que está en medio de las dos anteriores.

Para flujos en tuberías o flujo externo sobre una superficie:

$$Re = \frac{\rho v_s D}{\mu}$$

Donde:

v_s : Velocidad característica del flujo [m/s]

ρ : Densidad del fluido [kg/m^3]

D : Diámetro de la tubería o longitud característica del sistema [m]

μ : Viscosidad del fluido [$Pa \cdot s$]

Para los valores:

$Re \leq 2100$ el flujo se encuentra en régimen laminar.

$2100 \leq Re \leq 4000$ el fluido está en estado de transición (entre flujo laminar y turbulento).

$Re \geq 4000$ el fluido está en un régimen turbulento.

(Bird B. et al. 2006, Yunus A. et al. 2006, Frank M. 2003)

6.2.3 Volumen de control

Un volumen de control se define como cualquier región arbitraria en el espacio por la cual un fluido se desplaza y su superficie de control puede estar fija, en movimiento e inclusive deformándose en el curso del flujo y el tiempo. En esta región se deben de cumplir las leyes básicas que son conservación de momento, energía y continuidad (figura 6.4). (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

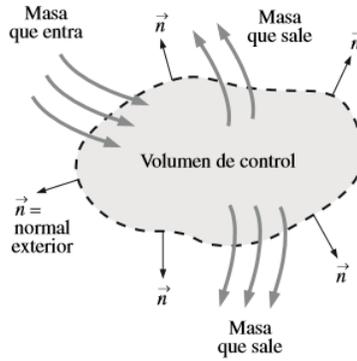


Figura 6.4 Volumen de control arbitrario delimitado por una superficie de control con vector normal \vec{n} . (Cengel Y. et al. 2006)

6.2.4 Fuerzas sobre un volumen de control

Las fuerzas sobre un volumen de control se dividen en dos tipos, las de cuerpo y las superficiales.

$$\sum \vec{F} = \sum \vec{F}_{cuerpo} + \sum \vec{F}_{superficial}$$

Ec. 6.3

Las fuerzas del cuerpo constan de aquellas fuerzas que actúan en todo el cuerpo de un volumen de control, la más común es la gravedad, la cual ejerce una fuerza hacia abajo sobre cada elemento del cuerpo (figura 6.5). (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

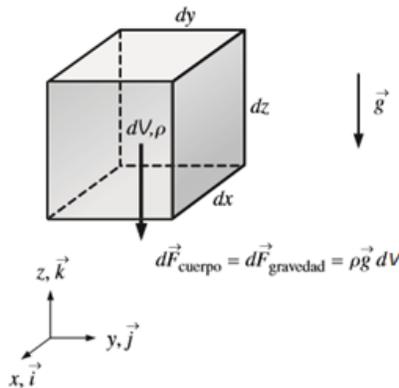


Figura 6.5 Fuerza de gravedad actuando sobre un volumen de control infinitesimal. (Cengel Y. et al. 2006)

Las fuerzas superficiales son debidas a los esfuerzos en las caras de la superficie de control esto es: la suma de la presión hidrostática y de los esfuerzos viscosos τ_{ij} (figura 6.6) (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

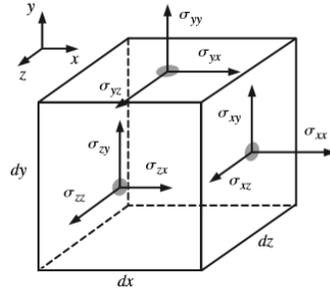


Figura 6.6 Dirección de las componentes de esfuerzos sobre un volumen de control infinitesimal. (Cengel Y. et al. 2006)

Cuando un fluido se mueve, la presión actúa hacia adentro normal en conjunto con los esfuerzos viscosos, σ_{ij} queda definida de la siguiente forma:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{pmatrix}$$

Ec. 6.4

Donde σ_{ij} es el tensor de esfuerzos. La diagonal principal son los esfuerzos normales, los cuales están formados por los esfuerzos de presión y los viscosos. Las componentes fuera de la diagonal principal se llaman esfuerzos cortantes. (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

6.3 Ecuaciones de conservación

6.3.1 Conservación de la masa: ecuación de continuidad

Las ecuaciones diferenciales (conservación de la masa y conservación del momento) se pueden obtener considerando un volumen de control, por simpleza se elige un volumen de control de dimensiones $dx \, dy \, dz$. En la figura 6.7 se muestran los flujos de entrada y el cambio del flujo en la salida.

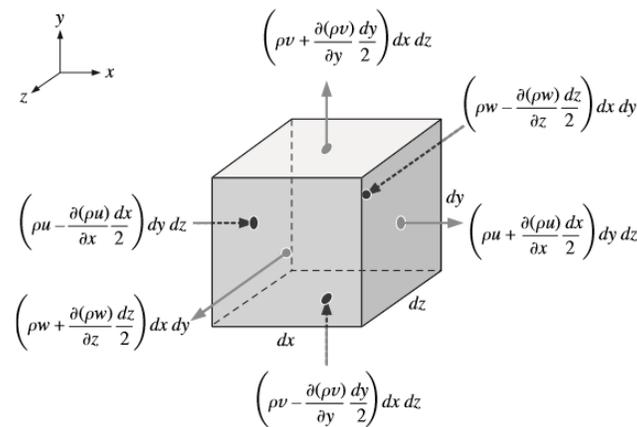


Figura 6.7 Flujos de entrada y salida de masa en un volumen de control infinitesimal. (Cengel Y. et al. 2006)

Del Teorema del transporte de Reynolds:

$$\iiint_{V_C} \frac{\partial}{\partial t} \rho dV + \sum_i (\rho_i A_i V_i)_{sal} - \sum_i (\rho_i A_i V_i)_{ent} = 0$$

Ec. 6.5

Con

$$\iiint_{V_C} \frac{\partial}{\partial t} \rho dV \approx \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz$$

Ec. 6.6

$$\begin{aligned} \sum_i (\rho_i A_i V_i)_{sal} - \sum_i (\rho_i A_i V_i)_{ent} &= \left[\rho u + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) dx \right] dy dz + \left[\rho v + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) dy \right] dx dz + \\ &+ \left[\rho w + \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) dz \right] dx dy - \rho u dy dz - \rho v dx dz - \rho w dx dy \end{aligned}$$

Ec. 6.7

Reduciendo términos en la ec. 4 y sustituyendo ec. 3 y ec. 4 en ec. 2

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz + \frac{\partial}{\partial x} (\rho u) dx dy dz + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) dx dy dz + \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) dx dy dz = 0$$

Ec. 6.8

Simplificando

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

Ec. 6.9

Con $\vec{V} = \vec{V}(u, v, w)$ esta es la ecuación de conservación de masa: (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{V} \cdot (\rho \vec{V}) = 0$$

Ec. 6.10

6.3.2 Conservación del momento

De igual manera este conjunto de ecuaciones se deduce mediante el uso de un volumen de control infinitesimal sobre el que se aplica la conservación de cantidad de movimiento lineal, en la figura

6.8 se muestran los flujos de cantidad de movimiento en la entrada y la salida a través de cada cara del volumen de control:

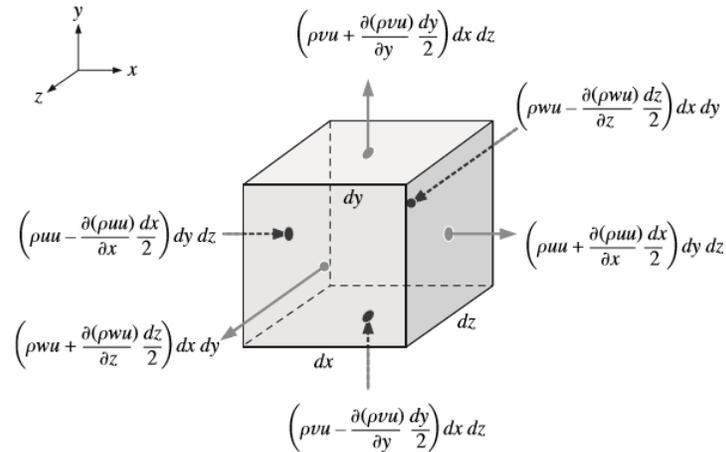


Figura 6.8 Flujos de entrada y salida de momento en un volumen de control infinitesimal. (Cengel Y. et al. 2006)

Aplicando el teorema de transporte de Reynolds para la componente x

$$\sum \vec{F}_x = \sum \vec{F}_{x,cuerpo} + \sum \vec{F}_{x,superficial} = \iiint_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) dV + \sum (u\dot{m})_{sal} - \sum (u\dot{m})_{ent} = 0$$

Ec. 6.11

$$\iiint_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) dV \approx \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) dx dy dz$$

Ec. 6.12

Realizando un procedimiento similar para la cantidad de movimiento sobre el diagrama anterior se obtiene

$$\sum (\dot{m}u)_{sal} - \sum (\dot{m}u)_{ent} = \left(\frac{\partial}{\partial x} (\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho vu) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho wu) \right) dx dy dz$$

Ec. 6.13

En el eje x la fuerza de cuerpo sobre el volumen de control es

$$\sum \vec{F}_{cuerpo} = \rho g_x dx dy dz$$

Ec. 6.14

De igual manera para el tensor de esfuerzos σ_{ij} que tiene unidades de fuerza por unidad de área:

$$\sum \vec{F}_{superficie} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \sigma_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \sigma_{yx} + \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zx} \right) dx dy dz$$

Ec. 6.15

Sustituyendo 6.12 a 6.15 en 6.11 y reduciendo

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vu) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho wu) = \rho g_x + \frac{\partial}{\partial x} \sigma_{xx} + \frac{\partial}{\partial y} \sigma_{yx} + \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zx}$$

Ec. 6.16

De igual manera para las componentes y y z

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vv) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho wv) = \rho g_y + \frac{\partial}{\partial x} \sigma_{xy} + \frac{\partial}{\partial y} \sigma_{yy} + \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zy}$$

Ec. 6.17

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho w) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uw) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vw) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho ww) = \rho g_z + \frac{\partial}{\partial x} \sigma_{xz} + \frac{\partial}{\partial y} \sigma_{yz} + \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zz}$$

Ec. 6.18

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (\vec{V} \vec{V}) = \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij}$$

Ec. 6.19

La cual es la manera más general de representar la conservación de momento de un fluido. (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003) La ec. 6.19, en conjunto con la ecuación de continuidad, la ecuación de energía y dos ecuaciones de la termodinámica (ecuaciones de estado) forman un sistema de ecuaciones consistente. Sin embargo, para un análisis más práctico se considera el uso del fluido newtoniano, en este los esfuerzos viscosos son proporcionales a la velocidad de deformación, esto hace que no intervengan variables termodinámicas. (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

6.4 Ecuación de Navier Stokes

Los fluidos newtonianos son aquellos fluidos en los cuales su razón de deformación es linealmente proporcional a la fuerza de corte aplicada. En consecuencia, las variables termodinámicas no son permitidas, lo que implica que la viscosidad μ es constante independientemente de la temperatura y presión a la cual es sometido el fluido (Bird R. et al. 2006, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003)

$$\tau_{ij} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix}$$

Ec. 6.20

$$\tau_{ij} = \begin{pmatrix} 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} & \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix}$$

Ec. 6.21

De tal manera la ecuación 6.19 queda como:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + 2\mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \mu \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

Ec. 6.22

Desarrollando

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right]$$

Ec. 6.23

$$= -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \left[\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right] + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right]$$

Ec. 6.24

Por la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \nabla^2 u$$

Ec. 6.25

Para y y z son similares

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y + \mu \nabla^2 v$$

Ec. 6.26

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z + \mu \nabla^2 w$$

Ec. 6.27

En forma vectorial se escribe:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = -\vec{\nabla}P + \rho\vec{g} + \mu\nabla^2\vec{V}$$

Ec. 6.28

A la ecuación 6.28 se le conoce como ecuación de cantidad de movimiento de Navier Stokes, este es un sistema de ecuaciones diferenciales parciales no lineales acopladas de segundo orden, las cuales aún no tienen soluciones analíticas, sólo es posible resolverlas para algunos dominios simples (geometrías simples), para problemas más complejos aún no tienen soluciones exactas, el estudio de geometrías más complicadas requiere el uso de métodos numéricos, los cuales discretizan el dominio de estudio con el fin de aproximar las ecuaciones diferenciales y dar una solución aproximada. (Kawahara M. 2016, Logan D. 2007, Cengel Y. et al. 2006, White F. 2003, Chandrupatla T. et al. 2002, Reddy J. 1993)

7. Método del elemento finito

El método de elemento finito es un método numérico en el cual dado el dominio de un problema este es representado como una colección de dominios más simples, llamados elementos finitos, de esta manera es posible construir un conjunto de funciones que aproximan la solución del problema dentro de esos dominios simplificados, utilizando el método de residuos pesados las ecuaciones diferenciales que gobiernan fenómenos físicos pueden transformarse en ecuaciones algebraicas más simples que gobiernan aisladamente a cada uno de los elementos. (Reddy J. 1993)

7.1 Características principales:

El método tiene tres características (Kawahara M. 2016, Logan D. 2007, Chandrupatla T. et al. 2002, Reddy J. 1993):

1. El dominio del problema es representado mediante una colección de subdominios más simples llamados elementos finitos, la colección de elementos es llamada la “malla” de elementos finitos.
2. Sobre cada elemento finito, el proceso físico es aproximado mediante funciones de un tipo deseado (polinomios u alguna otra), y las ecuaciones algebraicas relacionan las cantidades físicas a puntos selectos, llamados nodos. Estos polinomios algebraicos son generados mediante cierta teoría de interpolación.
3. Las ecuaciones del elemento son ensambladas usando un balance de las cantidades físicas y son resueltas. El ensamble de estos elementos representa una analogía discreta a lo largo del dominio original.

Ya que es una técnica de discretización se pueden tener cálculos de la solución en cada uno de los elementos del dominio y por tanto permite la representación “precisa” de dominios con geometrías complejas. Para obtener la solución del sistema se utiliza el método de Residuos pesados o Residuos ponderados, este método es útil para encontrar soluciones aproximadas de ecuaciones diferenciales mediante el uso de funciones auxiliares “arbitrarias” que generan un sistema de ecuaciones lineales.

El número de elementos usado en un problema depende principalmente del tipo de elemento y de la exactitud deseada. Existe más de un modelo de elemento finito para el mismo problema. El tipo de modelo depende de las ecuaciones diferenciales y los métodos utilizados para derivar las ecuaciones algebraicas (la forma integral-pesada usada) para hallar los coeficientes no determinados sobre cada nodo. Cualquier método apropiado o combinación de métodos pueden ser usados en principio para generar las ecuaciones algebraicas. (Kawahara M. 2016, Logan D. 2007, Chandrupatla T. et al. 2002, Reddy J. 1993)

7.2 Método de Residuos Ponderados

En el método de elemento finito se utiliza el método de residuos ponderados para crear las relaciones de los coeficientes u_j de la aproximación, esta es la solución a cada elemento por separado:

$$u = \sum_{j=1}^n u_j \psi_j$$

Ec. 7.1

Donde u representa la solución de una ecuación diferencial particular. El método de residuos ponderados utiliza funciones de prueba con coeficientes desconocidos, estas funciones son auxiliares para aproximar la solución de la ecuación diferencial mediante una formulación integral para crear un sistema de ecuaciones consistentes. (Reddy J. 1993)

Considerando la ecuación diferencial general 7.2, con esta ecuación es posible modelar transferencia de calor, flujos de fluidos, deflexión de una viga etc:

$$-\frac{d}{dx} \left[a(x) \frac{du}{dx} \right] + u = 0 \quad 0 < x < 1$$

Ec. 7.2

Con condiciones de frontera:

$$u(0) = 1 \quad \left(x \frac{du}{dx} \right)_{x=1} = 0$$

Ec. 7.3

Para encontrar los coeficientes se seleccionan funciones de peso w de tal manera que se cumpla la integral:

$$\int_{\text{dominio}} wR \, dx = 0$$

Ec. 7.4

w es llamada función de peso y R es llamado residual. Con ella se puede obtener tantas ecuaciones linealmente independientes como funciones independientes que componen la aproximación. Así este arreglo integral provee de medios para obtener tantas ecuaciones algebraicas como coeficientes desconocidos en la aproximación. A este método se conoce como residuos ponderados (forma fuerte). (Kawahara M. 2016, Logan D. 2007, Chandrupatla T. et al. 2002, Kwon W. et al. 1997, Reddy J. 1993)

7.3 Discretización espacial del dominio

Si el dominio consiste de todos los puntos entre $x = 0$ y $x = L$: $\Omega = (0, L)$, éste es dividido en un conjunto de elementos lineales (pueden ser de mayor orden), mediante elementos de longitud h_e , y como caso de estudio un elemento localizado entre los puntos A y B tal que $\Omega^e = (x_A, x_B)$ cuyos puntos finales tienen coordenadas $x = x_A$ y $x = x_B$ están aisladas de la malla. La colección de estos elementos es llamada malla de elemento finito del dominio. (Reddy J. 1993)

Existen dos razones para dividir el dominio en elementos finitos:

- Representar la geometría del dominio
- Aproximar la solución sobre cada elemento de la malla para poder obtener una mejor representación de la solución sobre el dominio entero

Como consideración general en este método, la discretización del dominio en un sistema equivalente de elementos finitos se tiene que tomar en cuenta que éstos deben de ser lo suficientemente pequeños para dar resultados congruentes y lo suficientemente grandes para reducir el tiempo de cálculo. (Kawahara M. 2016, Logan D. 2007, Chandrupatla T. et al. 2002, Kwon W. et al. 1997, Reddy J. 1993)

7.3.1 Elemento

Estas entidades son las partes que subdividen el dominio de estudio. Estas partes llamadas elementos finitos pueden tener distintas estructuras o formas geométricas dependiendo del tipo de estudio en 1, 2 o 3 dimensiones, cada uno de ellos tiene cierto número de nodos los cuales determinan el orden del elemento. El grado de interpolación del elemento depende del número de nodos que lo componen, el elemento más simple es el elemento lineal en una sola dimensión, llegando hasta elementos tridimensionales hexaédricos de 8 o 20 nodos (Kawahara M. 2016, Logan D. 2007, Chandrupatla T. et al. 2002, Zienkiewicz et al. 2000, Kwon W. et al. 1997, Reddy J. 1993)

7.3.2 Nodo

Es la unidad mínima de la cual se conforma el dominio de estudio, a cada elemento finito se le asigna un número específico de puntos llamados nodos, a cada uno de ellos le corresponde el valor de la variable o variables de la ecuación diferencial que se obtiene mediante interpolación dentro de cada elemento. Cada uno de estos puntos representa los valores exactos de la ecuación diferencial a calcular dentro en el dominio.

7.4 Formulación débil y derivación de las ecuaciones de elemento Finito

Considerando la ecuación diferencial:

$$-\frac{d}{dx} \left[a(x) \frac{du}{dx} \right] + cu = q(x) \quad 0 < x < L$$

Ec. 7.5

La solución $u(x)$, está sujeta a las condiciones de frontera:

$$u(0) = u_0 \quad \left(a \frac{du}{dx} \right)_{x=L} = Q_0$$

Ec. 7.6

Donde a y q son funciones conocidas que dependen de x , y las constantes u_0 y Q_0 a lo largo del dominio j son datos del problema. Subdividiendo en n elementos finitos el dominio L , se debe encontrar una solución aproximada de esta ecuación y obtener una solución polinómica en la forma 7.1 de tal manera que $u \approx U^e$:

$$U^e = \sum_{j=1}^n u_j^e \psi_j^e(x)$$

Ec. 7.7

Donde u_j^e son los valores de la solución en el nodo j del elemento e , y $\psi_j^e(x)$ son las funciones de aproximación del elemento e en un dominio aislado $\Omega^e = (x_A, x_B)$.

Los coeficientes u_j^e son determinados por medio del método de residuos ponderados, por tanto es necesario obtener un número n de ecuaciones para resolver los n valores de u_j^e del elemento.

Si se considera un elemento como en la figura 7.1:

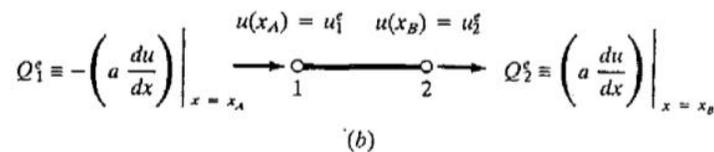
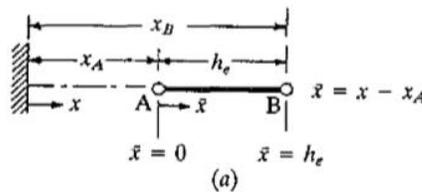


Figura 7.1 elemento característico de 2 nodos delimitado por las fronteras en x_A, x_B

Se multiplica por la función $w(x)$ e integramos sobre el dominio del elemento:

$$\int_{x_A}^{x_B} w \left[-\frac{d}{dx} \left(a \frac{du}{dx} \right) + cu - q \right] dx = 0$$

Ec. 7.8

La ecuación entre corchetes no es cero cuando u es reemplazada por su aproximación. Matemáticamente 7.8 es equivalente al error en la aproximación de la ecuación diferencial, pero es cero en el sentido de residuos ponderados. Esta integral nos permite escoger n funciones linealmente independientes para w y obtener n ecuaciones para u_1, u_2, \dots, u_n . Por regla de la cadena:

$$-w \left[\frac{d}{dx} \left(a \frac{du}{dx} \right) \right] = -\frac{d}{dx} \left(wa \frac{du}{dx} \right) + a \frac{dw}{dx} \frac{du}{dx}$$

Ec. 7.9

Así:

$$\int_{x_A}^{x_B} \left[-\frac{d}{dx} \left(wa \frac{du}{dx} \right) + a \frac{dw}{dx} \frac{du}{dx} + wcu - wq \right] dx = 0$$

Ec. 7.10

Integrando por partes y aplicando las condiciones de frontera:

$$0 = \int_{x_A}^{x_B} \left(a \frac{dw}{dx} \frac{du}{dx} + wcu - wq \right) dx - \left[wa \frac{du}{dx} \right]_{x_A}^{x_B} = 0$$

Ec. 7.11

Tomando en consideración que:

$$-Q_A = \left[a \frac{du}{dx} \right]_{x_A}$$

Y

$$Q_B = \left[a \frac{du}{dx} \right]_{x_B}$$

Ec. 7.12

Se obtiene:

$$0 = \int_{x_A}^{x_B} \left(a \frac{dw}{dx} \frac{du}{dx} + wcu - wq \right) dx - w(x_A)Q_A - w(x_B)Q_B = 0$$

Ec. 7.13

Esta forma tiene la característica principal de que requiere una continuidad “más débil” de la variable independiente. (Chandrupatla T. et al. 2002, Reddy J. 1993) La forma fuerte tiene la desventaja de que se necesita una función de prueba que al menos sea diferenciable 2 veces y no se haga cero. En la forma débil se “piden menos” requerimientos para la función de prueba, ya que solo se necesita que sea diferenciable una vez. (Reddy J. 1993)

7.5 Aproximaciones de la solución

Para la discretización en el elemento finito el orden mínimo del polinomio es un polinomio lineal, y es necesario usar los términos completos del polinomio, por tanto, debe ser de la forma:

$$U^e = a + bx$$

Ec. 7.14

Donde a y b son constantes. Entonces $U^e(x_A) = u_1^e$ y $U^e(x_B) = u_2^e$. Si se expresan las constantes a y b en términos de u_1^e y u_2^e . (Reddy J. 1993) Entonces

$$u_1^e = a + bx_A$$

$$u_2^e = a + bx_B$$

Ec. 7.15

Y en forma matricial

$$\begin{bmatrix} u_1^e \\ u_2^e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_A \\ 1 & x_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

Ec. 7.16

Resolviendo el sistema

$$U^e(x) = \psi_1^e(x)u_1^e + \psi_2^e(x)u_2^e = \sum_{j=1}^2 \psi_j^e(x)u_j^e$$

Ec. 7.17

Donde

$$\psi_1^e(x)u_1^e = \frac{1}{h_e}(\alpha_1^e + \beta_1^e x) = \frac{x_B - x}{x_B - x_A}$$

$$\psi_2^e(x)u_2^e = \frac{1}{h_e}(\alpha_2^e + \beta_2^e x) = \frac{x - x_A}{x_B - x_A}$$

Ec. 7.18

Las cuales son llamadas funciones lineales de aproximación de elemento finito. ψ_1^e Son las funciones de interpolación de los valores que debe tener la solución del sistema por elementos finitos. Estas definidas en coordenadas globales, si se expresan en coordenadas fijas en el nodo 1 del elemento $\psi_i^e(x)$ toma la forma:

$$\psi_1^e(\bar{x}) = 1 - \frac{\bar{x}}{h_e}$$

$$\psi_2^e(\bar{x}) = \frac{\bar{x}}{h_e}$$

Ec. 7.19

8. Dinámica de fluidos computacional

La Dinámica de fluidos computacional o computational fluid dynamics (CFD), es una rama de la mecánica de fluidos que conjunta la teoría de volumen finito con el poder de cálculo de las computadoras para crear una nueva herramienta para el análisis en fluidos en ingeniería. El análisis por CFD ha permitido ahorrar recursos en diseño, y construcción de sistemas complejos, generando un ahorro en términos de tiempo de diseño y económicos. (Versteeg H. et al. 2007, Patankar S. 1980)

8.1 Método de Volumen finito

A diferencia del método de elementos finitos el método de volumen finito tiene la ventaja de que se maneja en términos de variables de conservación sin la necesidad de generar funciones de peso, por ello tiene la ventaja de ser un método iterativo lo cual lo hace apto para calcular los campos de presión y velocidad más fácilmente que con otros métodos. (Patankar S. 1980)

En este método es útil escribir la ecuación de Navier Stokes en forma general, definiendo la ecuación general de transporte:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{V} \phi = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_{\phi}$$

Ec. 8.1

Esta es la forma conservativa de todas las ecuaciones de flujos de fluidos, incluyendo ecuaciones para cantidades escalares tales como la temperatura y concentración de alguna especie etc, así la ecuación 8.1 es llamada ecuación de transporte de la propiedad ϕ .

Donde:

$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi$: Término dependiente del tiempo

$\nabla \cdot \rho \vec{V} \phi$: Término convectivo

$\nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi)$: Término difusivo

Γ : Coeficiente de difusión

S_{ϕ} : Término fuente

El proceso de difusión afecta la distribución de una cantidad transportada a lo largo de sus gradientes en todas direcciones, mientras que la convección sólo tiene influencia en la dirección del flujo del fluido.

Esta ecuación es usada como punto de partida en el método de volumen finito, seleccionando ϕ igual a 1, u , v , w , o T etc, y usando los valores apropiados para el coeficiente de difusión y términos fuente, se pueden obtener cada una de las ecuaciones mostradas anteriormente: las ecuaciones 6.10 y 6.19 son resultados de esta ecuación más general. (Versteeg H. et al. 2007, Patankar S. 1980)

8.2 Desarrollo de flujo estacionario

En un problema de convección y difusión en estado estacionario, aplicando la ecuación general de transporte a un volumen de control infinitesimal, se debe cumplir para cualquier propiedad ϕ en un volumen de control de forma arbitraria:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{V} \phi) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi$$

Ec. 8.2

Integrando sobre el volumen de control y aplicando el teorema de la divergencia para los primeros dos términos de la ecuación:

$$\int_A \mathbf{n} \cdot (\rho \vec{V} \phi) dA = \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA + \int_{CV} \mathbf{n} \cdot S_\phi dV$$

Ec. 8.3

Esta ecuación representa el balance del flujo en el volumen de control, los términos del lado izquierdo corresponden al flujo neto convectivo, el lado derecho el flujo neto difusivo más la generación o destrucción de la propiedad ϕ en el volumen de control.

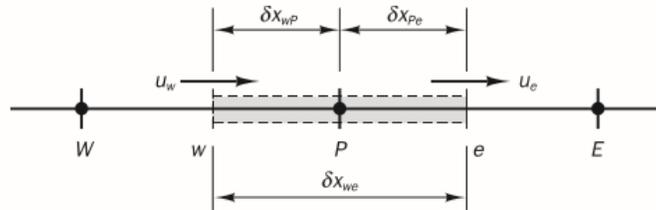


Figura 8.1 Representación de un volumen finito unidimensional con un centroide en P y con fronteras e y w. E y W son nodos de volúmenes vecinos (Versteeg H. et al. 2007)

Si se considera un volumen de control unidimensional (figura 8.1) la discretización del volumen en P, el dominio queda restringido entre los puntos w y e. Con un campo de velocidad u y en ausencia de fuentes la ecuación 8.2 se resume a:

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

Ec. 8.4

El flujo también satisface la ecuación de continuidad:

$$\frac{d}{dx}(\rho u) = 0$$

Ec. 8.5

Al integrar 8.4 sobre el volumen de control:

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_e - \left(\Gamma \frac{d\phi}{dx} \right)_w$$

Ec. 8.6

E integrando la ecuación de continuidad:

$$(\rho u A \phi)_e - (\rho u A \phi)_w = 0$$

Ec. 8.7

Para obtener las ecuaciones discretizadas de convección y difusión se debe de aproximar la ecuación 8.6, por conveniencia se definen dos variables F y D para representar el flujo convectivo de masa por unidad de área y la difusión en las caras de los volúmenes de control:

$$F = \rho u$$

Ec. 8.8

$$D = \frac{\Gamma}{\delta_x}$$

Ec. 8.9

Los valores de estas variables en las caras se escriben como:

$$F_w = (\rho u)_w$$

Ec. 8.10

$$D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta_{xPE}}$$

Ec. 8.11

Asumiendo que $A_w = A_e = A$ se divide la ecuación 8.6 entre A :

$$F_e \phi_e - F_w \phi_w = D_e (\phi_E - \phi_P) - D_w (\phi_P - \phi_W)$$

Ec. 8.12

La ecuación de continuidad queda como:

$$F_e - F_w = 0$$

Ec. 8.13

De tal manera que ϕ_p queda expresado en término de sus vecinas w y e . Esta es la manera en como el método de volumen finito hace la interpolación de cantidades sin la necesidad de determinar una función de peso como en elemento finito. Existen métodos de interpolación de mayor orden en el método de volumen finito que en general funcionan de la misma manera: la interpolación se realiza en términos de las celdas vecinas.

En este momento se tiene que asumir que el campo de velocidades es “conocido”, para calcular los valores de F_e y F_w , para resolver el problema completo se necesita calcular la propiedad de transporte ϕ en las caras e y w mediante algoritmos iterativos. (Versteeg H. et al. 2007)

8.3 Discretización del sistema

En un caso más general: un problema dependiente del tiempo y con algún término fuente, aplicando el método de volumen finito la ecuación general de transporte puede interpretarse de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{CV} \rho \phi dV \right) + \int_A \mathbf{n} \cdot (\rho u \phi) dA = \int_A \mathbf{n} \cdot (\Gamma_\phi \nabla \rho u \phi) dA + \int_{CV} \mathbf{n} \cdot S_\phi dV$$

Ec. 8.14

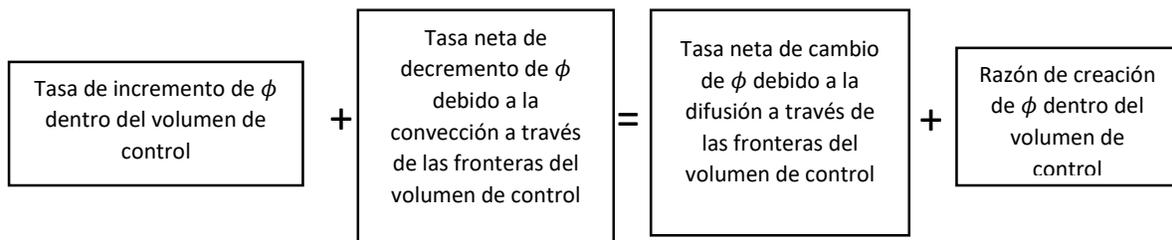


Figura 8.2. Significado físico de las partes que componen la ecuación general de transporte.

Aplicando a todo el dominio computacional, esta ecuación queda discretizada para cada volumen de control con N caras (excepto para los elementos en la frontera):

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} V + \sum_f^{N_{caras}} \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^{N_{caras}} \Gamma_\phi \nabla \phi_f \cdot \vec{A}_f + S_\phi V$$

Ec. 8.15

Donde:

N_{caras} : Número de caras encerrando la celda o volumen de control

ϕ_f : Valor de la variable ϕ transportada por convección a través de la cara f

$\rho_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f$: Flujo másico a través de la cara

\vec{A}_f : Área de la cara f

$\nabla\phi_f$: Gradiente de ϕ en la cara f

V : Volumen de la celda

La forma de esta ecuación es muy similar a la forma general dada 8.1 así que es aplicable a mallas no estructuradas compuestas de poliedros “arbitrarios”. (Manual Fluent® 2017) La ecuación de transporte 8.15 contiene la variable desconocida ϕ , así como los valores de celdas vecinas, ecuaciones similares son escritas para cada celda en la malla, esto resulta en un conjunto de sistemas de ecuaciones algebraicas.

La verdadera dificultad del cálculo del campo de velocidades consiste en que el campo de presiones es desconocido. El campo de presiones es indirectamente especificado mediante la ecuación de continuidad. Cuando el campo de presiones correcto es sustituido en las ecuaciones de momento, el campo de velocidades resultante satisface la ecuación de continuidad. (Versteeg H. et al. 2007, Patankar S. 1980)

8.4 Solver Basado en presión

La función de los solvers es “ajustar” los valores de las presiones en el dominio de tal manera que la ecuación de continuidad y los demás valores como las velocidades de los flujos se cumplan mediante la suposición de un campo de presiones “propuesto” en base a las condiciones de frontera. A lo largo de los años se han desarrollado varios solvers para la solución de estos sistemas, algunos más complejos que otros, dependiendo de su robustez es el tiempo de cómputo requerido para llegar a una solución.

Los algoritmos disponibles son SIMPLE, SIMPLEC, PISO y Coupled, siendo este último el más robusto de todos. Estos solvers utilizan algoritmos de solución donde las ecuaciones gobernantes son resueltas secuencialmente ya que estas ecuaciones son no lineales y están acopladas, es decir las ecuaciones gobernantes son “separadas” en ecuaciones individuales para las variables ($u, v, w, p, T, k, \varepsilon$) y son resueltas una después de otra, posterior a ello se resuelven mediante un proceso iterativo para obtener una solución numérica convergente. (Manual Fluent® 2017)

Mediante este algoritmo cada iteración consiste en los pasos siguientes:

1. Actualizar las propiedades del fluido (densidad, viscosidad, etc) basado en la solución actual (en la primera iteración estos valores serán dados por los valores de inicialización que se le dé al problema)
2. Resolver las ecuaciones de momento, una después de otra, usando los valores recién obtenidos de presión y flujos de masa en las caras.
3. Resolver la ecuación de corrección de presión usando los valores recién obtenidos del campo de velocidad y flujo másico.
4. Corregir los flujos másicos, presión, y campo de velocidad usando los valores de corrección de presión del paso 3.
5. Resolver las ecuaciones para escalares adicionales, ya sea, cantidades turbulentas, energía, especies, intensidad de radiación, usando los valores actuales de las variables de solución.
6. Actualizar los términos fuente que surgen de las interacciones alrededor de las diferentes fases.
7. Verificar la convergencia de las ecuaciones.

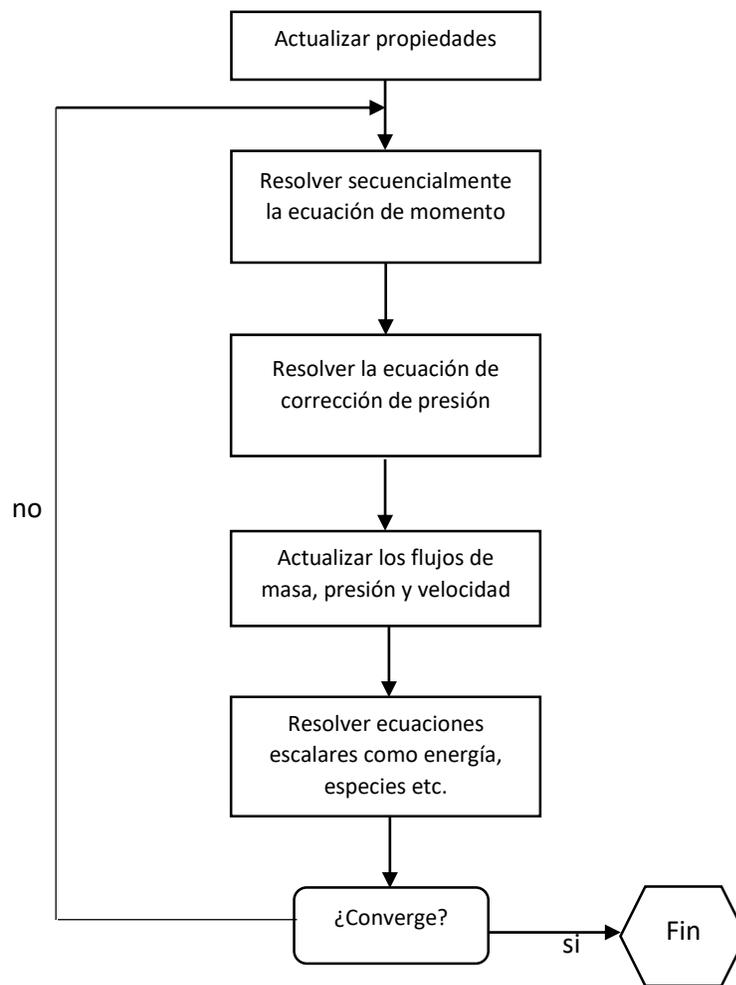


Figura 8.3. Algoritmo iterativo para resolver la ecuación general de transporte (Manual Fluent® 2017)

8.5 Residuales

Ya que el procedimiento de solución es iterativo para cada variable se genera un residual que representa la variación de las cantidades físicas respecto a la iteración anterior, esto para cada componente de velocidad, momento, variables de turbulencia etc. Estos residuales son una medida o cota para detener el proceso iterativo y declarar que tan pequeño se desea el error en el cálculo de la simulación.

La figura 8.4 muestra la gráfica de residuales de un problema bidimensional del flujo de una sola fase, utilizando un modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ en estado estable y que ha convergido alrededor de las 85 iteraciones.

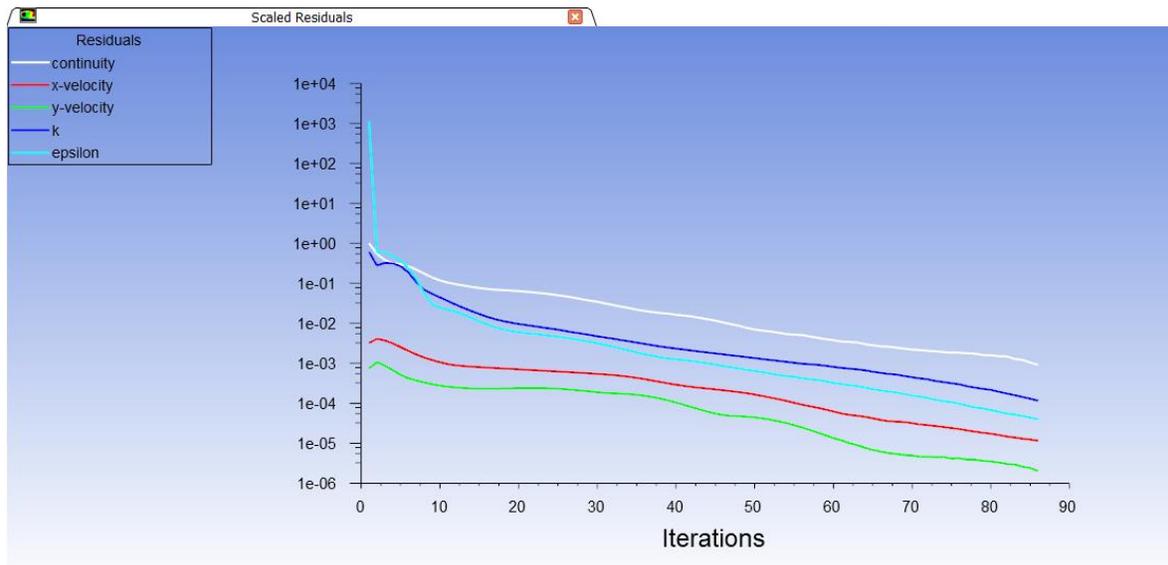


Figura 8.4 Para la mayoría de problemas, en ANSYS Fluent® el criterio por default de convergencia es que los residuales sean menores a un valor de $1e-3$ para todas las variables del problema.

9. Modelos Físicos en ANSYS Fluent®

El término de flujo multifásico se utiliza para referirse a cualquier flujo de fluido que consiste en más de una fase componente, excluyendo cuando los componentes se mezclan a nivel molecular. En consecuencia, el flujo tendrá algún nivel de separación de fase o componente a una escala superior al molecular.

Los fluidos que componen estos flujos multifásicos se clasifican en fases primarias o secundarias. La fase primaria se caracteriza como la fase continua o de envolvente de la fase secundaria (es la fase con mayor fracción de volumen). La fase secundaria es la que se distribuye por toda la fase primaria, cada fase presente en flujo multifásico puede ser laminar o turbulenta, lo que produce una variedad de regímenes de flujos para la mezcla. (Zamora M. 2016)

Los estudios por CFD en PBR se han incrementado en la última década. Los datos usados para determinar el performance de un PBR usando CFD están reportado en la literatura, comúnmente se estudia: campo de velocidades, diámetro de burbuja y TKE (energía cinética turbulenta). Haciendo uso de modelos multifase Euler-Euler para su análisis. Dicho esto, para el modelo del fotobiorreactor la fase primaria o fase continua se definirá como agua, por tanto, la fase secundaria o dispersa se definirá como aire.

Para modelar este tipo de interacción ANSYS Fluent® tiene distintos modelos multifase Euler- Euler los cuales tienen distintas capacidades y características dependiendo de los tipos de análisis o flujos que se deseen realizar.

9.1 Modelo Volume of Fluid (VOF)

El modelo VOF puede modelar 2 o más fluidos inmiscibles mediante la solución de un conjunto de ecuaciones de momento rastreando las fracciones de volumen de cada fluido a través del dominio.

En otras palabras, si la q -ésima fracción de volumen en el volumen finito es denotada como α_q entonces las siguientes tres condiciones son posibles:

$\alpha_q=0$: El volumen finito está vacío (de q -ésimo fluido)

$\alpha_q=1$: El volumen finito está lleno (del q -ésimo fluido)

$0<\alpha_q<1$: El volumen finito contiene la interfase entre el q -ésimo fluido y uno o más fluidos.

Basado en el valor local de α_q , las propiedades apropiadas y las variables serán asignadas a cada volumen de control dentro del dominio.

9.1.1 Conservación de masa

El sistema es resuelto mediante la solución de la ecuación de continuidad para la fracción de volumen de cada fase del flujo. Para la q -ésima fase, esta ecuación tiene la forma:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n \dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}$$

Ec. 9.1

Donde

ρ_q : Densidad de la fase q

\dot{m}_{qp} : Transferencia de masa de la fase q a la p

\dot{m}_{pq} : Transferencia de masa de la fase p a la q

\vec{v}_q : Velocidad de la q -ésima fase

Por default, el término fuente S_{α_q} del lado derecho de la ecuación 9.1, es cero, pero podría ser especificada como constante.

9.1.2 Conservación de momento

Se resuelve una sola ecuación de momento a través del dominio, y el campo de velocidades resultante es compartido entre las fases. La ecuación de momento es dependiente de las fracciones de volumen de todas las fases debido a las propiedades ρ y μ .

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla [\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F}$$

Ec. 9.2

$\nabla [\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)]$: Tensor de esfuerzos viscosos de las fases

\vec{F} : Fuerza externa, que por default es cero

Una limitación de este método es cuando exista una diferencia grande entre los campos de velocidad de las fases, la exactitud de las velocidades calculadas puede verse afectada.

9.2 Modelo Mixture

Este es usado para modelar flujos multifase homogéneos con un fuerte acoplamiento en las fases y moviéndose a la misma velocidad. El modelo mixture, también es una aproximación de “fluido simple”, esto es, que el modelo resuelve la ecuación de continuidad y momento para la mezcla.

Diferencia en el VOF:

- El modelo de mixture las fracciones de volumen α_q y α_p para un volumen de control pueden ser equivalentes a cualquier valor entre 0 y 1, dependiendo en el espacio ocupado por la fase q y la fase p .
- Este modelo permite que las fases se muevan a diferentes velocidades, usando el concepto de velocidad relativa.

En resumen, este modelo resuelve las ecuaciones de continuidad y momento para el promedio de las n fases de la mezcla, de esta manera solo resuelve una sola ecuación para continuidad y otra para el momento.

9.2.1 Ecuación de Continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m) = 0$$

Ec. 9.3

\vec{v}_m es la velocidad promedio:

$$\vec{v}_m = \frac{\sum_{k=1}^n a_k \rho_k \vec{v}_k}{\rho_m}$$

Ec. 9.4

ρ_m es la densidad de la mezcla:

$$\rho_m = \sum_{k=1}^n a_k \rho_k$$

Ec. 9.5

a_k es la fracción de volumen k -ésima fase.

9.2.2 Conservación de Momento

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \vec{v}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \vec{v}_m \vec{v}_m) \\ &= -\nabla p + \nabla \left[\mu_m (\nabla \vec{v}_m + \nabla \vec{v}_m^T) \right] + \rho_m \vec{g} + \vec{F} - \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \vec{v}_{dr,k} \vec{v}_{dr,k} \right) \end{aligned}$$

Ec. 9.6

Donde

n : Número de fases

\vec{F} : Fuerza de cuerpo

$\nabla \left[\mu_m \left(\nabla \vec{v}_m + \nabla \vec{v}_m^T \right) \right]$: Tensor de esfuerzos viscosos de las fases

$$\mu_m = \sum_{k=1}^n \alpha_k \mu_k$$

Ec. 9.7

$\vec{v}_{dr,k}$ es la velocidad de relativa para la fase secundaria k :

$$\vec{v}_{dr,k} = \vec{v}_k - \vec{v}_m$$

Ec. 9.8

$\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \vec{v}_{dr,k} \vec{v}_{dr,k}$ es la interacción entre las dos fases en este modelo

La ecuación 9.8 compensa (o toma en cuenta) la diferencia de velocidades entre las dos fases, pero, en este caso la principal limitante es que existe una diferencia sustancial de la densidad y viscosidad de las fases involucradas en este modelo, por las ecuaciones 9.5 y 9.7 es posible que no sea una buena aproximación para este modelo.

9.3 Modelo Eulerian

El modelo multifase Eulerian, modela las fases del sistema por separado, la fracción de volumen ocupada en el espacio por cada fase es denotada por α_q . En este esquema se cumplirán las leyes de conservación de momento y masa para cada fase individualmente.

$$V_q = \int_V \alpha_q dV$$

Ec. 9.9

Donde

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1$$

Ec. 9.10

La densidad de la fase q es

$$\rho_q = \alpha_q \rho_q$$

Ec. 9.11

9.3.1 Ecuación de continuidad

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

Ec. 9.12

Donde

\vec{v}_q : Velocidad de la fase q

\dot{m}_{pq} : Transferencia de masa de la fase p a la q

\dot{m}_{qp} : Transferencia de masa de la fase q a la fase p .

S_q : Término fuente, por default es cero. Pero se puede especificar un valor constante para cada fase.

9.3.2 Ecuación de momento

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_m) \\ = -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) + \vec{F} \end{aligned}$$

Ec. 9.13

$\bar{\bar{\tau}}_q$ representa el tensor de la fase q

El término que se encuentra dentro de la suma en la ecuación 9.13 representa las fuerzas entre la interfase de los fluidos, que depende de la fricción, presión, cohesión, y otros efectos.

El modelo Eulerian permite modelar para cada fase por separado, tomando en cuenta sus interacciones. Las fases interactuando pueden ser líquidos gases o sólidos en cualquier combinación. No tiene limitaciones al definir las características de los fluidos, gases o sólidos en el sistema, además también tiene la capacidad de modelar las interfases entre las fases como el modelo VOF.

9.4 Resumen modelos multifase

9.4.1 Modelo VOF

Está diseñado para dos o más fluidos inmiscibles donde la posición de la interfase entre éstos es de interés. En el modelo VOF, las ecuaciones de momento son compartidas por los fluidos, la fracción de volumen, propiedades para cada fluido y su interacción en el dominio son rastreadas y calculadas en cada volumen computacional.

9.4.2 Modelo Mixture

Está diseñado para dos o más fases. Este modelo resuelve la ecuación de momento y continuidad para la mezcla (suma las propiedades de todas las fases) y calcula la velocidad de cada fase calculando la velocidad relativa entre las fases.

9.4.3 Modelo Eulerian

Este resuelve las ecuaciones de momento y continuidad para cada fase participante en el sistema (Cada una contará con su propio sistema de ecuaciones de momento), el cálculo de las propiedades como campo de velocidad y de presiones se calculan para cada fase tomando en cuenta las interacciones que se puedan dar entre estas.

9.4.4 Selección del modelo Multifase

Ya que el interés del estudio tiene que ver con la interacción agua-aire hay que tomar en cuenta que:

Las densidades de estos fluidos varían en dos órdenes, por tanto, no se puede considerar el modelo Mixture debido a las ecuaciones 9.5 y 9.7, ya que las velocidades entre las fases pueden ser bastante variables para distintos tipos de biorreactores, además este modelo considera que las fases son completamente miscibles, algo que no sucede entre el agua y aire.

Debido a la existencia bien definida de la interfase agua-aire del biorreactor el modelo VOF podría proporcionar una buena aproximación, por otro lado, puede existir una diferencia grande entre los campos de velocidad entre ambas fases, por tanto, este modelo puede no ser tan exacto en esta aplicación. Debido a las limitaciones antes mencionadas de los modelos VOF y Mixture es necesario recurrir al modelo Eulerian, debido a prácticamente no tener limitaciones calculando las velocidades de las fases. Cabe señalar que el tiempo de cómputo de este modelo es el doble o triple que VOF y Mixture debido a su robustez.

9.5 Fuerza Drag

Esta fuerza interfasial se genera en un cuerpo que se encuentra en movimiento a través de un fluido, esto debido a la interacción de las fuerzas de corte y la condición de no deslizamiento. Esta fuerza está relacionada a la forma geométrica de la partícula. Esta fuerza tiene sentido opuesto al movimiento de dicha partícula y por tanto, limita, su movimiento y su velocidad dentro de la fase primaria.



Figura 9.1 Representación de la dirección de la fuerza Drag o fuerza de arrastre sobre una burbuja

Está dada en términos de un coeficiente de arrastre, la densidad de la fase primaria y las velocidades entre ambas fases:

$$F_D = \frac{1}{2} C_d A_p |\vec{v}_p - \vec{v}_q| (\vec{v}_p - \vec{v}_q)$$

Ec. 9.14

Donde:

A_p : Área Característica

C_d : Coeficiente de arrastre

\vec{v}_p : Velocidad de la burbuja

\vec{v}_q : Velocidad de la fase primaria

$\vec{v}_p - \vec{v}_q$: Velocidad relativa

9.6 Fuerza Lift

Esta es una fuerza que se genera en la fase secundaria debido a los gradientes de velocidad de la fase primaria. Esto provoca una fuerza perpendicular al flujo de la fase secundaria lo que se refleja en un cambio en la dirección del movimiento y por tanto afecta directamente el campo de velocidad del flujo.

Es importante tomar en cuenta esta fuerza en el cálculo del campo de velocidades ya que de lo contrario podría sobreestimar la velocidad de la fase primaria.

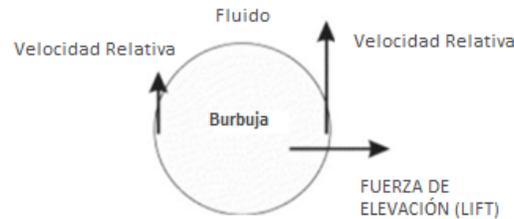


Figura 9.2 Representación de la fuerza Lift sobre una burbuja debido a los gradientes de velocidad a su alrededor

$$\vec{F}_l = C_l \alpha_p \rho_q (\vec{v}_q - \vec{v}_p) \times (\nabla \times \vec{v}_q)$$

Ec. 9.15

Donde:

C_l : Coeficiente de arrastre

α_p : Fracción de Volumen de la fase Secundaria

ρ_q : Densidad de la fase Primaria

\vec{v}_p : Velocidad de la burbuja

\vec{v}_q : Velocidad de la fase primaria

$\vec{v}_p - \vec{v}_q$: Velocidad relativa

9.7 Modelación de la turbulencia

Los flujos turbulentos son caracterizados por la fluctuación de sus campos de velocidad (figura 9.3), estas fluctuaciones son de carácter tridimensional y aleatorio, la modelación de este tipo de fenómeno conlleva un estudio tanto espacial como temporal.



Figura 9.3 Visualización de un chorro de flujo donde se aprecia lo caótico que puede ser un fluido debido a la turbulencia (Versteeg H. et al. 2007)

Existen distintas formas de modelar la turbulencia, los modelos LES (Large Eddy Simulation, figura 9.4) son modelos los más robustos sin embargo requieren gran tiempo de cómputo y cantidad de memoria. Debido a eso existen otras opciones de modelos más ampliamente usados por la industria debido a su robustez y tiempo de cómputo: los modelos RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) dentro de esta categoría existe un gran catálogo de modelos de turbulencia, los cuales los más usados son los $k - \varepsilon$ o $k - \omega$. (Manual Fluent® 2017, Versteeg H. et al. 2007, Patankar S. 1980)

Cada modelo de turbulencia tiene sus respectivas ventajas y desventajas dependiendo del tipo de problema que se esté modelando. Uno de los más recurridos en modelación de biorreactores son los modelos $k - \omega$ (Bitog et al. 2011) ya que tienen un buen compromiso entre el tiempo de cómputo y precisión (Manual Fluent® 2017).

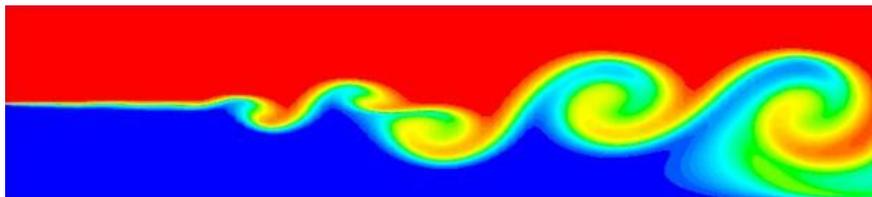


Figura 9.4 Eddys o remolinos generados debido a la fluctuación del flujo.

9.7.1 Escala de longitud temporal:

En los modelos RANS la velocidad $u(t)$ puede modelarse mediante un término de velocidad media U más una componente fluctuante $u'(t)$ (figura 9.5), así la velocidad se define como: $u(t) = U + u'(t)$. El término $u'(t)$ es promediado en el tiempo para calcular los gradientes de velocidad que se produzcan cerca de estos remolinos sin tener que recurrir a escalas de tiempo demasiado pequeñas

(1e-6s), de esta manera es posible trabajar en órdenes alrededor de 1e-3s dependiendo de la velocidad del flujo. (Manual Fluent® 2017).

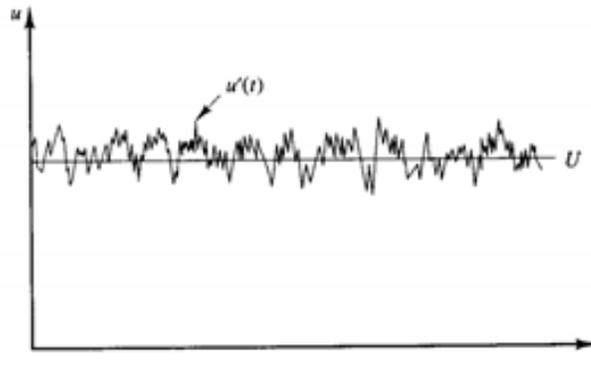


Figura 9.5 Fluctuación de la variable velocidad en un punto en el espacio. (Versteeg H. et al. 2007)

9.7.2 Escala de longitud espacial:

En el caso de modelos LES es necesario tener en cuenta el tamaño mínimo de vórtice que se desea modelar (figura 9.6) para generar una malla lo suficientemente fina y calcular los pequeños vórtices o remolinos generados en el sistema (donde el tamaño del remolino más grande es el mismo tamaño que el sistema o dominio completo y el mínimo tamaño o escala depende de la viscosidad del fluido) para flujos en ingeniería un tamaño típico va de 0.1 mm a 0.01mm. En el caso de modelos RANS no es necesaria hacer esta consideración ya que las velocidades son promediadas y los remolinos no son calculados directamente (figura 10.4).

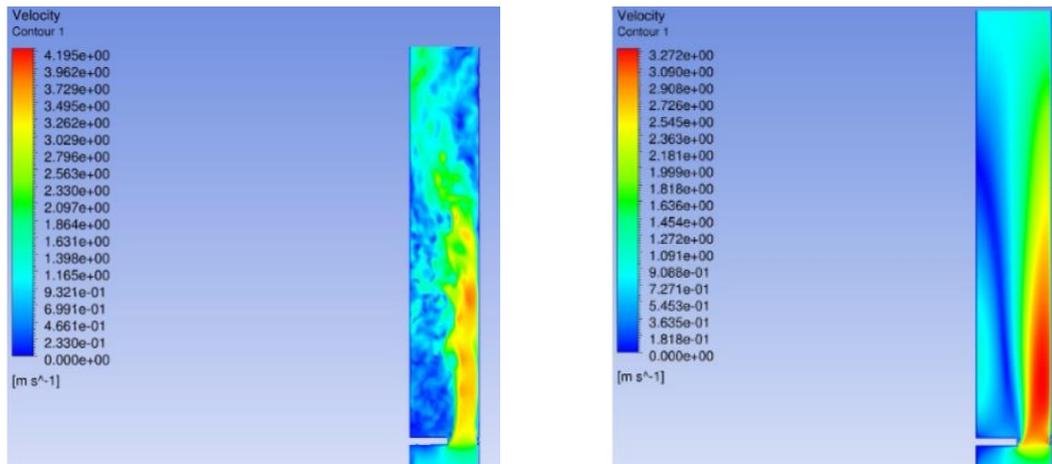


Figura 9.6 perfiles de velocidad. Comparación entre el modelo LES (izquierda) vs $k - \epsilon$ estándar (derecha) (modelo RANS) (Raef Kobeissi)

9.7.3 Intensidad turbulenta

La intensidad turbulenta está dada en función del término de velocidad fluctuante $u'(t)$ y la velocidad media del flujo U . La intensidad turbulenta en el núcleo de un flujo que pasa dentro de un ducto puede ser estimado de la siguiente relación empírica:

$$I = \frac{u'}{U} = 0.16(Re)^{-1/8}$$

Ec. 9.16

Como ejemplo a números de Reynolds de 50,000 la intensidad turbulenta debe ser de 4% de acuerdo con esta relación. Esta intensidad turbulenta está definida en ANSYS como una intensidad media, siendo valores iguales o mayores a 10% como una intensidad alta (Manual Fluent® 2017)

9.7.4 Modelo $k - \varepsilon$

En este se adhieren al sistema del fluido 2 ecuaciones de balance en derivadas parciales que relacionan la energía cinética turbulenta k y su razón de disipación ε . Este modelo se ha convertido en uno de los modelos clásicos para trabajos de ingeniería, es robusto, económicamente computacional, tiene una precisión razonable para resolver un amplio rango de fluidos turbulentos, este modelo tiene algunas variantes mejoradas: RNG y el Realizable. (Manual Fluent® 2017, Versteeg H. et al. 2007, Patankar S. 1980)

9.7.5 Modelo $k - \varepsilon$ RNG

El modelo RNG responde mejorar los efectos de esfuerzos cortantes rápidos y líneas de corriente curvadas que en comparación con el modelo estándar $k - \varepsilon$ no son completamente bien modelados, las ecuaciones que componen este modelo son: (Manual Fluent® 2017, Versteeg H. et al. 2007, Patankar S. 1980)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial X_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial X_j} \right) + G_k + G_b - \rho \varepsilon + S_k$$

Ec. 9.17

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial X_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial X_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{1\varepsilon} G_b) + C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon$$

Ec. 9.18

Donde

k : Energía cinética de turbulencia y está definida como la variación de las fluctuaciones en la velocidad. Tiene dimensiones de m^2/s^2

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

ε : Disipación del torbellino turbulento (la razón a la cual las fluctuaciones se disipan) y tiene dimensiones de k por unidad de tiempo m^2/s^3

$$\varepsilon = - \frac{dk}{dt}$$

G_k : Generación de energía cinética de turbulencia debido a los gradientes de velocidad

G_b : Generación de energía de turbulencia debido a la fuerza boyante

$C_{1\varepsilon}$ y $C_{2\varepsilon}$ son constantes determinadas experimentalmente

9.7.6 Modelo $k - \omega$ SST

Este es un modelo mejorado del modelo $k - \omega$ estándar, que inicialmente es empírico. Al igual que los modelos $k - \varepsilon$, cuenta con dos ecuaciones. Este modelo tiene como propósito mejorar la difusión del flujo de cizalla o esfuerzos cortantes, además de robustez en flujos libres en comparación a los modelos $k - \omega$ estándar, siendo este modelo el más robusto en lo que concierne a interacciones rápidas en comparación con modelos $k - \varepsilon$, de esta manera este modelo también es uno de los modelos clásicos para trabajos de ingeniería, es robusto y está definido por las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial X_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial X_j} \right) + G_k - Y_\omega + S_k$$

Ec. 9.19

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial X_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial X_j} \left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial X_j} \right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega$$

Ec. 9.17

Donde:

k : Energía cinética de turbulencia y está definida como la variación de las fluctuaciones en la velocidad. Tiene dimensiones de m^2/s^2

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

$$\omega = \frac{d\varepsilon}{dk}$$

G_k : Generación de energía cinética de turbulencia debido a los gradientes de velocidad

G_ω : La generación de ω

Γ_k : Difusividad de k

Γ_ω : Difusividad de ω

9.8 Discrete Phase Model (DPM)

Este modelo es otra aproximación para flujos multifase que ofrece Fluent, la diferencia con los modelos antes mencionados (9.1, 9.2 y 9.3) es que este utiliza un marco de referencia lagrangiano para la fase secundaria, mediante el rastreo de las trayectorias de partículas dentro de la fase continua.

La restricción para poder usar este modelo es que la fracción de volumen de la fase dispersa debe ser menos del 10% que la fracción de volumen de la fase continua (fase primaria). En esta aproximación la fase secundaria consta de partículas esféricas, que se distribuyen en toda la fase continua. Fluent® calcula las trayectorias de estas entidades, así como calor y transferencia de masa de o hacia ellas mediante su interacción. (Figura 9.7) (Manual Fluent® 2017)

Sus usos son:

- Calcular las trayectorias de la fase discreta, usando la formulación lagrangiana, considerando: inercia de las partículas, arrastre hidrodinámico y fuerza de gravedad
- Predicción de los efectos de turbulencia en la dispersión de las partículas debido a remolinos presentes en la fase continua
- Combustión de partículas

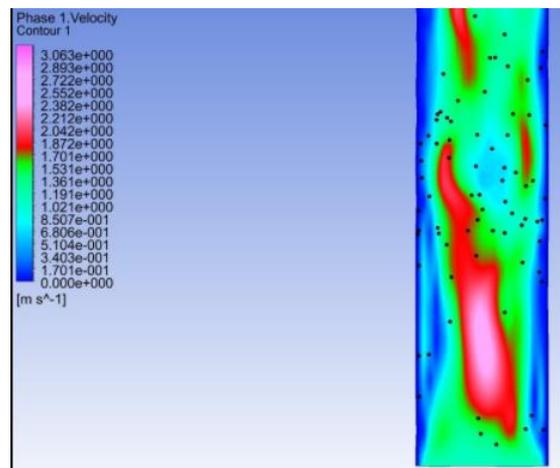


Figura 9.7 Partículas dentro de un agitador cilíndrico (Raef Kobessi)

Es posible mediante este modelo por su aproximación lagrangiana calcular la trayectoria de las partículas hasta que alcancen una salida en el dominio o algún criterio específico. Dependiendo del comportamiento en las condiciones de frontera que se impongan o hasta que llegue a un número fijo de pasos de tiempo para la partícula, así, mediante esta herramienta es posible calcular la distribución y posición de las partículas dentro de un dominio a lo largo del tiempo.

9.9 Tipos de elementos

Dependiendo de la física y tipo de modelo es posible realizar un mallado 2D o 3D, en caso de modelos 2D los elementos más comúnmente usados son los elementos triangulares debido a su versatilidad para ajustarse a curvas y geometrías complicadas, otro tipo del elemento son los cuadrangulares que son los más óptimos para CFD, sin embargo, no tienen la versatilidad de los elementos triangulares y es más complicada la creación de la malla con este tipo de elementos.

ANSYS® trabaja con diferentes tipos de elementos o volúmenes de control, cada uno tiene ciertas ventajas respecto a otros dependiendo de la aplicación o el tipo de geometría que tenga el dominio. En caso de modelos 3D son utilizados elementos tetraédricos, hexaedros, prismas y piramidales. (Figura 9.8) (Manual Fluent® 2017)

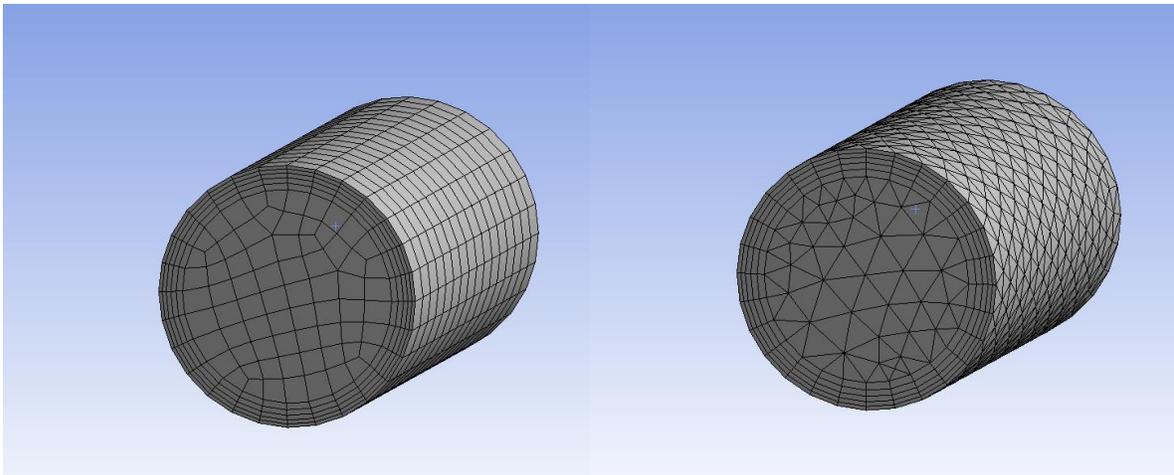


Figura 9.8 Discretización de una sección de tubería mediante elementos hexaédricos (izquierda), discretización con elementos tetraédricos (derecha). (ANSYS Meshing® 2018)

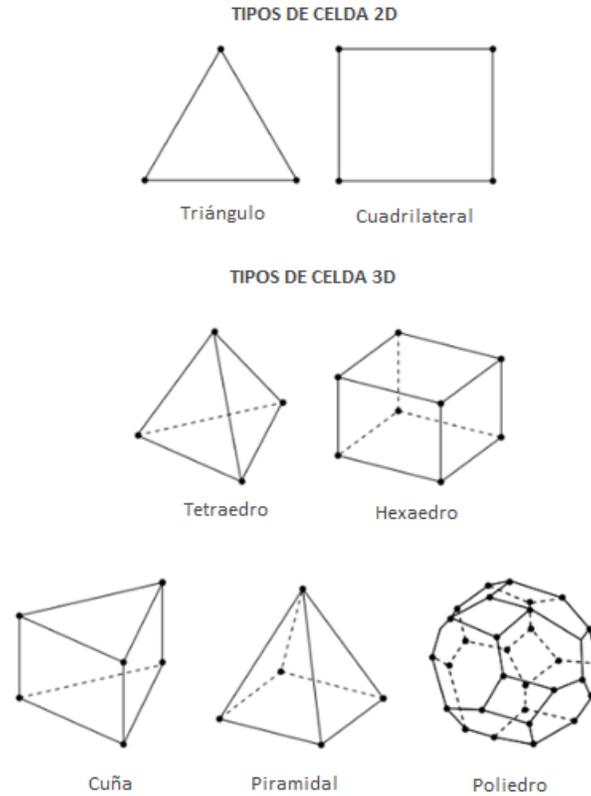


Figura 9.9 Elementos usados en ANSYS Fluent® para discretización de dominios. (Manual Fluent® 2017).

9.10 Calidad de la malla

La calidad de la malla es de suma importancia ya que de ello depende la convergencia de los resultados del fenómeno físico que se desea modelar. Para definir una buena calidad en la malla básicamente se tienen que cumplir ciertos criterios geométricos en los elementos o volúmenes de control que conforman nuestra discretización, esto es: que los volúmenes de control estén lo menos deformados posible respecto a sus formas geométricas ideales.

En pocas palabras, para decir que un elemento hexaédrico tiene “buena calidad”, la forma de éste tiene que asemejarse a la forma de un cubo, cuanto más se aleje de esa forma geométrica se dirá que su calidad es “mala” (figura 9.10).

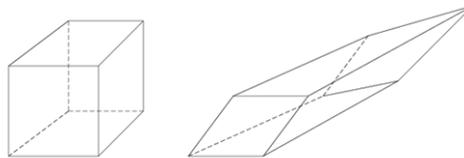


Figura 9.10 Ejemplo de un elemento hexaédrico de buena calidad (izquierda) y de mala calidad (derecha)

Para verificar la calidad de la malla ANSYS® tiene 2 métricas que se usan comúnmente en CFD; Skewness y Orthogonal Quality. En caso de Orthogonal Quality se mide el grado de deformación de los elementos respecto a sus vecinos y les asigna un valor entre 0 y 1, es recomendable para CFD que los elementos tengan un valor cercano a 1.

Para determinar la ortogonalidad de cada volumen de control, las siguientes cantidades deben ser calculadas para cada cara i del volumen, ejemplificado en la figura 9.11:

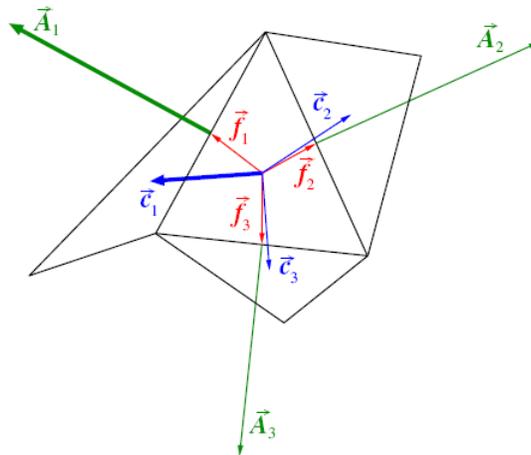


Figura 9.11 Vectores \vec{A}_i , \vec{c}_i y \vec{f}_i para calcular la ortogonalidad en un elemento tetraédrico

El producto punto normalizado entre el vector área \vec{A}_i de la cara i del elemento y el vector \vec{f}_i que va del centroide de ese mismo elemento hacia el centroide de la cara i :

$$\frac{\vec{A}_i \cdot \vec{f}_i}{|\vec{A}_i| |\vec{f}_i|}$$

Ec. 9.18

O el producto punto normalizado del vector área \vec{A}_i y el vector que inicia del centroide del elemento al centroide del elemento adyacente que comparte esa cara \vec{c}_i :

$$\frac{\vec{A}_i \cdot \vec{c}_i}{|\vec{A}_i| |\vec{c}_i|}$$

Ec. 9.19

El valor mínimo que resulte de calcular 9.18 y 9.19 y para todas las caras es definido como la ortogonalidad para el volumen finito.

10. Metodología del Cultivo de Microalga

Se empleó la microalga *Nannochloropsis Oculata*. Esta cepa fue obtenida de la colección del Laboratorio de Biotecnología de Microalgas (LBM) de la Universidad del Mar campus Puerto Ángel (UMAR), en donde también se realizó el cultivo y las respectivas mediciones.

10.1 Cultivo de la microalga

El experimento se llevó a cabo por triplicado en garrafones de vidrio (fotobiorreactores) con capacidad de 20 litros. El cultivo se inició el 16 de mayo del 2016 alrededor de las 17 horas, con las especificaciones mostradas a continuación (tabla 10.1):

La microalga fue cultivada en el medio f2 Guillard que usa como base agua de mar obtenida de las costas de Puerto Ángel, Oaxaca. Con una densidad de 1025-6 kg/m³ y una salinidad de 3.5-6%. (El-Sheekh M. et al. 2015, Khatoon H. et al. 2014)

Cepa	<i>Nannochloropsis Oculata</i>
Volumen de medio	15 litros
Inóculo	1 litro
Iluminación	75 μmol *fotones/s
Temperatura	25-26 C ⁰
Densidad celular de inóculo	17,227,273 células/ml.
pH inicial	7.6

Tabla 10.1. Condiciones de cultivo en la UMAR

El cultivo fue mantenido bajo iluminación continua con lámparas fluorescentes blancas y aireación continua (figura 10.2 a, b y c) durante los 20 días (hasta observar fase de muerte).

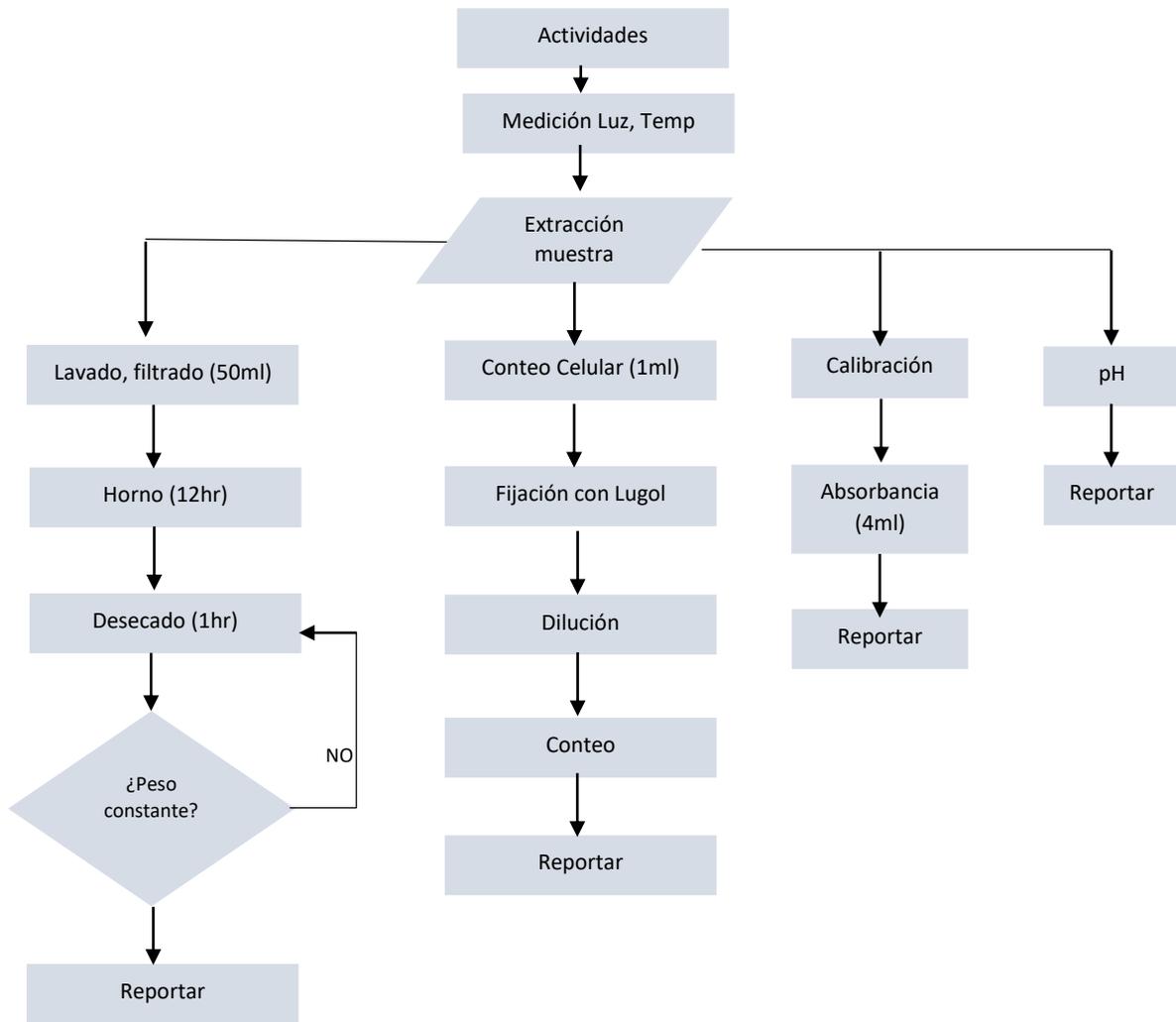


Figura 10.1 Diagrama de flujo del procedimiento de las mediciones a lo largo del cultivo



Figura 10.2. a) Fotobiorreactor con medio de crecimiento (izquierda), b) Fotobiorreactor después de inocular (Derecha)



Figura 10.2. c) Biorreactor al terminar los 20 días de cultivo.

10.2 Cinéticas de crecimiento

De este ensayo se midió peso seco, conteo celular, absorbancia, temperatura, luz. El peso seco y pH fueron medidos cada dos días. Todas estas mediciones se realizaron en el laboratorio de biotecnología de microalgas de la universidad el mar. En la figura 10.1 se muestra el diagrama de flujo que ilustra las distintas mediciones que se realizaron al cultivo.

10.2.1 Conteo celular

Para tomar una muestra del cultivo se tomaron 2 ml con una pipeta serológica, se colocaba en un tubo cónico de centrifuga con capacidad de 10 ml y posteriormente se fijó con una gota de Lugol. Para el recuento celular se utilizó un microscopio de contraste de fase (figura 10.3).

Materiales empleados:

- Microscopio óptico Olympus BX51
- Cámara de Neubauer marca Optik Labor
- Pipeta Pasteur
- Agitador tipo vórtex Agua de mar estéril
- Pipeta serológica de 2 ml

Se usó un agitador tipo vórtex para homogeneizar la muestra, posterior a esto, se usaba una pipeta Pasteur para colocar la cantidad adecuada en la cámara de Neubauer y enseguida se realizaba la medición.

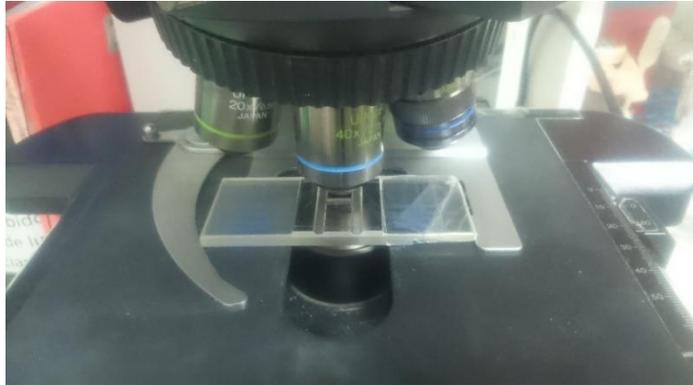


Figura 10.3. a) Microscopio óptico Olympus BX51 (izquierda), b) Cámara de Neubauer montada en el microscopio (derecha)

10.2.2 Densidad óptica

Se utilizó también como una medida indirecta de la densidad poblacional mediante la medición de la absorción de la clorofila a. Es uno de los métodos más usuales para estimar la concentración celular (Ma Y. et al. 2014, Khatoon H. et al. 2014), esta clorofila es un pigmento natural de las plantas el cual se encarga de convertir la energía solar en energía química (figura 10.4).

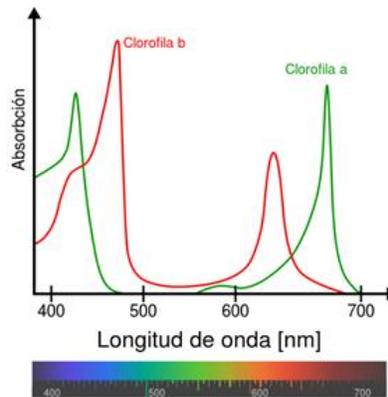


Figura 10.4. Picos de absorción característicos de la clorofila a y b

Esta clorofila en conjunto con otros pigmentos accesorios ayuda a la síntesis del ATP que es la fuente principal de energía para la mayoría de las funciones celulares y la fijación de CO₂. Los principales picos de absorción de la clorofila a están en 680nm y 450nm (Ma Y. et al. 2014, Khatoon H. et al. 2014)

Materiales empleados:

- Espectrofotómetro marca BECKMAN modelo DU530
- Celda con capacidad de 4ml
- Agua de mar estéril
- Agitador tipo vórtex

Se colocó una muestra de medio f2 Guillard estéril en la celda como blanco para el espectrofotómetro, una vez hecha la calibración a cero, se enjuagó la celda, se homogeneizó muestra del cultivo, se colocó 4 ml en la celda y se realizó el escaneo (figura 10.5).



Figura 10.5. a) Sistema de captura de espectro electromagnético computadora y espectrómetro BECKMAN modelo DU530 (Izquierda), b) Muestras de cultivo y celdilla para espectrómetro (Derecha)

10.2.3 Peso seco

En esta prueba se tomó una muestra de 50 ml del cultivo la cual se filtró usando un tamaño de poro de 0.07 μ m, mediante un matraz kitasato y una bomba de vacío. Posterior a esto se colocó en el horno de secado a 50 C⁰ durante 24 horas, para el almacenamiento de los filtros se usó un desecador para evitar que se absorbiera humedad (figura 10.6).

Materiales:

- Balanza analítica
- 2 desecadores de plástico (con sílice)
- 1 pinza
- 1 charola de aluminio
- Bomba de vacío
- Matraz kitasato

Se realizaron 10 mediciones de cada filtro cada hora y se tomó el promedio o en su defecto hasta que alcanzaran un peso constante durante tres mediciones seguidas.



Figura 10.6. a) Balanza analítica, desecador, filtro (derecha), b) Matraz kitasato con filtro (izquierda)

10.2.4 pH

El pH es una medida de la acidez o alcalinidad en una solución. Mide la concentración del ion hidrógeno. Las especies de microalga solo pueden crecer bajo ciertos valores de pH sin tomar en cuenta el factor ambiental. (Khatoon H. et al. 2014)

Nannochloropsis Oculata óptimamente se cultiva en valores cercanos a los 7.5. Para llevar un control se verificó el pH con una muestra de 25 ml de cultivo mediante un vaso de precipitados de 50 ml y un medidor de pH marca Hanna.

Cabe mencionar que el pH fue evolucionando con el crecimiento de la microalga manteniendo los niveles de aireación y CO₂ constantes, para mantener la turbulencia y flujos constantes a lo largo de todo el tiempo de cultivo, y no tener que reajustar la curva debido a agentes ajenos al medio de crecimiento.

11. Resultados (cultivo microalga)

11.1 Recuento celular

Las mediciones de conteo celular son la medida más directa del desarrollo del cultivo mediante visualización de una muestra de células extraídas del cultivo, verificando también que no exista contaminación por parte de algún agente externo (figura 11.1). (Khatoon H. et al. 2014, El- Sheekh M. et al. 2015).

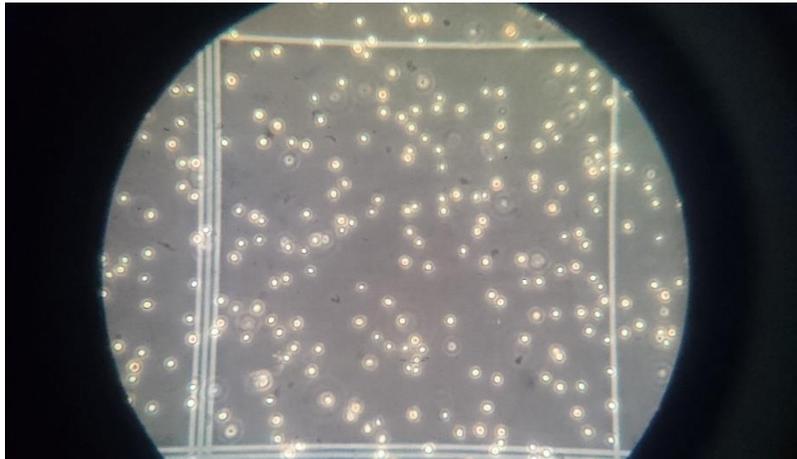


Figura 11.1 Células de Nannochloropsis Oculata vista en cámara de Neubauer para recuento celular antes de aplicar dilución.

Se observa una tendencia similar al trabajo de Tracey y colaboradores (2014), en donde se sigue la misma tendencia de crecimiento (o término de fase de crecimiento exponencial) ya que termina alrededor del día 10 de cultivo. Se observó un tamaño promedio de entre 2 y 4 micrómetros tal como menciona Montalescot (Montalescot V. et al. 2015). El comportamiento del cultivo se observa en la figura 11.2, se pueden observar las fases de crecimiento de la microalga, teniendo como término del crecimiento exponencial al día 7 e inicio de la fase de muerte al día 16, la fase lag es poco apreciable debido a que el inóculo se encontraba en condiciones ambientales similares al cultivo antes de ser introducido.

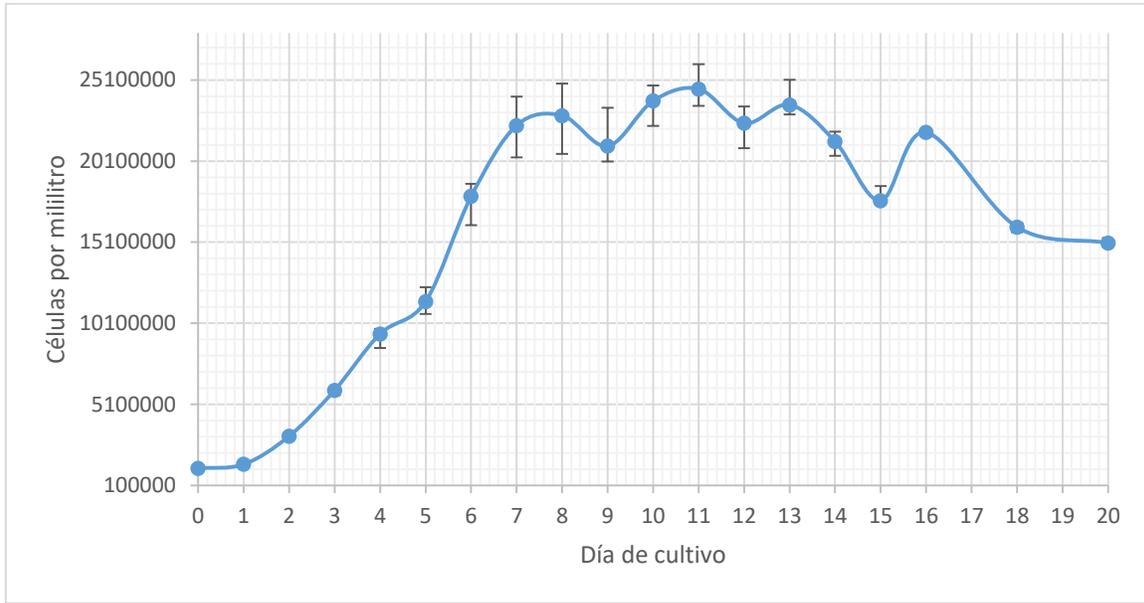


Figura 11.2 Crecimiento del cultivo a lo largo de los 20 días

11.2 Densidad óptica

Se obtuvo un comportamiento similar de la medición de clorofila a. Los principales picos de absorción de la clorofila a están en 680nm y 450nm (figura 11.3). Los otros picos pertenecen a los pigmentos accesorios. (Khatoon H. et al. 2014, El- Sheekh M. et al. 2015)

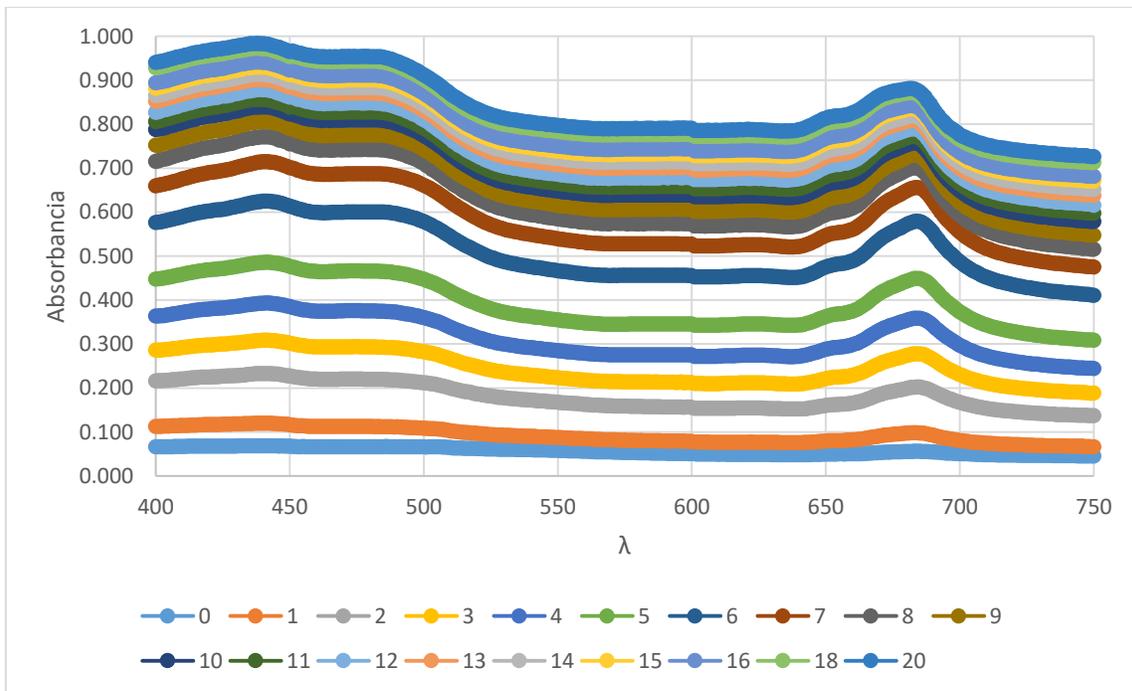


Figura 11.3 Curvas de absorbancia durante los 20 días de cultivo, cada línea de color representa la absorbancia del cultivo al día x.

La separación entre cada línea de color indica la diferencia de la concentración de la pigmentación al paso de los días, un análisis rápido indica que el crecimiento máximo (máxima separación entre líneas) ocurre entre los días 1 a 7, y el inicio de la fase estacionaria comienza al día 8 cuando las lecturas de absorbancia comienzan tener una poca variación en sus valores.

Como se observa en las figuras siguientes (11.4 y 11.5) existe un comportamiento similar al igual que en el recuento celular el crecimiento se detiene alrededor del día 7 del cultivo.

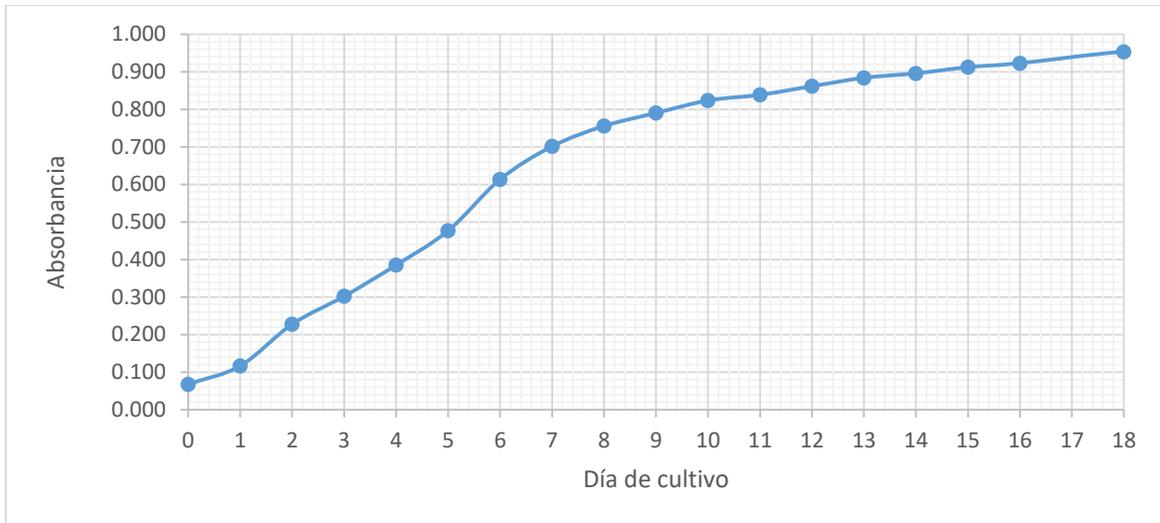


Figura 11.4 Curva de absorbancia a 450nm

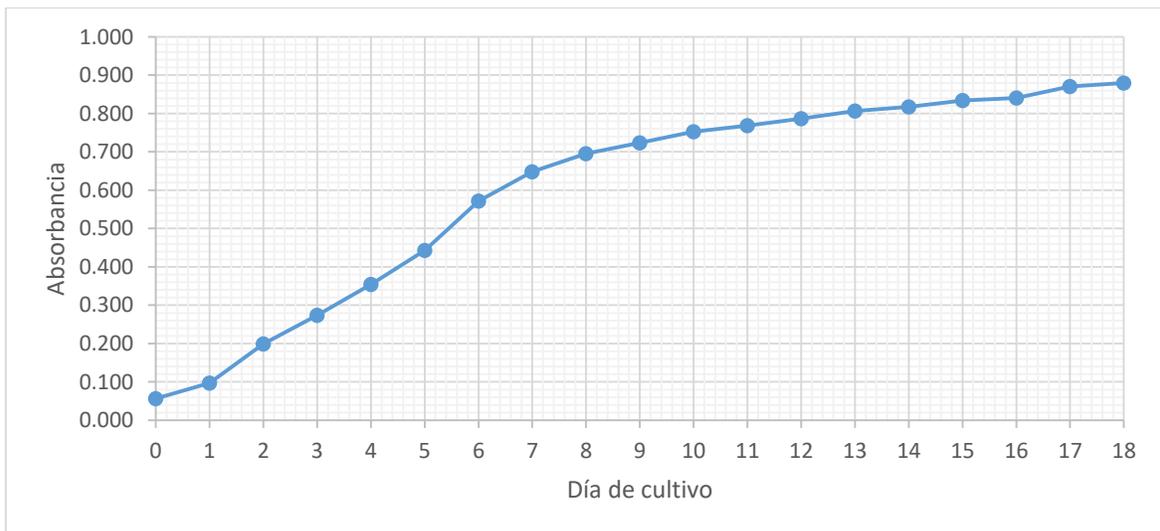


Figura 11.5 Curva de absorbancia a 680nm

En las gráficas 11.4 y 11.5 se observa un desarrollo similar a lo largo de todo el tiempo de cultivo, además de ser coincidentes con el comportamiento de la gráfica 11.2 que es basada en el recuento celular. Ya que también se observa el término del crecimiento al día 7 del cultivo.

11.3 Peso seco

Se observa un crecimiento continuo a lo largo de los 20 días de cultivo. Ma Y. y colaboradores (2014) observan un comportamiento similar en su trabajo. Existe una gran dispersión en los primeros días de cultivo debido a factores como humedad, sensibilidad de los instrumentos, o error humano, ya que la biomasa obtenida es “muy pequeña” y por esta característica los errores hicieron más grande la dispersión (figura 11.6).

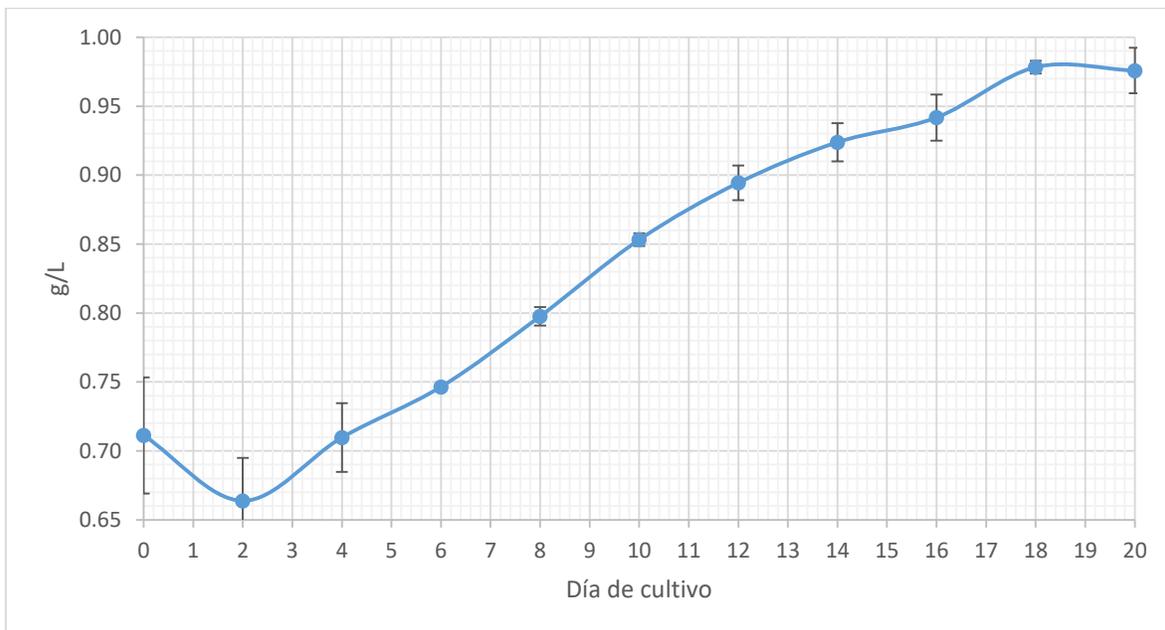


Figura 11.6. Gráfico de la evolución de la biomasa del cultivo

11.4 pH

El pH varía en función del CO_2 disuelto en el medio de crecimiento y de la tasa de absorción de la microalga, en el experimento se utilizó aire sin ningún agregado de CO_2 . La tasa de aireación fue continua a lo largo del desarrollo de los cultivos. El pH no puede llegar a tener valores menores a 7.0 ya que esto puede provocar una inhibición en el desarrollo de lípidos en *Nannochloropsis Oculata*, sin embargo un pH alto implica que existe una falta de CO_2 disuelto. (Chiu S.Y. et al. 2009)

Día	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20
pH	8.7	9.1	9.3	9.5	9.6	9.4	9.3	9.5	9.3	9.4	9.3

Tabla 11.2. Evolución del pH del cultivo a lo largo de 20 días

Se observa un aumento en el pH (tabla 11.2) lo que indica el incremento de la población de células. Se observa un incremento desde el día 0 hasta el día 8, que coincide con el tiempo en que el cultivo está en fase exponencial. Posterior a eso se observa un comportamiento oscilatorio en el pH cuando la población llegó a la fase estacionaria.

11.5 Cálculo de μ_a

En peso seco, conteo celular y espectrometría se observó un comportamiento de crecimiento similar, se puede decir que las diferencias entre estas se deben a ciertos errores o incertidumbres debidas a la diferencia entre las características que mide cada métrica.

Se determinó μ_a mediante el cálculo de la pendiente en la fase experimental a partir del conteo celular. Los valores de X_1 y X_2 corresponde respectivamente a los tiempos T_1 y T_2 de los días de cultivo, la tasa de crecimiento μ fue determinada mediante la relación (Traisey T et. al. 2014):

$$\mu_a = \frac{\ln(X_2) - \ln(X_1)}{(t_2 - t_1)}$$

Ec. 11.1

En recuento celular y absorbancia se llega a que la producción máxima fue en el día 2 del cultivo con una tasa de crecimiento de $\mu_{a_{max}} = 0.80 \text{ día}^{-1}$, y una tasa media de crecimiento en la fase exponencial de $\mu = 0.42 \text{ día}^{-1}$.

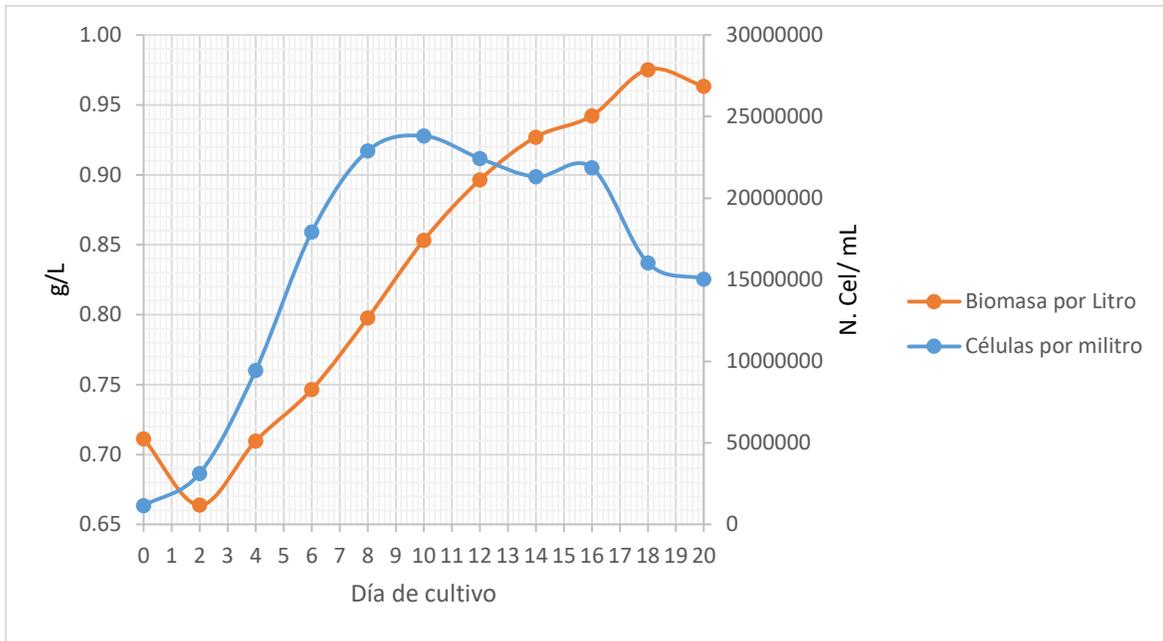


Figura 11.7 Gráfica de peso seco vs recuento celular

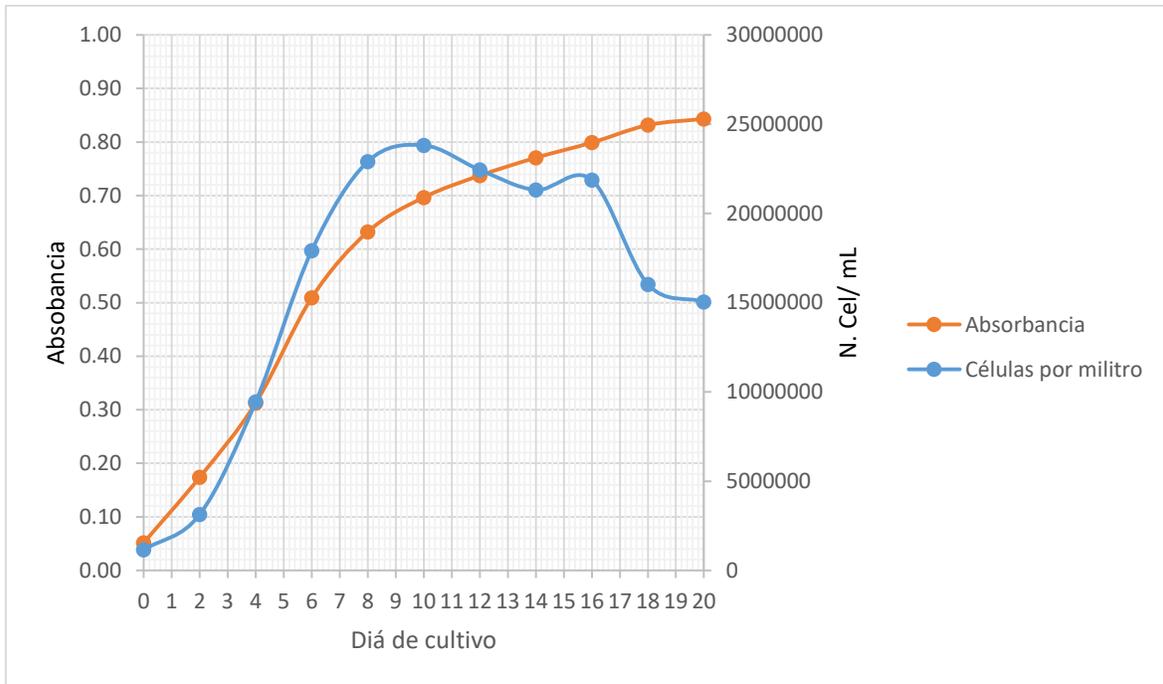


Figura 11.8 Gráfica recuento celular vs absorbancia

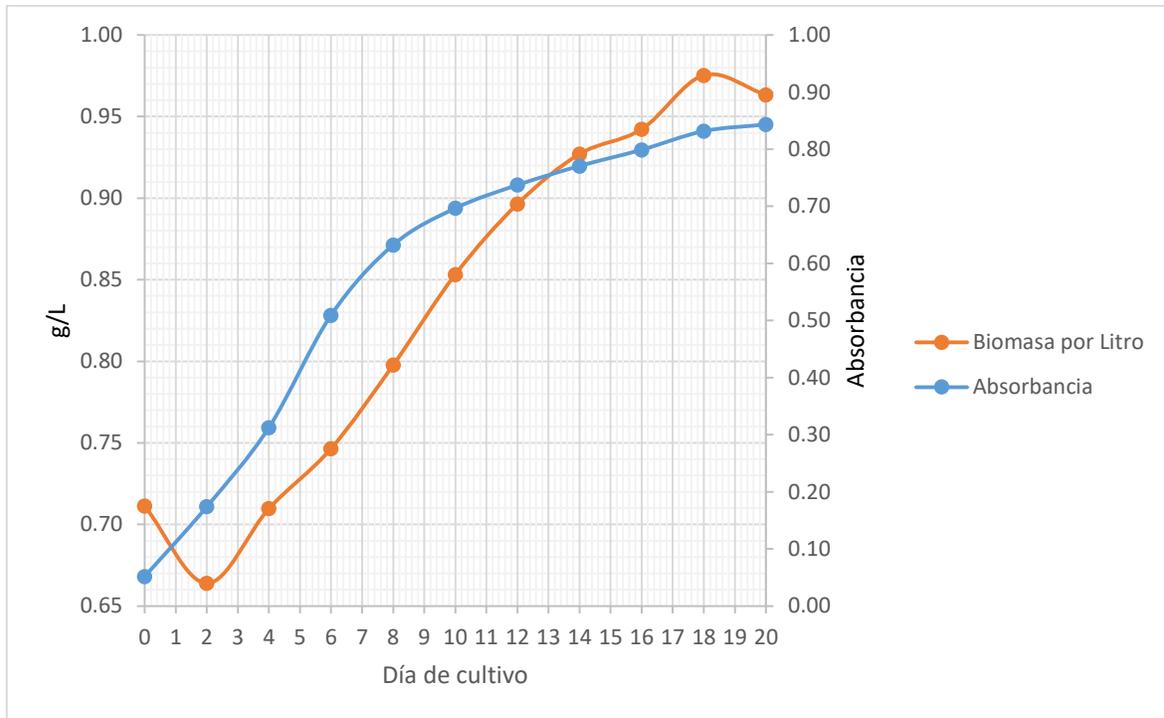


Figura 11.9 Gráfica peso seco vs absorbancia

Se observa en las figuras 11.7, 11.8 y 11.9 que existe cierta variación en el comportamiento de crecimiento, la que más variación presenta es la de peso seco vs conteo celular ya que en el peso seco no se aprecia la fase de muerte celular como también sucede en la espectroscopia.

La producción de biomasa no es consistente con la razón de crecimiento μ_a ya que la concentración de biomasa se acumuló constantemente a lo largo de los 20 días de cultivo, que es un comportamiento también registrado (Ma Y. et al. 2014). Sin embargo, si coincide en que la máxima producción se llevó a cabo en el día 2 del cultivo.

Existen algunas características que afectan positiva o negativamente la producción una de ellas es la edad del inóculo, ya que tiene un fuerte impacto en la duración de la fase lag y la concentración inicial del inóculo. La fase lag se minimiza cuando las células están adaptadas al medio de crecimiento y haber estado en condiciones ambientales similares antes de la inoculación. (Vasumathi K. et al. 2012). Es por ello que $\mu_{a_{max}}$ se haya dado al segundo día de cultivo, ya que el inóculo provenía de un cultivo similar en condiciones de luz, pH y medio de crecimiento.

12. Metodología de Simulación en ANSYS Fluent®

12.1 Modelos físicos

El primer paso es validar el setup para modelar correctamente la física dentro de los fotobiorreactores, esta comprobación se realizó con un modelo experimental llevado a cabo por Luo and Al- Dahhan 2008, en el cual miden el perfil de velocidades de un fotobiorreactor de 15L mediante la técnica de rastreo de partículas radioactivas (CARPT o computer Automated Radioactive Particle Tracking). Verificando así los modelos físicos ocupados para dar veracidad de los resultados que se obtendrán para los modelos propuestos, asegurando que los perfiles tanto de velocidad y turbulencia son representados correctamente en el modelo.

Se aplicó un modelo bifásico Euler-Euler, de esta manera se obtiene una simulación del flujo de aire como un medio continuo teniendo su propio set de ecuaciones de momento, se utilizó un modelo de turbulencia $k - \omega$ para mejorar la interacción del fluido con las paredes del fotobiorreactor. Los modelos utilizados se enlistan en la siguiente tabla:

Solver	Pressure based (Implicit)
Modelo multifase	EULER-EULER (Eulerian)
Fase primaria	Agua
Fase secundaria	Aire
Modelo de turbulencia	$k - \omega$
Discretización Espacial	TERCER ORDEN
Condición en el tiempo	Estado transitorio
Tamaño de burbuja	0.003m
Intervalo de tiempo	0.005s

Tabla 12.1 Modelos utilizados en la configuración del modelo

Las simulaciones se llevaron a cabo en las instalaciones de Grupo SSC S. A. de C. V. sede ciudad de México, la licencia utilizada para la simulación fue prestada por la empresa, y se utilizó una Workstation con un procesador Xeon E3 con 16 Gb de memoria Ram, el tiempo de cálculo fue aproximadamente de 2 días para cada simulación.

12.2 Modelado y Mallado

El modelado se hizo mediante la herramienta SolidWorks®, posterior a ello se realizaron los cambios concernientes en la herramienta SpaceClaim® que es el modelador que incorpora ANSYS®. La configuración de este fotobiorreactor se realizó mediante la descomposición en un cuerpo multipartes, compartiendo la topología entre cada parte vecina y así generar una malla hexaédrica asegurando la mayor calidad posible. En la figura 12.1 se muestra el mallado del fotobiorreactor, se observa en diferentes colores los cuerpos que componen el volumen de estudio.

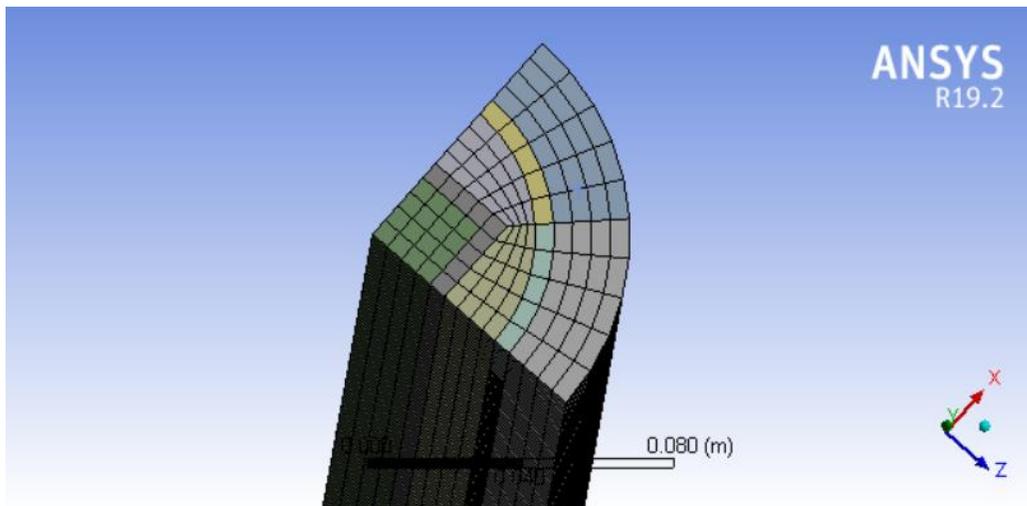


Figura. 12.1 Captura de la parte superior del fotobiorreactor.

Para mantener buenas condiciones de skewness y calidad ortogonal se implementaron inyectores de aire cuadrados en aras de obtener mejor convergencia y un tamaño más uniforme de elementos. Además de ser más adecuados para generar una malla hexaédrica.

La geometría fue mallada mediante el método de Multizone y Sweep, que son métodos de mapeo para dominios compuestos por cuerpos multipartes, obteniendo los valores en calidad de malla que se muestran en la tabla 12.2:

Métrica	Skewness	Orthogonal Quality
Min	3.18e-10	0.73549
Max	0.500	1
Ave	0.13478	0.96577
SD	0.11325	4.2579e-2

Tabla 12.2 Valores de calidad de malla obtenidos de ANSYS Meshing®. Se muestran los valores máximos y mínimos tanto de Skewness y Orthogonal Quality.

El valor máximo de skewness obtenido es de 0.5 y una calidad ortogonal mínima de 0.73 que son valores bastante “buenos” según las métricas mencionadas en la sección 9.10. El histograma de la figura 12.2 agrupa los elementos dependiendo de su calidad, se observa que la mayoría de estos se encuentran agrupados en valores de skewness cercano a cero y los elementos de “peor” calidad tienen un valor máximo de 0.5 en skewness y representan menos de 2 500 elementos. El número de elementos utilizados en esta simulación es de 24 376.

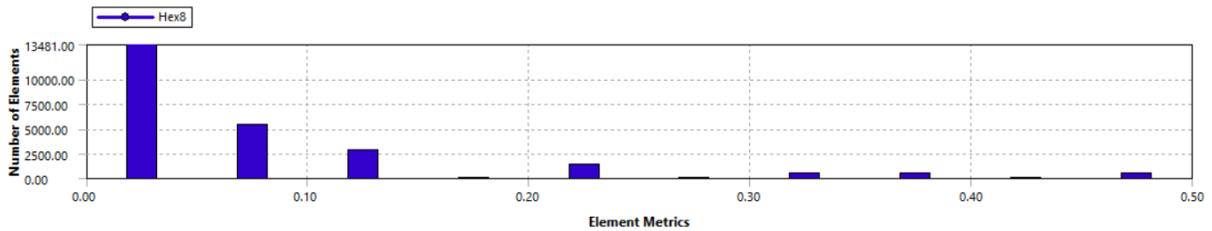


Figura 12.2 Histograma obtenido de ANSYS Meshing®. El Histograma muestra la calidad de los elementos y los agrupa dependiendo de su grado de calidad.

12.3 Consideraciones geométricas

El software proporciona herramientas para realizar modelos bidimensionales o modelos axisimétricos para geometrías con este tipo de simetría, sin embargo una buena aproximación al modelo real es usar un dominio 3D debido a que la turbulencia es un fenómeno tridimensional (Luo H.P. et al. 2011, Soman Abhinav et al. 2015). Aun así debido a la forma simétrica del biorreactor se modeló una $\frac{1}{4}$ parte de su volumen. En la figura 12.3 se muestra el dominio de ésta cuarta parte del fotobiorreactor.

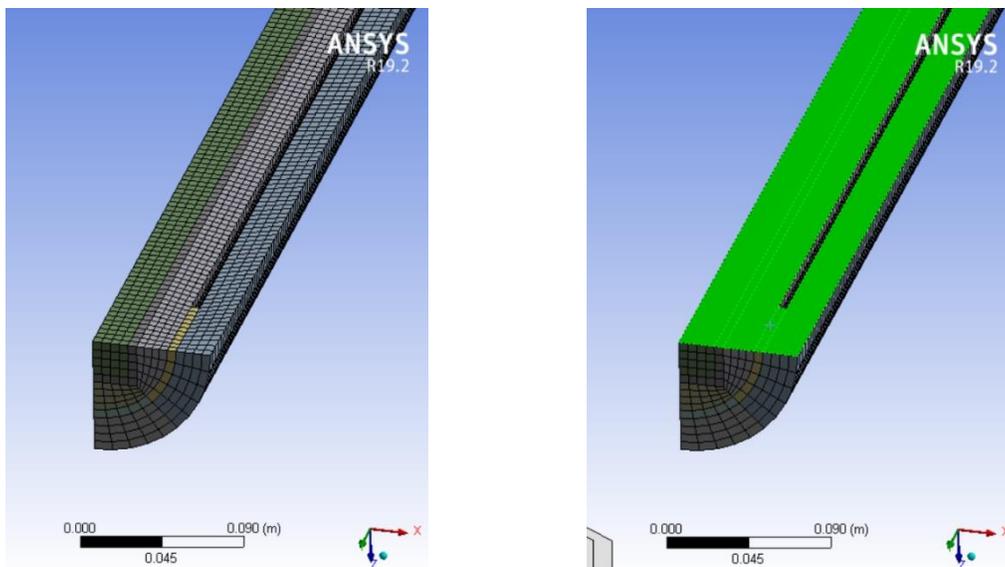


Figura 12.3 Mallado de fotobiorreactor (cuarta parte del fotobiorreactor), cara mostrando la sección para usar la condición de simetría.

12.4 Convergencia de los resultados

Ya que la simulación se llevó en estado transitorio se simuló un tiempo de 40s, el flujo dentro del fotobiorreactor se estabiliza a partir del segundo 20. En la figura 12.4 se muestra el monitor de flujo másico a la salida del biorreactor, en el intervalo de tiempo entre 0 y 3s de simulación se mantiene en un valor constante de cero, esto quiere decir que el aire aún no ha escapado del fotobiorreactor. En cuanto la gráfica empieza a fluctuar quiere decir que existe un flujo de aire saliendo del sistema. Sin embargo el flujo aun es muy fluctuante, hasta el segundo 15 aproximadamente, en ese momento el flujo dentro del fotobiorreactor se ha estabilizado, el flujo saliente solo tiene pequeñas oscilaciones con variaciones menores al 5%.

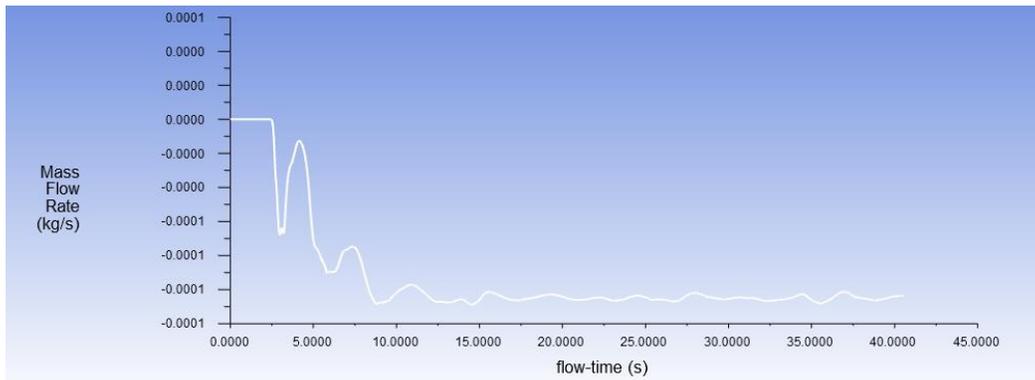


Figura 12.4 La variación del flujo a la salida después de 25 segundos de simulación, es de aproximadamente de 5 a 10% kg/s debido al movimiento del flujo de aire dentro de la fase primaria.

12.5 Exactitud y Tolerancia máxima

La figura 12.5 muestra la gráfica de residuales durante la simulación, en total son 10 variables, éstas comprenden las 3 ecuaciones de momento para cada componente de las fases, la ecuación de continuidad, la ecuación de k , ω y una ecuación de fracción de volumen.

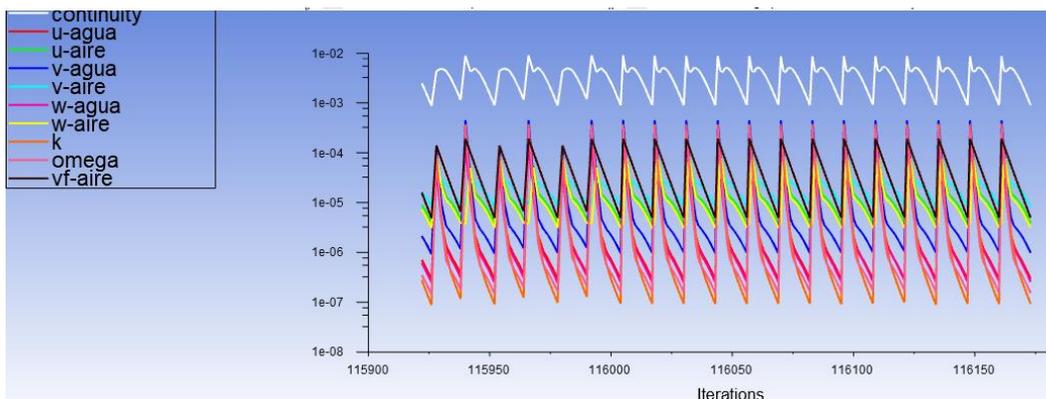


Figura 12.5 Gráfica de la evolución de los residuales a través de una simulación en estado transitorio, cada "pico" representa el inicio de un paso de tiempo en la simulación.

Los "picos" que se observan en la gráfica de residuales significan el inicio de cada paso de tiempo, cada uno de estos se completaba hasta que todas las variables tengan un valor residual de $1e-3$.

VARIABLES COMO VELOCIDAD EN CADA COMPONENTE TIENEN PRECISIONES DE $1e-5$ A $1e-7$, POR OTRO LADO LAS ECUACIONES CORRESPONDIENTE A TURBULENCIA LLEGAN A PRECISIONES DE HASTA $1e-8$. LOS VALORES DE ESTA GRÁFICA SE PUEDEN VISUALIZAR EN LA CONSOLA DE ANSYS FLUENT® (FIGURA 12.6).

iter	continuity	u-agua	u-aire	v-agua	v-aire	w-agua	w-aire	k	omega	vf-aire	time/iter
116145	1.5570e-03	4.5884e-07	5.9449e-06	1.5386e-06	1.2205e-05	4.1529e-07	4.9700e-06	1.6182e-07	2.5411e-07	8.9036e-06	0:00:13 19
116146	1.1888e-03	3.6230e-07	4.7237e-06	1.2432e-06	1.0373e-05	3.2742e-07	3.9495e-06	1.2115e-07	2.0049e-07	6.6316e-06	0:00:14 18
!116147	solution is converged										
116147	9.0548e-04	2.8332e-07	3.6993e-06	1.0062e-06	8.2113e-06	2.5795e-07	3.0879e-06	9.3609e-08	1.5829e-07	4.9580e-06	0:00:14 17

Figura 12.6 Valores de los residuales en cada iteración. Captura tomada de la consola de ANSYS Fluent®

LA DISCRETIZACIÓN EN EL TIEMPO QUE SE UTILIZÓ FUE DE UN PASO DE TIEMPO DE 0.005s, YA QUE UTILIZAR UN PASO DE TIEMPO MÁS GRANDE HACÍA INESTABLE LA SOLUCIÓN Y PUEDE PROVOCAR DIVERGENCIAS EN EL ANÁLISIS, EL NÚMERO DE ITERACIONES POR PASO DE TIEMPO QUE UTILIZABA EL SOLVER ERAN ALREDEDOR DE 15.

12.6 Comprobación de resultados

EL ANÁLISIS DE RESULTADOS REALIZÓ MEDIANTE LA PLATAFORMA ANSYS CFD Post®. LA FIGURA 12.7 MUESTRA EL FOTOBIORREACTOR SIMULADO, SE HA GENERADO UN CONTORNO DE VELOCIDAD EN PLANO A UNA ALTURA DE 0.667m, EL ESQUEMA DE COLORES DEL CONTORNO DIBUJADO MARCA EN ROJO LAS VELOCIDADES MÁS ALTAS ALCANZADAS, SE OBSERVA EN EL CENTRO EL ROJO, QUE INDICA LA MÁXIMA VELOCIDAD DEL FLUJO Y ADemás, LA VELOCIDAD DEL AGUA QUE FLUYE CERCA DE LAS PAREDES TIENE UN VALOR CERCA A CERO (COLOR AZUL) DEBIDO A LA CONDICIÓN DE NO DESLIZAMIENTO.

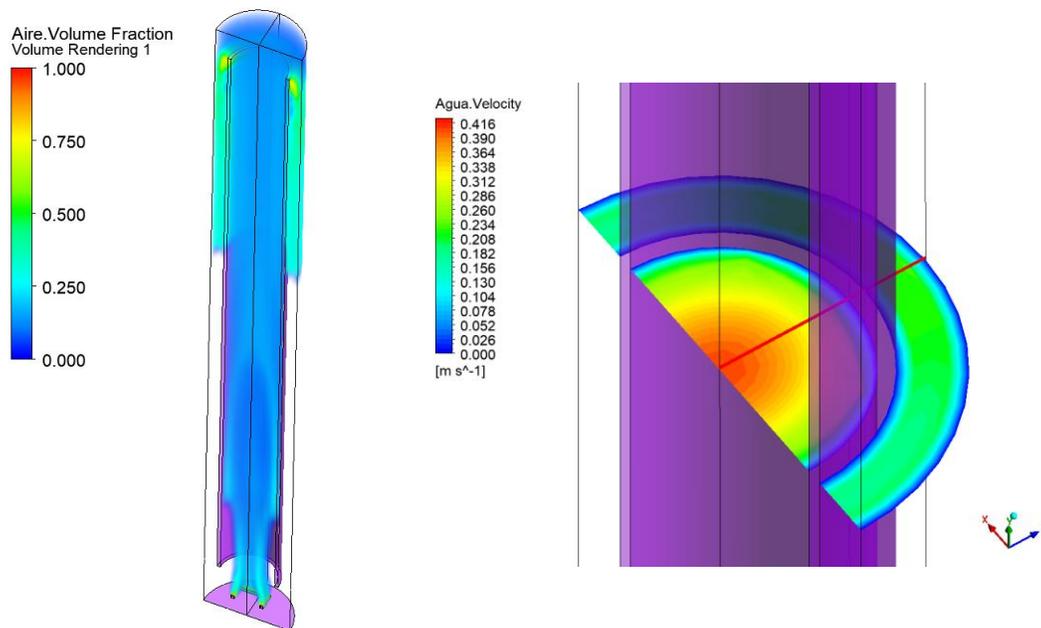


Figura 12.7 a) El contorno difuminado muestra la fracción de aire que se encuentra dentro del biorreactor (izquierda), b) corte transversal del fotobiorreactor mostrando contorno de velocidad en un plano a una altura de 0.667 metros, la línea roja es una entidad de referencia para crear un muestreo (derecha)

EN LA FIGURA 12.8 SE ILUSTRAN LOS VECTORES DE VELOCIDAD DEL FLUJO DE AGUA GENERADOS A PARTIR DEL PLANO MENCIONADO ANTERIORMENTE, DEBIDO A LA GEOMETRÍA DEL BIORREACTOR SE ESPERA UNA VELOCIDAD MÁXIMA

en el centro del fotobiorreactor, ya que esta es la región por donde ascienden las burbujas en el sistema. Estos vectores de velocidad ilustran la dirección del flujo en el interior del fotobiorreactor.

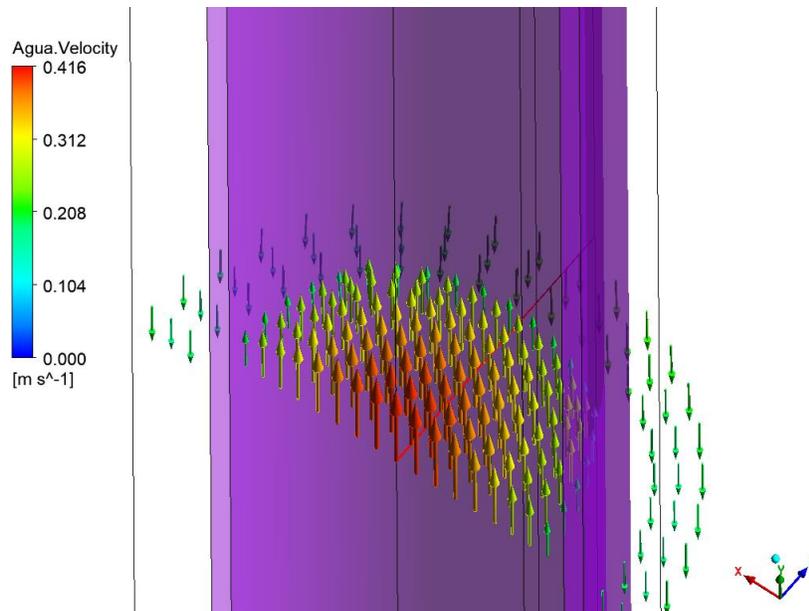


Figura 12.8 Corte transversal del fotobiorreactor mostrando los vectores de velocidad generados a partir de un plano a una altura de 0.667 metros.

Para poder hacer una medición del campo de velocidades en el fotobiorreactor se genera una línea que va del centro del fotobiorreactor al radio exterior sobre el mismo plano a una altura de 0.667m. Figura 12.7 b). Esta línea sirve como referencia para tomar información en los volúmenes finitos que atraviesa esta línea.

Un examen más detallado en las velocidades alcanzadas en este modelo se ve en la figura 12.9, esta gráfica muestra la velocidad del flujo de agua respecto al radio del fotobiorreactor. Se observa que entre los puntos entre 0.6 y 0.8 en el eje no se tiene una lectura de la velocidad ya que corresponden a zonas cercanas al baffle interno que tiene el fotobiorreactor, en el caso de la simulación los valores se declaran como cero.

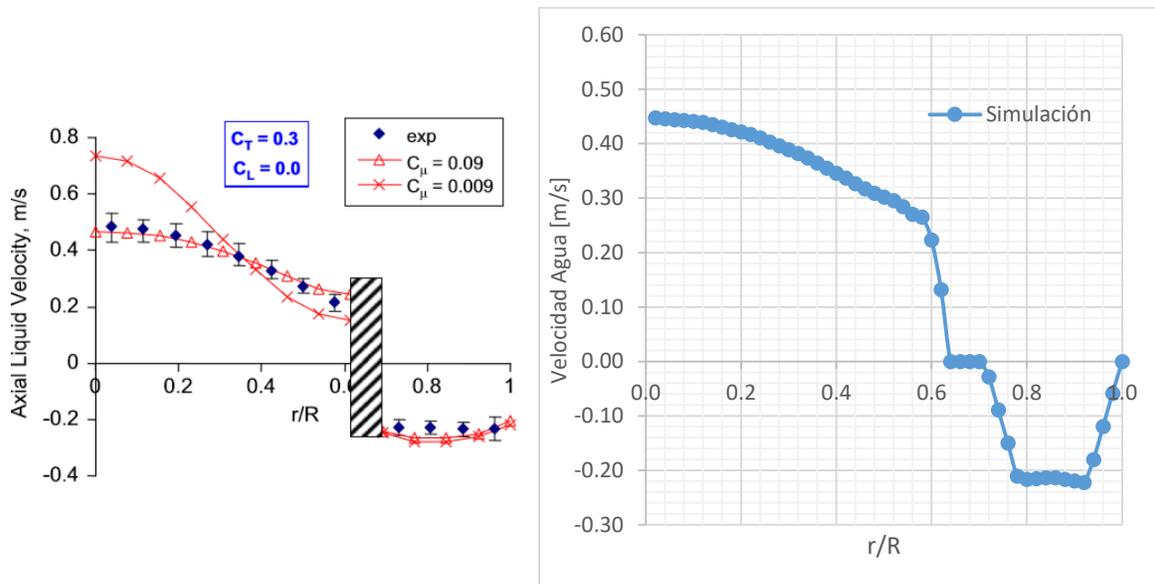


Figura 12.9 a) Se observa la gráfica de la velocidad dentro del fotobiorreactor en una línea que atraviesa desde su centro hasta su radio exterior medida por Luo and Al- Dahhan 2011 (izquierda) b) Resultados de la simulación Realizada en ANSYS Fluent ® (Derecha)

La ventaja que tiene realizar la comprobación del modelo con estos datos es que la velocidad es consistente o tiene una dirección específica lo que hace que las velocidades sean fácilmente medibles. Se tiene una variación de valores de velocidad entre los datos experimentales y la simulación de CFD. Ya que el movimiento del agua está gobernado por el flujo de aire que sale del inyector se concluye que los modelos y consideraciones son suficientes para validar la simulación, ya que el campo de velocidades del agua está en función del flujo de aire y de esa interacción entre las dos fases.

De esta manera se comprueba que el campo de velocidades es congruente con los modelos experimentales y queda verificado el perfil de velocidades en el modelo, ahora con estos modelos validados se procederá a realizar el análisis mediante los parámetros de optimización que propone Pascual J. y colaboradores (2014).

12.7 Parámetros de optimización

Los siguientes análisis para la optimización del PBR se harán en base a parámetros propuestos por Pascual J. y colaboradores (2014) desde el punto de vista de proveer una buena hidrodinámica para el crecimiento de las microalgas:

- Los porcentajes de las zonas muertas no debe exceder más del 10%
- La intensidad de turbulencia debe de estar en la categoría de baja a moderada
- El tiempo de circulación promedio no debe exceder 10s

En su trabajo Pascual J. y colaboradores obtienen un incremento de la eficiencia en 214% respecto a un fotobiorreactor de burbujeo convencional, estos parámetros tales como la cantidad de turbulencia o velocidades máximas son cotas que se deben de respetar para mantener un equilibrio

entre un mezclado más eficiente posible **sin que ocurra rompimiento celular o un estrés sobre el cultivo.**

12.7.1 Zonas muertas

Las zonas muertas se definen como zonas en la cual la velocidad del fluido es menor a $1e-3$ m/s, la presencia de zonas muertas causa el asentamiento de las células, lo que puede resultar en deterioración celular, descomposición anaeróbica o baja calidad de biomasa.

12.7.2 Turbulencia

Existen 3 regiones críticas donde los esfuerzos de corte son generados mayormente, estas regiones corresponden a las zonas:

BOTTOM: 20 mm arriba de la zona de inyección

CENTRO: Es el camino vertical donde ascienden las burbujas

TOP: 20 mm debajo de la interface agua aire

Los esfuerzos de corte serán evaluados en términos de la intensidad turbulenta, esta queda definida de la siguiente manera (ANSYS Fluent® 2017):

Si $IT \geq 10\%$ la intensidad turbulenta es alta

$1\% \leq IT \leq 10\%$ la intensidad turbulenta es moderada

$IT \leq 1\%$ Baja

Es preferible mantener una intensidad turbulenta moderada dentro del fotobiorreactor, ya que intensidades mayores al 10% pueden causar muerte celular, y valores menores a 1% son sinónimos de zonas de baja velocidad o poco mezclado.

12.7.3 Tiempo de circulación promedio

Se refiere al tiempo de viaje promedio que toma una partícula en viajar del fondo de fotobiorreactor hacia la superficie y de regreso. Esta puede ser determinada mediante la introducción de partículas en el fondo del fotobiorreactor y monitorearlas para determinar su localización como se mueven verticalmente en el medio. Para ello se implementa el modelo DPM de ANSYS Fluent®.

En este punto se busca que la circulación de las microalgas sea lo más uniforme posible a lo largo de todo el fotobiorreactor, y teniendo un tiempo de circulación menor a 10s, este tiempo se define como el tiempo que tarda la microalga de ir desde el fondo del fotobiorreactor subir a la superficie y llegar de nuevo al punto de partida.

Bajo las condiciones y configuraciones antes mencionadas se procedió a realizar la simulación del fotobiorreactor experimental que se utilizó en el cultivo de microalgas en el Laboratorio de Biotecnología de Microalgas en la UMAR, para estudiar sus propiedades y posibles mejoras.

13. Análisis de Resultados (Simulación)

13.1 Modelado sistema UMAR

Paralelamente al análisis del modelo experimental que se realizó en la UMAR (modelo A) se hizo un comparativo con un modelo de dimensiones similares pero el inyector de aire se colocó en la base del fotobiorreactor (modelo B), esto para identificar cómo afecta el cambio de la posición de este único elemento. Este sistema se modeló a una entrada aire de 0.5cm^2 de área y con una velocidad de aireación de aproximadamente 0.1 vvm .

13.1.1 Velocidades

En la figura 13.1 se muestra un corte de la sección transversal de ambos fotobiorreactores. Se observa en ambos como la velocidad de salida se concentra sobre la línea de inyección de aire como se espera, sin embargo la velocidad máxima del agua es de 1.128 m/s que es una velocidad muy alta que podría causar estrés celular, en el sistema que tiene el orificio en el fondo la velocidad máxima sigue siendo superior a 1 m/s , pero se observa una disminución de esta cantidad.

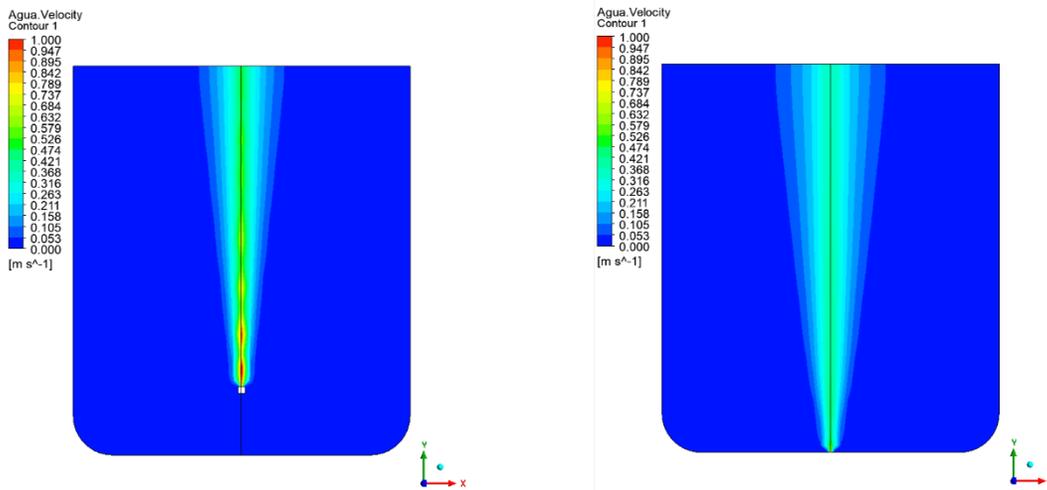


Figura 13.1 A) Contornos de velocidad en el centro del fotobiorreactor con inyector a 5cm de altura (izquierda). B) Contornos de velocidad en el centro del fotobiorreactor con inyector en el fondo (derecha).

En el fondo del fotobiorreactor A se muestra una zona de baja velocidad debido a la altura del inyector de aire (5cm), esta zona es crítica ya que esto puede provocar que no exista recirculación de las células que se dirijan hacia esa zona. Por otro lado esa zona se elimina en el fotobiorreactor b).

Se observa también que la distribución de los contornos de velocidad es mayor en el caso B debido a que se aprovecha mejor la energía de salida del aire, conforme más profunda es la entrada de aire existe un mayor tiempo de interacción entre las fases y por tanto un mayor desarrollo del flujo.

13.1.2 Intensidad turbulenta

En la figura 13.2 se observa que existe un incremento en la distribución de la turbulencia dentro del fotobiorreactor B, además de que la intensidad turbulenta máxima en el fotobiorreactor A es mayor que la del diseño B. El diseño A sobrepasa por más del doble la intensidad turbulenta máxima recomendada por Pascual J. y colaboradores (2014) llegando a valores superiores al 25%.

En el caso B la intensidad turbulenta máxima es de 13.52%, al igual que con los contornos de velocidad (figura 13.1) se observa que no existe una distribución a lo largo de todo el fotobiorreactor. Sin embargo son mejores estadísticas en comparación al modelo A ya que existe una disminución importante en la intensidad turbulenta máxima.

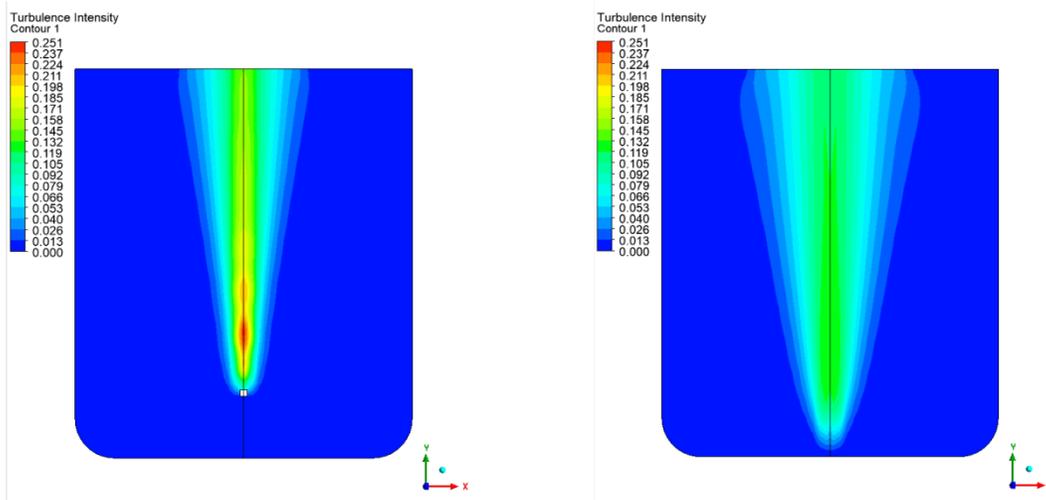


Figura 13.2 A) Contornos de intensidad turbulenta en el centro del fotobiorreactor con inyector a 5cm de altura (izquierda). B) Contornos de intensidad turbulenta en el centro del fotobiorreactor con inyector en el fondo (derecha).

13.1.3 Zonas muertas

En la figura 13.3 se observa el volumen del fluido que se mueve a una velocidad entre 0 a 1e-3 m/s representando las zonas muertas de cada fotobiorreactor, se observa que el volumen de las zonas de baja velocidad es mayor en el fotobiorreactor A, dando pie a lo publicado por Pascual J. y colaboradores (2014), estas zonas muertas pueden causar el asentamiento de las células.

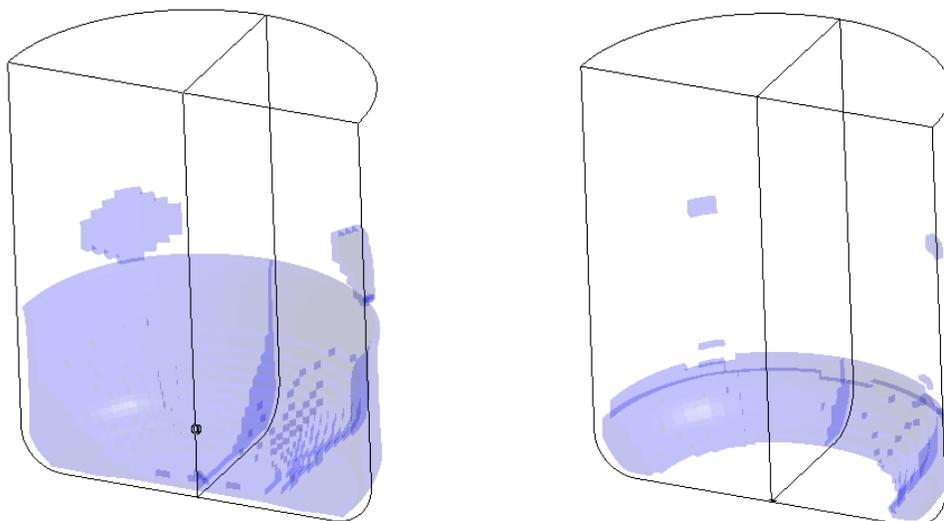


Figura 13.3 Zonas de baja velocidad dentro de los fotobiorreactores con un rango de velocidad de 0 m/s a 1e-3 m/s en el fotobiorreactor A (izquierda) y fotobiorreactor B (derecha).

En la figura 13.3 se observa que en B existe una disminución de las zonas muertas dentro del sistema en comparación al modelo A. Aunque debido a que el orificio de inyección está centrado en el fotobiorreactor se observa que no logra crear una corriente lo suficientemente grande para eliminar las zonas muertas cerca de la base del fotobiorreactor. Estos resultados coinciden con el hecho que se generaba asentamiento de las microalgas en el fondo del fotobiorreactor durante el experimento.

En el caso del fotobiorreactor A se calcula que las zonas muertas se generan a un radio de 0.08m del centro, cuando la entrada de aire se coloca en la base del fotobiorreactor la zona muerta disminuye hasta un radio de 0.1m del centro del fotobiorreactor. Eso significa que en el caso B existe más movimiento en zonas alejadas de la parte baja del fotobiorreactor.

13.3.4 Observaciones

El flujo saliente en los fotobiorreactores es a alta velocidad y genera zonas con alta turbulencia cerca de zona de inyección de aire, que en principio genera un buen mezclado, sin embargo la velocidad y la intensidad turbulenta es alta, pudiendo causar daño a las células (Pascual J. et al. 2014).

Además la utilización de un solo inyector de aire no promueve suficiente movimiento a lo largo de la base del fotobiorreactor. En base a esto se proponen los siguientes cambios para optimizar el mezclado:

- 1- Utilizar un inyector con boquillas más grandes conservando el caudal, esto disminuirá la velocidad del aire a la salida.
- 2- Generar un diseño con una distancia del inyector al centro de la pared máximo de 0.1m manteniendo el flujo de aire a 0.1 vvm para conservar la misma tasa de aireación y disminuir magnitudes de velocidad excesivas.

- 3- Utilizar un mayor número de inyectores de aire en la base del fotobiorreactor conservando el flujo másico, podría eliminar el exceso de intensidad turbulenta y disminuir las zonas muertas en el fondo del fotobiorreactor.

13.2 Columna de aireación

Se propusieron 3 diseños para el análisis de este tipo de fotobiorreactor, cada uno fue modelado con una altura de 1m, el radio del fotobiorreactor es de 0.097m y una entrada de inyección de 1cm². El diseño más básico cuenta con una entrada en la parte central (figura 13.4)

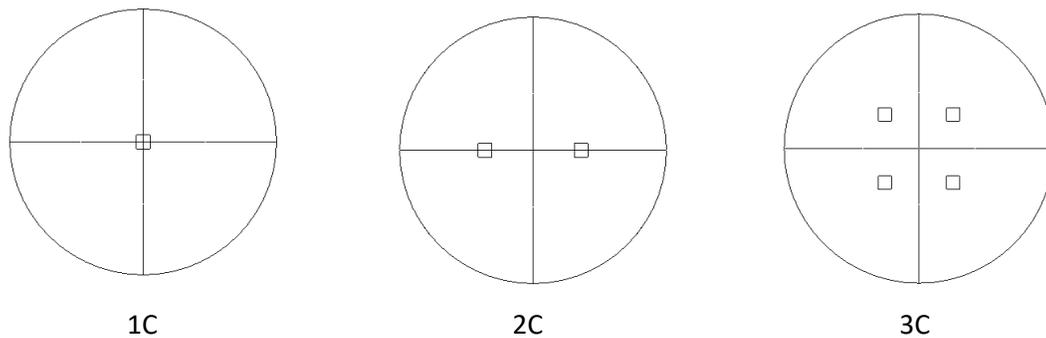


Figura 13.4. Vista de planta de los diseños 1C, 2C y 3C. La distancia al centro de cada orificio es de 0.035m para los diseños 2C y 3C.

13.2.1 Velocidad dentro del fotobiorreactor

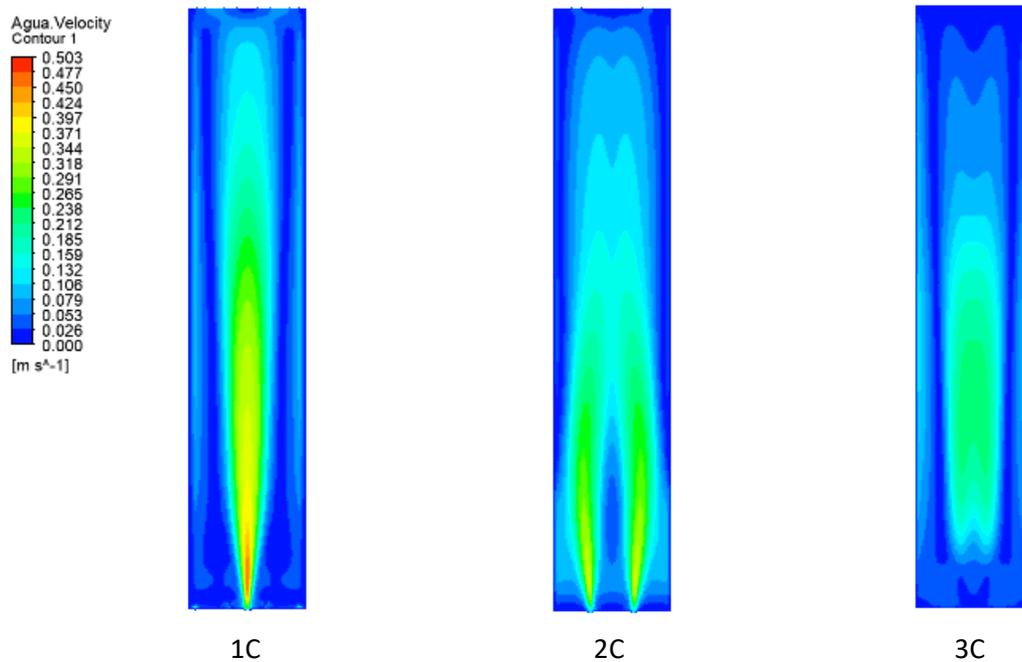


Figura 13.5 Vista del contorno de velocidades en un plano de simetría dentro de los fotobiorreactores 1C, 2C y 3C

Usando una comparativa entre los contornos de velocidad sobre un plano en el centro de los fotobiorreactores (figura 13.5) se aprecia que la máxima velocidad se encuentra en 1C, el

fotobiorreactor que tiene una sola entrada. Además de que existen zonas de baja velocidad cerca de las paredes del fotobiorreactor.

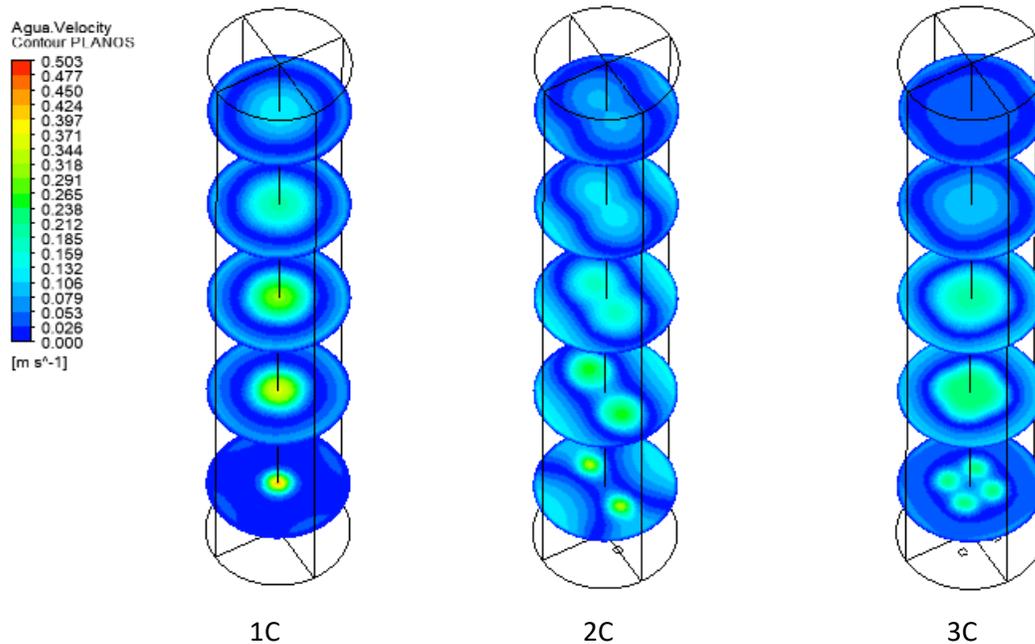


Figura 13.6 Contornos de velocidad en planos de corte a una distancia de 0.1m, 0.3m, 0.5m, 0.7 y 0.9m de los fotobiorreactores 1C, 2C y 3C.

En la figura 13.6, 2C y 3C tienen una mayor distribución en sus campos de velocidad a lo largo de los planos de corte y principalmente en el plano a una altura de 0.1m se observa que esta distribución es mayor que en 1C.

La tabla 13.1 muestra información de cuáles son los valores máximos y mínimos de las velocidades las regiones críticas de los fotobiorreactores.

Velocidad [m/s]	1C	2C	3C
Max val CENTRO	0.82330	0.27845	0.29614
Min val CENTRO	0.00040	0.00112	0.00013
Max val TOP	0.06452	0.04287	0.03441
Min val TOP	0.00638	0.00489	0.00013
Max val BOTTOM	0.82330	0.37038	0.24566
Min val BOTTOM	0.00271	0.00702	0.00234

Tabla 13.1 Velocidades máximas y mínimas en distintas zonas de los diseños de columna de aireación

Max val CENTRO Y Min val CENTRO, se refieren a los valores que toma la velocidad a lo largo de todo el dominio del fotobiorreactor. Max val TOP y Min val TOP se refieren a los valores que toma la velocidad en un volumen entre la parte mas alta del fotobiorreactor y 2cm debajo de la interfase agua aire (region TOP). Y Max val BOTTOM, Min val BOTTOM, la velocidad máxima y mínima en un volumen desde la base hasta 2cm de la base del fotobiorreactor.

En la tabla 13.1 se observa que las velocidades más altas se encuentran en el fotobiorreactor que tiene una sola entrada con un valor de 0.823 m/s muy cercana al 1.123 m/s que se había encontrado anteriormente en el fotobiorreactor A, existe una disminución significativa de las velocidades máximas calculadas en los casos 2C y 3C llegando a un valor máximo de 0.278 m/s y 0.291 m/s respectivamente que tienen un menor impacto en el estrés de las microalgas.

13.2.2 Intensidad turbulenta

Debido al incremento de la altura de los fotobiorreactores en las propuestas 1C, 2C y 3C (figura 13.7) existe una mejor distribución de la intensidad turbulenta en comparación a los resultados de A y B. Además de que la intensidad máxima se reduce en un 50%, estos valores ya son cercanos a los valores admitidos por Pascual J. y colaboradores (2014).

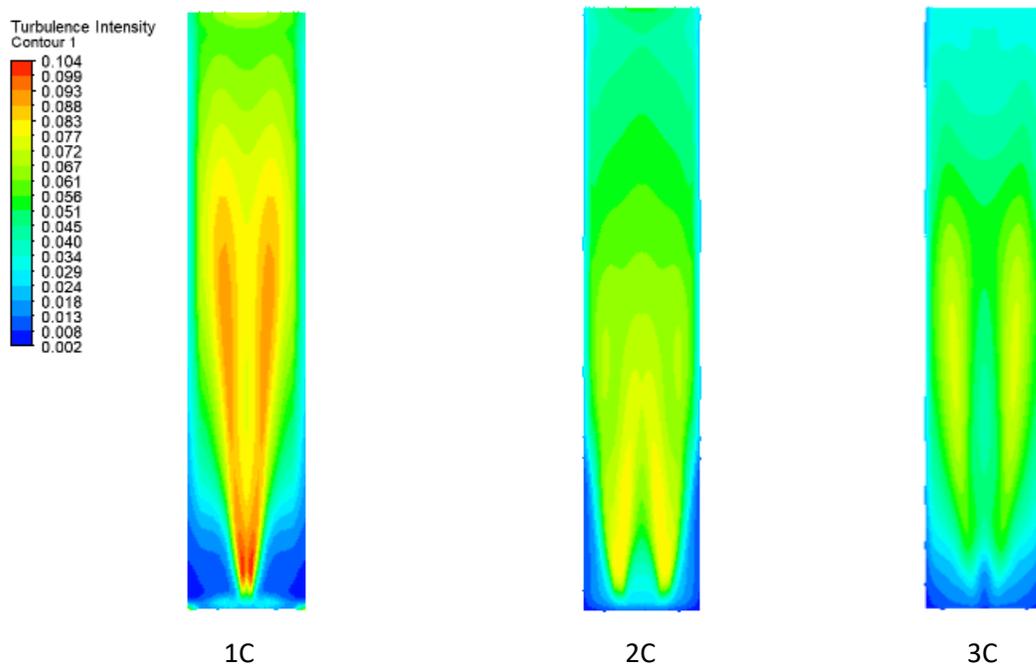


Figura 13.7 Vista del contorno de intensidad turbulenta en un plano de simetría dentro de los fotobiorreactores 1C, 2C y 3C

De igual manera los contornos de turbulencia muestran una mayor distribución en los sistemas 2C y 3C cerca de la zona de inyección de aire, este es un punto muy importante como se mencionó anteriormente.

En la tabla 13.2 se encuentran valores de turbulencia en las mismas zonas que se mencionaron anteriormente. El valor máximo es de 11.52% para el fotobiorreactor 1C, esto puede asociarse a las altas velocidades que se producen desde el inyector de aire. Los dos sistemas restantes se encuentran dentro del rango menor al 10% de intensidad turbulenta. Teniendo el fotobiorreactor con dos entradas en su base una intensidad turbulenta mínima de 0.42%, que es la más alta de los tres sistemas. Un indicio de que tiene un buen mezclado en esta región crítica.

%Intensidad turbulenta	1C	2C	3C
Max val CENTRO	11.52%	9.52%	7.72%
Min val CENTRO	0.21%	0.49%	0.32%
Max val TOP	7.08%	5.12%	3.46%
Min val TOP	3.64%	2.31%	1.76%
Max val BOTTOM	7.03%	3.68%	2.95%
Min val BOTTOM	0.25%	0.42%	0.32%

Tabla 13.2 Intensidad turbulenta máximas y mínimas en distintas zonas de los diseños de columna de aireación

13.2.3 Zonas muertas

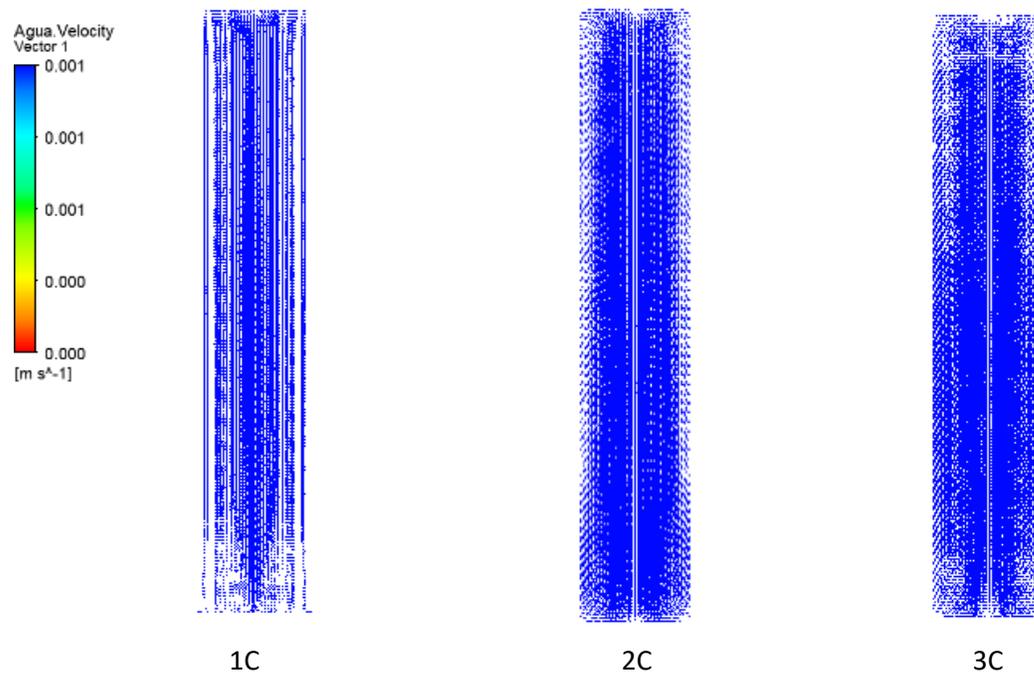


Figura 13.8 Vectores de velocidad trazados en el volumen de los diseños de fotobiorreactores de columna. Se graficaron de tal manera que las zonas donde no se dibujan vectores representan zonas muertas el sistema

En la figura 13.8 se muestra en color azul las zonas del fotobiorreactor que tienen una velocidad igual o mayor a $1e-3$ m/s, visualmente existe una menor diferencia entre los fotobiorreactores 2C y 3C. El porcentaje de zonas muertas se encuentra en la tabla 13.3 siendo 1C el fotobiorreactor con el porcentaje de zonas muertas más alto, 3C es el fotobiorreactor con menos zonas muertas, con apenas 0.85% de diferencia con relación a 2C.

Zonas muertas	Volumen [m ³]	% zonas muertas
1C	0.00141	18.83%
2C	0.00090	12.02%
3C	0.00083	11.17%

Tabla 13.3 Zonas muertas en los diseños de fotobiorreactores de columna de aireación

En las figura 13.9 y 13.10 se grafica la velocidad de las columnas de aireación a lo largo de su radio en un plano a 0.5m y 0.9m de altura respectivamente. Se escogió esta altura ya que el flujo ascendente es lo suficientemente desarrollado para decir que esta distribución de velocidades es similar.

En la figura 13.9, se observa el comportamiento de la velocidad en la columna con un inyector de aire, la cual tiene una velocidad mayor en el centro (0.3 m/s) en comparación con los sistemas 2C y 3C, menos de 0.2 m/s. El sistema con dos inyectores de aire tiene una velocidad uniforme desde el centro del fotobiorreactor ya que 1C Y 3C tienen velocidades menores pasando del radio en 0.3.

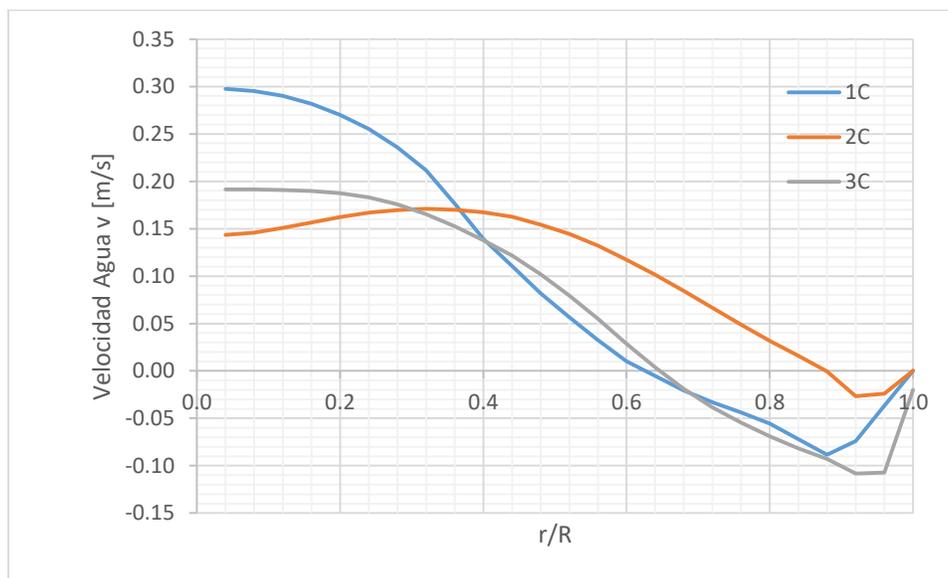


Figura 13.9 Velocidad de los fotobiorreactores en la componente vertical (v) a una altura de 0.5m de su base.

A una altura de 0.9m (figura 13.10) la distribución o comportamiento del flujo es muy similar con la diferencia de que el sistema 1C tiene un decremento importante en su velocidad en el eje radial, esto también se aprecia en la figura 13.5 y 13.6, lo que provocaba que tuviera zonas de baja velocidad cerca de las paredes del fotobiorreactor, en cambio la propuesta 2C sostiene una velocidad más uniforme en la dirección radial aproximadamente de 0.075 m/s. El fotobiorreactor con las velocidades más bajas es el 3C. Sin embargo es el que tiene las velocidades más altas cerca a las paredes del fotobiorreactor lo que ayuda a disminuir las zonas muertas debido a la condición de no deslizamiento.

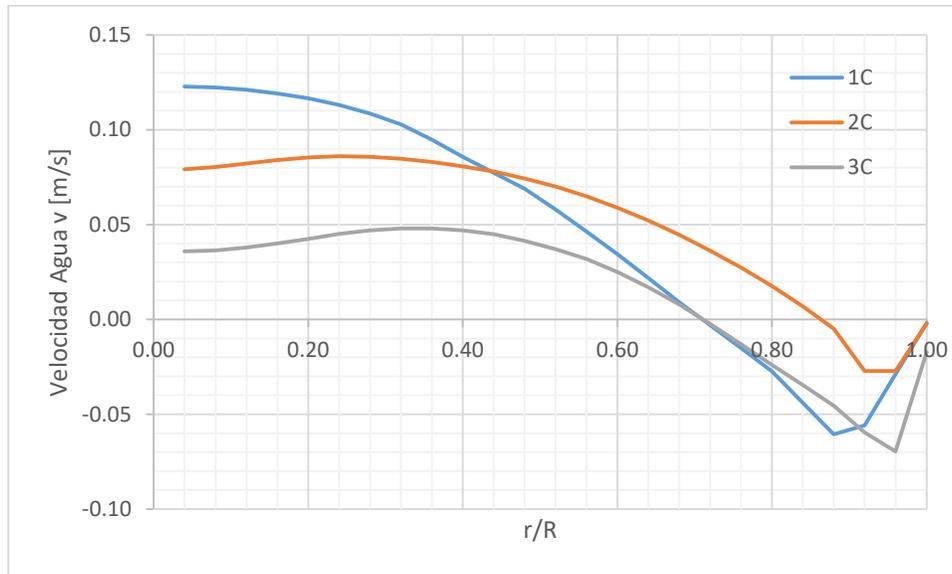


Figura 13.10 Velocidad de los fotobiorreactores en la componente vertical (v) a una altura de 0.9m de su base.

13.3 Placa plana

En la figura 13.11 se muestra la vista de planta de los modelos de fotobiorreactor de placa plana simulados. Las dimensiones fueron de 0.6m de largo, 0.05m de ancho y 1m de alto con una capacidad de 30L. El diseño más simple cuenta con una entrada en la parte central, los inyectores extras en los diseños 2P y 3P tienen una distancia al centro de 0.15m.

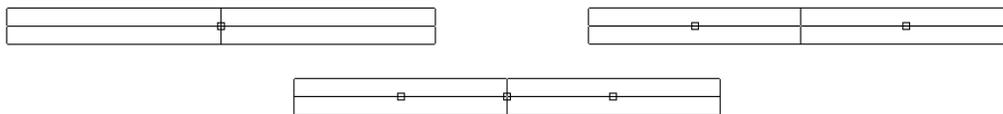


Figura 13.11 Vista de planta de los diseños 1P (izquierda), 2P (derecha) y 3P (centro). La distancia del centro de los inyectores extra en 2P y 3P es de 0.15m

13.3.1 Velocidad dentro del fotobiorreactor

En comparación la propuesta 1C con una velocidad máxima de 0.503m/s, el fotobiorreactor 1P alcanza velocidades aún mayores, siendo de nuevo el fotobiorreactor de un inyector que tiene la velocidad más grande registrada (0.645m/s) entre los diseños de placa plana. En el sistema 3P se observa que existe una distribución de flujo más uniforme, además de que tiene velocidades más altas cerca de la base del fotobiorreactor en comparación de 2P y 3P. La figura 13.12 muestra un comportamiento más detallado de los contornos de velocidad a diferentes distancias del fondo del fotobiorreactor.

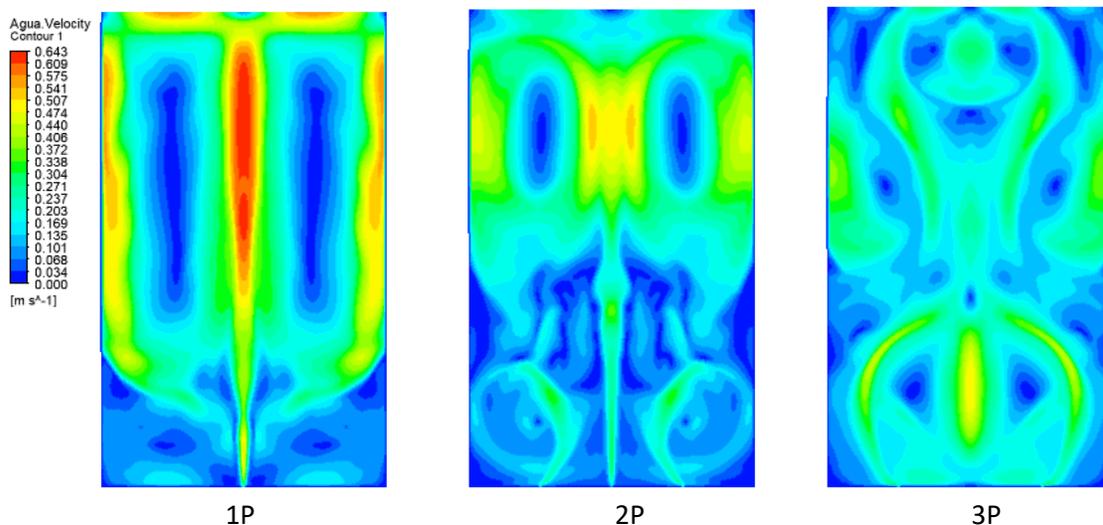


Figura 13.11 Contornos de velocidad en el plano central a la geometría de los fotobiorreactores de placa plana

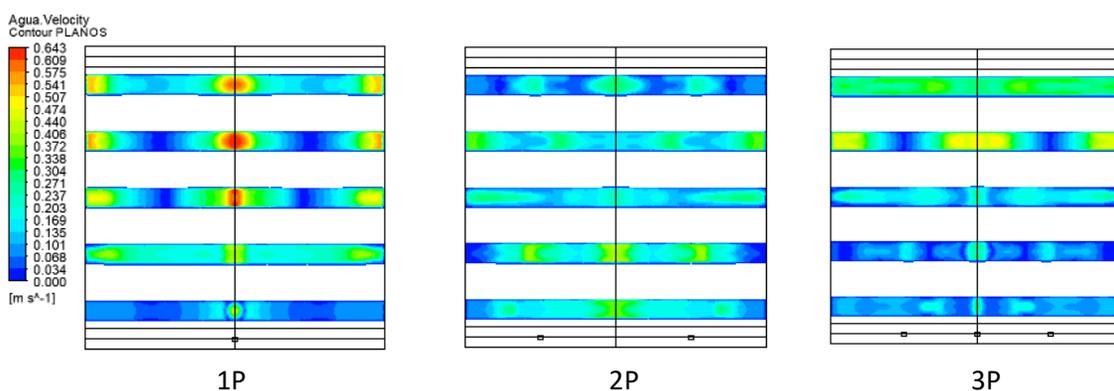


Figura 13.12 Contornos de velocidad en planos de corte a una distancia de 0.1m, 0.3m, 0.5m, 0.7 y 0.9m de los fotobiorreactores 1P, 2P y 3P

En la tabla 13.4 se observa que las velocidades máximas alcanzadas por los tres casos no difieren en más del 15%, donde existe diferencia notable es en las velocidades cercanas a la superficie del agua en donde la velocidad máxima es 0.57 m/s para el sistema 1P, en cambio para 2P y 3P es de cerca de 0.28m/s prácticamente la mitad.

Velocidad [m/s]	1P	2P	3P
Max val CENTRO	0.64542	0.51569	0.52805
Min val CENTRO	0.00034	0.00150	0.00038
Max val TOP	0.57535	0.29810	0.28230
Min val TOP	0.02959	0.00208	0.00830
Max val BOTTOM	0.44164	0.40860	0.29893
Min val BOTTOM	0.00433	0.00292	0.00038

Tabla 13.4 Velocidades máximas y mínimas en distintas zonas de los diseños de placa plana

13.3.2 Intensidad turbulenta

En el caso de intensidad turbulenta los fotobiorreactores 2P y 3P tienen una distribución más uniforme respecto al 1P, siendo el 2P con una mejor distribución cerca a la base del fotobiorreactor (figura 13.13).

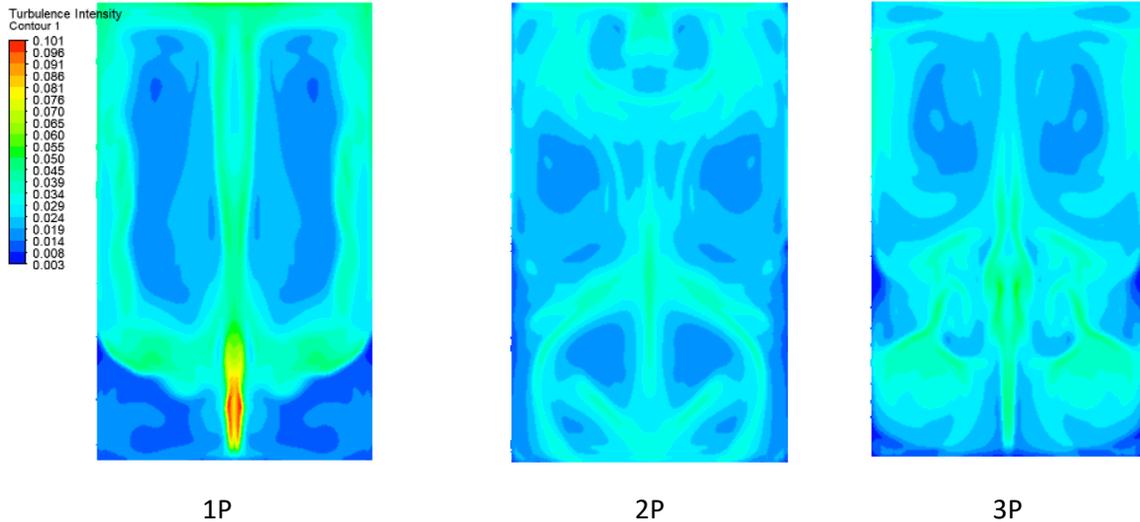


Figura 13.13 Vista del contorno de intensidad turbulenta en un plano de simetría dentro de los fotobiorreactores de placa plana

La intensidad turbulenta máxima para 2P Y 3P es menor en alrededor de un 40% en comparación con las máximas intensidades obtenidas para los fotobiorreactores 2C Y 3C. Sin embargo en la zona inferior la diferencia es poca teniendo valores muy similares para los 3 casos, probablemente debido a que predomina el flujo de aire en cada inyector de los fotobiorreactores y la poca distancia entre las placas limite el desarrollo del flujo debido a la condición de no deslizamiento.

%Intensidad turbulenta	1P	2P	3P
Max val CENTRO	10.60%	4.47%	6.08%
Min val CENTRO	0.33%	0.57%	0.32%
Max val TOP	5.66%	4.45%	3.62%
Min val TOP	2.71%	0.57%	1.18%
Max val BOTTOM	5.39%	3.69%	2.77%
Min val BOTTOM	0.55%	0.49%	0.32%

Tabla 13.5 Intensidad turbulenta en los diseños de fotobiorreactores de placa plana

13.3.3 Zonas muertas

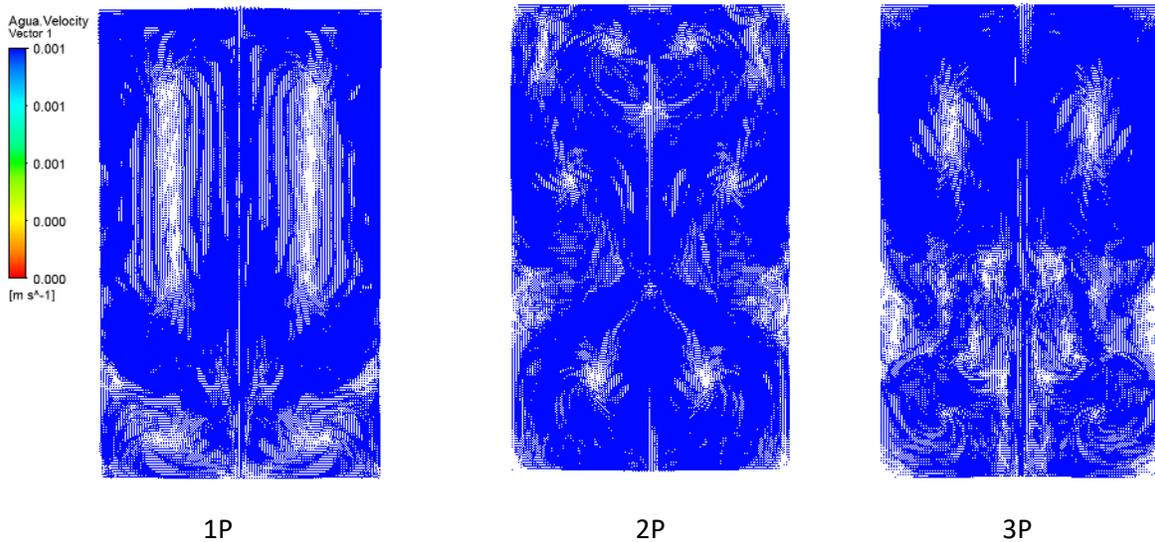


Figura 13.14. Vectores de velocidad trazado en el volumen de los diseños de fotobiorreactores de placa plana. Se graficaron de tal manera que las zonas donde no se dibujan vectores representan zonas muertas el sistema

En la figura 13.14 se muestra en color azul las zonas del fotobiorreactor que tienen una velocidad igual o mayor a $1e-3$ m/s, visualmente es más difícil discernir cuál es la que tiene más zonas muertas en comparación con los diseños de columna de aireación. Haciendo referencia a la tabla 13.6 se observa cuantitativamente que no existe diferencia entre el volumen de las zonas muertas, probablemente debido a la condición de no deslizamiento, ya que el área de la superficie de contacto entre el dominio del fluido y las paredes de los fotobiorreactores es mayor en comparación con los modelos de columna, lo que provoca que solo exista diferencia cerca de la zona de inyección.

Zonas muertas	Volumen [m ³]	% zonas muertas
1P	0.00163	21.73%
2P	0.00163	21.73%
3P	0.00163	21.75%

Tabla 13.6 Zonas muertas en los diseños de fotobiorreactores de placa plana

En la figura 13.15 y 13.16 se observan las gráficas de la velocidad de los fotobiorreactores de placa plana en un plano a 0.5m y 0.9m de altura. Se observa un comportamiento similar si se compara con 1P Y 1C ya que ambos tienen una velocidad máxima al centro del dominio, y de igual manera tienen una mayor descenso en magnitud cuando se aleja del centro de fotobiorreactor.

A una distancia de a 0.5m (figura 13.15) y 0.9m (figura 13.16) de altura el fotobiorreactor 1P tiene una velocidad cerca de las paredes mucho menor que 2P y 3P. En el plano a 0.9m de altura el fotobiorreactor 2P tiene una velocidad baja cercana a las paredes en comparación con 1P y 3P, y su

velocidad al centro es de 0.2m/s, sin embargo tiene una dirección descendente debido a una zona de recirculación, la cual puede apreciarse en los contornos de velocidad figura 13.11.

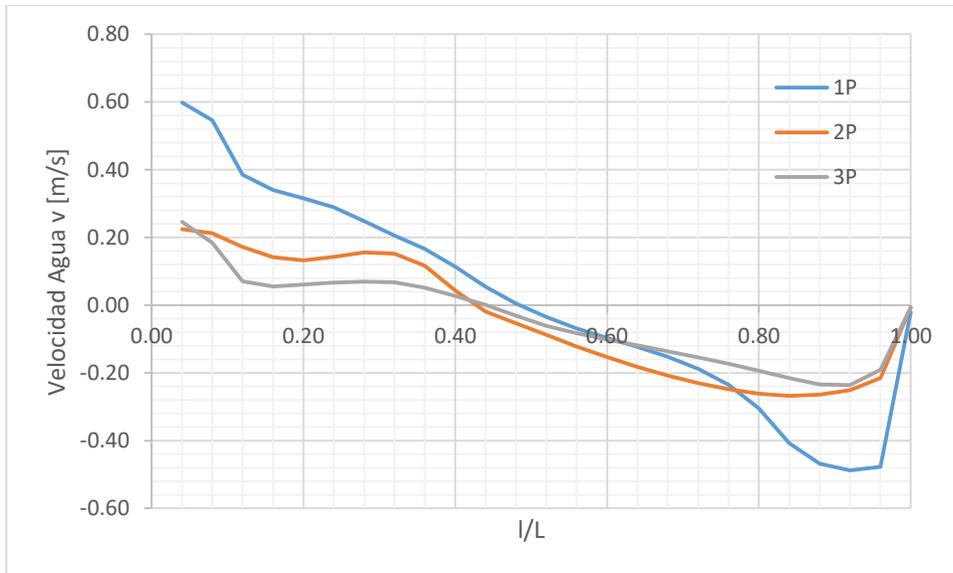


Figura 13.15 Velocidad de los fotobiorreactores de placa plana en la componente vertical (v) a una altura de 0.5m de su base.

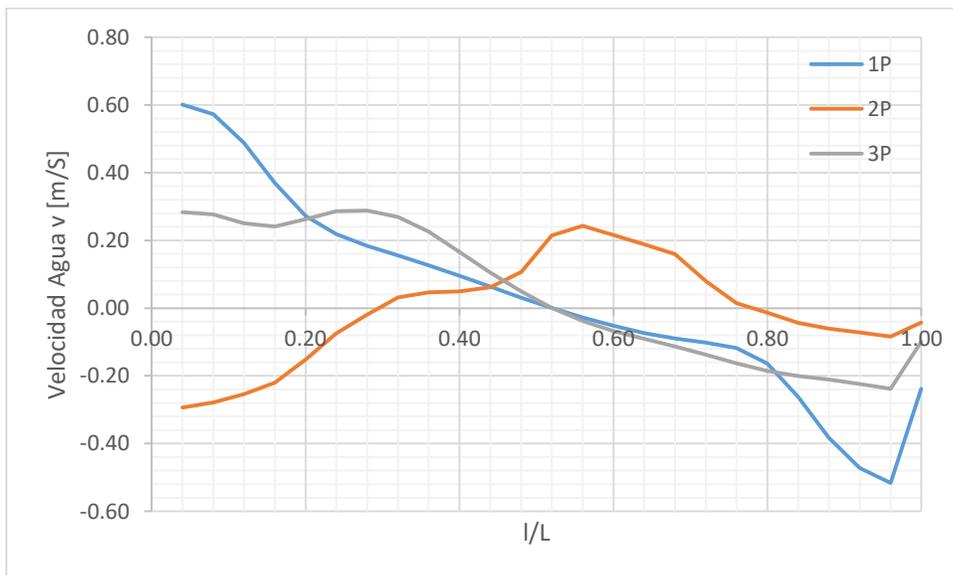


Figura 13.16 Velocidad de los fotobiorreactores de placa plana en la componente vertical (v) a una altura de 0.9m de su base.

En este tipo de biorreactor es un poco más difícil resolver debido a este criterio ya que la principal limitante es que el contacto con las paredes es mucho mayor por tanto el volumen calculado con velocidades menores a $1e-3$ es mayor, debido a la condición de no deslizamiento.

13.4 Diferencias de los flujos debido a la topología

Una observación importante es que claramente existe un comportamiento marcado en el desarrollo del flujo debido a la geometría del fotobiorreactor, como se observó existía un amplio margen en el comportamiento respecto a las zonas muertas entre los fotobiorreactores de placas planas y las columnas de aireación. Llegando a tener las placas planas un volumen de zonas muertas hasta 2 veces más grande que el de las columnas de aireación (tablas 13.3 y 13.6).

Una observación que se hizo en la sección 13.1 es la importancia de la distancia entre la pared del fotobiorreactor y del inyector de aire, ya que entre más grande sea la distancia entre la pared al inyector de aire se pueden generar zonas muertas cerca de la base del fotobiorreactor debido a su lejanía. Sin embargo en este análisis se puede ver que no es del todo cierto ya que las paredes cerca de la zona de inyección pueden provocar una disminución en el flujo e intensidad turbulenta.

Es cierto que se plantea que existe un mejor aprovechamiento de la luz en un fotobiorreactor de placa plana pero esto también tiene implicaciones en el mezclado dentro del sistema. Así como es posible apreciar diferencias entre las velocidades máximas alcanzadas en modelos 1C y 1P, la topología de estos tiene una gran influencia en el campo de velocidades.

13.5 Comparación de los modelos

A lo largo de las secciones 13.2 y 13.3 se presentaron algunas características principales de los fotobiorreactores, dentro de éstos cabe destacar que los modelos 1C como 1P tienen ciertas similitudes, ya que ambos tienen las lecturas más altas de velocidades e intensidad turbulenta, en el caso de las velocidades éstas sobrepasan los 0.5m/s y en el caso de intensidad turbulenta se sobrepasó el 10%, esto no se tradujo en un mejor mezclado en el volumen total de los fotobiorreactores ya que aun así las zonas muertas en el fotobiorreactor 1C con 18.83% eran mayores que las de diseños 2C y 3C. Algo similar pasa con el fotobiorreactor 1P ya que las distribuciones de velocidad no son tan uniformes como los diseños 2P y 3P, por tanto no es posible tomar en cuenta estos diseños como óptimos.

Una consideración importante es que para poder discernir respecto al porcentaje de zonas muertas es necesario darle una mayor atención a las zonas muertas que se encuentran más cerca de la base del fotobiorreactor, ya que velocidades muy bajas o intensidades turbulentas muy bajas favorecen el asentamiento de las microalgas.

Modelo	Vel min BOTTOM [m/s]	%Zonas muertas	%Intensidad turbulenta promedio		
			BOTTOM	CENTRO	TOP
1C	0.002717	18.83%	1.10%	0.67%	5.63%
2C	0.007028	12.02%	1.73%	0.67%	4.10%
3C	0.002343	11.17%	0.97%	0.68%	3.04%
1P	0.004332	21.73%	1.40%	2.50%	4.21%
2P	0.002926	21.73%	2.40%	2.38%	3.09%
3P	0.000387	21.75%	1.30%	2.55%	2.71%

Tabla 13.7 Concentrado de los parámetros a tomar en cuenta en el análisis

Ya que 1C queda descartado por lo antes dicho se considera a 2C como el más optimizado, se selecciona como el óptimo en su tipo ya que su velocidad mínima en la base es la mayor de su grupo, además de que también tiene la mayor intensidad turbulenta promedio en la base (tabla 13.7). No se escoge el 3C ya que aunque tenga un porcentaje menor de zonas muertas (0.85% de diferencia respecto a 2C) su intensidad turbulenta en la base es la menor de todos los fotobiorreactores lo que produce asentamiento celular.

No existe una diferencia significativa entre las zonas muertas de 1P, 2P y 3P, en el centro la intensidad turbulenta promedio es similar en todas las placas planas (alrededor de 2.5%). Lo más destacable es que la intensidad turbulenta promedio de 2P cerca de la región BOTTOM es la mayor de todos los modelos de fotobiorreactores de este tipo, por tanto es elegido 2P como el óptimo en el caso de fotobiorreactores de placas planas.

13.5 Tiempo de circulación promedio

Se realizó un modelo del tiempo de recirculación de microalga a los fotobiorreactores con mejores estadísticas en velocidad e intensidad turbulenta, teniendo en cuenta el tiempo que tarda la microalga en circular de la parte inferior del biorreactor, subir y regresar a la base del biorreactor.

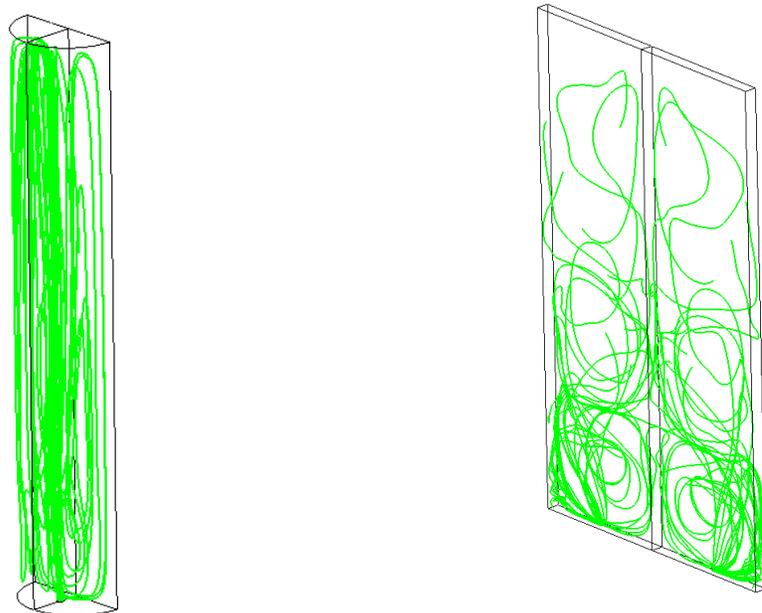


Figura 13.17 Trayectorias seguidas por las microalgas en su recorrido dentro del fotobiorreactor, el tiempo para ambos fotobiorreactores fue mayor a 10s para algunas partículas.

Se calcularon las trayectorias de 25 partículas (microalgas) dentro de los fotobiorreactores 2C y 2P. Iniciando su recorrido desde la parte central del fotobiorreactor. Este es un análisis multifásico compuesto de 3 fases (2 fases eulerianas y una fase lagrangiana)

Debido a las características de la biomasa generada la fracción de volumen de microalgas es menor al 10% del volumen total del fotobiorreactor por ello se considera que no existe un cambio de las propiedades del fluido en función del tiempo, con base a esta misma consideración las partículas no interactúan entre sí, por ello no se incluyen modelos de interacción entre las microalgas. (Manual Fluent® 2017)

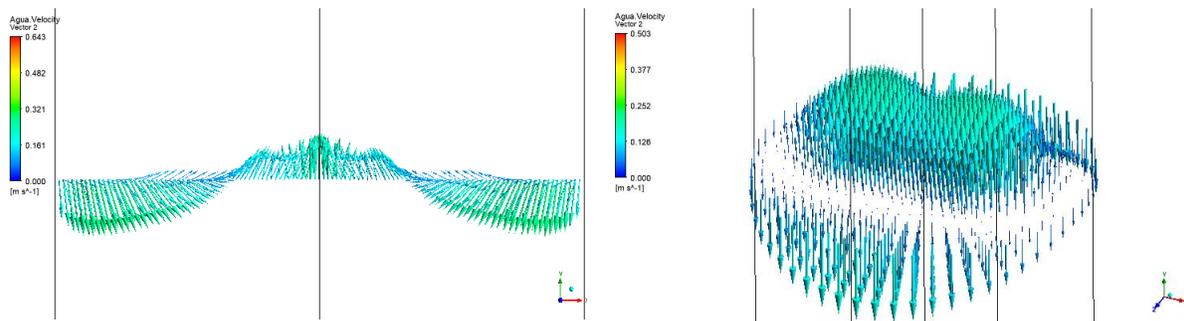


Figura 13.18 a) Vectores de velocidad de fotobiorreactor 2P (Izquierda) y b) fotobiorreactor 2C (Derecha) medidos en un plano a 0.5 metros de altura.

El recorrido se calculó para un tiempo de 15s dando como resultado las trayectorias mostradas en figura 13.17. Sin embargo el tiempo de circulación es mayor a 10s para algunas partículas, en este

punto ninguno de los dos fotobiorreactores cumple con el criterio de Pascual y colaboradores (2014). Es necesario un análisis estadístico más profundo en este apartado ya que un muestreo de 25 partículas es poco representativo. Aun así el muestreo de 25 partículas muestra que existe una distribución más uniforme de partículas en la columna de aireación en comparación a la placa plana, ya que en esta última existe una mayor recirculación cerca de su base, con este resultado el fotobiorreactor que tiene un mejor recirculamiento es el 2C ya que propicia un movimiento a lo largo de su dominio completo, esto se puede apreciar parcialmente en la figura 13.18 b) se observa un flujo dirigido en dirección del eje *y* en el fotobiorreactor 2C, en cambio en 13.18 a) existen corrientes transversales las cuales no aportan movimiento de descenso o ascenso de las partículas.

13.6 Comparación del Fotobiorreactor optimizado

El modelo simulado A tiene un volumen de zonas muertas de 13.15 %, mientras que el fotobiorreactor optimizado 2C tiene un 12.2% en volumen de zona muertas, que aunque la diferencia no es significativa en las tablas 13.8 y 13.9 se observa que existe una diferencia notable de cantidades como intensidad turbulenta y velocidad a lo largo de las regiones TOP, CENTRO y BOTTOM, ya que el flujo no es uniforme llegando a tener una variación en 3 órdenes de magnitud de una región a otra en el modelo A.

Velocidad [m/s]	A	2C
Max val CENTRO	1.17648	0.27845
Min val CENTRO	1.34977e-05	0.00112
Max val TOP	0.52375	0.04287
Min val TOP	0.002103	0.00489
Max val BOTTOM	0.001429	0.37038
Min val BOTTOM	5.67429e-05	0.00702

Tabla 13.8 Velocidades en los diseños de fotobiorreactores A y 2C

% Intensidad turbulenta	A	2C
Max val CENTRO	25.260%	9.52%
Min val CENTRO	0.0014%	0.49%
Max val TOP	14.812%	5.12%
Min val TOP	0.045%	2.31%
Max val BOTTOM	0.043%	3.68%
Min val BOTTOM	0.001%	0.42%

Tabla 13.9 Intensidad turbulenta en los diseños de fotobiorreactores A y 2C

Con estos datos puede observarse que aunque el dominio del fotobiorreactor tenga un volumen de zonas muertas bajo, no cumple los demás puntos planteados por Pascual J. y colaboradores (2014), el comportamiento del flujo dentro de A no es homogéneo en comparación a 2C en el que las cantidades como velocidades en diferente zonas es más uniforme.

Una producción a gran escala con este tipo de fotobiorreactores es posible mediante la conexión de estos sistemas (Photon Systems Instruments) (conexión en serie), de esta manera pueden obtenerse volúmenes de producción continua de hasta 1000L, sin la necesidad de grandes tanques de almacenamiento (figura 13.19 y 13.20)

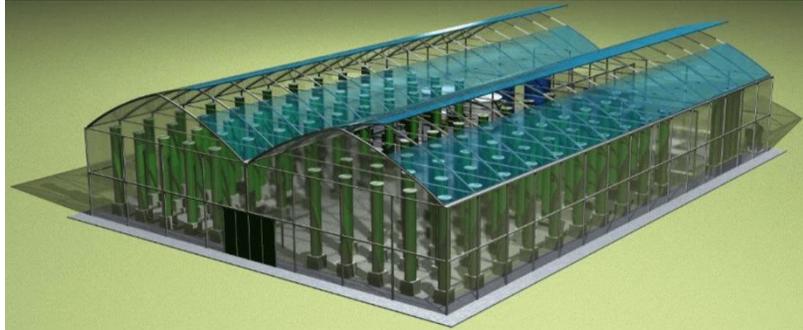


Figura 13.19 Diseño conceptual de un sistema con múltiples fotobiorreactores aislados (microalgaeproduction, 2018)



Figura 13.20 Sistema compuesto por múltiples fotobiorreactores (Varicon, 2018)

Así en un fotobiorreactor continuo, con un caudal de salida Q está dado por la ecuación 5.7:

$$\frac{Q}{\mu_a} = V$$

Ec. 5.7

$$1m^3 * 0.421/día = Q$$

Ec. 13.1

$$Q = 0.0175m^3/hora$$

Ec. 13.2

Así La producción por un sistema con un volumen de 1000L, y un cultivo al día 6 la producción es de 0.75g/L. (según grafica 11.6) con una tasa media de producción de $\mu_a=0.42\text{día}^{-1}$. La producción total sería de 315.75 g/día de biomasa. Así una producción de 15L en un sistema batch cultivado por 6 días puede realizarse en menos de 1 día de producción en un fotobiorreactor continuo. Con estos valores se estima una producción de aproximadamente 164 g de biocombustible por día. (Chisti Y. 2007)

Conclusión

Una opción de fuentes limpias de energía es la tercera generación de biocombustibles por las ventajas que ofrecen como la reutilización de CO₂. La creación de biocombustibles a través de microalgas conlleva tanto estudios biológicos, metabólicos, cultivo, procesos de extracción de estos microorganismos. Un factor importante en la producción de microalgas es la optimización de los sistemas llamados fotobiorreactores, por esto se calificó que tan influyente es el número de inyectores en los fotobiorreactores manteniendo una tasa de aireación constante y geometrías simples, y así determinar las diferencias en el mezclado en una placa plana y una columna de aireación.

En la mayoría de estos PBR la hidrodinámica del fluido es generada a través de la inyección de aire desde su centro, esto genera burbujas que son las que proveen de la fuente de CO₂. Se midió el porcentaje de zonas muertas y la turbulencia dada en cada simulación. La tasa de aireación es de 0.1 vvm, que es la recomendada por Pascual J. y colaboradores (2014), esta cantidad es importante ya que de esto depende tanto la circulación del cultivo así como la cantidad de CO₂ disuelto. Existen algunos parámetros que no puede ser posible modificar sin que tenga una repercusión en la biología de la microalga, por ello se podría recurrir a algunos cambios topológicos que impacten directamente la geometría. Sin embargo la geometría de estos tanques es simple, como tanques cilíndricos o placas planas; por otro lado se observó que la disposición de los inyectores de aire tiene un impacto en la circulación del flujo dentro del fotobiorreactor.

La velocidad de entrada de aire también es considerada como un posible indicador de muerte celular. Ya que, si los flujos son demasiado turbulentos, las microalgas podrían inhibirse debido al exceso de estrés provocado por las fuerzas actuando en la microalga o morir debido a ruptura provocada por el exceso de turbulencia (esfuerzos cortantes y normales a la microalga).

Además, la colocación de estos puntos es de gran importancia ya que tienen un resultado importante sobre todo en los flujos en la parte más baja del biorreactor, ya que se debe evitar la sedimentación de microalgas. Es cierto que colocando un número muy grande de inyectores se logrará disminuir la cantidad de zonas muertas en el fondo del fotobiorreactor. Sin embargo la construcción se haría más compleja, además de que como se observó más inyectores de aire no significa mejor mezclado en las 3 distintas regiones de los fotobiorreactores.

De esta manera se aprecia la importancia de la caracterización de estos sistemas. Una herramienta como lo es el CFD puede ayudar a la optimización de productos, ya que es posible analizar su

comportamiento en condiciones reales, en este caso la visualización de los flujos internos de los fotobiorreactores. Sin embargo es importante destacar la necesidad de una caracterización adecuada mediante datos experimentales para poder validar el modelo. Por lo tanto el modelo óptimo basado en los parámetros antes establecidos es el fotobiorreactor 2C y puede usarse como base para sistemas de producción en serie.

Trabajos a futuro

-Aplicar un modelo de transferencia de masa para el estudio de oxígeno y su distribución en el fotobiorreactor

-Aplicar un modelo de transferencia de energía solar al volumen y modelar la difusión de la luz dentro del fotobiorreactor

Apéndice a

Cámara de Neubauer

Para estimar la población celular se utilizó una cámara de Neubauer y las células fueron fijadas con Lugol el cual es uno de los fijadores más comunes para microalgas. (R. Alonso-Rodríguez 2004)

Este método de conteo consiste en agregar una muestra de cultivo a las dos cámaras que se muestran a continuación por medio de una pipeta Pasteur figura a1.



Figura a1. Cámara de Neubauer comercial

Cada cámara consta de 4 áreas las cuales están divididas mediante retículas que a su vez se subdividen en 9 cuadros de 1mm (cuadro número 1) como se observa en la figura a2.

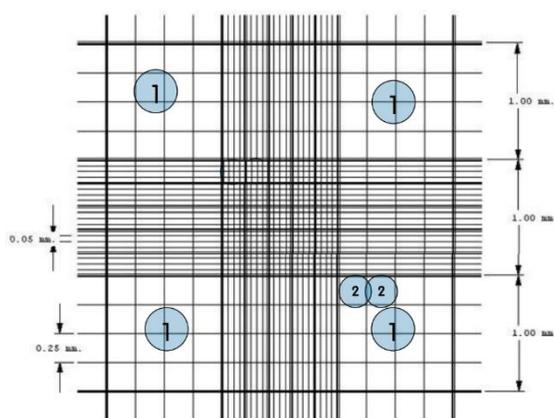


Figura a2. Retícula de cámara de Neubauer. Los cuadros numerados con el número 1 tienen un área de 1mm². Mientras que los cuadros marcados con el número 2 tienen un área de 0.25mm²

El conteo se realiza de la siguiente manera, para evitar alguna omisión o de agregar algún cuadro de más, se realiza en zigzag iniciando en cualquiera de las esquinas del cuadro con el número 1

contando las células en cada cuadro pequeño (cuadro con el número 2). Se cuentan solo las células que estén completamente dentro de la retícula omitiendo las que están encima de la línea.

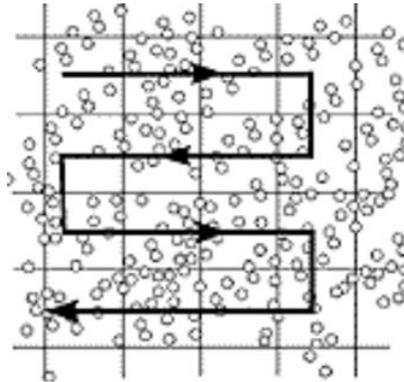


Figura a3. Aumento del cuadro número uno, ejemplificando una ruta de conteo típica en la cámara de Neubauer

Si la densidad celular es muy alta entonces se puede proceder con una dilución, lo cual debe de ser contemplado en la aplicación de la regla para obtener el número de células totales.

Una vez obtenido el número de células en las 8 regiones se realiza la estimación del número de células utilizando la siguiente relación para determinar el número de células por mililitro:

$$NC = \frac{\text{número de células} * 10\ 000}{\text{numero de cuadros} * \text{dilución}}$$

Se realizó el recuento de los 8 cuadros grandes para cada muestreo haciendo un total de 27 conteos por día de cultivo.

Se contaba el número de células para cada fotobiorreactor y se promediaba, ese es el resultado que se muestra a continuación:

										MUES TRA	H2O	Lugol	Promedi o	N. Cel/ mL
	Cuadra nte	1	2	3	4	5	6	7	8	mL	ml			
T0	A	110	134	133	152	119	124	117	139	1	1	1	128.5	1285000
	B	92	121	113	100	115	99	124	101	1	1	1	108.1	1081250
	C	113	106	123	107	129	94	80	120	1	1	1	109.0	1090000
T1	A	29	26	27	26	46	26	28	30	1	5	1	29.8	1487500
	B	28	31	19	22	34	24	29	31	1	5	1	27.3	1362500
	C	31	21	19	26	27	32	34	26	1	5	1	27.0	1350000
T2	A	33	39	42	41	36	34	36	23	1	9	1	35.5	3195000
	B	64	51	58	61	59	70	73	66	1	5	1	62.8	3137500

	C	76	66	67	62	45	52	59	65	1	5	1	61.5	3075000
T3	A	59	50	62	55	55	66	68	80	1	10	1	61.9	6187500
	B	54	53	59	65	63	64	72	59	1	10	1	61.1	6112500
	C	50	57	74	46	47	55	55	65	1	10	1	56.1	5612500
T4	A	79	112	83	97	97	108	105	115	1	10	1	99.5	9950000
	B	95	79	94	98	88	101	68	78	1	10	1	87.6	8762500
	C	79	87	88	76	121	106	119	94	1	10	1	96.3	9625000
T5	A	59	63	58	58	66	59	70	78	1	20	1	63.9	12775000
	B	58	56	68	44	67	57	55	79	1	20	1	60.5	12100000
	C	44	52	65	39	33	39	57	49	1	20	1	47.3	9450000
T6	A	88	74	96	94	100	98	123	100	1	20	1	96.6	19325000
	B	92	73	82	88	74	82	86	73	1	20	1	81.3	16250000
	C	86	95	78	83	97	97	92	100	1	20	1	91.0	18200000
T7	A	100	83	87	85	86	96	100	92	1	20	1	91.1	18225000
	B	139	109	118	121	105	138	99	128	1	20	1	119.6	23925000
	C	115	128	112	106	117	129	138	145	1	20	1	123.8	24750000
T8	A	105	127	103	110	142	125	146	143	1	20	1	125.1	25025000
	B	105	95	97	88	84	83	95	87	1	20	1	91.8	18350000
	C	121	117	138	128	112	119	132	147	1	20	1	126.8	25350000
T9	A	125	132	131	135	128	126	163	120	1	20	1	132.5	26500000
	B	90	80	96	72	119	92	84	93	1	20	1	90.8	18150000
	C	94	108	102	80	95	92	79	87	1	20	1	92.1	18425000
T10	A	118	125	128	118	124	134	150	115	1	20	1	126.5	25300000
	B	117	133	140	111	117	99	138	124	1	20	1	122.4	24475000
	C	110	93	78	103	108	126	127	122	1	20	1	108.4	21675000
T11	A	203	171	157	169	106	101	111	80	1	20	1	137.3	27450000
	B	125	124	124	117	127	130	116	132	1	20	1	124.4	24875000
	C	96	97	79	76	134	123	127	121	1	20	1	106.6	21325000
T12	A	118	107	119	122	127	130	129	119	1	20	1	121.4	24275000
	B	93	88	97	99	103	108	101	119	1	20	1	101.0	20200000
	C	99	104	101	97	128	128	129	128	1	20	1	114.3	22850000
T13	A	147	140	129	155	111	122	119	109	1	20	1	129.0	25800000
	B	91	100	98	87	110	96	107	113	1	20	1	100.3	20050000
	C	127	127	108	127	127	125	125	129	1	20	1	124.4	24875000
T14	A	95	117	110	105	93	96	87	96	1	20	1	99.9	19975000
	B	90	107	98	100	117	110	120	126	1	20	1	108.5	21700000
	C	113	119	122	112	118	112	98	97	1	20	1	111.4	22275000
T15	A	97	93	95	98	111	102	95	97	1	20	1	98.5	19700000
	B	94	70	94	87	71	92	82	84	1	20	1	84.3	16850000
	C	71	89	96	78	85	81	88	70	1	20	1	82.3	16450000
T16	A	119	110	114	115	110	107	117	99	1	20	1	111.4	22275000
	B	80	92	103	85	83	153	130	133	1	20	1	107.4	21475000
	C	99.5	101	108.5	100	96.5	130	123.5	116	1	20	1	109.4	21875000

T18	A	72	80	76	71	88	90	88	81	1	20	1	80.8	16150000
	B	93	84	79	76	79	63	96	88	1	20	1	82.3	16450000
	C	73	68	91	108	62	68	70	80	1	20	1	77.5	15500000
T20	A	70	68	65	66	83	86	73	87	1	20	1	74.8	14950000
	B	81	72	75	80	77	55	73	66	1	20	1	72.4	14475000
	C	75	88	79	66	75	80	75	91	1	20	1	78.6	15725000

Tabla a1. Conteos realizados durante el tiempo de cultivo.

Apéndice b

Preparación filtros

Se usaron N filtros, cada uno fue sumergido en agua destilada para eliminar cualquier residuo químico, se secaron mediante una mufla a una temperatura inicial 25 °C (temperatura ambiente) y llegó a 490 °C durante 5 horas (figura b1). Se colocaron en un desecador para que no ganaran humedad, se colocaron los N filtros en sobres de aluminio. Los sobres fueron colocados en un desecador y sometidos a vacío mediante una bomba.



Figura b1. Preparación de los filtros a mufla y charola con filtros.

Consideraciones para la realización de las mediciones

- Los sobres deben de permanecer abiertos para que pierdan humedad en el desecador
- El peso de los filtros fue medido en la balanza analítica teniendo en cuenta rapidez para que no absorban agua del ambiente
- Se encendió la balanza, una vez iniciada, se colocó una charola de aluminio en la platina de la balanza y se ajustó a cero, posterior a esto se realizaban las mediciones

Filtrado de la biomasa

- Se colocó el filtro de fibra de vidrio en el matraz kitasato
- Se conectó la bomba de vacío al matraz
- Se procedió a verter la muestra de 50 ml sobre el filtro y se encendía la bomba para extraer el medio
- Se extrajo el filtro con biomasa y se colocaba en un sobre de aluminio
- Se colocó en el horno durante 12hr posterior a eso se colocaba en el desecador por 1 hora para su posterior medición



Figura b2. a) Matraz kitasato conectado a bomba de vacío, b) Biomasa recién extraída con el filtro, c) Filtro dentro del horno para extraer humedad

Medición de los filtros

- Los filtros fueron manipulados con las pinzas todo el tiempo teniendo en cuenta no tocar directamente la biomasa con la pinza
- Se colocaba el filtro en la charola de aluminio y se esperó a que se estabilizara la medición
- Se tomaba la lectura, se extraía el filtro
- La medición se hacía lo más rápido posible para que los filtros no ganaran humedad y no perturbara las mediciones
- El filtro se colocaba en su sobre correspondiente y se metía en el desecador y se prosigue con el siguiente filtro

Referencias

Algenol <http://algenol.com/>

Baker A. J. *Finite Element Computational Fluid Mechanics*. Department of Engineering Science and Mechanics, University of Tennessee, Knoxville. First Edition (1985). McGraw-Hill.

Bird R. Byron, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot. *Fenómenos de transporte. Departamento de Ingeniería Química*. Universidad de Wisconsin-Madison. Limusa Wiley. Segunda edición (2006)

Bitog J.P., Lee I.-B., Lee C.-G., Kim K.-S., Hwang H.-S., Hong S.-W., Seo I.-H., Kwon K.-S., Mostafa E. *Application of computational fluid dynamics for modeling and designing photobioreactors for microalgae production: A review*. Computers and Electronics in Agriculture 76 (2011) 131–147

Brennan L., Owende P. *Biofuels from microalgae—A review of technologies for production, processing, and extractions of biofuels and co-products*. Renewable and Sustainable Energy Reviews 14 (2010) 557–577

Campbell M.N. *Biodiesel: algae as a renewable source for liquid fuel*. Guelph Eng J (2008) 2–7

Carolann M., Evelyn M. McLaughlin, Brett M. Barney. *Effect of temperaure control on green algae growth under continuous culture*. algal Research 35 (38) 301- 308

Cengel Yunus A., Jhon M. Cimbala. *Mecánica de fluidos fundamentos y aplicaciones*. Universidad de nevada, universidad del estado de Pensilvania. McGraw-Hill. Primera edición en español (2006)

Chandrupatla T. R., Ashok D. Belegundu. *Introduction to finite elements in engineering*. Prentice Hall. Third edition (2002)

Chisti Y. *Biodiesel from microalgae*. Biotechnology Advances 25 (2007) 294–306

Darvehei P., Parisa A. Bahri, Navid R. Moheimani. *Model development for the growth of microalgae: A review*. Renewable and Sustainable Energy Reviews 97 (2018) 233–258

Demirbas A. *Use of algae as biofuel sources*. Energy Conversion and Management 51 (2010) 2738–2749.

EIA - Energy Information Administration

El-Sheekh Mostafa M., Hanan M. Khairy, Saly F. Gheda, Rania A. El-Shenody. *Application of Plackett–Burman design for the high production of some valuable metabolites in marine alga Nannochloropsis oculata*. Egyptian Journal of Aquatic Research 42 (2016) 57–64

Fernández I., F.G. Acien, J. M. Fernández, J. L. Guzmán, J. J. Berenguel. *Dynamic model microalgal production in tubular photobioreactors*. Bioresource technology 126 (2012) 172-181

Firoz A., Abhijit D. Roesfiansjah R., Saleh M., Hazim M., Abdul B. *Biofuel from algae- Is it a viable alternative?*. Procedia Engineering 49 (2012)

Ghasem D. Najafpour. *Biochemical Engineering and biotechnology*. First edition, Universidad de Mazandaran Babol, Iran 2007

Guzmán Mónica Yamile Bermúdez Segura. *Modelamiento de la transferencia de oxígeno para el cultivo de microorganismos en un biorreactor de columna de burbujeo*. Universidad nacional de Colombia facultad de ingeniería y arquitectura 2003

Huang G., Chen F., Wei D., Zhang X., Chen G. *Biodiesel production by microalgal biotechnology*. Applied Energy 87 (2010) 38–46

Il-hwan S., In-bok L. *Numerical investigation of a bubble-column photo-bioreactor design for microalgae cultivation*. Biosystems engineering 113 (2012) 229-241.

IPCC - Intergovernmental Panel on Climate Change.

Jakob O., Daniel R. O'Donnell, Elena Litchman *Temperature effects on growth rates and fatty acid content in freshwater algae and cyanobacteria*. Algal Research (2018) 500- 507

Janaun J., Ellis. N. *Perspectives on biodiesel as a sustainable fuel*. Renewable and Sustainable Energy Reviews 14 (2010) 1312–1320

Joel C. Goldman And Edward J. Carpenter. *A kinetic approach to the affect of temperature on algal growth woods Hole Oceanographic Institution*. Woods Hole, Massachusetts 02543

Kawahara M. *Finite Element Methods in Incompressible, Adiabatic, and Compressible Flows*. Kyushu University. Mathematics for Industry, Volume 19. Springer. (2016)

Khatoon Helena Norazira Abdu Rahman Sanjoy Banerjee Nazurah Harun Siti Suhada Suleiman Nur Hazwani Zakaria Fathurrahman Lananan Siti Hajar Abdul Hamid Azizah Endut. *Effects of different salinities and pH on the growth and proximate composition of Nannochloropsis sp. and Tetraselmis sp. isolated from South China Sea cultured under control and natural condition*. International Biodeterioration & Biodegradation 95 (2014) 11-18

Kleinová A. *Biofuels from algae*. Procedia Engineering 42 (2012) 231 – 238

Kwon Young W., hyochoong Bang. *The finite element method using MatLab*. CRC Press (1997)

Liu J. 2017 *Application of computational fluid dynamics for modeling and designing photobioreactors for microalgae production*

Liu Junying, Yunmeng Song, Wen Qiu. *Oleaginous microalgae Nannochloropsis as a new model for biofuel production: Review & analysis*. Renewable and Sustainable Energy. Reviews 72 (2017) 154–162

Logan Daryl L. *A First Course In The Finite Element Method*. University of Wisconsin-Platteville. Fourth Edition (2007) THOMSON

Luo Hu-Ping, Al-Dahhan Muthanna H. *Local characteristics of hydrodynamics in draft tube air lift bioreactor*. Chemical Engineering Science 63 (2008) 3057--3068

Luo Hu-Ping, Al-Dahhan Muthanna H. *Verification and validation of CFD simulations for local flow dynamics in a draft tube airlift biorreactor*. Chemical Engineering Science 66 (2011) 907–923

Ma Y., Zhiyao Wang, Changjiang Yu, Yehu Yin, Gongke Zhou. Evaluation of the potential of 9 Nannochloropsis strains for biodiesel production. Bioresource Technology 167 (2014) 503–509

Microalgaeproduction. <https://microalgaeproduction.com/vertical-photobioreactors/>

Moazami N., Alireza Ashori, Reza Ranjbar, Mehrnoush Tangestani, Roghieh Eghtesadi, Ali Sheykhi Nejad. *Large-scale biodiesel production using microalgae biomass of Nannochloropsis*. Biomass and bioenergy 39 (2012) 449-453

Murphy T.E., H. Berberoglu. *Effect of algae pigmentation on photobioreactor productivity and scale up: A light transfer perspective*. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer 112 (2011) 2826–2834

Nauha E.K., Alopaeus V. *Modeling outdoors algal cultivation with compartmental approach*. Chemical Engineering Journal 259 (2015) 945–960.

Pascual J., In-Bok Lee, Hee-Mock Oh, Se-Woon Hong, Il-Hwan Seo, Kyeong-Seok Kwon, *Optimised hydrodynamic parameters for the design of photobioreactors using computational fluid dynamics and experimental validation*. Biosystems engineering 122 (2014) 42-61

Patankar Suhas V. *Numerical heat transfer and fluid Flow*. University of Minessota. McGraw-Hill (1980)

Photon Systems Instruments. <http://psi.cz/products/photobioreactors/>

PNUMA - Programa de Naciones Unidas para el Medio Ambiente

Prussi Matteo, Marco Buffi, David Casini, David Chiaramonti, Francesco Martelli, Mauro Carnevale, Mario R. Tredici, Liliana Rodolfi, *Experimental and numerical investigations of mixing in raceway ponds for algae cultivation*. Biomass and bioenergy 67 (2014) 390-400

Raef Kobeissi. *Large Eddy simulation of turbulent flow across a partially closed valve*. https://www.raefkobeissi.com/index.php/les_cfd_sim

Reddy J. N. *An Introduction To The Finite Element Method*. Texas A & M University. Second Edition (1993) McGraw-Hill.

Singh R. N., Shaishav Sharma. *Development of suitable photobioreactor for algae production a review*. Renewable and sustainable energy reviews 16 (2012) 2347-2353

Rodríguez Rosalba Alonso, *El Fitoplancton en la Camaronicultura Y Larvicultura: Importancia de Un Buen Manejo*, UNAM (2004) 147 páginas

- San Pedro A.**, González-López C.V., Acién F.G., Molina-Grima E. *Outdoor pilot-scale production of *Nannochloropsis gaditana*: Influence of culture parameters and lipid production rates in tubular photobioreactors*. *Bioresource Technology* 169 (2014) 667–676.
- Simionato D.**, Basso S., Giorgio M., Morosinotto T. *Optimization of light use efficiency for biofuel production in algae*. *Biophysical Chemistry* 182 (2013) 71–78
- Singhn S.P.**, Priyanka Singh. *Effect of CO₂ concentration on algal growth: A review*. *Renewable and sustainable energy reviews*. 38 (2014) 172-179
- Sheehan J.**, Duffield J, Graboski M, Shapouri H. *An overview of biodiesel and petroleum diesel life cycles*. US Department of agriculture and Energy Report (1998) 1–35
- Sheng Yi Chiu**, Chien-Ya Kao, Ming-Ta Tsai, Seow-Chin Ong, Chiun-Hsun Chen, Chih-Sheng Lin. *Lipid accumulation and CO₂ utilization of *Nannochloropsis oculata* in response to CO₂ aeration*, *Bioresource Technology* 100 (2009) 833–838
- Soman Abhinav**, Shastri Yogendra. *Optimization of novel photobioreactor design using computational fluid dynamics*. *Applied Energy* 140 (2015) 246–255
- Suali Emma**, Sarbatly Rosalam. *Conversion of microalgae to biofuel*. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 16 (2012) 4316– 4342
- Tracey A.** Beachan. *Lipid productivity and cell Wall ultrastructure of six strains of *Nannochloropsis*: implications for biofuel production and downstream processing*. *Algal research* (2014) 64–69
- Traisey T.** Claire Bradley, Daniel A. White, Peter Bond, Sohail T. Ali. *Lipid productivity and cell wall ultrastructure of six strains of *Nannochloropsis*: Implications for biofuel production and downstream processing*. *Algal Research* 6 (2014) 64–69.
- Varicon**. <http://dinocro.info/?k=Varicon+Aqua++Algal+photobioreactor+design+and>
- Vasumathi K. K.**, Premalatha M., Subramanian P. *Parameters influencing the design of photobioreactor for the growth of microalgae*. *Renewable and sustainable Energy Reviews* 16 (2012) 5443-5450
- Versteeg H. K.** and Malalasekera W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. Pearson. Segunda edición (2007)
- Wang L.**, Tao Y., Mao X. *A novel flat plate algal bioreactor with horizontal baffles: Structural optimization and cultivation performance*. *Bioresource Technology* 164 (2014) 20–27
- White Frank M.** *Mecánica de fluidos*. University of Rhode Island. Departamento de Motopropulsión y Termofluidodinámica. McGraw-Hill. Quinta edición (2003)
- Xu Ling**, Rui Liu, Feng Wang, Chun-Zhao Liu. *Development of a draft-tube airlift bioreactor for *Botryococcus braunii* with an optimized inner structure using computational fluid dynamics*. *Bioresource Technology* 119 (2012) 300–305

Yan Zeng, Thong-See Lee, Peng Yu, Hong-Tong Low. *Numerical study of mass transfer coefficient in a 3D flat-plate rectangular microchannel bioreactor*. International Communications in Heat and Mass Transfer 34 (2007) 217–22

Zhao Bingtao, Su Yaxin. *Process effect of microalgal-carbon dioxide fixation and biomass production: a review*. Renewable and sustainable energy reviews 31 (2014) 121-132

Zienkiewicz O. C., Taylor R.L. *The Finite Element Method*. International Centre for Numerical Methods in Engineering. Fifth Edition (2000) Butterworth Heinemann.

Zhu Baohua, Faqiang Sun, Miao Yang, Lin Lu, Guanpin Yang, Kehou Pan. *Large-scale biodiesel production using flue gas from coal-fired power plants with Nannochloropsis microalgal biomass in open raceway ponds*. Bioresource Technology 174 (2014) 53–59.