



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

**ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA
SECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN**

UNIDAD PROFESIONAL ADOLFO LÓPEZ MATEOS

**MODELACIÓN NUMÉRICA DE
REACTORES SONOQUÍMICOS
OPERADOS A DIFERENTES FRECUENCIAS**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

**DOCTOR EN CIENCIAS EN INGENIERÍA
MECÁNICA**

PRESENTA:

MCIQ. GABRIELA RIVADENEYRA ROMERO

DIRECTORES DE TESIS:

DRA. CLAUDIA DEL CARMEN GUTIÉRREZ TORRES

DR. SERGIO ALEJANDRO MARTÍNEZ DELGADILLO

CIUDAD DE MÉXICO

DICIEMBRE 2019





INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

SIP-14
REP 2017

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de siendo las horas del día del mes de del se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de la Tesis, designada por el Colegio de Profesores de Posgrado de:

para examinar la tesis titulada: por el (la) alumno (a):

Apellido Paterno:	RIVADENEYRA	Apellido Materno:	ROMERO	Nombre (s):	GABRIELA
-------------------	-------------	-------------------	--------	-------------	----------

Número de registro:

Aspirante del Programa Académico de Posgrado:

Después de la lectura y revisión individual, así como el análisis e intercambio de opiniones, los miembros de la Comisión manifestaron **APROBAR** **NO APROBAR** la tesis, en virtud de los motivos siguientes:

El trabajo presentado ha cumplido con los objetivos establecidos al inicio del programa doctoral de manera satisfactoria.

Comisión Revisora de Tesis

DRA. CLAUDIA DEL CARMEN GUTIÉRREZ TORRES

12301-EA-16y COLEGIADO

DR. ORLANDO SUSARREY HUERTA

12133-EF-16/6 y COLEGIADO

DR. JOSÉ ALFREDO JIMÉNEZ BERNAL

12302-EE-16y COLEGIADO

DR. SERGIO ALEJANDRO MARTÍNEZ DELGADILLO

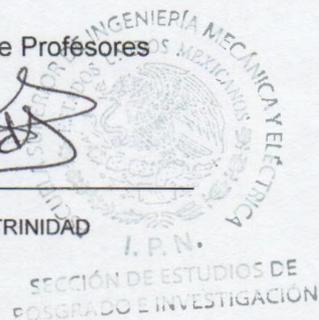
EXTERNO

DR. HELVIO RICARDO MOLLINEDO PONCE DE LEÓN

EXTERNO

Presidente del Colegio de Profesores

DR. JOSÉ MARTINEZ TRINIDAD





INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA CESION DE DERECHOS

En la Ciudad de México, el día **11** del mes de **noviembre** del año **2019**, la que suscribe **Gabriela Rivadeneyra Romero** alumna del Programa de **Doctorado en Ciencias en Ingeniería Mecánica opción Energética** con número de registro **A170700**, adscrito a **Sección de Estudios de Posgrado e Investigación de la ESIME Unidad Zacatenco**, manifiesta que es autora intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de la **Dra. Claudia del Carmen Gutiérrez Torres** y cede los derechos del trabajo titulado “**Modelación numérica de reactores sonoquímicos operados a diferentes frecuencias**”, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a las siguientes direcciones **gabriela.rivadeneyra@gmail.com** y **cgutierrez@ipn.mx**. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Gabriela Rivadeneyra Romero

RESUMEN

En este trabajo se investigaron tres reactores sonoquímicos, con frecuencias de 250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz, desde dos enfoques, el primero de ellos fue el experimental, mediante el cual se evaluaron aspectos relacionados con su desempeño, utilizando dos diferentes potencias para cada reactor (60% y 90%), respecto a la potencia total de 500 W y observando la respuesta en los patrones de flujo (axial y radial). Además, se evaluaron experimentalmente parámetros importantes referentes a la utilidad de los reactores ultrasónicos en cuanto a reacciones químicas, tales como el tiempo de mezclado y la producción de H_2O_2 . Así mismo se realizó la evaluación de la disipación de energía (ϵ) (en todo el reactor y en un plano) y energía cinética turbulenta (κ), parámetros que previamente no habían sido determinados experimentalmente en reactores sonoquímicos de manufactura industrial.

El segundo enfoque tuvo como finalidad la simulación numérica utilizando el método de los volúmenes finitos y la dinámica de fluidos computacionales en uno de los reactores sonoquímicos (de 500 kHz), mediante los modelos κ - ϵ y mediante LES; el motivo por el que se empleó únicamente un reactor es debido al elevado tiempo de cómputo requerido para la simulación dada la naturaleza del proceso estudiado. Se emplearon los datos experimentales evaluados en el reactor para hacer una comparación con la simulación realizada.

ABSTRACT

In this work, three sonochemical reactors were investigated, with frequency values of 250 kHz, 500 kHz and 1000 kHz. Two different approaches were used. The first one was experimentation, through which aspects related to their performance were evaluated. Two different power values for each reactor (60% and 90%) regarding to the total power of 500 W were used, and the response in the flow patterns (axial and radial) was observed. Likewise, important parameters regarding the usefulness of ultrasonic reactors in terms of chemical reactions, such as mixing time and H₂O₂ yield, were evaluated experimentally. In a similar manner, the evaluation of the energy dissipation (ϵ) (throughout the reactor and on a plane) and turbulent kinetic energy (κ) was performed, these parameters have never before been determined experimentally in industrial sonochemical reactors.

The second approach was the use of Computational Fluid Dynamics (CFD) to numerically simulate the behavior of the fluid dynamics within the sonochemical reactors (500 kHz), using the κ - ϵ and LES models; the reason why only one reactor was used is high computational time required for the simulation due to the nature of the studied process. Experimental data evaluated in the reactor were used to make a comparison with the simulation performed.

DEDICATORIA

A mi madre Lilia, a quien debo todo lo que soy y quien me ha acompañado en las buenas y las malas, jamás podré pagar todo su esfuerzo e incondicional apoyo; para ella mi amor, respeto y admiración.

A mi hijo Gabriel, a quien amo profundamente y es el motivo de mi lucha diaria, cuando puedas leer esto, quiero que sepas que todo fue por ti y para ti.

INTRODUCCIÓN

En el trabajo presentado se realizó el estudio de tres reactores sonoquímicos operados a diferentes frecuencias (250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz) y potencias (60% y 90% respecto al valor máximo de 500 W), para evaluar el efecto sobre parámetros operacionales relacionados con su hidrodinámica y su empleo en cuanto a síntesis químicas tales como: campos de velocidad, tiempo de circulación promedio y tiempo de mezclado, estimación de la disipación de energía y de la energía cinética turbulenta, la eficiencia energética y la producción de peróxido de hidrógeno (H_2O_2). Así mismo, se simuló el desempeño del reactor de 500 kHz, mediante los modelos κ - ϵ y LES. Esta investigación se realizó dado que los sonoreactores se han empleado únicamente a escala laboratorio, siendo los tipo *horn* los más investigados, lo cual impide el escalamiento de los mismos para su empleo en la industria. A su vez, hay parámetros como los descritos que han sido sumamente estudiados en reactores de tanque agitado, siendo este trabajo el primero en reportar datos para sonoreactores.

En el capítulo uno se detalla el objetivo general y los objetivos específicos, así como también se muestra la hipótesis de investigación; se hace énfasis en la justificación que da lugar al problema de investigación.

En el capítulo dos se explican conceptos básicos relacionados con el ultrasonido, así como también se detallan los sonoreactores empleados para investigación y los aspectos que tienen influencia directa con el mezclado en los mismos, tal como la corriente acústica (*acoustic streaming*) y la cavitación. También se detallan los parámetros necesarios para evaluar el desempeño en los reactores, tales como la frecuencia de irradiación, potencia ultrasónica, tiempo de mezclado, transferencia de masa, los patrones de flujo, la eficiencia energética y la producción de peróxido de hidrógeno. En este capítulo también se incluye una breve explicación de la dinámica de fluidos computacionales (DFC) y los pasos a seguir para la simulación en flujos turbulentos, incluyendo una descripción de los modelos con énfasis a los empleados en la investigación.

En el capítulo tres se detallan los aspectos operacionales de los reactores, así como también se describen las condiciones empleadas en las técnicas para evaluar los campos de velocidad, la eficiencia energética, tiempo de mezclado, el rendimiento de peróxido de hidrógeno y de la disipación de energía (ϵ) y de la energía cinética turbulenta (κ). Así mismo, se detallan las condiciones de simulación del reactor de 500 kHz, tanto en 3D para el caso de LES, como 2D para el caso de los modelos κ - ϵ .

En el capítulo cuatro se presentan los resultados obtenidos de las evaluaciones realizadas y detalladas en el capítulo tres, presentando, a su vez, la discusión de los mismos, comparando con otros trabajos realizados y los resultados obtenidos por otros autores. Finalmente se presentan las conclusiones del estudio realizado, alcanzando los objetivos planteados y en los anexos se pueden encontrar los residuales empleados en todos los casos de simulación.

AGRADECIMIENTOS

A mi directora de tesis, Dra. Claudia del Carmen Gutiérrez Torres, por su invaluable apoyo para la realización de esta tesis y para la realización del doctorado, le estaré eternamente agradecida.

A mi director de tesis, Dr. Sergio Alejandro Martínez Delgadillo, por su apoyo y sus consejos para la realización de este proyecto.

Al Instituto Politécnico Nacional, por ser una institución educativa de alto nivel, por sus docentes y por las instalaciones facilitadas para la realización de esta tesis.

A los miembros del equipo del laboratorio de Ciencias Básicas de la UAM-Azcapotzalco, por el apoyo brindado durante el tiempo de realización de la tesis: Israel González Neria, Juan Antonio Yáñez Varela, Víctor X. Mendoza Escamilla, Fernando Rodríguez Granados y Alejandro Alonzo García.

CONTENIDO

RESUMEN	ii
ABSTRACT	iii
DEDICATORIA	iv
INTRODUCCIÓN	v
AGRADECIMIENTOS	vii
CONTENIDO	viii
CAPÍTULO 1: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	1
1.1 Problema de investigación	2
1.2 Justificación	2
1.3 Objetivos	2
1.3.1 Objetivo general	2
1.3.2 Objetivos específicos	3
1.4 Hipótesis	3
CAPÍTULO 2: MARCO TEÓRICO	4
2.1 Ultrasonido	5
2.1.1 Longitud de onda	5
2.1.2 Frecuencia	6
2.1.3 Aplicaciones del ultrasonido	6
2.2 Mezclado en sonoreactores	7
2.2.1 Corriente acústica	7
2.2.2 Cavitación	8
2.3 Tipos de sonoreactores	9
2.3.1 Reactores ultrasónicos tipo “horn”	9
2.3.2 Reactores ultrasónicos tipo “bath”	10
2.4 Parámetros de operación en reactores ultrasónicos	11
2.4.1 Frecuencia de irradiación	11
2.4.2 Potencia ultrasónica	14
2.5 Desempeño en reactores sonoquímicos	14
2.5.1 Tiempo de mezclado	14
2.5.1.1 Técnica de sonda de conductividad	15

2.5.2	Transferencia de masa	15
2.5.3	Patrón de flujo.....	16
2.5.3.1	Número de flujo axial y tiempo de circulación axial	17
2.5.4	Eficiencia energética	18
2.5.4.1	Método calorimétrico	18
2.5.5	Producción de peróxido de hidrógeno.....	18
2.5.5.1	Dosimetría de KI	19
2.6	Simulación en reactores sonoquímicos.....	20
2.7	Dinámica de fluidos computacionales (DFC).....	28
2.7.1	Ecuaciones de movimiento	28
2.7.2	Flujo turbulento	28
2.7.3	Ecuaciones RANS y el problema de cierre.....	29
2.7.3.1	Modelos k- ϵ	30
2.7.4	Large-eddy simulation (LES).....	31
2.7.4.1	Modelo de adaptación a la pared local de viscosidad eddy (WALE).....	33
2.8	Simulación DFC.....	34
2.8.1	Modelado de la geometría.....	34
2.8.2	Generación de la malla (mallado)	34
2.8.2.1	Calidad de malla	36
2.8.2.2	Independencia de malla	36
2.8.3	Definición de modelos.....	36
2.8.4	Selección de propiedades	37
2.8.5	Selección de condiciones iniciales y condiciones frontera	37
2.8.6	Métodos de solución.....	37
2.8.7	Postprocesamiento	38
CAPÍTULO 3: METODOLOGÍA		39
3.1	Características de los reactores	40
3.2	Determinación de campos de velocidad mediante procesamiento de velocimetría de imágenes de partícula (PIV).....	40
3.3	Evaluación de la eficiencia energética	43
3.4	Medición del tiempo de mezclado.....	44
3.5	Medición del rendimiento de peróxido de hidrógeno.....	45
3.6	Evaluación de la disipación de energía (ϵ) y energía cinética turbulenta (κ)	45

3.7 Equipo de cómputo	46
3.8 Simulación del reactor ultrasónico mediante DFC (500 kHz).....	47
Caso I. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D y altura de líquido de 10 cm.....	47
Caso II. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 2D y altura del líquido de 10 cm.....	47
Caso III. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D y altura del líquido de 5 cm.....	48
CAPÍTULO 4: RESULTADOS Y DISCUSIÓN	49
4.1 Estudio de independencia de malla	50
4.2 Simulación del reactor ultrasónico mediante DFC (500kHz).....	54
Caso I. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D de 10 cm de altura del líquido	54
Caso II. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 2D y altura del líquido de 10 cm.....	55
Caso III. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D y altura del líquido de 5 cm.....	56
4.3 Campos de velocidad	59
4.4 Evaluación del desplazamiento máximo del piezoeléctrico (A0).....	66
4.5 Flujo axial.....	67
4.6 Tiempo de circulación axial promedio (t_{ax}) y tiempo de mezclado (t_{95})	69
4.7 Evaluación de disipación de energía (ϵ) y energía cinética turbulenta (κ).....	70
4.8 Eficiencia energética	73
4.9 Producción de peróxido de hidrógeno.....	75
CONCLUSIONES	77
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	78
ANEXO	86



CAPÍTULO 1: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA



En este capítulo se detalla el problema de investigación, se establece el objetivo general y los objetivos específicos que orientaron el desarrollo de la investigación y se detalla la justificación de la realización de la misma.

1.1 Problema de investigación

Dado que pueden aprovecharse dos cosas del ultrasonido, en el contexto de los reactores ultrasónicos, tanto su efecto químico (sonoquímica) como su efecto físico debido a las burbujas formadas por el fenómeno (sonoprocésamiento) [1], se tiene que uno de los principales problemas para el escalamiento de los reactores a escala industrial es el desconocimiento de los parámetros relacionados con la hidrodinámica de los mismos. Además, no se cuenta con información referente a la simulación de sonoreactores industriales, ya que en su mayoría los reactores investigados tanto experimentalmente como en DFC son tipo “*horn*” a escala laboratorio.

1.2 Justificación

A pesar de que hay muchas aplicaciones prometedoras del ultrasonido para incrementar la eficiencia del micromezclado en sonoreactores, ha habido problemas mayores en el diseño de reactores sonoquímicos, especialmente para reactores industriales. Una de las razones de este problema se relaciona a la falta del entendimiento de los patrones de flujo y condiciones de distribución de las ondas ultrasónicas.

Por lo tanto, el modelado matemático y la validación experimental de los modelos para la descripción del comportamiento del fluido en los sonoreactores, en cuanto a cómo se propagan las ondas ultrasónicas y sus efectos en la eficiencia de reacción, son necesarios para entender y optimizar el diseño de sonoreactores, para poder escalarlos a nivel a industrial. Así mismo, se tienen dos parámetros que no han sido estudiados experimentalmente en reactores sonoquímicos de ningún tipo, ni en escala laboratorio: disipación de energía (ϵ) y de la energía cinética turbulenta (κ), de los cuales se cuenta con información en otro tipo de reactores como los tanques agitados.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo general

Evaluar los parámetros hidrodinámicos y químicos de tres reactores sonoquímicos operados a diferentes frecuencias (250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz) y potencias (60% y 90% de la potencia máxima).

1.3.2 Objetivos específicos

- Evaluar el efecto de dos diferentes potencias (60% y 90% de la potencia máxima) de tres reactores sonoquímicos en los campos de velocidad, tiempo de mezclado y eficiencia energética.
- Evaluar el efecto de dos diferentes potencias (60% y 90% de la potencia máxima) de tres reactores sonoquímicos sobre el rendimiento de H_2O_2 .
- Simular mediante DFC el comportamiento del sonoreactor de 500 kHz mediante modelos de turbulencia κ - ϵ y LES.
- Evaluar la disipación de energía (ϵ) y la energía cinética turbulenta (κ) de tres reactores sonoquímicos operados a dos diferentes potencias (60% y 90%).

1.4 Hipótesis

La potencia y la frecuencia de operación de los reactores sonoquímicos afecta el comportamiento del fluido en cuanto a los campos de velocidad, la disipación de energía y la energía cinética total, lo que repercutirá en parámetros tales como el tiempo de mezclado y rendimiento de peróxido de hidrógeno.



CAPÍTULO 2: MARCO TEÓRICO



En este capítulo se explican conceptos básicos relacionados con el ultrasonido, reactores sonoquímicos, frecuencia de irradiación, tiempos de mezclado, potencia ultrasónica, transferencia de masa, patrones de flujo, eficiencia energética y rendimiento de peróxido de hidrógeno. Asimismo, se incluye una breve explicación de la dinámica de fluidos computacionales (DFC) y los pasos a seguir para la simulación en flujos turbulentos, incluyendo una descripción de los modelos con énfasis a los empleados en la investigación. De igual manera se provee el estado del arte referente a las potencias y frecuencias evaluadas en los diferentes tipos de reactores y sus configuraciones, además de los modelos empleados para DFC en reactores sonoquímicos y las condiciones de simulación.

2.1 Ultrasonido

El sonido es fácilmente transmitido en gases, líquidos y sólidos tales como el aire, agua, metal, concreto, etc., los cuales son todos medios elásticos. Sin un medio, el sonido no se propaga. La velocidad del sonido en el aire a 20 °C es de alrededor de 1235 km/hr (343 m/s); el sonido se propagará a cierta velocidad dependiendo del medio y otros factores. Mientras más densa sea la estructura molecular, es más fácil para las moléculas transferir energía sonora; en comparación con el aire, el sonido viaja más rápido en medios densos tales como líquidos o sólidos [2]. El agua es un medio natural para la transmisión efectiva de las ondas sonoras a largas distancias [3].

El sonido también viaja más rápido en el aire cuando la temperatura incrementa (un incremento de alrededor de 1.1 ft/s por cada grado Fahrenheit). La humedad afecta la velocidad del sonido en el aire, a mayor humedad, la velocidad será mayor. La velocidad del sonido determina cuán rápido la energía sonora se mueve a través de un medio.

El espectro audible es considerado como el rango de frecuencias incluidas en los límites del oído humano. El alcance comúnmente aceptado del espectro audible es de 20 Hz a 20 KHz. Hay sonidos que son demasiado bajos (infrasonido) y demasiado altos (ultrasonido) considerando al espectro audible. El ultrasonido es una onda acústica sobre el umbral de la percepción auditiva humana (>16 KHz) [2].

2.1.1 Longitud de onda

En la Figura 2.1 se muestra una onda sinusoidal. La longitud de onda λ es la distancia a la que una onda que viaja en el tiempo le toma completar un ciclo [2], la velocidad de la onda determina el tamaño físico de la misma [4]. Una longitud de onda se puede medir entre crestas o entre dos puntos correspondientes en el ciclo [2].

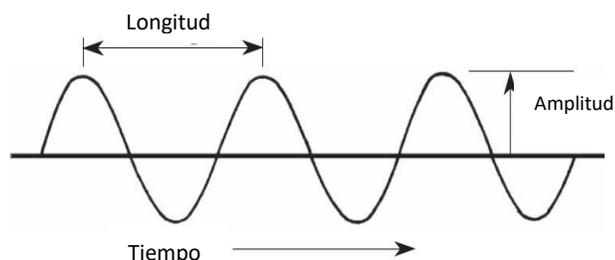


Figura 2.1. Longitud de onda es la distancia a la que una onda viaja en el tiempo que le toma para completar un ciclo [2].

2.1.2 Frecuencia

La frecuencia f especifica el número de ciclos por segundo, medida en Hertz (Hz). La frecuencia y la longitud de onda se relacionan como se muestra en la ecuación 2.1:

$$\text{Longitud de onda (m)} = \frac{\text{velocidad del sonido } (\frac{m}{s})}{\text{Frecuencia (Hz)}} \quad (2.1)$$

Si la frecuencia f de una vibración es conocida, el periodo de tiempo T para un ciclo de vibración puede hallarse mediante la ecuación 2.2:

$$T = \frac{1}{f} \quad (2.2)$$

El periodo de tiempo T es el inverso de la frecuencia de la vibración. El periodo de una onda es la duración del tiempo de un ciclo completo. Ya que la mayoría de las ondas se propagan o viajan, si el periodo de la onda es conocido, su tamaño físico puede determinarse con la ecuación 2.3, si la velocidad de propagación se conoce [4]:

$$\lambda = Tc \quad (2.3)$$

$$\lambda = \frac{c}{f} \quad (2.4)$$

2.1.3 Aplicaciones del ultrasonido

El ultrasonido es una nueva tecnología avanzada y se emplea para intensificar varios procesos físicos y químicos mediante la generación de cavitación y corrientes acústicas en medio líquido. Se ha empleado exitosamente en medio líquido, por ejemplo, para la remoción de colorantes contaminantes de las aguas [5], en reacciones químicas [6], tratamiento de agua [7], superficies de transferencia de calor [8], desorción [9], limpieza [10], cristalización [11] y [12], entre otras aplicaciones. En comparación con otras tecnologías, el empleo de energía ultrasónica ahorra y optimiza el consumo energético, mejorando la calidad del producto y reduciendo el tiempo de producción [13].

2.2 Mezclado en sonoreactores

El mezclado es una operación unitaria cuya finalidad es hacer a un sistema más homogéneo, es decir, reducir gradientes de concentración de propiedades tales como pH, conductividad, etc. El comportamiento molecular, para considerar el mezclado, puede ocurrir de dos formas, la primera de ellas en donde las moléculas se encuentran en total movimiento de tal manera que el fluido se comporta como un microfluido y no presenta segregación. De otra manera, el fluido disperso permanece en grupos que contienen un número elevado de moléculas, a esta forma se le conoce como macrofluido [14].

El micromezclado se relaciona con la vorticidad, entendida ésta como el rotacional del vector velocidad [15]. En este entendido, la turbulencia consiste de un espectro continuo de escalas que van desde las más grandes hasta las más pequeñas; un flujo turbulento se caracteriza por un nivel alto de fluctuaciones de vorticidad, durante la deformación del fluido causado por los vórtices, la energía cinética se transporta de mayores a menores eddies (un eddie turbulento se entiende como un grupo de partículas de fluido que comparte las mismas escalas de tiempo, longitud y velocidad), incrementando la vorticidad. De acuerdo con la teoría de Kolmogorov, debajo de un tamaño de escala de eddie de $\lambda_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{4}}$, los fenómenos hidrodinámicos dependen únicamente de la viscosidad cinemática y de la tasa de disipación de energía, por lo tanto, la mayor parte de vorticidad en un flujo turbulento reside en los eddies más pequeños [16]. La turbulencia es un aspecto fundamental respecto a tecnologías de mezclado, ya que todos los procesos típicos, tales como reacciones, transferencia de masa, transferencia de calor, dispersión líquido-líquido, dispersión de gas y suspensión de sólidos son afectados por su presencia [17].

Es el mezclado efectuado a nivel molecular o micromezclado el que suele ser objeto de estudio en cuanto a sonoreactores se trata. En este entendido, se ha estudiado que los principales factores que tienen una influencia en el micromezclado, son dos: la corriente acústica (*acoustic streaming*) y la cavitación [18].

2.2.1 Corriente acústica

Se puede definir a la corriente acústica como la generación de flujo por medio del sonido. Desde esta perspectiva, el sonido juega un papel principal y el flujo es un subproducto [19]. El efecto es más pronunciado y no lineal a mayor intensidad acústica [20]. Entre otras aplicaciones, la corriente acústica puede mejorar el mezclado en sonoreactores [21].

La corriente acústica es forzada por la acción del esfuerzo de Reynolds, definido como el valor medio del flujo de momento acústico, pero es exclusivamente la disipación del flujo de energía acústica que permite gradientes en el momento de flujo para forzar el movimiento de la corriente acústica [19].

Se puede clasificar en corriente por la disipación cerca de las fronteras (tipos Rayleigh y Schlichting), y corriente debido a la disipación en el cuerpo (tipo Eckart) [20].

El modelo más popular para la corriente acústica se atribuye a Eckart, sin embargo, Rayleigh, Westervelt y Nyborg contribuyeron al mismo resultado y encontraron información más general [22]. La teoría de corriente acústica de Nyborg, (1953) y Westervelt (1951), no consideró el efecto de la inercia del fluido sobre los movimientos de la corriente, esta teoría es válida sólo para fuentes acústicas de muy baja potencia, arriba de 10^{-6} W, en contraste, el movimiento de corriente acústica toma la forma de un jet dominante a potencias arriba de 3×10^{-5} W y llega a ser un jet turbulento sobre 4×10^{-4} W [19].

La corriente acústica es inversamente proporcional a la velocidad del sonido en el medio y a la viscosidad del medio, pero es proporcional al área superficial de la fuente de ultrasonido, intensidad de potencia ultrasónica y el coeficiente de atenuación en el seno del líquido [21].

2.2.2 Cavitación

La cavitación es un fenómeno de nucleación, crecimiento y subsecuente colapso (cuasi-adiabático) de micro burbujas en un medio líquido. La cavitación resulta en la generación de alta temperatura (en el rango de 1000 a 15000 K) y presión (en el rango de 500 a 5000 bar) en millones de lugares en el reactor [23].

Se pueden describir, de manera general, dos tipos de cavitación, dados sus efectos en el mezclado y relacionados con la implosión de las burbujas [24], ya que, cuando se encuentran oscilando y alargándose en tamaño hasta colapsar, provocan la formación de un jet proveniente del punto de implosión, a este tipo se le conoce como cavitación transitoria. De otra manera, se tiene que las burbujas únicamente oscilan y no implotan, a lo cual se conoce como cavitación estable y a ésta se debe la generación de movimiento del fluido, también llamado corriente micro y acústica [25].

La cavitación es un fenómeno dinámico y sus efectos dependen en gran medida de los parámetros de operación y la geometría del reactor [26]. La actividad cavitacional en reactores sonoquímicos es también una función de la localización de los transductores en el reactor, la frecuencia del

ultrasonido, las dimensiones del reactor, altura del medio líquido en el reactor, densidad de potencia y área superficial del elemento irradiante.

Se ha estudiado que para frecuencias de operación bajas, se disipa mayor cantidad de energía cerca de la superficie de irradiación. Debido a esto, hay una máxima actividad cavitacional muy cerca a la superficie de irradiación y amplia variación en las tasas de energía de disipación en el volumen remanente de líquido [27].

La implosión de las burbujas es más violenta cuando la frecuencia es más baja, se ha reportado una relación proporcional entre el número de burbujas y el cuadrado de la frecuencia [28] $N\alpha\omega^2$, donde N es el número de burbujas y ω es la frecuencia radial, que puede evaluarse mediante $2\pi f$, siendo a su vez f la frecuencia del ultrasonido.

2.3 Tipos de sonoreactores

Propiamente no existe una clasificación de sonoreactores, su división más bien se basa en el tipo de sonoreactores que han sido estudiados hasta el momento, con énfasis en la colocación de los transductores.

2.3.1 Reactores ultrasónicos tipo “horn”

En este entendido, se tienen los reactores “horn”, siendo los más estudiados hasta el momento, y consisten en un sonotrodo cilíndrico sumergido en un líquido, transmitiendo las ondas directamente en el medio. El material empleado para el sonotrodo suele ser un elemento de transición y el diámetro del mismo suele estar entre 5 mm y 1.5 cm [29], [30]. El sonoreactor *horn* se ha empleado de manera convencional, tal como se muestra en la Figura 2.2.

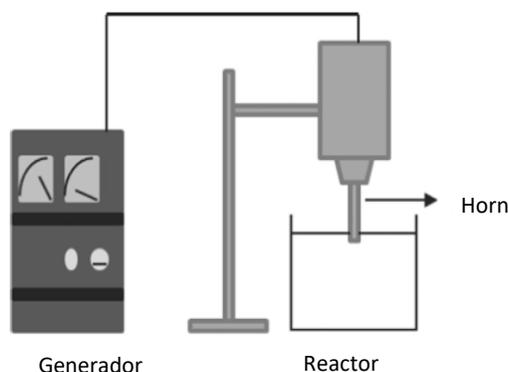


Figura 2.2. Reactor ultrasónico *horn* convencional [31].

Otra forma de utilización de los reactores *horn*, es el empleo del sonotrodo de manera longitudinal, tal como se muestra en la Figura 2.3, teniendo como ventaja que la eficiencia energética es mayor que en la forma convencional ya que hay una mayor área superficial de irradiación en el medio [32].

Los sonoreactores *horn* generan una gran intensidad cerca del sonotrodo, representando algo benéfico para la agitación vigorosa en operaciones a pequeña escala [33]. En los sonoreactores “*horn*”, los parámetros de diseño importantes se relacionan con la profundidad a la cual estará inmerso el sonotrodo así como también la relación entre el diámetro del sonotrodo y el diámetro del recipiente [34].

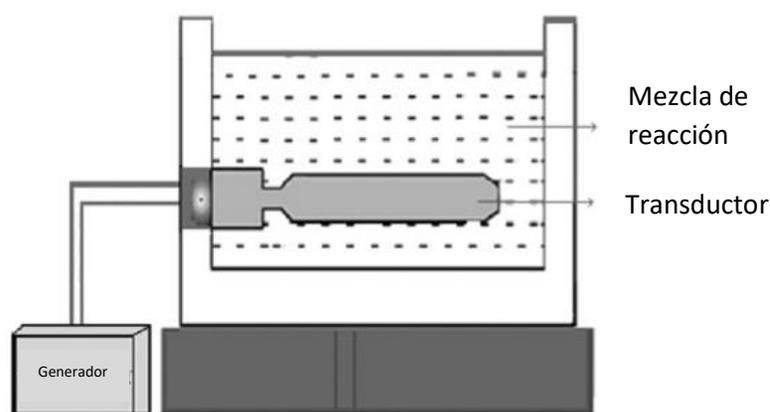


Figura 2.3. Reactor ultrasónico “horn” longitudinal [31].

Los sonoreactores *horn* se han empleado comúnmente a escala laboratorio ya que su capacidad para transmisión de energía acústica dentro de un tanque de volumen elevado no parece probable, además de la erosión del sonotrodo al estar en contacto directo con el líquido, estos factores dificultan su escalamiento para uso industrial [35]. Los reactores tipo *horn* son adecuados para enfocar la energía sobre una zona en particular [31].

2.3.2 Reactores ultrasónicos tipo “*bath*”

En este tipo de sonoreactor ultrasónico, los transductores se encuentran en la base del reactor y, en la mayoría de los casos, no están en contacto directo con el fluido, es decir, la irradiación se transmite al sistema de manera indirecta [31].

Generalmente, los sonoreactores tipo *bath* se utilizan cuando no se requiere un número de potencia o intensidad ultrasónica específica porque la potencia no cambia en este tipo de sonoreactores [36].

La forma de operación de ambos reactores ha sido principalmente por lote. Para operación a gran escala se prefiere el empleo de múltiples transductores con múltiples frecuencias, ya que de esta manera se produce la cavitación suficiente para emplear en diversos procesos [31]. La localización de los transductores es otro factor que modifica la dirección de las irradiaciones ultrasónicas, alcanzando una zona cavitacional máxima en el sonoreactor [27].

De igual manera se han probado diferentes geometrías, tales como cilíndricas y hexagonales, con diferente ubicación de los transductores, sin embargo, es un tema que requiere mayor investigación.

2.4 Parámetros de operación en reactores ultrasónicos

La frecuencia de irradiación y la potencia ultrasónica son los parámetros más importantes en reactores sonoquímicos.

2.4.1 Frecuencia de irradiación

Han sido estudiados diferentes rangos de frecuencias para diferentes fines, pero en general puede decirse que, cuando se necesita un efecto físico en el sistema, se emplean frecuencias bajas (< 100 kHz); si lo que se requiere es intensificar los efectos químicos, entonces se preferencia el uso de mayores frecuencias [31]. La frecuencia tiene una relación estrecha con la cavitación, tal como se señaló anteriormente, ya que, a bajas frecuencias, hay una máxima actividad cavitacional muy cerca a la superficie de irradiación y amplia variación en las tasas de energía de disipación en el volumen remanente de líquido [27]. En la Tabla 2.1, se presentan algunos trabajos realizados, detallando la frecuencia empleada y la finalidad del estudio.

Tabla 2.1. Reactores sonoquímicos operados a diferentes frecuencias y potencias.

Referencia	Frecuencia empleada	Potencia empleada	Características del reactor	Objetivo del estudio
Sajjadi et al. [21]	24 kHz	100-400 W	Tipo <i>horn</i> , cilíndrico pyrex, diámetro 7 cm y altura 9.3 cm con un sonotrodo.	Análisis del jet acústico generado a baja frecuencia y alta potencia.
Toma et al. [1]	500 kHz	10-50 W	Cilindro de vidrio, 58 mm de diámetro, con 500 mm de altura de líquido, empleando diversos solventes.	Balance de energía en el reactor.
Bussemaker y Zhang [37]	Reactor 1: 40 kHz Reactor 2: 376, 995 y 1179 kHz	250 W	Reactor 1: frecuencia baja, 90 mm de diámetro, 87 mm de altura de agua. Reactor 2: multifrecuencia, 57 mm de diámetro, 155 mm de altura de agua Un transductor	Evaluar el efecto de la agitación aérea con cuatro diferentes frecuencias y dos diferentes configuraciones de reactor.
Son et al. [38]	Reactor multifrecuencia 35, 72, 110, and 170 kHz	80, 160, y 320 W	Acrílico tipo <i>bath</i> , 1.20 m x 0.6 m x 0.4 m.	Evaluación de energía de cavitación ultrasónica utilizando métodos de mapeo bi y tridimensionales.
Rehorek, Michael y Gübitz [39]	850 kHz	60, 90 y 120 W		Degradación de colorantes industriales azo, Naranja ácido 5 y 52; azul directo 71; negro reactivo 5 y naranja reactivo 16 y 107
Grosjean et al. [40]	20 kHz	150 W	Tipo <i>horn</i> , lecho fluidizado, 30 cm de altura y 5 cm de diámetro, 5 cm altura de lecho fijo y partículas de vidrio 4 mm de diámetro.	Propagación de ultrasonido dentro de un lecho fluidizado.
Vega-Garzón, Gomez-Miranda y Peñuela [41]	574, 856 y 1134 kHz.	Densidad de potencia de 140 W/L	Cilindro de vidrio, volumen de 500 ml con chaqueta de enfriamiento. Un sonotrodo.	Optimización de variables de operación mediante método de superficie de

				respuesta en un reactor multifrecuencia en degradación de benzofenona 3.
O'Sullivan [42]	20 kHz	Para sonotrodo 1: 120.3 – 453.3 W/cm ² Para sonotrodo 2: 9.3 – 43.9 W/cm ²	Sonotrodo 1: 12 mm diámetro Sonotrodo 2: 3 mm de diámetro	Investigar el fenómeno de corriente acústica a través de un medio líquido mediante PIV.
Merouani y Hamdaoui [43]	20, 500 y 1000 kHz	2.5 W/cm ²	Cilíndrico, enchaquetado, volumen de 500 ml	Estudio computacional y experimental de la degradación de contaminantes orgánicos.
Pejin et al. [44]	40 kHz	125 W	Reactor tipo <i>bath</i>	Factibilidad de pretratamiento ultrasónico para mejorar la liberación de azúcares fermentables para producción de bioetanol.
Duckhouse et al. [7]	20 y 850 kHz	frecuencia a potencia de 20 kHz: 1.22 W frecuencia a potencia de 850 kHz: 22.34 W	Diámetro de sonotrodo de reactor de 20 kHz: 7.3 cm Diámetro de sonotrodo de reactor de 850 kHz: 1.3 cm	Evaluación del efecto de sonicado en la desinfección microbiana usando hipoclorito.
Wen-Yi et al. [45]	20 kHz	600 W máximo.	Reactor de vidrio tipo horn, con 6 mm de diámetro del sonotrodo, volumen de trabajo de 80 ml	Evaluación del efecto de la intensidad ultrasónica sobre los cambios conformacionales en pectina de cítricos.

2.4.2 Potencia ultrasónica

La potencia ultrasónica es, junto con la frecuencia de irradiación, uno de los parámetros más importantes en los reactores sonoquímicos [31]. La tasa de disipación de la potencia afectará el número, tamaño y tiempo de vida de las burbujas en el medio líquido y también el incremento de la temperatura el cual se encuentra directamente relacionado a la solubilidad del gas y la presión de vapor [46].

La potencia ultrasónica se relaciona con el área de los piezoeléctricos mediante la intensidad acústica, ya que ésta se define como la cantidad de potencia disipada en el fluido por unidad de área de superficie de irradiación.

La selección adecuada de la potencia incrementa la eficiencia de operación y por lo tanto, reduce el costo para un proceso dado, por lo cual se recomiendan grandes superficies de irradiación de los transductores para asegurar intensidades de potencia bajas [31]. Se han reportado en literatura rangos normales de intensidad de irradiación óptima, de 5 a 20 W/cm², sin embargo, depende de la aplicación final del reactor [46]. En la Tabla 2.1, se presentan algunos trabajos realizados, detallando la potencia empleada y la finalidad del estudio.

2.5 Desempeño en reactores sonoquímicos

Considerando al escalamiento como el siguiente paso respecto a la investigación realizada en reactores sonoquímicos, se tiene que las características hidrodinámicas y el mezclado juegan un papel fundamental, por lo cual se puede evaluar el desempeño de un reactor sonoquímico en función del tiempo de mezclado, la transferencia de masa y el patrón de flujo [31].

2.5.1 Tiempo de mezclado

Se puede definir el tiempo de mezclado como el tiempo que se requiere para que la salida de una sonda normalizada alcance y permanezca entre 95 y 105 % ($\pm 5\%$) del valor de equilibrio final, este valor es llamado el tiempo de mezclado 95 %.

El tiempo de mezclado es un factor muy importante en el diseño de un reactor y no es la excepción en sonoreactores. Es un parámetro relacionado con las reacciones en el entendido de que, en reacciones muy rápidas, la medida de la tasa de reacción es completamente dependiente de la tasa de mezclado, en este caso el tiempo de mezclado es mucho mayor que el tiempo de reacción. En

reacciones muy lentas, el tiempo de mezclado no tiene efecto en la cinética de reacción, ya que la reacción toma mucho más tiempo que el de mezclado [17].

Existen diversas técnicas para su evaluación en reactores convencionales sin embargo solo algunas pueden utilizarse en reactores sonoquímicos, tales como medida de pH, oxígeno disuelto, conductividad, velocimetría de imagen de partícula y dinámica de fluidos computacionales [46].

Dado que mayoritariamente han sido estudiados los sonoreactores tipo *horn*, es que se conoce que es similar el mezclado a otros sistemas de mezclado por jet y los resultados pueden correlacionarse de manera similar al caso de los jets de mezclado en tanques. En los reactores tipo *horn*, el tiempo de mezclado tiene una relación con la posición y diámetro del sonotrodo, así como también de la geometría del recipiente [47].

2.5.1.1 Técnica de sonda de conductividad

Tiene como ventaja el de ser una prueba económica y rápida para determinación del tiempo de mezclado ya que el tiempo de respuesta es corto. Esta técnica utiliza un electrolito como trazador y una sonda de conductividad monitorea la conductividad local como una función del tiempo. Si la concentración del electrolito es baja, la concentración es directamente proporcional a la conductividad. Las salidas de la sonda son procesadas para calcular el tiempo de mezclado para el sistema en consideración. Esta técnica no es adecuada para mediciones en sistemas cuyas soluciones no conduzcan corriente y en sistemas en los cuales las propiedades reológicas del líquido sean sensibles a cambios en la concentración de la sal. Los datos deben ser primero normalizados para eliminar el efecto de las diferentes sondas, esta normalización se efectúa entre un valor inicial de cero antes de la adición del trazador y un valor estable medido después de que la prueba se ha completado. La salida normalizada se obtiene mediante la ecuación 2.5:

$$C'_i = \frac{C_i - C_0}{C_\infty - C_0} \quad (2.5)$$

Donde C'_i es la salida de la sonda normalizada [17].

2.5.2 Transferencia de masa

Las operaciones de transferencia de masa se caracterizan por transferir una sustancia a través de otras a escala molecular [48]. La transferencia de masa es un efecto secundario y un objetivo crítico de la operación de mezclado. El gas debe estar en contacto efectivo y eficiente con el líquido para proveer transferencia de masa (absorción o desorción; absorción de gas dentro del líquido o

producir una reacción química). Algunas veces el gas sólo provee energía para el mezclado del líquido. El proceso de transferencia de masa en gas-líquido en sistemas turbulentos está controlado principalmente por la disipación de potencia en los fluidos y la fracción de volumen de gas (ϕ). La potencia, junto con las propiedades del fluido, repercuten en el tamaño de burbuja [17].

En reactores sonoquímicos, diversos estudios se han realizado para evaluar el impacto de la cavitación sobre el tamaño de burbuja y el volumen que éstas ocupan en el sonoreactor, principalmente utilizando DFC y con un solo sonotrodo en reactores tipo *horn* [21], [49]. Así mismo, se han realizado algunos estudios de manera experimental, en reactores tipo *horn* y tipo *bath*, mayoritariamente utilizando bajas frecuencias, para evaluar el coeficiente de transferencia de masa volumétrica ($K_L a$) para transferir oxígeno gaseoso del aire al agua [50], así mismo se han analizado el efecto de la solubilidad y transferencia de masa pero de igual manera, en reactores de baja frecuencia [51]. A este respecto, falta realizar más trabajos de tipo experimental en ambos tipos de sonoreactores y con diferentes geometrías, para complementar las investigaciones realizadas mediante DFC.

2.5.3 Patrón de flujo

Los patrones de flujo han sido muy estudiados en los reactores ideales tales como el flujo pistón o el mezcla completa. En reactores de tanque agitado se tiene regularmente identificado el patrón de flujo cuando se emplean impulsores [52], sin embargo este tema es objeto de estudio aún para el caso de los sonoreactores, ya que además de los tipos mencionados anteriormente (tipo *horn* y *bath*), pueden contar con diversidad de configuración de los piezoeléctricos además de presentar diversas formas geométricas y volúmenes.

Con relación a lo anterior, se puede utilizar la técnica de PIV o LDA para evaluar las velocidades de la corriente acústica en los fluidos, a este respecto se han realizado diversos estudios, encontrando valores tales como 0.0078 m/s en un sonoreactor rectangular [53] o de 0.01 a 0.03 m/s para un reactor cilíndrico de PVC con un transductor en la base [54]. También se han hecho algunos intentos por evaluar el efecto de la potencia sobre el patrón de flujo, pero principalmente mediante DFC, en la sección 2.6 se detallan los estudios realizados a sonoreactores vía simulación. Tocante a este tema, se posee información bastante detallada de la evaluación de patrones de flujo en reactores convencionales, tal como los reactores de tanque agitado, la cual se detalla a continuación.

2.5.3.1 Número de flujo axial y tiempo de circulación axial

El número de flujo axial (Q'_{ax}) se utiliza para caracterizar los lazos de conexión en el sistema y puede evaluarse a diferentes alturas del reactor, empleando ya sea la superficie de integración positiva v_z^+ , o negativa, v_z^- de la componente de velocidad axial en un plano particular horizontal, como se describe en la ecuación 2.6:

$$Q'_{ax(z)} = \int_A v_z^+ dA = \int_A v_z^- dA \quad (2.6)$$

Para el caso de los reactores de tanque agitado, A representa la sección radial del mismo.

El flujo axial promedio (Q_{ax}), para el recipiente entero se define como:

$$Q_{ax(z)} = \frac{\int_0^H Q'_{ax(z)} dz}{\int_0^H dz} \quad (2.7)$$

La adimensionalización de la tasa de flujo axial y la tasa de flujo axial promedio, mediante ND^3 en ambos casos, nos da el número de flujo axial $N'_{Q_{ax(z)}}$ y el número de flujo axial promedio $N_{Q_{ax(z)}}$:

$$N'_{Q_{ax(z)}} = \frac{Q'_{ax(z)}}{ND_i^3} \quad (2.8)$$

$$N_{Q_{ax(z)}} = \frac{Q_{ax(z)}}{ND_i^3} \quad (2.9)$$

Donde N, representa el número de revoluciones por segundo del impulsor y D_i el diámetro del impulsor.

La ecuación 2.10 define al tiempo de circulación axial promedio (τ_{ax}) [55]:

$$\tau_{ax} = \frac{V}{Q_{ax(z)}} \quad (2.10)$$

Donde V se refiere al volumen del reactor. Físicamente el tiempo de circulación representa el tiempo para que un elemento del fluido cubra el volumen entero, V, del tanque [56].

Dado lo anterior es que se requiere más investigación referente al patrón de flujo, es decir, evaluación de los perfiles de velocidad radial, axial, así como también el efecto de la potencia sobre los reactores sonoquímicos, por lo cual en esta investigación se determinó lo antes mencionado.

2.5.4 Eficiencia energética

Considerando dos aplicaciones principales del ultrasonido: las basadas en el efecto químico (sonoquímica) y la basada en el efecto físico generado por el colapso de las burbujas (sonoprocésamiento) [1], es que toma relevancia la evaluación de la energía en un sonoreactor, ya que la conversión de energía es un factor crítico si lo que se desea es el escalamiento de dichos reactores para su uso industrial, tema que representa hoy día un reto para los investigadores.

En este entendido, la potencia acústica disipada por una onda ultrasónica en el seno del líquido es un parámetro clave para expresar la eficiencia de un reactor sonoquímico, de igual manera esta potencia tiene una influencia trascendental en el rendimiento sonoquímico [57]. Se ha estudiado que en la disipación de energía, los factores que tienen influencia son el tipo de solvente y por ende sus propiedades, tales como la atomización ultrasónica, la potencia eléctrica entregada al transductor sobre la potencia eléctrica (η_e), y la altura del líquido en el reactor [1].

2.5.4.1 Método calorimétrico

Un método que ha sido utilizado para la determinación experimental de la potencia ultrasónica (P_{US}) es el método calorimétrico, éste ha sido probado no solo empleando agua en el sonoreactor, sino también en medios no acuosos, tales como etanol, tolueno, ciclohexano, xileno y naftaleno [1].

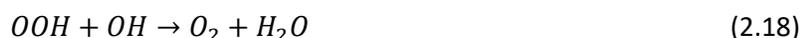
El método calorimétrico, también llamado calorimetría, se basa en la irradiación ultrasónica de un líquido con una masa conocida, con el subsecuente incremento de la temperatura debido a la absorción de energía ultrasónica. De esta manera, se puede evaluar la potencia ultrasónica mediante la medición del incremento de la temperatura en un periodo seleccionado de tiempo, empleando la capacidad calorífica del líquido.

El incremento en la temperatura es principalmente debido a la atenuación/absorción del ultrasonido en el sonoreactor. Es conocido que la atenuación del sonido es una función de la distancia de irradiación, frecuencia aplicada y características de la solución [58].

2.5.5 Producción de peróxido de hidrógeno

Continuando en el sentido de la utilización del ultrasonido en su efecto químico (sonoquímica), se sabe que el peróxido de hidrógeno (H_2O_2) generado durante la irradiación ultrasónica es sumamente poderoso para la degradación de contaminantes acuosos [59], [60] ya que es un oxidante fuerte para reacciones en fase líquida. La cavitación tiene un papel fundamental para la

oxidación de componentes, debido a que las elevadas temperaturas y presiones generadas debido al colapso de las burbujas, generan los siguientes radicales [61], [62] :



En las ecuaciones 2.11-2.23, el símbolo “sonolisis” representa la irradiación ultrasónica, pudiendo observarse la formación de especies reactivas tales como OH, H, y OOH, formadas mediante la sonólisis de las moléculas de agua, así como también H₂O₂ y H₂ gaseoso, mediante OH y H .

Así mismo, en el interior de las burbujas se destruyen algunos componentes orgánicos gaseosos mediante pirólisis. Las temperaturas extremas alcanzadas por el colapso de las burbujas propician la formación de los radicales químicos, tales como los radicales hidroxilo [63]; los radicales químicos son muy reactivos y pueden interactuar ya sea con otros radicales o con otras especies químicas en solución [64]; dicha producción ha sido aprovechada para la degradación de diversos componentes indeseables en la materia, en combinación, por ejemplo, con fotocatalisis [5], o con la presencia de óxidos metálicos tales como óxido de aluminio, a diferentes potencias ultrasónicas, para la remoción de Rodamina B [65].

2.5.5.1 Dosimetría de KI

En el contexto de la formación de iones hidroxilo mediante la sonólisis, se tiene a la dosimetría de KI como un método empleado para evaluar la producción de radicales OH, basado en la oxidación

de yoduro. Iones I^- son oxidados por radicales OH para dar I_2 . Cuando el exceso de iones I^- están presentes en la solución, I_2 reacciona con los iones I^- para formar iones I_3^- , los cuales pueden detectarse por su absorbancia óptica a 355 nm [58]. Se han realizado investigaciones en donde se ha determinado que mayor potencia o intensidad de ultrasonido mejora la formación de H_2O_2 , sin embargo evaluando la adición de peróxido a reactores sonoquímicos y tomando un testigo sin la adición del mismo, se ha evaluado también que a elevadas concentraciones de H_2O_2 , éste puede actuar como depredador de los radicales hidroxilo al formar iones hidropéroxido [66], [62]. Se ha determinado también que el agua de grifo tiene minerales y químicos orgánicos que inhiben la formación de H_2O_2 [62].

2.6 Simulación en reactores sonoquímicos

Diversos autores han estudiado el efecto de ultrasonido sobre las propiedades de los fluidos, teniendo diferentes configuraciones respecto a los reactores empleados, así mismo entre sus técnicas de validación más recurrentes se encuentran la velocimetría de imagen de partícula (PIV), la anemometría doppler de láser (LDA) y las reacciones Villermaux-Dushman, dependiendo de las variables de estudio. Entre algunos de los estudios empleando DFC y modelos de turbulencia en reactores sonoquímicos se han desarrollado modelos para la predicción de la corriente acústica y calor inducido generado por un reactor sonoquímico con un sonotrodo, asumiendo que la punta del sonotrodo es una entrada de flujo [67]. Las velocidades de DFC predichas se ajustaron con los datos experimentales mediante anemometría doppler de láser (LDA), para densidades de potencia mayores que $W_0/V \geq 25 \text{ kWm}^{-3}$, describiendo adecuadamente las corrientes generadas por ultrasonido de baja frecuencia y alta potencia. En otro trabajo [68] se simuló mediante DFC un sonoreactor a 1.7 MHz, con enfoque en mezclado mecánico y se realizó una comparación con un reactor de tanque agitado equipado con un impulsor Rushton; se encontró que a la misma potencia consumida, el sonoreactor presentó una mayor y más uniforme distribución de velocidad comparada con el tanque agitado, sin embargo no se compararon resultados experimentales. Otros estudios [69] han simulado el movimiento de los piezoeléctricos a una frecuencia de 1.7 MHz, para evaluar el efecto en la tasa de mezclado. Los resultados indicaron que la corriente acústica fue en dirección de la propagación de la onda y su máxima velocidad cerca de la superficie del piezoeléctrico. Por otra parte, se ha investigado el efecto de ondas ultrasónicas (microcorrientes y cavitación) de 24 kHz y 1.7 MHz sobre la transferencia de calor de un alambre de platino delgado [70]. Encontraron que el transductor ultrasónico de 1.7 MHz aumentó la tasa de transferencia de

calor más eficientemente que la frecuencia baja, así mismo observaron que la eficiencia de la transmisión de ultrasonido con las ondas de alta frecuencia fue mayor que la frecuencia baja a varias amplitudes de potencia. Respecto al análisis DFC, para ondas de alta frecuencia, obtuvieron menos fracción de volumen de fase de vapor y mayores velocidades a corrientes de flujo en comparación con bajas frecuencias. De esta manera, para bajas frecuencias de onda la creación de cavitación acústica fue el principal mecanismo de incremento de transferencia de calor, pero para alta frecuencia las más fuertes corrientes acústicas fueron el principal mecanismo. A su vez, se investigó el efecto de ondas ultrasónicas de baja frecuencia (42 kHz) sobre el mezclado en un reactor tipo T, para lo cual emplearon la reacción de Villermaux-Dushman [71]. Se observó que las ondas ultrasónicas tuvieron una influencia favorable sobre el producto de distribución y el índice de segregación a varias tasas de flujo total ya que en todos los casos el índice de segregación decreció con el incremento en el flujo total. Como resultado obtuvieron que el índice de segregación incrementó de 10-20% por el bajo consumo de energía (2.45 WKg^{-1}) por el transductor, lo anterior se explicó mediante DFC. De igual manera [72], se estudió el efecto simultáneo de ondas ultrasónicas de 1.7 MHz y micropartículas poliméricas sobre el comportamiento del micromezclado, para lo cual se utilizó un modelo multifásico Euleriano basado en la teoría cinética de flujo granular. Se modeló la prueba Villermaux-Dushman, utilizando la relación del índice de segregación como criterio para evaluar el desempeño del micromezclado. Se encontró que la propagación de ultrasonido de alta frecuencia puede prevenir la aglomeración de micropartículas y también tiene un efecto directo sobre la eficiencia del micromezclado debido a la generación de corriente micro y acústica. Por otra parte, se encontró que la potencia del ultrasonido afecta significativamente las condiciones de puntos calientes y velocidad de oscilación de las burbujas, mediante empleo de DFC, observaron que el volumen total de microburbujas incrementó alrededor de 4.95 % con cada 100 W de incremento en la amplitud de la potencia [73]. La velocidad de la corriente acústica incrementó de 29 a 119 cm/s como incremento de potencia, lo cual se corroboró con los resultados de PIV. Se simuló también un tipo peculiar de cavitación ligada a un transductor tipo *horn* (supercavitación acústica) [74]. Para tal fin, se probaron diversos modelos de cavitación, reportando que ninguno de ellos predijo adecuadamente las principales características del flujo de cavitación en la vecindad de la punta del sonotrodo. Probaron el modelo desarrollado contra medidas sobre el *horn* de cavitación ultrasónico y se obtuvieron resultados precisos en términos de dinámica cavitacional, volumen de cavitación, pulsaciones de presión y campos de velocidad. A su vez, se ha investigado la influencia de la corriente acústica inducida por ultrasonido de baja frecuencia sobre la transferencia de masa

en un sistema de dos fases en 3D [49]. Se comparó la operación de dos diferentes sonoreactores con un reactor de tanque agitado; encontrando que el coeficiente de transferencia de masa volumétrica presenta una relación lineal (con la pendiente de +1) con la amplitud de ultrasonido. Sin embargo este incremento fue más significativo con la tasa de rotación del impulsor en el recipiente agitado. Se simuló un sonotrodo vibrante [75] y se estudió el patrón de flujo inducido con una nueva condición de frontera de movimiento, de esta manera el único parámetro que se necesitó fue la amplitud del sonotrodo vibrante. Se estudiaron los campos de velocidad y presión dentro del medio fluido, las distribuciones de volumen de vapor y funciones de corriente. La validación de los resultados numéricos se realizó mediante la técnica de PIV, mostrando una concordancia cercana. En la Tabla 2.2 se describen los modelos de turbulencia empleados y las condiciones de simulación en DFC. Como se puede observar, la mayoría de estos estudios utiliza solamente un piezoeléctrico y bajas frecuencias, y en todos los casos utilizan el modelo $k-\epsilon$.

Con base en lo anterior, en el presente trabajo se utilizó también la simulación numérica mediante Large Eddy Simulation (LES), por sus ventajas en los cálculos sobre los modelos RANS, pues han mostrado una mejora significativa en las predicciones en flujos vorticales, importantes para el mezclado, y otras estructuras más complejas en los campos de flujo donde los modelos RANS frecuentemente fallan [76]. Adicionalmente, a diferencia de los otros trabajos, se utilizaron reactores industriales tipo *bath* de altas frecuencias.

Tabla 2.2. Condiciones de simulación en DFC de reactores sonoquímicos.

Referencia	Modelo de turbulencia	Frecuencia y/o potencia (W)	No. De piezoeléctricos	Condiciones de simulación en DFC
Trujillo y Knoerzer [67]	k-ε estándar	30, 50 y 70	1	<p>2D</p> <p>Elementos triangulares (no especifica el número).</p> <p>Entrada de velocidad</p> $v = \frac{3}{8\pi} \frac{K}{\rho \mu_t x} \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4} \eta^2\right)^2}$ <p>COMSOL</p>
Parvizian et al. [68]	k-ε	1.7 MHz	4	<p>3D</p> <p>Malla de 888,268 elementos tetraédricos, con refinamiento en la parte de los piezoeléctricos.</p> <p>Condición frontera: entrada de presión en los piezoeléctricos.</p> $P_s = P_A \cos[\omega(t + z/c)]$ <p>Paso temporal: 1×10^{-7}</p> <p>Algoritmo: Discretización mediante upwind de primer orden.</p> <p>Residuales 1×10^{-5} en todos los parámetros.</p>
Parvizian et al. [69]	k-ε			<p>3D</p> <p>Malla dinámica de elementos triangulares en los piezoeléctricos y hexaédricos en el resto del dominio.</p>

Discretización: Esquema de primer orden. El momento, la energía turbulenta y la tasa de disipación turbulenta se discretizaron con el esquema upwind de primer orden.

Condición frontera: Velocidad de vibración de piezoeléctrico

$$\xi(t) = \omega A_0 \sin(\omega t) \cos(2\pi \chi/\lambda)$$

$$\text{Paso temporal: } 7.353 \times 10^{-8} \text{ s}$$

Dehbani et al.
[70]

k-ε

1.7 MHz con potencia disipada de 9.6 W y 24 kHz con potencias disipadas de 17.6, 23.8, 27.4 and 27.9 W

1

Celdas triangulares y tetraédricas estructuradas (número de elementos no especificados).

Algoritmo: SIMPLE con esquema fuerza de cuerpo ponderada y discretización con esquema upwind de primer orden.

Entrada de velocidad (en ambos piezoeléctricos).

$$V = A_0 \omega \sin(\omega t)$$

Rahimi et al.
[71]

k-ε

42 kHz
(no reporta potencia utilizada)

1

3D

Malla hexaédrica de 1,026,000 elementos

Malla dinámica

Residuales: 1×10^{-8} para componentes químicos y 1×10^{-6} el resto de componentes.

Condición de frontera: entrada de velocidad.

Algoritmo: SIMPLE presión-velocidad

Acoplamiento con presión estándar y upwind de segundo orden

Esquema de discretización para momento.

Rahimi et al. [72]	k-ε	1.7 MHz	1	3D Malla tetraédrica estructurada en los piezoeléctricos y malla hexaédrica estructurada, en el resto del dominio, 210,477 elementos. Malla dinámica. Algoritmo: SIMPLE, energía y disipación turbulenta fueron discretizados usando un esquema upwind de segundo orden. La fracción de volumen utilizando el esquema QUICK. Paso temporal: 7.353×10^{-8} s. Residuales: 1×10^{-8} para componentes químicos y 1×10^{-5} en el resto de los parámetros.
Sajjadi, Raman y Ibrahim [73]	k-ε	24 KHz 100-400W	1	3D Paso temporal: 1×10^{-5} s Residuales: 1×10^{-5} Número de elementos: 499,758 elementos tetraédricos Entrada de presión: $P = PA \sin (wt)$ Método SIMPLE, junto con esquema upwind de primer orden. ANSYS FLUENT

Znidarcic, Mettin, y Dular [74]	k-ε realizable	20 kHz 70 W (990W/cm ²)	1	<p>Malla dinámica, de 9800 elementos</p> <p>Algoritmo: COUPLED, upwind de segundo orden para discretizar ecuaciones de momento y energía cinética turbulenta. Para discretización de gradiente y para mayor estabilidad se empleó el método basado en nodos Green-Gauss , se empleó un upwind de primer orden para el cálculo de ecuaciones de continuidad y transporte de fracción de volumen de vapor.</p> <p>Condición frontera: Movimiento de pared.</p> <p>Residuales: 1x10⁻⁸ para la ecuación de energía y 1x10⁻⁴ para el resto de los parámetros.</p> <p>40 iteraciones por paso temporal</p> <p>Paso temporal: < 1x10⁻⁵ s</p>
Sajjadi et al. [49]	k-ε	24 kHz 200-400W	1	<p>3D</p> <p>Celdas tetraédricas, 144,488; 154,223 y 330,700 elementos para los dos sonificadores y el recipiente agitado, respectivamente.</p> <p>Algoritmo: SIMPLE junto con el esquema de discretización upwind de segundo orden</p> <p>Paso temporal: 1x10⁻⁶</p> <p>Residuales: 1x10⁻⁶</p> <p>Entrada de presión (para los sonoreactores)</p> $P(t) = -P_a \sin \omega(t + y/c)$ <p>ANSYS-FLUENT</p>

Rahimi,
Movahedirad y
Shahhosseini
[75]

k-ε

20 kHz
100-400 W

1

2D

Malla dinámica; 41,690 elementos triangulares

Paso temporal: 5×10^{-6} s

Condición de frontera: Movimiento de pared, referida al piezoeléctrico con la siguiente ecuación:

$$U_{UHR}(r, t) = \xi_{max} 2\pi f \left[1 - \left(\frac{r}{R}\right)^2 + 2 \left(\frac{r}{R}\right)^2 \ln\left(\frac{r + \delta}{R}\right) \cos(2\pi f t) \right]$$

Algoritmo: PISO con discretización upwind de segundo orden para energía cinética turbulenta y ecuaciones de energía; upwind de primer orden para continuidad y tasa de disipación

2.7 Dinámica de fluidos computacionales (DFC)

La dinámica de fluidos computacionales (DFC), es un campo de estudio dedicado a solucionar ecuaciones de flujo de fluidos con computadora o con computadoras que trabajan en paralelo. La dinámica de fluidos computacionales se complementa con el análisis experimental [77].

La dinámica de fluidos computacionales es considerada una herramienta fundamental para los ingenieros, la simulación DFC proporciona información referente a detalles sobre cómo se desarrollan productos y procesos. De igual manera se emplea para resolver problemas de optimización. El tiempo de obtención de resultados ha disminuido a medida que las computadoras se hacen más potentes y el software emplea cada vez algoritmos más eficientes [78].

2.7.1 Ecuaciones de movimiento

Se tienen las siguientes ecuaciones de movimiento, para un flujo laminar estacionario de un fluido viscoso, newtoniano, incomprensible, con ρ y ν constantes y sin efectos de superficie libre. La ecuación 2.24 es la de continuidad (de conservación de masa), es una ecuación escalar:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (2.24)$$

La ecuación 2.25 es la denominada ecuación de Navier-Stokes (ecuación de transporte de cantidad de movimiento lineal en el dominio computacional), la cual es una ecuación vectorial:

$$(\vec{V} \cdot \vec{\nabla})\vec{V} = -\frac{1}{\rho}\vec{\nabla}P' + \nu\nabla^2\vec{V} \quad (2.25)$$

Donde: \vec{V} es la velocidad del fluido, ρ es su densidad y ν es la viscosidad cinemática ($\nu = \mu/\rho$). Debido a que no hay efectos de superficie libre, se puede emplear la presión modificada P' y, de esta manera, eliminar el término de gravedad de la ecuación 2.25.

2.7.2 Flujo turbulento

Las ecuaciones de Navier-Stokes describen el comportamiento de los fluidos, y dentro de éstos, de los flujos turbulentos, sin embargo, su resolución demanda gran cantidad de tiempo. La simulación numérica directa (DNS) de las ecuaciones de Navier-Stokes para pequeños sistemas es muy útil para comprender la turbulencia y para desarrollar nuevos modelos.

Para flujos más complejos no es posible resolver del todo las fluctuaciones de turbulencia. La mayor parte de las simulaciones en ingeniería son realizadas con métodos *Reynolds-Averaged Navier-Stokes* (RANS). En estos modelos las fluctuaciones turbulentas son promediadas en el tiempo, se pueden simular con estos modelos velocidades promedio razonables, sin embargo todo lo que ocurra sobre una escala debajo del tamaño de malla no se resuelve, por lo cual se deben emplear modelos adicionales para incluir estos fenómenos.

Un método más costoso que los modelos RANS, pero efectivo es el denominado *Large-Eddy Simulation* (LES), que consiste en resolver únicamente la turbulencia de gran escala, filtrando la escala fina de turbulencia, y en modelar esa pequeña escala como viscosidad efectiva de flujo dependiente. Esta simulación consume mucho tiempo de cómputo y se pueden llegar a requerir semanas para obtener buenos promedios estadísticos para flujos simples [78].

2.7.3 Ecuaciones RANS y el problema de cierre

El promedio de tiempo es definido como:

$$\bar{f} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(x_i, t) dt \quad (2.26)$$

La variable instantánea se define como la suma de la media y el componente fluctuante:

$$p = \bar{p} + p' \quad u_i = \bar{u}_i + \bar{u}'_i \quad (2.27)$$

Promediando las ecuaciones de Navier-Stokes, se obtienen las ecuaciones promediadas de Reynolds Navier-Stokes (RANS):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_m}{\partial x_m} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_i u'_j}) \quad (2.29)$$

En la ecuación 2.29 se encuentra el tensor de esfuerzo de Reynolds, R_{ij} , definido como:

$$R_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} \quad (2.30)$$

$$R_{ij} = -\rho \begin{pmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{v'u'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{w'u'} & \overline{w'v'} & \overline{w'w'} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

De esta manera, R_{ij} es un tensor de segundo orden asimétrico que proviene de promediar el término de aceleración convectiva en la ecuación de momento, por lo cual esfuerzo de Reynolds provee el efecto promedio de convección turbulencia (fluctuante al azar), el cual es altamente difusivo. El tensor de esfuerzo de Reynolds en las ecuaciones de RANS representa una combinación de mezclado debido a fluctuación turbulenta y suavizado por el promedio [79].

Existen modelos clásicos de turbulencia, tales como el $k-\varepsilon$ y el modelo de esfuerzo de Reynolds, los cuales se emplean para modelar los términos adicionales en las ecuaciones de flujo dependientes del tiempo (promedio de Reynolds) [80].

2.7.3.1 Modelos $k-\varepsilon$

Los modelos $k-\varepsilon$ se encuentran dentro de los modelos RANS, son conocidos como modelos de dos ecuaciones, y hacen la misma suposición de equilibrio local, la cual implica que las escalas de turbulencia son localmente proporcionales a la media de las escalas del flujo, por lo cual la mayoría de modelos de dos ecuaciones estarían en un error cuando se apliquen a flujos que no estén en equilibrio [81].

2.7.3.1.1 Modelo $k - \varepsilon$ estándar

El modelo $k - \varepsilon$ estándar tiene dos ecuaciones, una para k y otra para ε , aquí se utilizan para definir la escala de velocidad ϑ y la escala de longitud ℓ respectivamente de la escala de turbulencia grande como sigue:

$$\vartheta = k^{1/2} \quad (2.32)$$

$$\ell = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (2.33)$$

Se podría cuestionar la validez de utilizar la variable de “pequeños Eddies” ε para definir la escala de “gran Eddy” ℓ , esto se permite hacer debido a que a altos números de Reynolds la velocidad a la cual los eddies largos extraen energías del flujo promedio es emparejada a la velocidad de transferencia a través del espectro de energía a pequeños eddies si el flujo no cambia demasiado rápido. Con un análisis dimensional, la viscosidad del eddy se especifica de la siguiente manera:

$$\mu_t = C_\rho \vartheta \ell = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.34)$$

Donde C_μ es una constante adimensional. El modelo $k - \varepsilon$ estándar utiliza las siguientes ecuaciones de transporte para k y ε :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k \mathbf{U}) = \text{div} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \text{grad } k \right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \varepsilon \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \varepsilon \mathbf{U}) = \text{div} \left[\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \text{grad } \varepsilon \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (2.36)$$

Es decir

Razón de cambio de k o ε	+	Transporte de k o ε por convección	=	Transporte de k o ε por difusión	+	Tasa de producción de k o ε	-	Tasa de destrucción de k o ε
--	---	--	---	--	---	---	---	--

Las ecuaciones 2.34 a 2.36 contienen cinco constantes ajustables: C_μ , σ_k , σ_ε , $C_{1\varepsilon}$ y $C_{2\varepsilon}$. El modelo $k - \varepsilon$ estándar emplea valores para las constantes que llegan a un buen ajuste para un amplio rango de fluidos turbulentos:

$$C_\mu = 0.09 \quad \sigma_k = 1.00 \quad \sigma_\varepsilon = 1.30 \quad C_{1\varepsilon} = 1.44 \quad C_{2\varepsilon} = 1.92$$

Las constantes $C_{1\varepsilon}$ y $C_{2\varepsilon}$ permiten una proporcionalidad correcta entre los términos en las ecuaciones k y ε . Para calcular el esfuerzo de Reynolds se emplea la relación de Boussinesq:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} = 2\mu_t S_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (2.37)$$

2.7.4 Large-eddy simulation (LES)

Se puede decir que LES ocupa un lugar intermedio entre los enfoques DNS y RANS, ya que los grandes eddies se resuelven directamente en LES, mientras que los pequeños eddies se modelan. Así mismo, las ecuaciones gobernantes empleadas en LES se obtienen filtrando las ecuaciones de Navier Stokes dependientes del tiempo, ya sea en espacio de Fourier o espacio de configuración [83].

En este sentido, LES también se basa en la teoría sobre turbulencia de Kolmogorov, la cual hace la presunción de que los grandes eddies del flujo dependen de la geometría del flujo, mientras que los pequeños eddies son similares y tienen un carácter universal, el efecto de las escalas universales pequeñas (las así llamadas escalas de submalla) se modelan empleando un modelo de escala de submalla (SGS). Las ecuaciones gobernantes en LES son espacialmente filtradas en lugar de ensambladas o promediadas con el tiempo, la justificación es que los eddies más grandes contienen la mayor parte de la energía, realizan la mayor parte del transporte de las propiedades conservativas y varían más de un flujo a otro; se cree que los eddies más pequeños son más universales y menos importantes y deben ser más fáciles de modelar.

La escala grande o campo de escala es un promedio local del campo completo, para un flujo unidimensional, la velocidad filtrada se define por la ecuación 2.38:

$$\bar{u}_i = \int G(x, x') u_i(x') dx' \quad (2.38)$$

Donde $G(x, x')$, el núcleo filtrado, es una función localizada que es grande únicamente cuando x y x' no están muy lejos. Cuando las ecuaciones de Navier-Stokes son filtradas, se obtiene un grupo de ecuaciones muy similares a las RANS:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (2.39)$$

Donde las definiciones de velocidades difieren de las RANS, pero los problemas de cierre son muy similares. Ya que $\overline{u_i u_j} \neq \bar{u}_i \bar{u}_j$, se debe introducir una aproximación del modelo para la diferencia entre los dos lados de esta desigualdad $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$. En este contexto de LES, $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$ se denomina escala de submalla de esfuerzo de Reynolds (SGS), cuyo rol desempeñado en LES es similar al que en RANS desempeña por el esfuerzo de Reynolds en RANS, siendo diferente la física del modelo.

Escribiendo el campo de velocidad completo como una combinación del campo filtrado y el campo de escala de submalla, se puede descomponer el esfuerzo de escala de Reynolds de submalla (SGSRS) en los tres grupos de términos siguientes [76]:

$$\tau_{ij} = \underbrace{(\overline{u_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j)}_I + \underbrace{(\overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{\bar{u}_j u'_i})}_{II} + \underbrace{\overline{u'_i u'_j}}_{III}$$

2.7.4.1 Modelo de adaptación a la pared local de viscosidad eddy (WALE)

El modelo WALE se basa en un tensor invariante y reproduce la escala propia a la pared, se ajusta bien para LES en geometrías complejas con métodos estructurados y no estructurados porque no se requiere de un filtrado explícito y únicamente se requiere información local para construir la viscosidad de eddy. El modelo es sensible al esfuerzo y a la rotación de las estructuras turbulentas pequeñas.

En el modelo WALE, la escala de viscosidad de eddy v_{sgs} se evalúa de la siguiente forma

$$v_{sgs} = C_k \Delta \sqrt{k_{sgs}} \quad (2.40)$$

Donde C_k es una constante del modelo y k_{sgs} es la energía cinética de submalla. La parte simétrica del cuadrado del tensor de gradiente de velocidad S^d se calcula:

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} + \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_l} \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial x_k} \quad (2.41)$$

La escala de energía cinética de la submalla k_{sgs} , es:

$$k_{sgs} = \left(\frac{C_w^2 \Delta}{C_k} \right)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^3}{\left((\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4} \right)^2} \quad (2.42)$$

Donde el tensor de velocidad de deformación a escala resuelta se define como:

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.43)$$

Sustituyendo la ecuación 2.42 en 2.40, se obtiene la ecuación 2.44 [85]:

$$v_{sgs} = (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{\left(\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij} \right)^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} \quad (2.44)$$

2.8 Simulación DFC

En general, se identifican los siguientes pasos en una simulación DFC: Modelado de la geometría, generación de la malla, definición de modelos, selección de propiedades, selección de propiedades de entrada y salida, solución y postprocesamiento [78].

2.8.1 Modelado de la geometría

En esta parte se desarrolla el dominio computacional, es decir, la región de interés, para lo cual se realizan trazos en dos dimensiones (2D) o tres dimensiones (3D), según el objetivo del estudio, para tal desarrollo, se puede hacer uso de un programa de diseño asistido por computadora (CAD) con una posterior importación hacia el software para DFC o incluso éste puede, como en el caso de ANSYS, contar con un CAD [80].

2.8.2 Generación de la malla (mallado)

Se refiere a la división del dominio en muchos elementos pequeños llamados celdas las cuales representan áreas para dominios 2D y volúmenes para dominios 3D. Puede considerarse a cada celda como un pequeño volumen de control en el que se resuelven las versiones separadas de las ecuaciones de conservación y transporte, tal como se muestra en la Fig. 2.4 [77].

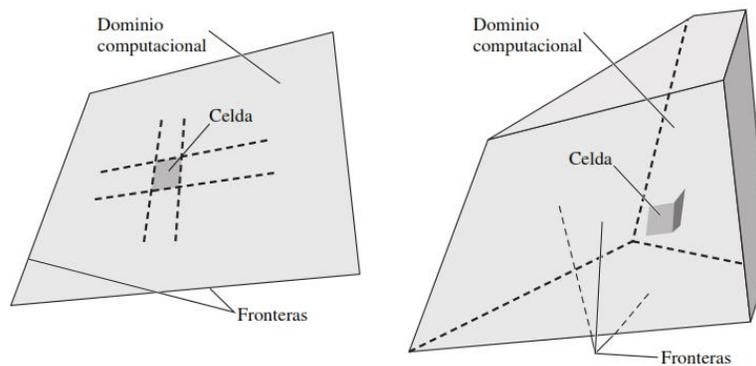


Figura 2.4. Dominio computacional y celdas en 2D y 3D [77].

Las ecuaciones para transporte de momento son no lineales, lo cual implica que el volumen computacional debe ser discretizado adecuadamente para obtener una solución numérica precisa de las ecuaciones [78], se tiene que una malla estructurada está compuesta por celdas planas con cuatro lados, para el caso de los modelos en dos dimensiones (2D), o celdas volumétricas con seis caras para el caso de los modelos tridimensionales (3D). Una malla no estructurada consta de celdas

de diversas formas, regularmente se emplean triángulos o cuadriláteros (2D) y tetraedros o hexaedros (3D), en la Fig. 2.5 se muestran los elementos a emplearse en dominios 2D y 3D y en la Fig. 2.6 se muestra un ejemplo para malla 2D estructurada y no estructurada [77].

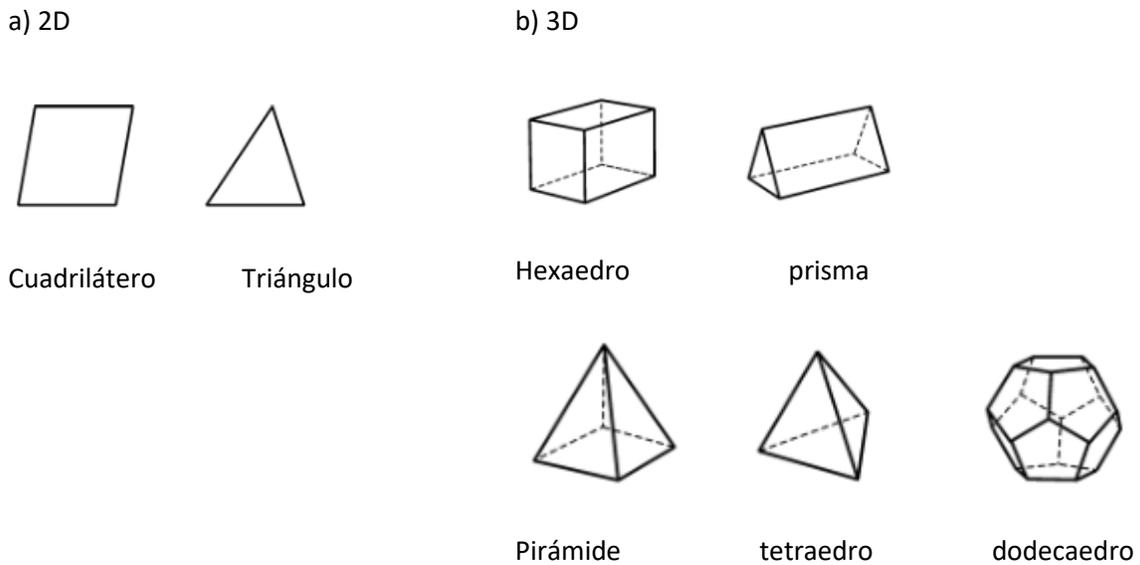


Figura 2.5. Elementos de construcción para mallas en a) 2D y b) 3D [78].

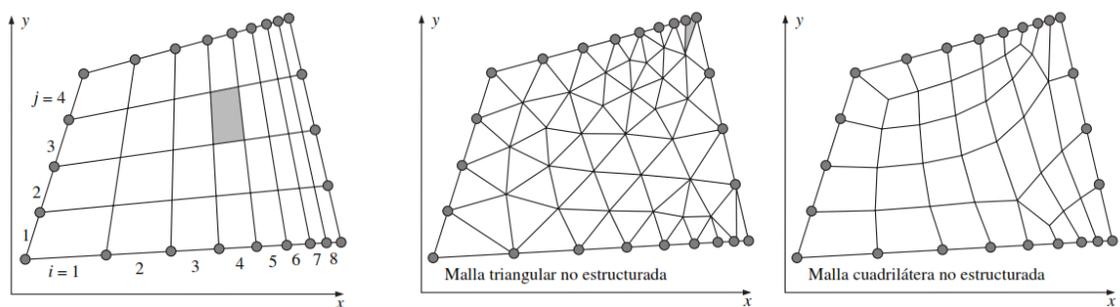


Figura 2.6. a) Malla estructurada b) malla triangular no estructurada c) malla cuadrilátera no estructurada [77].

La mayoría de los programas DFC presentan la posibilidad de adaptación de la malla, es decir, ya que se ha obtenido un resultado preliminar, se puede realizar un refinamiento de la malla donde sea necesario [78].

2.8.2.1 Calidad de malla

Independientemente de la malla seleccionada, la calidad de la misma juega un papel fundamental en la convergencia de la solución, aunque existen diversos criterios para la evaluación de la calidad de malla, los dos criterios más comúnmente utilizados son la ortogonalidad y la oblicuidad, ya que además son los que se consideran para DFC en ANSYS-Fluent, recomendando mantener valores con una ortogonalidad mínima mayor a 0.1 y una oblicuidad máxima menor a 0.95 [86], tal como puede observarse en la Fig. 2.7.



Figura 2.7. Espectros de calidad de malla A) Oblicuidad y B) Ortogonalidad [86]

2.8.2.2 Independencia de malla

Entre más resolución presente la malla, mayor exactitud habrá en los resultados, sin embargo el empleo de mallas con un gran número de elementos hace inoperante la simulación en el entendido de que se requerirá mayor tiempo de cómputo, por lo cual se requiere realizar un estudio de independencia de malla. La forma estándar de realizar el estudio es incrementando la resolución en un factor de 2 en todas las direcciones si es posible [77] o bien incrementar el número de elementos al 100 % [87], seleccionar la variable de estudio y realizar al menos tres mallas, comparando dicha variable con la diferencia de elementos mencionada entre cada malla, y dilucidar de esta manera si la diferencia entre esta variable y el tiempo de cómputo hace válido el empleo de un tamaño de malla determinado.

2.8.3 Definición de modelos

Para modelos de flujo laminar de una fase, las ecuaciones de Navier-Stokes se resuelven directamente, sin embargo para flujos turbulentos o multifásicos, se debe seleccionar un modelo más apropiado. Dentro de cada modelo también tienen que elegirse muchos parámetros, aunque usualmente los valores por defecto son una buena opción. También en ocasiones es necesario

escribir un modelo propio haciendo uso de una subrutina o función definida por el usuario (UDS/UDF) en algún lenguaje de programación.

2.8.4 Selección de propiedades

Se deben seleccionar las propiedades principales del fluido en cuestión, tal como viscosidad, densidad y temperatura. Algunos programas DFC cuentan con bases de datos que incluyen estos datos o de lo contrario puede introducirse los valores.

2.8.5 Selección de condiciones iniciales y condiciones frontera

Se deben seleccionar las condiciones frontera, tal como pared, simetría, etc., en dependencia del fenómeno a simular. De igual manera, se deben especificar las condiciones iniciales para simulaciones transitorias o realizar una suposición inicial para iniciar las iteraciones para simulaciones en estado estacionario.

Se pueden clasificar de manera general, las condiciones de entrada o salida al dominio computacional, como de velocidad o de presión, ambas referidas a la cara de admisión del dominio computacional. La condición de frontera de simetría permite ahorrar tiempo computacional al modelar sólo una parte del dominio físico del fluido, siempre que se tenga un plano de simetría.

2.8.6 Métodos de solución

Aquí se pueden seleccionar los esquemas numéricos para alcanzar la convergencia.

Algoritmo SIMPLE

Los algoritmos SIMPLE (*Semi-implicit method for Pressure-Linked Equations*) utilizan una suposición inicial para presión o velocidad y de esta manera resuelven para las velocidades correspondientes mediante las ecuaciones de momento, posteriormente se evalúa la convergencia y el procedimiento se repite.

Algoritmo PISO

El algoritmo PISO es el más empleado para flujo inestable, puede considerarse como una extensión del algoritmo SIMPLE, con la diferencia de que utiliza dos niveles de corrección en lugar de uno.

Esquemas de discretización

Existe una amplia variedad de esquemas de discretización, los códigos DFC más comerciales emplean algunas variantes del algoritmo Gauss-Seidel (GSA), el cual es un método iterativo, por lo

cual se requiere de un valor inicial para la resolución del problema, es decir, se itera hasta que la solución converja. Se tienen los esquemas de diferencias finitas centrales, donde los valores de la cara o superficie se obtienen mediante la media de dos celdas circundantes, se recomienda para la simulación LES. Se tiene además que los esquemas donde los valores de las caras son dependientes únicamente de las condiciones de entrada, se denominan esquemas upwind, en este entendido y para mejorar la exactitud, se tiene el esquema upwind de segundo orden, en donde se predicen los valores de cara empleando información de dos celdas. Así mismo el esquema upwind de primer orden, el cual permite que el valor de superficie entre dos celdas sea igual al valor para la corriente de entrada más cercana, se considera buena cuando la convección es dominante y el flujo está alineado con la malla; es robusto.

El esquema QUICK (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinetics*), surge como un intento para mejorar la exactitud de los esquemas de segundo orden, utiliza tres puntos de corrientes de entrada para realizar una interpolación cuadrática y de esta manera estimar los valores de las superficies. Se puede considerar una combinación de los esquemas upwind y diferencias finitas centrales [78].

2.8.7 Postprocesamiento

Esta etapa estará en dependencia del software empleado, para ANSYS se tiene que es posible visualizar los resultados como isosuperficies, contornos, animaciones, etc. Así mismo se pueden trazar gráficas de barras, de contornos y exportar los datos a otros programas para trabajar con ellos.



CAPÍTULO 3: METODOLOGÍA



En este capítulo se detallan los aspectos operacionales de los reactores, así como también se describen las condiciones empleadas en las técnicas para evaluar los campos de velocidad, la eficiencia energética, tiempo de mezclado, el rendimiento de peróxido y de la disipación de energía (ε) y de la energía cinética turbulenta (κ). Así mismo se detallan las condiciones de simulación del reactor de 500 kHz, tanto en 3D para el caso de LES, como 2D para el caso de los modelos κ - ε .

3.1 Características de los reactores

Se emplearon tres sonoreactores industriales con paredes de plexiglás, con piezoeléctricos (circulares) de 1.5 cm de diámetro (D), localizados en la base de cada sonoreactor (Fig. 3.1). Los reactores utilizados se operaron a tres diferentes frecuencias: 250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz y son de potencia variable. La potencia máxima de los sonoreactores fue de 500 W, para los experimentos se empleó 300 W, el 60 % (P60%) y 450 W, el 90% (P90%) de potencia. El fluido usado para los experimentos fue agua destilada a condiciones de laboratorio: 25 °C, $\rho = 998.2 \text{ kg/m}^3$, $\mu = 1.003 \text{ mPa}\cdot\text{s}$; se emplearon 10 cm de altura de líquido (H) en todos los experimentos.

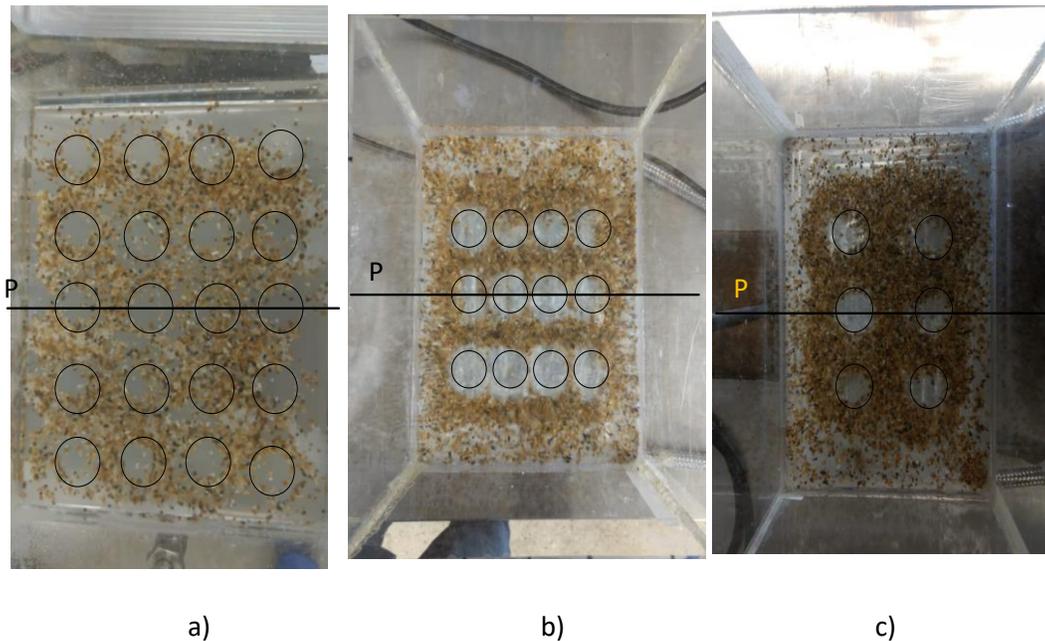


Figura 3.1. Localización de los piezoeléctricos en los sonoreactores: a) 250 kHz, b) 500 kHz, c) 1000 kHz y P es el plano de medición.

3.2 Determinación de campos de velocidad mediante procesamiento de velocimetría de imágenes de partícula (PIV)

La velocimetría de imágenes de partícula es una técnica de imagen basada en láser que combina la precisión y la medición puntual no intrusiva con la capacidad de imagen de visualización de flujo para obtener de manera instantánea, información de velocidad sobre una amplia región de flujo.

Para poder efectuarse, se requiere el empleo de pequeñas partículas trazadoras con propiedades específicas, las cuales son adicionadas en el fluido sujeto de estudio. Un rayo láser es formado

mediante una combinación de lentes en el equipo, así mismo se ilumina el plano o región de estudio comúnmente denominada ventana o área de interrogación, la cual para todos los casos fue en la parte central de los sonoreactores (Fig. 3.1), sobre la cual se recibe una pulsación de láser, el cual ubica la localización de partículas en la región de medición planar. Los pulsos de láser están separados por un tiempo conocido (Δt), el sistema de medida PIV, se observa en la Fig. 3.2. Mientras tanto, una cámara capturó una imagen de las partículas en el área de interrogación, a su vez las lentes de la cámara realizan una magnificación. Se tomaron dos imágenes por cada pulso de láser correspondiente; dichas imágenes se transfirieron a una computadora para su procesamiento. La resolución espacial incrementa con la magnificación.

En el procesamiento, las imágenes son divididas en diferentes ventanas de interrogación pequeñas, el movimiento de la partícula (Δx , Δy) entre imágenes es determinado a través de la siguiente correlación cruzada.

$$C(\Delta x) = \int l_1(x)l_2(x + \Delta x)dx \quad (3.1)$$

La velocidad se encontró dividiendo los desplazamientos de las partículas entre el tiempo entre pulsos. Este proceso se repitió para todas las áreas de interrogación para obtener el campo de velocidad instantáneo. Los experimentos se realizaron con un láser Quantel EverGreen®, con una tasa máxima de repetición de 15 Hz, y un ancho de pulso láser menor o igual a 10 nanosegundos a energía nominal.

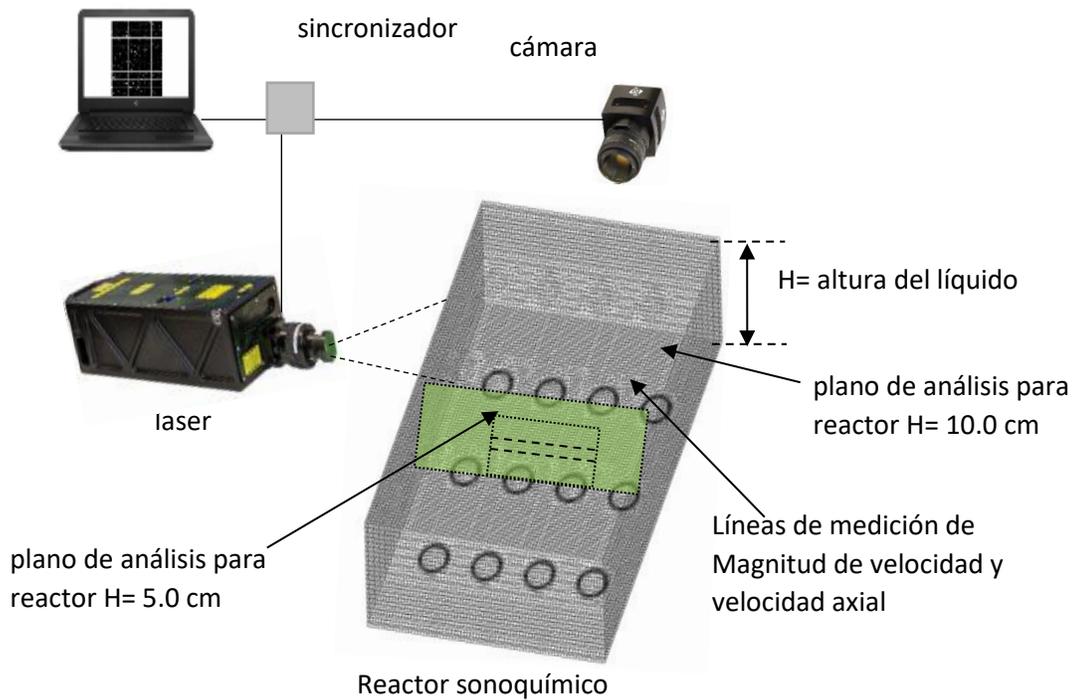


Figura 3.2. Sistema de medición PIV

Se empleó, una cámara 4MP-LS, Modelo 630090 PowerView™, con una resolución de 2360 x 1776 pixeles, diseñada para ser usada para velocimetría de imágenes de partícula (PIV). La cámara captura imágenes de un campo de flujo iluminado para medidas de velocidades en el campo de flujo. Cuando se emplea en mediciones de PIV, se tienen dos modos de operación. El modo de corrida libre, es utilizado para la alineación y diagnóstico del sistema, mientras que el modo Frame Straddling es empleado para mediciones de campos de flujo actuales, es justo cuando se emplea en este modo cuando las imágenes son analizadas usando la técnica de correlación cruzada para calcular los campos de flujo de velocidad. El sistema estuvo provisto, además, de dos lentes cilíndricos; los cuales divergen el haz de láser incidente en una dirección, creando una hoja plana de luz. La divergencia es controlada por la longitud focal de las lentes, también pueden utilizarse combinados. Respecto a la medición en los experimentos, la cámara se situó aproximadamente a 70 cm del plano de análisis, el cual se localizó a la mitad de cada reactor (12.5 cm). La altura de las mediciones de PIV se ajustó para evitar la reflexión del láser, de la base de acero inoxidable y la superficie del líquido en el sonoreactor, la cual interfiere con las mediciones. Por tal motivo las medidas fueron

tomadas a 1.2 cm de la base y a 1.0 cm de la superficie del líquido, por lo tanto las imágenes fueron tomadas cada $\Delta t = 3500 \mu s$ y la tasa de captura se fijó en 7.5 cuadros/s. Se empleó el software TSI Insight 4G para el análisis de las imágenes mediante el algoritmo Nyquist de rejilla recursiva, con una ventana de interrogación de 32×32 píxeles y un 50 % de superposición. Los parámetros de flujo se obtuvieron del promedio de 350 pares de imágenes tomadas en el plano. Se emplearon, como partículas trazadoras, esferas de vidrio huecas recubiertas con plata, con un diámetro aproximado de $10 \mu m$ y una densidad, $\rho = 1020 \text{ kg/m}^3$.

3.3 Evaluación de la eficiencia energética

La evaluación de la eficiencia energética se realizó mediante calorimetría, asumiendo que la energía del ultrasonido es convertida en calor a las escalas disipativas más pequeñas [1], se utilizó la ecuación 3.2.

$$P_{US} = C_p M \frac{dT}{dt} \quad (3.2)$$

Donde; P_{US} es la potencia ultrasónica (W), C_p es la capacidad calorífica del agua a presión constante ($\text{J Kg}^{-1}\text{K}^{-1}$), M es la masa de agua (Kg) y $\frac{dT}{dt}$ es el incremento de la temperatura por segundo. De esta manera, los tres reactores fueron operados a potencias de 60 % y 90 % y el incremento de temperatura por segundo se midió con un termopar en cinco puntos de referencia a 2.5 cm sobre el fondo del sonoreactor y localizado como se muestra en la Fig. 3.3 d). El experimento se efectuó por triplicado y la media se utilizó para los cálculos.

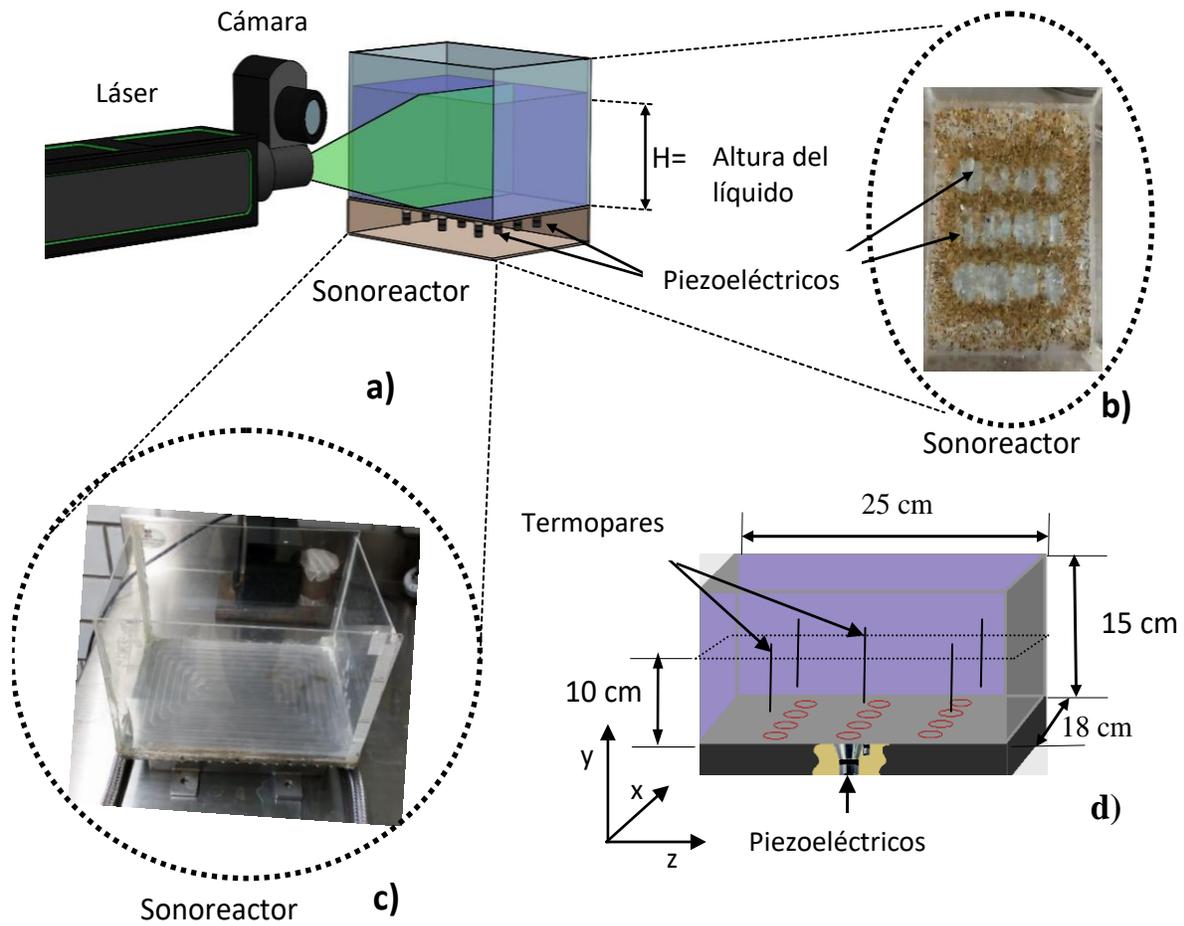


Figura 3.3. a) Sistema PIV, b) vista superior de piezoeléctricos, c) vista lateral de sonoreactor, d) disposición de termopares para estimación de disipación de energía por calorimetría.

3.4 Medición del tiempo de mezclado

Se utilizaron dos electrodos de conductividad para calcular el tiempo de mezclado, el primero se situó en una posición central ($x = 9 \text{ cm}$, $y = 5 \text{ cm}$, $z = 12 \text{ cm}$), mientras que el segundo se situó a $x = 9 \text{ cm}$, $y = 5 \text{ cm}$, $z = 10 \text{ cm}$. Como trazador, se utilizó una solución de KCl, la cual se inyectó en el centro de cada reactor, 1 cm por debajo de la superficie libre del sonoreactor, para evitar problemas de tensión superficial. Se registraron los perfiles de conductividad en función del tiempo. Con los resultados se obtuvo la curva promedio y su desviación estándar. Se utilizó la ecuación 3.3 para calcular la uniformidad [88].

$$U = 1 - \frac{\sigma_{\bar{c}}}{\bar{c}} \quad (3.3)$$

Donde:

\bar{c} = valor promedio de la concentración en un instante de tiempo,

$\sigma_{\bar{c}}$ = desviación estándar de la concentración en un instante de tiempo

U = Uniformidad en un instante de tiempo (%).

El tiempo de mezclado que se utilizó (τ_{95}) fue el tiempo que transcurre para alcanzar una uniformidad del 95%.

3.5 Medición del rendimiento de peróxido de hidrógeno

Para la medición de la concentración de H_2O_2 , cada reactor fue irradiado durante 30 minutos. Se tomaron muestras de un mililitro cada 5 minutos, y se les determinó la concentración de peróxido de hidrógeno mediante la técnica de dosimetría, la cual consiste en mezclar la muestra de 1 ml con el reactivo de yoduro [62]. Para obtener la concentración de peróxido, se empleó un espectrofotómetro de absorción UV-vis, a una longitud de onda de 352 nm. El experimento se efectuó tres veces y la media de la concentración se utilizó en los cálculos.

3.6 Evaluación de la disipación de energía (ϵ) y energía cinética turbulenta (κ)

Energía cinética turbulenta (TKE)

La energía cinética turbulenta (TKE), o κ , es la porción de energía cinética debido a las fluctuaciones de velocidad que provee un mecanismo de mezclado debido a la dispersión turbulenta, en 3D se define de la siguiente manera [89]:

$$\kappa = \frac{1}{2} (\bar{u}^2 + \bar{v}^2 + \bar{w}^2) \quad (3.4)$$

Debido a que se emplea para su evaluación PIV en 2D, no se puede evaluar la tercera componente, es decir \bar{w} , por lo cual se empleó el método de Khan [90], en el que se utilizan las dos componentes de fluctuación de velocidad obtenidas mediante el PIV-2D, para obtener el tercer componente, asumiendo isotropía, como se muestra en la ecuación (3.5).

$$\bar{w}^2 = \frac{1}{2}(\bar{u}^2 + \bar{v}^2) \quad (3.5)$$

Por lo que:

$$\kappa = \frac{3}{4}(\bar{u}^2 + \bar{v}^2) \quad (3.6)$$

Disipación de energía (ε)

Para el caso de ε , debido a que el tamaño de la ventana de interrogación (Δ) es hasta 228 veces mayor que la escala de Kolmogorov (3.7), subpredicciones de ε se presentan si se aplica directamente el método de evaluación.

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \quad (3.7)$$

Donde η_k es la escala de longitud de Kolmogorov y ν es la viscosidad cinemática. Con base en lo anterior, se utilizó el método de grandes remolinos propuesto por Sheng [91], en el cual las escalas menores a la ventana de interrogación, se modelan mediante el modelo de escala de submalla (SGS), para compensar los cálculos de ε . Por lo cual y bajo la consideración de isotropía, se utilizó para el cálculo de ε con los datos experimentales de PIV la ecuación 3.8 [90].

$$\varepsilon = (C_s \Delta)^2 \left(4 \overline{\left(\frac{\partial u'}{\partial x}\right)^2} + 4 \overline{\left(\frac{\partial v'}{\partial y}\right)^2} + 2 \overline{\left(\frac{\partial u'}{\partial y}\right)^2} + 2 \overline{\left(\frac{\partial v'}{\partial x}\right)^2} \right)^{3/2} \quad (3.8)$$

Para este trabajo $\Delta = 2.4592 \cdot 10^{-3}$ m y la constante de Smagorinsky (C_s) se ajustó con base en la relación Δ/η_k , como los sugirieron Meyers y Sagaut [92]. Para esta investigación, la relación Δ/η_k tomó valores de 175 a 228, por lo que para los cálculos se utilizó una $C_s = 0.17$.

3.7 Equipo de cómputo

Para la simulación se dispuso de una computadora de 24 núcleos a 2.1 GHz, con una capacidad de 16 Gb de RAM.

3.8 Simulación del reactor ultrasónico mediante DFC (500 kHz)

Caso I. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D y altura de líquido de 10 cm

Par simular el reactor mediante dinámica de fluidos computacionales (DFC), se realizó una malla no estructurada, con 1 662 611 elementos, se utilizó el modelo k-ε estándar. Como algoritmo de acoplamiento para presión-velocidad, se utilizó el esquema SIMPLE. Para la discretización espacial se utilizó, para gradiente, el método basado en nodos Green-Gauss; para presión, estándar; y para momento, upwind de segundo orden. Para la formulación en régimen transitorio, se empleó upwind de segundo orden. Se establecieron los residuales para todos los parámetros en 1×10^{-5} . Se utilizó un paso temporal de 2.5×10^{-7} s, debido a que se recomienda emplear, para reactores sonoquímicos, un valor de 1/8 del periodo de tiempo a la frecuencia empleada [94] y se calcularon 20 iteraciones por cada paso temporal. Se utilizaron las siguientes condiciones frontera: en las paredes del reactor se utilizó la condición de pared estacionaria y no deslizamiento, en la parte superior del fluido se utilizó la condición de simetría, y los piezoeléctricos se simulaban como una entrada de velocidad, se creó una UDF, utilizando la ecuación 3.9 [94].

$$v_0(t) = \omega A_0 \sin(\omega t) \quad (3.9)$$

A su vez, se tiene que:

$$\omega = 2\pi f \quad (3.10)$$

Donde f es la frecuencia empleada para la determinación, que fue de 500 kHz, t es el tiempo, ω la frecuencia angular y A_0 el desplazamiento máximo del piezoeléctrico, estimado experimentalmente mediante resultados de PIV.

Caso II. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 2D y altura del líquido de 10 cm

Para modelar el reactor mediante DFC, se realizó una malla no estructurada, con 11,925 elementos, se utilizó el modelo k-ε estándar. Como algoritmo de acoplamiento para presión-velocidad, se utilizó el esquema SIMPLE. Para la discretización espacial se utilizó, para gradiente, mínimos cuadrados basado en celdas; para presión, estándar y para momento, upwind de segundo orden. Para la formulación en régimen transitorio, se empleó implícito de primer orden. Se establecieron los residuales para todos los parámetros en 1×10^{-5} . Se utilizó un paso temporal de 2.5×10^{-7} s y se calcularon 20 iteraciones por cada paso temporal. Se utilizaron las siguientes condiciones frontera:

en las paredes del reactor se utilizó la condición de pared estacionaria y no deslizamiento, en la parte superior del fluido se utilizó la condición de simetría, y los piezoeléctricos se simularon como una entrada de velocidad y se creó una UDF para cada piezoeléctrico, utilizando la ecuación parabólica (3.9) [94].

Caso III. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D y altura del líquido de 5 cm

Para simular el reactor se utilizó el modelo LES, con el modelo de submalla WMLES. Se emplearon 349 329 elementos. Como algoritmo de acoplamiento para presión-velocidad, se utilizó el esquema SIMPLE. Para la discretización espacial se utilizó, para gradiente, el basado en nodos Green-Gauss; para presión, PRESTO; y para momento, diferencia central acotada. Para la formulación en régimen transitorio, se empleó segundo orden implícito. Se establecieron los residuales para todos los parámetros en 1×10^{-6} . Se utilizó un paso temporal de 2.5×10^{-7} y se calcularon 30 iteraciones por cada paso temporal. Se utilizaron las siguientes condiciones frontera: en las paredes del reactor se utilizó la condición de pared estacionaria y no deslizamiento, en la parte superior del fluido se utilizó la condición de simetría, y los piezoeléctricos se simularon como una entrada de velocidad y se creó una UDF, utilizando la ecuación (3.9) [94].



CAPÍTULO 4: RESULTADOS Y DISCUSIÓN



En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de las evaluaciones realizadas y detalladas en la metodología, presentando, a su vez, la discusión de los mismos, comparando con otros trabajos realizados y los resultados obtenidos por otros autores.

4.1 Estudio de independencia de malla

El estudio de independencia de malla se realizó empleando el modelo $k-\varepsilon$, puesto que para la simulación LES resulta poco práctico dado el elevado consumo de tiempo computacional. Se generaron tres mallas, cuya diferencia en el número de elementos fue de aproximadamente 100 % entre ellas. En todas se empleó el método de refinamiento con base en resultados, en la Tabla 4.1 se muestran las características de las mismas antes del refinamiento. Se consideró la $V_{\max}=0.0219912$ m/s, y un límite de refinamiento evaluado dividiendo ésta sobre 4, 5 y 6.

Tabla 4.1. Malla 1, 2 y 3 antes del refinamiento.

Malla	Elementos	Ortogonalidad min.	Iteraciones	Tiempo de convergencia (minutos)
1	94112	0.68	907	10
2	267288	0.77	2175	46
3	536300	0.81	2847	102

En la Tabla 4.2 se muestran los detalles del refinamiento

Tabla 4.2. Refinamiento de mallas 1, 2 y 3 en base a resultados.

Malla	Límite de refinamiento	Celdas marcadas	Elementos posteriores al refinamiento	Ortogonalidad min.
1	0.0054978	1438	104178	0.545
	0.00439824	5252	141719	0.47
	0.0036652	2960	164637	0.47
2	0.0054978	1970	281078	0.58
	0.00439824	7263	332738	0.47
	0.0036652	4710	368095	0.53
3	0.0054978	2323	552561	0.606
	0.00439824	8398	612103	0.569

En la Tabla 4.3 se aprecian las características de las mallas posteriores al refinamiento. El estudio de independencia de malla se realizó empleando estado estacionario y el modelo de turbulencia k-ε.

Tabla 4.3. Malla 1, 2 y 3 posteriores a refinamiento

Malla	Elementos posteriores a refinamiento	Ortogonalidad min.	Iteraciones	Tiempo de convergencia
1	164637	0.47	620	12 minutos
2	368095	0.53	1056	32 minutos
3	612103	0.569	1737	120 minutos

La Figura 4.1 muestra un plano a 0.055 cm sobre el eje z, con los detalles de refinamiento con base en resultados.

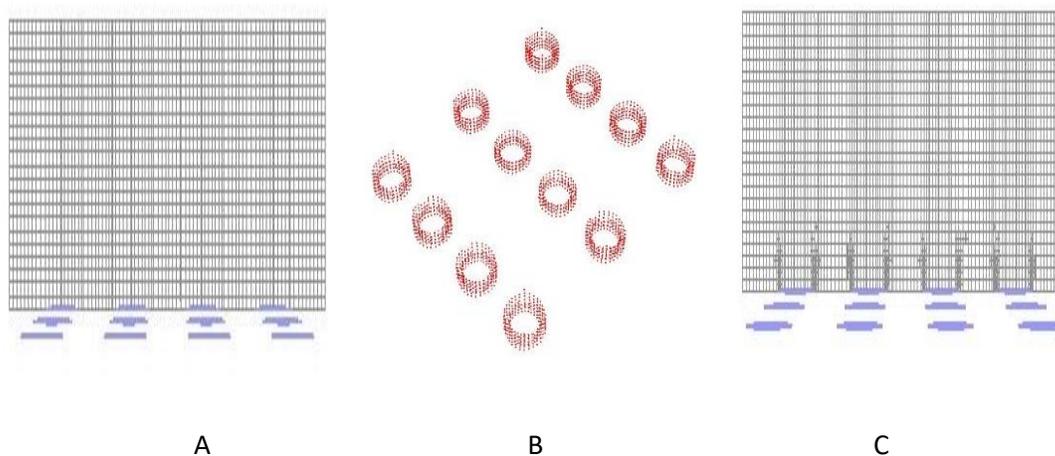


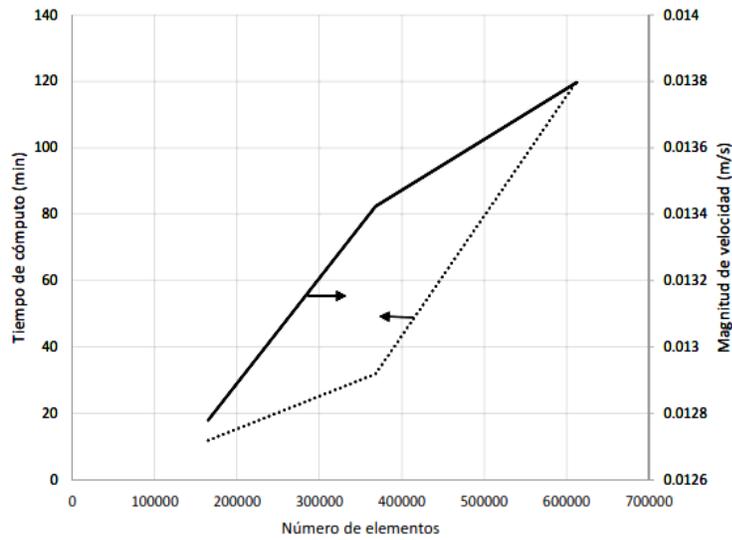
Figura 4.1. A) Celdas anteriores al refinamiento, B) Celdas marcadas para refinamiento, C) Celdas posteriores a refinamiento.

Se seleccionó la magnitud de velocidad como variable para evaluar la independencia de malla, la cual se evaluó en una posición a 0.02 cm sobre los piezoeléctricos. La magnitud de velocidad se evaluó como promedio en el volumen e integral volumétrica, para cada una de las tres mallas. Así mismo, se evaluó el tiempo de convergencia de cada una de las mallas, empleando residuales de 10^{-6} en los parámetros de continuidad y flujo, los resultados se observan en la Tabla 4.4.

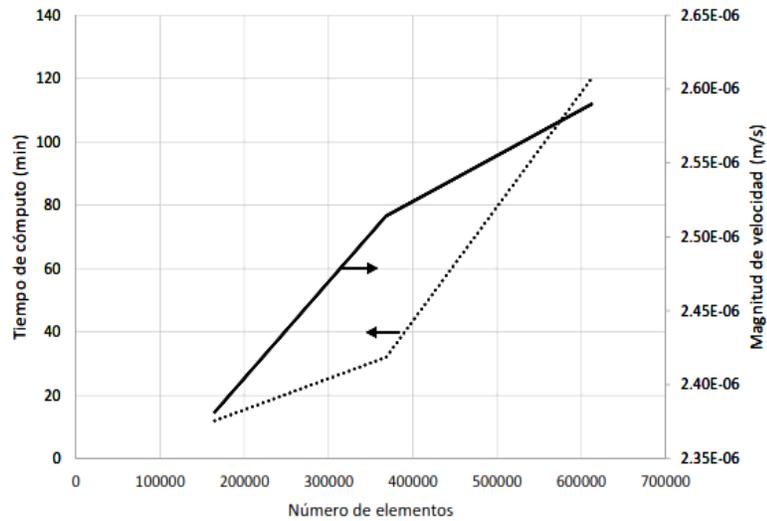
Tabla 4.4. Magnitud de velocidad con promedio de volumen e integral de volumen.

Malla	Elementos	Tiempo de cómputo (minutos)	Magnitud de velocidad (Promedio de volumen)	Magnitud de velocidad (Integral de volumen)
1	164637	12	0.01278064	2.381620×10^{-06}
2	368095	32	0.01342403	2.514102×10^{-06}
3	612103	120	0.01379673	2.589915×10^{-06}

En la Figura 4.2 se observa el comportamiento de la variable analizada (magnitud de velocidad), con un incremento del 100 % en cuanto al número de elementos en las mallas. Se puede ver que en el caso de la malla 1, la magnitud de velocidad promedio en el volumen (Figura 4.2 A), existe una variación de 5% con respecto a la malla 2, mientras que hay una variación de 2.7 % entre las mallas 2 y 3. El mismo comportamiento se observa con la magnitud de velocidad con la integral de volumen (Figura 4.2 B), donde se presenta una diferencia de 5.3 % entre las mallas 1 y 2, y una diferencia de 2.9 % entre las mallas 2 y 3, ambos caso, con el 100 % de incremento de en el número de elementos. Adicionalmente, se presenta un ahorro en el tiempo de cómputo de 73 % respecto a la malla 3. Con base en estos resultados, se utilizó la malla 2 para los estudios.



(A)



(B)

Figura 4.2. A) Magnitud de velocidad en promedio de volumen, B) Magnitud de velocidad en integral de volumen.

En la Figura 4.3 se observan los perfiles de velocidad de las mallas 1, 2 y 3, cuyos datos fueron tomados a 0.02 m sobre la base del reactor para los tres casos. En la gráfica se observa que los perfiles de magnitud de velocidad de las mallas 2 y 3 son más parecidos entre sí que el perfil de la malla 1, sin embargo, dado que existe una diferencia en el tiempo de cómputo para convergencia de 73 % entre la malla 2 y 3, se prefirió utilizar la malla 2 (Figura 4.2 B).

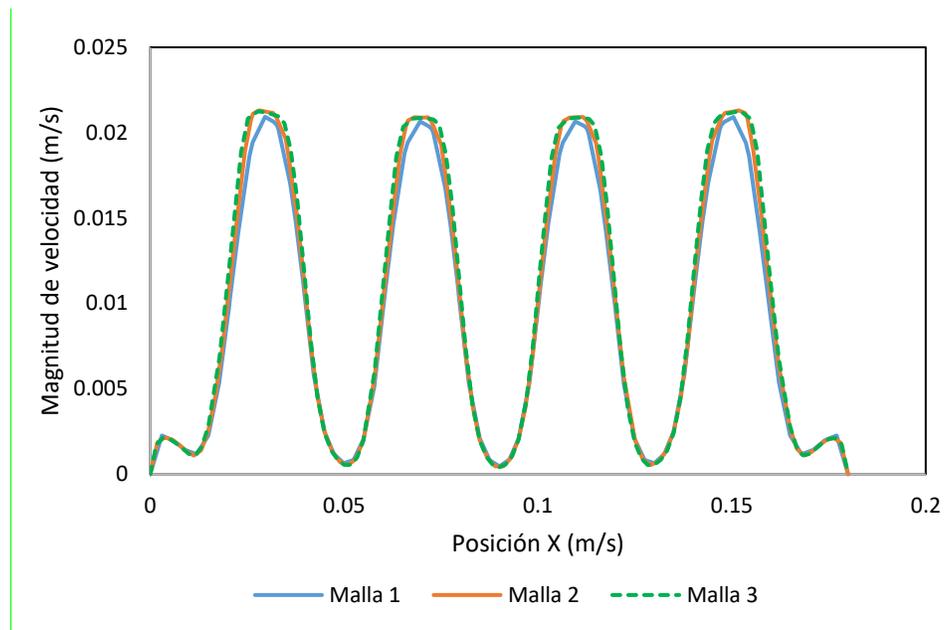


Figura 4.3. Perfiles de magnitud velocidad de las mallas 1, 2 y 3 a 0.02 m sobre la base del reactor.

4.2 Simulación del reactor ultrasónico mediante DFC (500kHz)

Caso I. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D de 10 cm de altura del líquido

En la Figura 4.4, se muestran los resultados para 2 tiempos de simulación y los obtenidos experimentalmente mediante PIV para un tiempo de 30 s. En la simulación, se observa que, en los primeros tiempos, se forma un jet (Figura 4.4 a) cercano a los piezoeléctricos, sin embargo a tiempos mayores (Figura 4.4 b) ya no se observa la presencia del jet.

Los resultados obtenidos experimentalmente mediante PIV (Figura 4.4 c) muestran que no se observan jets cerca de los piezoeléctricos. Estas mediciones se hicieron durante un tiempo de operación del sonoreactor de 30 s, ya que es el tiempo que se requiere para obtener los 350 pares de fotografías, por lo que se dificulta la comparación con los resultados de la modelación, donde fue posible simular hasta un tiempo de 0.135 s, debido al tamaño del paso, que es del orden de 10^{-7} s. Sin embargo, se observa que las velocidades alcanzadas en ambos casos, simulación y experimental, son del mismo orden de magnitud. Es importante mencionar que en otros trabajos [21], se reportan jets que se forman durante el proceso, sin embargo, los resultados de las experimentaciones y de la simulación muestran que sólo en los primeros instantes del fenómeno se presentan.

Dado el tamaño de paso empleado (del orden de 10^{-7} s), se estimó que, con los recursos computacionales con los que se contaba, se tomarían aproximadamente 3 años para simular 1 segundo, por lo cual se decidió reducir el dominio computacional a 2D.

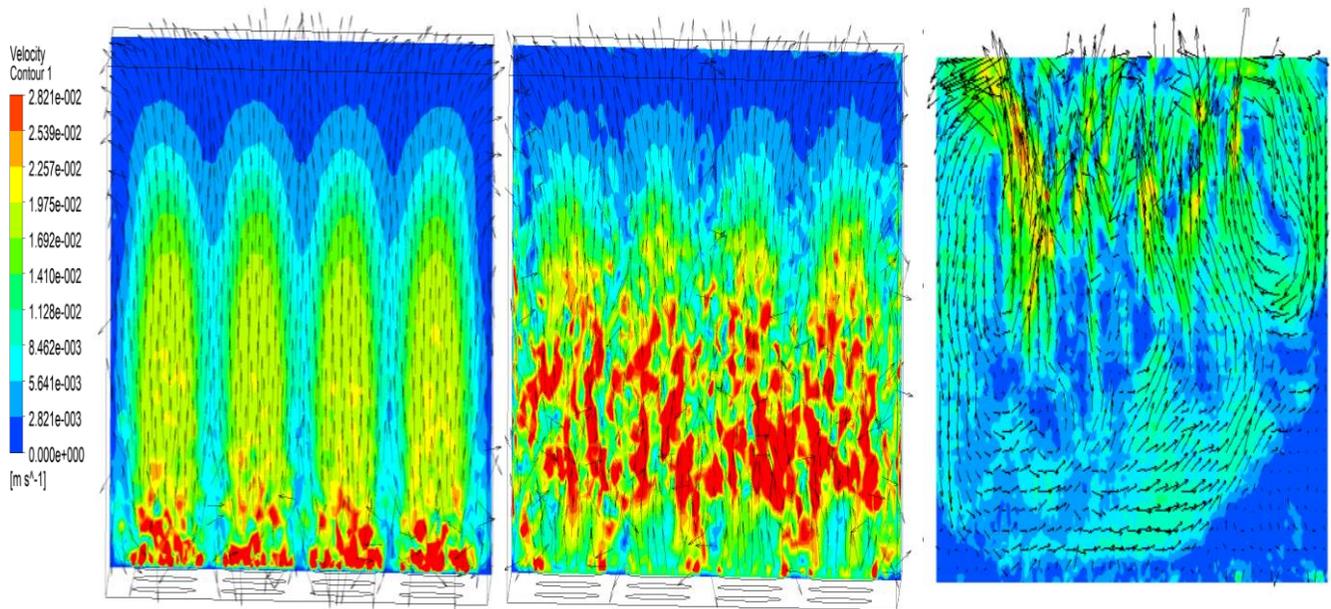


Figura 4.4. Reactor ultrasónico de 500 kHz con 10 cm de altura de líquido: a) Simulación durante un tiempo 0.0025 s, b) Simulación durante un tiempo de 0.135 s c) resultados experimentales obtenidos mediante PIV a tiempo 30 s.

Caso II. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 2D y altura del líquido de 10 cm

Con la finalidad de reducir el tiempo de cálculo, el dominio del reactor se redujo a 2D. Los resultados se muestran la Fig 4.5 a, se simuló un tiempo de 0.398 segundos y se comparan con los resultados experimentales (Fig. 4.5 b)

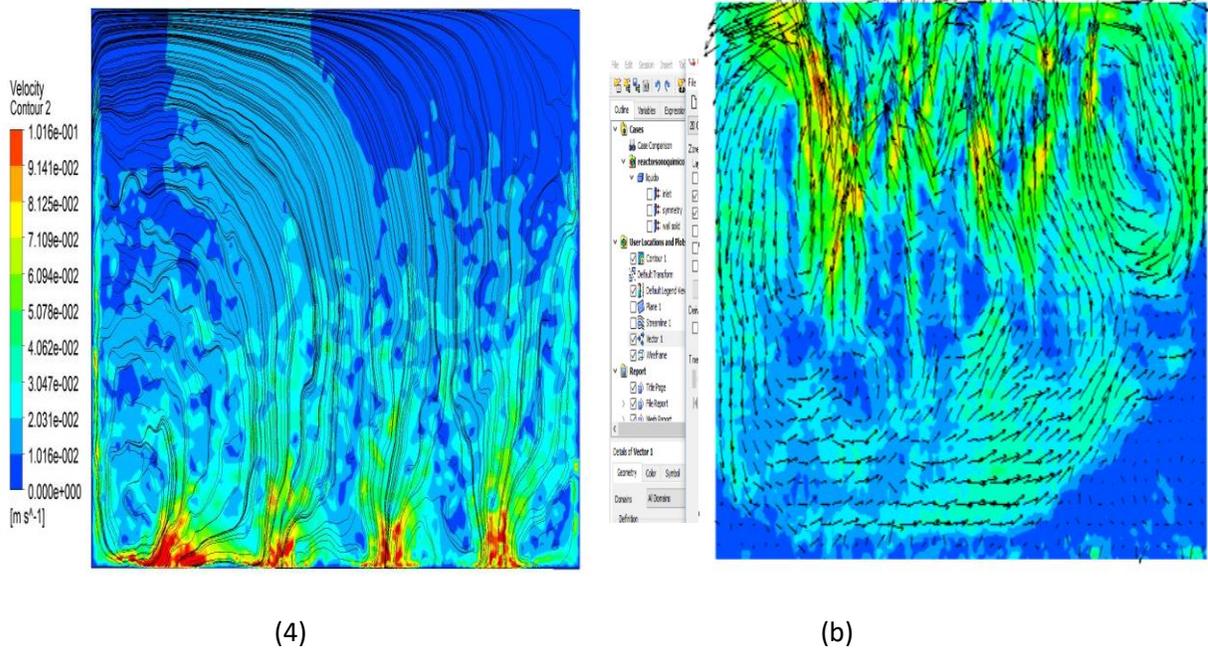


Figura 4.5. Reactor ultrasónico de 500 kHz con 10 cm de altura de líquido: a) simulación 2D a 0.398 s y b) resultados experimentales obtenidos mediante PIV a tiempo de 30 s.

Caso III. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D y altura del líquido de 5 cm.

Con la finalidad de reducir el tiempo de simulación, se redujo el volumen del dominio, empleando únicamente 5 cm de altura de agua. El tiempo de simulación que se pudo realizar fue de 0.11 s.

Comparación entre los datos experimentales obtenidos mediante PIV y la simulación

La simulación se efectuó en estado no estacionario empleando un paso temporal de 1/8 del periodo a la frecuencia de 500 kHz, es decir, 2.5×10^{-7} s y con criterios de convergencia en todos los parámetros de 1×10^{-6} . Así mismo, se empleó el modelo LES y la zona estudiada fue el plano de análisis para reactor H= 5.0 cm (Fig. 4.6).

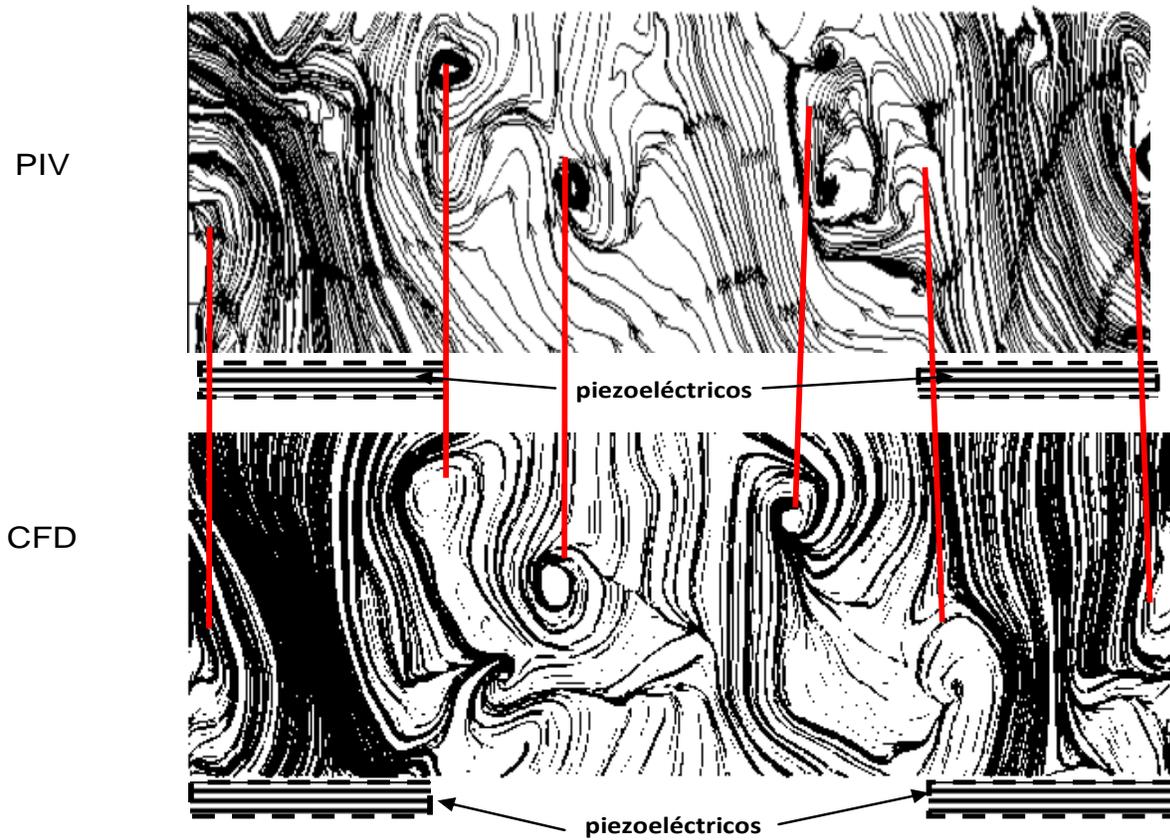


Fig. 4.6. Líneas de corriente obtenidas a 0.11s.

Los resultados presentados se obtuvieron a un tiempo de simulación de 0.11 s. Se observa similitud en los patrones de líneas de corriente. La Fig. 4.7 muestra los resultados de la magnitud de velocidad (Figura 4.7 A) y velocidad axial (Figura 4.7 B) en dos líneas posicionadas a diferentes alturas del piezoeléctrico.

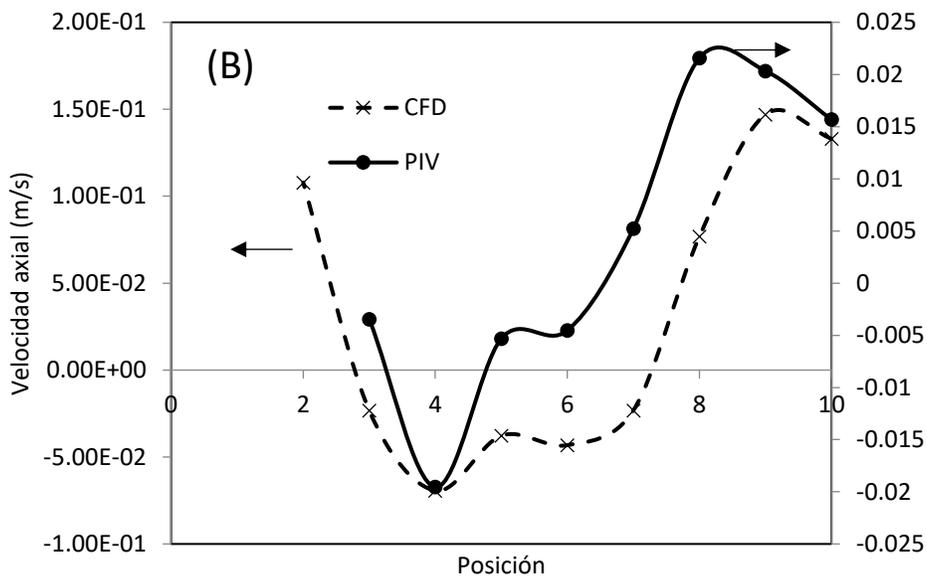
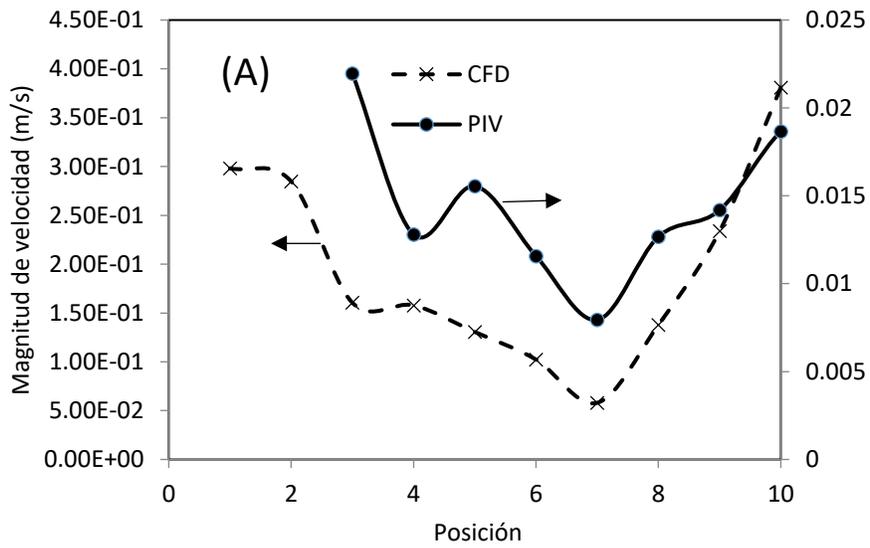


Figura 4.7. Magnitud de velocidad (A) y velocidad axial (B).

Se observa una misma tendencia, sin embargo, el orden de magnitud es mayor en el caso de los resultados del DFC. Esto se puede explicar por el efecto que tiene la potencia, la cual afecta el desplazamiento del piezoeléctrico (A_0). En el caso de la DFC se tendrá que calibrar este desplazamiento disminuyéndolo para reducir la velocidad.

4.3 Campos de velocidad

Los resultados en Fig. 4.8, muestran los contornos de la magnitud de velocidad promedio (MV) para las tres frecuencias (250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz) y ambos porcentajes de potencia, 60 % (P60%) y 90 % (P90%) obtenidos mediante la técnica de PIV. Los resultados muestran que a 250 kHz el número de antinodos es más claro que a 500 kHz y 1000 kHz, lo cual concuerda con otros trabajos de investigación [95], [96]. Esto puede explicarse debido a que a mayores frecuencias la longitud de onda es demasiado pequeña para diferenciarse entre la presión de los nodos y antinodos [58].

A pesar de que tales fenómenos físicos han sido discutidos con antelación mediante el uso del método de sonoluminiscencia [95], [96], en las mediciones del PIV efectuadas, se presenta una visualización en forma de gradiente de velocidad, el cual puede cuantificarse. Tal como se observa, cuando la frecuencia y potencia incrementan, la velocidad aumenta, en todos los casos. En los sonoreactores de 500 kHz y 1000 kHz, dos principales lazos de recirculación se localizan cerca de las paredes, con algunos pequeños en la parte media superior de los reactores. Las velocidades más elevadas se localizan principalmente por encima de la parte media de los reactores ($y \leq -50$ mm). En el caso del reactor de 1000 kHz, hay una zona de baja velocidad (en azul) alargada hacia la dirección normal, la cual se reduce a la potencia mayor. La región de baja velocidad es consecuencia de las fuertes interacciones entre la región vortical media la cual desvía el flujo hacia abajo y los lazos de recirculación lateral los cuales impulsan el flujo hacia arriba. Es posible que los movimientos de flujo estén ocurriendo a lo largo de la dirección normal del plano. En el caso de 250 kHz, hay pequeños vórtices abundantes y aleatorios cerca de las paredes y en la zona central del reactor. En general, similares patrones de flujo se encontraron a cada frecuencia empleada, independientemente del porcentaje de potencia acústica.

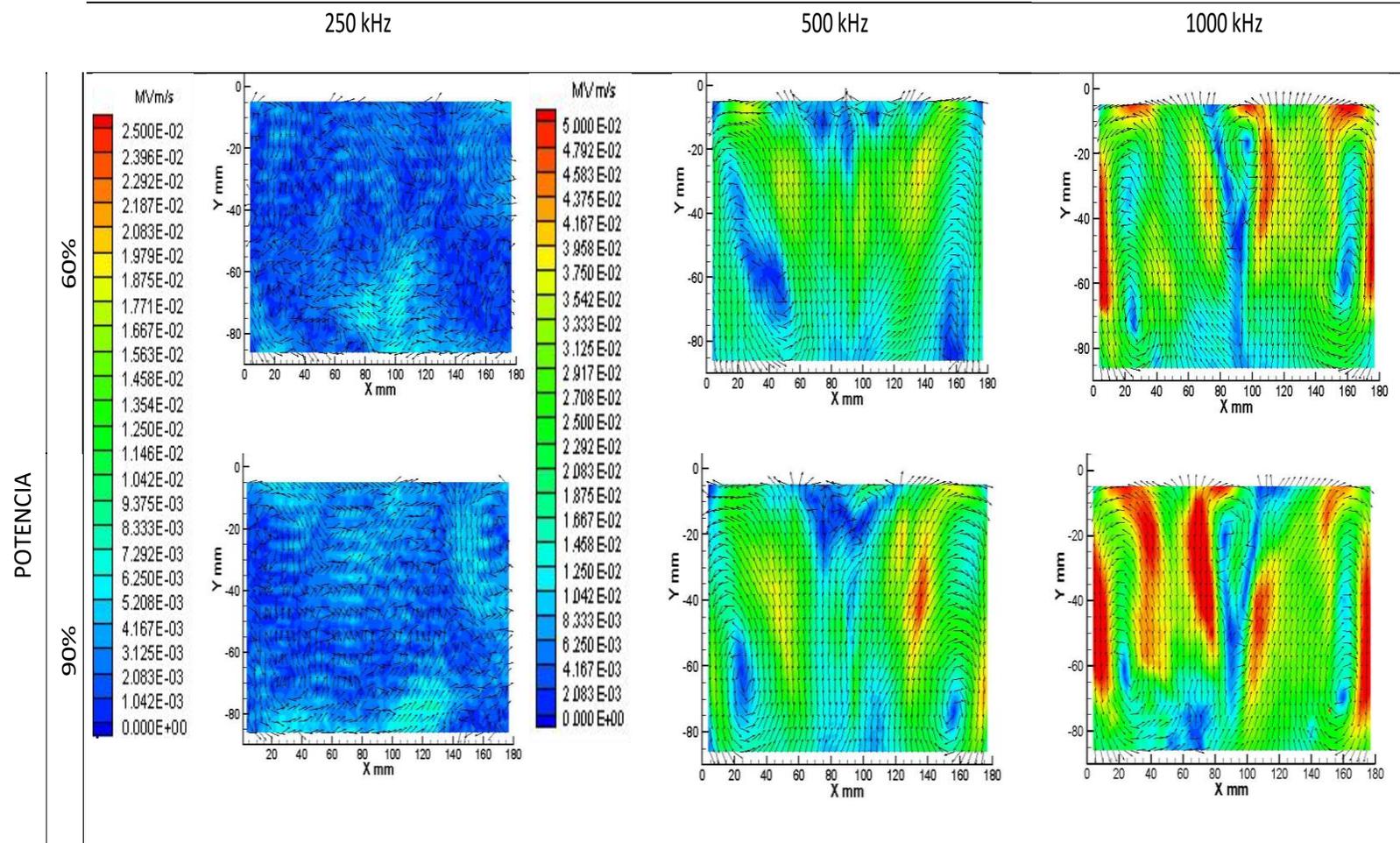


Figura 4.8. Contornos de magnitud de velocidad para frecuencias de 250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz y porcentajes de potencia de 60% y 90% (P60% y P90%).

Las velocidades alcanzadas a 250 kHz son similares a las reportadas en otras investigaciones (0.0078 m/s) [53], siendo sus magnitudes las más pequeñas de todos los casos para ambos porcentajes de potencia (%P). Como se muestra en la Fig. 4.9, las velocidades promedio alcanzadas en 500 kHz y 1000 kHz se encuentran alrededor de siete a diez veces por arriba de las del reactor de 250 kHz, por ejemplo, la velocidad promedio a 90 % de potencia es, para 500 kHz, 0.01232 m/s, mientras que a 1000 kHz es de 0.01739 m/s y a 250 kHz es de 0.001689 m/s. Por otra parte, entre el sonoreactor de 500 kHz y 1000 kHz, las velocidades incrementan en un factor de alrededor de 1.4 veces para ambas condiciones de potencia. Estas velocidades son similares a las obtenidas usando la técnica de tomografía láser (0.028-0.03 m/s) en un sonoreactor con la misma altura de líquido y frecuencia (500 kHz) [97] y de manera similar, en otro trabajo, se reportaron velocidades en el rango de 0.01 a 0.03 m/s [54].

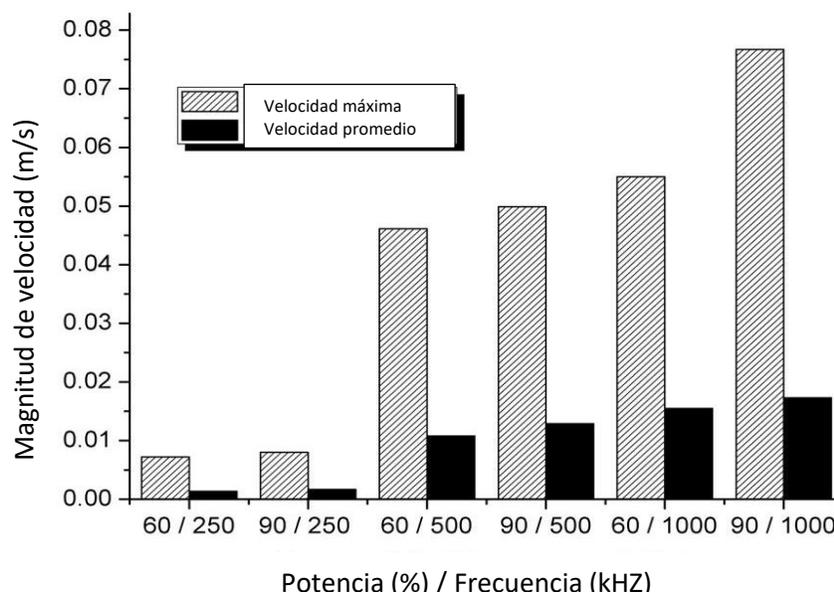


Figura 4.9. Magnitud de velocidad (máxima y promedio) a diferentes frecuencias y condiciones de potencia.

La Fig. 4.10 muestra la velocidad radial en los sonoreactores. Se observa que es muy baja la velocidad radial (U) generada en todos los casos a las potencias de 60 % y 90 %. Por otra parte, la Fig. 4.11 muestra que la velocidad axial (V) predomina sobre la radial (U) e incrementa cuando la frecuencia y la potencia lo hacen. La mayor velocidad axial alcanzada fue en el sonoreactor de 1000 kHz. Las mayores velocidades axiales para 500 kHz y 1000 kHz están localizadas en las mismas zonas tal como se mencionó sobre la Fig. 4.8. Las velocidades axiales en el sonoreactor de 250 kHz son

muy bajas, en comparación con las presentadas a las frecuencias más elevadas tal como se mencionó anteriormente, a 250 kHz los antinodos de presión se muestran con mayor claridad que a mayores frecuencias. Se han descrito tres mecanismos que mejoran el micromezclado por ultrasonido [18]; el colapso de burbujas de cavitación que crea micro-jets y micro-corrientes [98], micro-mezclado debido a la oscilación de la burbujas de cavitación estables, las cuales generan circulación convectiva [24] y corriente acústica macroscópica debido a la propagación de ondas de sonido a través del líquido, generando turbulencia [15]. Para el último mecanismo, otros autores han reportado una dependencia de la disipación de energía sobre la frecuencia [18], [37].

La corriente acústica puede explicar las velocidades más elevadas alcanzadas en el sonoreactor operado a mayores frecuencias.

A pesar de que hay otros mecanismos durante la irradiación ultrasónica en sonoreactores, en este caso, a mayor frecuencia, la corriente acústica es el principal mecanismo que afecta el desempeño hidrodinámico del reactor, el cual debe ser más estudiado, debido a que la mayoría de los estudios han identificado la cavitación como el mecanismo más importante [49]. La vorticidad se relaciona a la deformación y rotación de las partículas del fluido, y a menudo es utilizada para visualizar los remolinos relacionados con el mezclado que toman lugar a mayores escalas. En consecuencia, se incluyó en el análisis y se muestra en la Fig. 4.12. A menores frecuencias independientemente de la potencia, los niveles de vorticidad son más bajos que en otros casos. Esto explica por qué el tiempo de mezclado de este reactor es el mayor. Para las frecuencias de 500 kHz y 1000 kHz son claramente visibles las formas de los tres principales lazos discutidos anteriormente.

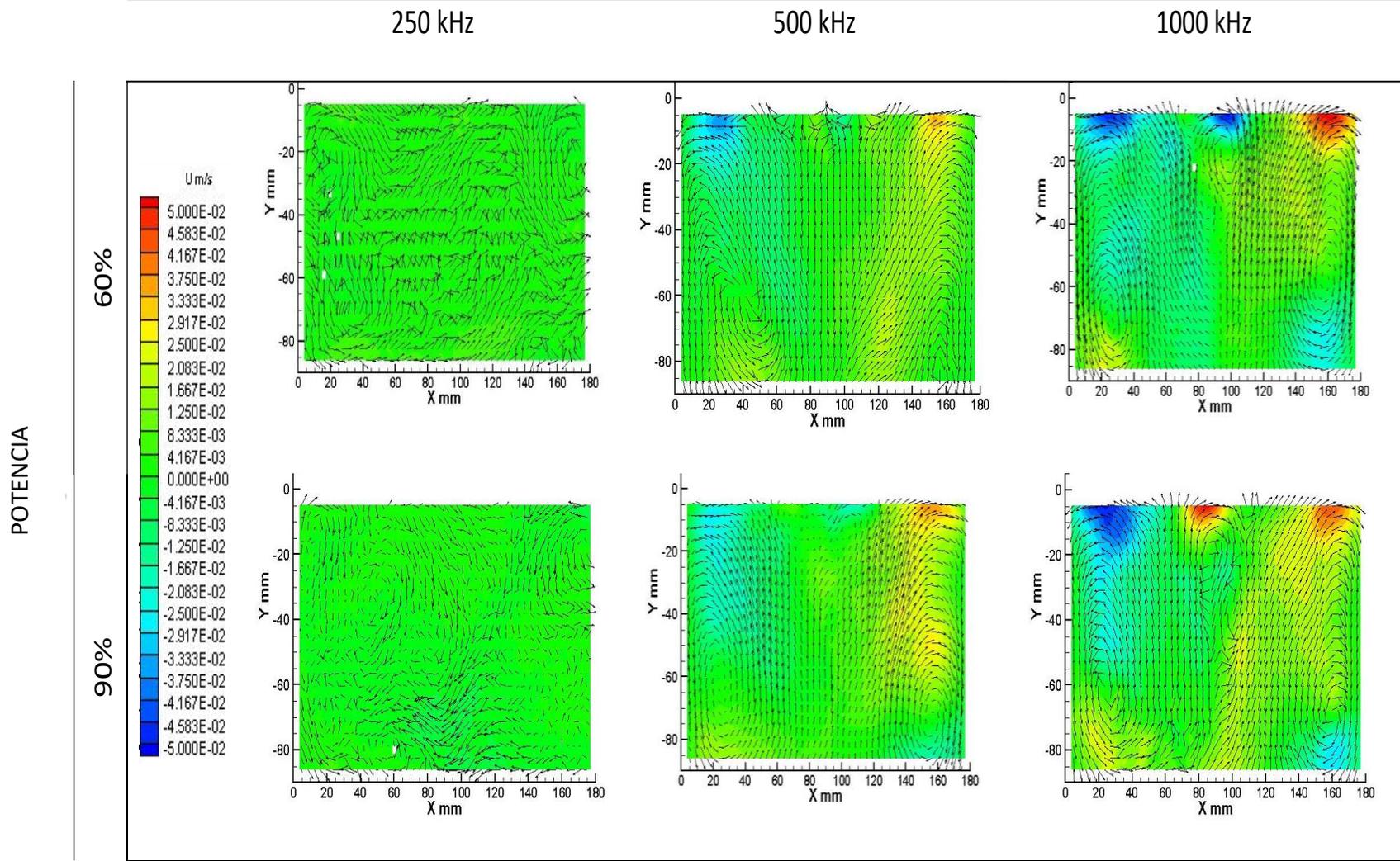


Figura 4.10. Contornos de velocidad radial para frecuencias ultrasónicas de 250 kHz, 500 kHz, 1000 kHz y potencias P60% y P90%.

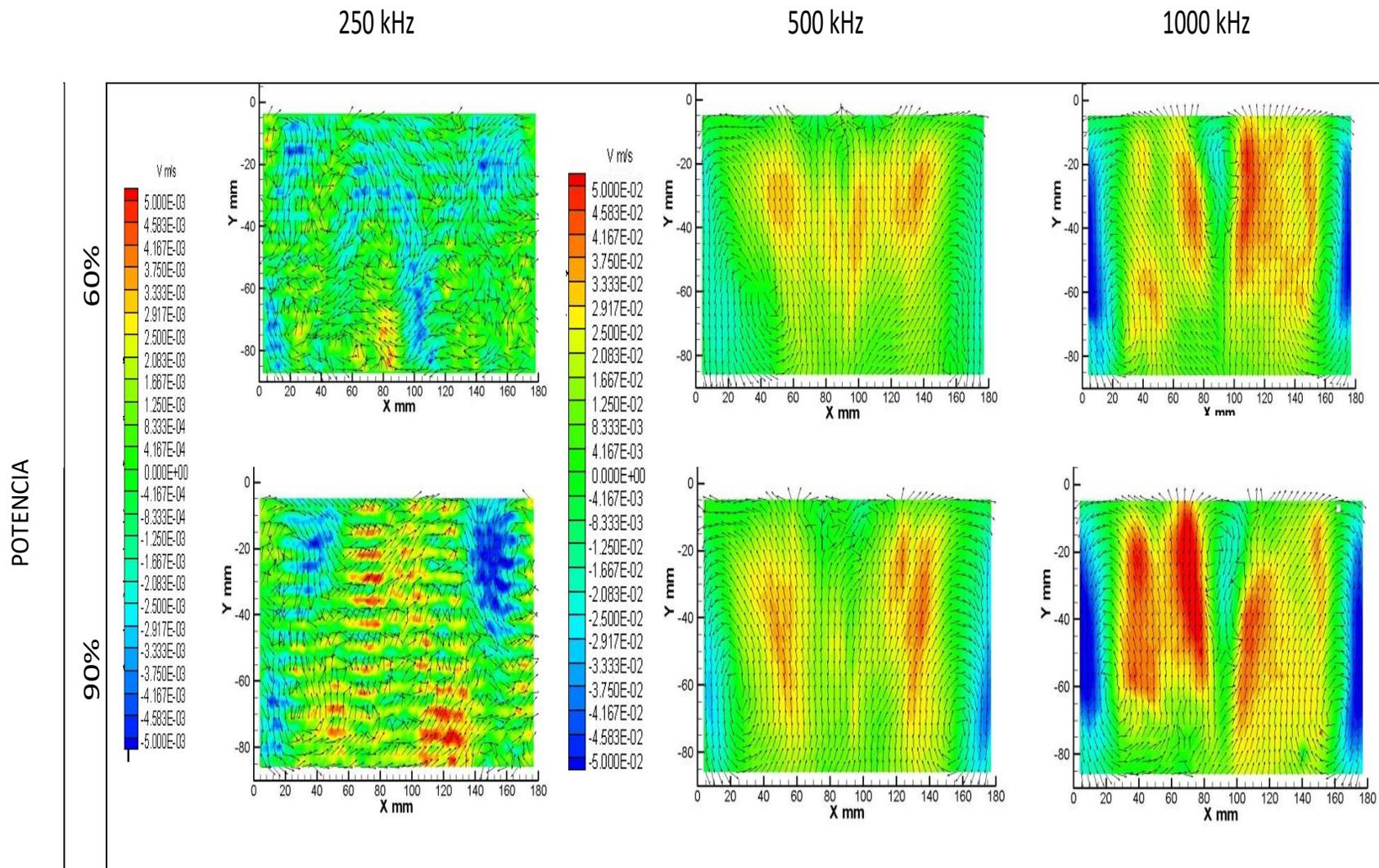


Figura 4.11. Contornos de velocidad axial para frecuencias ultrasónicas de 250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz y potencias P60% y P90%.

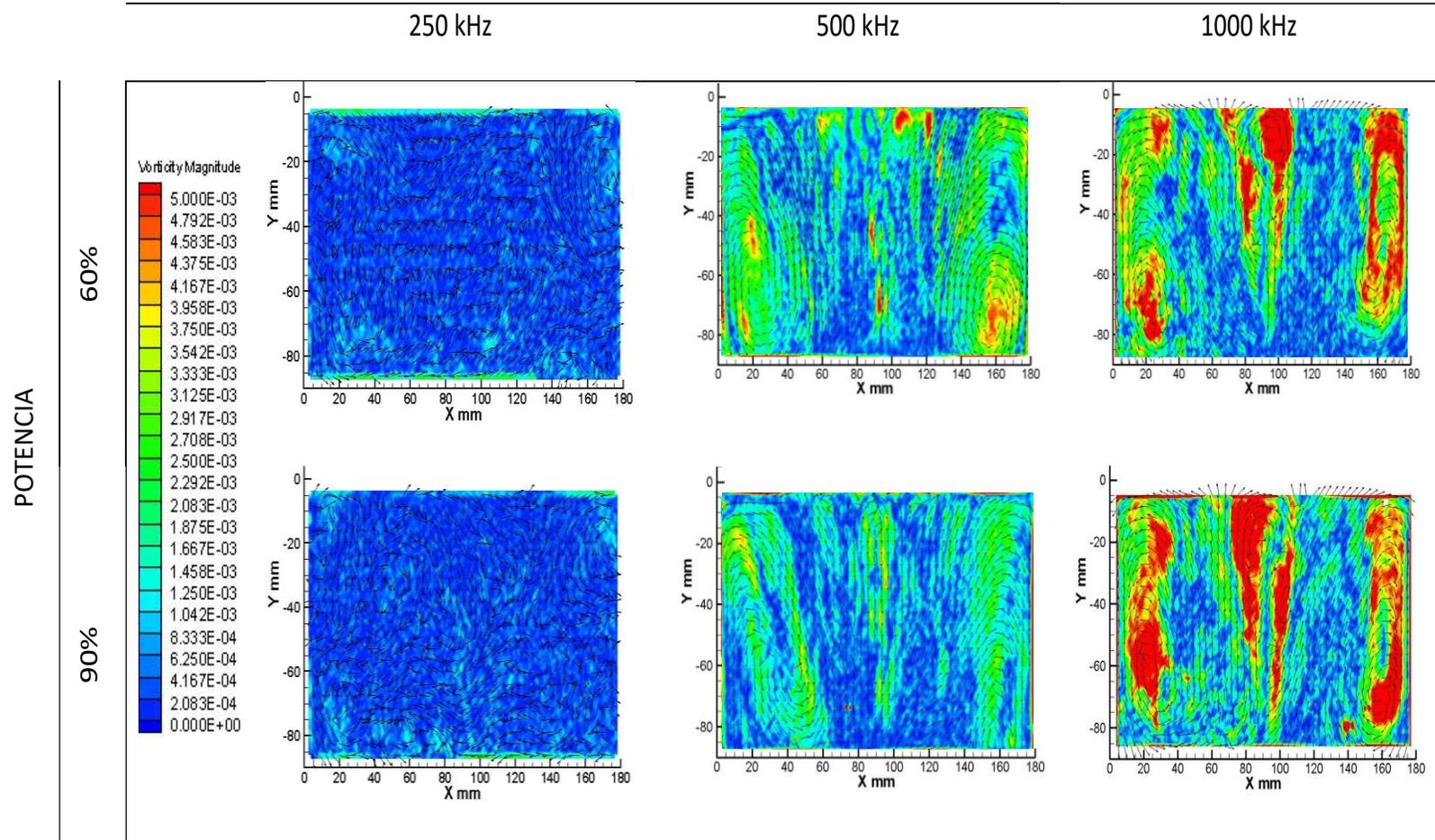


Figura 4.12. Contornos de magnitud de vorticidad para frecuencias ultrasónicas de 250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz y potencias P60% y P90%.

4.4 Evaluación del desplazamiento máximo del piezoeléctrico (A_0)

En la Figura 4.13 se muestran los resultados de la evaluación del desplazamiento máximo del piezoeléctrico (A_0) que se obtuvieron con base en los resultados de las mediciones de PIV para los diferentes reactores sonoquímicos empleados en este trabajo. Se observó que a la frecuencia de 250 kHz se obtuvo el menor desplazamiento de los piezoeléctricos respecto a los reactores de 500 kHz y 1000 kHz, esto se debe a que en este sonoreactor se obtuvo la menor potencia ultrasónica (P_{US}). Por otro lado, a potencias ultrasónicas similares, presentadas en el sonoreactor de 500 kHz y 1000 kHz (Tabla 4.6) se observó que el desplazamiento es menor a mayor frecuencia. En la Figura 4.13 se muestra también la frecuencia de 1700 kHz reportada en otros trabajos [94], cuyo desplazamiento máximo del piezoeléctrico sigue la misma tendencia descrita, es decir, el desplazamiento es menor a mayor frecuencia.

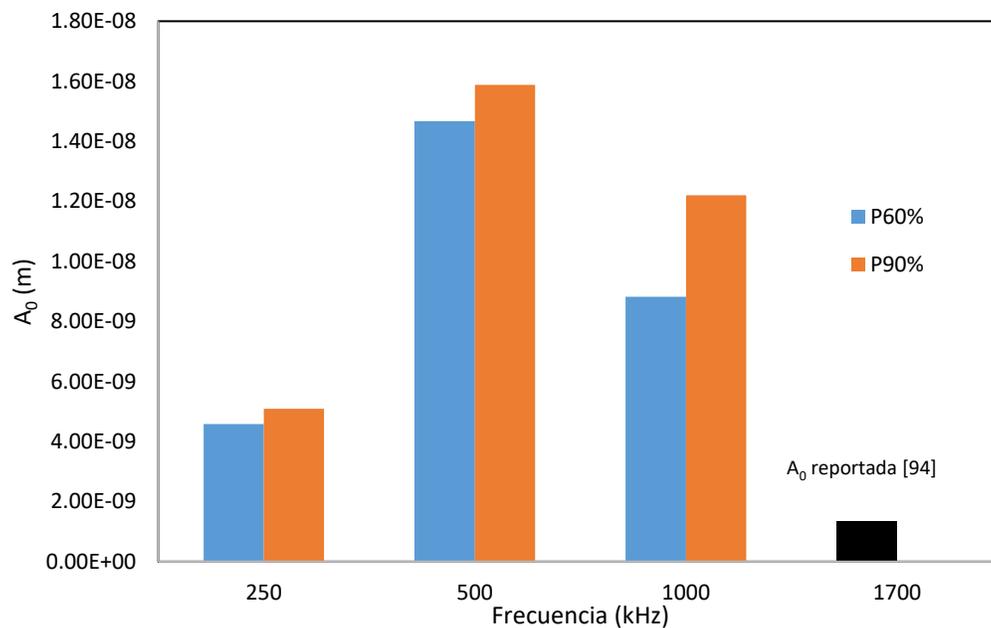


Figura 4.13. Desplazamiento máximo del piezoeléctrico a frecuencias de 250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz y a P60% y P90%.

4.5 Flujo axial

En la Fig. 4.14, se muestra el flujo axial ($Q_{ax(z)}$) a diferentes alturas de agua en los reactores. Como puede observarse, el menor $Q_{ax(z)}$ fue obtenido en el sonoreactor de 250 kHz, el cual es el que presenta, a su vez, las velocidades axiales más bajas (Fig. 4.11).

Los resultados muestran que los ($Q_{ax(z)}$) más altos, se producen a mayores frecuencias. En este caso, el mayor flujo axial se produce a 1000 kHz y a potencia de 90 % y es mayor alrededor de 55 % que el obtenido a 500 kHz y potencia de 90 %.

Esto puede ser explicado debido a que a esta frecuencia, los valores de velocidad son mayores que las velocidades a las otras frecuencias, como se muestra en la Fig. 4.11. En el caso del reactor de 500 kHz se presentan dos valores máximos de $Q_{ax(z)}$ a $z/H = 0.6$ para P60% y $z/H = 0.7$ y P90%. Por otra parte, en el caso de 1000 kHz el perfil es más plano que a 500 kHz. En este caso los valores máximos de $Q_{ax(z)}$ se presentan a z/H de 0.4 a 0.8.

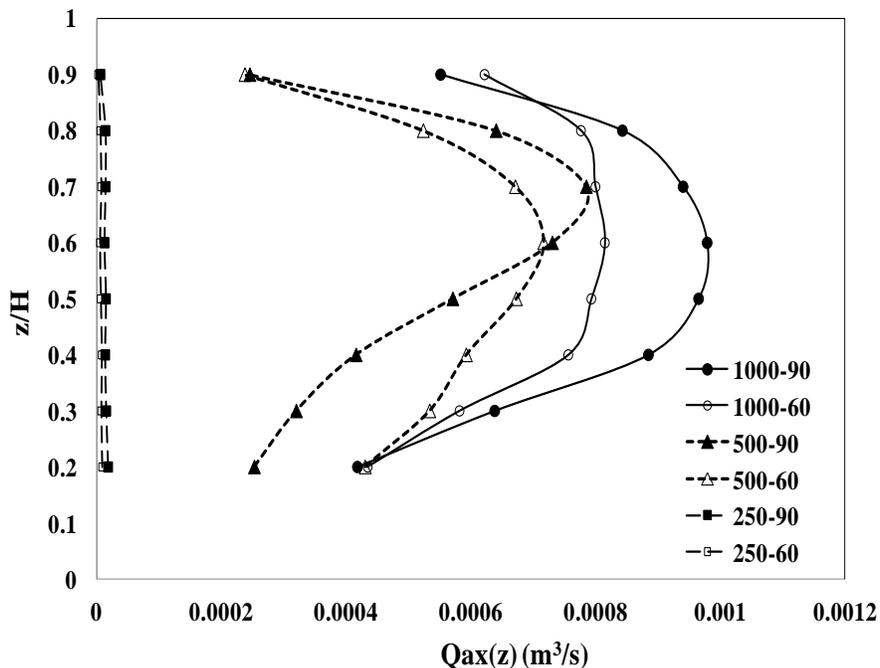


Figura 4.14. Flujo axial ($Q_{ax(z)}$) a diferentes alturas en el sonoreactor a frecuencias ultrasónicas de 250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz y porcentajes de potencia de 60 % y 90 %.

En el caso de los tanques agitados con impulsor [55] el flujo axial promedio es normalizado por ND_i^3 , donde N es el número de revoluciones por segundo del impulsor, y D_i es el diámetro del impulsor. En este caso el flujo axial promedio fue normalizado mediante la frecuencia (f) y el desplazamiento máximo del piezoeléctrico (A_0) con fA_0^3 , el cual se multiplicó por el número de piezoeléctricos en el sonoreactor (n) como se muestra en la ecuación 4.1, para obtener el número de flujo axial ($N_{Qax(z)}$).

$$N_{Qax(z)} = \frac{Q_{ax(z)}}{nfA_0^3} \quad (4.1)$$

Como se puede observar en la Figura 4.15, se obtuvieron los números de circulación axial solamente para 500 kHz y 1000 kHz, debido a que tienen similares relaciones PV, para los dos porcentajes de potencia utilizados. Como se observa, los mayores valores de $N_{Qax(z)}$ se obtienen a 1000 kHz, debido a las mayores velocidades que se alcanzan en este sonoreactor. Sin embargo se puede ver que los $N_{Qax(z)}$ son mayores a P60, es decir, con una menor potencia, en proporción, se genera mayor flujo axial. En el caso del de 500 kHz, debido a que se generan $Q_{ax(z)}$ menores que en el caso de 1000 kHz, las $N_{Qax(z)}$ que se obtienen son menores y de la misma manera que en el caso de 1000 kHz, se observa que a menor potencia, en proporción, se genera mayor flujo axial, es decir los $N_{Qax(z)}$, a 500 kHz y P60% son mayores que a P90%.

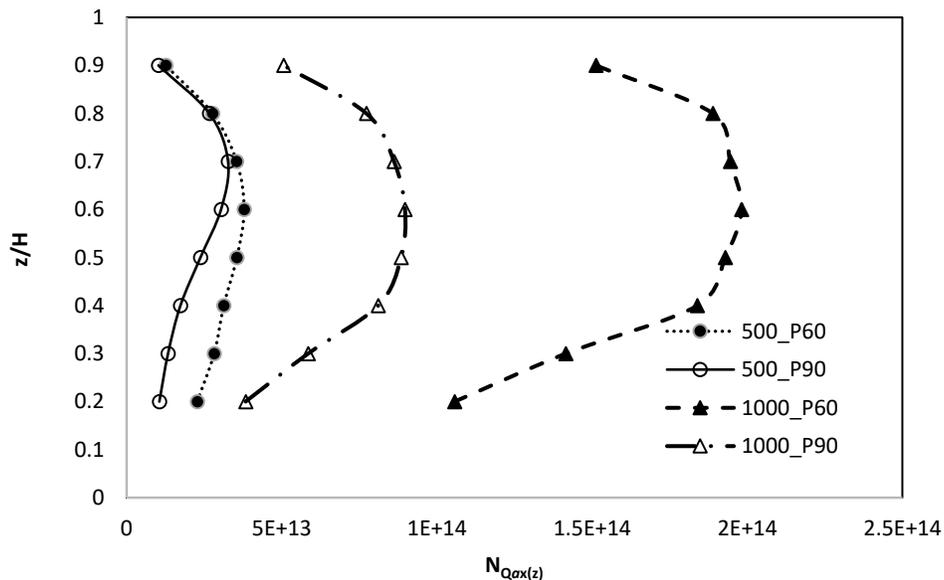


Figura 4.15. Número de flujo axial ($N_{Qax(z)}$) a diferentes alturas en el sonoreactor a frecuencias de 250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz y potencias ultrasónicas de 60 % y 90%.

4.6 Tiempo de circulación axial promedio (t_{ax}) y tiempo de mezclado (t_{95})

Las bajas velocidades alcanzadas a 250 kHz causan que el tiempo de circulación axial promedio (t_{ax}) y el tiempo de mezclado (t_{95}) sean los más grandes de todos como se muestra en la Tabla 4.5. El t_{ax} se definió y evaluó con la ecuación 2.10, siendo obtenido mediante la razón de V que es el volumen del sonoreactor y $Q_{(axz)}$, flujo axial promedio [55].

Los tiempos más bajos se obtuvieron a 1000 kHz con el sonoreactor operando a ambos valores de potencia. No hay resultados experimentales relacionados a estos parámetros en sonoreactores industriales, pero en otros trabajos basados en simulación se reportó un tiempo de circulación axial promedio de 1.32 s con potencia de 400 W, mientras que 4.85 s a 300 W para un sonoreactor operado a 1.7 MHz [68].

Tabla 4.5. Tiempo de circulación axial promedio (t_{ax}) y tiempo de mezclado (t_{95}) para los tres sonoreactores a las tres frecuencias estudiadas y los % de potencia empleados.

Frec. (kHz)	% P	t_{ax} (s)	t_{95} (s)	$(t_{95}) / (t_{ax})$
250	60	388.91	435	1.12
	90	122.48	214	1.75
500	60	8.56	71	8.28
	90	7.76	65	8.38
1000	60	6.09	25	4.11
	90	5.46	18	3.30

Como se presenta en la Tabla 4.5, la relación $(t_{95}) / (t_{ax})$ significa que para la frecuencia de 1000 kHz, una partícula del fluido sigue un lazo de circulación de entre tres a cuatro veces, dependiendo del %P. Mientras tanto, para el caso de 500 kHz, el fluido pasa a través del lazo de circulación ocho veces. Esto puede ser explicado por las velocidades y vorticidades más altas alcanzadas a 1000 kHz. En el caso del reactor de 250 kHz, debido a las bajas velocidades, el fluido da alrededor de una a dos lazos de circulación para alcanzar la homogeneidad, esto es debido a que la convección no es lo más importante durante el mezclado, ya que la difusión juega un rol importante. No hay resultados

reportados de la relación $(t_{95})/(t_{ax})$ en sonoreactores, pero en tanques agitados con impulsores esta relación va de 2 a 4, dependiendo de la geometría de los impulsores [99].

4.7 Evaluación de disipación de energía (ϵ) y energía cinética turbulenta (κ)

Se estimaron la ϵ (Fig. 4.16) y la κ (Fig. 4.17) en los diferentes sonoreactores a las dos potencias, resolviendo las ecuaciones 3.6 y 3.8. La figura 4.16 muestra que se disipa más energía a mayor frecuencia y mayor potencia. Se observa que la disipación se encuentra principalmente en las zonas donde se encuentran los piezoeléctricos (Fig. 3.1). Para el caso de los sonoreactores de 250 kHz y 500 kHz, son cuatro zonas que corresponden a los cuatro piezoeléctricos, mientras que en el caso del sonoreactor de 1000 kHz hay 2 grandes zonas ya que en este caso hay 2 piezoeléctricos en el plano de medición (Fig. 4.16).

Para el caso de la energía cinética turbulenta, Fig. 4.17, también se observa que aumenta a mayor frecuencia y mayor potencia. De igual manera que en el caso de ϵ , aparecen cuatro zonas de alta κ para los sonoreactores de 250 kHz y 500 kHz, sin embargo para el caso del sonoreactor de 1000 kHz, se observan 2 grandes zonas con alta κ , sobre los piezoeléctricos, sin embargo los mayores valores se encuentran en la zona ventral superior, donde también se presentan altas ϵ (Fig. 4.16).

EPSILON

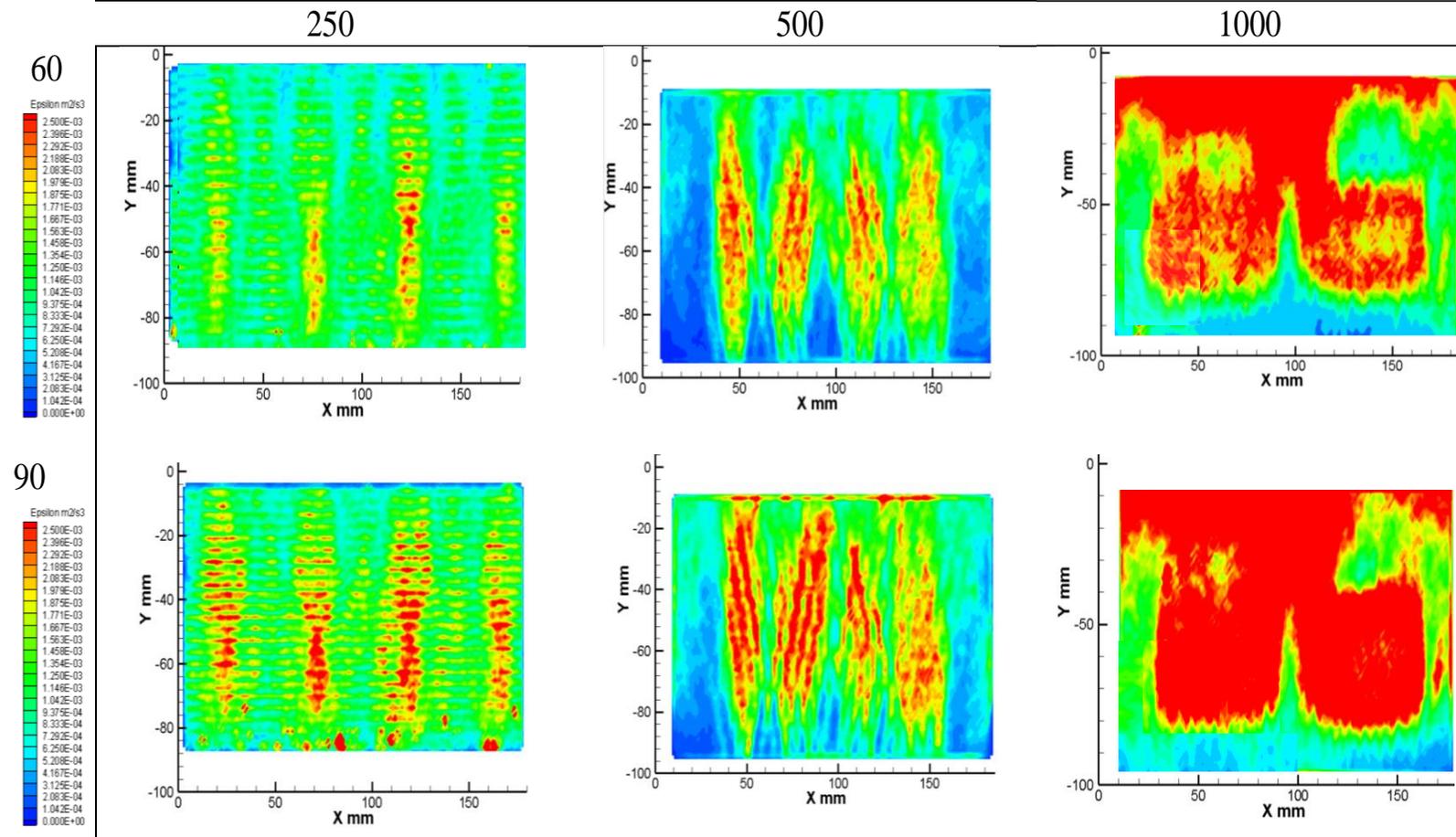


Figura 4.16. Tasa de disipación de energía (ϵ) a diferentes frecuencias y potencias en los sonoreactores.

TKE

250

500

1000

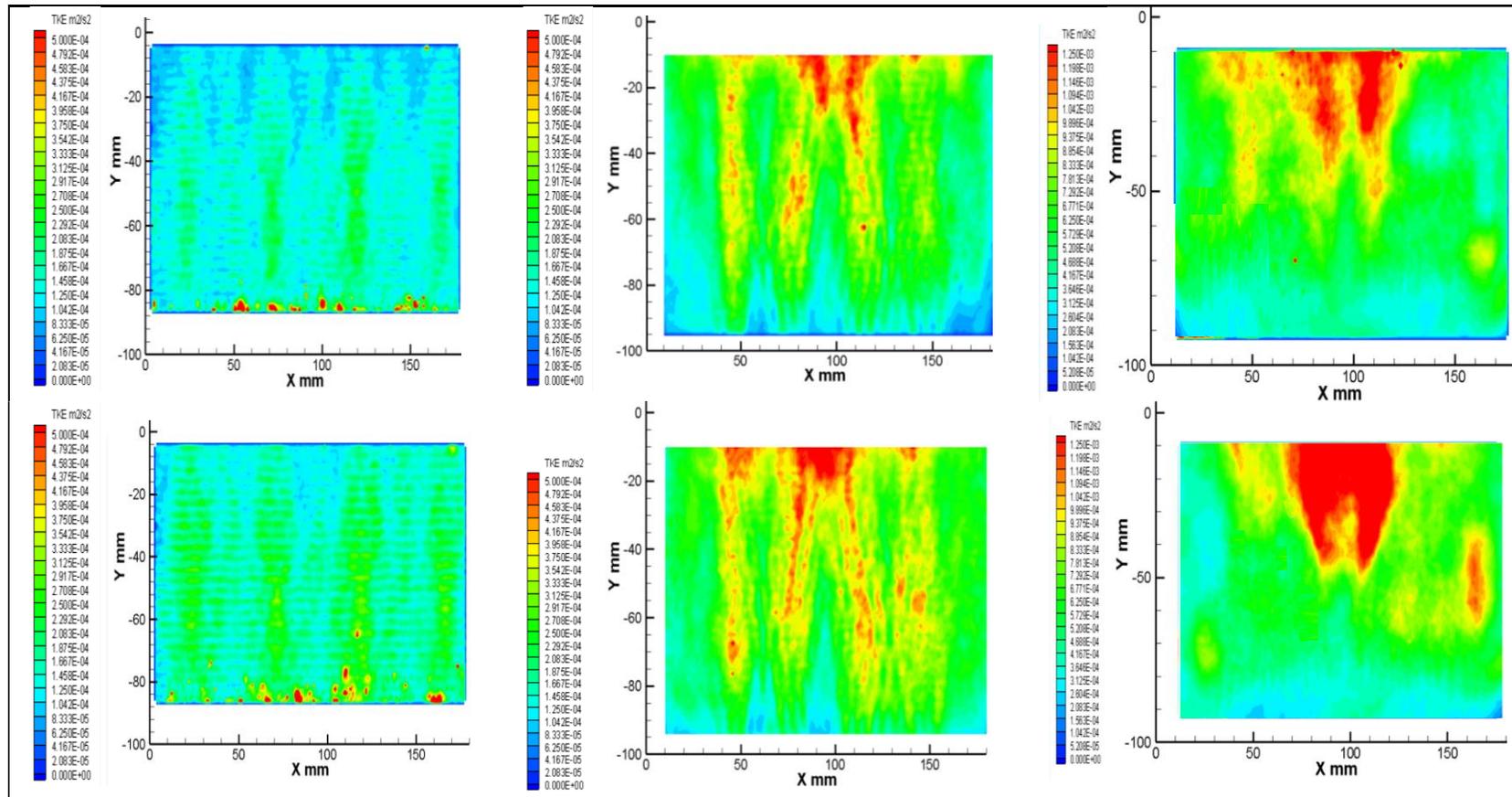


Figura 4.17. Energía cinética turbulenta (k) a diferentes frecuencias y potencias en los sonorreactors.

4.8 Eficiencia energética

Se realizaron las medidas calorimétricas para obtener la potencia ultrasónica (P_{us}). La eficiencia energética (η_e) se calculó utilizando la ecuación 4.2, donde (P_e) es la potencia eléctrica entregada en el transductor [1].

$$\eta_e = \frac{P_{us}}{P_e} \quad (4.2)$$

Los resultados se muestran en la Tabla 4.6. Como puede observarse, la razón de temperatura ($\frac{dT}{dt}$) incrementa a mayor frecuencia y potencia. Esto puede explicarse debido a que a mayores frecuencias la atenuación de las ondas sonoras es mayor, disipando más energía (ϵ) que a frecuencias más bajas [18]. La (ϵ) se obtuvo con los valores de (P_{us}) y la masa del agua. Como puede observarse, a 250 kHz la potencia ultrasónica y ϵ son las más bajas, por consiguiente, se obtiene la eficiencia energética (η_e) más baja, explicando por qué a esta frecuencia se alcanzan las velocidades más bajas. Más elevadas y similares eficiencias energéticas alrededor de 0.7 se alcanzaron a 500 kHz y 1000 kHz, en contraste con 250 kHz donde la velocidad y vorticidad son más bajas. Los resultados están acordes con las mediciones experimentales de ϵ (Fig. 4.16), donde se demostró que es mayor a mayor frecuencia y potencia.

Tabla 4.6. Potencia (P_e y P_{us}), $\frac{dT}{dt}$, η_e , ϵ y PV a las tres diferentes frecuencias y porcentajes de potencia (%P).

Frecuencia (kHz)	$\frac{dT}{dt}$ (°C/s)	%P	P_e (J/s)	P_{us} (J/s)	η_e	ϵ (W/kg)	PV (kW/m ³)
250	0.0063	60	300	131.40	0.44	30.32	30.92
	0.0094	90	450	196.06	0.44	46.28	46.13
500	0.0121	60	300	214.52	0.72	50.56	50.47
	0.0178	90	450	315.57	0.70	74.38	74.25
1000	0.0123	60	300	218.06	0.73	51.40	51.31
	0.0182	90	450	322.66	0.72	76.05	75.92

En otros estudios, donde se utilizó un transductor de 500 kHz y altura de agua de 10 cm en el sonoreactor, se reportó que $\frac{dT}{dt} = 0.015 \text{ } ^\circ\text{C/s}$ y $\eta_e = 74 \%$ [1], los cuales son similares a los datos obtenidos en este trabajo. Los resultados muestran que ϵ es mayor a frecuencias más elevadas e incrementa a mayores potencias ultrasónicas, lo cual concuerda con otros estudios [18].

Otro parámetro evaluado fue la potencia específica de consumo (PV). Como se puede observar (Tabla 4.6) el tiempo de mezclado decrece cuando PV incrementa, lo cual concuerda con lo reportado por otros investigadores [34]. Al comparar la relación PV del reactor de 250 kHz al porcentaje de potencia de 90% (46.13kW/m^3), con las de 500 kHz y 1000 kHz (≈ 50.9 y 46.13kW/m^3) a $\%P=60$, se observa que son similares, (diferencia de aproximadamente 9%), se observa que la frecuencia tiene un efecto muy importante en el comportamiento del fluido. Esto se puede ver en τ_{95} (Tabla 4.5), donde se observa que al aumentar la frecuencia al doble, el tiempo de mezclado (τ_{95}) disminuye hasta en un 65%.

Hay estudios que mencionan las ventajas del ultrasonido sobre los impulsores en el mezclado [68], [98], donde desafortunadamente no se establece la relación PV para su comparación. También en otros trabajos [68] no se reportó la potencia ultrasónica del dispositivo simulado y no está claro si los resultados discutidos son promedio o instantáneos, siendo incluso que el tiempo máximo simulado tampoco se reportó. Por otra parte, otro estudio reporta que la transferencia de masa del ultrasonido incrementa cuando la agitación mecánica es adicionada [51], pero tampoco reportan la relación PV. Para comparar con el proceso industrial convencional, por ejemplo la relación PV en tratamiento de aguas residuales en la escala industrial, el tanque de aereación para tratamiento convencional aerobio de aguas residuales, los requerimientos de mezclado oscilan de 0.465 a 0.931 kW/m^3 [102] lo cual es más bajo que lo encontrado en esta investigación (Tabla 4.6).

Sin embargo, a pesar de que la relación PV es mayor con el ultrasonido, el tiempo de tratamiento para remover contaminantes en aguas residuales puede ser en minutos, mientras que el tiempo de tratamiento para métodos convencionales toma horas. El tiempo de tratamiento más corto con ultrasonido puede compensar la mayor PV reduciendo la energía de consumo y el volumen del reactor. Sin embargo, es necesario efectuar más estudios con diferentes frecuencias, valores de potencia, geometría de sonoreactor, régimen de operación tal como continuo y discontinuo, para encontrar a qué condiciones la propuesta de uso de reactores ultrasónicos es más adecuada que los métodos convencionales.

4.9 Producción de peróxido de hidrógeno

Se evaluó la producción de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) en los sonoreactores a diferentes valores de potencia y frecuencia. Los resultados se presentan en la Fig. 4.18. Como se puede observar, en todos los casos a mayor P_{US} , la concentración de peróxido de hidrógeno incrementa, lo cual concuerda con lo reportado en otros estudios [66]. A 250 kHz el rendimiento de H_2O_2 es el más bajo, y puede explicarse debido a que la P_{US} a 250 kHz es también la más baja (Tabla 4.6), como se ha mencionado anteriormente. Por otra parte, en los sonoreactores de 500 kHz y 1000 kHz, se observa que las relaciones PV, son similares (Tabla 4.6), es decir aproximadamente 50 kW/m^3 en promedio para las P60%, en ambas frecuencias y aproximadamente 75 kW/m^3 , en promedio para P90%, en ambas frecuencias, por lo que solamente se comparó entre estas dos frecuencias, puesto que en el caso de la frecuencia de 250 kHz, las relaciones PV fueron menores. Con base en lo anterior, se observa que para sonoreactores operados a 500 kHz y 1000 kHz, las mayores concentraciones de H_2O_2 se obtuvieron a 500 kHz, y se explica porque a menor frecuencia se forman burbujas de cavitación de mayor tamaño, por lo que se forma mayor cantidad de peróxido de hidrógeno [66]. Por otra parte, para 500 kHz, no se observa un efecto importante en la producción de peróxido al aumentar la P_{US} , a diferencia del sonoreactor de 1000 kHz, lo que se podría explicar porque al aumentar la potencia, en este último sonoreactor, la velocidad máxima y promedio y el desplazamiento máximo del piezoeléctrico (A_0) tienen un mayor aumento de P60% a P90%, aproximadamente del 40%, que en el caso del sonoreactor de 500 kHz, donde aumentan aproximadamente 25% (Figura 4.9). Adicionalmente se podría explicar el mayor tamaño de burbuja, en el caso de 500 kHz debido al mayor desplazamiento del piezoeléctrico (Figura 4.13).

La mayor producción de peróxido en el sonoreactor de 500 kHz, puede explicar por qué en algunos estudios efectuados en esta clase de sonoreactores [5], se obtuvo mayor eficiencia de degradación de colorantes a 500 kHz que en 250 kHz y en 1000 kHz. Por último, los resultados mostraron que el desempeño del reactor depende de la frecuencia y la relación PV (P_{US} aplicada al volumen de líquido) que afectan la cavitación (producción de peróxido y la degradación de contaminantes) y la corriente acústica, la cual es mayor a mayores frecuencias, mejorando el mezclado.

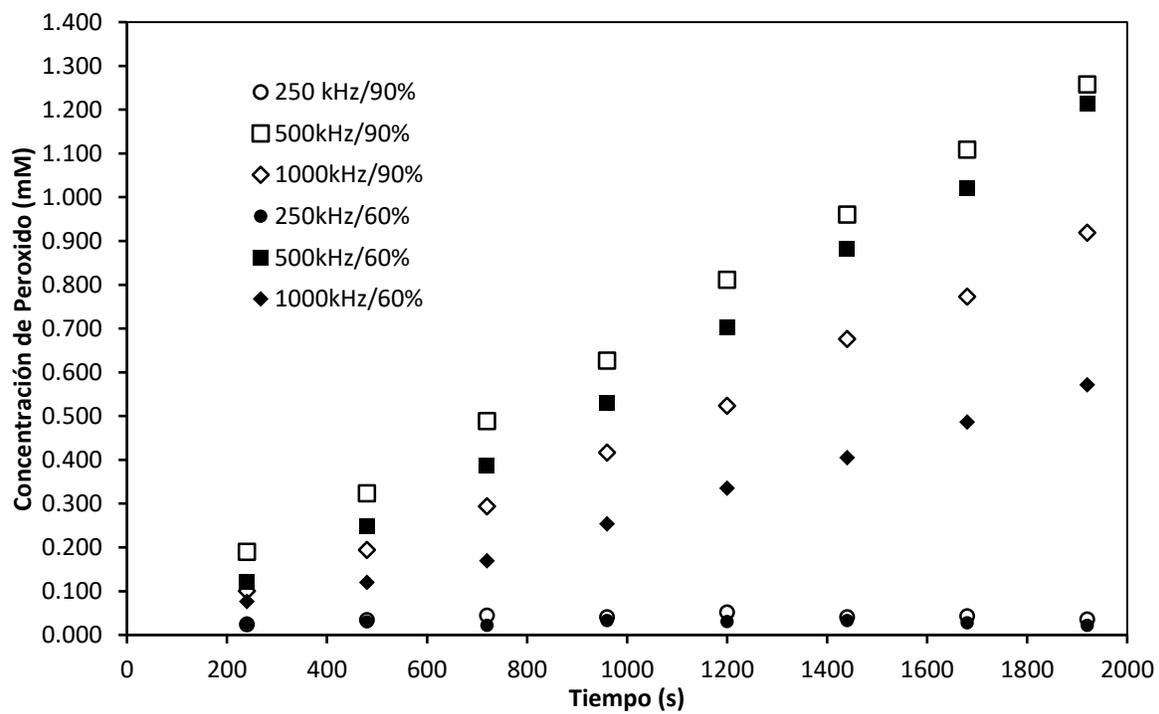


Figura 4.18. Producción de peróxido de hidrógeno a diferentes potencias y frecuencias

CONCLUSIONES

La simulación para el reactor de 500 kHz con altura de líquido de 5 cm mediante DFC con modelo LES mostró que es posible captar las estructuras que se forman en el fluido (vórtices) similares a las que se detectaron experimentalmente mediante CFD. A partir de la evaluación experimental del desempeño de tres reactores sonoquímicos operados a diferentes frecuencias (250 kHz, 500 kHz y 1000 kHz) y potencias (60% y 90% de la potencia nominal máxima), mediante velocimetría de imágenes de partícula (PIV), se midieron los campos de velocidad, que se utilizaron para obtener el número de flujo axial y tiempo de circulación. Se encontró que en todos los casos, la velocidad axial es predominante sobre la velocidad radial. Así mismo, la potencia ultrasónica es mayor, para los casos de 500 kHz y 1000 kHz, que en el caso del sonoreactor operado a 250 kHz. La potencia ultrasónica transmitida al líquido incrementa la velocidad, vorticidad, disipación de energía y la energía cinética total, lo que repercutirá en la reducción del tiempo de mezclado y tiempos de circulación. Así mismo, la frecuencia muestra un efecto muy importante, se observó que el tiempo de mezclado se pudo reducir hasta un 65% al duplicar la frecuencia. Lo anterior se debe a la corriente acústica, la cual incrementa con la potencia ultrasónica y frecuencia, y es además, el principal mecanismo que afecta el desempeño hidrodinámico del reactor. El mayor valor de flujo axial promedio ($Q_{ax(z)}$) se obtuvo a 1000 kHz y 90% de potencia (322.66 W), sin embargo la circulación es más eficiente es a 1000 kHz y 60% de potencia (218.06 W) debido a que los valores de $N_{Q_{ax(z)}}$ son los mayores a estas condiciones. Los tiempos de mezclado (t_{95}) y de circulación (t_{ax}) a 1000 kHz fueron los más cortos de todos los obtenidos a diferentes frecuencias y potencias, lo cual se debe a la mayor velocidad alcanzada, por la potencia ultrasónica y la mayor frecuencia. Los valores más elevados de potencia ultrasónica y η_e se obtuvieron a las frecuencias más altas (500 kHz y 1000 kHz), lo que explica por qué las velocidades en 250 kHz fueron menores. Como se mostró, la velocidad de producción de peróxido se afecta por la frecuencia y la potencia, lo que se debe a que a mayores frecuencias se producen burbujas de cavitación más pequeñas que producen menor cantidad de peróxido, por esta razón, a 500 kHz es mayor la producción de peróxido que en 1000 kHz. Las experimentaciones aquí descritas, presentan un enfoque diferente a lo reportado, aportando nuevo conocimiento relacionado a los reactores sonoquímicos, puesto que hasta antes de esta investigación no se tenían datos experimentales de parámetros tales como: la potencia disipada y el tiempo de mezclado en este tipo de reactores, el número de circulación, entre otros parámetros. El presente trabajo presenta un aporte en el campo de este tipo de reactores que conducirá a la optimización y escalamiento para su aplicación a nivel industrial.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] M. Toma, S. Fukotomi, Y. Asakura y S. Koda, «A calorimetric study of energy conversion efficiency of a sonochemical reactor at 500 kHz for organic solvents,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 18, pp. 197-208, 2011.
- [2] F. A. Everest y K. C. Pohlman, *Master Handbook of Acoustics*, Nueva York: McGraw-Hill, 2009.
- [3] J. D. Cheeke, *Fundamentals and Applications of Ultrasonic Waves*, Estados Unidos de América: CRC Press, 2002.
- [4] G. M. Ballou, *Handbook for sound engineers*, Cuarta ed., Estados Unidos de América: Focal Press/Elsevier, 2008.
- [5] M. May-Lozano, V. Mendoza-Escamilla, E. Rojas-García, A. López-Medina, G. Rivadeneyra-Romero y A. Martínez-Delgadillo, «Sonophotocatalytic degradation of Orange II dye using low cost photocatalyst,» *Journal of Cleaner Production*, nº 148, pp. 836-834, 2017.
- [6] Z. L. Wu, J. Lifka y B. Ondrushka, «Comparison of Energy Efficiency of Various Ultrasonic Devices in Aquasonochemical Reactions,» *Chemical Engineering Technology*, vol. 29, nº 5, pp. 610-615, 2006.
- [7] H. Duckhouse, T. J. Mason, S. S. Phull y J. P. Lorimer, «The effect of sonication on microbial disinfection using hypochlorite,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 11, nº 3-4, pp. 173-176, 2004.
- [8] M. Legay, B. Simony, P. Boldo, N. Gondrexon, S. Le Person y A. Bontemps, «Improvement of heat transfer by means of ultrasound: Application to a double-tube heat exchanger,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 19, pp. 1194-1200, 2012.
- [9] S. Gantert y D. Möller, «Ultrasonic Desorption of CO₂ - A New Technology to Save Energy and Prevent Solvent Degradation,» *Chemical Engineering and Technology*, vol. 35, nº 3, pp. 576-578, 2012.
- [10] A. D. Farmer, A. F. Collings y G. J. Jameson, «The application of power ultrasound to the surface cleaning of silica and heavy mineral sands,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 7, nº 4, pp. 243-247, 2000.
- [11] K. Seo, S. Suzuki, T. Kinoshita y I. Hirasawa, «Effect of Ultrasonic Irradiation on the Crystallization of Sodium Acetate Trihydrate Utilized as Heat Storage Material,» *Chemical Engineering and Technology*, vol. 33, nº 6, pp. 1013-1016, 2012.
- [12] R. Ambrus, N. N. Amirzadi, P. Sipos y P. Szabo-Revesz, «Effect of sonocrystallization on the habit and structure of gemfibrozil crystals,» *Chemical Engineering and Technology*, vol. 33, nº 5, p. 827-832, 2010.

- [13] L. Nastac, «Mathematical Modeling of the Solidification Structure Evolution in the Presence of Ultrasonic Stirring,» *Metalurgical and Materials Transactions B*, vol. 42, nº 6, pp. 1297-1305, 2011.
- [14] O. Levenspiel, *Ingeniería de las Reacciones Químicas*, España: Reverte, 2012.
- [15] H. Monnier, A. M. Wilhelm y H. Delmas, «Influence of ultrasound on mixing on the molecular scale for water and viscous liquids,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 6, nº 1-2, pp. 67-74, 1999.
- [16] C. D. Wilcox, *Turbulence modelling for CFD*, San Diego, California: Birmingham Press, 2006.
- [17] E. Paul, V. A. Atiemo-Obeng y S. M. Kresta, *Handbook of industrial mixing science and practice*, New Jersey: Willey-Interscience, 2004.
- [18] J. Jordens, B. Bamps, B. Gielen, L. Braeken y T. V. Gerven, «The effects of ultrasound on micromixing,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 32, pp. 68-78, 2016.
- [19] J. Lighthill, «Acoustic streaming,» *Journal of sound and vibration*, vol. 32, pp. 391-418, 1978.
- [20] J. Eisener, A. Lippert, T. Nowak, C. Cairós, F. Reuter y R. Mettin, «Characterization of acoustic streaming beyond 100 MHz,» *Physics Procedia*, vol. 70, pp. 151-154, 2015.
- [21] B. Sajjadi, A. A. Raman y S. Ibrahim, «A comparative fluid flow characterisation in a low frequency/high power sonoreactor and mechanical stirred vessel,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 27, pp. 359-373, 2015.
- [22] O. Louisnard, «A viable method to predict acoustic streaming in presence of cavitation,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 35, pp. 518-524, 2017.
- [23] K. S. Suslick, «Sonochemistry,» *Science*, vol. 249, pp. 1439-1445, 1990.
- [24] M. Rahimi, S. Safari, M. Faryadi y N. Moradi, «Experimental investigation on proper use of dual high-low frequency ultrasound waves - advantages and disadvantage,» *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 78, pp. 17-26, 2014.
- [25] F. Parvizian, M. Rahimi y N. Azimi, «Macro and micromixing studies on a high frequency continuous tubular sonoreactor,» *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, Vols. %1 de %257-58, pp. 8-15, 2012.
- [26] D. Krefting, R. Mettin y W. Lauterborn, «High-speed observation of acoustic cavitation erosion in multibubble systems,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 11, pp. 119-123, 2004.
- [27] V. S. Sutkar y P. R. Gogate, «Design aspects of sonochemical reactors: Techniques for understanding cavitation activity distribution and effect of operating parameters,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 155, pp. 26-36, 2009.

- [28] L. D'Agostino y C. E. Brennen, «On the acoustical dynamics of bubble cloud,» *American Society of Mechanical Engineers División 2*, pp. 72-75, 1983.
- [29] M. S. Goyat, S. Ray y P. K. Ghosh, «Innovative application of ultrasonic mixing to produce homogeneously mixed nanoparticulate-epoxy composite of improved physical properties,» *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 42, nº 10, pp. 1421-1431, 2011.
- [30] F. Faïd, F. Contamine, A. M. Wolhelm y H. Delmas, «Comparison of ultrasound effects in different reactors at 20 kHz,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 5, nº 3, pp. 119-124, 1998.
- [31] S. Asgharzadehahmadi, A. A. Raman, R. Parthasarathy y B. Sajjadi, «Sonochemical reactors: Review on features, advantages and limitations,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 63, pp. 302-314, 2016.
- [32] L. Csoka, S. N. Katekhaye y P. R. Gogate, «Comparison of cavitation activity in different configurations of sonochemical reactors using model reaction supported with theoretical simulations,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 178, nº 15, pp. 384-390, 2011.
- [33] V. L. Gole y P. R. Gogate, «A review on intensification of synthesis of biodiesel from sustainable feed stock using sonochemical reactors,» *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 53, pp. 1-9, 2012.
- [34] A. Kumar, T. Kumaresan, A. B. Pandit y J. B. Joshi, «Characterization of flow phenomena induced by ultrasonic horn,» *Chemical Engineering Science*, vol. 61, nº 22, pp. 7410-7420, 2006.
- [35] M. M. Chivate y A. B. Pandit, «Quantification of cavitation intensity in fluid bulk,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 2, nº 1, pp. S19-S25, 1995.
- [36] F. Priego-Capote y M. C. Luque de Castro, «Analytical uses of ultrasound I. Sample preparation,» *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, vol. 23, nº 9, pp. 644-653, 2004.
- [37] M. J. Bussemaker y D. Zhang, «A phenomenological investigation into the opposing effects of fluid flow on sonochemical activity at different frequency and power settings. 1. Overhead stirring,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 21, nº 1, pp. 436-445, 2014.
- [38] Y. Son, M. Lim, I.-B. Park y J. Khim, «Analysis of the Ultrasonic Cavitation Energy in a Pilot-Scale Sonoreactor,» *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 47, nº 5s, pp. 4119-4122, 2008.
- [39] A. Rehorek, M. Tauber y G. Gübitz, «Application of power ultrasound for azo dye degradation,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 11, pp. 177-182, 2004.
- [40] V. Grosjean, C. Julcour, O. Louisnard y L. Barthe, «Axial acoustic field along a solid-liquid fluidized bed under power ultrasound,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 56, pp. 274-283, 2019.

- [41] L. P. Vega-Garzón, I. N. Gomez-Miranda y G. A. Peñuela, «Benzophenone-3 ultrasound degradation in a multifrequency reactor: Response surface methodology approach,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 43, pp. 201-207, 2018.
- [42] J. J. O'Sullivan, C. J. Espinoza, O. Mihailova y F. Alberini, «Characterisation of flow behaviour and velocity induced by ultrasound using particle image velocimetry (PIV): Effect of fluid rheology, acoustic intensity and transducer tip size,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 48, pp. 218-230, 2018.
- [43] S. Merouani y O. Hamdaoui, «Computational and experimental sonochemistry,» *Process Engineering Journal*, vol. 1, pp. 10-18, 2017.
- [44] D. J. Pejin, L. V. Mojovic, J. D. Pejin, O. S. Grujic, S. L. Markov, S. B. Nikolic y M. N. Markovic, «Increase in bioethanol production yield from triticale by simultaneous saccharification and fermentation with application of ultrasound,» *Chemical Technology and Biotechnology*, vol. 87, nº 2, pp. 170-176, 2011.
- [45] Q. Wen-Yi, C. Wu-Dan, W. Meng y Y. Jing-Kun, «Effect of ultrasonic intensity on the conformational changes in citrus pectin under ultrasonic processing,» *Food Chemistry*, vol. 297, p. 125021, 2019.
- [46] P. R. Gogate, V. S. Sutkar y A. B. Pandit, «Sonochemical reactors: Important design and scale up considerations with a special emphasis on heterogeneous systems,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 166, nº 3, pp. 1066-1082, 2011.
- [47] N. P. Vichare, P. R. Gogate, V. Y. Dindore y A. B. Pandit, «Mixing time analysis of a sonochemical reactor,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 8, nº 1, pp. 23-33, 2001.
- [48] R. Treybal, Operaciones de transferencia de masa, Madrid: McGraw-Hill, 1988.
- [49] B. Sajjadi, S. Asgharzadehahmadi, P. Asaithambi, A. A. Raman y R. Parthasarathy, «Investigation of mass transfer intensification under power ultrasound irradiation using 3D computational simulation: A comparative analysis,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 43, pp. 504-518, 2017.
- [50] A. Kumar, P. R. Gogate, A. B. Pandit, H. Delmas y A. M. Wilhelm, «Gas-Liquid Mass Transfer Studies in Sonochemical Reactors,» *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 43, nº 8, pp. 1807-1896, 2004.
- [51] F. Laugier, C. Andriantsiferana, A. M. Wilhelm y H. Delmas, «Ultrasound in gas-liquid systems: Effects on solubility and mass transfer,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 15, nº 6, pp. 965-972, 2008.
- [52] I. González-Neria, A. Alonzo-García, S. A. Martínez-Delgadillo, V. X. Mendoza-Escamilla, J. A. Yáñez-Varela, P. G. Verdin y G. Rivadeneyra-Romero, «PIV and dynamic LES of the turbulent

stream and mixing induced by a V-grooved blade axial agitator,» *Chemical Engineering Journal*, vol. 374, pp. 1138-1152, 2019.

- [53] Q. Tang y J. Hu, «Diversity of acoustic streaming in a rectangular acoustofluidic field,» *Ultrasonics*, vol. 58, pp. 27-34, 2015.
- [54] N. Gondrexon, V. Renaudin, C. Petrier, M. Clement, P. Boldo, Y. Gonthier y A. Bernis, «Experimental study of the hydrodynamic behaviour of a high frequency ultrasonic reactor,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 5, nº 1, pp. 1-6, 1998.
- [55] M. Alliet-Gaubert, R. Sardeing, C. Xuereb, P. Hobbes, B. Letellier y P. Swaels, «CFD analysis of industrial multi-staged stirred vessels,» *Chemical Engineering and Processing*, vol. 45, pp. 415-427, 2006.
- [56] D. B. Holmes, R. M. Voncken y J. A. Dekker, «Fluid flow in turbine-stirred, baffled tanks—I: Circulation time,» *Chemical Engineering Science*, vol. 19, nº 3, pp. 201-208, 1964.
- [57] A. G. Chakinala, P. R. Gogate, A. E. Burgess y D. H. Bremner, «Intensification of hydroxyl radical production in sonochemical reactors,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 14, nº 5, pp. 509-514, 2007.
- [58] M. Ashokkumar, *Handbook of Ultrasonics and Sonochemistry*, Singapur: Springer, 2016.
- [59] L. Jih-Gaw y M. Ying-Shih, «Magnitude of effect of reaction parameters on 2-chlorophenol decomposition by ultrasonic process,» *Journal of Hazardous Materials*, vol. 66, nº 3, pp. 291-305, 1999.
- [60] K. C. Teo, Y. Xu y C. Yang, «Sonochemical degradation for toxic halogenated organic compounds,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 8, nº 3, pp. 241-246, 2001.
- [61] I. Arslan-Alaton, «A review of the effects of dye-assisting chemicals on advanced oxidation of reactive dyes in wastewater,» *Coloration Technology*, vol. 119, nº 6, pp. 345-353, 2013.
- [62] S. Ziembowicz, M. Kida y P. Koszelnik, «Sonochemical Formation of Hydrogen,» de *2nd International Electronic Conference on Water Sciences*, 2018.
- [63] C. Ozdemir, M. K. Oden, S. Sahinyaka y D. Guclu, «The sonochemical decolorisation of textile azo dye CI Reactive Orange 127,» *Coloration Technology*, vol. 127, nº 4, pp. 268-273, 2011.
- [64] J. Dewulf, H. Van Langenhove, A. De Visscher y S. Sabbe, «Ultrasonic degradation of trichloroethylene and chlorobenzene at micromolar concentrations: kinetics and modelling,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 8, nº 2, pp. 143-150, 2001.
- [65] A. Mehrdad y R. Hashemzadeh, «Ultrasonic degradation of Rhodamine B in the presence of hydrogen peroxide and some metal oxide,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 17, nº 1, pp. 168-172, 2010.

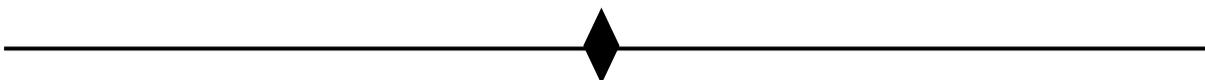
- [66] P. Kanthale, M. Ashokkumar y F. Grieser, «Sonoluminescence, sonochemistry (H₂O₂ yield) and bubble dynamics: Frequency and power effects,» *Ultrasonic Sonochemistry*, vol. 15, nº 2, pp. 143-150, 2008.
- [67] F. J. Trujillo y K. Knoerzer, «A computational modeling approach of the jet-like acoustic streaming and heat generation induced by low frequency high power ultrasonic horn reactors,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 18, nº 6, pp. 1263-1273, 2011.
- [68] F. Parvizian, M. Rahimi, M. Faryadi y A. A. Alsairafi, «Comparison between Mixing in Novel High Frequency Sonoreactor and Stirred Tank Reactor,» *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. 6, nº 2, pp. 295-306, 2012.
- [69] F. Parvizian, M. Rahimi, N. Azimi y A. A. Alsairafi, «CFD Modeling of Micromixing and Velocity Distribution in a 1.7-MHz Tubular Sonoreactor,» *Chemical Engineering Technology*, vol. 37, nº 1, pp. 113-122, 2013.
- [70] M. Dehbani, M. Rahimi, M. Abolhasani, A. Maghsoodi, P. G. Afshar, A. R. Dodmantipi y A. A. Alsairafi, «CFD modeling of convection heat transfer using 1.7 MHz and 24 kHz ultrasonic waves: a comparative study,» *Heat and Mass Transfer*, vol. 50, nº 9, p. 1319–1333, 2014.
- [71] M. Rahimi, B. Aghel, B. Hatamifar, M. Akbaki y A. A. Alsairafi, «CFD modeling of mixing intensification assisted with ultrasound wave in a T-type microreactor,» *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 86, pp. 36-46, 2014.
- [72] M. Rahimi, N. Azimi, F. Parvizian y A. A. Alsairafi, «Computational Fluid Dynamics modeling of micromixing performance in presence of microparticles in a tubular sonoreactor,» *Computers & Chemical Engineering*, vol. 60, pp. 403-412, 2014.
- [73] B. Sajjadi, A. A. Raman y S. Ibrahim, «Influence of ultrasound power on acoustic streaming and micro-bubbles formations in a low frequency sono-reactor: Mathematical and 3D computational simulation,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 24, pp. 193-203, 2015.
- [74] A. Znidarcic, R. Mettin y M. Dular, «Modeling cavitation in a rapidly changing pressure field – Application to a small ultrasonic horn,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 22, pp. 482-492, 2015.
- [75] M. Rahimi, S. Movahedirad y S. Shahhosseini, «CFD study of the flow pattern in an ultrasonic horn reactor: Introducing a realistic vibrating boundary condition,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 35, nº parte A, pp. 359-374, 2017.
- [76] J. Xi y L. Choi-Hong, *Numerical Techniques for Direct and Large-Eddy Simulations*, Boca Raton, Florida: CRC, 2009.
- [77] Y. A. Cengel y J. M. Cimbala, *Mecánica de Fluidos, Fundamentos y Aplicaciones*, México, D. F.: McGraw-Hill, 2006.

- [78] B. Andersson, R. Andersson, L. Hakansson, M. Mortensen, R. Sudiyo y B. Van Wachem, *Computational Fluid Dynamics for Engineers*, CDMX: Cambridge University Press, 2012.
- [79] ANSYS, *Turbulence Modeling. Introductory FLUENT Training*, ANSYS, Inc., 2009.
- [80] H. K. Versteeg y W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics, the Finite Volume Method*, Segunda edición ed., Inglaterra: Pearson Education Limited, 2007.
- [81] T. M. Soe y S. Y. Khaing, «Comparison of Turbulence Models for Computational Fluid Dynamics Simulation of Wind Flow on Cluster of Buildings in Mandalay,» *International Journal of Scientific and Research Publications*, vol. 7, nº 8, pp. 337-350, 2017.
- [82] D. C. Wilcox, *Turbulence Modeling for CFD*, Tercera edición ed., San Diego, California: DCW Industries, Inc., 2006.
- [83] J. Min y Z. Gao, «Large Eddy Simulations of Mixing Time in a Stirred Tank,» *Chinese Journal of Chemical Engineering*, vol. 14, nº 1, pp. 1-7, 2006.
- [84] J. H. Ferziger, *Simulation and Modeling of Turbulent Flows*, Oxford: Oxford University Press, 1996.
- [85] F. Nicoud y F. Ducros, «Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor,» *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 62, nº 3, pp. 183-200, 1999.
- [86] ANSYS , *ANSYS Meshing Advanced Techniques*, ANSYS: PADT Lunch & Learn Series, 2019.
- [87] P. J. Roache, «Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies,» *Journal of Fluids Engineering*, vol. 116, nº 3, pp. 405-4013, 1994.
- [88] O. Huerta-Chávez, Y. Rodríguez-Arias, V. X. Mendoza-Escamilla, H. Mollinedo, M. Morales-Mora y S. Martínez-Delgadillo, «The effect of internal impellers on mixing in an electrochemical reactor with rotating rings electrodes,» *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 88, pp. 37-46, 2015.
- [89] A. Gabriele, A. W. Nienow y M. J. Simmons, «Use of angle resolved PIV to estimate local specific energy dissipation rates for up- and down-pumping pitched blade agitators in a stirred tank,» *Chemical Engineering Science*, vol. 64, pp. 126-143, 2009.
- [90] F. R. Khan, *Investigation of turbulent flows and instabilities in a stirred vessel using particle image velocimetry*, Inglaterra: Loughborough University, 2005.
- [91] J. Sheng, H. Meng y R. O. Fox, «A large PIV method for turbulence dissipation rate estimation,» *Chemical Engineering Science*, vol. 55, pp. 4423-4434, 2000.
- [92] J. Meyers y P. Sagaut, «On the model coefficients for the standard and the variational multi-scale Smagorinsky model,» *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 569, pp. 287-319, 2006.

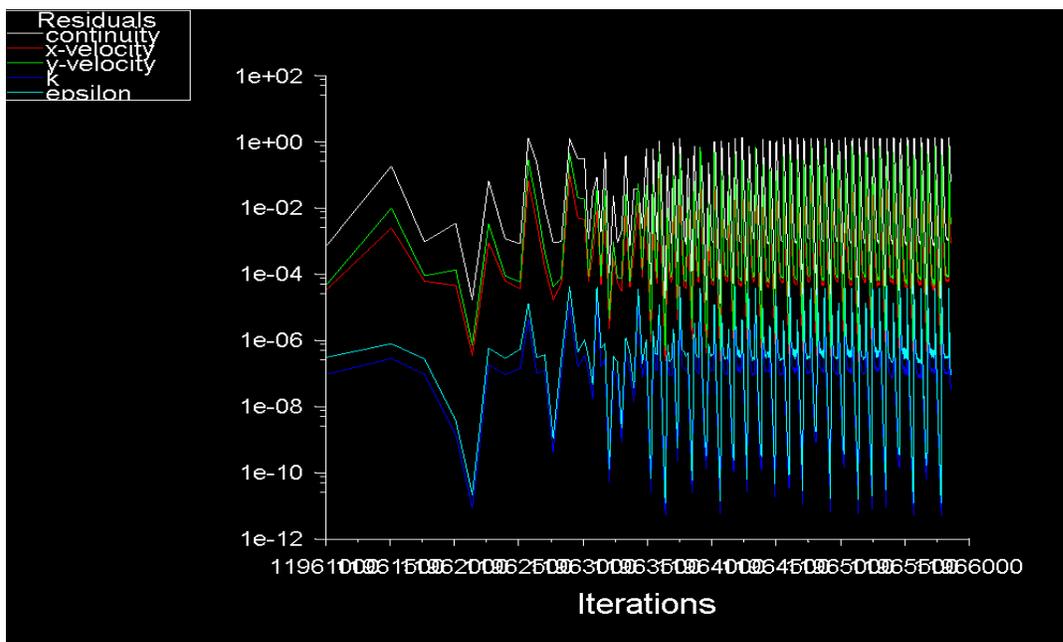
- [93] J. O. Hinze, *Turbulence, An Introduction to its Mechanism and Theory*, Nueva York: McGraw-Hill, 1975.
- [94] M. Abolhasani, M. Rahimi, Dehbani y A. A. Alsairafi, «CFD modeling of heat transfer by 1.7 MHz ultrasound waves,» *Numerical Heat Transfer, Part A*, vol. 62, pp. 822-841, 2012.
- [95] M. Ashokkumar, J. Lee, Y. lida, K. Yasui, T. Kozuka, T. Tuziuti y A. Towata, «The detection and control of stable and transient acoustic cavitation bubbles,» *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 11, nº 43, pp. 10118-10121, 2009.
- [96] M. Ashokkumar, J. Lee, Y. lidia, K. Yasui, T. Kozuka, T. Tuziuti y A. Towata, «Spatial Distribution of Acoustic Cavitation Bubbles at Different Ultrasound Frequencies,» *ChemPhysChem*, vol. 11, nº 8, pp. 1680-1684, 2010.
- [97] M. Chouvellon, A. Largillier, T. Fournel, P. Boldo y Y. Gonthier, «Velocity study in an ultrasonic reactor,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 7, p. 207–211, 2000.
- [98] F. Parvizian, M. Rahimi y M. Faryadi, «Macro- and micromixing in a novel sonochemical reactor using high frequency ultrasound,» *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, vol. 50, pp. 732-740, 2011.
- [99] Y. Sano y H. Usui, «Interrelations among mixing time, power number and discharge flow rate number in baffled mixing vessels,» *Journal of Chemical Engineering of Japan*, vol. 18, nº 1, pp. 47-52, 1985.
- [100] J. Stelmach, R. Musoski, C. Kuncewicz y M. Głogowski, «Turbulent Energy Dissipation Rate and Turbulence Scales in the Blade Region of a Self-Aspirating Disk Impeller,» *Journal of Applied Fluid Mechanics*, vol. 12, nº 3, pp. 715-728, 2019.
- [101] S. Merouani, O. Hamdaoui, Y. Rezgui y M. Guemini, «Effects of ultrasound frequency and acoustic amplitude on the size of sonochemically active bubbles—theoretical study,» *Ultrasonics Sonochemistry*, vol. 20, pp. 815-819, 2013.
- [102] EPA 832-F-00-03, «Decentralized Systems Technology Fact Sheet Aerobic Treatment,» EPA, Washington, D.C, Septiembre 2000.



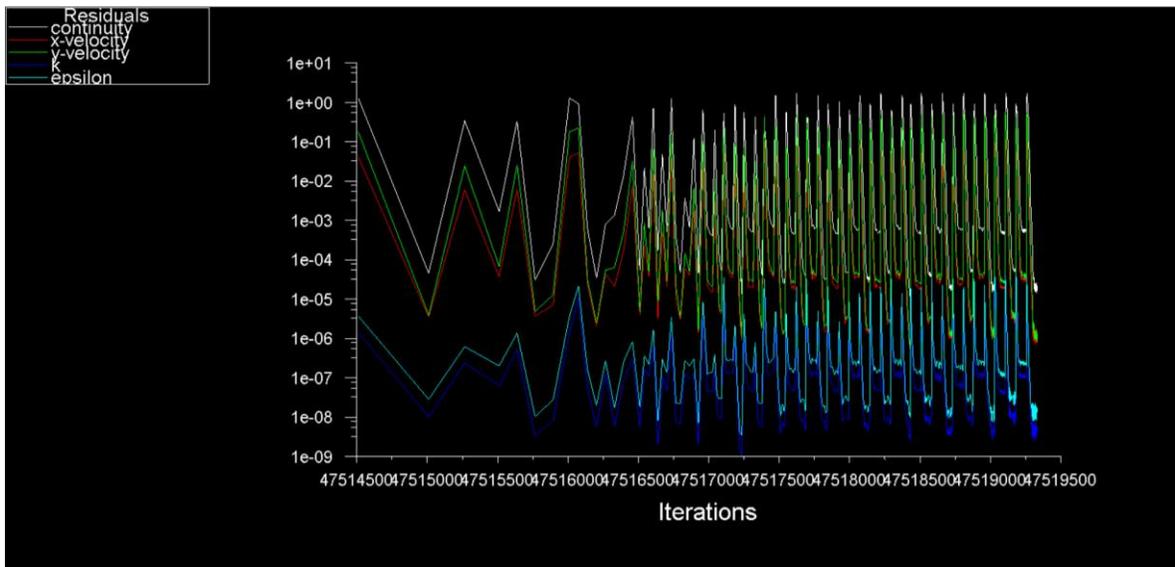
ANEXO



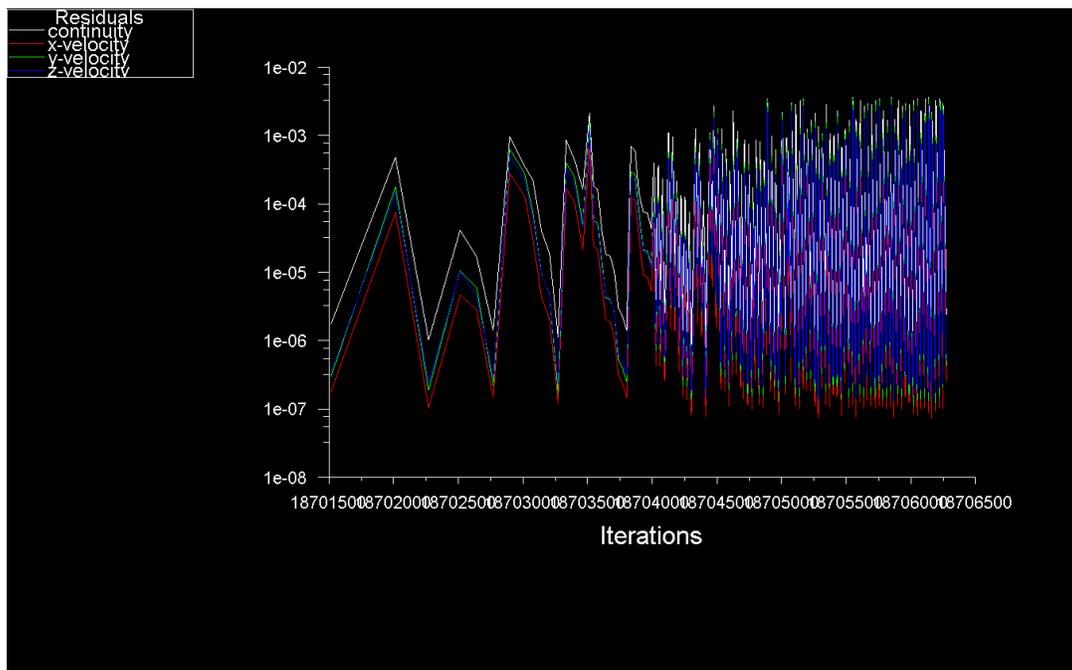
RESIDUALES



Caso I. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D de 10 cm de altura del líquido, modelo RANS k- ϵ estándar.



Caso II. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 2D y altura del líquido de 10 cm, modelo RANS, $k-\epsilon$ estándar.



Caso III. Reactor ultrasónico de 500 kHz en 3D y altura del líquido de 5cm, modelo LES, con el modelo de submalla WMLES.