DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA MECÁNICA

MAESTRIA EN ENERGÍAS RENOVABLES

TRABAJO DE TITULACIÓN, PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE MAGISTER EN ENERGÍAS RENOVABLES

TEMA: "DESARROLLO DE UN MODELO MATEMÁTICO DE UN FOTOBIOREACTOR SOLAR DE PLACA PLANA PARA LA PRODUCCIÓN DE *SPIRULINA PLATENSIS*"

AUTOR: MEJÍA GALARZA WILLIAM ANDRÉS

DIRECTOR: ALVAREZ LLORET EDGAR PAÚL

SANGOLQUÍ

2016

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
MAESTRÍA EN ENERGÍAS RENOVABLES
PROMOCIÓN IV

CERTIFICACIÓN

Certifico que el trabajo de titulación **"DESARROLLO DE UN MODELO MATEMÁTICO DE UN FOTOBIOREACTOR SOLAR DE PLACA PLANA PARA LA PRODUCCIÓN DE *SPIRULINA PLATENSIS*"** realizado por el Ing. William Andrés Mejía Galarza, ha sido revisado en su totalidad y analizado por el software anti-plagio, el mismo cumple con los requisitos teóricos, científicos, técnicos, metodológicos y legales establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, por lo tanto me permito acreditarlo y autorizar al Ing. William Andrés Mejía Galarza para que lo sustente públicamente.

Sangolquí, 29 de agosto de 2016

Ing. Edgar Paúl Álvarez Lloret
DIRECTOR

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
MAESTRÍA EN ENERGÍAS RENOVABLES
PROMOCIÓN IV

AUTORIZACIÓN

Yo, William Andrés Mejía Galarza, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar en la biblioteca virtual de la institución el presente trabajo de titulación **"DESARROLLO DE UN MODELO MATEMÁTICO DE UN FOTOBIOREACTOR SOLAR DE PLACA PLANA PARA LA PRODUCCIÓN DE *SPIRULINA PLATENSIS*"** cuyo contenido, ideas y criterios son de mi autoría y responsabilidad.

Sangolquí, 29 de agosto de 2016

William Andrés Mejía Galarza
CC:010442360-3

DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA
MAESTRÍA EN ENERGÍAS RENOVABLES
PROMOCIÓN IV

AUTORÍA DE RESPONSABILIDAD

Yo, William Andrés Mejía Galarza, con cédula de identidad 010442360-3 declaro que este trabajo de titulación **"DESARROLLO DE UN MODELO MATEMÁTICO DE UN FOTOBIOREACTOR SOLAR DE PLACA PLANA PARA LA PRODUCCIÓN DE *SPIRULINA PLATENSIS*"** ha sido desarrollado considerando los métodos de investigación existentes, así como también se ha respetado los derechos intelectuales de terceros considerándose en las citas bibliográficas.

Consecuentemente declaro que este trabajo es de mi autoría, en virtud de ello me declaro responsable del contenido, veracidad y alcance de la investigación mencionada.

Sangolquí, 29 de agosto de 2016

William Andrés Mejía Galarza
CC:010442360-3

DEDICATORIA

A Dios, mis padres Willian y Carmen, mi hermana Karen, a Silvana mi querida amiga y a mi compañero de camino Carlos Xavier.

William Mejía Galarza

Julio, 2016

AGRADECIMIENTO

A la Ing. Silvana Zalamea, Directora del grupo de Ingeniería de Reactores de la Universidad de Cuenca por todas las facilidades prestadas para la realización de este trabajo.

William Mejía Galarza

Julio, 2016

ÍNDICE DE CONTENIDOS

CARÁTULA…….. 0
CERTIFICACIÓN DEL DIRECTOR…….. i
AUTORIZACIÓN…….. ii
AUTORÍA DE RESPONSABILIDAD…… iii
DEDICATORIA…… iv
AGRADECIMIENTO…… v
ÍNDICE DE CONTENIDOS…… vi
ÍNDICE DE FIGURAS…… x
ÍNDICE DE TABLAS……... xviii
RESUMEN…… xx
ABSTRACT…….. xxi
INTRODUCCIÓN…… xxii
Capítulo I
DINÁMICA DE FLUIDOS EN EL FOTOBIOREACTOR DE PLACA PLANA
1.1 Introducción……. 1
1.2 Fase, componente y flujo multifásico…….. 2
1.3 Principales procedimientos de promediado de la fase continua. 6
1.3.1 Promediado basado en el tiempo…… 6
1.3.2 Promediado basado en el volumen……. 7
1.3.3 Promediado de ensamble……. 7
1.4 Descripción matemática de los sistemas multifásicos……. 8
1.5 Ecuaciones de conservación para la fase continua……. 12
1.5.1 Teoremas fundamentales……. 13
1.5.2 Ecuación de conservación de la masa…… 16
1.5.3 Conservación de la cantidad de movimiento lineal …….. 22
1.5.4 Ecuación de conservación de la energía…… 34
1.5.5 Ecuaciones de conservación efectivas……... 52
1.5.6 Transporte de masa, cantidad de movimiento lineal y energía en la interfase…….. 63
1.6 Consideraciones y simplificaciones……. 64

1.6.1 Flujo a bajas velocidades o a bajos números de Match…….. 64
1.6.2 Ecuaciones constitutivas para fluidos Newtonianos……. 66
1.7 Modelos de turbulencia……. 68
1.7.1 Modelo de difusividad de remolino…….. 69
1.7.2 Modelo k-ω de transporte de esfuerzo cortante (SST)…….. 73
1.8 Ecuaciones de conservación para la fase dispersa…….. 78
1.8.1 Balance de fuerzas sobre una partícula……. 79
1.9 Turbulencia en la fase discreta…… 91
1.9.1 Fuentes de turbulencia en la fase discreta……. 91
1.9.2 Tipos de turbulencia……... 92
1.9.3 Hipótesis de Kolmogorov y escalas de turbulencia…….. 93
1.9.4 Simulación de camino aleatorio (Random Walk Model)…….. 96
1.10 Descripción de la geometría del fotobioreactor……. 99

Capítulo II

TRANSFERENCIA DE CALOR POR RADIACIÓN EN UN MEDIO PARTICIPANTE. CINÉTICA DE CRECIMIENTO DE LA *ARTHROSPIRA PLATENSIS*

2.1 Introducción……. 102
2.2 Radiación térmica…….. 102
2.3 Estimación de la radiación solar…….. 109
2.4 Radiación solar en el Ecuador……. 113
2.5 Microorganismos fotoautótrofos: cianobacterias……... 118
2.5.1 Factores que afectan el crecimiento de la *Arthrospira Platensis*……... 120
2.5.2 La luz solar y su efecto en el crecimiento de la *Arthrospira Platensis*……... 125
2.6 Balance de materia en el medio de cultivo…… 144
2.7 Cinética de crecimiento de la *Arthrospira Platensis*…….. 146
2.8 Balance de energía de la fase fotónica ……. 150
2.8.1 Ecuación de transporte radiativo…… 150
2.8.2 Ecuación de transporte radiativo considerando las componentes de la radiación solar…….. 171

2.9 Método de las ordenadas discretas……. 180

Capítulo III

EXPERIMENTOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

3.1 Introducción……. 183

3.2 Etapa de pre-procesamiento…… 183

3.2.1 Modelado de la geometría del fotobioreactor de placa plana en DESIGN MODELER……... 183

3.2.2 Mallado del dominio de fluido en MESHING…….. 187

3.2.3 Superficies en donde se definirán las condiciones de frontera……. 197

3.3 Etapa de procesamiento…… 199

3.3.1 Metodología de experimentación numérica……... 199

3.3.2 Procedimiento de solución …….. 202

3.3.3 Materiales……..... 203

3.3.4 Condiciones de frontera…… 204

3.3.5 Condiciones iniciales……. 206

3.3.6 Ejecución de experimentos numéricos……... 207

3.4 Etapa de post-procesamiento. Análisis de resultados……. 212

3.4.1 Contornos de fracciones volumétricas de líquido……. 212

3.4.2 Contornos de velocidad del líquido …… 216

3.4.3 Contornos de irradiancia incidente en las superficies y distribución de la radiación fotosintéticamente activa en el interior del fotobioreactor de placa plana……... 220

3.4.4 Contornos de temperatura…… 231

3.4.5 Determinación de la cinética de crecimiento de la *Arthrospira Platensis*……... 237

3.5 Análisis de validez y convergencia…….. 247

3.5.1 Análisis de validez del modelo……. 247

3.5.2 Análisis de convergencia del modelo……. 260

Capítulo IV

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1 Conclusiones……. 268

4.2 Recomendaciones……. 271
REFERENCIAS…… 273

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura i	Diferentes tecnologías de cultivo de microalgas: a) Piscina de camino serpenteante, b) Fotobioreactor de placa plana, c) Fotobioreactor tubular inclinado y d) Fotobioreactor tubular horizontal continuo……..	xxv
Figura ii	Interacción entre la dinámica de fluidos, cinética de crecimiento y la transferencia de luz mediante radiación térmica…….	xxvi
Figura iii	Modelos matemáticos que describen la dinámica del fotobioreactor de placa plana……..	xxvii
Figura 1	Representación de un fluido bifásico como la suma de una fase discreta y otra continua……	5
Figura 2	Representación de un volumen de control (derecha) y un volumen material (izquierda)……...	10
Figura 3	Esquema para la selección de un modelo multifásico…….....	12
Figura 4	Volumen material (izquierda) y volumen de control (derecha) empleados para el análisis…….	13
Figura 5	Esquema en donde se muestra las fases interactuando a través de su interfase……...	19
Figura 6	Corte a través de un punto de una región material (cuerpo) de un medio continuo mediante un plano. Se observa el vector de esfuerzos…….....	24
Figura 7	Tetraedro que contiene en sus caras a los vectores de esfuerzo en cada una de sus caras……	25
Figura 8	Perfil de flujo laminar y turbulento en una tubería circular.....	53
Figura 9	Fluctuación de la propiedad Σ^k con el tiempo en algún punto fijo……..	54
Figura 10	Transporte de energía cinética a través de los torbellinos……	69
Figura 11	Partícula que forma parte de la fase dispersa……..	78

Figura 12	Partícula en presencia de un gradiente de velocidad…….	84
Figura 13	Fuerza de Magnus sobre la partícula…….	86
Figura 14	Escala de las estructuras turbulentas…….	95
Figura 15	Esquema del fotobioreactor de placa plana……..	100
Figura 16	Dimensiones del fotobioreactor de placa plana……	100
Figura 17	Espectro electromagnético……..	105
Figura 18	Irradiancia espectral media diaria para diferentes longitudes de onda. En negro la irradiancia espectral extraterrestre, en gris oscuro la irradiancia espectral global y el gris calor la irradiancia espectral directa…….	107
Figura 19	Radiación directa, y aportes de radiación difusa……..	108
Figura 20	Instrumentos para medir la radiación solar. A la izquierda el piranómetro de Kipp-Zonen para medir la radiación global. A la derecha el pirheliómetro de Kipp-Zonen para medir la radiación directa…….	109
Figura 21	Irradiancia difusa promedio sobre una superficie horizontal para el año 2008……..	114
Figura 22	Irradiancia directa promedio sobre una superficie horizontal para el año 2008……..	114
Figura 23	Irradiancia global promedio sobre una superficie horizontal para el año 2008……..	115
Figura 24	Promedio mensual de la irradiación global diaria sobre superficie horizontal……..	116
Figura 25	Forma de hélice, característica de la Arthrospira Platensis……..	119
Figura 26	A la izquierda se muestra una fotografía ampliada de la cianobacteria Arthrospira Platensis. A la derecha una ampliación mostrando los tricomas cilíndricos……..	119
Figura 27	Diversidad de formas de Arthrospira Platensis, en dos lagos salinos del este de Chad……	120
Figura 28	Esquema de una cianobacteria. La membrana	126

citoplasmática separa el periplasma del citoplasma (región sombreada con puntos). Dentro de este se encuentran las membranas tilacoides en donde se produce la fotosíntesis……..
Figura 29 Esquema tridimensional de una cianobacteria……. 127
Figura 30 Generación y transporte de electrones en el aparato fotosintético de la célula…… 128
Figura 31 Irradiancia promedio mensual q y flux de fotones Fph sobre superficie horizontal a diferentes longitudes de onda (400nm, 500nm, 600nm y 700nm), para la localidad de Pedernales…… 134
Figura 32 Reflexión, difracción y absorción de un haz de luz en el espectro de la radiación fotosintéticamente activa al entrar en contacto con una célula de una cianobacteria…….. 136
Figura 33 Sección transversal óptica de una cianobacteria, también conocida como coeficiente específico molar de absorción de luz…… 137
Figura 34 Curva de crecimiento de la Arthrospira Platensis en función del flux de fotones. La cianobacteria fue aislada del lago Chitu en Etiopía…….. 142
Figura 35 Esquema del fotobioreactor de placa plana. Se observa la diferencia entre volumen de reacción (volumen del fluido) y volumen de reactor (característica geométrica)……..... 145
Figura 36 Suspensión, que contiene al medio de cultivo y a los microorganismos. Se puede observar las interacciones de la radiación con la materia…….. 152
Figura 37 Intensidad de radiación redirigida por dispersión……. 157
Figura 38 Áreas perpendiculares a los rayos incidentes……. 157
Figura 39 Distancia ds_i recorrida por el haz de radiación que viene desde la dirección s_i…….. 158

Figura 40 Elemento conformado por haces de radiación en donde se efectuará el balance de energía……. 161
Figura 41 Coeficiente de absorción másico y coeficiente de dispersión másico para cada longitud de onda en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa…….... 169
Figura 42 Geometría que representa el dominio experimental del fotobioreactor de placa plana…….. 184
Figura 43 Esquema final con dimensiones del dominio de fluido…… 185
Figura 44 Vista superior del dominio de fluido…… 186
Figura 45 Vista lateral del dominio de fluido…… 186
Figura 46 Dominio de fluido para el mallado…….. 188
Figura 47 Mallado generado automáticamente por MESHING. A la izquierda se observa uno de las caras laterales del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. A la derecha se muestra el refinamiento de la malla alrededor del sparger…….. 189
Figura 48 Mallado generado automáticamente por MESHING. A la izquierda se observa la cara frontal del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. A la derecha se muestra una ampliación de la malla generada……. 190
Figura 49 Mallado generado automáticamente por MESHING. A la izquierda se observa la cara frontal del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. A la derecha se muestra una ampliación de la malla generada……. 190
Figura 50 Mallado generado automáticamente por MESHING. Se observa la cara superior del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana…….. 191
Figura 51 Mallado generado automáticamente por MESHING. Se observa la cara inferior del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana…….. 191
Figura 52 Acoplamiento de las celdas entre caras del dominio de fluido……. 192

Figura 53 Vista inferior del dominio de fluido refinado…….. 194
Figura 54 Vista superior del dominio de fluido refinado…… 195
Figura 55 Vista frontal del dominio de fluido refinado…… 195
Figura 56 Vista posterior del dominio de fluido refinado…….. 196
Figura 57 A la izquierda vista lateral del dominio de fluido refinado. A la derecha detalle de un nuevo refinamiento cerca del sparger……..... 196
Figura 58 Posición del fotobioreactor de placa plana respecto al Sol…… 200
Figura 59 Contornos de fracción volumétrica de líquido (08E). …….. 212
Figura 60 Contornos de fracción volumétrica de líquido (10E). …….. 213
Figura 61 Contornos de fracción volumétrica de líquido (11E)…… 213
Figura 62 Contornos de fracción volumétrica de líquido (12E)…… 214
Figura 63 Contornos de fracción volumétrica de líquido (13E)…… 214
Figura 64 Contornos de fracción volumétrica de líquido (14E)…… 215
Figura 65 Contornos de fracción volumétrica de líquido (16E)…… 215
Figura 66 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (08E)… 216
Figura 67 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (10E)… 217
Figura 68 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (11E)… 217
Figura 69 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (12E)… 218
Figura 70 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (13E)… 218
Figura 71 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (14E)… 219
Figura 72 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (16E)… 219
Figura 73 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (08E)…….. 221
Figura 74 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (08E). ……..…. 221
Figura 75 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (10E)…….. 222
Figura 76 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm 223

	al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (10E)……..	
Figura 77	Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (11E)……..	224
Figura 78	Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (11E)……..	225
Figura 79	Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (12E)…….	225
Figura 80	Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (12E)…….	226
Figura 81	Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (13E)…….	227
Figura 82	Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (13E)……..	228
Figura 83	Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (14E)…….	229
Figura 84	Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (14E)…….	229
Figura 85	Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (16E)…….	230
Figura 86	Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (16E)……..	231
Figura 87	Contornos de temperatura en °C (08E)…….	232
Figura 88	Contornos de temperatura en °C (10E)…….	232
Figura 89	Contornos de temperatura en °C (11E)…….	233
Figura 90	Contornos de temperatura en °C (12E)…….	234
Figura 91	Contornos de temperatura en °C (13E)…….	235
Figura 92	Contornos de temperatura en °C (14E)…….	236

Figura 93 Contornos de temperatura en °C (14E)……. 236
Figura 94 Irradiancia normal directa y difusa para el 20 de marzo de 2016……. 237
Figura 95 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} de los experimentos realizados…… 239
Figura 96 Irradiancia total entre 400nm y 700nm en la rama izquierda (azul) y derecha (naranja) del fotobioreactor…... 240
Figura 97 Tasa de crecimiento y concentración de la cianobacteria Spirulina Platensis…… 243
Figura 98 Velocidad de crecimiento de la cianobacteria Arthrosphira Platensis bajo las condiciones de irradiancia de los experimentos numéricos…….. 245
Figura 99 Velocidad de crecimiento de la cianobacteria Arthrosphira Platensis bajo las condiciones de irradiancia de los experimentos numéricos, y concentración constante…….. 246
Figura 100 Ángulo de incidencia de la radiación solar sobre la superficie del fotobioreactor……. 249
Figura 101 Espesor del fotobioreactor y coordenadas de análisis…… 250
Figura 102 Ángulos que describen la posición del equipo en las coordenadas geográficas……. 252
Figura 103 Comparación de los valores de irradiancia obtenidos con el modelo de aproximación de dos fluxes y el modelo matemático propuesto en esta investigación para la rama izquierda del fotobioreactor…….. 257
Figura 104 Comparación de los valores de irradiancia obtenidos con el modelo de aproximación de dos fluxes y el modelo matemático propuesto en esta investigación para la rama izquierda del fotobioreactor…….. 258
Figura 105 La línea sólida negra muestra la radiación en el rango fotosintéticamente activo predicho por el modelo y los puntos los datos experimentales, con C_{Bx} de 0.09 gL^{-1} 259

obtenidos con un sensor cuántico esférico de 3mm de diámetro……..
Figura 106 La línea sólida negra muestra la radiación en el rango fotosintéticamente activo predicho por el modelo y los puntos los datos experimentales, con C_{Bx} de 0.25 gL^{-1} obtenidos con un sensor cuántico esférico de 3mm de diámetro…….. 259
Figura 107 La línea sólida negra muestra la radiación en el rango fotosintéticamente activo predicho por el modelo y los puntos los datos experimentales, con C_{Bx} de 0.49 gL^{-1} obtenidos con un sensor cuántico esférico de 3mm de diámetro…….. 260
Figura 108 Residuales para el experimento 08E…….. 261
Figura 109 Residuales para el experimento 10E…….. 261
Figura 110 Residuales para el experimento 11E…….. 262
Figura 111 Residuales para el experimento 12E…….. 262
Figura 112 Residuales para el experimento 13E…….. 262
Figura 113 Residuales para el experimento 14E…….. 263
Figura 114 Residuales para el experimento 16E…….. 263
Figura 115 Contornos de fracción volumétrica de líquido (12T)…… 264
Figura 116 Contornos de velocidad del líquido en ms^{-1} (12T)…… 264
Figura 117 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (12T)…….. 265
Figura 118 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (12T)…….. 265
Figura 119 Contornos de irradiancia en Wm^{-2} (12T)…… 266
Figura 120 Residuales para el experimento 12T…….. 267

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla i	Sistemas de cultivo para cianobacterias……..	xxiv
Tabla 1	Clasificación de los sistemas multifásicos y ejemplos……...	4
Tabla 2	Descripción matemática de los fluidos bifásicos dispersos..	11
Tabla 3	Términos de la ecuación de Cauchy…….	31
Tabla 4	Términos de la ecuación general de conservación de la energía……...	41
Tabla 5	Términos de la ecuación de energía mecánica……..	45
Tabla 6	Constantes del modelo k-ω……	77
Tabla 7	Longitud, velocidad y tiempo para diferentes escalas de remolinos turbulentos……..	96
Tabla 8	Valores de las constantes a y b del modelo matemático de Amstrong-Page modificado……	111
Tabla 9	Coordenadas geográficas de los emplazamientos analizados…….	116
Tabla 10	Promedio de la irradiación global promedio anual en los tres emplazamientos analizados……...	117
Tabla 11	Parámetros obtenidos de la experimentación con Arthrospira Platensis aislada del lago Chitu en Etiopía…….	141
Tabla 12	Estadísticas generadas por MESHING respecto a las celdas del dominio del fluido……..	193
Tabla 13	Estadísticas generadas por MESHING respecto a las celdas del dominio del fluido refinado……..	194
Tabla 14	Superficies en donde se definirán las condiciones de frontera……..	197
Tabla 15	Matriz con los códigos de los experimentos numéricos a realizarse.....	199
Tabla 16	Irradiancia normal directa y difusa, determinadas con la calculadora solar de FLUENT, para Pedernales Latitud 0.0701° Longitud -80.0536°…….....	201
Tabla 17	Componentes de la irradiancia difusa para Pedernales, determinadas con la calculadora solar de FLUENT, para	202

	Pedernales Latitud 0.0701° Longitud -80.0536°…….	
Tabla 18	Materiales a emplearse durante la simulación en FLUENT..	204
Tabla 19	Condiciones de frontera requeridas por FLUENT……..	205
Tabla 20	Condiciones iniciales para la simulación…….	207
Tabla 21	Condiciones de frontera para los experimentos 08E, 10E, 14E y 16E……..	208
Tabla 22	Condiciones de frontera para los experimentos 11E, 12E y 13E…….	209
Tabla 23	Condiciones iniciales para los experimentos 08E, 10E, 14E y 16E……..	211
Tabla 24	Condiciones iniciales para los experimentos 11E, 12E y 13E…….	211
Tabla 25	Irradiancia y Flux de fotones a 550nm, en la región del espectro de la radiación Fotosintéticamente Activa, en las ramas derecha e izquierda del fotobioreactor…….	241
Tabla 26	Tasa específica de crecimiento μ y Concentración de biomasa C_{Bx} …….	241
Tabla 27	Velocidades de reacción local en la rama derecho e izquierda en el fotobioreactor de placa plana……..	244
Tabla 28	Ángulo de incidencia……	253
Tabla 29	Irradiancia dentro del fotobioreactor tanto en la rama izquierda como en la rama derecha……..	254
Tabla 30	Diferencia entre el campo de irradiancia obtenido con el modelo de aproximación de dos fluxes y el método de las ordenadas discretas al interior del fotobioreactor……..	255

RESUMEN

La cinética de crecimiento de la *Arthrospira Platensis* depende fuertemente de la interacción entre la dinámica de fluidos en el fotobioreactor, el transporte de luz solar por radiación desde el exterior y distribución de luz al interior del fotobioreactor. Estos fenómenos describen la dinámica de funcionamiento del fotobioreactor, y antes del diseño y construcción del equipo, deben ser modelados y simulados para comprender su interrelación. En la presente investigación se abordó esta temática. En primer lugar, se describió la dinámica de interacción entre el agua líquida y el aire gaseoso dentro del equipo, considerándolos como un fluido bifásico disperso. Luego, se planteó el modelo de transferencia de luz solar por radiación que incide en el exterior de las superficies, y la ecuación de transporte radiativo que permite determinar la distribución de luz solar al interior del reactor, en función de los datos de irradiancia solar de la localidad de Pedernales en Ecuador. También se desarrolló un modelo cinético que permite predecir el crecimiento de la cianobacteria en cuestión en función del campo de irradiancia solar. La simulación numérica de estos modelos se llevó a cabo en el software ANSYS WORKBENCH 15.0. Con la solución numérico se observó que el crecimiento de esta cianobacteria se encuentra en una zona de saturación lumínica bajo la irradiancia de Pedernales. Para probar la estabilidad de los modelos, se desarrolló una simulación en estado transitorio y se probó que los residuales cumplen el criterio de ANSYS para la convergencia.

PALABRAS CLAVE:

- **MODELADO**
- **SIMULACIÓN**
- **FOTOBIOREACTOR**
- ***SPIRULINA PLATENSIS***
- **RADIACIÓN SOLAR**

ABSTRACT

The growth kinetics of Arthrospira platensis strongly depends on the interaction between fluid dynamics in the photobioreactor, transport sunlight radiation from the outside and light distribution within the photobioreactor. These phenomena describe the dynamics of operation of the photobioreactor, and before the design and construction of equipment this interaction must be modeled and simulated. In this research this subject was discussed. First, the dynamics of interaction between liquid water and gaseous air inside the equipment, considering them as a disperse two-phase fluid is described. The sunlight radiation that strikes the outside surfaces was calculated using Pedernales radiation data, and the radiative transfer equation was solved for determining the distribution of sunlight into the reactor. A kinetic model to predict the growth of cyanobacteria in question depending on the field of solar irradiance was also developed. The numerical simulation of these models was carried out in the ANSYS WORKBENCH 15.0 software. The numerical solution was observed that the growth of this cyanobacterium is in a saturation zone light under Pedernales irradiance. To test the stability of the models, a transient simulation was developed and tested that residual meet the criteria for convergence ANSYS.

KEYWORDS:

- **MODELING**
- **SIMULATION**
- **PHOTOBIOERACTOR**
- ***SPIRULINA PLATENSIS***
- **SOLAR RADIATION**

INTRODUCCIÓN

"Desarrollo de un modelo matemático de un fotobioreactor solar de placa plana para la producción de *Spirulina Platensis*"

Las cianobacterias son microorganismos fotosintéticos que se encuentran tanto en lagos y lagunas de agua dulce como en los mares y océanos. Para su supervivencia, al igual que las plantas terrestres, necesitan de la luz solar para desarrollar el proceso de fotosíntesis. Al estar estos microorganismos inmersos en un medio acuático, tienen un eficiente acceso a este recurso, así como al dióxido de carbono y nutrientes, convirtiendo eficientemente la luz solar en biomasa(John, Anisha, Nampoothiri, & Pandey, 2011). Estos microorganismos pronto se convertirán en uno de los recursos renovables más importantes debido a (Campbell & Duncan, 1997):

- Una conversión protónica eficiente (aproximadamente del 3 al 8% en contra del 0,5% de las plantas terrestres) lo que representa elevados rendimientos en biomasa por hectárea, así como altas tasas de crecimiento.
- Una alta capacidad de captura de dióxido de carbono.
- Estos microorganismos son capaces de crecer en un medio líquido, y pueden crecer en agua salada, lo que permite ahorrar el consumo de agua dulce.
- Pueden utilizar nitrógeno y fósforo de una variedad de fuentes (aguas residuales industriales, municipales, provenientes de tratamientos agrícolas, etc.) proveyendo el beneficio adicional de la bioremediación.
- Para su cultivo, se puede utilizar espacios que no son útiles desde el punto de vista agrícola (por ejemplo, desiertos) evitando de esta manera la competencia con tierras destinadas a la agricultura.
- Su producción no es estacional, lo que da la ventaja de poder cosechar el cultivo en todo el año.
- No se necesita el uso de fertilizantes o pesticidas para su cultivo.

En las pasadas dos décadas, la cianobacteria *Spirulina Platensis*, también denominada como *Arthrosphira Platensis*, ha sido el foco de interés de muchos investigadores debido a su importancia comercial (Kebede & Ahlgren, 1996). En el campo alimentario, su valor radica en la gran cantidad de nutrientes que contiene, como aminoácidos, proteínas, carbohidratos, ácidos grasos omega, vitaminas, minerales y otros, convirtiéndolas en un suplemento alimenticio, ya sea en polvo, encapsulado, en tabletas, pastas para sopas, salsas, barras de cereales, bebidas de frutas u otros (Ramírez & Olvera, 2006).

En el campo energético, el cultivo de cianobacterias ha recibido una especial atención en las áreas de producción de biodiesel (Chisti, 2008), producción de biohidrógeno (Berberoglu, Yin, & Pilon, 2007), biomasa proveniente de algas para la combustión (Bruhn et al., 2011), digestión anaeróbica para producir gas metano (Yen & Brune, 2007), y remoción de dióxido de carbono de los gases de combustión (Chiu et al., 2011).

Las cianobacterias en general, han sido cultivadas en sistemas abiertos (piscinas) y en sistemas cerrados (fotobioreactores). A continuación se presentan algunas características de estos sistemas (Ugwu, Aoyagi, & Uchiyama, 2008):

Tabla i
Sistemas de cultivo para cianobacterias

Sistema de cultivo		Ventajas	Desventajas
Abierto	**Estanques**	Relativamente económico, fácil de limpiar después del cultivo, bueno para cultivos en masa.	Poco control de las condiciones de cultivo, dificultad de crecimiento de los cultivos de cianobacterias para periodos largos, pobre productividad, ocupa largos espacios de terreno, limitado a pocas especies, los cultivos son fácilmente contaminados.
	Raceway	Puede ser operado en un modo continuo	Elevadas relaciones área/volumen, requiere elevadas potencias del agitador para evitar que el cultivo de cianobacterias precipite
Cerrado	**Fotobioreactores de columna vertical**	Elevadas tasas de transferencia de masa, buen mezclado, bajo consumo de energía, alto potencial de escalabilidad, fácil de esterilizar, fácilmente temperado, bueno para inmovilización de algas, reducida fotoinhibición y fotooxidación.	Baja área superficial iluminada, su construcción requiere materiales sofisticados, los cultivos sufren esfuerzos cortantes.
	Fotobioreactores de placa plana	Gran área superficial iluminada, seguro para cultivos puertas afuera, bueno para inmovilización de algas, buen camino de luz (espesor del fotobioreactor hasta	Su escalado requiere muchos compartimientos y refuerzos estructurales, dificultad para controlar la temperatura de

	donde la luz puede penetrar), buenas productividades de biomasa, relativamente barato, fácil de limpiar, fácilmente temperado, baja acumulación de oxígeno.	cultivo, algún grado de crecimiento en las paredes, posibilidad de esfuerzos cortantes para algunos tipos de cianobacterias.
Fotobioreactores tubulares horizontales	Gran área superficial iluminada, seguro para cultivos puertas afuera, productividades en biomasa bastante buenas, relativamente barato.	Gradientes de pH, oxígeno disuelto y CO_2 a lo largo de los tubos, ensuciamiento, algún grado de crecimiento en las paredes, requiere un gran espacio de terreno.

Fuente: Ugwu et. Al 2008

A continuación se muestran algunos de estos sistemas de cultivo en la Figura 0.1 (Bitog et al., 2011):

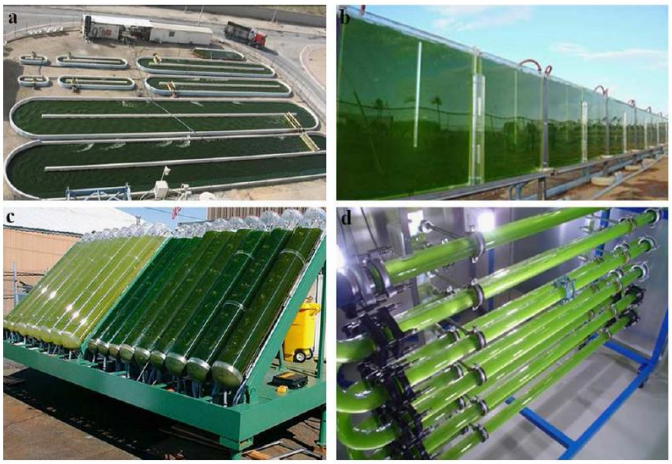


Figura i Diferentes tecnologías de cultivo de microalgas: a) Piscina de camino serpenteante, b) Fotobioreactor de placa plana, c) Fotobioreactor tubular inclinado y d) Fotobioreactor tubular horizontal continuo. Fuente: Bitog et al. 2011.

Como se puede observar en la Tabla i, los fotobioreactores aventajan a los sistemas abiertos, ya que mediante la manipulación de algunos parámetros como área superficial, intensidad luminosa, temperatura, etc. se puede tener el control del avance de la reacción de fotosíntesis. También se muestra que los fotobioreactores más prometedores son los tubulares verticales y los de placa plana, siendo estos últimos de geometría más sencilla, motivo por el cual se estudiarán en esta investigación, en especial el modelado y simulación de los aspectos fundamentales que describen su comportamiento dinámico (Posten, 2009), a saber: la dinámica de los fluidos presentes, la transferencia de luz desde el exterior y sus distribución en el interior del fotobioreactor, y la cinética de crecimiento de las cianobacterias influenciadas altamente por la radiación incidente.

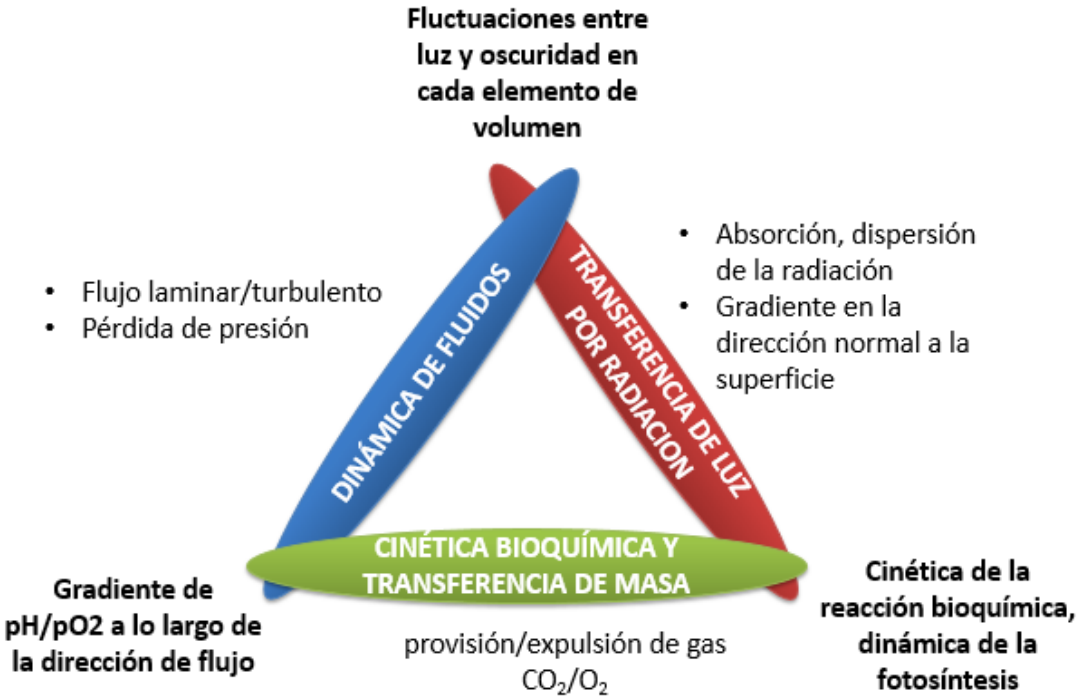


Figura ii Interacción entre la dinámica de fluidos, cinética de crecimiento y la transferencia de luz mediante radiación térmica. Adaptado de Posten 2009.

En la Figura ii se observa cómo interactúan estos parámetros, por lo que se hace evidente que los procesos de modelado y simulación deben

integrarlos para comprender cómo influyen en el crecimiento de la *Arthrosphira Platensis*. En el presente proyecto de investigación se pretende modelar estos tres aspectos (ver figura iii):

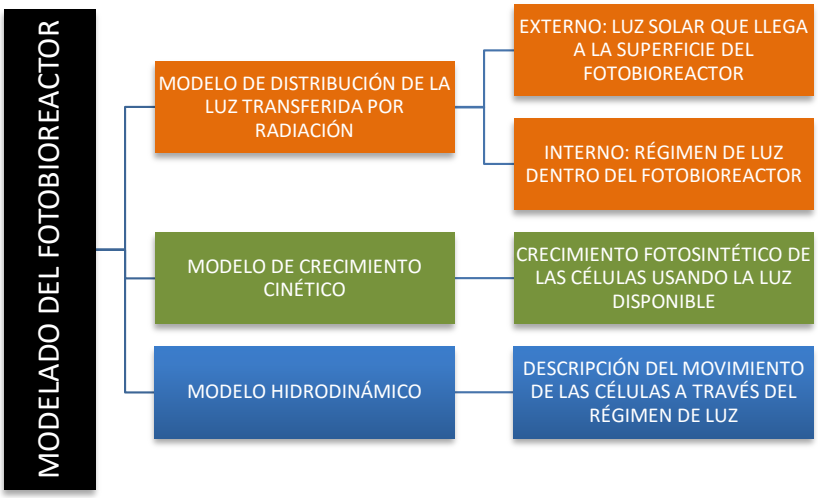


Figura iii Modelos matemáticos que describen la dinámica del fotobioreactor de placa plana. Fuente: El Autor.

Conjuntamente los tres modelos mostrados conformarán el modelo general del fotobioreactor, mismo que permitirá predecir la producción de *Arthrosphira Platensis* bajo unas determinadas condiciones de radiación solar. A continuación se describen los objetivos generales y específicos de este trabajo de investigación:

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar un modelo matemático de un fotobioreactor de placa plana que utiliza luz solar para la producción de *Spirulina Platensis.*

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Desarrollar un modelo matemático que describa el comportamiento hidrodinámico de los fluidos en la geometría propuesta del fotobioreactor de placa plana.

- Desarrollar un modelo matemático de la distribución de la luz transferida por radiación tanto en la superficie del fotobioreactor de placa plana como dentro del mismo.
- Establecer cómo influye la distribución de luz al interior del fotobioreactor mediante un modelo cinético que describa el crecimiento de la *Spirulina Platensis.*

El presente trabajo abordará las temáticas antes expuestas de la siguiente manera: en el capítulo 1 se estudiará el modelado matemático de la dinámica de la dinámica de los fluidos dentro del fotobioreactor, en el capítulo 2 se analizará la transferencia de luz solar por radiación desde el exterior y su distribución en el interior del fotobioreactor de placa plana, tras lo cual se desarrollará un modelo cinético que describe el crecimiento de la cianobacteria *Arthrosphira Platensis*. El capítulo 3 estará dedicado a los experimentos numéricos y el análisis de sus resultados, completando esta investigación con el capítulo 4 en donde se realizarán las conclusiones y recomendaciones pertinentes a lo desarrollado.

REFERENCIAS

Berberoglu, H., Yin, J., & Pilon, L. (2007). Light transfer in bubble sparged photobioreactors for H 2 production and CO 2 mitigation. *International Journal of Hydrogen Energy*, *32*(13), 2273-2285.

Bitog, J., Lee, I.-B., Lee, C.-G., Kim, K.-S., Hwang, H.-S., Hong, S.-W., . . . Mostafa, E. (2011). Application of computational fluid dynamics for modeling and designing photobioreactors for microalgae production: A review. *Computers and Electronics in Agriculture*, *76*(2), 131-147.

Bruhn, A., Dahl, J., Nielsen, H. B., Nikolaisen, L., Rasmussen, M. B., Markager, S., . . . Jensen, P. D. (2011). Bioenergy potential of Ulva lactuca: Biomass yield, methane production and combustion. *Bioresource Technology*, *102*(3), 2595-2604.

Campbell, C. J., & Duncan, R. C. (1997). *The coming oil crisis*: Multi-Science Publishing Company & Petroconsultants.

Chiu, S.-Y., Kao, C.-Y., Huang, T.-T., Lin, C.-J., Ong, S.-C., Chen, C.-D., . . . Lin, C.-S. (2011). Microalgal biomass production and on-site bioremediation of carbon dioxide, nitrogen oxide and sulfur dioxide from flue gas using Chlorella sp. cultures. *Bioresource Technology*, *102*(19), 9135-9142.

Chisti, Y. (2008). Biodiesel from microalgae beats bioethanol. *Trends in biotechnology, 26*(3), 126-131.

John, R. P., Anisha, G., Nampoothiri, K. M., & Pandey, A. (2011). Micro and macroalgal biomass: a renewable source for bioethanol. *Bioresource Technology, 102*(1), 186-193.

Kebede, E., & Ahlgren, G. (1996). Optimum growth conditions and light utilization efficiency of Spirulina platensis (= Arthrospira fusiformis)(Cyanophyta) from Lake Chitu, Ethiopia. *Hydrobiologia, 332*(2), 99-109.

Posten, C. (2009). Design principles of photo-bioreactors for cultivation of microalgae. *Engineering in Life Sciences, 9*(3), 165-177.

Ugwu, C., Aoyagi, H., & Uchiyama, H. (2008). Photobioreactors for mass cultivation of algae. *Bioresource Technology, 99*(10), 4021-4028.

Yen, H.-W., & Brune, D. E. (2007). Anaerobic co-digestion of algal sludge and waste paper to produce methane. *Bioresource Technology, 98*(1), 130-134.

CAPÍTULO I

DINÁMICA DE FLUIDOS EN EL FOTOBIOREACTOR DE PLACA PLANA

1.1 Introducción

Un fotobioreactor puede ser definido como un sistema de cultivo de microorganismos, como la cianobacteria *Arthrosphira Platensis*, que no permite el intercambio directo de gases (CO_2, O_2, etc.) y contaminantes entre el medio de cultivo y la atmósfera. Este equipo contiene en su interior una mezcla, denominada como suspensión, conformada por el medio de cultivo (líquido y nutrientes disueltos), burbujas de CO_2 diluidas en aire o puras y microorganismos (Posten & Walter, 2013) que basan su crecimiento en un proceso de fotosíntesis mediante luz solar o artificial.

Debido a la complejidad de la suspensión, el fotobioreactor debe garantizar un mezclado adecuado con el fin de mejorar la transferencia de masa (nutrientes, transferencia gas-líquido) y calor (homogenización de la temperatura) así como prevenir la sedimentación y la formación de un biofilm en las paredes del dispositivo (Pandey, 2011).

El mezclado así dispuesto presenta algunos efectos en la suspensión. Uno de ellos es la creación de los denominados ciclos de luz/oscuridad. Las células en movimiento experimentan niveles diferentes de absorción de radiación, desde los más elevados en la vecindad de las superficies en donde se recepta la radiación hasta los más bajos en la profundidad del medio de cultivo donde las células de los microorganismos tienen poco o nada de contacto con la radiación, lo que condiciona fuertemente el crecimiento de los microorganismos fotosintéticos. Otro efecto es la creación de esfuerzos cortantes de origen hidrodinámico que pueden destruir las células de los microorganismos cultivados.

El estudio de todos estos fenómenos en el fotobioreactor solo puede llevarse a cabo si se comprenden como se produce la interacción de los medios fluidos en el interior del equipo.

Por ello, en este primer capítulo se abordará el estudio de dinámica de los fluidos presentes en el fotobioreactor y su descripción matemática, que involucrará el planteamiento de las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento lineal y energía conjuntamente con un modelo de turbulencia para la fase continua desde un punto de vista Euleriano y la descripción de las fuerzas e interacciones de la fase dispersa desde un punto de vista Lagrangiano.

1.2 Fase, componente y flujo multifásico

Para iniciar con la descripción de los fluidos multifásicos es necesario definir previamente los conceptos de fase y componente. El término fase hace referencia al estado de agregación de una sustancia (sólido, líquido o gas), mientras que componente se refiere a una especie química con una identidad plenamente definida (N_2, H_2O, CO_2).

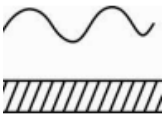
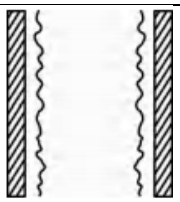
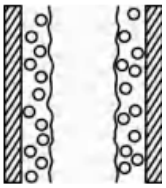
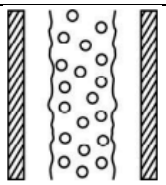
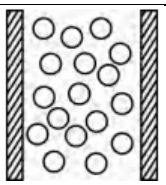
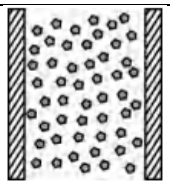
En la naturaleza, los fluidos pueden estar en un solo estado de agregación y tener múltiples componentes, como por ejemplo el aire, que está compuesto en su mayoría de N_2 y O_2 en estado gaseoso. También pueden existir fluidos constituidos por un solo componente en distintos estados de agregación, como por ejemplo el agua en ebullición, compuesta de líquido y burbujas de vapor. De acuerdo a estos ejemplos, los fluidos se pueden denominar multifásicos o multicomponentes, términos que en general suelen usarse indistintamente debido a que las matemáticas usadas para su descripción son similares (Faghri & Zhang, 2006).

Con base en lo anterior, se define como flujo multifásico al **desplazamiento simultáneo** de: a) una mezcla de especies químicas en un mismo estado de agregación, b) una especie química que se encuentra en diferentes estados de agregación, o c) combinaciones de los casos anteriores.

Los fluidos multifásicos pueden clasificarse según la estructura de sus interfases en (Faghri & Zhang, 2006): a) fluidos con fases separadas, b) fluidos con una o más fases dispersas, y c) fluidos con fases combinadas o mezcladas. En el primer caso el fluido contiene dos o más fases inmiscibles separadas de manera clara y contundente por sus interfases, como se observa en la Tabla 1. En el segundo caso una de las fases se encuentra diseminada o dispersa en la otra. El número de interfases es proporcional a la cantidad de elementos que contiene la fase dispersa (usualmente cientos o miles de ellos) (ver tabla 1). En el tercer caso, mediante la manipulación de algún parámetro del sistema como presión o temperatura, la estructura de la interfase cambia y coexisten dos o más estados de agregación (ver tabla 1).

Un caso especial de fluido multifásico es aquel que está constituido por dos fases (o dos componentes), que pueden tener distinta naturaleza: a) líquido-gas (vapor), b) líquido-líquido, c) líquido-partículas sólidas y d) gas (vapor)-partículas sólidas (Badalassi, Ceniceros, & Banerjee, 2003). Este fluido se denomina bifásico.

Tabla 1
Clasificación de los sistemas multifásicos y ejemplos

Tipo	Regímenes Típicos	Geometría	Configuración
Fase separada	Cambio de fase en una superficie plana		Capa líquida en vapor, capa de vapor en líquido, capa sólida en líquido, capa líquida en sólido, capa sólida en vapor
	Flujo anular líquido vapor		Capa líquida y flujo central de vapor, capa de vapor y flujo central de líquido
Fase combinada	Flujo anular con presencia de burbujas		Burbujas de vapor en la capa líquida con flujo central de vapor, con una película líquida anular.
	Flujo anular con gotas líquidas		Gotas de líquido presentes en el flujo central de vapor, con una película líquida anular.
Fase dispersa	Flujo de burbujas de vapor(gas) en un líquido		Burbujas de vapor o gas discretas en una fase líquida continua
	Flujo de partículas sólidas en un medio continuo		Partículas sólidas en un líquido, partículas sólidas discretas en un gas, lechos fluidizados

Fuente: Adaptado de Faghri et. al 2006.

De especial importancia en este trabajo de investigación son los flujos bifásicos dispersos, particularmente el flujo gas-líquido y sólido-líquido. La estructura de fluido bifásico disperso puede suponerse constituida por una

fase continua la cual ocupa una región conectada en el espacio, mientras que la fase dispersa ocupa regiones no conexas en el mismo, como se ilustra en la Figura 1:

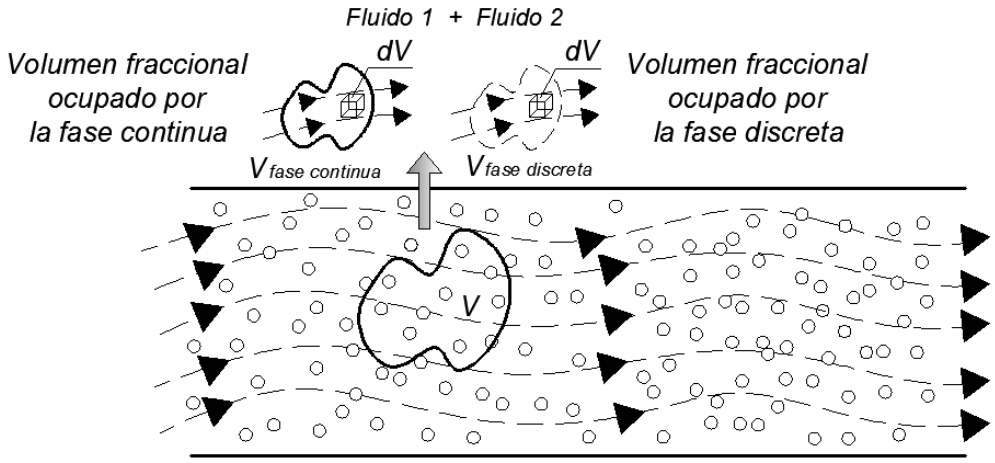


Figura 1 Representación de un fluido bifásico como la suma de una fase discreta y otra continua. Fuente: El Autor.

La fase continua puede ser un gas o un líquido, mientras que la fase dispersa puede estar constituida por partículas diseminadas de sólidos o burbujas de gas o vapor, representadas en la Figura 1 mediante los círculos blancos. En un sistema bifásico disperso, las fases que coexisten exhiben movimiento relativo entre ellas, así como intercambio de calor y masa a través de las múltiples interfases presentes (Yeoh & Tu, 2009).

Describir un sistema bifásico disperso es un asunto complejo. Para propósitos de análisis, lo ideal es resolver las ecuaciones que gobiernan el comportamiento de la fase continua tomando en cuenta las condiciones de frontera impuestas por cada elemento que constituye la fase dispersa (Crowe, Schwarzkopf, Sommerfeld, & Tsuji, 2011). Esto implica rastrear las múltiples interfases presentes, muchas de ellas deformables y tomar en cuenta las discontinuidades presentes en las propiedades del fluido bifásico disperso (Faghri & Zhang, 2006), lo cual excede la capacidad computacional

disponible. Para sobrellevar estos inconvenientes, se han desarrollado procedimientos matemáticos que involucran un proceso de promediado en el desarrollo de las ecuaciones de conservación de la fase continua, siendo posible su resolución a través de métodos numéricos robustos, haciendo factible la comparación de los resultados obtenidos por los modelos matemáticos con la experimentación (Yeoh & Tu, 2009). A continuación se analizarán los principales procedimientos de promediado aplicados a la fase continua.

1.3 Principales procedimientos de promediado de la fase continua

Fundamentalmente existen tres procedimientos de promediado de las ecuaciones de conservación de la fase continua:

1.3.1 Promediado basado en el tiempo

Resulta de promediar las propiedades del fluido en el tiempo en un punto del campo de flujo. Este enfoque ha sido empleado ampliamente en el flujo de fluidos con una sola fase para tratar las fluctuaciones causadas por la turbulencia y desarrollar ecuaciones de conservación promediadas en el tiempo con términos adicionales tal como el tensor de tensiones de Reynolds que toma en cuenta los efectos de la turbulencia (Crowe et al., 2011). Aplicado este procedimiento a un campo de flujo $\Phi(x,y,z,t)$ en un instante de tiempo particular, se obtiene:

$$\overline{\emptyset} = \lim_{T\to\infty} \int \emptyset(x,y,z,t)dt \qquad \overline{\emptyset} = \overline{\emptyset}(x,y,z) \tag{1.1}$$

En la ecuación 1.1 T representa el tiempo promedio. Debe notarse que la función promediada obtenida ahora solo depende de las coordenadas espaciales.

1.3.2 Promediado basado en el volumen

Se efectúa promediando las propiedades del fluido en un instante de tiempo sobre un volumen determinado V (Crowe et al., 2011), como se ilustra en la Figura 1. En este volumen arbitrario, el tamaño de todas las fases relevantes debe superar la escala de longitud de los elementos individuales de la fase (espaciado entre partículas o diámetro de burbuja), y debe ser mucho más pequeño que la longitud característica del problema(Yeoh & Tu, 2009). La condición anterior se debe cumplir para que este volumen arbitrario V contenga una muestra representativa de cada una de las fases. Matemáticamente para un campo de flujo Φ(*x,y,z,t*) en un instante de tiempo particular, se representa de la siguiente manera:

$$\langle \emptyset \rangle_V = \lim_{V \to \infty} \iiint \emptyset(x, y, z, t) dV \qquad \langle \emptyset \rangle_V = \langle \emptyset \rangle_V(t) \tag{1.2}$$

En la ecuación 1.2 la función promediada ahora solo depende del tiempo.

1.3.3 Promediado de ensamble

Evita las deficiencias de los procedimientos de promediado basados en el tiempo o en el volumen pero es de difícil implementación. Se basa en la probabilidad de que el campo de flujo esté en una configuración particular en un tiempo dado (Crowe et al., 2011). Matemáticamente para un campo de flujo Φ(*x,y,z,t*) en un instante de tiempo particular se representa de la siguiente manera:

$$\langle \emptyset \rangle_V = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \emptyset_n \, (x, y, z, t) \qquad \langle \emptyset \rangle_E = \langle \emptyset \rangle_E (x, y, z, t) \tag{1.3}$$

En la ecuación 1.3 N representa el número total de configuraciones que el campo de flujo puede adoptar.

Aunque los procedimientos de promediado posibilitan la obtención de una solución matemática de las ecuaciones de conservación, existe una inherente pérdida de la información de los gradientes locales entre las fases que interactúan, misma que puede ser suplida en forma de relaciones semi-empíricas denominadas ecuaciones constitutivas (Yeoh & Tu, 2009), que guardan consigo las propiedades intrínsecas del medio continuo. Estas expresiones se pueden calcular a partir de las transferencias de calor, masa y cantidad de movimiento suscitadas en la interfase.

1.4 Descripción matemática de los sistemas multifásicos

Para definir apropiadamente los flujos multifásicos, es necesario revisar algunos conceptos de la mecánica de los medios continuos (Olivella & de Saracíbar Bosch, 2002):

- **Volumen o región material (Ω):** Comúnmente conocido en termodinámica como sistema. Es una porción de materia, constituida por partículas que conservan su identidad, limitado por una superficie material cerrada que puede moverse e interactuar con sus alrededores (ver figura 2).
- **Superficie material (Γ):** Es un contorno móvil en el espacio que se encuentra constituido por las mismas partículas de materia que el volumen material (ver figura 2).

- **Volumen o región espacial (Ω):** Comúnmente conocido en termodinámica como volumen de control. Es un volumen fijo en el espacio (entidad geométrica neta) que es atravesado por las partículas de materia durante su movimiento (ver figura 2).
- **Superficie de control (Γ):** Es un contorno fijo en el espacio, que es continuamente atravesado por las distintas partículas de materia a lo largo del tiempo (ver figura 2).

Basándose en las definiciones anteriores, es posible escoger dos descripciones matemáticas diferentes del movimiento de los fluidos. La primera, denominada Langrangiana, es apropiada para representar el movimiento de volúmenes o regiones materiales. Esta requiere que las propiedades de un elemento de fluido sean rastreadas conforme este avanza con el flujo, como se observa en la Figura 2 (Jakobsen, 2008).

La segunda, denominada Euleriana, es empleada para describir lo que sucede en los volúmenes o regiones espaciales. Aquí las propiedades de un elemento de fluido son observadas desde una posición fija relativa a un marco de referencia, como se aprecia en la Figura 2 (Faghri & Zhang, 2006). Las variables de flujo son función del espacio y el tiempo y entonces son representadas como campos. Es ampliamente usada en mecánica de fluidos debido a su consistencia con los resultados experimentales obtenidos usualmente en el laboratorio.

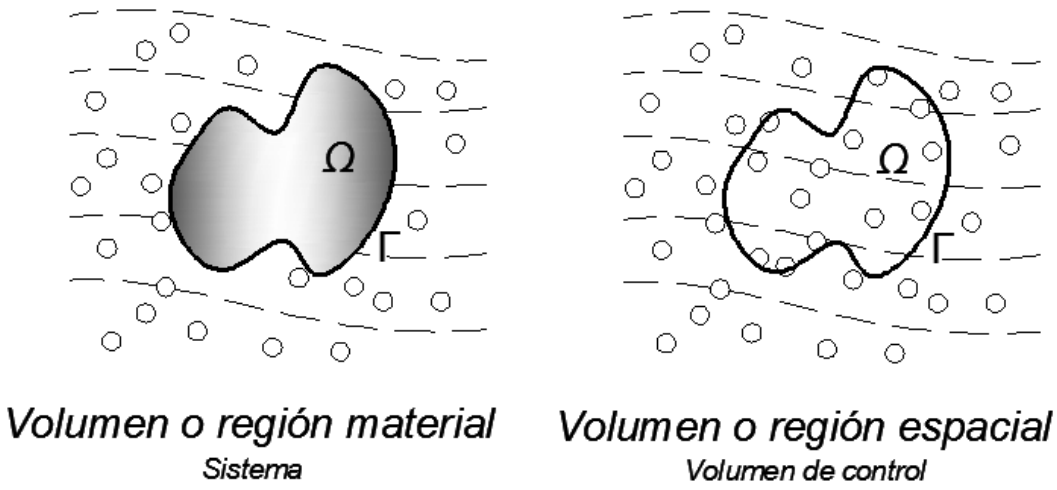


Figura 2 Representación de un volumen de control (derecha) y un volumen material (izquierda). Fuente: El Autor.

Un problema fundamental es que las leyes físicas que describen el comportamiento de los fluidos se encuentran descritas para un conjunto de partículas con identidad fija, es decir para un volumen material. Por tanto, para reconciliar la información obtenida de los modelos matemáticos Lagrangianos y los resultados experimentales, es necesario reformular las leyes físicas y ponerlas en función de un volumen de control (Deen, 1998).

Las leyes físicas pueden ser expresadas de manera integral o diferencial, como se observará posteriormente. Si el enfoque integral es usado, el empleo de los teoremas de transporte de Leibniz o Reynolds permitirá relacionar la tasa de cambio de una propiedad extensiva en un volumen material con su respectivo equivalente en el volumen de control. Si el enfoque diferencial es usado, el empleo de la derivada sustancial o material permitirá obtener una relación similar (Jakobsen, 2008).

En esta investigación, el interés está puesto en la descripción matemática del movimiento de fluidos bifásicos dispersos. Entre los modelos matemáticos tradicionalmente usados para modelar estos fluidos se encuentran (ver tabla

2). Otros modelos matemáticos, denominados de alta resolución, simulan cualquier número de partículas. Entre los más usados está el método VOF (Volume of Fluid), el cual es usado para determinar la localización y orientación de las interfases (Jakobsen, 2008), dependiendo del tipo de mezcla: gas-líquido, gas-sólido o líquido-sólido, modelo de naturaleza Euleriana.

Tabla 2
Descripción matemática de los fluidos bifásicos dispersos

Modelo	Descripción matemática de la fase		Aplicación
	Fase continua	Fase dispersa	
Euleriano-Euleriano	Euleriana	Euleriana	Es usado para flujos bifásicos densos en donde un gran número de partículas son consideradas (fracción volumétrica de fase dispersa>10%)
Euleriano-Lagrangiano	Euleriana	Lagrangiana Para cada partícula individual se resuelve la ecuación del movimiento de Newton	Es usado para flujos ligeramente densos o no densos (fracción volumétrica de fase dispersa≤10%). Para mayores a 30% se emplea el Dense Discrete Phase Model

Fuente: (Suzzi, Radl, & Khinast, 2009)

Un esquema útil para escoger el modelo matemático apropiado para la descripción de sistemas multifásicos, viene dado en la Figura 1.3 (Andersson et al., 2011):

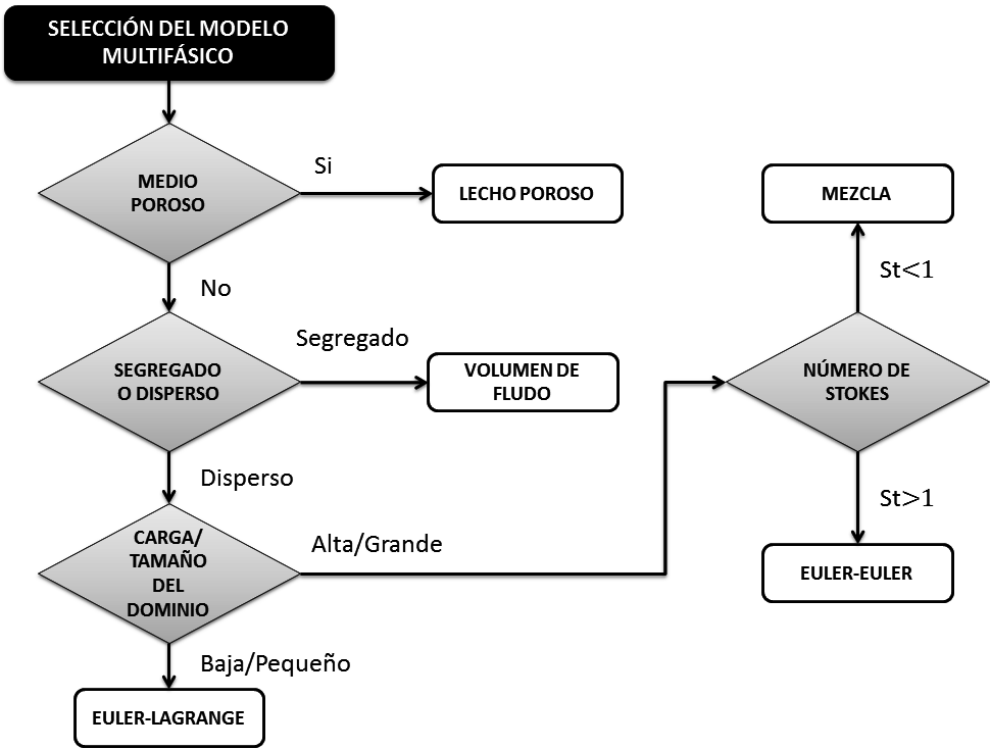


Figura 3 Esquema para la selección de un modelo multifásico. Fuente: Andersson et. al 2011.

Es este trabajo de investigación, se pretende que la fracción volumétrica de la fase dispersa sea pequeña, por lo cual se adoptará el modelo matemático Euleriano-Lagrangiano, de acuerdo al esquema de la Figura 3. Sin embargo, la fracción en volumen de las burbujas de gas puede oscilar en un rango hasta 30%, por lo cual el modelo Lagrangiano se extenderá para cubrir estos valores, modelo denominado como Dense Discrete Phase Model, que se desarrollará en esta investigación.

1.5 Ecuaciones de conservación para la fase continua

Una ecuación de conservación es un estamento matemático que establece que una propiedad extensiva termodinámica no puede crearse ni destruirse, es decir se conserva. Este tipo de propiedades tienen carácter aditivo y

dependen del tamaño del sistema. En mecánica de fluidos, se plantean las ecuaciones de conservación para tres propiedades extensivas particulares: masa, cantidad de movimiento y energía. En los siguientes apartados se desarrollarán las ecuaciones de conservación promediadas para las tres cantidades extensivas antes citadas, para posteriormente incluir el efecto de la turbulencia, presente en prácticamente cualquier proceso industrial.

1.5.1 Teoremas fundamentales

En este apartado se desarrollará una expresión general de conservación para una propiedad extensiva cualquiera. En un fluido bifásico disperso, una de las fases presentes se considera como un medio continuo. En este contexto, supóngase que un medio continuo B constituye la k-ésima fase de un sistema multifásico. De este se selecciona una región fija en el espacio Ω cuya superficie o contorno se representa con Γ (para este caso es una superficie de control), como se ilustra en la parte derecha de la Figura 4.

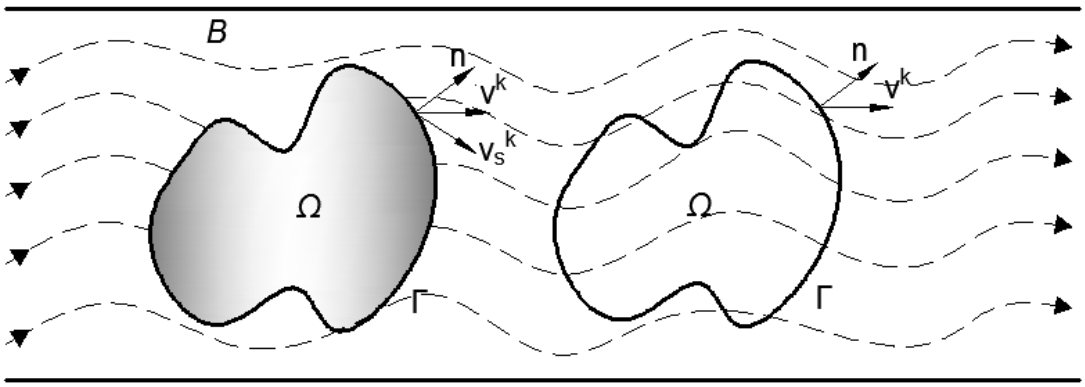


Figura 4 Volumen material (izquierda) y volumen de control (derecha) empleados para el análisis. Fuente: El Autor.

Si cada punto de la superficie circundante se mueve con una velocidad $\mathbf{v_s^k}$, la derivada con respecto al tiempo de una función continua $\Phi^k(\mathbf{r},t)$ toma la siguiente forma (Eu, 2002):

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega} \phi^k(\mathbf{r},t)\, dV \equiv \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t}\phi^k(\mathbf{r},t)\, dV + \oint_{\Gamma} \phi^k \mathbf{n}\cdot\mathbf{v_s^k} ds \tag{1.4}$$

El superíndice k de la función Φ indica que esta función pertenece a la k-ésima fase del medio continuo, mientras que **n** representa al vector unitario normal que apunta hacia el exterior de la superficie o contorno. Aunque su magnitud permanece constante, su dirección cambia localmente de acuerdo a la orientación de la superficie de control Γ. El término $\mathbf{n}\cdot\mathbf{v_s^k}$ ds representa la tasa de volumen ganada causada por el movimiento de un elemento de la superficie de control, y su producto por Φ^k constituye la tasa de entrada de esta cantidad hacia el volumen de control (Deen, 1998). La expresión 1.4 es usada para diferenciar un integral de volumen con límites variables, expresión conocida como la regla de Leibniz en tres dimensiones (Reddy, 2013).

Considérese ahora que cada uno de los elementos de masa del medio se mueven con una velocidad $\mathbf{v^k}(\mathbf{r},t)$, y se encuentran en una región material Ω con una superficie o contorno adherida (Γ es una superficie material en este caso), como se ilustra en la parte izquierda de la Figura 2. Como consecuencia, cada uno de los puntos de la superficie material se mueven a la misma velocidad que los elementos del volumen material ($\mathbf{v_s^k}=\mathbf{v^k}$) y la región contiene una cantidad total fija de masa, debido a que no existen flujos que crucen la superficie material Γ. Con estos antecedentes, la ecuación 1.4 puede reformularse (Reddy, 2013):

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \phi^k(\mathbf{r},t)\, dV \equiv \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t}\phi^k(\mathbf{r},t)\, dV + \oint_{\Gamma} \phi^k \mathbf{n}\cdot\mathbf{v^k} ds \tag{1.5}$$

En la literatura la ecuación 1.5 se conoce como el Teorema de Transporte de Reynolds. Como se observa en la misma, el operador d/dt ha sido substituido por *D/Dt* para hacer hincapié que la derivada con respecto al tiempo de la integral se evalúa sobre una región material. Este operador se conoce con el nombre de derivada sustancial o material (enfoque Lagrangiano) (Demirel, 2007). La ecuación 1.5 establece la relación entre una derivada Lagrangiana de una integral de volumen, con una integral en derivadas Eulerianas. Restando de la ecuación 1.5 de la ecuación 1.4 se obtiene:

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega} \phi^k(\mathbf{r},t)\, dV \equiv \frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \phi^k(\mathbf{r},t)\, dV + \oint_{\Gamma} \phi^k \mathbf{n}\cdot\left(\mathbf{v_s^k} - \mathbf{v^k}\right) ds \tag{1.6}$$

La diferencia vectorial $\mathbf{v_s^k}$- $\mathbf{v^k}$ representa la velocidad del fluido relativa a la velocidad de la superficie, y su integral, el flujo de salida de la propiedad Φ^k de la región Ω. En conjunto, la ecuación 1.6 constituye una relación entre la derivada con respecto al tiempo para la integral sobre una región fija en el espacio y la integral sobre una región material. Esta expresión será de utilidad para la deducción de las ecuaciones de conservación. También serán necesarios los siguientes teoremas del cálculo vectorial:

$$\oint_{\Gamma} \mathbf{nS} ds = \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla}\mathbf{S}\, dV \tag{1.7}$$

$$\oint_{\Gamma} \phi^k \mathbf{n}\cdot\mathbf{S} ds = \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla}\cdot(\phi^k \mathbf{S})\, dV \tag{1.8}$$

$$\oint_{\Gamma} \mathbf{r}\times(\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}) ds = \int_{\Omega} [\mathbf{r}\times(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{S}) + \boldsymbol{\varepsilon}:\mathbf{S}]\, dV \tag{1.9}$$

En las ecuaciones 1.6, 1.7 y 1.8 **S** representa un campo tensorial de orden *n*, Φ^k es una función escalar, **r** es un vector posición y **ε** es un tensor de permutación de tercer orden (Reddy, 2013). Debe destacarse también el uso del teorema del valor cero, representado por la ecuación 1.10:

$$\int_{\Omega} \mathbf{S}\, dV = 0 \rightarrow \boldsymbol{S} = 0 \in \Omega \tag{1.10}$$

Este teorema establece que siendo **S** un campo tensorial continuo de orden n definido en una región arbitraria Ω, si la integral de **S** sobre Ω desaparece, entonces **S** debe desaparecer en Ω (Sadd, 2009).

1.5.2 Ecuación de conservación de la masa

Para deducir la ecuación de conservación de la masa, se iguala el valor de la función continua Φ^k con la densidad de la k-ésima fase del medio continuo $\rho^k(\mathbf{r},t)$. La conservación de la masa en una región material Ω requiere que:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k(\mathbf{r},t)\, dV = 0 \tag{1.11}$$

A partir de la ecuación 1.6, para una región espacial Ω ($\boldsymbol{v_s^k}=\boldsymbol{0}$) la ecuación de conservación de la masa enuncia que:

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega} \rho^k(\mathbf{r},t)\, dV \equiv -\oint_{\Gamma} \rho^k \mathbf{n}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}} ds \tag{1.12}$$

La ecuación 1.12 establece que el cambio con respecto al tiempo de la masa dentro de la región espacial Ω es igual al flujo de masa que ingresa al volumen

de control a través de la superficie de control Γ (se deduce a partir del signo negativo del integral). Aplicando el resultado de la ecuación 1.11 en la 1.5 y realizando operaciones, se tiene:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \rho^k(\mathbf{r}, t)\, dV \equiv -\oint_{\Gamma} \rho^k \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} ds \tag{1.13}$$

Luego, mediante la aplicación del teorema de la divergencia al lado derecho de la ecuación 1.12, se obtiene:

$$\oint_{\Gamma} \rho^k \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} ds = \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) dV \tag{1.14}$$

Incorporando este resultado y realizando operaciones, se llega a lo siguiente:

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t} \rho^k(\mathbf{r}, t) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right)\right] dV = 0 \tag{1.15}$$

Empleando la ecuación 1.10 (teorema del valor cero), se llega a la expresión diferencial de la conservación de la masa:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho^k(\mathbf{r}, t) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) = 0 \tag{1.16}$$

La ecuación 1.16 también se conoce con el nombre de la ecuación de la continuidad y básicamente expresa la conservación local de la masa en cualquier punto de un medio continuo. Esta misma ecuación puede ser expresada de manera diferente:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho^k(\mathbf{r},t) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\rho^k(\mathbf{r},t) + \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\nabla}\rho^k + \rho^k\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}} = 0 \qquad (1.17)$$

Los dos primeros términos a lado derecho de la igualdad representan la derivada material:

$$\frac{D}{Dt}\rho^k(\mathbf{r},t) + \rho^k\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}} = 0 \qquad (1.18)$$

Como se indicó en el apartado 1.2, se necesita derivar las ecuaciones de conservación promediadas para la fase continua. Para iniciar con la deducción, en primer lugar se introduce una función denominada indicador de fase que toma un valor de 1 si el vector posición **r** está en la k-ésima fase en un tiempo particular t, y 0 de lo contrario (Yeoh & Tu, 2009):

$$\Psi^k(x,y,z,t) = \begin{cases} 1, \text{si } \mathbf{r} \in \text{k fase} \\ 0, \text{de lo contrario} \end{cases} \qquad (1.19)$$

Este indicador de fase está relacionado con la velocidad de la interfase $\mathbf{v}^{\mathbf{int}}$. Como se observa en la Figura 5, se ha ampliado una región del fluido bifásico disperso para ilustrar la interacción que tienen la fase continua y dispersa a través de la interfase:

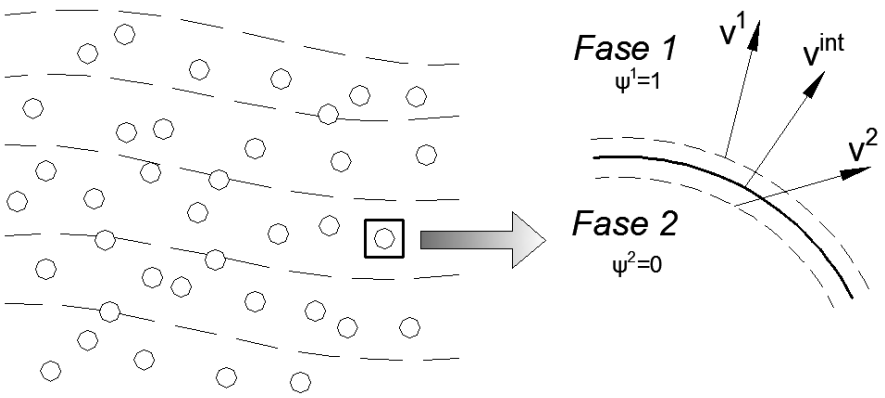


Figura 5 Esquema en donde se muestra las fases interactuando a través de su interfase. Fuente: El Autor.

Para este caso, la función con los valores Ψ^1=1 y Ψ^2=0 describe a las dos fases, notando que estas se mueven a una velocidad distinta en la interfase. Esta función puede considerarse constante para cualquiera de las fases que señale, por lo que su derivada material debe ser igual a cero:

$$\frac{D}{Dt}\Psi^k(x,y,z,t) = \frac{\partial}{\partial t}\Psi^k + \mathbf{v^{int}} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k = 0 \qquad (1.20)$$

De la ecuación 1.20 se puede notar que la única manera en que la derivada material del indicador de fase se anule es que las derivadas parciales del lado derecho de la ecuación 1.20 también lo hagan. Esto indica por tanto que estas derivadas parciales se anulan lejos de la interfase.

Luego, multiplicando el indicador de fase por la ecuación 1.16 se obtiene:

$$\Psi^k \frac{\partial}{\partial t}\rho^k + \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\rho^k \mathbf{v^k}\right) = 0 \qquad (1.21)$$

Ambos términos de la ecuación 1.21 necesitan ser reemplazados a través de equivalentes que incluyan dentro de sus operaciones al indicador de fases. Para ello se usan dos identidades:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k \rho^k) = \Psi^k \frac{\partial \rho^k}{\partial t} + \rho^k \frac{\partial \Psi^k}{\partial t} = 0 \tag{1.22}$$

De donde despejando se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k \rho^k) - \rho^k \frac{\partial \Psi^k}{\partial t} = \Psi^k \frac{\partial \rho^k}{\partial t} \tag{1.23}$$

El segundo término de lado izquierdo de esta igualdad puede ser reemplazado empleando la ecuación 1.20, de donde:

$$\frac{\partial \Psi^k}{\partial t} = -\mathbf{v}^{\mathbf{int}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi^k \tag{1.24}$$

Sustituyéndose en 1.23:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k \rho^k) + \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{int}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi^k = \Psi^k \frac{\partial \rho^k}{\partial t} \tag{1.25}$$

La segunda identidad es:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) = \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) + \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi^k \tag{1.26}$$

De esta expresión:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) - \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi^k = \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) \tag{1.27}$$

Reemplazando los resultados de las ecuaciones 1.25 y 1.27 en la ecuación 1.21 y mediante operaciones se llega a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k \rho^k) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) = \rho^k \left(\mathbf{v}^{\mathbf{k}} - \mathbf{v}^{\mathbf{int}}\right) \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi^k \tag{1.28}$$

Una vez integrado el indicador de fase a la ecuación de conservación de la masa, el siguiente paso es realizar el promediado. En este punto se representará de manera genérica el promediado de ensamble o basado en el volumen con **<·>** en donde el punto representa cualquier cantidad a promediarse. Debe notarse que ambos tipos de promediado resultan esencialmente en las mismas ecuaciones (Yeoh & Tu, 2009).

A continuación se presentan una serie de reglas útiles para el proceso de promediado:

$$\langle f + g \rangle = \langle f \rangle + \langle g \rangle \tag{1.29}$$

$$\langle \langle f \rangle g \rangle = \langle f \rangle \langle g \rangle \tag{1.30}$$

$$\langle \langle c \rangle \rangle = \langle c \rangle \tag{1.31}$$

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle f \rangle \tag{1.32}$$

$$\langle \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathrm{f} \rangle = \boldsymbol{\nabla} \cdot \langle f \rangle \tag{1.33}$$

En las expresiones anteriores, f y g pueden representar tanto funciones escalares, vectoriales o tensoriales. Las ecuaciones 1.29-1.31 se conocen como reglas de Reynolds, la ecuación 1.32 se denomina regla de Leibniz y la ecuación 1.33 es conocida como la regla de Gauss (Lee, 2008). Mediante la aplicación de estas reglas a la ecuación 1.28 resulta:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^k \rho^k) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi^k \rho^k \rangle \tag{1.34}$$

$$\left\langle \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right) \right\rangle = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right\rangle \tag{1.35}$$

$$\left\langle \rho^k \left(\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}} \right) \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi^k \right\rangle = \Lambda^k \tag{1.36}$$

Acomodando todos estos resultados se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi^k \rho^k \rangle + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \right\rangle = \Lambda^k \tag{1.37}$$

El término Λ^k representa el transporte de masa a través de la interfase.

1.5.3 Conservación de la cantidad de movimiento lineal

De un medio continuo B que constituye la k-ésima fase de un sistema multifásico, selecciónese una región material Ω con una superficie o contorno se representa con Γ. De acuerdo a la segunda ley de Newton, la fuerza neta que actúa sobre esta región material producirá un cambio en su cantidad de movimiento lineal:

$$\mathbf{F^k} = \frac{D\mathbf{P^k}}{Dt} \tag{1.38}$$

En donde $\mathbf{P^k}$ representa la cantidad de movimiento lineal. Si se define esta cantidad vectorial en la región material como:

$$\mathbf{P^k} = \int_{\Omega} \rho^k \mathbf{v^k} \, dV \tag{1.39}$$

El término $\rho^k \mathbf{v^k}$ representa la concentración de cantidad de movimiento lineal (momentum lineal por unidad de volumen). Entonces, combinando las ecuaciones 1.38 y 1.39 se tiene (Jakobsen, 2008):

$$\mathbf{F}^{\mathbf{k}} = \frac{D\mathbf{P}^{\mathbf{k}}}{Dt} = \frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^{k}\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\, dV \tag{1.40}$$

Esta es la expresión de la conservación de la cantidad de movimiento lineal para una región material. Antes de deducir la forma euleriana de la ecuación, es necesario analizar la naturaleza de las fuerzas que actúan sobre la región material. Estas pueden ser de dos clases: internas y externas. Las fuerzas internas son las encargadas de mantener unidas unas partes del cuerpo con otras y si se expresan por unidad de área, son conocidas como esfuerzos. Las fuerzas externas son aquellas que se transmiten al cuerpo mediante la acción de campos externos como el gravitacional o el electromagnético. Actúan sobre la masa (o el volumen) de la región material o cuerpo.

A. Fuerzas superficiales y de volumen

Las fuerzas superficiales que actúan en un elemento de área de un medio continuo no solamente dependen de la magnitud sino de la orientación del área. Para indicar dicha orientación se acostumbra a utilizar un vector unitario normal, que por convención, es positivo si apunta hacia afuera del área en cuestión.

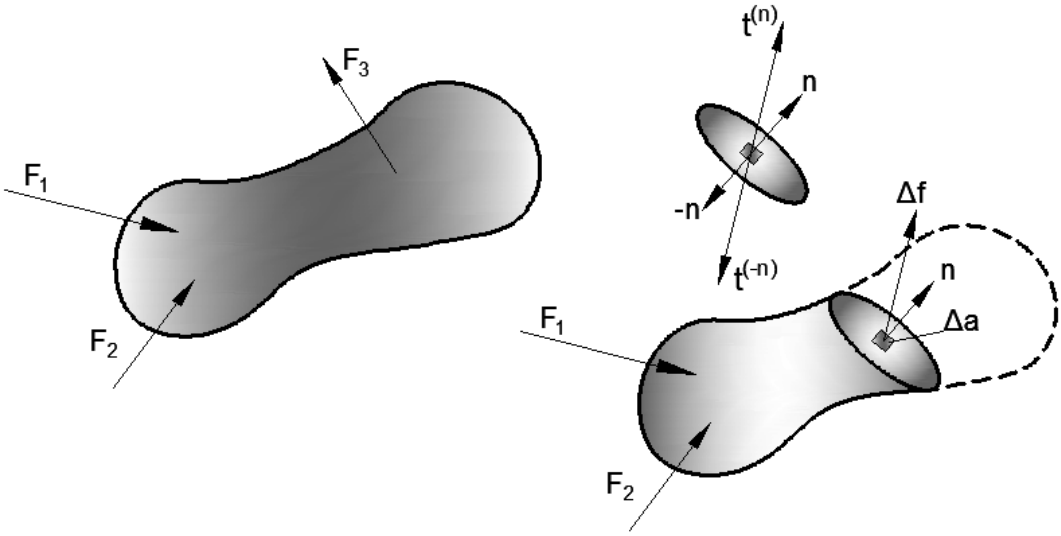


Figura 6 Corte a través de un punto de una región material (cuerpo) de un medio continuo mediante un plano. Se observa el vector de esfuerzos. Fuente: Reddy 2013.

En la Figura 6 se puede reconocer al vector de esfuerzos **t**(**n**), que procede de (Mase, Smelser, & Mase, 2009) :

$$\mathbf{t}(\mathbf{n}) = \lim_{\Delta a \to 0} \frac{\Delta \mathbf{f}(\mathbf{n})}{\Delta a} = \frac{d\mathbf{f}(\mathbf{n})}{da} \tag{1.41}$$

Se puede ver que el vector **t**(**n**) es una función puntual del vector unitario normal **n**, que define la orientación del plano en el cual actúa **t**(**n**). Por la tercera ley de Newton, t(**-n**) = **-t**(**n**). Para establecer la relación entre estos dos vectores, considérese que la región material (cuerpo) sufre una deformación infinitesimal. Entonces bajo esta condición se plantea un tetraedro infinitesimal en coordenadas cartesianas x_1, x_2 *y* x_3 con vectores unitarios $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ y $\mathbf{e}_3$ que puede provenir tanto de un punto al interior de la región material como de la superficie material, cortado por un plano con orientación arbitraria (Reddy, 2013).

Para cumplir con el propósito antes descrito, tómese $\mathbf{t}^{(-n)} = -\mathbf{t}_n$. De la Figura 7 se observa que $-\mathbf{t}_1$, $-\mathbf{t}_2$, $-\mathbf{t}_3$ y $\mathbf{t}_n$ son los vectores de esfuerzo, aplicados correspondientemente a los elementos de área Δa_1, Δa_2, Δa_3 y Δa.

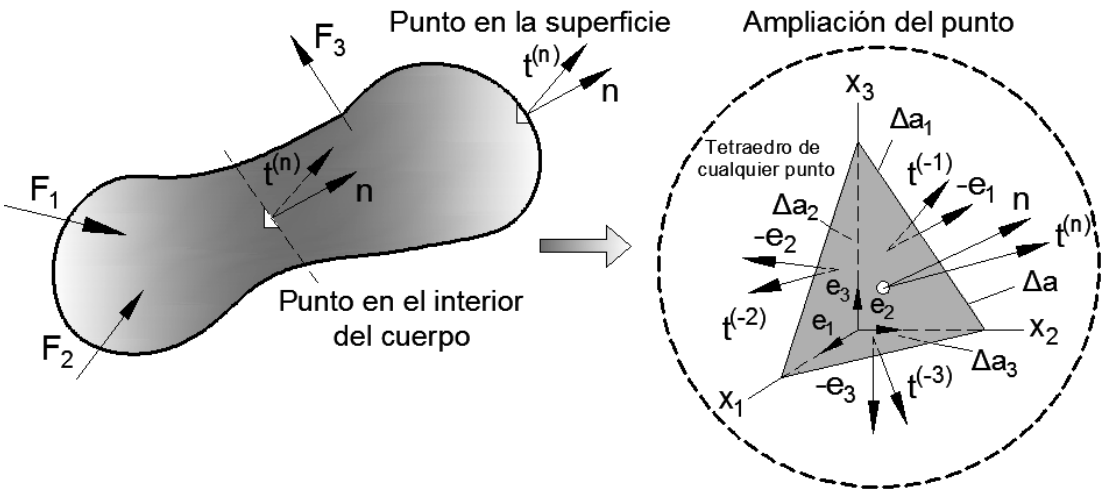


Figura 7 Tetraedro que contiene en sus caras a los vectores de esfuerzo en cada una de sus caras. Fuente: Reddy 2013.

Recordando que la segunda ley de Newton establece que la fuerza neta que actúa sobre un cuerpo es proporcional a la aceleración que le imparte, un balance de todas las fuerzas en el cuerpo se presentaría como:

$$\mathbf{t}\Delta a - \mathbf{t_1}\Delta a_1 - \mathbf{t_2}\Delta a_2 - \mathbf{t_3}\Delta a_3 + \rho\Delta V\mathbf{f} = \rho\Delta V\mathbf{a} \qquad (1.42)$$

En esta ecuación ρ representa la densidad de la región puntual, ΔV es el volumen del tetraedro y **f** es la fuerza que actúa sobre el cuerpo por unidad de masa. Cualquier área puede ser representada mediante un vector normal a la misma con una magnitud proporcional al tamaño de dicha área. Expresado matemáticamente, el vector **Δa**=Δa**n** es la representación vectorial del elemento de área Δa. Luego, genéricamente se puede obtener cada una de los elementos de área Δa_1, Δa_2, Δa_3 en función de Δa si se recuerda que

el elemento de área Δa_n no es más que la proyección del vector **Δa** a lo largo del vector unitario normal $\mathbf{e_n}$:

$$\Delta a_1 = \Delta \mathbf{a} \cdot \mathbf{e_1} = \Delta a\ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_1})$$

$$\Delta a_2 = \Delta \mathbf{a} \cdot \mathbf{e_2} = \Delta a\ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_2}) \qquad (1.43)$$

$$\Delta a_3 = \Delta \mathbf{a} \cdot \mathbf{e_3} = \Delta a\ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_3})$$

Reemplazando las expresiones 1.43 en la ecuación 1.42 y acomodando términos se llega a:

$$\mathbf{t}\Delta a - \mathbf{t_1}\Delta a\ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_1})\ - \mathbf{t_2}\Delta a\ (\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_2}) - \mathbf{t_3}\Delta a(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_3}) = \rho \Delta V(\mathbf{a} - \mathbf{f}) \qquad (1.44)$$

Tomando factor común y dividiendo ambos miembros para Δa se obtiene:

$$\mathbf{t} - \mathbf{t_1}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_1})\ - \mathbf{t_2}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_2}) - \mathbf{t_3}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_3}) = \rho \frac{\Delta V}{\Delta a}(\mathbf{a} - \mathbf{f}) \qquad (1.45)$$

El volumen de un tetraedro es igual a (Δh/3) Δa, por lo tanto:

$$\mathbf{t} - \mathbf{t_1}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_1})\ - \mathbf{t_2}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_2}) - \mathbf{t_3}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{e_3}) = \rho \frac{\Delta h}{3}(\mathbf{a} - \mathbf{f}) \qquad (1.46)$$

Tomando el límite cuando Δh→0 (para colapsar el tetraedro en un punto) y acomodando términos:

$$\mathbf{t} = (\mathbf{t_1}\mathbf{e_1} + \mathbf{t_2}\mathbf{e_2} + \mathbf{t_3}\mathbf{e_3}) \cdot \mathbf{n} \qquad (1.47)$$

El término entre paréntesis se conoce con el nombre de tensor de esfuerzos de Cauchy, se representa con la letra **σ** y tiene la característica de ser simétrico. Finalmente:

$$\mathbf{t}(\mathbf{n}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{T}} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \tag{1.48}$$

Debe destacarse que los resultados obtenidos en la ecuación 1.48 solo son posibles debido a la simetría del tensor de Cauchy. Estos representan la relación entre el vector de esfuerzos y la normal al plano sobre el cual está aplicado. Para cada punto atravesado por un plano arbitrario se tendrán valores diferentes de la ecuación 1.48. Cabe notar que el tensor de Cauchy representa el esfuerzo por unidad de área deformada.

B. Balance de fuerzas para una región material

En un fluido, las fuerzas viscosas y la presión actúan en la superficie de la región material (Deen, 1998). Si $\mathbf{t^k}$ es la fuerza superficial por unidad de área, la fuerza que actúa sobre un diferencial de área superficial será $\mathbf{t^k}ds$. En este mismo sentido, la fuerza que actúa sobre un elemento diferencial de volumen de la región material es igual a $\rho^k\mathbf{f^k}dV$. Por tanto, la fuerza neta que actúa sobre toda región material será:

$$\mathbf{F^k} = \frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k \mathbf{v^k}\, dV = \int_{\Omega} \rho^k \mathbf{f^k}\, dV + \oint_{\Gamma} \mathbf{t^k} ds \tag{1.49}$$

Debido a que el vector de esfuerzos que actúa en la superficie material está relacionado con el tensor de esfuerzos (internos) de Cauchy, a partir de la ecuación 1.49 se llega a:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k \mathbf{v^k}\, dV = \int_{\Omega} \rho^k \mathbf{f^k}\, dV + \oint_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{n} ds \tag{1.50}$$

La ecuación 1.50 representa el balance de cantidad de movimiento lineal en donde se esclarece la naturaleza de las fuerzas que actúan sobre la región material. En su totalidad resume la aplicación de la segunda ley de Newton a una región material Ω de un medio continuo.

C. Conservación de la cantidad de movimiento lineal para una región espacial

Aplicando el teorema de la divergencia a la integral de superficie de la ecuación 1.50:

$$\oint_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} ds = \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} \, dV \tag{1.51}$$

Reemplazando el resultado de la ecuación 1.51 en la ecuación 1.50, y agrupando se tiene:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \rho^{k} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \, dV = \int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} + \rho^{k} \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \right) dV \tag{1.52}$$

Considérese ahora una región espacial Ω con una superficie de control Γ dentro de un medio continuo. Aplicando el teorema de transporte de Reynolds (ecuación 1.5) y reemplazando el valor de Φ^{k} con la concentración de cantidad de movimiento lineal, se obtiene:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \rho^{k} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \, dV = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho^{k} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right) dV + \oint_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \left(\rho^{k} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right) ds \tag{1.53}$$

Aplicando el teorema de la divergencia a la integral de superficie de la ecuación 1.53 y agrupando términos:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k \mathbf{v^k}\, dV = \int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho^k \mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right)\right] dV \tag{1.54}$$

Luego, igualando las ecuaciones 1.52 y 1.54:

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho^k \mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right)\right] dV = \int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} + \rho^k \mathbf{f^k}\right) dV \tag{1.55}$$

Con la ayuda de algunas identidades tensoriales, es posible desarrollar el lado izquierdo de la ecuación 1.55:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho^k \mathbf{v^k}\right) = \rho^k \frac{\partial \mathbf{v^k}}{\partial t} + \mathbf{v^k}\frac{\partial \rho^k}{\partial t} \tag{1.56}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right) = \mathbf{v^k}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k \mathbf{v^k}\right) + \rho^k \mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} \tag{1.57}$$

Combinado los resultados de las ecuaciones 1.56 y 1.57, con la ecuación 1.55:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho^k \mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right) \\ = \mathbf{v^k}\left[\frac{\partial \rho^k}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k \mathbf{v^k}\right)\right] + \rho^k\left[\frac{\partial \mathbf{v^k}}{\partial t} + \mathbf{v^k}\cdot\nabla\mathbf{v^k}\right]\end{aligned} \tag{1.58}$$

Analizando la ecuación 1.58 se puede observar que el primer término del lado derecho de la igualdad corresponde a la ecuación de la continuidad, por lo que toma un valor de cero. Por tanto:

$$\int_{\Omega} \left[\rho^k \left(\frac{\partial \mathbf{v}^{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right) - \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} + \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \right) \right] dV = 0 \tag{1.59}$$

Aplicando el teorema del valor cero (ecuación 1.10) y escribiendo el primer término dentro del integral en su forma de derivada material:

$$\rho^k \left(\frac{\partial \mathbf{v}^{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right) = \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} + \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \tag{1.60}$$

La ecuación 1.59 expresa la conservación de la cantidad de movimiento lineal para una región espacial Ω, válida para cualquier fluido que cumpla con la condición de ser continuo.

El tensor de esfuerzos de Cauchy puede representarse como la suma de otros dos tensores: uno denominado hidrostático o esférico y otro conocido como desviador (Sadd, 2009). El primero de ellos solo tiene elementos diferentes de cero en la diagonal y se representa como –P$\boldsymbol{\delta}$**,** en donde P es la presión termodinámica y $\boldsymbol{\delta}$ el tensor identidad. De la mecánica de fluidos se desprende el hecho de que en un punto determinado de un fluido la presión actúa igualmente en todas las direcciones. En este sentido, el producto de la presión y el tensor identidad garantiza también que esta actúe en forma normal (motivo por el cual el tensor solo tiene elementos en su diagonal). El signo negativo se usa por convención para que los esfuerzos de compresión sean positivos (Deen, 1998). Por tanto:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} = -P^k \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \tag{1.61}$$

En donde $\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}$ es el tensor de esfuerzos viscosos (la parte desviadora). Este tensor se relaciona con la tasa de deformación del fluido. Debido a que todos los elementos que se encuentran fuera de la diagonal del tensor de esfuerzos de Cauchy igualan a aquellos del tensor de esfuerzos viscosos, este último se

considera simétrico (Deen, 1998). Tomando el divergente en ambos lados de la ecuación 1.61:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(-P^k \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right) = -\boldsymbol{\nabla} P^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \tag{1.62}$$

Reemplazando en la ecuación 1.62 este resultado:

$$\rho^k \left(\frac{\partial \mathbf{v}^{\mathbf{k}}}{\partial t} + \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) = \rho^k \frac{D\mathbf{v}^{\mathbf{k}}}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla} P^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} + \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \tag{1.63}$$

La ecuación 1.63 es llamada la ecuación de momentum lineal de Cauchy. Esta es el punto de partida para analizar tanto fluido Newtonianos como no Newtonianos. En la Tabla 3 se presenta un análisis de cada uno de los términos que intervienen en la ecuación 1.63 (Bird, Stewart, & Lightfoot, 2002):

Tabla 3
Términos de la ecuación de Cauchy

Término	Definición
$\rho^k \frac{D\mathbf{v}^{\mathbf{k}}}{Dt}$	Masa por unidad de volumen multiplicada por la aceleración
$\boldsymbol{\nabla} P^k$	Fuerza de presión sobre la región espacial Ω por unidad de volumen
$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}$	Fuerza viscosa sobre la región espacial Ω por unidad de volumen
$\rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}$	Fuerza gravitacional sobre la región espacial Ω por unidad de volumen

Fuente: (Bird et al., 2002)

Como en el caso de la ecuación de conservación de la masa, antes de iniciar el proceso de promediado de la ecuación 1.63 se introducirá el indicador de fase, multiplicándolo por cada uno de los términos de la ecuación 1.63:

$$\Psi^k \rho^k \frac{\partial \mathbf{v^k}}{\partial t} + \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v^k} = -\Psi^k \boldsymbol{\nabla} P^k + \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} + \Psi^k \rho^k \mathbf{f^k} \tag{1.64}$$

Mediante las siguientes identidades, cada uno de los términos de la ecuación 1.64 será reemplazado excepto el último:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) = \Psi^k \rho^k \frac{\partial \mathbf{v^k}}{\partial t} + \mathbf{v^k} \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k \rho^k\right) \tag{1.65}$$

El segundo término del lado derecho de la igualdad contiene una derivada parcial conocida. A partir de la ecuación 1.28, se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k \rho^k\right) = \rho^k\left(\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}\right) \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi^k - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) \tag{1.66}$$

Para el término de advección:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right) = \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla}\left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) + \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v^k} \tag{1.67}$$

Para los términos de presión y el tensor de esfuerzos viscosos:

$$\boldsymbol{\nabla}\left(\Psi^k P^k\right) = \Psi^k \boldsymbol{\nabla} P^k + P^k \boldsymbol{\nabla} \Psi^k \tag{1.68}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right) = \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \Psi^k \tag{1.69}$$

Como se observa, las ecuaciones 1.64-1.69 contienen términos pertenecientes a la ecuación 1.64. Reemplazándolos y realizando operaciones:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right) = -\boldsymbol{\nabla}(\Psi^k P^k) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right) + \Psi^k \rho^k \mathbf{f^k} + \left[\rho^k \mathbf{v^k}\left(\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}\right) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k + P^k \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k\right] \tag{1.70}$$

Como se analizó anteriormente, el procedimiento de promediado sea por el método basado en el volumen o el de ensamble llegan a las mismas ecuaciones mediante el uso de las reglas de Reynolds, Leibniz y Gauss (ecuaciones 1.29-1.33). Aplicando estas reglas se obtiene:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right)\right\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right\rangle \tag{1.71}$$

$$\left\langle \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right)\right\rangle = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right\rangle \tag{1.72}$$

$$\langle \boldsymbol{\nabla}(\Psi^k P^k)\rangle = \boldsymbol{\nabla}\langle \Psi^k P^k\rangle \tag{1.73}$$

$$\left\langle \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right)\right\rangle = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right\rangle \tag{1.74}$$

$$\left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{f^k}\right\rangle = \langle \Psi^k\rangle\left\langle \rho^k \mathbf{f^k}\right\rangle \tag{1.75}$$

$$\left\langle \rho^k \mathbf{v^k}\left(\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}\right) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k + P^k \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k\right\rangle = \left\langle \rho^k \mathbf{v^k}\left(\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}\right) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k\right\rangle + \langle P^k\rangle\langle \boldsymbol{\nabla}\Psi^k\rangle - \left\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k\right\rangle = \aleph^k \tag{1.76}$$

Finalmente, aplicando los resultados promediados se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right\rangle + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right\rangle = -\boldsymbol{\nabla}\langle \Psi^k P^k\rangle + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right\rangle + \langle \Psi^k\rangle\left\langle \rho^k \mathbf{f^k}\right\rangle + \aleph^k \tag{1.77}$$

En donde $\aleph^k$ representa las fuentes de intercambio de cantidad de movimiento lineal a través de la interfase. Esta es la segunda ecuación promediada de la fase continua.

1.5.4 Ecuación de conservación de la energía

La primera ley de la termodinámica establece que la energía total de una región material es igual a la suma del calor aportado desde los alrededores hacia el fluido (medio continuo) y el trabajo realizado por los alrededores sobre el fluido. Esta misma ley puede formularse para sistemas de flujo considerando tasas de cambio de la energía total, calor y trabajo con respecto al tiempo.

Para deducir la primera ley de la termodinámica existen dos enfoques: i) incluir la fuerza gravitacional en la energía total y, ii) incluir un ingreso de energía resultante del trabajo de la fuerza gravitacional. Para simplificar los cálculos se optará por la segunda vía (Deen, 1998). Por tanto, para una región material Ω, la función Φ^k toma ahora el valor de la de la energía total E^k representada por la suma de las energías cinética K^k y la energía interna U^k. Entonces:

$$\frac{D}{Dt}(E^k) = \frac{D}{Dt}(K^k + U^k) = \dot{Q}^k + \dot{W}^k \tag{1.78}$$

En la ecuación 1.78, tanto el calor añadido al sistema $\dot{Q}^k$ y el trabajo realizado sobre el sistema $\dot{W}^k$ por los alrededores se consideran como positivos, respetando las convenciones actuales respecto a los signos. En la región material, la energía cinética y la energía interna vienen representadas por:

$$K^k = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho^k \mathbf{v^k} \cdot \mathbf{v^k} dV \tag{1.79}$$

$$U^k = \int_{\Omega} \rho^k u^k \, dV \tag{1.80}$$

En la ecuación 1.79 el producto escalar $\mathbf{v^k} \cdot \mathbf{v^k}$ representa a v^2, es decir, a la magnitud de la velocidad elevada al cuadrado. En la ecuación 1.80, u^k es la energía interna específica, es decir, la energía interna extensiva U^k por unidad de masa. Reemplazando las definiciones dadas por las ecuaciones 1.79 y 1.80 en la ecuación 1.78 se obtiene:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} \rho^k \left(\frac{1}{2} \mathbf{v^k} \cdot \mathbf{v^k} + u^k \right) dV = \dot{Q}^k + \dot{W}^k \tag{1.81}$$

Antes de expresar la ecuación 1.81 para una región espacial, es decir en la forma euleriana, primero conviene averiguar las contribuciones energéticas que se dan a través de la superficie material: los flujos de calor y trabajo.

El calor se define como una forma de energía en tránsito, que fluye desde las regiones de más alta temperatura hacia las regiones de más baja temperatura en un sistema termodinámico. A partir del planteamiento básico de la primera ley de la termodinámica, es decir Q=ΔE-W, podría decirse que el calor es la diferencia entre el cambio de la energía total en la región material Ω y el trabajo real realizado sobre la misma a través de la superficie material Γ (Tester & Modell, 1997). El flux de calor (flujo de calor por unidad de área) $\mathbf{q^k}$ que ingresa a través de la superficie material Γ, para fluidos puros a moderadas temperaturas se calcula a través de la ley de Fourier (Deen, 1998):

$$\mathbf{q_c^k} = -k\boldsymbol{\nabla}T^k \tag{1.82}$$

Sin embargo, para mezclas de fluidos, flujos multifásicos y gases a alta temperatura con contribuciones adicionales, la definición tiene que contemplar al flux de calor intercambiado por radiación $\mathbf{q_r^k}$ y a un término especial denominado difusión térmica de Dufour $\mathbf{q_x^k}$, que se considera casi siempre despreciable (Deen, 1998):

$$\mathbf{q^k} = \mathbf{q_c^k} + \mathbf{q_r^k} + \mathbf{q_x^k} \tag{1.83}$$

Por tanto, la ecuación 1.83 debería constar solo de las contribuciones por conducción y radiación. Además, el flujo de calor también puede ser generado por una fuente interna que se encuentre dentro de la región material Ω, representada como r_h^k (generación interna de calor por unidad de masa). Colocando en una ecuación todas estas aportaciones, la ecuación que describe el flujo de calor en la región material viene dada por:

$$\dot{Q}^k = -\oint_{\Gamma} \mathbf{q^k} \cdot \mathbf{n} ds + \int_{\Omega} \rho^k r_h^k \, dV \tag{1.84}$$

Debe notarse que el signo negativo de la primera integral de la ecuación 1.84 corrobora el hecho de que el calor ingresa al volumen material a través de Γ. Aplicando el teorema de la divergencia a la integral de superficie se tiene:

$$\dot{Q}^k = -\int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} dV + \int_{\Omega} \rho^k r_h^k \, dV = \int_{\Omega} \left[-\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} + \rho^k r_h^k\right] dV \tag{1.85}$$

El flujo de trabajo o potencia que ingresa a la región material Ω, provendrá de dos contribuciones: la potencia ingresada por fuerzas superficiales externas por unidad de área que actúan en la superficie material Γ y las

fuerzas que actúan sobre el cuerpo por unidad de volumen de la región material Ω:

$$\dot{W}^k = \oint_{\Gamma} \mathbf{t}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} ds + \int_{\Omega} \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \, dV \tag{1.86}$$

La ecuación 1.86 puede ser transformada a una forma más conveniente, aplicando la ecuación 1.48, reemplazando al vector de esfuerzos por su equivalente:

$$\dot{W}^k = \oint_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} ds + \int_{\Omega} \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \, dV \tag{1.87}$$

Y aplicando el teorema de la divergencia a la integral de superficie de la ecuación 1.87:

$$\dot{W}^k = \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) dV + \int_{\Omega} \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \, dV \tag{1.88}$$

Recordando que el tensor de Cauchy puede descomponerse en su parte esférica y desviadora, mediante la ecuación 1.61 se llega a:

$$\dot{W}^k = \int_{\Omega} \left[-\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(P^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right)\right] dV + \int_{\Omega} \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \, dV \tag{1.89}$$

Por lo tanto, agrupando se tiene:

$$\dot{W}^k = \int_{\Omega} \left[-\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(P^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) + \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right] dV \tag{1.90}$$

Combinando las ecuaciones que describen el flujo de calor y la potencia que ingresan a la región material (ecuaciones 1.85 y 1.90) con la ecuación 1.81:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k} + u^k\right) dV$$

$$= \int_{\Omega} \left[-\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{q^k} + \rho^k r_h^k\right] dV \tag{1.91}$$

$$+ \int_{\Omega} \left[-\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(P^k\mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v^k}\right) + \rho^k\mathbf{f^k}\cdot\mathbf{v^k}\right] dV$$

En este punto es conveniente pasar la ecuación 1.91 a su forma euleriana, empleando el teorema de transporte de Reynolds, para lo cual Ω es ahora la región espacial o volumen de control tomada para el análisis y Γ es la superficie de control:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k} + u^k\right) dV$$

$$= \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t}\rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k} + u^k\right) dV \tag{1.92}$$

$$+ \oint_{\Gamma} \rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k} + u^k\right) \mathbf{n}\cdot\mathbf{v^k} ds$$

Aplicando el teorema de la divergencia a la integral de superficie de la ecuación 1.92, se obtiene:

$$\oint_{\Gamma} \rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k} + u^k\right) \mathbf{n}\cdot\mathbf{v^k} ds = \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\rho^k\mathbf{v^k}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k} + u^k\right)\right] dV \tag{1.93}$$

Entonces, agrupando términos:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) dV = \int_{\Omega} \left[\frac{\partial}{\partial t}\rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\rho^k \mathbf{v^k}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)\right]\right] dV \tag{1.94}$$

El integral de volumen de lado derecho de la igualdad puede descomponerse:

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\rho^k \mathbf{v^k}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)\right] = \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k\mathbf{v^k}\right) + \rho^k\mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) \tag{1.95}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho^k\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) = \rho^k\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) + \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)\frac{\partial\rho^k}{\partial t} \tag{1.96}$$

Combinando las ecuaciones 1.95 y 1.96, tomando factor común y agrupando términos se llega a:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho^k\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\rho^k\mathbf{v^k}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)\right] = \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)\left[\frac{\partial\rho^k}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\rho^k\mathbf{v^k}\right)\right] + \rho^k\left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) + \mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)\right] \tag{1.97}$$

El primer término del lado derecho de la igualdad contiene entre corchetes a la ecuación de conservación de la masa, que es equivalente a cero. Por tanto:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)dV = \int_{\Omega} \rho^k \left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)\right]dV \tag{1.98}$$

Como se observa en la ecuación 1.98, el lado derecho de la ecuación representa a la derivada material de la energía total, entonces:

$$\frac{D}{Dt}\int_{\Omega} \rho^k \left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)dV = \int_{\Omega} \rho^k \frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)dV \tag{1.99}$$

Finalmente de la ecuación 1.91:

$$\int_{\Omega} \rho^k \frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)dV = \int_{\Omega} \left[-\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{q^k}+\rho^k r_h^k\right]dV + \int_{\Omega} \left[-\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(P^k\mathbf{v^k}\right)+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v^k}\right)+\rho^k\mathbf{f^k}\cdot\mathbf{v^k}\right]dV \tag{1.100}$$

Agrupando todos los términos bajo un solo integral de volumen y aplicando el teorema del valor cero (ecuación 1.10):

$$\rho^k \frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{q^k}+\rho^k r_h^k-\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(P^k\mathbf{v^k}\right)+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v^k}\right)+\rho^k\mathbf{f^k}\cdot\mathbf{v^k} \tag{1.101}$$

Esta es la forma más general de la ecuación de conservación de la energía para una región espacial Ω que intercambia flujos de calor y trabajo con sus alrededores a través de la superficie de control Γ. A continuación se presenta un análisis del significado de cada uno de los términos de la ecuación 1.101 (Bird et al., 2002):

Tabla 4
Términos de la ecuación general de conservación de la energía

Término	Definición
$\rho^k \frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k} \cdot \mathbf{v^k} + u^k\right)$	Velocidad de ganancia de energía por unidad de volumen
$-\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k}$	Velocidad de entrada de energía por transferencia de calor por unidad de volumen
$\rho^k r_h^k$	Velocidad de generación de energía dentro de la región espacial Ω por unidad de volumen
$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(P^k \mathbf{v^k}\right)$	Potencia comunicada al fluido por unidad de volumen debido a la fuerzas de presión
$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^\mathbf{k} \cdot \mathbf{v^k}\right)$	Potencia comunicada al fluido por unidad de volumen debido a las fuerzas viscosas
$\rho^k \mathbf{f^k} \cdot \mathbf{v^k}$	Potencia comunicada al fluido por unidad de volumen debido a las fuerzas externas que actúan sobre el cuerpo (ejm: gravitacionales)

Fuente: (Bird et al., 2002)

A. Ecuación de conservación de la energía mecánica

Puede ser más útil para los análisis energéticos que la ecuación 1.101 se exprese solo en función de la energía interna, para lo cual se deben realizar algunas manipulaciones matemáticas, dadas por las ecuaciones:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(P^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) = P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} + \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla} P^k \tag{1.102}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) = \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right) + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} : \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \tag{1.103}$$

Por tanto:

$$\begin{aligned} \rho^k \frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} + u^k\right) \\ = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q}^{\mathbf{k}} + \rho^k r_h^k - P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} - \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla} P^k + \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \\ \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right) + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} : \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} + \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \end{aligned} \tag{1.104}$$

Tomando factor común:

$$\begin{aligned} \rho^k \frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} + u^k\right) \\ = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q}^{\mathbf{k}} + \rho^k r_h^k - P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} + \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \\ \cdot \left(-\boldsymbol{\nabla} P^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} + \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}\right) + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} : \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \end{aligned} \tag{1.105}$$

El término entre paréntesis representa el lado derecho de la ecuación de Cauchy del balance de cantidad de movimiento lineal. Introduciendo su equivalente:

$$\rho^k \frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{q^k}+\rho^k r_h^k - P^k\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v^k}+\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\left(\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}:\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} \tag{1.106}$$

Este último término introducido puede expandirse de la siguiente manera:

$$\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\left(\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)=\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\left(\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right) \tag{1.107}$$

Aplicando la siguiente identidad vectorial:

$$\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}=\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}\right)-\mathbf{v^k}\times\left(\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{v^k}\right) \tag{1.108}$$

Entonces:

$$\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\left(\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right) = \rho^k\mathbf{v^k}\cdot\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t} + \rho^k\left[\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}\right)-\mathbf{v^k}\cdot\left[\mathbf{v^k}\times\left(\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{v^k}\right)\right]\right] \tag{1.109}$$

Luego, reconociendo que:

$$\mathbf{v^k}\cdot\left[\mathbf{v^k}\times\left(\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{v^k}\right)\right]=\mathbf{v^k}\cdot\left[-\boldsymbol{\nabla}\times\left(\mathbf{v^k}\times\mathbf{v^k}\right)\right]=0 \tag{1.110}$$

Se obtiene:

$$\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\left(\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)=\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}\right) \tag{1.111}$$

De la ecuación 1.111 se puede deducir que:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}\right)=\frac{1}{2}\left(\mathbf{v^k}\cdot\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}\cdot\mathbf{v^k}\right)=\mathbf{v^k}\cdot\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t} \tag{1.112}$$

Reemplazando este resultado en la ecuación 1.111:

$$\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\left(\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)=\rho^k\left[\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}\right)+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}\right)\right] \tag{1.113}$$

O equivalentemente:

$$\rho^k\mathbf{v^k}\cdot\left(\frac{\partial\mathbf{v^k}}{\partial t}+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)=\rho^k\left[\frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}\right)\right] \tag{1.114}$$

Por tanto:

$$\begin{aligned}\rho^k\frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}+u^k\right)&\\ &=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{q^k}+\rho^k r_h^k-P^k\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v^k}+\rho^k\left[\frac{D}{Dt}\left(\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k}\right)\right]\\ &\quad+\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}:\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\end{aligned} \tag{1.115}$$

Llevando este nuevo término introducido al lado izquierdo de la ecuación, tomando factor común y realizando operaciones se llega a:

$$\rho^k\frac{D}{Dt}\left(u^k\right)=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{q^k}+\rho^k r_h^k-P^k\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v^k}+\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}:\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} \tag{1.116}$$

Esta es la llamada ecuación de energía mecánica (Deen, 1998). A continuación se analizarán cada uno de los términos de la ecuación de la ecuación de energía mecánica:

Tabla 5
Términos de la ecuación de energía mecánica

Término	Definición
$\rho^k \frac{D}{Dt}(u^k)$	Velocidad de ganancia de energía interna por unidad de volumen
$-\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q}^{\mathbf{k}}$	Velocidad de entrada de energía interna por transferencia de calor por unidad de volumen
$\rho^k r_h^k$	Velocidad de generación de energía interna dentro de la región espacial Ω por unidad de volumen
$P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}}$	Velocidad reversible de aumento de la energía interna por unidad de volumen debido a la compresión
$\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} : \boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}^{\mathbf{k}}$	Velocidad irreversible de aumento de energía interna por unidad de volumen debido a la disipación viscosa

Fuente: (Bird et al., 2002)

B. Ecuación de conservación de la entalpía específica

La ecuación 1.116 puede expresarse en función de la entalpía específica, si se recuerda que:

$$u^k = h^k - \frac{P^k}{\rho^k} \tag{1.117}$$

Para poder expresar la ecuación de conservación de la energía en función de la entalpía, primero se desarrollará la derivada temporal de la expresión 1.117:

$$\begin{aligned} \rho^k \frac{D}{Dt}\left(h^k - \frac{P^k}{\rho^k}\right) &= \rho^k \frac{Dh^k}{Dt} - \rho^k \left[\frac{1}{(\rho^k)^2}\left(\rho^k \frac{DP^k}{Dt} - P^k \frac{D\rho^k}{Dt}\right)\right] \\ &= \rho^k \frac{Dh^k}{Dt} - \frac{DP^k}{Dt} + \frac{P^k}{\rho^k}\frac{D\rho^k}{Dt} \end{aligned} \tag{1.118}$$

A partir de la ecuación de la continuidad (ecuación 1.16):

$$\frac{\partial \rho^k}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\rho^k \mathbf{v^k}\right) = \frac{\partial \rho^k}{\partial t} + \rho^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} + \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} \rho^k = 0 \tag{1.119}$$

Definiendo la derivada material de la densidad de la k-ésima fase del medio continuo:

$$\frac{D\rho^k}{Dt} = \frac{\partial \rho^k}{\partial t} + \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} \rho^k \tag{1.120}$$

Las ecuaciones 1.119 y 1.120 se pueden combinar con lo cual se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{D\rho^k}{Dt} = -\rho^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} \tag{1.121}$$

Reemplazando la ecuación 1.121 en la ecuación 1.118:

$$\rho^k \frac{D}{Dt}\left(h^k - \frac{P^k}{\rho^k}\right) = \rho^k \frac{Dh^k}{Dt} - \frac{DP^k}{Dt} - P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} \tag{1.122}$$

Entonces:

$$\rho^k \frac{Dh^k}{Dt} - \frac{DP^k}{Dt} - P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} + \rho^k r_h^k - P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} : \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v^k} \tag{1.123}$$

Eliminando los términos repetidos en ambos lados de la igualdad, y despejando:

$$\rho^k \frac{Dh^k}{Dt} = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} + \rho^k r_h^k + \frac{DP^k}{Dt} + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} : \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v^k} \tag{1.124}$$

Esta última ecuación es la expresión general de la conservación de la energía en términos de la entalpía específica. Equivalentemente se puede expresar de la siguiente manera:

$$\rho^k\left(\frac{\partial h^k}{\partial t}+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}h^k\right)=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{q^k}+\rho^k r_h^k+\left(\frac{\partial P^k}{\partial t}+\mathbf{v^k}\cdot\boldsymbol{\nabla}P^k\right)+\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}:\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} \qquad (1.125)$$

C. Ecuación de conservación de la entalpía total

Al estudiar el flujo de fluidos, algunas ecuaciones se pueden simplificar si se introduce el estado de estancamiento isentrópico, que se obtiene a partir de un fluido que sufre una desaceleración adiabática reversible hasta llegar a una velocidad de cero. Si se aplica la primera ley de la termodinámica para un fluido en condiciones estacionarias en el punto de estancamiento, se obtiene (Borgnakke & Sonntag, 2009):

$$H^k=h^k+\frac{1}{2}\mathbf{v^k}\cdot\mathbf{v^k} \qquad (1.126)$$

La ecuación 1.126 define a la entalpía de estancamiento válida en un punto en donde la velocidad del fluido se ha detenido por completo. Por otra parte, la entalpía total se define en cada punto de un campo de flujo, y es la suma de la entalpía asociada con la temperatura y la entalpía asociada con la presión dinámica, ambas evaluadas en cada punto. La entalpía total es la misma en cada punto de un campo de flujo, así que la entalpía de estancamiento evaluada en el punto de estancamiento es idéntica a la entalpía total en cualquier punto del campo de flujo. Por lo tanto la ecuación 1.126 describe a la entalpía total.

La entalpía específica h^k viene definida por la ecuación 1.117. Reemplazando el valor de h^k en la ecuación 1.126 se tiene:

$$H^k = u^k + \frac{1}{2}\mathbf{v^k} \cdot \mathbf{v^k} + \frac{P^k}{\rho^k} = E^k + \frac{P^k}{\rho^k} \tag{1.127}$$

Este resultado se puede reemplazar en la ecuación 1.101 de tal manera que se puede obtener una ecuación de conservación en función de la entalpía total. En primer lugar, se remplazará la energía total por su equivalente dado por la ecuación 1.127, para luego tomar la derivada temporal de este término introducido:

$$\begin{aligned} \rho^k \frac{D}{Dt}\left(H^k - \frac{P^k}{\rho^k}\right) &= \rho^k \frac{DH^k}{Dt} - \rho^k \left[\frac{1}{(\rho^k)^2}\left(\rho^k \frac{DP^k}{Dt} - P^k \frac{D\rho^k}{Dt}\right)\right] \\ &= \rho^k \frac{DH^k}{Dt} - \frac{DP^k}{Dt} + \frac{P^k}{\rho^k}\frac{D\rho^k}{Dt} \end{aligned} \tag{1.128}$$

Con un procedimiento parecido al aplicado en la sección 1.5.4.2 se llega a la conclusión de que:

$$\frac{D\rho^k}{Dt} = -\rho^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} \tag{1.129}$$

Reemplazando la ecuación 1.129 en la ecuación 1.128:

$$\rho^k \frac{D}{Dt}\left(H^k - \frac{P^k}{\rho^k}\right) = \rho^k \frac{DH^k}{Dt} - \frac{DP^k}{Dt} - P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} \tag{1.130}$$

Aplicando el resultado obtenido de la ecuación 1.130 en la ecuación 1.101, expandiendo el término de potencia por unidad de volumen debido a las fuerzas de presión mediante la ecuación 1.102 y desarrollando la derivada material de la presión termodinámica:

$$\rho^k \frac{DH^k}{Dt} - \frac{\partial P^k}{\partial t} - \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} P^k - P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} + \rho^k r_h^k - P^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k} - \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} P^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^\mathbf{k} \cdot \mathbf{v^k}\right) + \rho^k \mathbf{f^k} \cdot \mathbf{v^k} \tag{1.131}$$

Finalmente, eliminando términos de ambos miembros de la igualdad:

$$\rho^k \frac{DH^k}{Dt} = \frac{\partial P^k}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} + \rho^k r_h^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^\mathbf{k} \cdot \mathbf{v^k}\right) + \rho^k \mathbf{f^k} \cdot \mathbf{v^k} \tag{1.132}$$

Esta es la forma de conservación de la energía en función de la entalpía total. Esta es la forma más frecuentemente usada en las investigaciones de fluidos multifásicos (Yeoh & Tu, 2009).

Para iniciar el proceso de promediado, conviene desarrollar la derivada material presente en la ecuación 1.132:

$$\rho^k \frac{\partial H^k}{\partial t} + \rho^k \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} H^k = \frac{\partial P^k}{\partial t} - \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} + \rho^k r_h^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^\mathbf{k} \cdot \mathbf{v^k}\right) + \rho^k \mathbf{f^k} \cdot \mathbf{v^k} \tag{1.133}$$

A continuación, se multiplica el indicador de fase por cada uno de los términos de la ecuación 1.133:

$$\Psi^k \rho^k \frac{\partial H^k}{\partial t} + \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} H^k = \Psi^k \frac{\partial P^k}{\partial t} - \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} + \Psi^k \rho^k r_h^k + \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^\mathbf{k} \cdot \mathbf{v^k}\right) + \Psi^k \rho^k \mathbf{f^k} \cdot \mathbf{v^k} \tag{1.134}$$

Mediante el uso de las siguientes identidades cada uno de los términos de la ecuación 1.134 serán remplazados:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k \rho^k H^k) = \Psi^k \rho^k \frac{\partial H^k}{\partial t} + H^k \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k \rho^k) \tag{1.135}$$

La derivada del segundo término de lado derecho de la igualdad puede ser reemplazada por la ecuación 1.28:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k \rho^k) = \rho^k \left(\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}\right) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) \tag{1.136}$$

Por tanto:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k \rho^k H^k) = \Psi^k \rho^k \frac{\partial H^k}{\partial t} \\ + H^k \left[\rho^k \left(\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}\right) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right)\right] \end{aligned} \tag{1.137}$$

Para el término de advección:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k H^k \mathbf{v^k}\right) = H^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) + \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla} H^k \tag{1.138}$$

Para el resto de términos se procede de manera similar:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^k P^k) = \Psi^k \frac{\partial P^k}{\partial t} + P^k \frac{\partial \Psi^k}{\partial t} \tag{1.139}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \mathbf{q^k}\right) = \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q^k} + \mathbf{q^k} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k \tag{1.140}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \boldsymbol{\tau}^\mathbf{k} \cdot \mathbf{v^k}\right) = \Psi^k \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\boldsymbol{\tau}^\mathbf{k} \cdot \mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\tau}^\mathbf{k} \cdot \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k \tag{1.141}$$

Despejando de las ecuaciones 1.137-1.141 los términos correspondientes a la ecuación 1.134 y realizando operaciones se llega a:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k \rho^k H^k\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k H^k \mathbf{v^k}\right)$$
$$= \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k P^k\right) - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \mathbf{q^k}\right) + \Psi^k \rho^k r_h^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v^k}\right)$$
$$+ \Psi^k \rho^k \mathbf{f^k} \cdot \mathbf{v^k} + H^k \rho^k \left(\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}\right) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - P^k \frac{\partial \Psi^k}{\partial t} + \mathbf{q^k} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k \tag{1.142}$$

Una vez introducido el indicador de fase, se procede a realizar el procedimiento de promediado mediante el empleo de las reglas de Reynolds, Leibniz y Gauss (ecuaciones 1.29-1.33):

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k \rho^k H^k\right)\right\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\left\langle \Psi^k \rho^k H^k \right\rangle \tag{1.143}$$

$$\left\langle \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \rho^k H^k \mathbf{v^k}\right)\right\rangle = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \rho^k H^k \mathbf{v^k} \right\rangle \tag{1.144}$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^k P^k\right)\right\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\left\langle \Psi^k P^k \right\rangle \tag{1.145}$$

$$\left\langle \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \mathbf{q^k}\right)\right\rangle = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \mathbf{q^k} \right\rangle \tag{1.146}$$

$$\left\langle \Psi^k \rho^k r_h^k \right\rangle = \left\langle \Psi^k \right\rangle \left\langle \rho^k r_h^k \right\rangle \tag{1.147}$$

$$\left\langle \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v^k}\right)\right\rangle = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v^k} \right\rangle \tag{1.148}$$

$$\left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{f^k} \cdot \mathbf{v^k} \right\rangle = \left\langle \Psi^k \right\rangle \left\langle \rho^k \mathbf{f^k} \cdot \mathbf{v^k} \right\rangle \tag{1.149}$$

$$\left\langle H^k \rho^k (\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - P^k \frac{\partial \Psi^k}{\partial t} + \mathbf{q^k} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v^k} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k \right\rangle = \beth^k \tag{1.150}$$

Finalmente, la ecuación obtenida es la siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \Psi^k \rho^k H^k \right\rangle + \nabla \cdot \left\langle \Psi^k \rho^k H^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t}\langle \Psi^k P^k \rangle - \nabla \cdot \left\langle \Psi^k \mathbf{q}^{\mathbf{k}} \right\rangle + \langle \Psi^k \rangle \langle \rho^k r_h^k \rangle + \nabla \cdot \left\langle \Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right\rangle + \langle \Psi^k \rangle \langle \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \rangle + \beth^k \tag{1.151}$$

La ecuación 1.151 es la ecuación promediada de la conservación de la entalpía total.

1.5.5 Ecuaciones de conservación efectivas

Las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento lineal y energía gobiernan el comportamiento de la fase continua, aunque, la manera en que se pone de manifiesto la naturaleza de dicho comportamiento no está expresada explícitamente en el desarrollo contextual de las ecuaciones.

El flujo de un medio continuo puede presentar en general dos comportamientos dependiendo de un grupo adimensional de términos conocido como número de Reynolds, que indica la importancia de los efectos inerciales con respecto a los efectos viscosos del flujo (Wilkes, 2006):

$$\mathrm{Re} = \frac{L_o U_o \rho}{\mu} = \frac{\rho U_o^2}{\frac{\mu U_o^2}{D}} = \frac{Fuerzas\ inerciales}{Fuerzas\ viscosas} \tag{1.152}$$

La ecuación 1.152 representa al número de Reynolds siendo L_o la longitud característica, U_o la velocidad característica, ρ la densidad del fluido y μ la viscosidad dinámica o absoluta, conocidos como factores de escala (Bird et al., 2002). Dependiendo del valor de este número, los flujos pueden ser clasificados en: i) **Laminar**, cuando el flujo es ordenado, a bajas velocidades

y en capas paralelas que no presentan disrupción alguna, con valores de Re<2000, ii) **Transición**, cuando el flujo alterna aparentemente de manera aleatoria entre el estado laminar y turbulento, dado generalmente a velocidades intermedias de flujo con 2000≤ Re≤ 4000 (Wilkes, 2006) y, iii) **Turbulento**, cuyo flujo tiene características irregulares, dependientes del tiempo y de carácter tridimensional (Deen, 1998) con Re>4000 (Wilkes, 2006). Los perfiles de flujo laminar y turbulento en una tubería circular se pueden apreciar en la Figura 8, en donde v y v_{max} deben tomarse como velocidades medias, siendo R el radio máximo de la tubería:

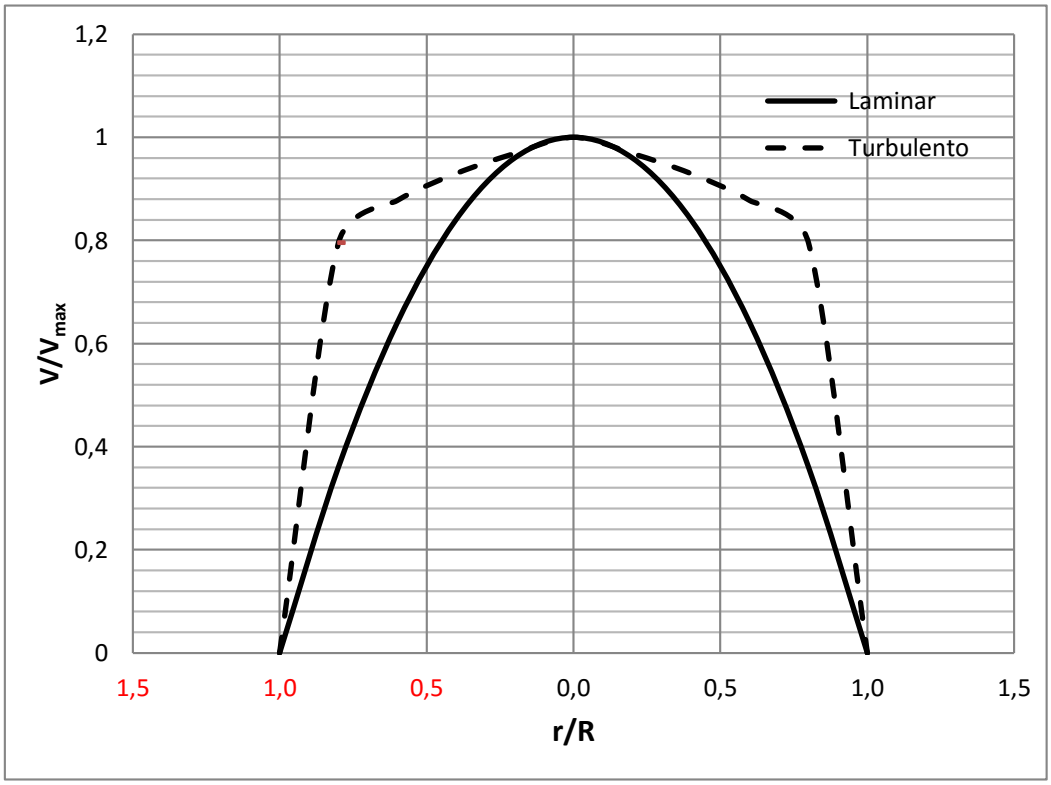


Figura 8 Perfil de flujo laminar y turbulento en una tubería circular. Adaptado de Bird et. al 2002.

A nivel industrial la mayoría de los flujos tienen carácter turbulento por lo que se hace necesario estudiar dicho fenómeno. Una de las características fundamentales de los flujos turbulentos es su alta dependencia con el tiempo,

que se puede corroborar midiendo alguna cantidad física escalar o vectorial Σ^k de la k-ésima fase del medio continuo en una posición fija, usando diversas técnicas instrumentales. En este sentido las velocidades locales instantáneas pueden ser medidas mediante un anemómetro laser-Dopler, capaz de detectar oscilaciones rápidas (McCabe, Smith, & Harriott, 2007). Graficando los resultados obtenidos se podría llegar a algo similar a lo mostrado en la Figura 9:

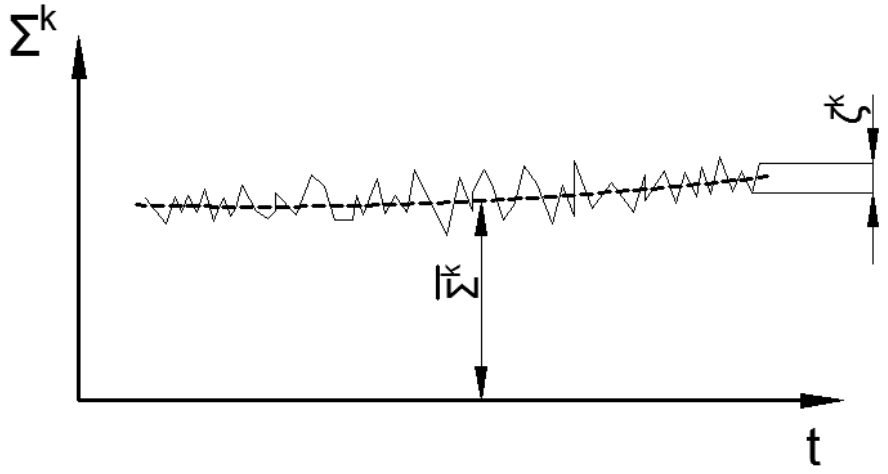


Figura 9 Fluctuación de la propiedad Σ^k con el tiempo en algún punto fijo. Adaptado de Deen 1998.

De la Figura 9 se puede observar que en general cualquier propiedad Σ^k en un instante particular de tiempo tiene un componente promedio $\overline{\Sigma^k}$ y un componente fluctuante ζ'^k, por tanto:

$$\Sigma^k = \overline{\Sigma^k} + \zeta'^k \tag{1.153}$$

Especial énfasis debe darse al uso de la barra sobre una determinada cantidad física, lo que significa que la misma está promediada con respecto al tiempo. La ecuación 1.153 se conoce con el nombre de descomposición de Reynolds.

Con ayuda de la ecuación 1.153 se pueden descomponer algunas de las cantidades escalares y vectoriales estudiadas hasta el momento:

$$\mathbf{v}^{\boldsymbol{k}} = \overline{\mathbf{v}^{\boldsymbol{k}}} + \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \quad \rightarrow \overline{\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}} = \mathbf{0} \tag{1.154}$$

$$\rho^{k} = \overline{\rho^{k}} + \rho'^{k} \quad \rightarrow \overline{\rho'^{k}} = 0 \tag{1.155}$$

$$P^{k} = \overline{P^{k}} + P'^{k} \quad \rightarrow \overline{P'^{k}} = 0 \tag{1.156}$$

$$H^{k} = \overline{H^{k}} + H'^{k} \quad \rightarrow \overline{H'^{k}} = 0 \tag{1.157}$$

$$\mathbf{q}^{\mathbf{k}} = \overline{\mathbf{q}^{\mathbf{k}}} + \mathbf{q}'^{\mathbf{k}} \quad \rightarrow \overline{\mathbf{q}'^{\mathbf{k}}} = 0 \tag{1.158}$$

En las ecuaciones 1.154-1.158 debe notarse que el promedio temporal de las fluctuaciones es igual a cero. Para efectos de obtener las ecuaciones requeridas, se debe promediar en el tiempo las ecuaciones que ya fueron promediadas por el método de volumen (o de ensamble). El promediado en volumen fue realizado para construir un continuo para cada fase mientras que le promediado en el tiempo se realizará para tomar en cuenta el alto nivel de fluctuaciones generados por la turbulencia (Jakobsen, 2008). Para ello es necesario averiguar cómo funcionan ciertos operadores matemáticos en los procesos de promediado múltiple y más específicamente en aquellos en donde el promediado en el tiempo va después del promediado en volumen, aunque, algunos autores han citado que este último proceso es de carácter conmutativo, es decir, se obtienen los mismos resultados si se promedia primero en tiempo y luego en volumen (Delhaye & Achard, 1976, 1978).

A continuación se realizará una deducción no rigurosa de las ecuaciones de conservación con un proceso de promediado múltiple. Para una deducción estricta revísese (Jakobsen, 2008). En primer lugar, cada cantidad física estudiada puede representarse mediante el promedio ponderado de fase $\overline{\langle \kappa^{k} \rangle}$

y la masa media ponderada $\overline{\langle \xi^k \rangle}$ (descomposición de Favre) (Yeoh & Tu, 2009):

$$\overline{\langle \kappa^k \rangle} = \frac{\overline{\langle \Psi^k \kappa^k \rangle}}{\overline{\langle \Psi^k \rangle}} \tag{1.159}$$

$$\overline{\langle \xi^k \rangle} = \frac{\overline{\langle \rho^k \xi^k \rangle}}{\overline{\langle \rho^k \rangle}} \tag{1.160}$$

Nótese que ambas ecuaciones muestran la naturaleza múltiple del promediado que se está realizando. En este punto se introducirá el concepto de fracción volumétrica local (o concentración volumétrica o tiempo de residencia relativo), que se define como la fracción del tiempo en la cual la fase continua o la fase dispersa ocupa un punto particular del espacio. Para fluidos bifásicos se cumple que (Yeoh & Tu, 2009):

$$\alpha^k = \frac{V^k}{V} = \langle \Psi^k \rangle \qquad \sum_{k=1}^{2} \alpha^k = 1 \tag{1.161}$$

En donde V^k es el volumen fraccional de la k-ésima fase en una región pequeña de carácter arbitrario y V es el volumen total de la región en cuestión que abarca tanto al flujo continuo como el disperso. Se puede observar de la ecuación 1.161 que la fracción volumétrica local es igual al promediado en volumen del indicador de fase.

También serán necesarias para las posteriores deducciones las adaptaciones de las reglas de Reynolds, Leibniz y Gauss a los procesos de promediado múltiple (Deen, 1998; Jakobsen, 2008):

$$\overline{\langle f + g \rangle} = \overline{\langle f \rangle} + \overline{\langle g \rangle} \tag{1.162}$$

$$\overline{\langle\langle f\rangle g\rangle} = \overline{\langle f\rangle}\,\overline{\langle g\rangle} \tag{1.163}$$

$$\overline{\langle\langle c\rangle\rangle} = \overline{\langle c\rangle} \tag{1.164}$$

$$\overline{\left\langle\frac{\partial f}{\partial t}\right\rangle} = \frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle f\rangle} \tag{1.165}$$

$$\overline{\langle\boldsymbol{\nabla}\cdot \mathrm{f}\rangle} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\langle f\rangle} \tag{1.166}$$

$$\overline{\langle\boldsymbol{\nabla}\mathrm{f}\rangle} = \boldsymbol{\nabla}\overline{\langle \mathrm{f}\rangle} \tag{1.167}$$

Con estas herramientas, se comenzará con el promediado en el tiempo de la ecuación de conservación de la masa promediada en volumen (ecuación 1.37):

$$\overline{\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi^k\rho^k\rangle} = \frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle\Psi^k\rho^k\rangle} \tag{1.168}$$

$$\overline{\boldsymbol{\nabla}\cdot\langle\Psi^k\rho^k\mathbf{v^k}\rangle} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\langle\Psi^k\rho^k\mathbf{v^k}\rangle} \tag{1.169}$$

$$\overline{\langle\rho^k(\mathbf{v^k}-\mathbf{v^{int}})\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi^k\rangle} = \overline{\Lambda^k} = \Lambda'^k \tag{1.170}$$

A continuación se aplicará la descomposición de Favre que involucra el promedio ponderado de fase, conjuntamente con la descomposición de Reynolds para cada cantidad escalar o vectorial:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle\Psi^k\rho^k\rangle} &= \frac{\partial}{\partial t}\left[\overline{\langle\Psi^k\rangle}\,\overline{\langle\overline{\rho^k}+\rho'^k\rangle}\right] = \frac{\partial}{\partial t}\left[\overline{\alpha^k}\,\left(\overline{\langle\rho^k\rangle}+\overline{\langle\rho'^k\rangle}\right)\right]\\ &= \frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle\rho^k\rangle}\right)\end{aligned} \tag{1.171}$$

$$\nabla \cdot \overline{\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \rangle} = \nabla \cdot \left[\overline{\langle \Psi^k \rangle} \, \overline{\langle \rho^k \left(\overline{\mathbf{v}^{\boldsymbol{k}}} + \mathbf{v'^k} \right) \rangle} \right] = \nabla \cdot \left[\overline{\alpha^k} \, \overline{\langle \rho^k \left(\overline{\mathbf{v}^{\boldsymbol{k}}} + \mathbf{v'^k} \right) \rangle} \right]$$
$$= \nabla \cdot \left[\overline{\alpha^k} \left(\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\boldsymbol{k}} \rangle} + \overline{\langle \rho^k \mathbf{v'}^{\boldsymbol{k}} \rangle} \right) \right] = \nabla \cdot \left(\overline{\alpha^k} \, \overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\boldsymbol{k}} \rangle} \right) \tag{1.172}$$

$$\overline{\langle \rho^k (\mathbf{v^k} - \mathbf{v^{int}}) \cdot \nabla \Psi^k \rangle} = \overline{\Lambda^k} = \Lambda'^k \tag{1.173}$$

Incorporando estos resultados en una sola ecuación y eliminando las barras y paréntesis que denotan los diferentes promediados, se llega a:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha^k \rho^k) + \nabla \cdot \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k} \right) = \Lambda'^k \tag{1.174}$$

En la ecuación 1.174 se han incorporado los efectos de la turbulencia y la fracción volumétrica local, lo que pone de manifiesto la naturaleza bifásica del flujo.

A continuación, es el turno de promediar en el tiempo a la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento lineal promediada en volumen (ecuación 1.77). Para ello:

$$\overline{\frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \rangle} = \frac{\partial}{\partial t} \overline{\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \rangle} \tag{1.175}$$

$$\overline{\nabla \cdot \langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k} \rangle} = \nabla \cdot \overline{\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k} \rangle} \tag{1.176}$$

$$\overline{\nabla \langle \Psi^k P^k \rangle} = \nabla \overline{\langle \Psi^k P^k \rangle} \tag{1.177}$$

$$\overline{\nabla \cdot \langle \Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \rangle} = \nabla \cdot \overline{\langle \Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \rangle} \tag{1.178}$$

$$\overline{\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{f^k} \rangle} = \overline{\langle \Psi^k \rangle \langle \rho^k \mathbf{f^k} \rangle} \tag{1.179}$$

$$\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}(\mathbf{v}^{\mathbf{k}} - \mathbf{v}^{\mathbf{int}}) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k + P^k \boldsymbol{\nabla}\Psi^k - \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k \rangle}$$
$$= \overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}(\mathbf{v}^{\mathbf{k}} - \mathbf{v}^{\mathbf{int}}) \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k \rangle} + \overline{\langle P^k \rangle \langle \boldsymbol{\nabla}\Psi^k \rangle} - \overline{\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi^k \rangle} \qquad (1.180)$$
$$= \overline{\aleph^k} = \aleph'^k$$

Con estos resultados, aplicando la descomposición de Favre que involucra el promedio ponderado de fase conjuntamente con la descomposición de Reynolds para cada cantidad escalar o vectorial se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \rangle} = \frac{\partial}{\partial t}\left[\overline{\langle \Psi^k \rangle}\,\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \rangle}\right] = \frac{\partial}{\partial t}\left[\overline{\alpha^k}\,\overline{\left\langle \rho^k \left(\overline{\mathbf{v}^{\boldsymbol{k}}} + \mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right)\right\rangle}\right]$$
$$= \frac{\partial}{\partial t}\left[\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\boldsymbol{k}} \rangle} + \overline{\langle \rho^k \mathbf{v}'^{\boldsymbol{k}} \rangle}\right)\right] = \frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\boldsymbol{k}} \rangle}\right) \qquad (1.181)$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \overline{\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \rangle} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\overline{\langle \Psi^k \rangle}\,\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \rangle}\right] = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\overline{\alpha^k}\,\overline{\left\langle \rho^k \left(\overline{\mathbf{v}^{\boldsymbol{k}}} + \mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right) \otimes \left(\overline{\mathbf{v}^{\boldsymbol{k}}} + \mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right)\right\rangle}\right]$$
$$= \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \rangle} + \overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \rangle} + \overline{\langle \rho^k \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}^{\boldsymbol{k}} \rangle} + \overline{\langle \rho^k \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \rangle}\right)\right] \qquad (1.182)$$
$$= \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \rangle} + \overline{\langle \rho^k \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \rangle}\right)\right]$$
$$= \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \rangle}\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\overline{\alpha^k}\,\overline{\left\langle \rho^k \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \otimes \mathbf{v}'^{\mathbf{k}} \right\rangle}\right)$$

Especial atención merece la aparición de un nuevo término, producto de las fluctuaciones de la velocidad y de naturaleza convectiva conocido como el tensor de Reynolds o tensor de esfuerzos turbulentos, que representa el aporte de la turbulencia a la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento lineal. Continuando con las operaciones:

$$\boldsymbol{\nabla}\overline{\langle \Psi^k P^k \rangle} = \boldsymbol{\nabla}\left(\overline{\langle \Psi^k \rangle}\,\overline{\langle P^k \rangle}\right) = \boldsymbol{\nabla}\left(\overline{\alpha^k}\,\overline{\left\langle \overline{P^k} + P'^k \right\rangle}\right) = \boldsymbol{\nabla}\left[\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle P^k \rangle} + \overline{\langle P'^k \rangle}\right)\right] = \boldsymbol{\nabla}\left(\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle P^k \rangle}\right) \qquad (1.183)$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \overline{\langle \Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \rangle} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\overline{\langle \Psi^k \rangle}\,\overline{\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \rangle}\right) = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\overline{\alpha^k}\,\overline{\left\langle \overline{\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}} + \boldsymbol{\tau}'^{\mathbf{k}} \right\rangle}\right) = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \rangle} + \overline{\langle \boldsymbol{\tau}'^{\mathbf{k}} \rangle}\right)\right] = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} \rangle}\right) \qquad (1.184)$$

$$\overline{\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{f^k} \rangle} = \overline{\langle \Psi^k \rangle \langle \rho^k \mathbf{f^k} \rangle} = \overline{\alpha^k}\ \overline{\langle \rho^k \mathbf{f^k} \rangle} \tag{1.185}$$

Incorporando estos resultados en una sola ecuación y eliminando las barras y paréntesis que denotan los diferentes promediados, se llega a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right) \\ = -\boldsymbol{\nabla}(\alpha^k P^k) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right) - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v'^k} \otimes \mathbf{v'^k}\right) \\ + \alpha^k \rho^k \mathbf{f^k} + \aleph'^k \end{aligned} \tag{1.186}$$

En la ecuación 1.186 se han incorporado lo efectos de la turbulencia, presentes tácitamente mediante el tensor de Reynolds, poniéndose de manifiesto nuevamente la naturaleza bifásica del flujo mediante la fracción volumétrica local.

La siguiente ecuación a ser promediada en el tiempo está vinculada con el principio de conservación de la energía promediado en volumen. Aplicando las reglas modificadas de Reynolds, Leibniz y Gauss:

$$\overline{\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \Psi^k \rho^k H^k \right\rangle} = \frac{\partial}{\partial t}\overline{\left\langle \Psi^k \rho^k H^k \right\rangle} \tag{1.187}$$

$$\overline{\boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \rho^k H^k \mathbf{v^k} \right\rangle} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \overline{\left\langle \Psi^k \rho^k H^k \mathbf{v^k} \right\rangle} \tag{1.188}$$

$$\overline{\frac{\partial}{\partial t}\langle \Psi^k P^k \rangle} = \frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle \Psi^k P^k \rangle} \tag{1.189}$$

$$\overline{\boldsymbol{\nabla} \cdot \left\langle \Psi^k \mathbf{q^k} \right\rangle} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \overline{\left\langle \Psi^k \mathbf{q^k} \right\rangle} \tag{1.190}$$

$$\overline{\left\langle \Psi^k \rho^k r_h^k \right\rangle} = \overline{\left\langle \Psi^k \right\rangle}\ \overline{\left\langle \rho^k r_h^k \right\rangle} \tag{1.191}$$

$$\overline{\boldsymbol{\nabla}\cdot\left\langle\Psi^k\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right\rangle}=\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\left\langle\Psi^k\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right\rangle} \tag{1.192}$$

$$\overline{\left\langle\Psi^k\rho^k\mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right\rangle}=\overline{\left\langle\Psi^k\right\rangle}\,\overline{\left\langle\rho^k\mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right\rangle} \tag{1.193}$$

$$\begin{aligned}\overline{\left\langle H^k\rho^k(\mathbf{v}^{\mathbf{k}}-\mathbf{v}^{\mathbf{int}})\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi^k-P^k\frac{\partial\Psi^k}{\partial t}+\mathbf{q}^{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi^k-\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi^k\right\rangle}&=\overline{\beth^k}\\&=\beth'^k\end{aligned} \tag{1.194}$$

Con estos resultados, aplicando la descomposición de Favre que involucra el promedio ponderado de fase conjuntamente con la descomposición de Reynolds para cada cantidad escalar o vectorial se obtiene:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle\Psi^k\rho^kH^k\rangle}&=\frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle\Psi^k\rangle}\,\overline{\langle\rho^kH^k\rangle}=\frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle\Psi^k\rangle}\,\overline{\left\langle\rho^k\left(\overline{H^k}+H'^k\right)\right\rangle}\\&=\frac{\partial}{\partial t}\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle\rho^kH^k\rangle}+\overline{\langle\rho^kH'^k\rangle}\right)=\frac{\partial}{\partial t}\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle\rho^kH^k\rangle}\end{aligned} \tag{1.195}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\langle\Psi^k\rho^kH^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\rangle}&=\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\langle\Psi^k\rangle}\,\overline{\langle\rho^kH^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\rangle}=\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\alpha^k}\,\overline{\left\langle\rho^k\left(\overline{H^k}+H'^k\right)\left(\overline{\mathbf{v}^{\mathbf{k}}}+\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right)\right\rangle}\\&=\boldsymbol{\nabla}\\&\cdot\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle\rho^kH^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\rangle}+\overline{\left\langle\rho^kH^k\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right\rangle}+\overline{\langle\rho^kH'^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\rangle}+\overline{\langle\rho^kH'^k\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\rangle}\right)\\&=\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle\rho^kH^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\rangle}+\overline{\langle\rho^kH'^k\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\rangle}\right)\\&=\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle\rho^kH^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\rangle}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle\rho^kH'^k\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\rangle}\end{aligned} \tag{1.196}$$

Nuevamente debido a la descomposición del flujo aparece un término en la ecuación 1.196, que incluye la influencia de las fluctuaciones de la entalpía total y la velocidad, conocido como flux de energía turbulenta de Reynolds. Este término pone de manifiesto al fenómeno turbulento en el flujo bifásico. Continuando con el procedimiento:

$$\frac{\partial}{\partial t}\overline{\langle \Psi^k P^k\rangle} = \frac{\partial}{\partial t}\,\overline{\langle \Psi^k\rangle}\,\overline{\langle P^k\rangle} = \frac{\partial}{\partial t}\overline{\alpha^k}\,\overline{\left\langle \overline{P^k} + P'^k\right\rangle} = \frac{\partial}{\partial t}\overline{\alpha^k}\left(\overline{\langle P^k\rangle} + \overline{\langle P'^k\rangle}\right)$$
$$= \frac{\partial}{\partial t}\overline{\alpha^k}\,\overline{\langle P^k\rangle} \tag{1.197}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\langle \Psi^k \mathbf{q}^{\mathbf{k}}\rangle} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\langle \Psi^k\rangle}\;\overline{\langle \mathbf{q}^{\mathbf{k}}\rangle} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\alpha^k}\;\left(\overline{\left\langle \overline{\mathbf{q}^{\mathbf{k}}} + \mathbf{q}'^{\mathbf{k}}\right\rangle}\right) = \boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\alpha^k}\;\left(\overline{\langle \mathbf{q}^{\mathbf{k}}\rangle} + \overline{\langle \mathbf{q}'^{\mathbf{k}}\rangle}\right)$$
$$= \boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\alpha^k}\;\overline{\langle \mathbf{q}^{\mathbf{k}}\rangle} \tag{1.198}$$

$$\overline{\left\langle \Psi^k \rho^k r_h^k\right\rangle} = \overline{\left\langle \Psi^k\right\rangle}\,\overline{\left\langle \rho^k r_h^k\right\rangle} = \overline{\alpha^k}\,\overline{\left\langle \rho^k r_h^k\right\rangle} \tag{1.199}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\nabla}\cdot\overline{\langle \Psi^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\rangle} &= \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\overline{\langle \Psi^k\rangle}\;\overline{\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\rangle}\right)\\
&= \boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\overline{\langle \Psi^k\rangle}\;\overline{\left\langle\left(\overline{\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}} + \boldsymbol{\tau}'^{\mathbf{k}}\right)\cdot\left(\overline{\mathbf{v}^{\mathbf{k}}} + \mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right)\right\rangle}\right]\\
&= \boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\overline{\alpha^k}\;\left(\overline{\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{k}\rangle} + \overline{\left\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right\rangle} + \overline{\langle \boldsymbol{\tau}'^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{k}\rangle} + \overline{\left\langle \boldsymbol{\tau}'^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right\rangle}\right)\right]\\
&= \boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\overline{\alpha^k}\;\left(\overline{\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{k}\rangle} + \overline{\left\langle \boldsymbol{\tau}'^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right\rangle}\right)\right]\\
&= \boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\overline{\alpha^k}\;\overline{\langle \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{k}\rangle}\,\right] + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\overline{\alpha^k}\;\overline{\langle \boldsymbol{\tau}'^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}'^{k}\rangle}\,\right]
\end{aligned} \tag{1.200}$$

$$\overline{\left\langle \Psi^k \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right\rangle} = \overline{\left\langle \Psi^k\right\rangle}\,\overline{\left\langle \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right\rangle} = \overline{\alpha^k}\;\overline{\left\langle \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\left(\overline{\mathbf{v}^{\mathbf{k}}} + \mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right)\right\rangle}$$
$$= \overline{\alpha^k}\;\left(\overline{\left\langle \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right\rangle} + \overline{\left\langle \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right\rangle}\right) = \overline{\alpha^k}\overline{\left\langle \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right\rangle} \tag{1.201}$$

Combinando todos los resultados anteriores y eliminando los símbolos de los diferentes promediados efectuados, se llega a:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t}(\alpha^k \rho^k H^k) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k \rho^k H^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right)\\
&\qquad = \frac{\partial}{\partial t}(\alpha^k P^k) - \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k \mathbf{q}^{\mathbf{k}}\right) - \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k \rho^k H'^k \mathbf{v}'^{\mathbf{k}}\right)\\
&\qquad + \alpha^k \rho^k r_h^k + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{k}\right) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k \boldsymbol{\tau}'^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}'^{k}\right)\\
&\qquad + \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{f}^{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) + \beth'^k
\end{aligned} \tag{1.202}$$

Las ecuaciones 1.174, 1.186 y 1.202 son las versiones promediadas en volumen y en el tiempo de las ecuaciones de conservación originales deducidas al principio de este capítulo, denominadas en conjunto como ecuaciones efectivas de conservación.

1.5.6 Transporte de masa, cantidad de movimiento lineal y energía en la interfase

A lo largo del proceso de deducción de las ecuaciones de conservación efectivas, aparecieron términos de intercambio de masa, cantidad de movimiento y energía entre las fases continua y dispersa. En dinámica de fluidos computacional, dichos términos pueden normalmente ser linealizados para su tratamiento numérico de acuerdo a (Yeoh & Tu, 2009):

$$\Lambda'^{k} = \sum_{j=1}^{2} \left(\dot{m}_{jk} - \dot{m}_{kj} \right) \tag{1.203}$$

$$\aleph'^{k} = \sum_{j=1}^{2} \left(\dot{m}_{jk} \mathbf{v}^{\mathbf{j}} - \dot{m}_{kj} \mathbf{v}^{\mathbf{k}} \right) + P_{int}^{k} \, \boldsymbol{\nabla} \alpha^{k} + \mathbf{F}_{\mathbf{D}}^{\mathbf{k}} \tag{1.204}$$

$$\beth'^{k} = \sum_{j=1}^{2} \left(\dot{m}_{jk} H^{j} - \dot{m}_{kj} H^{k} \right) + \dot{Q}_{int}^{k} \tag{1.205}$$

En las ecuaciones anteriores, $\dot{m}_{jk}$ y $\dot{m}_{kj}$ representan el transporte de masa desde la j-ésima fase hacia la k-ésima fase, y desde la k-ésima fase hacia la j-ésima fase respectivamente. El término $\mathbf{F_D^K}$ representa la densidad de fuerza en la interfase, y normalmente puede dividirse en:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{D}}^{\mathbf{k}} = \mathbf{F}_{\mathbf{AD}}^{\mathbf{k}} + \mathbf{F}_{\mathbf{OD}}^{\mathbf{k}} \tag{1.206}$$

En donde $\mathbf{F_{AD}^k}$ representa la fuerza de arrastre y $\mathbf{F_{OD}^k}$ cualquier otra fuerza en la interfase distinta a la de arrastre. La fuerza de arrastre y el flujo de calor interfacial también pueden ser linealizados (Yeoh & Tu, 2009):

$$\mathbf{F_{AD}^k} = \sum_{j=1}^{2} B_{jk}\left(\mathbf{v^j} - \mathbf{v^k}\right) \tag{1.207}$$

$$\dot{Q}_{int}^{k} = \sum_{j=1}^{2} h_{jk}\left(T^j - T^k\right) \tag{1.208}$$

En donde B_{jk} y h_{jk} son los términos de arrastre y de trasferencia de calor en la interfase.

1.6 Consideraciones y simplificaciones

En este apartado se propondrán algunas simplificaciones que ayudarán a resolver las ecuaciones efectivas de conservación.

1.6.1 Flujos a bajas velocidades o a bajos números de Match

Algunos flujos multifásicos en la práctica pueden considerarse como flujos a baja velocidad o a bajos números de Match. Este tipo de flujos pueden considerarse como débilmente compresibles, debido a que las variaciones de densidad del fluido se deben principalmente a cambios en la temperatura y no a cambios en la presión. Por tanto, en la ecuación efectiva de conservación de la energía, los términos $\partial P^k/\partial t$, y los que representan a los esfuerzos que deforman la región espacial Ω y a la interfase Γ pueden ser ignorados. Adicionalmente, si consideramos que la velocidad de deslizamiento entre las fases (definida como la diferencia de velocidades entre la fase continua y la

fase discreta) es pequeña y no existe expansión o contracción en la fase dispersa, todas las fases compartirán la misma presión y por tanto P^k=P (Yeoh & Tu, 2009). Con estas consideraciones y el uso de las ecuaciones 1.203-1.208, se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha^k \rho^k) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) = \sum_{j=1}^{2} \left(\dot{m}_{jk} - \dot{m}_{kj}\right) \tag{1.209}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right) \\ = -\alpha^k \boldsymbol{\nabla} P^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}}\right) - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \boldsymbol{\tau}^{*\mathbf{k}}\right) + \alpha^k \rho^k \mathbf{g^k} \\ + \sum_{j=1}^{2} \left(\dot{m}_{jk} \mathbf{v^j} - \dot{m}_{kj} \mathbf{v^k}\right) + \left(P_{int}^k - P^k\right) \boldsymbol{\nabla} \alpha^k + \mathbf{F_{AD}^k} \\ + \mathbf{F_{OD}^k} \end{aligned} \tag{1.210}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha^k \rho^k H^k) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \rho^k H^k \mathbf{v^k}\right) \\ = -\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \mathbf{q^k}\right) - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \mathbf{q}^{*\mathbf{k}}\right) + \alpha^k \rho^k r_h^k \\ + \sum_{j=1}^{2} \left(\dot{m}_{jk} H^j - \dot{m}_{kj} H^k\right) + \dot{Q}_{int}^k \end{aligned} \tag{1.211}$$

En las ecuaciones precedentes, se reemplazó el tensor y el flux de Reynolds de la siguiente manera:

$$\boldsymbol{\tau}^{*\mathbf{k}} = \rho^k \mathbf{v'^k} \otimes \mathbf{v'^k} \tag{1.212}$$

$$\mathbf{q}^{*\mathbf{k}} = \rho^k H'^k \mathbf{v'^k} \tag{1.213}$$

Debe ponerse especial atención en las ecuaciones 1.212 y 1.213, debido a que estos términos provienen de los promediados sucesivos realizados anteriormente, aunque las barras y paréntesis no consten. En lo que respecta

a la ecuación 1.210, se toma al campo gravitacional como las únicas fuerzas que actúan sobre el cuerpo. El cambio más notorio se presenta en la ecuación 1.211 en donde la mayoría de los términos relacionados con la potencia desarrollada por los esfuerzos que actúan sobre la región espacial han desaparecido.

1.6.2 Ecuaciones constitutivas para fluidos Newtonianos

Una ecuación constitutiva involucra las propiedades intrínsecas de un medio continuo (Reddy, 2013), y permite relacionar dichas propiedades con las ecuaciones de conservación.

Los esfuerzos viscosos son un reflejo de la fricción existente dentro de un fluido. La idea de que los esfuerzos viscosos en un fluido podrían ser simplemente proporcionales a la tasa de deformación fue propuesta por Newton (Deen, 1998), y a tal fluido se lo denominó Newtoniano. Por tanto, para un fluido Newtoniano el tensor de esfuerzos viscosos puede ser calculado a través de la siguiente ecuación constitutiva:

$$\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} = 2\mu^{k}\left[\boldsymbol{\Xi}^{\mathbf{k}} - \frac{1}{3}\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right)\boldsymbol{\delta}\right] - 3\vartheta^{k}\left[\frac{1}{3}\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right)\boldsymbol{\delta}\right] \tag{1.214}$$

En la ecuación 1.214 μ^k representa la viscosidad dinámica o absoluta del fluido y ϑ^k la viscosidad dilatacional. El origen del tensor $\boldsymbol{\Xi}^{\mathbf{k}}$ se esclarece si se recuerda que el gradiente de velocidad, al ser un tensor, puede descomponerse en su parte simétrica y en su parte antisimétrica. Por tanto:

$$\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}^{\mathbf{k}} = \boldsymbol{\Xi}^{\mathbf{k}} + \mathbf{I}^{\mathbf{k}} \tag{1.215}$$

Cada una de estas partes pude expresarse en función del mismo gradiente de velocidad:

$$\mathbf{\Xi^k} = \frac{1}{2}\left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} + \left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)^{\boldsymbol{T}}\right] \tag{1.216}$$

$$\mathbf{I^k} = \frac{1}{2}\left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} - \left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)^{\boldsymbol{T}}\right] \tag{1.217}$$

En donde $\mathbf{\Xi^k}$ se conoce como tensor velocidad de deformación y $\mathbf{I^k}$ como tensor de spin (Olivella & de Saracíbar Bosch, 2002). Combinando la ecuación 1.216 y 1.214 se obtiene:

$$\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} = \mu^k\left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} + \left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)^{\boldsymbol{T}}\right] - \left[\frac{2}{3}\mu^k + \vartheta^k\right]\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v^k}\right)\boldsymbol{\delta} \tag{1.218}$$

Los efectos de la viscosidad dilatacional en la dinámica de fluidos son difíciles de detectar. Se ha demostrado que $\vartheta^k=0$ para gases monoatómicos ideales, y que para el resto de fluidos $\vartheta^k \ll \mu^k$ (Deen, 1998). Por estos motivos en este trabajo se considerará que $\vartheta^k=0$. Con esta consideración:

$$\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} = \mu^k\left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} + \left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)^{\boldsymbol{T}}\right] - \frac{2}{3}\mu^k\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v^k}\right)\boldsymbol{\delta} \tag{1.219}$$

Incorporando este resultado a la ecuación efectiva de conservación de la cantidad de movimiento lineal:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k\rho^k\mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\rho^k\mathbf{v^k}\otimes\mathbf{v^k}\right) \\ = -\alpha^k\boldsymbol{\nabla}P^k + \boldsymbol{\nabla} \\ \cdot\left\{\alpha^k\left[\mu^k\left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} + \left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)^{\boldsymbol{T}}\right) - \frac{2}{3}\mu^k\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v^k}\right)\boldsymbol{\delta}\right]\right\} - \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\boldsymbol{\tau}^{*\mathbf{k}}\right) \\ + \alpha^k\rho^k\mathbf{g^k} + \sum_{j=1}^{2}\left(\dot{m}_{jk}\mathbf{v^j} - \dot{m}_{kj}\mathbf{v^k}\right) + \left(P_{int}^k - P^k\right)\boldsymbol{\nabla}\alpha^k \\ + \mathbf{F_{AD}^k} + \mathbf{F_{OD}^k}\end{aligned} \tag{1.220}$$

Otras ecuaciones constitutivas permiten determinar la temperatura T^k y la densidad ρ^k medio continuo:

$$H^k = H^k(T^k, P^k) \tag{1.221}$$

$$\rho^k = \rho^k(T^k, P^k) \tag{1.222}$$

La ecuación 1.221 permite calcular la temperatura T^k a partir del conocimiento de la entalpía total H^k en un punto determinado, mientras que la ecuación 1.222 permite establecer la densidad del medio a través de una ecuación de estado, misma que describe el estado de agregación del medio continuo mediante una relación matemática que en este caso involucra tanto temperatura como presión de la fase.

1.7 Modelos de turbulencia

En el apartado 1.5.5. se introdujeron algunos conceptos de turbulencia, quedando sentadas las bases para el presente análisis. La turbulencia puede originarse por el contacto del fluido con límites sólidos o por el contacto entre dos capas del fluido que se mueven a velocidades diferentes.

El flujo turbulento consiste en un conjunto de remolinos de tamaños distintos que se disgregan en otros cada vez más pequeños (entre 10 a 100μm), desapareciendo aquellos cuya extensión es menor a la citada por acción de las fuerzas viscosas. En un tiempo y volumen dados, existe una gama amplia de remolinos de varios tamaños. Se considera que el flujo turbulento no es un fenómeno microscópico debido a que inclusive el remolino más pequeño contiene 10^{12} moléculas, considerándose como macroscópico (McCabe et al., 2007) .

La turbulencia puede considerarse como un fenómeno de transferencia de energía cinética en el cual los remolinos formados a partir del flujo global del fluido transfieren su energía rotacional a lo largo de una serie continua de remolinos más pequeños. En esta transferencia se considera que la energía cinética no se disipa y pasa cuantitativamente a los remolinos pequeños, hasta que finalmente estos se destruyen por la acción de los esfuerzos viscosos y entonces la energía cinética se disipa en forma de calor (McCabe et al., 2007), como se observa en la Figura 10 (Andersson et al., 2011):

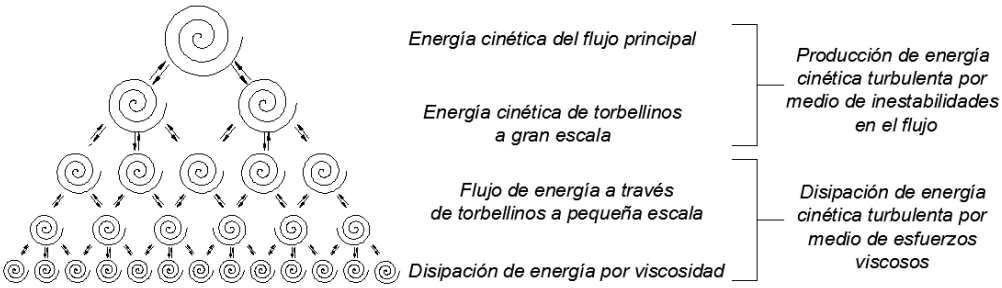


Figura 10 Transporte de energía cinética a través de los torbellinos. Fuente: Andersson et. al 2011.

Adicional a la energía, los remolinos turbulentos tienden a trasferir cantidad de movimiento lineal y materia desde las regiones de más alta concentración hacia aquellas de más baja concentración de la cantidad en estudio (Deen, 1998). La escala más pequeña a la cual sucede esta disipación se conoce como escala de Kolmogorov (Yeoh & Tu, 2009).

1.7.1 Modelo de difusividad de remolino

Hasta el momento se han desarrollado las ecuaciones de conservación efectivas, promediadas en volumen y en tiempo. Estas ecuaciones que representan la conservación de la masa, de la cantidad de movimiento lineal

y la energía permiten calcular respectivamente la fracción volumétrica local α^k; las componentes de la velocidad v_1^k, v_2^k y v_3^k; y la entalpía total H^k. La temperatura T^k y densidad del fluido ρ^k pueden determinarse a partir de las ecuaciones constitutivas 1.221 y 1.222. Sin embargo, durante los procesos de promediado surgieron dos términos adicionales: el tensor de esfuerzos turbulentos y el flux de energía turbulenta de Reynolds. Estos términos introducen incógnitas adicionales que superan el número de ecuaciones disponibles para su resolución. Este es el llamado ***Problema de Cierre.***

La manera más simple de resolver este problema es postular una serie de "Ecuaciones Constitutivas" que relacionen los fluxes turbulentos $\boldsymbol{\tau}^{*\mathbf{k}}$ y $\mathbf{q}^{*\mathbf{k}}$ con variables propias del fenómeno (Deen, 1998). Estas variables no se consideran propiedades del fluido, aunque dependen de su velocidad y de la geometría del sistema en consideración. Por tanto, los fluxes turbulentos se consideran funciones fuertes de la posición (Deen, 1998) (McCabe et al., 2007). Las teorías de la viscosidad y difusividad del remolino permitirán establecer el nexo para resolver el problema de cierre.

La teoría de viscosidad (difusividad de cantidad de movimiento lineal) de remolino fue introducido por Boussinesq en 1868, y sugiere que es posible relacionar el tensor de esfuerzos turbulentos de Reynolds con las tasas medias de deformación (promediadas en el tiempo) (Yeoh & Tu, 2009):

$$-\boldsymbol{\tau}^{*\mathbf{k}} = \mu_T^k \left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}^{\mathbf{k}} + \left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right)^{\boldsymbol{T}}\right] - \frac{2}{3}\mu_T^k\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right)\boldsymbol{\delta} - \frac{2}{3}\rho^k k^k \boldsymbol{\delta} \qquad (1.223)$$

En donde k^k es la energía cinética turbulenta de la k-ésima fase y μ_T^k es la viscosidad o difusividad de cantidad de movimiento lineal de remolino de la k-ésima fase, la cual es una propiedad del flujo y no del fluido. En la ecuación 1.223 el signo negativo se emplea para su reemplazo directo posterior en la ecuación efectiva de conservación de la cantidad de movimiento lineal.

Por otra parte, la teoría de la difusividad de remolino también establece que el flux de energía turbulenta de Reynolds es proporcional al gradiente de la cantidad transportada, que en el caso de la ecuación efectiva de conservación de la energía, es la entalpía total (Yeoh & Tu, 2009):

$$\mathbf{q}^{*\mathbf{k}} = \varrho_T^k \boldsymbol{\nabla} H^k \tag{1.224}$$

El término $\varrho_T{}^k$ es la difusividad de transporte de calor de remolino para la entalpía total de la k-ésima fase. El origen convectivo de los fluxes turbulentos, creados por el mismo movimiento de remolino, permite establecer que para un determinado flujo las difusividades $\mu_T{}^k$ y $\varrho_T{}^k$ deberían ser similares (Deen, 1998). Se puede relacionar ambas difusividades turbulentas mediante el número de Prandtl:

$$Pr_T^k = \frac{\mu_T^k}{\varrho_T^k} \tag{1.225}$$

Debe notarse que este número relaciona la difusividad de cantidad de movimiento lineal con respecto a la difusividad térmica

La viscosidad de remolino puede ser determinada a partir de los conceptos de velocidad característica U_T y longitud característica L_T (Yeoh & Tu, 2009):

$$\mu_T^k = C_\mu \rho^k U_T L_T \tag{1.226}$$

En donde C_μ es una constante. La longitud característica puede ser definida a través de:

$$L_T = \frac{(k^k)^{\frac{3}{2}}}{\epsilon^k} \tag{1.227}$$

En la ecuación 1.227 ϵ^k es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta. La velocidad característica viene definida por:

$$U_T = \sqrt{k^k} \tag{1.228}$$

Combinando las ecuaciones 1.226-1.228, combinando las constantes obtenidas, se llega a la siguiente expresión que define a la viscosidad de remolino (Yeoh & Tu, 2009):

$$\mu_T^k = C_\mu \rho^k \frac{(k^k)^2}{\epsilon^k} \tag{1.229}$$

A partir de las ecuaciones 1.223 y 1.229 se puede analizar que para calcular el tensor de esfuerzos turbulentos de Reynolds es necesario determinar la energía cinética turbulenta y su tasa de disipación. Para estos dos parámetros, se pueden plantear ecuaciones de transporte. Introduciendo estos conceptos en las ecuaciones efectivas de conservación, se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k \rho^k\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) = \sum_{j=1}^{2}\left(\dot{m}_{jk} - \dot{m}_{kj}\right) \tag{1.230}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k \rho^k\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) = S_{m^k}^{int}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k}\right) + \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v^k} \otimes \mathbf{v^k}\right) = -\alpha^k \boldsymbol{\nabla} P^k +$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left\{\alpha^k \left[\left(\mu^k + \mu_T^k\right)\left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k} + \left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)^{\boldsymbol{T}}\right) - \frac{2}{3}\left(\mu^k + \mu_T^k\right)\left(\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v^k}\right)\boldsymbol{\delta} - \frac{2}{3}\rho^k k^k \boldsymbol{\delta}\right]\right\} - \tag{1.231}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\alpha^k \boldsymbol{\tau}^{*\mathbf{k}}\right) + \alpha^k \rho^k \mathbf{g^k} + \sum_{j=1}^{2}\left(\dot{m}_{jk}\mathbf{v^j} - \dot{m}_{kj}\mathbf{v^k}\right) + \left(P_{int}^k - P^k\right)\boldsymbol{\nabla}\alpha^k + \mathbf{F_{AD}^k}$$

$$+ \mathbf{F_{OD}^k}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k\rho^k\mathbf{v^k}\right)+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\rho^k\mathbf{v^k}\otimes\mathbf{v^k}\right)=-\alpha^k\boldsymbol{\nabla}P^k+$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left\{\alpha^k\left[\left(\mu^k+\mu_T^k\right)\left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}+\left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v^k}\right)^{\boldsymbol{T}}\right)-\frac{2}{3}\left(\mu^k+\mu_T^k\right)\left(\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v^k}\right)\boldsymbol{\delta}-\frac{2}{3}\rho^k k^k\boldsymbol{\delta}\right]\right\}-$$

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\boldsymbol{\tau}^{*\mathbf{k}}\right)+\alpha^k\rho^k\mathbf{g^k}+S_{\mathbf{v}^k}^{int}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k\rho^k H^k\right)+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\rho^k H^k\mathbf{v^k}\right)$$

$$=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\mathbf{q^k}\right)-\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\frac{\mu_T^k}{Pr_T^k}\boldsymbol{\nabla}H^k\right)+\alpha^k\rho^k r_h^k$$

$$+\sum_{j=1}^{2}\left(\dot{m}_{jk}H^j-\dot{m}_{kj}H^k\right)+\dot{Q}_{int}^k \tag{1.232}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k\rho^k H^k\right)+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\rho^k H^k\mathbf{v^k}\right)$$

$$=-\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\mathbf{q^k}\right)-\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\frac{\mu_T^k}{Pr_T^k}\boldsymbol{\nabla}H^k\right)+\alpha^k\rho^k r_h^k+S_{H^k}^{int}$$

En las ecuaciones anteriores, S_{mk}^{int}, S_{vk}^{int} y S_{Hk}^{int} representan las fuentes de intercambio de masa, cantidad de movimiento lineal y entalpía total a través de la interfase, mismos que han reemplazado algunos términos de las ecuaciones efectivas de conservación. El conjunto de ecuaciones 1.230-1.232 se conoce como el sistema RANS (Reynols Averaged Navier Stokes Equations) para la fase continua de un fluido bifásico disperso. Para completar el problema de cierre, se puede escoger un modelo de turbulencia para calcular la energía cinética y su tasa de disipación.

1.7.2 Modelo k-ω de transporte de esfuerzo cortante (SST)

Este modelo matemático k-ω SST combina la formulación robusta y exacta del modelo k-ω en las regiones cercanas a las superficies sólidas con la

independencia del modelo k-ϵ en el seno del fluido. Para ello, se debe transformar al modelo k-ϵ en una formulación compatible con el modelo k-ω (Menter, 1994). El modelo k-ω de transporte de esfuerzo cortante permite calcular k^k y ϵ^k, siendo este último parámetro determinado indirectamente a través de la frecuencia turbulenta:

$$\omega^k = \frac{\epsilon^k}{k^k} \tag{1.233}$$

Se considera un modelo de dos ecuaciones y describe de mejor manera el comportamiento turbulento de un flujo bifásico disperso limitado por superficies sólidas, mejorando las propiedades de los modelos individuales que le dan origen. Resuelve el flujo de la subcapa viscosa adyacente a las superficies sólidas así como el flujo en el seno del fluido que se encuentra lejos de estas (Yeoh & Tu, 2009). Entre sus desventajas se encuentra el hecho de que necesita un mallado fino cerca de las superficies sólidas.

La deducción de las ecuaciones de transporte para los parámetros descritos al inicio de esta sección así como las suposiciones en las que se basa están fuera del alcance del presente trabajo, pero se recomienda remitirse a bibliografía técnica recomendada (Tennekes & Lumley, 1972) (Yeoh & Tu, 2009). A continuación se presentan dichas ecuaciones:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k \rho^k k^k\right) + \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k \rho^k \mathbf{v}^{\mathbf{k}} k^k\right) \\ = \boldsymbol{\nabla}\cdot\left\{\alpha^k\left[\left(\mu^k + \frac{\mu_T^k}{\sigma_{k3}}\right)\boldsymbol{\nabla} k^k\right]\right\} + \alpha^k\left(p^k + G^k - \rho^k \beta' k^k \omega^k\right) \\ + S_{k^k}^{int}\end{aligned} \tag{1.234}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha^k\rho^k\omega^k\right)+\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\alpha^k\rho^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\omega^k\right)$$
$$=\boldsymbol{\nabla}\cdot\left\{\alpha^k\left[\left(\mu^k+\frac{\mu_T^k}{\sigma_{\omega 3}}\right)\boldsymbol{\nabla}\omega^k\right]\right\}$$
$$+2\alpha^k\rho^k(1-F_1)\frac{1}{\sigma_{\omega 2}\omega^k}\boldsymbol{\nabla}k^k\boldsymbol{\nabla}\omega^k \tag{1.235}$$
$$+\alpha^k\alpha_3\frac{\omega^k}{k^k}\left(p^k+C_3\left\|G^k\right\|\right)-\alpha^k\rho^k\beta_3\left(\omega^k\right)^2+S_{\omega^k}^{int}$$

En las ecuaciones anteriores los términos $S_{k^k}^{int}$ y $S_{\omega^k}^{int}$ representan fuentes o sumideros que toman en cuenta la producción o disipación de la turbulencia debido a la interacción entre la fase continua y la fase dispersa. Las burbujas y pequeñas partículas tienden a disminuir la turbulencia del flujo (Yeoh & Tu, 2009). La producción de esfuerzo cortante p^k se define como:

$$p^k=\mu_T^k\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\cdot\left[\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}^{\mathbf{k}}+\left(\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right)^{\boldsymbol{T}}\right]-\frac{2}{3}\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\left(\mu_T^k\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{v}^{\mathbf{k}}-\rho^k\mathbf{v}^{\mathbf{k}}\right) \tag{1.236}$$

La producción debido a la gravedad G^k, válida para flujos débilmente compresibles, se determina a partir de:

$$G^k=-\frac{\mu_T^k}{\rho^k\sigma_{\rho^k}}\mathbf{g}\cdot\boldsymbol{\nabla}\rho^k \tag{1.237}$$

En la ecuación 1.235 se impone la condición por la cual G^k siempre debe ser positivo (signo de valor absoluto), es decir, max(G^k,0). Como se observa en las ecuaciones preliminares, el modelo está constituido por algunas funciones y constantes adicionales.

La primera función es F_1 que cumple con el papel de ser el nexo entre los modelos k-ω y k-ϵ. Esta función es multiplicada en ambos modelos matemáticos, y el resultado de estas multiplicaciones es sumado correspondientemente para originar el modelo de transporte de esfuerzo

cortante. Esta función está diseñada para tomar un valor de uno en la vecindad de superficies sólidas (lo que activa el modelo k-ω) y cero en el seno del flujo (lo que activa el modelo k-ϵ transformado):

$$F_1 = tanh(\chi_1^4) \tag{1.238}$$

En donde $\chi_1{}^4$ está definido como:

$$\chi_1 = \min\left[\max\left(\frac{\sqrt{k^k}}{0.09\omega^k d_n}, \frac{500\mu^k}{\rho^k \omega^k d_n^2}\right), \frac{4\rho^k k^k}{D_\omega^2 \sigma_{\omega 2} d_n^2}\right] \tag{1.239}$$

La variable $D_{\omega 2}$ se evalúa de la siguiente manera:

$$D_\omega^2 = \max\left[2\rho^k \frac{1}{\sigma_{\omega 2}\omega^k} \boldsymbol{\nabla} k^k \boldsymbol{\nabla} \omega^k, 10^{-10}\right] \tag{1.240}$$

En cuanto a la difusividad de remolino, esta viene determinada a través de:

$$\mu_T^k = \frac{\rho^k \alpha_3 k^k}{\max[\alpha_3 \omega^k, S^k F_2]} \tag{1.241}$$

En donde S^k está relacionado con el tensor velocidad de deformación (definido por la ecuación 1.216):

$$S^k = \sqrt{\mathbf{2\Xi^k : \Xi^k}} \tag{1.242}$$

La función F_2 viene dada por:

$$F_2 = tanh(\chi_2^2) \tag{1.243}$$

En donde $\chi_2{}^2$ está definido como:

$$\chi_2 = \max\left[\frac{2\sqrt{k^k}}{0.09\omega^k d_n}, \frac{500\mu^k}{\rho^k \omega^k d_n^2}\right] \tag{1.244}$$

En las ecuaciones 1.239 y 1.244 la constante d_n representa la distancia más cercana a una superficie o pared fija. Otras funciones son definidas a partir de F_1 (Yeoh & Tu, 2009):

$$\sigma_{k3} = F_1\sigma_{k1} + (1 - F_1)\sigma_{k2} \tag{1.245}$$

$$\sigma_{\omega 3} = F_1\sigma_{\omega 1} + (1 - F_1)\sigma_{\omega 2} \tag{1.246}$$

$$\alpha_3 = F_1\alpha_1 + (1 - F_1)\alpha_2 \tag{1.247}$$

$$\beta_3 = F_1\beta_1 + (1 - F_1)\beta_2 \tag{1.248}$$

Finalmente, el grupo de constantes de las ecuaciones 1.234-1.248 toman valores fijos, que han sido de deducidos a través del ajuste de datos de un gran número de experimentos de flujo turbulento, descritos en la Tabla 6 (Menter, 1994).

Tabla 6
Constantes del modelo k-*ω*

σ_{k1} 1.176	σ_{k2} 1.0
$\sigma_{\omega 1}$ 2.0	$\sigma_{\omega 2}$ 1.168
α_1 5.0/9.0	α_2 0.44
β_1 0.075	β_2 0.0828
α_3 0.31	C_3~ $\sigma_{\rho k}$~1
β' 0.09	C_μ 0.09

Fuente: (Menter, 1994)

En síntesis, las ecuaciones 1.230-1.232, 1.234 y 1.235 resuelven la conservación de masa, cantidad de movimiento lineal y energía tomando en cuenta los efectos de la turbulencia para la fase continua del fluido bifásico disperso.

1.8 Ecuaciones de conservación para la fase dispersa

Una vez realizado el análisis de la fase continua, es necesario plantear las ecuaciones que gobiernan el comportamiento de la fase discreta. Como se mencionó anteriormente, esta fase puede estar compuesta de burbujas de gas (o vapor) o partículas sólidas, siendo el primer caso de interés en esta investigación.

Se señaló anteriormente que el modelo matemático para describir el fluido bifásico disperso, aplicado en este estudio, analiza la fase continua desde el punto de vista Euleriano y la fase dispersa desde el punto de vista Lagrangiano. Esto implica que la trayectoria de cada partícula deberá ser rastreada, tomando en cuenta el efecto de la turbulencia que se desarrolla en la fase continua.

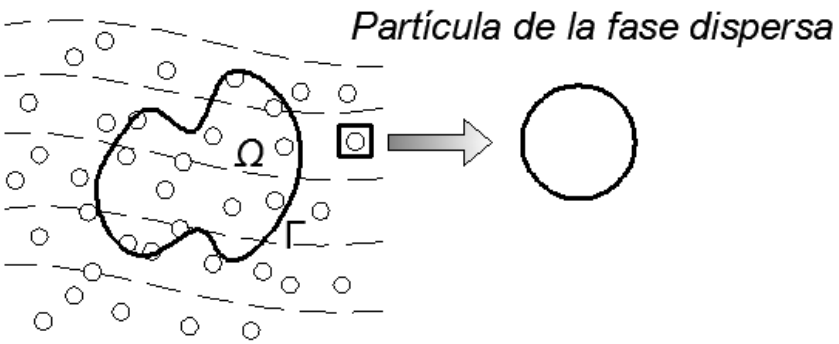


Figura 11 Partícula que forma parte de la fase dispersa. Fuente: El Autor.

En primera instancia, se describirá el balance de fuerzas sobre una partícula de la fase dispersa (ver figura 11) y posteriormente se analizará una metodología para calcular la trayectoria que un número establecido de partículas describen en la fase continua turbulenta. Por motivos de simplicidad del modelo, se asumirá que la partícula considerada para el análisis tiene forma esférica.

1.8.1 Balance de fuerzas sobre una partícula

Aplicando la segunda Ley de Newton, desde el punto de vista Lagrangiano, se obtiene la expresión para la conservación de la cantidad de movimiento lineal de una partícula (Jakobsen, 2008):

$$\frac{\breve{D}\mathbf{P^p}}{\breve{D}t} = \mathbf{F^p} \tag{1.249}$$

En donde $\mathbf{P^p}$ representa la cantidad de movimiento lineal de la partícula y $\mathbf{F^p}$ la fuerza neta que actúa sobre la misma. Nótese que la derivada temporal ha cambiado, debido a que ahora el sentido Lagrangiano de la ecuación 1.249 demanda seguir el movimiento de la partícula y no del fluido. Por tanto, la derivada sustancial D/Dt no se emplea debido a que esta rastrea el movimiento de un elemento de fluido. Recordando que el vector de cantidad de movimiento lineal puede expresarse como el producto de la masa de la partícula por su velocidad instantánea $\mathbf{v^p}$, la ecuación 1.249 se transforma en:

$$\rho^p V^p \frac{\breve{D}\mathbf{v^p}}{\breve{D}t} = \mathbf{F_S^p} + \mathbf{F_V^p} \tag{1.250}$$

Debe notarse que la masa de la partícula, al ser constante, sale del operador derivada temporal y se representa por el producto de la densidad de la partícula ρ^p y el volumen de la misma V^p. La fuerza neta que Figura en la

ecuación 1.250 representa la contribución de todas la fuerzas que en general tienen dos procedencias: superficiales $\mathbf{F_S^P}$ y volumétricas $\mathbf{F_V^P}$ (Kleinstreuer, 2003). Aunque la mayoría de fuerzas han sido deducidas para bajos números de Reynolds, mediante la introducción de constantes deducidas de la experimentación, es posible extrapolar los resultados a flujos con elevados números de Reynolds (Sommerfeld, 2000).

A. Fuerza de presión y empuje

Esta fuerza se origina en el fluido que rodea a la partícula, cuando este no se ve perturbado por la presencia de la misma. La fuerza superficial que actúa sobre la partícula $\mathbf{t^f}$, debida a su interacción con el fluido, puede representarse en toda su superficie s_p mediante:

$$\mathbf{F_P^p} = \oint_{\Gamma} \mathbf{t^f} ds_p = \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{n} ds_p \tag{1.251}$$

En donde aparece el tensor de esfuerzos de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{f}}$. Aplicando el teorema de la divergencia y la ecuación 1.61 que define al tensor de Cauchy en función de su parte hidrostática y desviadora, se obtiene:

$$\begin{aligned} \mathbf{F_P^p} &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\mathbf{f}} dV_p = \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(-P^f \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{f}}\right) dV_p \\ &= -\int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} P^f dV_p + \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{f}} dV_p \end{aligned} \tag{1.252}$$

Asumiendo que tanto el gradiente de presión como el tensor de esfuerzos viscosos son constantes en todo el volumen de la partícula, se puede integrar la ecuación 1.252:

$$\mathbf{F_P^p} = V^p(-\boldsymbol{\nabla}P^p + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{p}}) = \frac{\pi}{6}d_p^3(-\boldsymbol{\nabla}P^p + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{p}}) \tag{1.253}$$

En la ecuación 1.253 d_p representa el diámetro de la partícula. Esta misma ecuación puede plasmarse de la siguiente forma:

$$\mathbf{F_P^p} = V^p(-\boldsymbol{\nabla}P^p + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\tau}^{\mathbf{p}}) \tag{1.254}$$

Siendo ρ^f la densidad y $\mathbf{v^f}$ la velocidad instantánea del fluido que rodea a la partícula. La fuerza descrita por la ecuación 1.254 no contribuye significativamente a la fuerza neta en el caso de fluidos bifásicos dispersos en los cuales la fase dispersa sea un gas o un vapor (relación entre densidades de la fase dispersa con respecto a la fase continua del orden de 10^{-3}). En el caso del flujo de partículas sólidas en un medio líquido o gaseoso, esta fuerza toma importancia (Crowe et al., 2011).

B. Fuerza de arrastre

Es la fuerza que se ejerce el fluido sobre la partícula en la dirección del flujo (Yunus & Cimbala, 2006). Esta fuerza de arrastre se obtiene a partir de:

$$\mathbf{F_D^p} = \frac{3}{4}V^p\rho^f C_D\left(\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right)\left\|\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right\| = \frac{\pi}{8}d_p^3\rho^f C_D\left(\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right)\left\|\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right\| \tag{1.255}$$

El coeficiente de arrastre C_D es función del número de Reynolds relativo, definido como:

$$\mathrm{Re^p} = \frac{\rho^f d_p\left\|\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right\|}{\mu^f} \tag{1.256}$$

En la ecuación 1.256 μ^{f} representa la viscosidad absoluta o dinámica del fluido que rodea la partícula. Para valores de $\mathrm{Re}^{p} \leq 2.6\times10^{5}$, se ha determinado que la siguiente correlación permite predecir el valor de C_D (Krueger, Wirtz, & Scherer, 2015):

$$C_D = \frac{24}{\mathrm{Re}^{\mathrm{p}}}[1 + A(\mathrm{Re}^{\mathrm{p}})^{B}] + \frac{C\ \mathrm{Re}^{\mathrm{p}}}{D + \mathrm{Re}^{\mathrm{p}}} \tag{1.257}$$

Los valores de las constantes A, B, C y D pueden obtenerse de:

$$A = \exp(2.3288 - 6.4581\varkappa + 2.4486\varkappa^{2}) \tag{1.258}$$

$$B = 0.0964 + 0.5565\varkappa \tag{1.259}$$

$$C = \exp(4.905 - 13.8944\varkappa + 18.4222\varkappa^{2} - 10.2599\varkappa^{3}) \tag{1.260}$$

$$D = \exp(1.4681 + 12.2584\varkappa - 20.7322\varkappa^{2} + 15.8855\varkappa^{3}) \tag{1.261}$$

En las ecuaciones 1.258-1.261, $\varkappa$ se conoce como el factor de forma y se define como:

$$\varkappa = \frac{s}{S} \tag{1.262}$$

En esta ecuación *s* es el área de una esfera equivalente en volumen al de la partícula (esta puede adoptar cualquier forma), y *S* es el área superficial real de la partícula. Para una partícula esférica $\varkappa$=1.

C. Fuerza de Basset

Esta fuerza toma en cuenta los efectos viscosos. Hace referencia al retraso en el desarrollo de la capa límite en un medio fluido conforme la velocidad relativa ($\mathbf{v^f}$ - $\mathbf{v^p}$) cambia con el tiempo (Clift, Grace, & Weber, 2005; Crowe et al., 2011). La fuerza de Basset se calcula a través de (Sommerfeld, 2000):

$$\mathbf{F_B^p} = 9C_B \frac{V^p}{d_p}\sqrt{\frac{\rho^f \mu^f}{\pi}}\left[\int_{t_0}^{t} \frac{\frac{d}{dt}\left(\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right)}{\sqrt{t-s}}\,ds + \frac{\left(\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right)_0}{\sqrt{t}}\right] \tag{1.263}$$

El término a la derecha de la integral contempla la velocidad relativa inicial en un tiempo t_0=0. La constante C_B puede ser calculada mediante:

$$C_B = 0.48 + \frac{0.52}{(A_c + 1)^3} \tag{1.264}$$

El término A_c se conoce como el número de aceleración, y viene descrito por:

$$A_c = \frac{\left\|\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right\|^2}{d_p\left\|\frac{d}{dt}\left\|\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right\|\right\|} \tag{1.265}$$

La fuerza de Basset es de difícil implementación y usualmente suele ser eliminada por razones prácticas (Johnson, 1998).

D. Fuerza de sustentación de Saffman

Se origina por la distribución de presión originada sobre una partícula sumergida en un fluido que experimenta un gradiente de velocidad. Como se

observa en la Figura 12, la partícula está sumergida en un flujo cortante. En la parte superior las altas velocidades dan lugar a bajas presiones, cumpliéndose lo contrario en la parte inferior (Crowe et al., 2011), creándose una distribución de presión a lo largo de la partícula que origina la rotación.

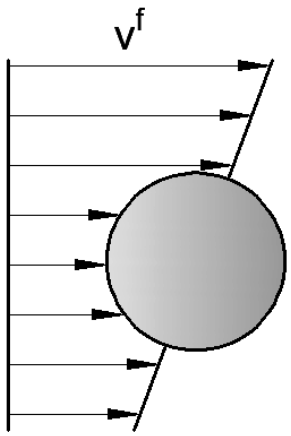


Figura 12 Partícula en presencia de un gradiente de velocidad. Fuente: Crowe et. al 2011.

Esta fuerza está definida como (Li & Ahmadi, 1992):

$$\mathbf{F_S^p} = K_L V^p \sqrt{\rho^f \mu^f} \frac{\left(\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right)\boldsymbol{\Xi}^\mathbf{f}}{d_p \left(\boldsymbol{\Xi}^\mathbf{f} : \boldsymbol{\Xi}^\mathbf{f}\right)^{1/4}} \tag{1.266}$$

En esta ecuación $\boldsymbol{\Xi}^\mathbf{f}$ es el tensor velocidad de deformación y la constante K_L=5.188. La inclusión de esta fuerza solo se recomienda en el caso de partículas de tamaño submicrométrico (Ansys, 2011). Otra versión de esta misma fuerza, establece que (Crowe et al., 2011):

$$\mathbf{F_S^p} = 1.615 C_S d_p^2 \left(\frac{\rho^f \mu^f}{\|\boldsymbol{\omega}_\mathbf{f}\|}\right)^{\frac{1}{2}} \left[\boldsymbol{\omega}_\mathbf{f} \times \left(\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\right)\right] \tag{1.267}$$

En esta ecuación $\boldsymbol{\omega}_\mathbf{f}$ representa la velocidad angular del fluido que rodea a la partícula:

$$\boldsymbol{\omega}_\mathbf{f} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{v}^\mathbf{f} \tag{1.268}$$

C_S es un coeficiente que puede ser calculado a través de (Sommerfeld, 2000):

$$C_S = \frac{4.1126}{(\mathrm{Re}^\mathrm{s})^{0.5}} C_{LS} \tag{1.269}$$

En donde Re^s es el número de Reynolds de flujo cortante (Sommerfeld, 2000):

$$\mathrm{Re}^\mathrm{s} = \frac{\rho^f d_p^2 \|\boldsymbol{\omega}_\mathbf{f}\|}{\mu^f} \tag{1.270}$$

El coeficiente C_{LS} depende directamente de Re^p y una constante Π. Para valores de $\mathrm{Re}^\mathrm{p} \leq 40$ (Crowe et al., 2011):

$$C_s = (1 - 0.3314\Pi^{0.5})\exp\left(-\frac{\mathrm{Re}^\mathrm{p}}{10}\right) + 0.3314\Pi^{0.5} \tag{1.271}$$

Para valores de $\mathrm{Re}^\mathrm{p} > 40$:

$$C_s = 0.0524(\Pi \mathrm{Re}^\mathrm{p})^{0.5} \tag{1.272}$$

La constante Π se calcula a partir de (Sommerfeld, 2000):

$$\Pi = \frac{\mathrm{Re}^\mathrm{s}}{\mathrm{Re}^\mathrm{p}} \tag{1.273}$$

La ecuación 1.273 es válida para rango de $0.005 < \Pi < 0.4$.

E. Fuerza de sustentación de Magnus

Las partículas que no están girando libremente en un flujo también pueden experimentar una fuerza de sustentación debido a su rotación, denominada como fuerza de Magnus. Esta sustentación es causada por una diferencia de presión entre ambos lados de la partícula resultante de la diferencia de velocidad debido a la rotación (Crowe et al., 2011). El vector de fuerza de Magnus es perpendicular a la velocidad de flujo de la fase continua, como se observa en la Figura 13. Está representada por la ecuación 1.274 (Sommerfeld, 2000).

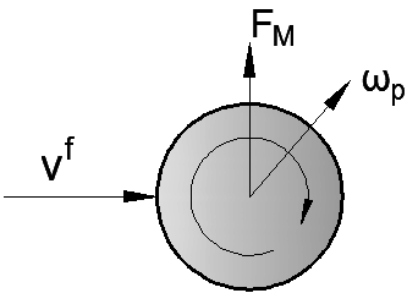


Figura 13 Fuerza de Magnus sobre la partícula. Fuente: Crowe et. al 2011.

$$\mathbf{F_M^p} = \frac{1}{2} C_{LR} V^p \rho^f \frac{\mathrm{Re^p}}{\mathrm{Re^r}} \left[\mathbf{\Omega} \times \left(\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p} \right) \right] \tag{1.274}$$

En la ecuación 1.274 $\boldsymbol{\Omega}$ representa al vector de rotación relativa, definido como:

$$\mathbf{\Omega} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}} \nabla \times \mathbf{v^f} - \boldsymbol{\omega}_\mathbf{p} \tag{1.275}$$

En la ecuación 1.275 $\boldsymbol{\omega}_\mathbf{p}$ es el vector de velocidad angular de la partícula, que puede calcularse mediante:

$$\boldsymbol{\omega}_\mathbf{p} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{v}^\mathbf{p} \tag{1.276}$$

La constante CLR viene determinada a través de:

$$\mathbf{C}_\mathbf{LR} = \frac{\mathrm{Re}^\mathrm{r}}{\mathrm{Re}^\mathrm{p}} \tag{1.277}$$

En donde Rer es el número de Reynolds de rotación de la partícula:

$$\mathrm{Re}^\mathrm{r} = \frac{\rho^f d_p^2 \|\boldsymbol{\Omega}\|}{\mu^f} \tag{1.278}$$

F. Fuerza virtual o de masa añadida

Se origina por la diferencia entre las aceleraciones del fluido y la partícula, tomando relevancia cuando esta diferencia es grande. El nombre proviene del hecho de que la partícula resiste aceleraciones más fuertes de las que debería considerando su masa real (Wörner, 2003). Se define como la fuerza necesaria para acelerar el fluido que rodea la partícula y viene dada por (Kleinstreuer, 2003; Tomiyama, Žun, Higaki, Makino, & Sakaguchi, 1997):

$$\mathbf{F}_\mathbf{MA}^\mathbf{p} = \frac{1}{2} C_A m^f \left(\frac{D}{Dt}\mathbf{v}^\mathbf{f} - \frac{\breve{D}}{\breve{D}t}\mathbf{v}^\mathbf{p} \right) = \frac{1}{2} C_A \rho^f V^p \left(\frac{D}{Dt}\mathbf{v}^\mathbf{f} - \frac{\breve{D}}{\breve{D}t}\mathbf{v}^\mathbf{p} \right) \tag{1.279}$$

En la ecuación 1.279, la masa de fluido ha sido reemplazada por el producto $\rho^f V_p$. Esto quiere decir que estamos acelerando un volumen de fluido

equivalente al volumen de la partícula. El coeficiente CA se puede calcular mediante:

$$C_B = 2.1 - \frac{0.132}{A_c^2 + 0.12} \tag{1.280}$$

El número de aceleración A_c viene calculado a través de la ecuación 1.265.

G. Fuerza de gravedad y de empuje o flotación

La fuerza de gravedad se origina por la acción que ejerce el campo gravitatorio terrestre sobre la partícula. Esta fuerza se conoce también como peso y se representa como:

$$\mathbf{F_G^p} = \rho^p V^p \mathbf{g} \tag{1.281}$$

La fuerza de flotación o empuje se produce por la diferencia de densidades entre el fluido y la partícula. Representa el volumen desalojado de fluido debido a la inmersión de la partícula en el mismo. Una manera de calcularlo, es a través de la ecuación de Cauchy (ecuación 1.63):

$$\rho^f \left(\frac{D\mathbf{v^f}}{Dt} - \mathbf{g} \right) = -\boldsymbol{\nabla} P^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{F_P^p}}{V^p} \tag{1.282}$$

Como se observa en la ecuación 1.282, se ha introducido también el concepto de fuerza de presión que actúa sobre la partícula. Despejando se llega a:

$$V^p \rho^f \left(\frac{D\mathbf{v^f}}{Dt} - \mathbf{g} \right) = -\boldsymbol{\nabla} P^k + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau}^{\mathbf{k}} = \mathbf{F_P^p} \tag{1.283}$$

Dos cosas deben notarse de la ecuación 1.283. La primera, el surgimiento del empuje o fuerza de flotación que se encuentra en el miembro izquierdo de la ecuación 1.283, definido como:

$$\mathbf{F_E^p} = -\rho^f V^p \mathbf{g} \tag{1.284}$$

La segunda, está relacionada con la aparición de una fuerza producto de la masa de la partícula y la aceleración del fluido, que se encuentra en el lado izquierdo de la ecuación 1.283. Para entender esto, recuérdese que la partícula se encuentra totalmente sumergida en el fluido. Como el volumen desalojado de fluido es igual al volumen de la partícula, se deduce que V^f=V^p, es decir, estamos acelerando un volumen de fluido equivalente al volumen de la partícula. Si la influencia del campo gravitatorio terrestre es despreciable comparada con esta fuerza, entonces las fuerzas de presión pueden también definirse como:

$$\mathbf{F_P^p} \approx V^p \rho^f \frac{D\mathbf{v^f}}{Dt} \tag{1.285}$$

Por otra parte, la fuerza de flotación tiene signo contrario a la fuerza de gravedad, como se puede deducir a partir de la ecuación 1.281. Combinando estas fuerzas, se obtiene una resultante que depende en su totalidad del vector aceleración de la gravedad **g**:

$$\mathbf{F_{GE}^p} = (\rho^p - \rho^f) V^p \mathbf{g} \tag{1.286}$$

Las ecuaciones 1.251-1.286 presentan el marco conceptual que permite entender las diferentes interacciones de la partícula con el fluido (medio continuo) que la rodea. Finalmente, el balance de fuerzas sobre la partícula es el siguiente:

$$\rho^p V^p \frac{\widetilde{D\mathbf{v}^\mathbf{p}}}{\widetilde{Dt}} = \mathbf{F_P^p} + \mathbf{F_D^p} + \mathbf{F_B^p} + \mathbf{F_S^p} + \mathbf{F_M^p} + \mathbf{F_{MA}^p} + \mathbf{F_{GE}^p} \tag{1.287}$$

En el caso de que $\rho^f \gg \rho^p$, como es el caso de fluidos dispersos con un líquido como fase continua y un gas o vapor como fase dispersa, la ecuación 1.287 se reduce a (Hanratty, 2013):

$$0 = \mathbf{F_P^p} + \mathbf{F_D^p} + \mathbf{F_S^p} + \mathbf{F_M^p} + \mathbf{F_{MA}^p} + \mathbf{F_E^p} \tag{1.288}$$

Es decir, la fuerza de Basset, el peso y el término que incluye la derivada temporal de la cantidad de movimiento lineal de la partícula desaparecen debido a su densidad despreciable (comparada con la fase líquida). Sin embargo, debe notarse que la fuerza virtual o de masa añadida conserva la derivada temporal de la velocidad de la partícula.

Otro enfoque, que emplea las mismas fuerzas, lo da Boutloutsky y Sommerfeld (2004) que plantean un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para flujos bifásicos con burbujas como fase dispersa:

$$\rho^p V^p \frac{\widetilde{D\mathbf{v}^\mathbf{p}}}{\widetilde{Dt}} = \mathbf{F_P^p} + \mathbf{F_D^p} + \mathbf{F_{ST}^p} + \mathbf{F_{MA}^p} + \mathbf{F_{GE}^p} \tag{1.289}$$

En donde $\mathbf{F_{ST}^p}$ representa una fuerza de sustentación transversal que se calcula de la siguiente manera:

$$\mathbf{F_{ST}^p} = \frac{1}{2} V^p \rho^f \left[\left(\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p} \right) \times \boldsymbol{\omega}_\mathbf{f} \right] \tag{1.290}$$

Una adaptación de la ecuación 1.289 se propone para el caso de partículas sólidas (Bourloutski & Sommerfeld, 2004):

$$\rho^p V^p \frac{\widetilde{D\mathbf{v}^\mathbf{p}}}{\widetilde{Dt}} = \mathbf{F}_\mathbf{P}^\mathbf{p} + \mathbf{F}_\mathbf{D}^\mathbf{p} + \mathbf{F}_\mathbf{S}^\mathbf{p} + \mathbf{F}_\mathbf{M}^\mathbf{p} + \mathbf{F}_\mathbf{MA}^\mathbf{p} + \mathbf{F}_\mathbf{GE}^\mathbf{p} \tag{1.291}$$

Nótese que tanto en la ecuación 1.289 como en la 1.291, la fuerza de Basset fue eliminada.

1.9 Turbulencia en la fase discreta

1.9.1 Fuentes de turbulencia en la fase discreta

Para contemplar la turbulencia generada el movimiento de las partículas de la fase discreta, se han propuesto algunas ecuaciones que se deben incluir como fuentes de turbulencia en las ecuaciones del modelo k-ω SST. Estas ecuaciones son (Andersson et al., 2011):

$$S_k^p = \frac{\alpha^p \rho^p}{\mathcal{T} \rho^f} \left(\mathbf{v}^\mathbf{p} - \mathbf{v}^\mathbf{f} \right) \tag{1.292}$$

En esta ecuación α^{d} corresponde a la fracción volumétrica de la fase discreta, y $\mathcal{T}$ se conoce como tiempo de relajación de la partícula, término que será explicado posteriormente. En cuanto al término relacionado con la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, este viene expresado de la siguiente manera:

$$S_\omega^p = C_{3\omega} \omega^f S_k^p \tag{1.293}$$

El coeficiente $C_{3\omega}$ tiene un valor aproximado de 1.8. Sin embargo, dado que los remolinos generados por la fase discreta son mucho más pequeños que aquellos remolinos que obtienen directamente la energía cinética turbulenta de la fase continua, decaerán de manera rápida. Por tanto, las ecuaciones

1.292 y 1.293 solo deben incluirse en caso de que los remolinos generados por la fase discreta sean más grandes que aquellos generados por la fase continua (Andersson et al., 2011).

1.9.2 Tipos de turbulencia

Para analizar cómo afecta a la fase discreta la turbulencia generada en la fase continua, es necesario observar que la velocidad instantánea $\mathbf{v}^{\mathbf{f}}$ está definida como la suma de una componente promediada, generada en el modelo Euleriano (velocidad promediada en volumen y tiempo), y una componente fluctuante que se origina por los remolinos turbulentos (Muñoz-Cobo, Chiva, Essa, & Mendes, 2012).

Para desarrollar posteriormente el modelo de simulación para la componente fluctuante de la velocidad, se debe definir en primer lugar el tipo de turbulencia presente en el flujo. Para ello, supóngase que $v_1^{f'}$, $v_2^{f'}$ y $v_3^{f'}$son las componentes fluctuantes de la velocidad, definidas mediante:

$$\mathrm{v}_1^{f'} = \Re\sqrt{\left(\overline{\mathrm{v}_1^{f'}}\right)^{\mathbf{2}}} \tag{1.294}$$

$$\mathrm{v}_2^{f'} = \Re\sqrt{\left(\overline{\mathrm{v}_2^{f'}}\right)^{\mathbf{2}}} \tag{1.295}$$

$$\mathrm{v}_3^{f'} = \Re\sqrt{\left(\overline{\mathrm{v}_3^{f'}}\right)^{\mathbf{2}}} \tag{1.296}$$

En las ecuaciones 1.294-1.296 $\Re$ es un número aleatorio que sigue una distribución normal. En función del comportamiento de estas componentes, la turbulencia puede ser clasificada en:

- **Turbulencia homogénea:** Se presenta cuando la turbulencia tiene la misma estructura cuantitativa en todas partes del flujo. Aquí, las componentes fluctuantes de la velocidad no son iguales entre sí, aunque permanecen constantes en todas partes del campo de velocidades turbulento.
- **Turbulencia isotrópica:** Las fluctuaciones de velocidad con independientes del eje de referencia, es decir, invariantes respecto a la rotación o reflexión de los ejes coordenados. Por tanto:

$$\mathrm{v}_1^{f\prime} = \mathrm{v}_2^{f\prime} = \mathrm{v}_3^{f\prime} \tag{1.297}$$

- **Turbulencia anisotrópica:** Las componentes fluctuantes de la velocidad tienen una dirección preferencial y no permanecen constantes a lo largo del campo de flujo.

Con este conocimiento, se puede avanzar a otro tópico de vital importancia para entender a la turbulencia: las hipótesis de Kolmogorov y las escalas de la turbulencia.

1.9.3 Hipótesis de Kolmogorov y escalas de turbulencia

En 1941 Kolmogorov formuló tres hipótesis que son de vital importancia para entender las implicaciones que tiene el fenómeno de la turbulencia. Para ello, considérese a L_0 como la medida de los remolinos turbulentos más grandes, de carácter anisotrópico, y a LEI-LDI como límites establecidos que diferenciarán las diferentes regiones de las escalas turbulentas. Con esto se plantean las siguientes hipótesis (Andersson et al., 2011):

- **Hipótesis 1:** *A números de Reynolds suficientemente elevados y a pequeñas escalas,* $L \ll L_0$*, los movimientos turbulentos son*

estadísticamente isotrópicos. En otras palabras, si en algún lugar del flujo se presenta un proceso de reducción de tamaño de los remolinos turbulentos, se pierde cualquier información direccional. En esta escala la turbulencia es estadísticamente isotrópica y por tanto independiente de la geometría.

- **Hipótesis 2**: *En todo flujo turbulento a números de Reynolds suficientemente elevados*, estadísticamente los movimientos turbulentos a pequeñas escalas, $L<L_{EI}$, *tienen una forma universal que es determinada por la viscosidad cinemática del fluido* ν *y la tasa de disipación de la energía cinética* ϵ^f. Esto quiere decir que las estructuras turbulentas mucho más pequeñas que las estructuras anisotrópicas son universales, siendo solamente determinadas por ν^f y ϵ^f.
- **Hipótesis 3**: *En todo flujo turbulento a números de Reynolds suficientemente elevados*, estadísticamente los movimientos turbulentos de escala L en el rango $\eta_s \ll L \ll L_0$, *tienen una forma universal que es únicamente determinada por la tasa de disipación de la energía cinética* ϵ^f, *siendo independiente de* ν^f. En la expresión anterior η_s es la escala a la cual se produce la disipación de la energía cinética turbulenta, conocida como escala de Kolmogorov.

Para aclarar lo que significan las tres hipótesis, obsérvese la Figura 14 (Andersson et al., 2011):

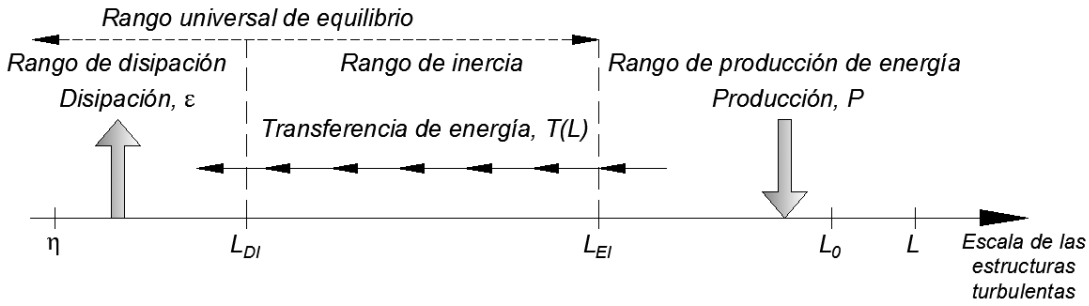


Figura 14 Escala de las estructuras turbulentas. Adaptado de: Andersson et. al 2011.

En esta representación se puede apreciar los rangos de las estructuras turbulentas. La isotropía de la turbulencia viene dada para valores de $L \ll L_0$. Para un valor de $L<L_{EI}$ se cumple que los movimientos turbulentos a pequeña escala son universales, lo que quiere decir que son similares para cada valor suficientemente elevado de número de Reynolds. Por este motivo, se ha denominado a esta como la región universal de equilibrio.

Para un rango especial de estructuras turbulentas (dentro del rango universal de equilibrio) cuya escala se encuentra limitada entre LDI=0.60 η_s < L< L_{EI}, el efecto de la viscosidad ν en los movimientos turbulentos es despreciable, lo que significa que solamente la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta ϵ^f determina el comportamiento estadístico del movimiento turbulento en este rango. Como regla práctica, L_{EI} puede usarse como la división entre remolinos de carácter isotrópico ($L<L_{EI}$) y anisotrópico ($L>L_{EI}$). Para esto, se requiere definir a L_{EI}=1/6 L_0. Con estos conceptos, se definen a continuación algunos parámetros útiles en el manejo de las escalas turbulentas (Andersson et al., 2011):

Tabla 7
Longitud, velocidad y tiempo para diferentes escalas de remolinos turbulentos

Escala turbulenta	Longitud	Velocidad	Tiempo
Gran escala	$L_T = \frac{(k^f)^{\frac{3}{2}}}{\epsilon^f}$	$U_T = (k^f)^{1/2}$	$\mathfrak{T}_T = \frac{k^f}{\epsilon^f}$
Pequeña escala	$\eta_s = \left[\frac{(\nu^f)^3}{\epsilon^f}\right]^{\frac{1}{4}}$	$U_s = \left(\frac{\nu^f}{\epsilon^f}\right)^{1/2}$	$\mathfrak{T}_s = (\epsilon^f \nu^f)^{\frac{1}{4}}$

Fuente: Andersson et. al 2011

De la Tabla 7 se pueden realizar algunas reflexiones. La primera de ellas con respecto a los remolinos turbulentos de gran escala. Si la escala de longitud de uno de estos viene determinada por L_0=L_T, esa estructura turbulenta puede considerarse como una de las más grandes existentes en el flujo conteniendo la mayoría de la energía cinética turbulenta. Para estos mismos remolinos turbulentos, la escala de tiempo $\mathfrak{T}_T$ se define como el tiempo necesario para que se disgreguen desde el tamaño L_0, es decir, el tiempo de vida del remolino. También se puede definir como el tiempo necesario para que la energía cinética turbulenta contenida en un remolino de dimensiones L_0 se transfiera a uno de dimensión η_s.

1.9.4 Simulación de camino aleatorio (random walk model)

Para modelar la componente fluctuante de la velocidad instantánea se han propuesto algunas metodologías. La primera de ellas se denomina ***simulación de camino aleatorio continuo (Continuum Random Walk Model).*** Este modelo matemático calcula la velocidad instantánea a través de la ecuación de Langevin (Dehbi, 2008). Esta ecuación provee una descripción más realista de los torbellinos turbulentos, a expensas de un gran esfuerzo computacional. Este modelo correlaciona las fluctuaciones de la velocidad

experimentadas por una partícula en una nueva posición en función de las fluctuaciones experimentadas en una posición anterior a través de una función de decaimiento exponencial (función de decaimiento de Langevin) (Ranade, 2001).

La segunda metodología se denomina ***simulación de camino aleatorio discreto (Discrete Random Walk Model).*** En este modelo, se asume que la componente fluctuante de la velocidad tiene una distribución Gaussiana, siendo calculada por la multiplicación de un número aleatorio con una distribución normal y la raíz cuadrada de la velocidad media instantánea. Este mismo número es usado para determinar el tiempo de vida de un torbellino turbulento (escala de tiempo integral), empleándose un número aleatorio distinto para cada tiempo de vida de torbellino. Este método entrega resultados razonables por lo cual ha sido ampliamente usado (Ranade, 2001). Por motivos de simplicidad, en esta investigación se adoptará este enfoque.

En el modelo de simulación de camino aleatorio discreto, cada torbellino es caracterizado por: i) una componentes fluctuantes de la velocidad que siguen una distribución Gaussiana y permanecen constantes durante el tiempo de vida del torbellino (Yeoh & Tu, 2009), y ii) el tiempo de vida característico del torbellino.

En cuanto a las componentes fluctuantes de la velocidad, si se asume que la turbulencia desarrollada en el medio continuo es de carácter isotrópico, pueden ser definidas en función de la energía cinética turbulenta k^f:

$$\sqrt{\overline{\left(\mathrm{v}_1^{f\prime}\right)^2}} = \sqrt{\overline{\left(\mathrm{v}_2^{f\prime}\right)^2}} = \sqrt{\overline{\left(\mathrm{v}_3^{f\prime}\right)^2}} = \sqrt{\frac{2}{3}k^f} \tag{1.298}$$

En lo que respecta al tiempo de vida característico del torbellino $\mathfrak{T}_T$, este puede ser determinado en primera instancia a través de (Ansys, 2011):

$$\mathfrak{T}_T = 2T_L \tag{1.299}$$

En donde T_L representa la integral Lagrangiana de tiempo del fluido. Se define en función de la energía cinética turbulenta y su tasa de disipación, o en función de la frecuencia turbulenta dependiendo del modelo de turbulencia escogido para la fase continua:

$$T_L = C_L \frac{k^f}{\epsilon^f} = \frac{C_L}{\omega^f} \tag{1.300}$$

Para los modelos de turbulencia k-ϵ y k-ω en general (incluido el k-ω SST), el coeficiente $C_L \approx 0.30$. Otra opción para determinar $\mathfrak{T}_e$ es definirlo a través de una variación aleatoria a través de T_L:

$$\mathfrak{T}_T = -T_L \ln(r) \tag{1.301}$$

En la ecuación 1.301 *r* en un número aleatorio tal que 1> *r* >0. Este método provee una aproximación más realista para el cálculo de $\mathfrak{T}_e$ (Ansys, 2011). Otro parámetro importante es el tiempo en el que una partícula tarda en atravesar un torbellino turbulento $\mathfrak{T}_c$, que está en función de la escala de longitud del torbellino $L_0=L_T$:

$$\mathfrak{T}_c = -\mathcal{T} \ln\left(1 - \frac{L_0}{\mathcal{T}\|\mathbf{v^f} - \mathbf{v^p}\|}\right) \tag{1.302}$$

$\mathcal{T}$ se conoce como tiempo de relajación de la partícula y hace referencia a la tasa de respuesta de la aceleración de la partícula con respecto a la velocidad relativa entre la partícula y el fluido que la rodea. Viene dado por (Andersson et al., 2011):

$$\mathcal{T} = \frac{4}{3}\frac{d_p^3}{\mu^f}\frac{\rho^p}{C_D}\frac{1}{\mathrm{Re^p}} \tag{1.303}$$

Con todos estos elementos, se asume que la partícula interactúa con el torbellino el menor tiempo entre $\mathfrak{T}_T$ y $\mathfrak{T}_c$. Cuando este tiempo se alcanza, una nueva velocidad instantánea (velocidad media más su componente fluctuante) es obtenida aplicando un nuevo número aleatorio $\mathfrak{N}$.

1.10 Descripción de la geometría del fotobioreactor

Para definir las condiciones de frontera de las ecuaciones de conservación efectivas tanto de la fase continua como de la dispersa (Capítulo 3), es necesario conocer la geometría del fotobioreactor de placa plana. El equipo seleccionado en este trabajo fue empleado en la investigación de Reyna-Velarde y colaboradores (2010), en la cual se desarrolló una caracterización hidrodinámica y de transferencia de masa del fluido bifásico contenido en el fotobioreactor.

La fase continua está constituida por una disolución de nutrientes (medio de cultivo de Zarrouk) mientras que la fase dispersa está conformada por burbujas de aire que son introducidas al fotobioreactor a través de un tubo de acero inoxidable con 11 agujeros de 2mm de diámetro. Las paredes del equipo fueron construidas de placas acrílicas y la división interior de una placa de vidrio (ver figura 15). El equipo descrito no cuenta con una cubierta superior, es decir, está expuesto a la atmósfera (Reyna-Velarde, Cristiani-Urbina, Hernández-Melchor, Thalasso, & Cañizares-Villanueva, 2010).

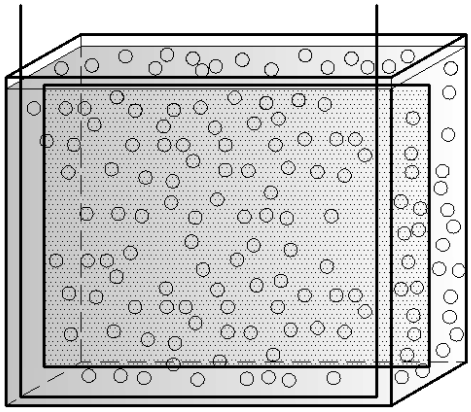


Figura 15 Esquema del fotobioreactor de placa plana. Fuente: Reyna-Velarde et. al 2010.

En la Figura 16 se aprecian las medidas del fotobioreactor de placa plana, en tres vistas obtenidas a partir de la Figura 15 (Reyna-Velarde et al., 2010):

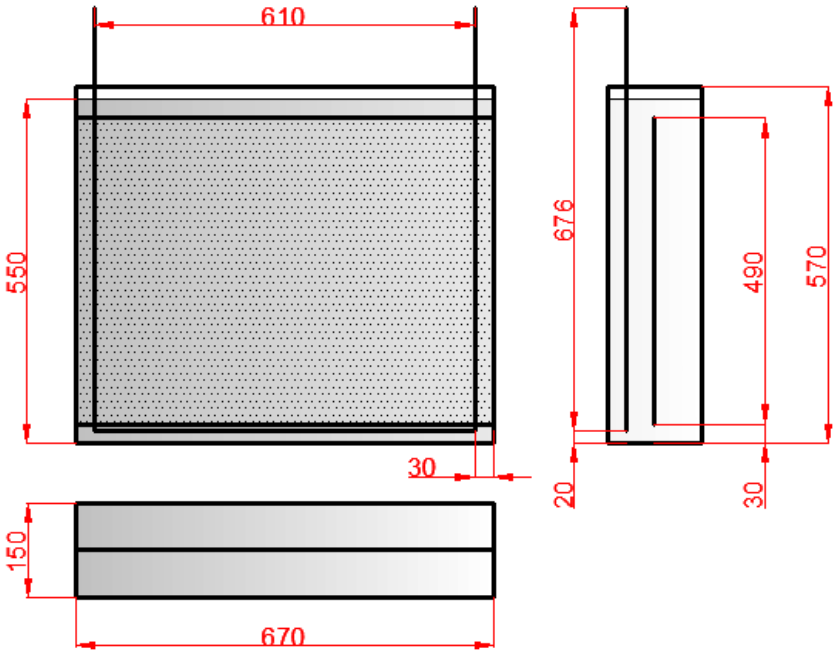


Figura 16 Dimensiones del fotobioreactor de placa plana. Fuente: Reyna-Velarde et. al 2010.

Debe notarse que la placa central que divide al fotobioreactor en dos compartimentos está colocada a una distancia de 30mm desde la base del equipo y la altura máxima de líquido en el equipo alcanza los 550mm, desde la misma cota.

CAPÍTULO II

TRANSFERENCIA DE CALOR POR RADIACIÓN EN UN MEDIO PARTICIPANTE. CINÉTICA DE CRECIMIENTO DE LA *ARTHROSPIRA PLATENSIS*

2.1 Introducción

En este capítulo se desarrollarán los fundamentos teóricos del modelo matemático que permitirá predecir el crecimiento de la cianobacteria *Arthrospira Platensis* en un fotobioreactor de placa plana. En primer lugar, se analizarán las características estructurales que hacen que diferentes especies de microorganismos fotosintéticos capten la radiación solar. A continuación, se deducirá la ecuación de transporte radiativo, fundamental para entender como los fotones provenientes de la radiación solar interactúan con las cianobacterias. Inmediatamente, se estudiará el modelo matemático de ordenadas discretas, mismo que permitirá resolver eficientemente la ecuación de transporte radiativo en el dominio computacional. Finalmente, se planteará una ecuación cinética que predecirá el crecimiento de la cianobacteria *Arthrospira Platensis*, vinculada con el campo de radiación resuelto mediante el modelo matemático de ordenadas discretas.

2.2 Radiación térmica

Para analizar los fundamentos de la radiación térmica es necesario definir qué es radiación electromagnética. El fundamento teórico de la radiación electromagnética fue establecido en la década de 1860 por James Clerk Maxwell, quien postuló que las cargas aceleradas o las corrientes eléctricas cambiantes dan lugar a campos eléctricos y magnéticos. Estos campos que

se mueven con rapidez se denominan ondas electromagnéticas o simplemente radiación electromagnética y son capaces de transportar energía debido a cambios en las configuraciones electrónicas a nivel atómico o molecular (Cengel & Ghajar, 2011).

Los parámetros que permiten definir a una onda electromagnética son la frecuencia ν, la energía ε y la longitud λ. La frecuencia de una onda electromagnética se define como el número de oscilaciones efectuadas por unidad de tiempo y depende solamente de la fuente emisora de la radiación, siendo independiente del medio a través del cual viaja la onda. La longitud de onda se define como la distancia real que recorre una perturbación (onda) en un intervalo de tiempo entre dos máximos consecutivos de cualquier propiedad física de la onda (Fitzpatrick, 2008). Estas dos últimas propiedades se encuentran relacionadas mediante la ecuación 2.1 en donde *c* representa la velocidad de propagación de la onda en un medio determinado:

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \tag{2.1}$$

Esta ecuación establece que las ondas electromagnéticas con elevadas frecuencias poseen menores longitudes de onda, o viceversa. La constante *c* a su vez está relacionada con la velocidad de la luz c_0 a través de la ecuación 2.2:

$$c = \frac{c_0}{n} \tag{2.2}$$

La velocidad es de la luz es de aproximadamente $2.9979 \times 10^8 ms^{-1}$. En esta ecuación *n* es el índice de refracción del medio tomando un valor aproximado de 1 para el aire y la mayoría de los gases, 1.33 para el agua y aproximadamente 1.5 para el vidrio (Cengel & Ghajar, 2011).

La energía de una onda es una característica fundamental en el análisis de transferencia de energía por radiación. En 1900 Max Planck presentó el trabajo titulado *"Sobre la Ley de Distribución de la Energía en el Espectro Normal"*, en el cual supuso que la radiación electromagnética podía ser representada por un conjunto de paquetes discretos de energía denominados fotones o cuantos. Con ello, se consideró que la energía de uno de estos fotones es proporcional a su frecuencia (Cengel & Ghajar, 2011):

$$\varepsilon = \hbar\nu = \frac{\hbar c}{\lambda} \tag{2.3}$$

La constante de proporcionalidad $\hbar$ tiene un valor equivalente de 6.6256×10^{-34}Js y se conoce como la constante de Planck. La ecuación 2.3 expresa que la energía de un fotón es directamente proporcional a su frecuencia, o inversamente proporcional a su longitud de onda.

El espectro electromagnético está dividido en una serie de regiones que cubren longitudes de onda tan pequeñas como las de los rayos gama hasta longitudes grandes como las microondas, tal como se observa en la Figura 17 (Modest, 2013) :

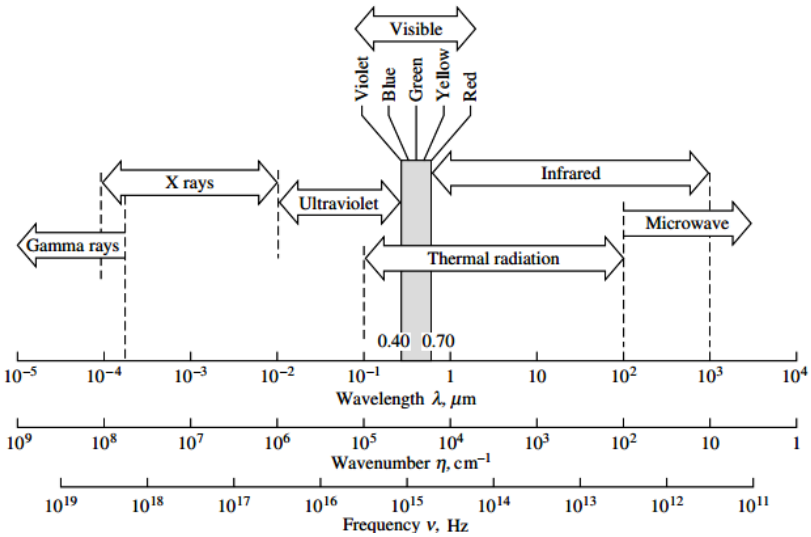


Figura 17 Espectro eléctromagnético. Fuente: Modest 2013.

Sin embargo, de todo el espectro electromagnético solo la región sombreada en la Figura 17 corresponde a lo que se conoce como radiación térmica(desde 0.1μm hasta 100μm), compuesta por un 6.4% de radiación ultravioleta, 48% de radiación visible y 45.6% de radiación infrarroja (Duffie & Beckman, 2006). De especial interés para esta investigación constituye una fracción del espectro de radiación térmica conocida como Radiación Fotosintéticamente Activa (RFA), que abarca todo el espectro visible de la luz. En esta región los microorganismos fotoautótrofos son capaces emplear los fotones provenientes de la luz solar para fijar el carbón inorgánico en forma de CO_2 y transformarlo en carbón orgánico para su crecimiento, como se verá posteriormente.

Una de las fuentes más prominentes de este tipo de radiación es el Sol, del cual recibimos diariamente energía en forma de fotones cuyas longitudes de onda abarcan todo el espectro de la radiación térmica (Bergman, Incropera, & Lavine, 2011). El Sol puede considerarse como una esfera que contiene plasma a muy elevadas temperaturas, de diámetro aproximado de 1.39×10^{9}m, localizado a una distancia promedio de 1.49×10^{11}m de la Tierra

y con una temperatura superficial de 5800K (Duffie & Beckman, 2006). El Sol puede suponerse como un absorbedor de la radiación electromagnética en todas sus longitudes de onda sin considerar su dirección. Además, ningún cuerpo puede emitir más radiación a una determinada temperatura y longitud de onda que el Sol. Por tanto, de acuerdo a ley de Planck, el Sol puede considerarse como un cuerpo negro a 5800K (Liou, 2002).

El Sol emite continuamente un flujo de energía radiante *Q* equivalente a 3.8×10^{26}W, impactando contra la Tierra menos de una décima parte de este flujo. La energía solar que llega a la atmósfera terrestre alcanza un valor de 1367 Wm^{-2} y se la conoce con el nombre irradiancia solar total o constante solar, q_{SC}. Esta cantidad representa el flujo de energía solar que incide sobre una superficie perpendicular a los rayos solares en el borde exterior de la atmósfera cuando la Tierra se encuentra a una distancia media del Sol (Cengel & Ghajar, 2011).

En este punto conviene diferenciar la energía radiante Q, el flujo de energía radiante $\dot{Q}$ (Q/Δt), la irradiación *G* definida como la cantidad de energía radiante incidente por unidad de área (Q/A) y la irradiancia *q* que representa el flujo de energía radiante incidente por unidad de área ($\dot{Q}$/A). Estas cantidades están relacionadas mediante:

$$G = \frac{Q}{A} \qquad q = \frac{\dot{Q}}{A} \qquad G = q\Delta t \tag{2.4}$$

El espectro solar que incide en la Tierra, conocido como irradiancia extraterrestre, depende de la latitud, la longitud, la hora del día y el año (Bergman et al., 2011). En la Figura 2.2 se muestra el estándar ASTM G173-03 de la irradiancia espectral q_λ (irradiancia por unidad de longitud de onda) para un rango de longitudes de onda entre 250nm y 4000nm. En la misma

figura se puede observar que la irradiancia espectral extraterrestre (en color negro) alcanza su valor máximo entre 400nm y 700nm.

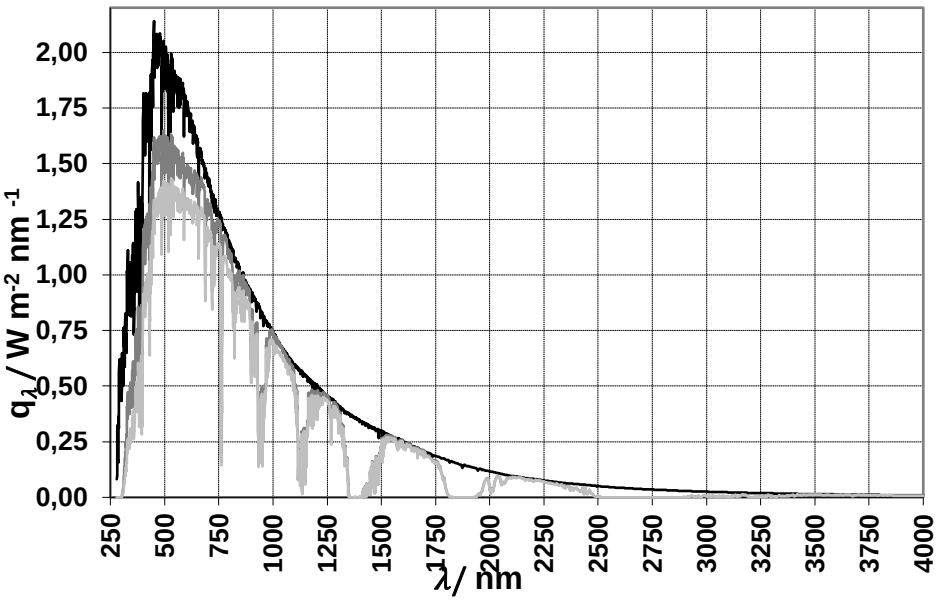


Figura 18 Irradiancia espectral media diaria para diferentes longitudes de onda. En negro la irradiancia espectral extraterrestre, en gris oscuro la irradiancia espectral global y el gris calor la irradiancia espectral directa. Fuente: ASTM G173-03 Reference spectra.

La radiación proveniente del Sol puede sufrir variaciones al momento de entrar en contacto con la atmósfera por dos motivos principalmente: a) La dispersión, que es causada por la interacción de las ondas electromagnéticas con las moléculas de aire, agua y material particulado y b) la absorción debida a las moléculas de Ozono (en la espectro ultravioleta), y a las moléculas de agua y dióxido de carbono (en el espectro infrarrojo) (Duffie & Beckman, 2006). Lo anterior pone en evidencia que no toda la radiación solar se recibe directamente, sino que parte de esta se difumina en la atmósfera.

Atendiendo estos criterios, la radiación solar puede clasificarse en (Duffie & Beckman, 2006):

- **Radiación directa:** Es la radiación recibida desde el Sol sin que sufra ninguna dispersión debido a la presencia de la atmósfera.
- **Radiación difusa:** Es la radiación recibida desde el Sol luego de ser dispersada por la atmósfera.
- **Radiación total:** Es la suma de la radiación directa y difusa.

Estas atenuaciones pueden mostrarte en la Figura 18 como discontinuidades en las curvas mostradas tanto para la radiación directa (en gris claro) como para la radiación global (en gris oscuro). Para comprender de mejor lo que sucede a nivel atmosférico, supóngase que el cielo puede representarse mediante una bóveda, como se ilustra en la Figura 19 (J Pruvost, Cornet, Goetz, & Legrand, 2011).

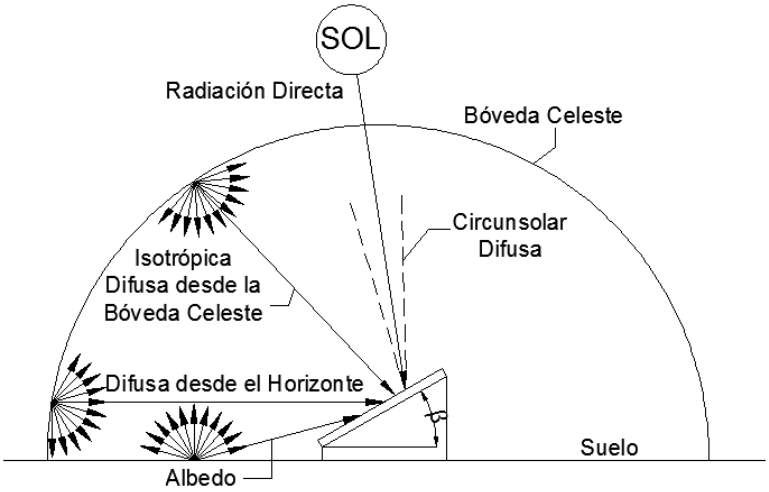


Figura 19 Radiación directa, y aportes de radiación difusa. Fuente: Pruvost et. al 2011.

La radiación directa sufre atenuaciones en esta bóveda, las mismas que dan origen a diferentes tipos de radiación difusa. La primera de ellas es la radiación isotrópica difusa (no depende de la dirección), que se recibe uniformemente desde toda la bóveda celeste. La segunda componente es la radiación cincunsolar difusa, que resulta de la dispersión directa de la

radiación solar y se concentra en la parte del cielo alrededor del Sol. La tercera componente se denomina radiación difusa desde el horizonte, cuya intensidad crece en días claros y la última componente se denomina albedo y surge de la reflexión de la radiación que incide en la superficie. Depende del material en el cual se esté reflejando la radiación (Duffie & Beckman, 2006). Todos estos tipos de radiación inciden sobre la superficie que se encuentra inclinada un ángulo β.

2.3 Estimación de la radiación solar

La radiación solar para un emplazamiento puede estimarse tanto por métodos experimentales como analíticos. Los métodos experimentales emplean algunos instrumentos de medición como el piranómetro (ver figura 20) que mide la radiación solar global. Este instrumento puede ser capaz de medir también el albedo si se lo invierte en dirección al suelo, o la radiación solar difusa si de lo tapa con una banda o cubierta. Otro instrumento conocido como pirheliómetro (ver figura 20) se utiliza para estimar la radiación solar directa. Es importante que este equipo esté acoplado a un sistema de seguimiento solar.

Figura 20 Instrumentos para medir la radiación solar. A la izquierda el piranómetro de Kipp-Zonen para medir la radiación global. A la derecha el pirheliómetro de Kipp-Zonen para medir la radiación directa.

La mayoría de estos instrumentos se acoplan en estaciones meteorológicas en donde la información es captada diariamente con fines de investigación. Todas estas mediciones experimentales son almacenadas alrededor del mundo en bases de datos (como el Atmospheric Science Data Center de la Nasa), de donde se puede obtener la información para un determinado emplazamiento únicamente especificando sus coordenadas geográficas. También a partir de estos datos se han realizado mapas heliográficos que muestran la radiación solar global, directa y difusa en un periodo de tiempo determinado para cada sitio especificado.

Para la estimación analítica de la radiación solar se han propuesto algunos modelos matemáticos como el de Anstrong-Page modificado, el de Ingeniería sin Fronteras, el modelo de la ASHRAE (American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers), entre otros.

El modelo matemático de Angstrom-Page es del tipo empírico y se basa en unas constantes que son función del clima, vegetación y horas de Sol disponibles en cada emplazamiento (Duffie & Beckman, 2006). Viene descrito por la ecuación 2.5:

$$\frac{G_{\mathrm{av}}}{(G_0)_{\mathrm{av}}} = a + b\frac{n_{\mathrm{av}}}{N_{\mathrm{av}}} \tag{2.5}$$

En donde a y b son las constantes empíricas, G_{av} es la irradiación global sobre superficie horizontal que expresa el promedio mensual de la irradiación global diaria, $(G_0)_{av}$ es la irradiación extraterrestre promediada para el intervalo de tiempo en cuestión, n_{av} es el promedio mensual del número de horas de Sol diarias y N_{av} es el promedio mensual del máximo número de horas de Sol diarias. Tanto $(G_0)_{av}$ como N_{av} pueden calcularse a partir de ecuaciones que describen la geometría solar (Duffie & Beckman, 2006), mientras que n_{av} puede encontrarse en bases de datos de estaciones meteorológicas propias de cada emplazamiento. Para el Ecuador, el Instituto Nacional de

Meteorología e Hidrología (INAMHI) ha establecido que las constantes a y b varían según la región (ver tabla 8):

Tabla 8
Valores de las constantes a y b del modelo matemático de Amstrong-Page modificado

Región	Sierra	Costa
a	0.25	0.28
b	0.45	0.54

Fuente: INAMHI

El modelo matemático de Ingeniería sin Fronteras se emplea para calcular la irradiancia sobre superficie inclinada:

$$q_\beta = Aq_H + Bq_H^2 \tag{2.6}$$

En donde q_β es la irradiancia sobre una superficie que se encuentra inclinada un ángulo β y q_H es la irradiancia sobre superficie horizontal. La constante A es una función de la reflectividad del suelo en donde se encuentra instalado el equipo de captación de la energía solar y del ángulo de inclinación de la superficie β, mientras que el coeficiente B depende de la latitud del emplazamiento y del ángulo de inclinación de la superficie β (García & Arribas, 1999).

El modelo matemático de la ASHRAE calcula directamente la irradiancia normal directa q_N sobre una superficie (ASHRAE, 2001):

$$q_N = C_N \frac{A}{\exp\left(\frac{B}{sen\alpha_z}\right)} = C_N A \exp(-Bsec\theta_z) \tag{2.7}$$

En la ecuación 2.7, A, B y C_N son constantes, α_z representa el ángulo de altitud solar que se define como el ángulo de incidencia de la irradiancia directa medida desde la horizontal y θz (ángulo cenital) es el ángulo complementario de α_z. La constante A puede ser calculada mediante la ecuación 2.8 (Wong & Chow, 2001) :

$$A = q_{SC} E_0 \tag{2.8}$$

En donde q_{SC} representa la constante solar, con un valor de 1367 Wm^{-2} y E_0 es el factor de corrección de la excentricidad de la órbita terrestre, que puede ser calculado a través de (Wong & Chow, 2001):

$$E_0 = 1.00011 + 0.034221\cos\Gamma + 0.00128\mathrm{sen}\Gamma + 0.000719\cos 2\Gamma + 0.000077\mathrm{sen}2\Gamma \tag{2.9}$$

En la ecuación 2.9 Γ representa el ángulo diario en radianes, que se calcula de la siguiente manera (Wong & Chow, 2001):

$$\Gamma = 2\pi\left(\frac{n-1}{365}\right) \tag{2.10}$$

En donde *n* representa el número de día (en el año), tomando el valor de 1 el 01 de enero y 365 el 31 de diciembre.

La constante B toma el nombre de coeficiente de extinción atmosférico y C_N representa el número de claridad. Los valores de estos coeficientes pueden ser encontrados en el libro de Fundamentos de la ASHRAE (ASHRAE, 2001). Para una determinación adecuada del recurso solar deberían contrastarse los

resultados obtenidos a partir de las distintas metodologías revisadas en este apartado, dependiendo de las necesidades particulares de cada investigación.

2.4 Radiación solar en el Ecuador

Uno de los objetivos de esta investigación es realizar el modelado matemático del campo de radiación solar incidente sobre el fotobioreactor de placa plana en el cual servirá de medio de cultivo para el crecimiento de la cianobacteria *Arthrospira Platensis*. Como se mencionó anteriormente, estos microorganismos necesitan de una fuente de radiación para poder desarrollarse mediante un proceso fotosintético. Por tanto, se considera primordial localizar un emplazamiento tentativo en el territorio nacional en donde con fines de modelación se pueda instalar el fotobioreactor de placa plana. Dos factores se considerarán como variables de decisión: el nivel de irradiancia del emplazamiento y la temperatura media del lugar.

Como primera aproximación para la determinación de la irradiancia promedio, considérese la información obtenida del Atlas Solar del Ecuador con Fines de Generación Eléctrica (2008) del CONELEC (ver figuras 21-23).

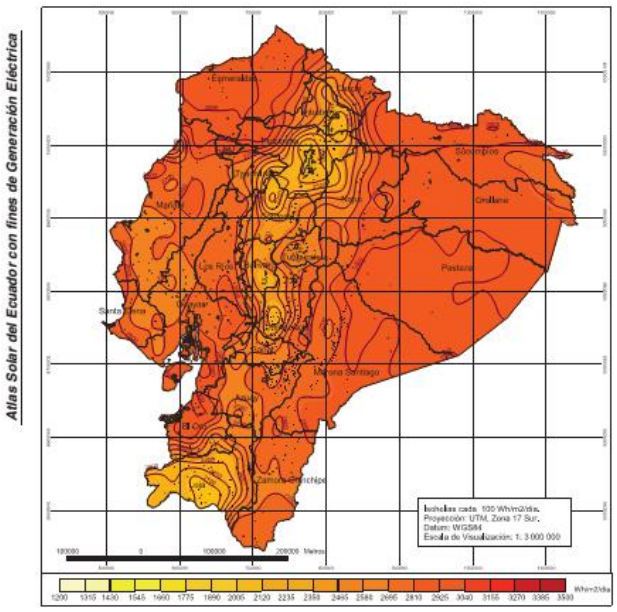


Figura 21 Irradiancia difusa promedio sobre una superficie horizontal para el año 2008. Fuente: CONELEC

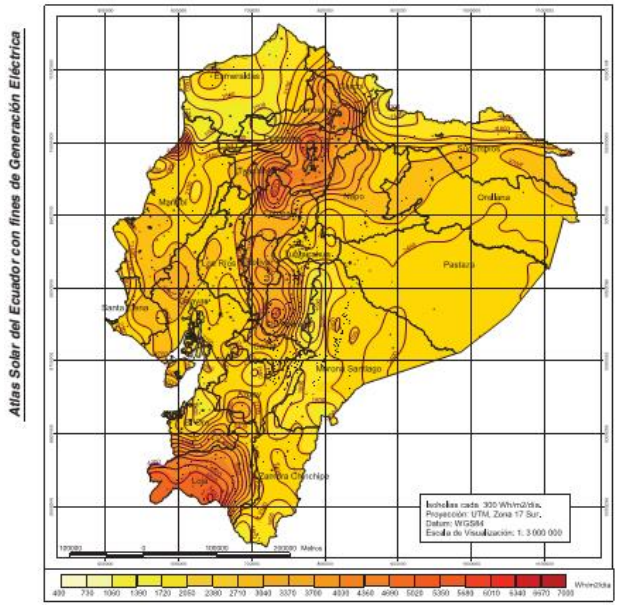


Figura 22 Irradiancia directa promedio sobre una superficie horizontal para el año 2008. Fuente: CONELEC

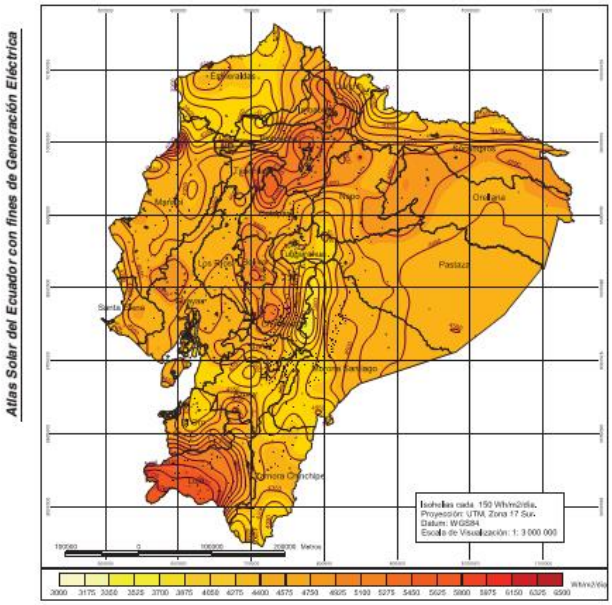


Figura 23 Irradiancia global promedio sobre una superficie horizontal para el año 2008. Fuente: CONELEC

En las Figuras 21 y 22 se presentan los mapas heliográficos de la irradiancia difusa y directa promedio en el territorio nacional para el año 2008. Los colores más cálidos indican un mayor nivel de irradiancia. Se puede observar con claridad que las regiones al norte de la provincia de Manabí, la provincia de Pichincha y sus alrededores y el sur de la provincia de Loja presentan niveles de irradiancia elevados. Esto se corrobora en la Figura 23 en donde se muestra la irradiancia global promedio.

La aproximación anterior nos lleva a escoger tres emplazamientos tentativos en el Ecuador: Pedernales al norte de la provincia de Manabí, Sangolquí en la provincia de Pichincha y Cariamanga al sur de la provincia de Loja. Para confirmar lo anterior, se emplea el método de Angstrom-Page mediante el cual se estima el promedio mensual de la irradiación global diaria sobre superficie horizontal. El cómputo de estos valores se realizó mediante una hoja de cálculo de Excel. Los resultados se presentan en la Figura 24:

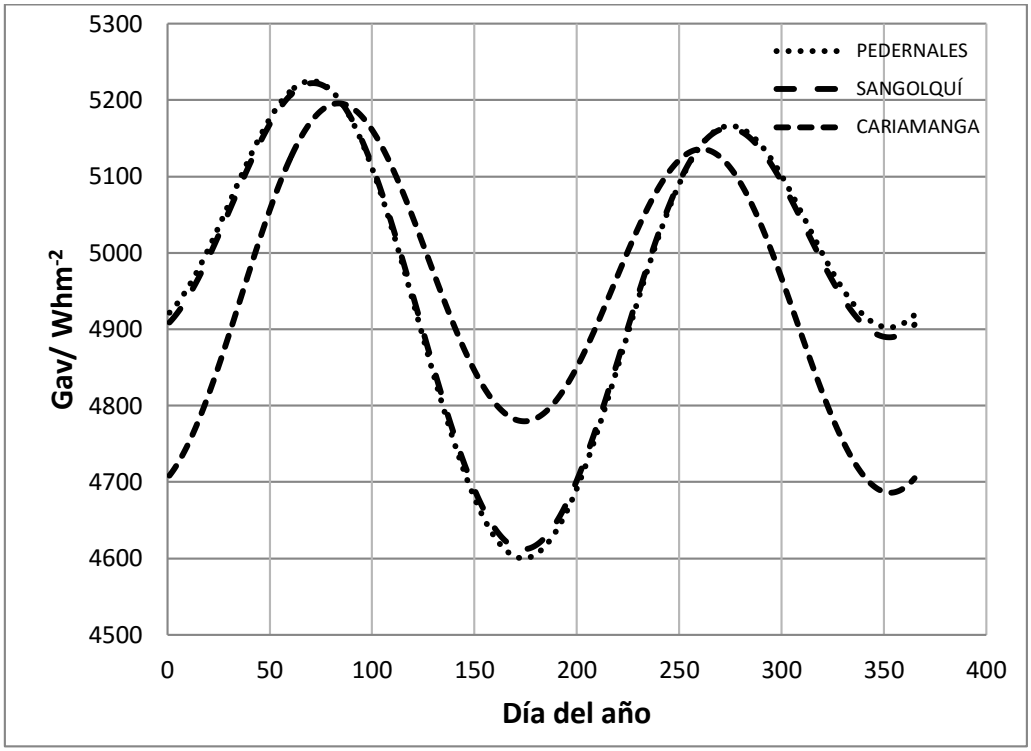


Figura 24 Promedio mensual de la irradiación global diaria sobre superficie horizontal. Fuente: El Autor.

Tabla 9
Coordenadas geográficas de los emplazamientos analizados

Emplazamiento	Latitud		Longitud	
Pedernales	0°4’12.36’’	0.070°	80°3’12.9’’	-80.053°
Sangolquí	0°20’4’’	-0.334°	78°26’51’’	-78.447°
Cariamanga	4°19’12’’	-4.320°	79°33’36’’	-79.560°

Fuente: Google Maps.

Como puede observarse en la Figura 24 para los tres emplazamientos los máximos niveles de irradiación global diaria ocurren aproximadamente a los 60 y 260 días del año, alcanzando un mínimo alrededor de los 170 días del año. Algo importante que debe notarse es que las curvas para Sangolquí y

Pedernales coinciden, algo que se espera debido a su proximidad en latitud como se muestra en la Tabla 9. Ambos emplazamientos presentan un máximo de irradiación global de aproximadamente 5200Whm^{-2} y un mínimo alrededor de los 4600Whm^{-2}. Para Cariamanga el máximo ocurre en un valor próximo al de los emplazamientos anteriores, mientras que el mínimo se sitúa aproximadamente en 4800Whm^{-2}, produciéndose una variación en los valores de irradiación global no tan pronunciada como en el caso de Sangolquí y Pedernales. La irradiación global promedio anual obtenida con el modelo de Angstrom-Page se muestra en la Tabla 10:

Tabla 10
Promedio de la irradiación global promedio anual en los tres emplazamientos analizados

Emplazamiento	Irradiación global promedio anual Whm^{-2}	Temperatura mínima promedio anual °C[1]	Temperatura máxima promedio anual °C[1]
Pedernales	4966,42	21.3	32.9
Sangolquí	4966,12	8.2	22.6
Cariamanga	4949,31	11.5	23.9

[1]Fuente: climate-data.org

Pedernales y Sangolquí coinciden en el valor de irradiación global promedio anual mientras que Cariamanga presenta un valor ligeramente menor de acuerdo al modelo. Por tanto, este primer criterio permite establecer que los tres emplazamientos son adecuados en cuanto al nivel de irradiación.

La segunda variable de decisión es la temperatura. Como se verá posteriormente, la temperatura es un factor clave en el desarrollo de las cianobacterias. Particularmente la *Arthrospira Platensis* ha demostrado tener un amplio rango de tolerancia a las variaciones de temperatura (20-42°C)

alcanzándose el crecimiento óptimo a los 36°C bajo una intensidad lumínica de exposición equivalente a 2000lux (Kumar, Kulshreshtha, & Singh, 2011).

Entonces, conviene escoger un emplazamiento cuya temperatura promedio mínima anual este cercana al rango mínimo de tolerancia de la *Arthrospira Platensis*. De acuerdo a la Tabla 2.3 Pedernales cumple con este requisito. Otra ventaja de este emplazamiento es la cercanía con el agua de mar que puede usarse como un medio de cultivo para este mismo tipo de cianobacteria (Leema, Kirubagaran, Vinithkumar, Dheenan, & Karthikayulu, 2010).

2.5 Microroganismos fotoautotótrofos: cianobacterias

Existen en la naturaleza microorganismos conocidos como fotótrofos capaces de emplear los fotones provenientes de la luz solar como fuente de energía. Dentro de este grupo, se encuentra un subconjunto de microorganismos capaces de fijar el carbono inorgánico y transformarlo en carbono orgánico (fotosíntesis), denominados fotoautótrofos.

Estos microorganismos son conocidos también como algas verdeazuladas y forman parte de la gran familia de células procariotas. Alrededor del 20-30% de la productividad fotosintética primaria mundial es atribuida a las cianobacterias (Moss et al., 2003), lo que corresponde aproximadamente de 20-30Gt de CO_2 transformado en biomasa y de 50-80Gt de O_2 liberado a la atmósfera (M Aboal, Puig, Ríos, & López-Jiménez, 2000; Marina Aboal, Puig, & Asencio, 2005). Adicionalmente algunas cianobacterias pueden intervenir de manera importante en el ciclo de transformación de N_2 en compuestos biológicamente accesibles (LeBlanc, Pick, & Aranda-Rodriguez, 2005). Pueden adaptarse a vivir en ambientes extremos (Jia et al., 2008).

Un tipo especial de cianobacteria se conoce como *Arthrospira Platensis*. Es conocida a nivel mundial por ser un suplemento alimenticio avalado por la

Organización para la Alimentación y la Agricultura (FAO, por sus siglas en inglés) así como en la industria de la química fina para la fabricación de colorantes (Ali & Saleh, 2012). También ha sido seleccionada por la NASA y por la Agencia Europea Espacial como uno de los alimentos principales para misiones espaciales de gran duración (Whitton, 2012). Morfológicamente, la *Arthrospira Platensis* es una cianobacteria filamentosa, conformada por una serie de tricomas cilíndricos multicelulares, dispuestos en forma de hélice (ver figura 25 y 26).

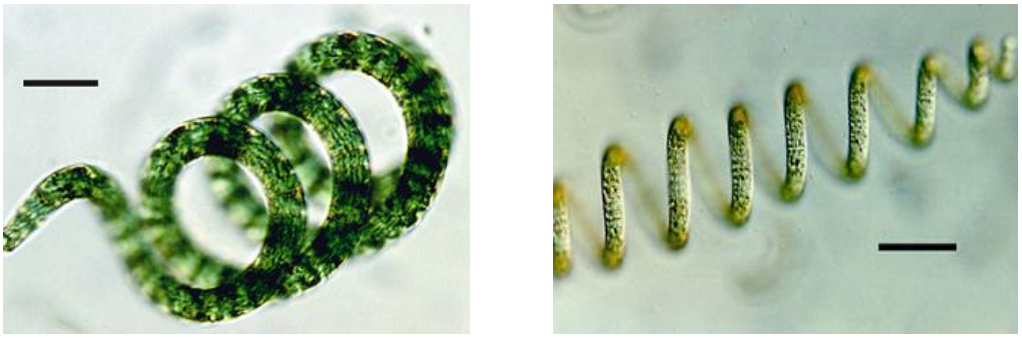


Figura 25 Forma de hélice, característica de la *Arthrospira Platensis*. Fuente: Whitton 2012.

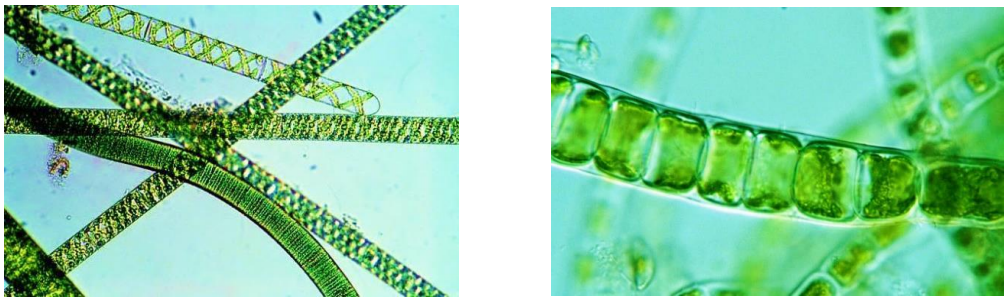


Figura 26 A la izquierda se muestra una fotografía ampliada de la cianobacteria *Arthrospira Platensis*. A la derecha una ampliación mostrando los tricomas cilíndricos. Fuente: http://bioweb.uwlax.edu/bio203/2011.

La multiplicación se da por una fragmentación de estos tricomas. El ancho de los tricomas puede variar de 2.5-16μm. La distancia entre dos crestas o dos valles de la hélice puede oscilar entre 0 y 80μm, mientras que el diámetro de la hélice puede estar alrededor de 15-60μm. Estas dimensiones pueden cambiar dependiendo de las condiciones en las que se desarrolle el microrganismo, especialmente la temperatura, la luz y la disponibilidad de nutrientes (Vonshak, 1997). Las características mencionadas pueden variar entre poblaciones de *Arthrospira Platensis* e inclusive dentro de una misma población, como se demuestra en la Figura 27.

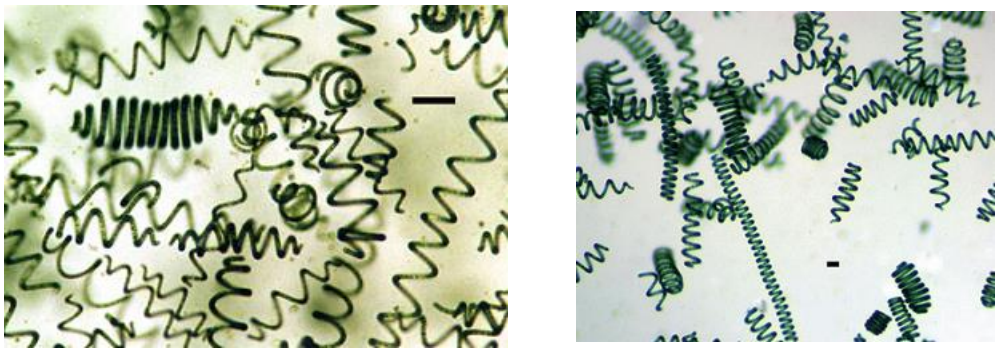


Figura 27 Diversidad de formas de *Arthrospira Platensis*, en dos lagos salinos del este de Chad. Fuente: Whitton 2012.

2.5.1 Factores que afectan el crecimiento de la *Arthrospira Platensis*

En esta sección serán analizados los factores que afectan el crecimiento de la cianobacteria *Arthrospira Platensis*. Sin embargo, el efecto de la luz solar será tratado en una sección posterior por ser considerado el factor más importante en esta investigación.

A. Fuentes de carbono inorgánico

Es considerado como uno de los factores críticos para el crecimiento de este tipo de microorganismos. Las cianobacterias al ser organismos fotoautótrofos, usan fuentes de carbón inorgánico como el CO_2, Na_2CO_3 y $NaHCO_3$ (Ren et al., 2010). El contenido de carbono de la biomasa procedente de la *Arthrospira Platensis* está alrededor del 50% (G Torzillo, Sacchi, Materassi, & Richmond, 1991), por lo que se requiere un mínimo de 1.8g de CO_2 para sintetizar 1g (en base seca) de biomasa (Posten, 2009).

A nivel industrial el CO_2 puede ser suministrado en forma de burbujas enriquecidas mezcladas con aire. Sin embargo, incluso con una buena agitación la difusión del CO_2 en el agua (0.03%) es demasiado baja para reemplazar el CO_2 que rápidamente asimilan las algas para su crecimiento, por lo que se necesita un abastecimiento de CO_2. Para solventar este problema, usualmente se emplea CO_2 diluido en aire en concentraciones del 5 al 15% en volumen. (Suh & Lee, 2003). Desde el punto de vista de la reducción de emisiones de CO_2, el crecimiento fotoautotrófico de las algas representa un modelo ideal para la reutilización del CO_2 emitido en los gases de combustión de las plantas termoeléctricas o en industrias que tengan una elevada tasa de emisiones de este compuesto (Packer, 2009).

B. Macro y micro nutrientes

Se conoce como macro y micro nutrientes a un conjunto de elementos químicos que complementan los requerimientos nutricionales de los microorganismos, pero que a su vez son imprescindibles en el desarrollo de los mismos. Entre los macronutientes considerados esenciales para el normal desarrollo las cianobacterias están: el carbono, nitrógeno, fósforo, hidrógeno, oxígeno, azufre, calcio, magnesio, sodio, potasio y cloro. Los micronutrientes

requeridos en trazas de micro, nano o incluso picogramos por litro son: el hierro, boro, manganeso, cobre, molibdeno, vanadio, cobalto, niquel, silicio y selenio (Mandalam & Palsson, 1998).

Estos macro y micronutrientes pueden estar presentes en el hábitat natural de la *Arthrospira Platensis*. Otra posibilidad es el abastecimiento de estos elementos en medios de cultivo artificiales como los fotobioreactores. A nivel de laboratorio se emplean formulaciones basados en el denominado medio de Zarrouk (Kebede & Ahlgren, 1996) para suplir la demanda de macro y micronutrientes de la *Arthrospira Platensis*. Una preparación genérica podría incluir N ($412gL^{-1}$), P ($89gL^{-1}$) S ($184gL^{-1}$), Na ($6545gL^{-1}$), K ($672gL^{-1}$), Ca ($11gL^{-1}$), Mg ($20gL^{-1}$), Cl ($626gL^{-1}$) y Fe ($6gL^{-1}$) provenientes de sales inorgánicas asimilables por la cianobacteria en cuestión (Kebede & Ahlgren, 1996).

A nivel industrial los costos de los compuestos químicos restringen su uso. Por ejemplo, como fuente de N se prefiere usar sales de amonio envés de nitratos, aunque a niveles de pH superiores a 9.25 prevalece la forma NH_3 sobre $NH4^+$, siendo la primera tóxica sobre 2.5mM (milimolar) para las cianobacterias. En las granjas de cultivo de *Arthrospira Platensis* se emplean tanto nitratos como sales de amonio (Whitton, 2012).

C. Alcalinidad y salinidad del medio

En la naturaleza la *Arthrospira Platensis* ha sido encontrada en aguas alcalinas, salobres y salinas, tanto en regiones tropicales como subtropicales (Komárek & Anagnostidis, 2005), principalmente en África, Asia y América del Sur, concretamente en Perú y Uruguay (Whitton, 2012).

Los lagos alcalinos presentan condiciones excepcionales para el desarrollo de esta cianobacteria debido a sus elevadas temperaturas, altos niveles de irradiancia solar y una fuente ilimitada de CO_2, registrándose niveles de productividad alrededor de 10g m^{-2} d^{-1} lo que supera aproximadamente en un orden de magnitud el crecimiento registrado en lagos de agua fresca (Grant, 2006). Estas condiciones altamente alcalinas elevan el pH considerablemente, lo que evita la contaminación ocasionada por otros microorganismos (por ejemplo, microalgas), permitiendo que la *Arthrospira Platensis* se desarrolle como única especie presente en el medio. Aparentemente no se han registrado hallazgos de esta cianobacteria en ambientes marinos. Esto se debe probablemente a la baja cantidad de bicarbonatos antes que a la alta cantidad de NaCl (Whitton, 2012). Sin embargo, cuando en este medio se provee de un adecuado suministro de bicarbonato, nitrógeno, fósforo así como condiciones de pH y salinidad favorables, la *Arthrospira Platensis* puede multiplicarse (Tredici, Papuzzo, & Tomaselli, 1986), aunque su productividad se reduce en un 36% comparado con medios artificiales de cultivo.

La salinidad también está presente en los lagos alcalinos y afecta al crecimiento de la *Arthrospira Platensis*. Los niveles de salinidad pueden ser muy variables, dependiendo especialmente del nivel de agua disponible en los lagos. Por ejemplo, cuando la evaporación excede al nivel de precipitaciones, se forman depósitos de sal en los bordes de estos cuerpos de agua. La temperatura media del agua alcanza los 25°C con oscilaciones de $\pm$10°C. Las horas de luz en el día llegan a 12h y el flux de fotones llega alrededor de 2000 μmol $m^{-2}s^{-1}$. La salinidad de los lagos también puede variar si es que existen cuerpos acuíferos subterráneos en los que existe prevalencia de iones Na^+ y K^+, altas concentraciones de carbonatos, bicarbonatos y SO_4^{2-} bajas concentraciones de Ca^{2+}, Mg^{2+} y Cl^-. Todas estas condiciones hacen que estos cuerpos de agua subterráneos alcancen valores de pH entre 9.5 y 11 (Vonshak, 1997; Whitton, 2012). En estas condiciones tan severas de

salinidad la *Arthrospira Platensis* es el único microorganismo presente en el medio (Iltis, 1968). La salinidad de los mares y océanos es consecuencia directa de la presencia del NaCl. Se ha observado que la *Arthrospira Platensis* no requiere de esta sal para su crecimiento, y por el contrario, elevadas cantidades de NaCl inhiben el desarrollo de esta cianobacteria (Vonshak, Guy, & Guy, 1988).

En general, los afloramientos de colonias de *Arthrospira Platensis* ocurren a valores de salinidad entre $22gL^{-1}$ y $60gL^{-1}$, altas concentraciones de carbonatos y bicarbonatos que elevan el pH a un rango entre 8.5 y 11, y temperaturas entre 25°C y 40°C.

D. Temperatura y pH

Si bien aspectos como temperatura y pH fueron tratados brevemente en apartados anteriores, en donde se concluyó que elevados valores de temperatura y pH son requeridos para un efectivo crecimiento de la cianobacteria *Arthrospira Platensis,* conviene realizar un análisis de los rangos óptimos en los que deberían situarse estos parámetros.

Con respecto a la temperatura, se ha determinado que sus valores óptimos oscilan entre 35°C y 38°C (Richmond, 2008), con rangos de tolerancia que pueden ir desde los 20°C hasta los 42°C (Kumar et al., 2011). En cuanto al pH, la *Arthrospira Platensis* crece óptimamente en un rango de 9 a 10. Es recomendable mantener un pH sobre 9.5 para evitar contaminación proveniente de otros microorganismos que pudieran alojarse en el medio de cultivo (Richmond, 2008). El ajuste de pH en la práctica industrial se realiza a través de la provisión de CO_2 gaseoso, con sistemas de distribución que son el resultado de un compromiso entre una transferencia eficiente del gas, costos de capital y de operación (Becker, 1994). Especial cuidado debe tenerse en cuanto a las pérdidas de CO_2 que pueden darse por el contacto

con la atmósfera y por precipitaciones en forma de $CaCO_3$ a valores de pH sobre 10.5, pudiendo producirse también sedimentación del cultivo de cianobacterias.

E. Oxígeno disuelto

Los medios de cultivo de *Arthrospira Platensis* pueden ser vulnerables a procesos de sobresaturación de oxígeno, mismos que pueden inhibir el crecimiento de esta cianobacteria (Marquez, Sasaki, Nishio, & Nagai, 1995). Se ha determinado que niveles entre 70-80mg L^{-1} de oxígeno disuelto en el medio disminuyen la productividad de Arthrospira *Platensis* en un 33%. El oxígeno puede disolverse de mejor manera en medios de cultivo que estén a bajas temperaturas, por lo que si se combina este factor y los niveles de oxígeno descritos anteriormente, la productividad disminuiría en un 60% (Giuseppe Torzillo, Bernardini, & Masojídek, 1998).

Por esta razón, los fotobioreactores deben tener la capacidad de evacuar adecuadamente el oxígeno producto de la reacción de fotosíntesis.

2.5.2 La luz solar y su efecto en el crecimiento de la *Arthrospira Platensis*

A. Mecanismo biológico de la fotosíntesis

En la naturaleza existe un mecanismo de crecimiento tanto de organismos procariotas como eucariotas, conocido como fotosíntesis, cuyo objetivo es la transformación del carbono inorgánico (carbonatos, bicarbonatos o CO_2 atmosférico) en carbono orgánico mediante el empleo de los fotones provenientes de la luz, sea esta artificial o solar, mecanismo mediante el cual

se desarrolla la *Arthrospira Platensis* tal como se estableció en la sección anterior. La luz artificial (comúnmente lámparas LED) puede ser útil en investigaciones a nivel de laboratorio, aunque a escala comercial se ha corroborado que su uso incrementa el costo de producción de la cianobacteria en 16USD/kg de cianobacteria procesada (Blanken, Cuaresma, Wijffels, & Janssen, 2013), con el inconveniente adicional de que más del 65% de la energía eléctrica se pierde en el proceso de conversión a energía lumínica (fotones) (Janssen, 2016). Por lo tanto, la luz solar es la opción válida a escala industrial. Sin embargo, es necesario señalar que solo aquellos fotones cuya longitud de onda esté entre los 400nm y 700nm (RFA) serán absorbidos por estos microorganismos (Janssen, 2016). En lo que sigue, deberá entenderse que tanto fotones como cualquier otro tipo de energía lumínica estarán comprendidos en esta región del espectro electromagnético.

Para entender como los fotones provenientes de la luz solar interactúan con una cianobacteria a nivel celular en el proceso de transformación del carbono inorgánico (CO_2) en carbono orgánico, es necesario analizar las diferentes reacciones químicas que se suceden a nivel celular.

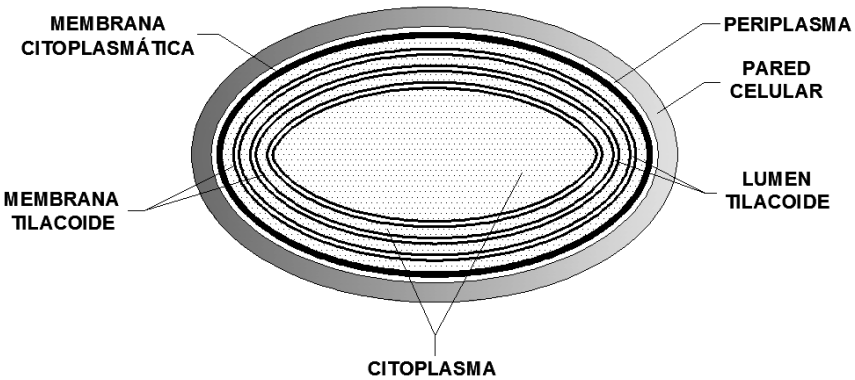


Figura 28 Esquema de una cianobacteria. La membrana citoplasmática separa el periplasma del citoplasma (región sombreada con puntos). Dentro de este se encuentran las membranas tilacoides en donde se produce la fotosíntesis. Adaptado de Jansen 2015.

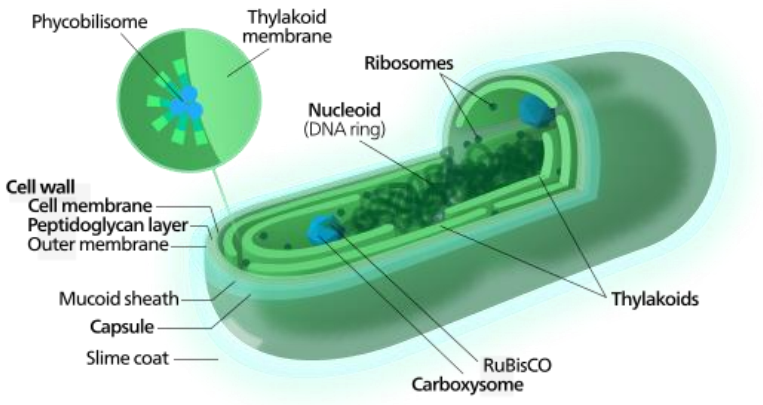


Figura 29 Esquema tridimensional de una cianobacteria. Fuente: Wikipedia.

En las Figuras 28 y 29 se muestra esquemáticamente una célula de una cianobacteria. La pared celular separa los componentes interiores del medio circundante a la célula. La membrana plasmática separa el periplasma del citoplasma, dentro del cual se encuentran las membranas tilacoides en donde se produce tanto la fotosíntesis como la respiración celular.

Las membranas tilacoides contienen moléculas denominadas pigmentos cuya misión es absorber la Radiación Fotosintéticamente Activa en diferentes bandas espectrales permitiendo el uso eficiente de la luz solar. Las cianobacterias presentan únicamente moléculas de clorofila *a* que son, en primera instancia, los pigmentos responsables de absorber los fotones provenientes de la luz visible (RFA) y trasferir las cargas eléctricas al centro de reacción (ver figura 30).

Adicionalmente existe una amplia variedad de pigmentos auxiliares denominados carotenoides que pueden ser clasificarse en carotenos y xantofilas (Ke, 2001). Los carotenos absorben fotones en longitudes de onda correspondientes a los colores amarillo y verde transfiriendo las cargas eléctricas a las moléculas de clorofila, aumentando la eficiencia en la utilización de la luz (Ke, 2001). Las xantofilas evitan la foto oxidación del centro

de reacción en donde se desarrolla la fotosíntesis convirtiendo el exceso de energía radiante incidente en calor (Ke, 2001).

También están presentes otros cromóforos conocidos como las filicobiliproteínas, que se encuentran en partículas denominadas filicobilisomas (ver figura 29), que incluyen a la ficoeritrobilina (PBI) y la ficourobilina (PUB) que absorben los fotones con longitudes de onda entre 550-600nm, así como a la ficocianina (PCCN), de donde las cianobacterias toman su color azulado, que absorbe fotones fuertemente a 620nm. Otros pigmentos relevantes se conocen como bacterioclorofilas y usan longitudes de onda fuera del espectro de la radiación fotosintéticamente activa (700-1000nm). Lo anteriormente descrito tiene lugar en el aparato fotosintético de la célula (ver figura 30), localizada en la membrana tilacoide (Pilon, Berberoğlu, & Kandilian, 2011).

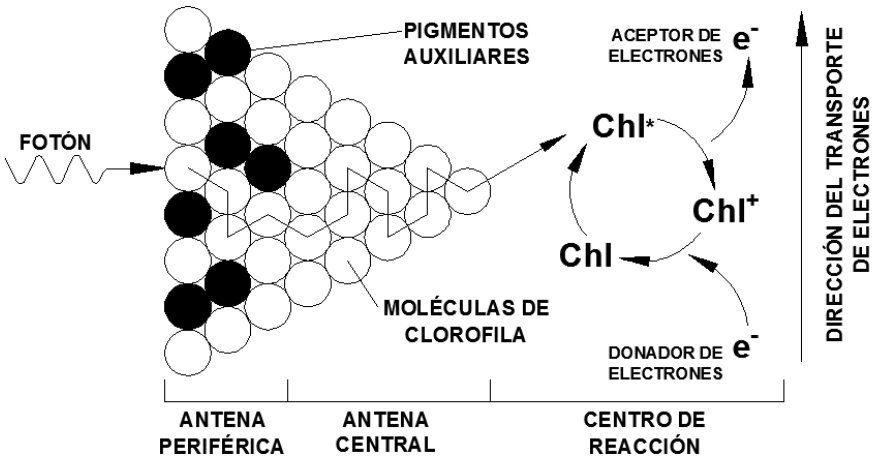


Figura 30 Generación y transporte de electrones en el aparato fotosintético de la célula. Fuente: Pilon et. al 2011.

Este aparato está formado de tres partes: a) la antena periférica, b) la antena central y c) el centro de reacción. La antena periférica se encarga del traslado de la energía fotónica de baja intensidad hacia el centro de reacción, y está compuesta de pigmentos como la clorofila a (representada como Chl)

y los carotenos. La antena central contiene el mínimo número de pigmentos necesarios para la fotosíntesis, todos ellos Clorofilas. Finalmente, la separación de carga fotoquímica y el posterior transporte de electrones tienen lugar en el centro de reacción.

En el proceso de fotosíntesis el carbono inorgánico suministrado en forma de CO_2 es convertido a carbono orgánico en presencia de la luz solar. Esta transformación viene descrita por la ecuación 2.11 en donde se aprecia que se necesitan seis moléculas de dióxido de carbono para formar una molécula de glucosa, esto en presencia de 54 fotones (Janssen, 2016):

$$6CO_2 + 6H_2O + 54\,hv \rightarrow C_6H_{12}O_6 + 6O_2 \qquad (2.11)$$

La reacción descrita por la ecuación 2.11 se lleva a cabo en dos fases: una de luz y otra de oscuridad. En la fase lumínica la energía proveniente de los fotones es captada por la célula y convertida en adenosin trifosfato (ATP) y agentes reductores como la nicotinamida adenina dinucleótido fosfato reducida (NADPH). En este proceso los átomos de hidrógeno son removidos de las moléculas de agua con el fin de reducir a la nicotinamida adenina dinucleótido fosfato ($NADP^+$), dejando libre al mismo tiempo oxígeno. Simultáneamente las moléculas de adenosin difosfato (ADP) son fosforiladas (en presencia de fosfato inorgánico P_i) convirtiéndose en ATP. La reacción que describe este proceso se detalla a continuación (Janssen, 2016; Shulter & Kargi, 2000):

$$12H_2O + 12NADP^+ + 18P_i + 18ADP + 9\,hv \rightarrow 6O_2 + 12NADPH + 12H^+ + 18ATP \qquad (2.12)$$

En la fase lumínica actúan dos sistemas definidos: a) el Fotosistema I que puede ser excitado con radiación solar de longitud de onda menor a los 700nm, encargado de producir NADPH y, b) el Fotosistema II que requiere luz solar de longitud de onda más corta que 680nm cuya misión es escindir la molécula de agua en H^+ y O_2. Las moléculas de ATP se forman conforme los electrones migran del Fotosistema II al Fotosistema I (Shulter & Kargi, 2000).

En la fase de oscuridad los productos de la primera fase como el ATP y la NADPH son empleados como fuente de energía para la reducción del dióxido de carbono con el fin de producir la glucosa. Al mismo tiempo el NADPH es oxidado nuevamente a $NADP^+$ mientras que el ATP es convertido a ADP y fosfato P_i. Lo anterior se sintetiza en la ecuación 2.13 (Janssen, 2016; Shulter & Kargi, 2000) :

$$6CO_2 + 12NADPH + 18ATP + 12H^+ \rightarrow C_6H_{12}O_6 + 18ADP + 12NADP^+ + 18P_i + 6H_2O \quad (2.13)$$

Si en la ecuación 2.11 se divide para 6, se obtiene una ecuación genérica para la fabricación de múltiples carbohidratos, con un carbono por sección ($CO_2 + H_2O + 9\,hv \rightarrow CH_2O + O_2$) en donde se puede notar que se requieren 9 fotones para transformar 1 molécula de dióxido de carbono en un azúcar genérico de un átomo de carbono (Janssen, 2016).

Las ecuaciones 2.11-2.13 describen la producción directa de glucosa, pero en realidad lo que se produce en primera instancia es el gliceraldehido-3-fosfato ($C_3H_7O_6P$). Una parte del $C_3H_7O_6P$ (exactamente 2 moléculas) se destinan para la producción de glucosa y otros compuestos de la fotosíntesis (Shulter & Kargi, 2000).

El crecimiento fotosintético puede estar representado por una ecuación estequiométrica, que puede ser deducida de un análisis elemental de la

biomasa constituida por las cianobacterias. La ecuación 2.14 es específica para la *Arthrospira Platensis* (Posten & Walter, 2013):

$$CO_2 + 0.71H_2O + 0.14HNO_3 + 0.008H_2SO_4 + 0.005H_3PO_4 \rightarrow CH_{1.59}O_{0.55}N_{0.14}S_{0.008}P_{0.005} + 1.32O_2 \quad (2.14)$$

Esta ecuación resulta útil al momento de determinar la cantidad de nutrientes requeridos por la *Arthrospira Platensis,* al igual que conocer el intercambio CO_2/O_2 en el medio de reacción. Debe observarse que se ha tomado a un nitrato como la fuente de N, pudiendo cambiar la estequiometría al cambiar la fuente de N, con una sal de amonio por ejemplo.

Los procesos anteriores en conjunto forman el proceso de fotosíntesis, que no solamente se da en las cianobacterias sino también en las microalgas y en las plantas verdes en general.

B. Flux de fotones

Quedó establecido en la sección anterior que las cianobacterias absorben la Radiación Fotosintéticamente Activa comprendida en una longitud de onda entre 400nm y 700nm, que es no es más que el rango visible de la luz. Por tanto, experimentalmente se hace necesario poder determinar la potencia lumínica con la cual el Sol o una fuente de luz artificial impactan en el medio de cultivo en donde se desarrollarán las cianobacterias.

En el Sistema Internacional SI se ha establecido al lumen (lm) como unidad de potencia luminosa. Sin embargo, esta unidad de medida está adaptada a la sensibilidad del ojo humano que difiere totalmente de la sensibilidad de estos microorganismos (Janssen, 2016), por lo que se ha sugerido el empleo

del vatio (flujo de energía radiante $\dot{Q}$) como un análogo apropiado en los procesos de fotosíntesis. Para corroborar lo anterior, obsérvese que 1W de energía radiante equivale a 683lm a 555nm mientras que a 650nm equivale a 73lm, lo que da cuenta de la amplia sensibilidad del lumen con la longitud de onda de la fuente luminosa.

Otra opción comúnmente usada para expresar la potencia lumínica de una fuente se conoce como flux de fotones, que se describe como el flujo de fotones por unidad de área incidente. Este flux es usado especialmente en investigaciones en donde el flujo de luz visible (RFA) con distinta longitud de onda tiene más relevancia que la irradiancia.

Para calcular el flux de fotones, es necesario en primera instancia establecer el número de fotones existentes en una determinada cantidad de energía radiante incidente, como está descrito en la ecuación 2.15:

$$N_{ph} = \frac{Q}{\varepsilon} \tag{2.15}$$

En esta ecuación, se ha dividido la cantidad de energía radiante Q para la energía que contiene un fotón ε. Luego, el número fotones expresado en moles m_{ph} viene dado por:

$$m_{ph} = \frac{Q}{\varepsilon N_A} \tag{2.16}$$

En donde N_A es el número de Avogadro, equivalente a 6.022×10^{23} mol^{-1}. Si en la ecuación 2.16 se divide en ambos miembros para el producto del área incidente A por un intervalo de tiempo Δt se obtiene el flux de fotones F_{ph}:

$$F_{ph} = \frac{Q}{\varepsilon A N_A \Delta t} = \frac{\dot{Q}}{\varepsilon A N_A} = \frac{q}{\varepsilon N_A} \tag{2.17}$$

Debe notarse que la ecuación 2.17 permite obtener el flux de fotones a partir de la cantidad de energía radiante Q, el flujo de energía radiante $\dot{Q}$ o la irradiancia q. Reemplazando en esta última expresión la ecuación 2.3 se obtiene:

$$F_{ph} = \frac{q\lambda}{\hbar c N_A} \tag{2.18}$$

Para el adecuado empleo de la ecuación 2.18 se debe verificar que las unidades sean consistentes. Si se trabaja en el SI el flux de fotones vendrá dado en mol m^{-2} s^{-1}. También se utiliza con frecuencia el μmol m^{-2} s^{-1}.

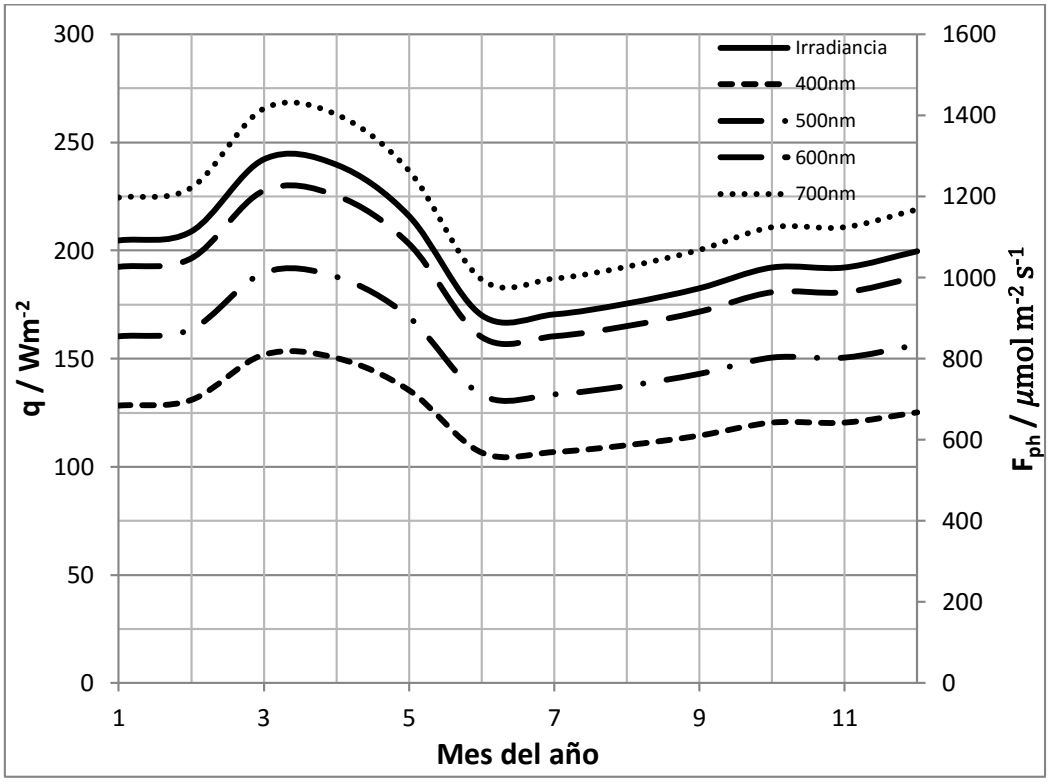


Figura 31 Irradiancia promedio mensual q y flux de fotones F_{ph} sobre superficie horizontal a diferentes longitudes de onda (400nm, 500nm, 600nm y 700nm), para la localidad de Pedernales. Fuente: https://eosweb.larc.nasa.gov/sse/.

En la Figura 31 se puede apreciar la irradiancia promedio mensual sobre superficie horizontal (*q* global) calculada para la localidad de Pedernales, con datos obtenidos del satélite de la NASA. Con estos datos se pueden construir las curvas que representan el flux de fotones F_{ph} a diferentes longitudes de onda empleando la ecuación 2.18. En la Figura 31 estas gráficas se muestran con líneas discontinuas. Obsérvese que en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa, el flux de fotones puede variar desde aproximadamente 600μmol m^{-2} s^{-1} hasta alrededor de 1200μmol m^{-2} s^{-1}.

El flux de fotones total F_{ph}, resulta de la integración de un parámetro conocido como flux espectral de fotones $F_{ph,}$, en todo el rango de la Radiación Fotosintéticamente Activa:

$$F_{ph} = \int_{400}^{700} F_{ph,\lambda}\, \mathrm{d}\lambda \qquad (2.19)$$

Consecuentemente, las unidades de $F_{ph,}$ en el SI son mol $m^{-2}s^{-1}nm^{-1}$. Esta integral se puede discretizar en pequeños intervalos de longitud de onda $\Delta\lambda$, por lo cual la resolución numérica de la ecuación 2.19 vendrá dada por:

$$F_{ph} = \sum_{\lambda=400}^{\lambda=700} F_{ph,\lambda}\, \Delta\lambda \qquad (2.20)$$

Se sugiere que el intervalo $\Delta\lambda$ sea de 1nm para obtener una mayor precisión en el resultado (Janssen, 2016).

C. Sección transversal óptica de una cianobacteria

Cuando haces de luz en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa entran en contacto con una célula de una cianobacteria, una fracción de estos pueden ser absorbido por los pigmentos contenidos en la membrana tilacoide de la célula, otra fracción puede pasar la célula sin ser absorbida cambiando su dirección en un ángulo diferente al de incidencia debido a que el índice de refracción de los componentes celulares y del medio de cultivo circundante son diferentes, y una tercera parte puede reflejarse en la superficie celular cambiando su dirección, como se aprecia en la Figura 32 (Janssen, 2016).

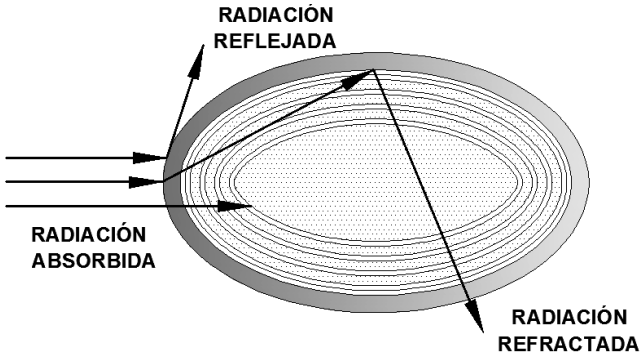


Figura 32 Reflexión, difracción y absorción de un haz de luz en el espectro de la radiación fotosintéticamente activa al entrar en contacto con una célula de una cianobacteria. Fuente: El Autor.

La radiación reflejada y difractada está disponible para otros microorganismos en el medio, y su suma se conoce como dispersión. La cantidad de luz absorbida por las cianobacterias puede ser calculada en función del tamaño de la superficie celular que es perpendicular al haz de luz incidente, como se aprecia en la Figura 33. Esta sección óptica transversal de la célula se conoce también como coeficiente específico molar de absorción de luz (Pilon & Kandilian, 2016), representando por $f_{x,\lambda}$ y que viene dado en m^2mol^{-1}de biomasa. Este coeficiente varía en función de la longitud de onda de la radiación incidente y de la composición real de los pigmentos que conforman las membranas tilacoides de la cianobacteria, pudiendo ser determinado mediante espectrofotómetros especializados (Dauchet, Cornet, Gros, Roudet, & Dussap, 2016).

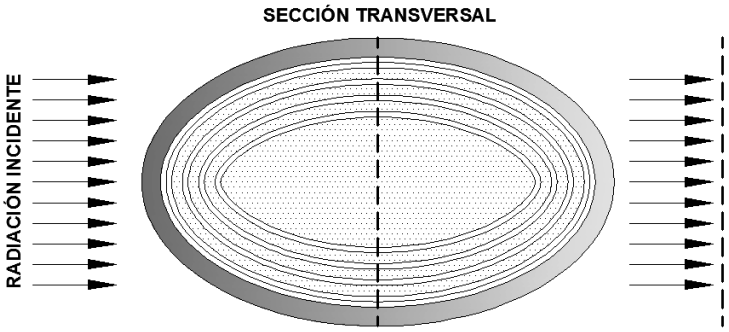


Figura 33 Sección transversal óptica de una cianobacteria, también conocida como coeficiente específico molar de absorción de luz. Fuente: El Autor.

Este parámetro es útil para calcular la tasa de absorción específica de fotones, que viene definida como:

$$-f_{ph} = \int_{400}^{700} f_{x,\lambda}\, F_{ph,\lambda}\, \mathrm{d}\lambda \qquad (2.21)$$

La ecuación 2.21 establece que la tasa de absorción específica de fotones es una función de la sección transversal óptica de la cianobacteria $f_{x,}$, y del flux espectral de fotones $F_{ph,\lambda}$, integrados en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa. El signo negativo se coloca en la ecuación 2.21 porque la tasa de absorción específica de fotones va disminuyendo conforme estos son absorbidos por las cianobacterias para su desarrollo. Numéricamente esta ecuación puede resolverse de la siguiente manera:

$$-f_{ph} = \sum_{\lambda=400}^{\lambda=700} f_{x,\lambda}\, F_{ph,\lambda}\, \Delta\lambda \qquad (2.22)$$

En donde se recomienda intervalos de 1nm para obtener una mayor precisión en el resultado. Las unidades de f_{ph} en el SI son mol $mol_x^{-1}s^{-1}$. Una

aclaración es necesaria debido a que el primer mol de las unidades de f_{ph} está referido a la cantidad de fotones contenidos entre 400nm y 700nm, mientras que mol_x^{-1} hace referencia a la cantidad de biomasa que emplea esos fotones para su desarrollo. Por tanto, la tasa de absorción específica de fotones podría definirse también como el flujo de fotones por mol de biomasa que se desarrolla en el proceso fotosintético.

Si se asume que el coeficiente específico molar de absorción de luz es constante sobre el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa, la ecuación 2.22 puede expresarse de la siguiente manera:

$$-f_{ph} = f_x \sum_{\lambda=400}^{\lambda=700} F_{ph,\lambda}\, \Delta\lambda \qquad (2.23)$$

Reconociendo que lo que está dentro del símbolo de sumatoria no es más que el flux total de fotones (ecuación 2.20), se llega a la siguiente expresión:

$$-f_{ph} = f_x F_{ph} \qquad (2.24)$$

Calculado de esta manera, f_{ph} representa un coeficiente de absorción específica promediado espectralmente. En secciones posteriores se analizará el empleo de este coeficiente en las ecuaciones que describen el campo de radiación en el fotobioeractor de placa plana.

D. Fotosíntesis de la Arthospira Platensis

El proceso de fotosíntesis de la *Arthrospira Platensis* puede ser representado en una gráfica *P* vs. *q*, en donde *P* representa la producción de carbono a un determinado nivel de irradiancia *q* (Richmond, 2008). Analíticamente, esta relación puede ser representada mediante modelos

matemáticos como los de Webb, Blackman, Monod y Jassby & Platt, siendo este último considerado como el único de los modelos capaz de describir con exactitud el comportamiento real de un proceso de fotosíntesis (Janssen, 2016).

El modelo de Jassby & Platt puede ser representado matemáticamente como:

$$P = P_{max} \tanh\left(\frac{\alpha q}{P_m}\right) \tag{2.25}$$

En donde P_{max} representa máxima producción de carbono en condiciones de saturación de luz, α es la pendiente inicial de la curva P vs. q y puede interpretarse como una medida de la eficiencia de la producción de carbono a bajos niveles de irradiancia. Esta misma ecuación puede expresarse en función de la cantidad de clorofila a (Chla):

$$P^B = P_m^B \tanh\left(\frac{\alpha q}{P_m^B}\right) \tag{2.26}$$

En donde P^B representa los miligramos de carbono producido por miligramo de clorofila a y P_m^B figura como los miligramos de carbono por miligramo de clorofila a en condiciones de saturación de luz. La producción de carbono puede expresarse también de la siguiente manera:

$$P = \mu C \tag{2.27}$$

En la ecuación 2.26 μ representa la tasa específica de crecimiento de la cianobacteria expresada en d^{-1} y C es el equivalente de la biomasa en carbono. Reemplazando la ecuación 2.26 en la 2.25 se obtiene:

$$\mu C = (\mu_{max} C) \tanh\left(\frac{\alpha q}{P_m}\right) \tag{2.28}$$

En donde $P_m = \mu_{max}\ C$, y μ_{max} simboliza la tasa máxima específica de crecimiento. Luego, si se define q_s como el valor de la irradiancia a la cual comienza la saturación de la luz dada por:

$$q_s = \frac{P_m}{\alpha} \tag{2.29}$$

Y reemplazando en la ecuación 2.28 se llega a:

$$\mu = \mu_{max} \tanh\left(\frac{q}{q_s}\right) \tag{2.30}$$

La ecuación 2.30 puede ponerse también en función del flux total de fotones en el espectro de la radiación Fotosintéticamente Activa:

$$\mu = \mu_{max} \tanh\left(\frac{F_{ph}}{F_{phs}}\right) \tag{2.31}$$

Las ecuaciones 2.25 y 2.26 pueden expresarse en la misma forma que la ecuación 2.31:

$$P = P_{max} \tanh\left(\frac{F_{ph}}{F_{phs}}\right) \tag{2.32}$$

$$P^B = P_m^B \tanh\left(\frac{F_{ph}}{F_{phs}}\right) \tag{2.33}$$

Las ecuaciones 2.31-2.33 fueron ajustadas a los datos experimentales obtenidos por Kebede et al. (1996) quienes asilaron a la Arthrospira Platensis del lago Chitu en Etiopía. Esta cianobacteria fue cultivada en un medio de Zarrouk modificado en lo que tiene que ver con micronutrientes. El crecimiento se lo desarrolló en un turbidostato, un dispositivo de cultivo continuo en donde se trabaja a volumen constante. El control se lo realizó en función de la turbidez que provoca la presencia de las cianobacterias (Kebede & Ahlgren, 1996). La temperatura fue mantenida en 30°C, y el flux de fotones varió entre 200μmolm^{-2} s^{-1} y 500μmol m^{-2} s^{-1}. Los resultados obtenidos se sintetizan en la Tabla 11:

Tabla 11
Parámetros obtenidos de la experimentación con *Arthrospira Platensis* aislada del lago Chitu en Etiopía

Parámetro	Valor	F_{phs} μmol m^{-2} s^{-1}
μ_{max}	1,76 d^{-1}	171
P_{max}	104 mgC L^{-1} d^{-1}	144
P_{max}^{B}	141 mgC (mg Chla)$^{-1}$	206

Fuente: (Kebede & Ahlgren, 1996)

En la Figura 34 se muestra la curva de crecimiento de la *Arthrospira Platensis*, en donde se representan la tasa de crecimiento específico vs. el flux de fotones. La curva se caracteriza por tener tres regiones perfectamente diferenciadas. La primera de ellas se conoce como zona de crecimiento limitado por la luz, que se alcanza si los parámetros como temperatura y pH son mantenidos en sus niveles óptimos y los nutrientes son provistos en las cantidades adecuadas (Pandey, 2011). En esta región se alcanza la mayor tasa de crecimiento de la *Arthrospira Platensis* conforme se aumenta el flux de fotones. Un incremento adicional en el flux de fotones produce un decremento en la tasa de crecimiento de esta cianobacteria, hasta que se

alcanza una meseta en la curva de crecimiento. La región en la que se produce este fenómeno se conoce con el nombre de zona de saturación lumínica. La tasa máxima específica de crecimiento alcanzada es de 1.76 d^{-1}, equivalente a 0.073h^{-1}.

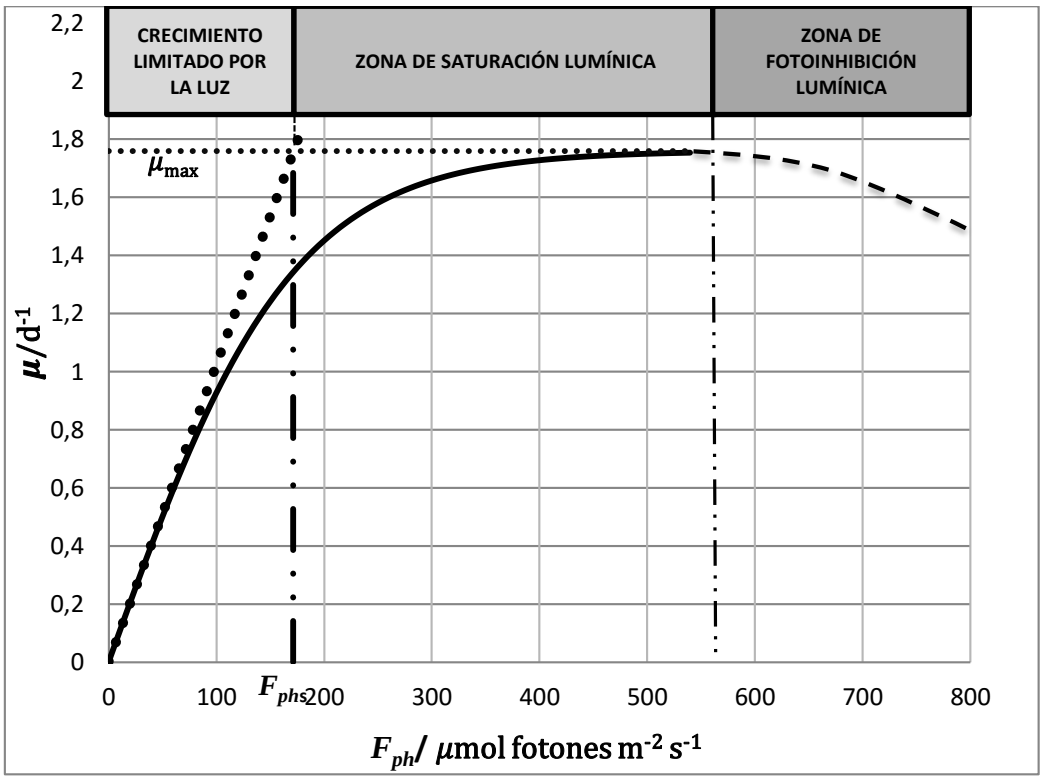


Figura 34 Curva de crecimiento de la Arthrospira Platensis en función del flux de fotones. La cianobacteria fue aislada del lago Chitu en Etiopía. Fuente: El Autor.

Estudios realizados con *Arthrospira Platensis* del lago Texoco en México muestran un valor de μ_{max} de 0.059h^{-1} (Balloni, Tomaselli, Giovannetti, & Margheri, 1980), siendo muy similar al del cultivo realizado por Kebede et al. (1996). Estos valores imponen un techo máximo al crecimiento por fotosíntesis y por supuesto, depende del tipo de microorganismo analizado.

El parámetro α, de las ecuaciones 2.25-2.29, representa la pendiente inicial de la curva de crecimiento en un punto cuyo valor de flux de fotones equivale a 0μmol m^{-2} s^{-1}. La intersección de la recta con pendiente α y otra recta paralela al eje de las abscisas, que representan el valor de μ_{max}, da origen a un punto conocido como saturación de luz F_{phs} (ver figura 34). Para la curva de crecimiento de la *Arthrospira Platensis,* la saturación lumínica alcanza un valor de 171μmol m^{-2} s^{-1}, pero en general este punto puede encontrarse en un rango entre 150-300μmol m^{-2}s^{-1}(Richmond, 2008; Whitton, 2012). Al igual que μ_{max}, F_{phs} constituye un límite que restringe el crecimiento de la *Arthrospira Platensis* y debe ser considerado en el diseño de fotobioreactores.

La tercera región se conoce con el nombre de zona de fotoinhibición, definida como la pérdida de la capacidad fotosintética del Fotosistema II, causada por un excesivo flux de fotones con respecto a los necesarios para llevar a cabo la fotosíntesis (Richmond, 2008; Whitton, 2012). Se ha detectado que la fotoinhibición ocurre en valores que exceden los 400μmol m^{-2}s^{-1} en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa (Richmond, 2008), y que puede exacerbarse por bajas o elevadas temperaturas, altas concentraciones de sal o de oxígeno así como bajas concentraciones de CO_2 en el medio de cultivo (Giuseppe Torzillo et al., 1998).

En el caso de los fotobioreactores, una adecuada mezcla y el sombreado mutuo entre células podrían evitar el efecto de fotoinhibición. Esto permite trabajar a elevados valores de flux de fotones (sobre los 1000μmol m^{-2}s^{-1}) (Takache, Christophe, Cornet, & Pruvost, 2010).Tomar en cuenta todas estas etapas relacionadas con el crecimiento de la *Arthrospira Platensis* juega un papel fundamental a la hora de diseñar adecuadamente un fotobioreactor.

2.6 Balance de materia en el medio de cultivo

Una vez que se tienen presentes todos los factores que influencian en el crecimiento de la *Arthrospira Platensis*, es necesario realizar un balance de materia que permita establecer analíticamente la tasa de crecimiento de esta cianobacteria. En general, para el j-ésimo componente de una mezcla reactiva, el balance de materia se puede plantear como:

$$\begin{bmatrix} Tasa\ de\ acumulación \\ del\ j-ésimo \\ componente \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Tasa\ de\ ingreso \\ de\ flujo \\ del\ j-ésimo \\ componente \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Tasa\ de\ salida \\ de\ flujo \\ del\ j-ésimo \\ componente \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Tasa\ de\ generación \\ del\ j-ésimo \\ componente\ por \\ reacciones \\ químicas \end{bmatrix} \tag{2.34}$$

Planteando la ecuación 2.34 para las cianobacterias, llamadas genéricamente como biomasa (B):

$$\frac{dN_B}{dt} = \dot{m}_{B0} - \dot{m}_B + \int_V R_B dV \tag{2.35}$$

En donde N_B representa el número de moles de biomasa, $\dot{m}_{B0}$ el caudal molar de entrada de biomasa, $\dot{m}_B$ el caudal molar de salida de biomasa y R_B la tasa volumétrica de crecimiento de la biomasa local. Cabe destacar que el volumen de reacción V al que hace referencia el integral no necesariamente es igual al volumen del reactor V_R (ver figura 35). Dado que en el fotobioreactor no existe entrada ni salida de flujos de biomasa, la ecuación 2.35 se transforma en:

$$\frac{dN_B}{dt} = \int_V R_B dV \tag{2.36}$$

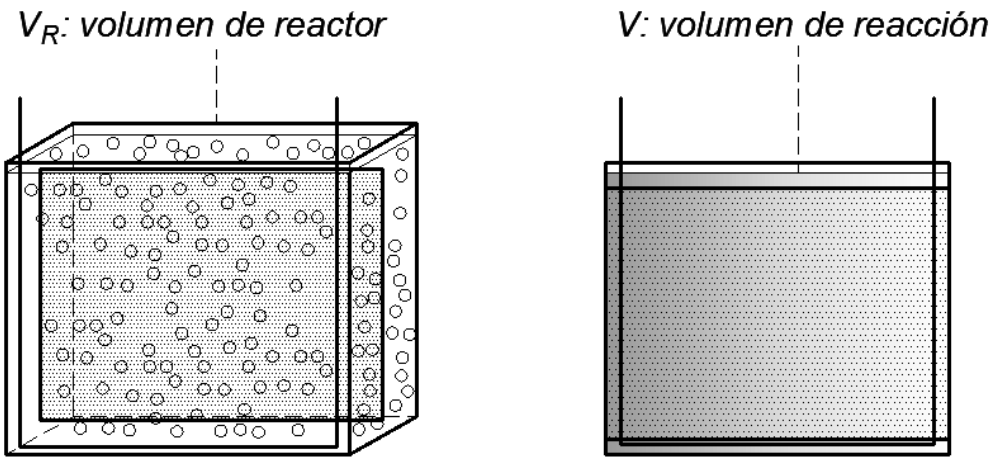


Figura 35 Esquema del fotobioreactor de placa plana. Se observa la diferencia entre volumen de reacción (volumen del fluido) y volumen de reactor (característica geométrica). Fuente: El Autor.

N_B puede expresarse como el producto de la concentración molar de biomasa C_B (moles de biomasa por metro cúbico de suspensión) y el volumen de reacción V:

$$\frac{d(VC_B)}{dt} = \int_V R_B dV \tag{2.37}$$

Debido a que el volumen de reacción es constante en el fotobioreactor, V puede salir del operador diferencial:

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{V}\int_V R_B dV \tag{2.38}$$

Si definimos ahora el lado derecho de la ecuación 2.38 como la tasa volumétrica de crecimiento de la biomasa promedio en el volumen de reacción $<R_B>$, entonces:

$$\frac{dC_B}{dt} = \langle R_B \rangle \tag{2.39}$$

Por tanto, es necesario calcular el valor de R_B si se quiere determinar la variación de concentración de biomasa dentro del fotobioreactor. Esto se lo podrá realizar mediante un planteamiento cinético que tome en cuenta la influencia de la luz solar en el crecimiento de los microorganismos.

2.7 Cinética de crecmiento de la *Arthrospira Platensis*

La cinética del crecimiento de la *Arthrospira Platensis* está profundamente vinculada con todas las posibles limitaciones que pueden ocurrir en el medio de cultivo. Por tanto, en los siguientes puntos que se desarrollen en esta investigación se supondrá que el crecimiento de la *Arthrospira Platensis* solo está limitado por la luz, con lo cual se asumirá que todo el resto de variables están en sus valores óptimos. Uno de los principales problemas para poder determinar la cinética crecimiento de esta cianobacteria es la dependencia de la tasa de generación volumétrica local R_B con la posición, es decir, R_B=R_B(**x**).

De los criterios anteriormente expuestos, se sabe que los fotones provenientes de la luz solar son absorbidas dentro de las células de las cianobacterias para promover su crecimiento, por lo que se concluye que la

tasa de generación volumétrica local $R_B(\mathbf{x})$ debe ser proporcional a la densidad volumétrica local de fotones absorbidos $\mathcal{A}(\mathbf{x})$, cantidad que describe el número de moles o micromoles de fotones absorbidos por las cianobacterias por unidad de volumen y por unidad de tiempo El factor de proporcionalidad se conoce como rendimiento cuántico $\Phi(\mathbf{x})$ y determina la cantidad de biomasa producida por mol (o μmol) de fotones (J. F. Cornet & Dussap, 2009). Cabe recalcar que los términos presentados anteriormente están referidos al espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa. Por tanto:

$$R_B(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x})\mathcal{A}(\mathbf{x}) \tag{2.40}$$

La descomposición representada por la ecuación 2.40 es una consecuencia del análisis de la transferencia de energía desde la antena fotosintética (Figura 2.14) hacia el centro de reacción (J. F. Cornet & Dussap, 2009). El rendimiento cuántico a su vez puede ser expresado de la siguiente manera:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \varpi(\mathbf{x})\bar{\phi}_B \tag{2.41}$$

La cantidad $\varpi(\mathbf{x})$ se denomina rendimiento energético de la conversión fotónica y representa la parte que se disipa de la energía fotónica y que es absorbida por las antenas (Figura 2.14). Es un valor local, es decir, depende de la posición dentro del fotobioreactor y decrece con el valor de irradiación local q, expresada como flux de fotones F_{ph} en μmol $m^{-2}s^{-1}$. Se formula aproximadamente a través de la ecuación 2.42, desarrollada a partir de estudios cuánticos de la transferencia energética en las antenas(Jeremy Pruvost, Cornet, Goetz, & Legrand, 2012):

$$\varpi(\mathbf{x}) \cong \varpi_M \frac{F_{phs,0.5}}{F_{phs,0.5} + F_{ph}(\mathbf{x})} \tag{2.42}$$

En donde ϖ_M representa la eficiencia termodinámica máxima para la conversión fotónica en las unidades celulares fotosintéticas, representada como un rendimiento de Carnot (J. F. Cornet & Dussap, 2009):

$$\varpi_M = 1 - \frac{T}{T_R} \tag{2.43}$$

T_R representa la temperatura absoluta de emisión de un cuerpo negro, que se puede calcular a través de la Ley de Distribución Espectral de Planck (Bergman et al., 2011):

$$T_R = \frac{\hbar nc}{\left[\lambda k_B \ln\left(\frac{2\hbar nc}{\lambda^5 I_{b,\lambda}} + 1\right)\right]} \tag{2.44}$$

En la ecuación 2.44 k_B representa a la constante de Boltzmann, que adopta un valor de 1.381×10^{-23}JK^{-1}, y $I_{b,}$ representa la intensidad espectral de un cuerpo negro, término que será analizado con detalle en las secciones posteriores. Sin embargo, para una gran cantidad de organismos eucariotas, el valor de ϖ_M oscila entre 0.76 y 0.82 en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa (J. F. Cornet & Dussap, 2009) y se considera que depende débilmente de la longitud de onda, por lo cual puede asumirse prácticamente constante en esta región del espectro electromagnético, tomando un valor de 0.80 (Farges, Laroche, Cornet, & Dussap, 2009).

La constante $F_{phs,0.5}$ se denomina constante de saturación media de fotosíntesis y para la *Arthrospira Platensis* alcanza un valor de 90μmol m^{-2}s^{-1} (Farges et al., 2009). En la sección anterior se observó que el punto se saturación lumínica F_{phs} de la curva de crecimiento oscila entre 150 y300μmol m^{-2}s^{-1} por lo que un valor medio estaría ubicado entre 75-150μmol m^{-2}s^{-1}, rango en el cual se encuentra el $F_{phs,0.5}$ para esta cianobacteria.

Por otra parte, $\bar{\phi}_B$ se denomina rendimiento cuántico másico y representa la fracción de la energía fotónica absorbida que se conserva en el fotobioreactor. Corresponde a la parte del proceso fotónico que conlleva una separación de cargas desde el centro de reacción (Figura 2.14) (J. F. Cornet & Dussap, 2009). Se considera un valor promediado en el tiempo y puede ser obtenido mediante aproximaciones teóricas y ecuaciones estequiométricas estructuradas que detallan el proceso de fotosíntesis a nivel celular (Posten & Walter, 2013). El rendimiento cuántico másico puede ser calculado mediante:

$$\bar{\phi}_B = M_B \bar{\phi}'_B \tag{2.45}$$

En la ecuación 2.45 $\bar{\phi}'_B$ se conoce como el rendimiento cuántico verdadero, que para la *Arthrospira Platensis* adopta un valor aproximado de 7.8×10^{-8} mol_x μmol^{-1}(mol de biomasa/ μmol de fotones) y M_B representa la masa molar de biomasa equivalente en carbono, que para la gran mayoría de microorganismos fotosintéticos alcanza un valor alrededor de 23.7×10^{-3} $kg_x mol_x^{-1}$, en donde kg_x representa kilogramos de biomasa. Multiplicando, se obtiene que el rendimiento cuántico másico para esta cianobacteria es de 1.85×10^{-9} kg_x μmol^{-1} (Farges et al., 2009). Debe especificarse que el cálculo de $\bar{\phi}_B$ se realizó empleando un nitrato como fuente de N. Sin embargo, debido a la dependencia de $\bar{\phi}_B$ con la estequiometría a nivel celular, al cambiar la fuente de N variará su valor. Así, si se emplea una sal de amonio como fuente de N, se ha estimado que $\bar{\phi}_B$ toma un valor de 2.40×10^{-9} kg_x μmol^{-1} (J. F. Cornet & Dussap, 2009).

Para determinar la densidad volumétrica local de fotones absorbidos $\mathscr{A}(\mathbf{x})$ es necesario plantear la ecuación de transporte radiativo, como a continuación se detalla.

2.8 Balance de energía de la fase fotónica

Antes de establecer formalmente el balance de energía de la fase fotónica es necesario conocer a la intensidad de radiación total, definida como el flujo de energía radiante por unidad de ángulo sólido (medido en estereorradianes sr) y por unidad de área normal al haz de radiación. En el SI sus unidades son W $sr^{-1}m^{-2}$. Puede expresarme como:

$$I = \int_0^\infty I_\lambda\,(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}, \lambda) d\lambda \tag{2.46}$$

En la ecuación 2.46 I_λ se conoce como intensidad espectral, cuyas unidades en el SI son W $sr^{-1}m^{-2}$ nm^{-1}, dando cuenta de su dependencia con la longitud de onda. Debe notarse que la intensidad espectral es también función de la posición dentro del fotobioreactor **x** y de la dirección de emisión del haz de radiación, representada mediante el vector unitario $\hat{\mathbf{s}}$. Este parámetro juega un papel fundamental en el desarrollo de la ecuación de transporte radiativo.

2.8.1 Ecuación de transporte radiativo

La transferencia de calor por radiación es un proceso netamente superficial, que puede llevarse a cabo entre dos o más superficies que estén a distintas temperaturas. Estas superficies pueden estar separadas por un medio transparente, es decir que no interactúa con la radiación como el vacío o el aire, o también por un medio que podría emitir, absorber o dispersar la radiación llamado medio participante. Este último caso compete a esta investigación debido a que el medio de cultivo y las cianobacterias, denominados en conjunto como suspensión, participa en los procesos de transporte de calor por radiación.

En esta sección se desarrollará la ecuación de transporte radiativo que describe el campo de intensidad de radiación en función de la posición **x**, dirección de la radiación $\hat{\mathbf{s}}$ y la longitud de onda λ, y toma en cuenta la influencia de un medio que puede emitir, absorber y dispersar la radiación proveniente de una fuente. Esta ecuación permite entender el nexo entre materia (suspensión) y la energía (fotones de la luz solar). En términos generales, esta ecuación establece que (Howell, Menguc, & Siegel, 2010):

$$\begin{bmatrix} Cambio\ en\ la \\ energía\ radiante \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ganancia \\ debido\ a \\ emisión \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Pérdida \\ debido\ a \\ absorción \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Pérdida \\ debido\ a \\ dispersión \\ saliente \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Ganancia \\ debido\ a \\ dispersión \\ entrante \end{bmatrix} \tag{2.47}$$

La ecuación 2.47 describe que un rayo de luz que viaja a través de un medio participante en la dirección $\hat{\mathbf{s}}$ pierde energía por absorción y dispersión (in-scattering) (ver figura 36), pero al mismo tiempo gana energía por emisión (energía solar irradiada desde las superficies del fotobioreactor) y por dispersión desde otras direcciones hacia la dirección de propagación $\hat{\mathbf{s}}$ (ver figura 36). Cabe puntualizar que debe entenderse como dispersión a la radiación que no sigue la dirección establecida por el vector unitario $\hat{\mathbf{s}}$ (ver figura 36).

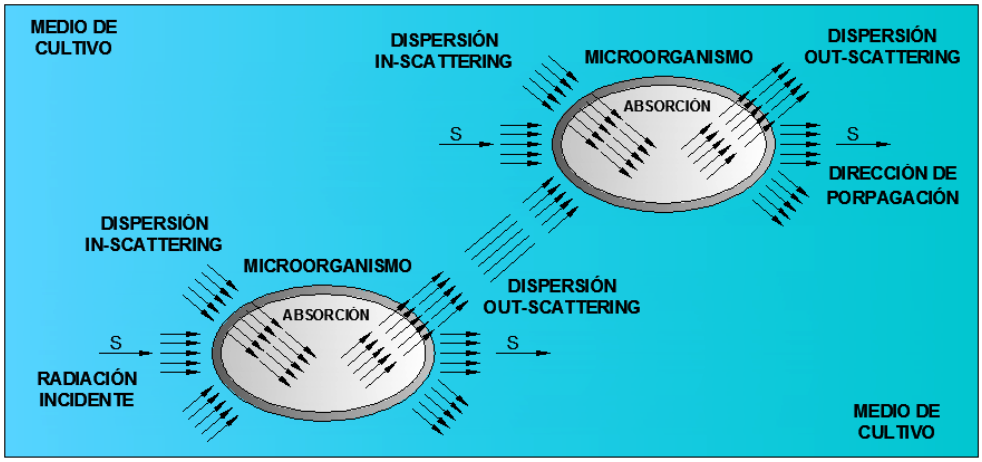


Figura 36 Suspensión, que contiene al medio de cultivo y a los microorganismos. Se puede observar las interacciones de la radiación con la materia. Fuente: El Autor.

Para el desarrollo de las ecuaciones que explican analíticamente cada uno de los términos de la ecuación 2.47 será necesario realizar las siguientes suposiciones con respecto a la suspensión (Modest, 2013):

- Tiene un índice de refracción constante (los haces de radiación viajan en línea recta).
- Está en estado estacionario, comparada con la magnitud de la velocidad de la luz.
- No se polariza.
- Dentro de esta existe un equilibrio termodinámico local.

Además, en los fotobioreactores los microorganismos están uniformemente distribuidos y orientados en forma aleatoria gracias a la agitación producida por las burbujas, por lo cual la suspensión se considera homogénea, con capacidad de absorber y dispersar la radiación, siendo incapaz de emitirla (Pilon & Kandilian, 2016).

En función de estos supuestos se presenta a continuación el fundamento teórico necesario para la deducción de la ecuación de transporte radiativo.

A. Atenuación por absorción

La cantidad de radiación absorbida por la suspensión es directamente proporcional a la magnitud de la energía incidente y a la distancia recorrida por el haz de radiación conforme atraviesa el medio participante. La energía absorbida se transforma en energía interna, y matemáticamente se la puede expresar en función de la intensidad de radiación espectral como:

$$(dI_\lambda)_{abs} = -\mathscr{k}_{\lambda,abs} I_\lambda ds \tag{2.48}$$

En donde $\mathscr{k}_{\lambda,\text{abs}}$ representa el coeficiente efectivo de absorción espectral y *ds* un diferencial del camino recorrido por el haz de radiación. En el SI $\mathscr{k}_{\lambda,\text{abs}}$ viene dado en m^{-1}. El signo negativo se introduce debido a que la intensidad espectral disminuye. La integración de esta ecuación sobre la trayectoria *s* mediante el procedimiento de variables separables da como resultado:

$$I_\lambda(s) = I_\lambda(0)\exp\left(-\int_0^s \mathscr{k}_{\lambda,abs} ds\right) = I_\lambda(0)\exp(-\tau_\lambda) \tag{2.49}$$

En donde τ_λ se conoce como el espesor óptico de absorción, a través del cual el haz de radiación ha viajado y *I(0)* es la intensidad espectral que ingresa al medio, es decir en *s=0*. Por tanto:

$$\tau_{\lambda,abs} = \int_0^s \mathscr{k}_{\lambda,abs} ds \tag{2.50}$$

El espesor óptico es de carácter adimensional. A partir de la ecuación 2.49 y 2.50 se puede definir a la absortividad espectral del medio $\psi_{\lambda,\text{abs}}$ como:

$$\psi_{\lambda,abs} = \frac{I_\lambda(0) - I_\lambda(s)}{I_\lambda(0)} = 1 - \exp(-\tau_\lambda) \tag{2.51}$$

La absortividad espectral, de acuerdo a la ecuación 2.51, se define como el cociente entre la intensidad de radiación espectral absorbida y la intensidad de radiación espectral que ingresa en el medio, constituyéndose como una fracción de *I(0)* de carácter adimensional.

B. Atenuación por dispersión (out-scattering)

Un proceso de dispersión implica que una fracción de la intensidad de radiación que ingresa o sale de la suspensión es desviada de la dirección de propagación $\hat{\mathbf{s}}$. En el caso del out-scaterring, la radiación que sale de una parte del medio participante (Figura 2.20) es redirigida y aparece como una contribución externa en otra parte del mismo, denominada como in-scattering (Figura 20). Como es de esperarse, esta pérdida ocasiona una atenuación de la cantidad de energía radiante disponible. Matemáticamente se expresa en función de la intensidad de radiación espectral:

$$(dI_\lambda)_{sca} = -\mathscr{k}_{\lambda,sca} I_\lambda ds \tag{2.52}$$

Al igual que en el caso de la absorción, el signo negativo se coloca para hacer énfasis que la intensidad de radiación espectral disminuye por dispersión. El coeficiente $\mathscr{k}_{\lambda,\mathrm{sca}}$ se conoce como coeficiente efectivo de dispersión espectral y viene dado en m^{-1} en el SI.

C. Atenuación total

La atenuación total de la intensidad de radiación espectral, conocida comúnmente como extinción, es la suma de las pérdidas ocasionadas por absorción y dispersión:

$$(dI_\lambda)_{ext} = (dI_\lambda)_{abs} + (dI_\lambda)_{sca} = -\left(\mathscr{k}_{\lambda,sca} + \mathscr{k}_{\lambda,abs}\right) I_\lambda ds \tag{2.53}$$

La suma de los coeficientes $\mathscr{k}_{\lambda,\text{abs}}$ y $\mathscr{k}_{\lambda,\text{sca}}$ da origen al coeficiente efectivo de extinción espectral $\mathscr{k}_{\lambda,\text{ext}}$, cuyas unidades en el SI son m^{-1}:

$$\mathscr{k}_{\lambda,ext} = \mathscr{k}_{\lambda,sca} + \mathscr{k}_{\lambda,abs} \tag{2.54}$$

El espesor óptico basado en $\mathscr{k}_{\lambda,\text{ext}}$ se define como:

$$\tau_{\lambda,ext} = \int_0^s \mathscr{k}_{\lambda,ext} ds \tag{2.55}$$

Este término es adimensional.

D. Incremento por emisión

La tasa de emisión de radiación desde un elemento de volumen es proporcional a la magnitud del volumen. Por tanto, la intensidad emitida a lo largo de cualquier trayectoria debe ser proporcional tanto a la longitud del camino como a la energía local contenida en el medio. Entonces:

$$(dI_\lambda)_{em} = j_\lambda ds \tag{2.56}$$

A j_λ se le conoce con el nombre de coeficiente espectral de emisión, y dado que en condiciones de equilibrio térmico local la intensidad espectral de radiación en cualquier parte del medio debe ser igual a la intensidad espectral de emisión de un cuerpo negro $I_{b\lambda}$ (Modest, 2013), la ecuación 2.56 puede ser expresada de la siguiente manera:

$$(dI_\lambda)_{em} = \kappa_{\lambda,abs} I_{b\lambda} ds \tag{2.57}$$

Lo que quiere decir que en equilibrio termodinámico local, el coeficiente de proporcionalidad para la emisión es igual al de absorción.

E. Incremento por dispersión

Esta contribución de energía radiante proviene de todas las direcciones por lo que para su cálculo será necesario integrarla sobre todos los ángulos sólidos. Para esto, considérese el flujo de calor que viene desde la dirección dada por el vector $\hat{\mathbf{s}}_i$ (ver figura 37):

$$\frac{dQ_i}{dt} = I_\lambda(\hat{\mathbf{s}}_i)(dA\, \hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}})d\Omega_i d\lambda \tag{2.58}$$

En donde $d\Omega_i$ representa un diferencial de ángulo sólido. El término entre paréntesis da cuenta de la proyección haz de radiación que llega desde la dirección i sobre el área dA.

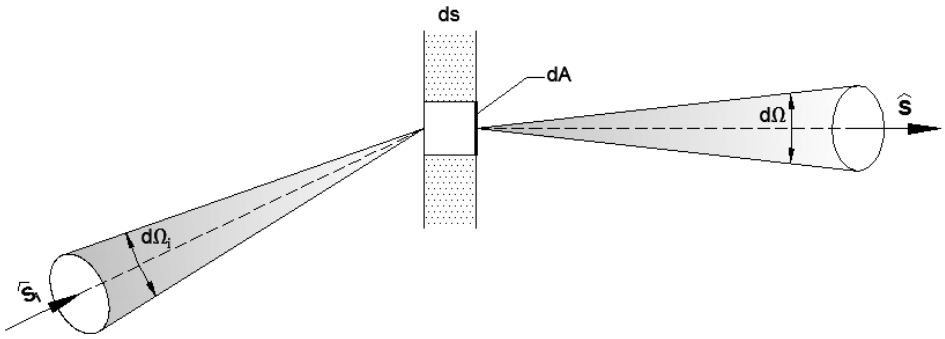


Figura 37 Intensidad de radiación redirigida por dispersión. Fuente: Modest 2013.

Para ver esto claramente, en primer lugar se aplica la definición de producto interno entre los vectores unitarios $\hat{\mathbf{s}}_i$ y $\hat{\mathbf{s}}$:

$$\hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}} = \|\hat{\mathbf{s}}_i\| \|\hat{\mathbf{s}}\| cos\theta_i \tag{2.59}$$

Debido a que la magnitud de los vectores unitarios es 1, la ecuación 2.59 se expresa así:

$$\hat{\mathbf{s}}_i \cdot \hat{\mathbf{s}} = cos\theta \tag{2.60}$$

En donde θ es el ángulo de abertura entre los vectores unitarios. El siguiente paso es expresar las áreas dA y dA_i como vectores (ver figura 38):

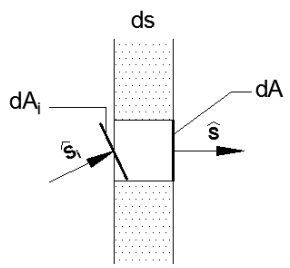


Figura 38 Áreas perpendiculares a los rayos incidentes. Fuente: El Autor.

$$\mathbf{dA_i} = dA_i \hat{\mathbf{s}}_i \tag{2.61}$$

$$\mathbf{dA} = dA \hat{\mathbf{s}} \tag{2.62}$$

Nótese que de acuerdo a las ecuaciones 2.61 y 2.62, los vectores **dA** y $\mathbf{dA_i}$ tienen una magnitud que es proporcional al tamaño del área que representan, y siguen la misma dirección que sus respectivos vectores unitarios. Finalmente, se proyecta el vector **dA** a lo largo del vector unitario $\hat{\mathbf{s}}_i$:

$$\mathbf{dA} \cdot \hat{\mathbf{s}}_i = dA\, \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_i = dA cos\theta = dA_i \tag{2.63}$$

Por tanto, el término entre paréntesis de la ecuación 2.58 representa el área *dAi*, que no es más que la proyección de *dA* en la dirección del vector unitario $\hat{\mathbf{s}}_i$. Luego, el flujo de calor descrito por la ecuación 2.58 viaja una distancia ds_i en el volumen *dV*=*dA ds*, como se aprecia en la Figura 39:

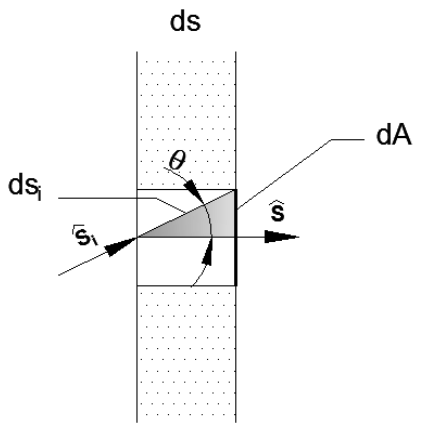


Figura 39 Distancia ds_i recorrida por el haz de radiación que viene desde la dirección s_i. Fuente: El Autor.

Esta distancia puede ser calculada en el triángulo sombreado de la Figura 39:

$$ds_i = \frac{ds}{cos\theta} = \frac{ds}{\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}} \tag{2.64}$$

Si multiplicamos la ecuación 2.58 simultáneamente por la ecuación 2.64 y el coeficiente efectivo de dispersión espectral, se obtiene un término dimensionalmente coherente:

$$\hbar_{\lambda,sca}[I_\lambda(\hat{\mathbf{s}}_1)(dA\,\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}})d\Omega_i d\lambda]\frac{ds}{\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}} = \hbar_{\lambda,sca} I_\lambda(\hat{\mathbf{s}}_1)dAd\Omega_i d\lambda ds \tag{2.65}$$

Nótese que en esencia la ecuación 2.65 sigue representando un flujo de energía. De esta cantidad, una fracción es dispersada hacia el cono *dΩ* alrededor de la dirección $\hat{\mathbf{s}}$ (ver figura 39):

$$w(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) = \frac{\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}})d\Omega}{4\pi} \tag{2.66}$$

En donde $(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}})$ se conoce como función de dispersión y describe la probabilidad de que un rayo que lleva una dirección $\hat{\mathbf{s}}_1$ sea dispersado a una dirección $\hat{\mathbf{s}}$. La constante 4π es arbitraria y se incluye por conveniencia (Modest, 2013). Entonces, la cantidad de energía del cono $d\Omega_i$ dispersada hacia el cono *dΩ* se expresa como:

$$\hbar_{\lambda,sca} I_\lambda(\hat{\mathbf{s}}_1)dAd\Omega_i d\lambda ds\frac{\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}})d\Omega}{4\pi} \tag{2.67}$$

Finalmente, para obtener el flujo de energía radiante que proviene desde todas las direcciones $\hat{\mathbf{s}}_1$ y se dispersa hacia la dirección $\hat{\mathbf{s}}$, integramos la ecuación 2.67:

$$(dI_\lambda)_{sca}(\hat{\mathbf{s}})dAd\Omega d\lambda = \int_{4\pi} \mathscr{k}_{\lambda,sca} I_\lambda(\hat{\mathbf{s}}_1)dAd\Omega_i d\lambda ds \frac{\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}})d\Omega}{4\pi} \tag{2.68}$$

La variable de integración en la ecuación 2.68 es $d\Omega_i$ por lo que el resto de diferenciales pueden salir de la integral y eliminarse:

$$(dI_\lambda)_{sca}(\hat{\mathbf{s}}) = \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca} ds}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\hat{\mathbf{s}}_1)\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}})d\Omega_i \tag{2.69}$$

Si iguales cantidades de energía son dispersadas en todas las direcciones (dispersión isotrópica), entonces la función de dispersión es constante e igual a la unidad:

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}})\, d\Omega = 1 \tag{2.70}$$

Esta es la razón de la introducción de la constante arbitraria 4π en la ecuación 2.66. Una vez que se han desarrollado todos los términos de la ecuación 2.47, es hora de ensamblarlos mediante un balance de energía referido a la intensidad de radiación espectral, en un elemento de área diferencial conformado por haces de radiación. En la Figura 40 se observa este elemento, en donde la radiación incidente tiene una dirección definida $\hat{\mathbf{s}}$ y la radiación dispersa está representada mediante flechas con líneas interpuntadas fuera de la dirección $\hat{\mathbf{s}}$ (ver figura 40):

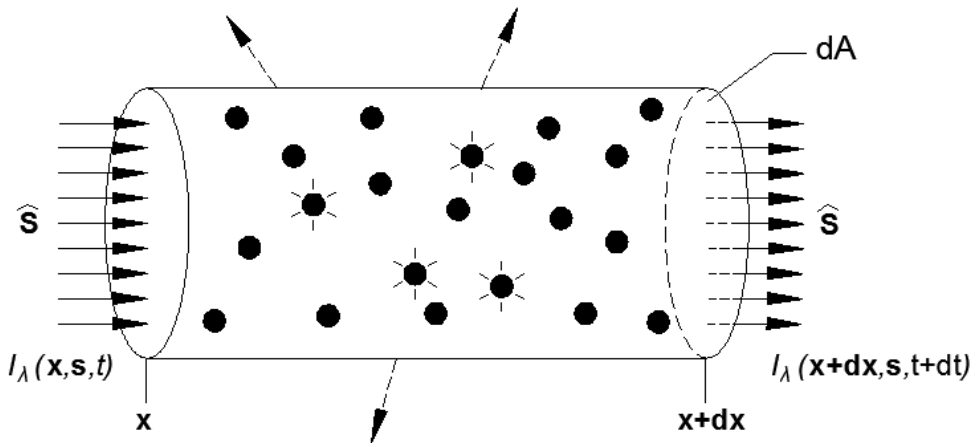


Figura 40 Elemento conformado por haces de radiación en donde se efectuará el balance de energía. Fuente: Modest 2013.

Por tanto, siguiendo el orden de la ecuación 2.47:

$$I_\lambda(\mathbf{x}+\mathbf{dx},\hat{\mathbf{s}},t+dt)-I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)=j_\lambda(\mathbf{x},t)ds-\kappa_{\lambda,abs}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)ds$$

$$-\kappa_{\lambda,sca}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)ds+\frac{\kappa_{\lambda,sca}ds}{4\pi}\int_{4\pi}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1,\mathrm{t})\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}})d\Omega_i \tag{2.71}$$

La ecuación 2.71 es Lagrangiana es su naturaleza porque se está siguiendo un haz de radiación desde *s* a *s+ds*. Debido a que el haz de radiación viaja a la velocidad de la luz *c* (en un medio con un índice de refracción n), la distancia recorrida por este haz viene dada por *ds=cdt*. El lado izquierdo de la ecuación 2.71 puede desarrollarse mediante una serie de Taylor truncada de primer orden:

$$I_\lambda(\mathbf{x}+\mathbf{dx},\hat{\mathbf{s}},t+dt)=I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)+\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial s}ds+\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial t}dt \tag{2.72}$$

Reemplazando el resultado obtenido en la ecuación 2.71:

$$\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial s}ds+\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial t}dt=j_\lambda(\mathbf{x},t)ds-\mathscr{k}_{\lambda,abs}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)ds$$

$$-\mathscr{k}_{\lambda,sca}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)ds+\frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}ds}{4\pi}\int_{4\pi}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1,\mathrm{t})\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}})d\Omega_i \tag{2.73}$$

Luego, sustituyendo *dt* por *ds/c*:

$$\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial s}ds+\frac{ds}{c}\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial t}=j_\lambda(\mathbf{x},t)ds-\mathscr{k}_{\lambda,abs}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)ds$$

$$-\mathscr{k}_{\lambda,sca}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)ds+\frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}ds}{4\pi}\int_{4\pi}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1,\mathrm{t})\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}})d\Omega_i \tag{2.74}$$

Eliminando *ds* de todos los términos de la ecuación 2.74 se obtiene:

$$\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial s}+\frac{1}{c}\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial t}=j_\lambda(\mathbf{x},t)-\mathscr{k}_{\lambda,abs}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)$$

$$-\mathscr{k}_{\lambda,sca}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)+\frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi}\int_{4\pi}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1,\mathrm{t})\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}})d\Omega_i \tag{2.75}$$

Expresada así la ecuación 2.74 se conoce con el nombre de ecuación de transporte radiativo en su forma transitoria, válida tanto en el equilibrio termodinámico local como en los casos de que no exista tal equilibrio. Reemplazando en la ecuación 2.74 las definiciones dadas por las ecuaciones 2.56-2.57:

$$\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial s}+\frac{1}{c}\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial t}=\mathscr{k}_{\lambda,abs}I_{b\lambda}(\mathbf{x},t)-\mathscr{k}_{\lambda,abs}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)$$

$$-\mathscr{k}_{\lambda,sca}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)+\frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi}\int_{4\pi}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1,t)\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}})d\Omega_i \tag{2.76}$$

Reemplazando en esta ecuación la definición del coeficiente efectivo de extinción espectral:

$$\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial s}+\frac{1}{c}\frac{\partial I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)}{\partial t}=\mathscr{k}_{\lambda,abs}I_{b\lambda}(\mathbf{x},t)$$

$$-\mathscr{k}_{\lambda,ext}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}},t)+\frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi}\int_{4\pi}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1,t)\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}})d\Omega_i \tag{2.77}$$

La velocidad de la luz es mucho mayor que cualquier velocidad que se desarrolle a nivel local. Por tanto, el término transitorio puede eliminarse (estado cuasi-estacionario) y desaparece la dependencia con respecto al tiempo de las distintas funciones involucradas en la ecuación 2.77:

$$\frac{dI_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}})}{ds}=\mathscr{k}_{\lambda,abs}I_{b\lambda}(\mathbf{x})-\mathscr{k}_{\lambda,ext}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}})$$

$$+\frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi}\int_{4\pi}I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1)\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1\cdot\hat{\mathbf{s}})d\Omega_i \tag{2.78}$$

La ecuación 2.78 contiene un término diferencial de primer orden en cuanto a la intensidad espectral de radiación para una dirección fija $\hat{\mathbf{s}}$. Esta ecuación puede modificarse si se introduce el concepto de derivada direccional, que no

es más que el producto interno entre el gradiente de intensidad de radiación espectral y el vector unitario $\hat{\mathbf{s}}$:

$$\frac{dI_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}})}{ds} = \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}) \tag{2.79}$$

Entonces, reemplazando este resultado en la ecuación 2.78 se llega a:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}) &= \mathscr{k}_{\lambda,abs} I_{b\lambda}(\mathbf{x}) - \mathscr{k}_{\lambda,ext} I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}) \\ &+ \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1)\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \end{aligned} \tag{2.80}$$

Esta ecuación de transporte será de utilidad para estudiar como la Radiación Fotosintéticamente Activa interactúa con la suspensión (medio de cultivo y microorganismos). Para ello, $\mathscr{k}_{\lambda,\text{abs}}$, $\mathscr{k}_{\lambda,\text{sca}}$ y $\mathscr{k}_{\lambda,\text{ext}}$ serán referidos como los coeficientes efectivos espectrales de absorción, dispersión y extinción de la suspensión. Además, recordando que una de las suposiciones en las cuales se basó el balance de energía desarrollado establecía que la suspensión es un medio no emisor, la ecuación 2.80 se transforma en:

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}) = -\mathscr{k}_{\lambda,ext} I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}) + \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x},\hat{\mathbf{s}}_1)\vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \tag{2.81}$$

Aunque el balance de energía expresado por la ecuación 2.81 está en función de la intensidad espectral de radiación, en la práctica es más útil poner esta ecuación en función de la irradiancia espectral. Para ello, se debe integrar la ecuación 2.81 sobre todos los ángulos sólidos, multiplicando antes cada término por un diferencial de ángulo sólido $d\Omega$:

$$\int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \cdot \boldsymbol{\nabla} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega = -\int_{4\pi} \mathscr{k}_{\lambda,ext} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega$$

$$+ \int_{4\pi} \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i d\Omega \tag{2.82}$$

El operador diferencial de la integral de lado izquierdo de la ecuación 2.82 está en función del ángulo sólido. Por tanto, el operador nabla cuyas derivadas están en función de la posición puede salir de la integral (solo para coordenadas cartesianas) conjuntamente con el operador del producto interno. De la misma manera, las integrales del último término de la ecuación 2.82 pueden intercambiar sus posiciones, obteniéndose la ecuación 2.70 que otorga un valor de 1 (dispersión isotrópica) a la expresión entre corchetes:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathbf{s}} d\Omega$$

$$= -\mathscr{k}_{\lambda,ext} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega$$

$$+ \mathscr{k}_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) \left[\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \right] d\Omega_i \tag{2.83}$$

En la ecuación 2.83 se debe notar que los coeficientes efectivos espectrales no son función del ángulo sólido por lo que pueden salir de los integrales sin ningún problema. Reacomodando los términos:

$$\nabla \cdot \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})\hat{\mathbf{s}} d\Omega$$
$$= -\kappa_{\lambda,ext} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega + \kappa_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_i)\, d\Omega_i \tag{2.84}$$

En este punto, es necesario definir el vector de irradiancia espectral:

$$\mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})\hat{\mathbf{s}} d\Omega \tag{2.85}$$

Reemplazando este resultado en la ecuación 2.84:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) = -\kappa_{\lambda,ext} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega + \kappa_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_i)\, d\Omega_i \tag{2.86}$$

Desde que los diferenciales dΩ y dΩ_i son argumentos empleados para indicar la integración sobre todos los ángulos sólidos, entonces:

$$\int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega = \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_i)\, d\Omega_i \tag{2.87}$$

Por tanto, la ecuación 2.86 se puede agrupar:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) = \left(\kappa_{\lambda,sca} - \kappa_{\lambda,ext}\right) \int_{4\pi} I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.88}$$

La diferencia entre paréntesis no es más que el coeficiente efectivo de absorción espectral. Por tanto:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) = -\mathscr{k}_{\lambda,abs} \int_{4\pi} I_{\lambda}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.89}$$

Introduciendo el concepto de irradiancia espectral:

$$\mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I_{\lambda}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.90}$$

Por tanto:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) = -\mathscr{k}_{\lambda,abs} \mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) \tag{2.91}$$

La ecuación vectorial 2.91 se puede hacer aún más específica para los microorganismos estudiados en esta investigación. Para ello definamos la concentración másica de biomasa como C_{Bx} (kilogramos de biomasa por metro cúbico de suspensión) y multipliquemos y dividamos simultáneamente en el lado derecho de la ecuación 2.91:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) = -\frac{\mathscr{k}_{\lambda,abs}}{C_{Bx}} C_{Bx} \mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) \tag{2.92}$$

En secciones anteriores se analizó el concepto de sección trasversal óptica de una cianobacteria fx,. Ahora, este parámetro se puede expresar en base másica multiplicándolo por la masa molecular de la biomasa equivalente en carbono, y es equivalente también a dividir el coeficiente efectivo de absorción espectral para la concentración másica de biomasa:

$$\mathrm{E}_{\lambda,abs} = f_{x,\lambda} M_B = \frac{\mathscr{k}_{\lambda,abs}}{C_{Bx}} \tag{2.93}$$

En donde $E_{\lambda,\mathrm{abs}}$ se conoce como coeficiente espectral de absorción másico (Janssen, 2016). Introduciendo este concepto en la ecuación 2.92:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) = -\mathrm{E}_{\lambda,abs} C_{Bx} \mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) \tag{2.94}$$

La ecuación 2.94 es todavía dependiente de la longitud de onda. Integrando en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa se obtiene:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) d\lambda = -\int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathrm{E}_{\lambda,abs} C_{Bx} \mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) d\lambda \tag{2.95}$$

El lado izquierdo de esta ecuación se puede resolver de manera sencilla si se define el vector de irradiancia total en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa como:

$$\mathbf{q}_{\mathbf{RFA}}(\mathbf{x}) = \int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathbf{q}_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{x}) d\lambda \tag{2.96}$$

El lado derecho de la ecuación 2.95 se soluciona fácilmente si se analiza en primer lugar como evoluciona $E_{\lambda,\mathrm{abs}}$ con la longitud de onda en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa (J. Cornet, Dussap, & Gros, 1994).

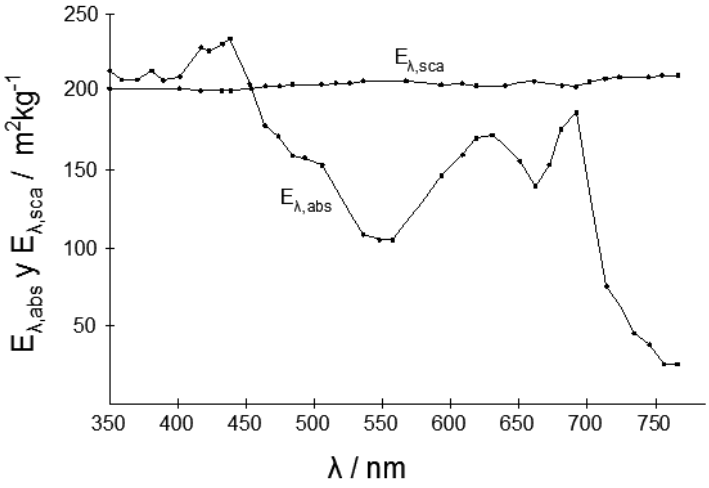


Figura 41 Coeficiente de absorción másico y coeficiente de dispersión másico para cada longitud de onda en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa. Fuente: Cornet et. al 1994.

Como se observa en la Figura 41, entre los 400nm y 700nm el coeficiente de absorción másica presenta variaciones significativas en el intervalo entre $25m^2kg_x^{-1}$ y $200m^2kg_x^{-1}$, por lo que es necesario definir un promedio en el espectro de interés. Investigaciones experimentales acuerdan que este valor debe ser equivalente a $150m^2kg_x^{-1}$(J. Cornet et al., 1994). Con esta consideración, $E_{\lambda,abs}$ puede salir del integral como un valor promedio E_{abs}:

$$\nabla \cdot \mathbf{q_{RFA}}(\mathbf{x}) = -\mathrm{E}_{abs} C_{Bx} \int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) d\lambda \tag{2.97}$$

Por último, es necesario definir la irradiancia total en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa como:

$$q_{RFA}(\mathbf{x}) = \int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) d\lambda \tag{2.98}$$

Reemplazando la ecuación 2.98 en la ecuación 2.97, se obtiene el siguiente resultado:

$$-\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q}_{\mathbf{RFA}}(\mathbf{x}) = \mathrm{E}_{abs} C_{Bx}\, q_{RFA}(\mathbf{x}) \tag{2.99}$$

Las irradiancias totales de la ecuación 2.99 están expresadas en Wm^{-2}. Sin embargo, pueden convertirse a flux total de fotones mediante la ecuación 2.18:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\frac{\mathbf{q}_{\mathbf{RFA}}(\mathbf{x})\, \lambda}{\hbar c N_A}\right] = -\mathrm{E}_{abs} C_{Bx} \left[\frac{q_{RFA}(\mathbf{x})\, \lambda}{\hbar c N_A}\right] \tag{2.100}$$

Entonces:

$$-\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{ph,RFA}}(\mathbf{x}) = \mathrm{E}_{abs} C_{Bx}\, F_{ph,RFA}(\mathbf{x}) \tag{2.101}$$

Debe tenerse en cuenta que las unidades de ambos lados de la ecuación 2.101 están expresadas en μmol m^{-3} s^{-1} y se mantiene la naturaleza vectorial de la ecuación 2.99. En esencia, la ecuación 2.101 expresa que el flux de fotones provenientes de la luz solar en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa disminuye como consecuencia de la absorción que se produce en los centros especializados de la célula encargados del proceso de fotosíntesis (de ahí el signo negativo que aparece en la citada ecuación), que no es más que la confirmación del principio de conservación de la energía. Lo anterior también permite comprender el vínculo existente entre la fase fotónica y la biomasa, en el sentido de que los fotones cedidos por la radiación solar son empleados por las células para su crecimiento. Un análisis más detallado permite establecer que el lado derecho de la ecuación 2.101 corresponde a la densidad volumétrica local de fotones absorbidos $\mathscr{A}(\mathbf{x})$ por lo que:

$$\mathcal{A}(\mathbf{x}) = \mathrm{E}_{abs} C_{Bx}\, F_{ph,RFA}(\mathbf{x}) \tag{2.102}$$

Las ecuaciones 2.99-2.102 tiene un carácter local debido a que son función de la posición dentro del fotobioreactor.

La ecuación 2.102 pone de manifiesto que para determinar la tasa de generación volumétrica local $R_B(\mathbf{x})$ mediante la ecuación 2.40 se requiere conocer previamente el flux local de fotones $F_{ph,RFA}$, mismo que debe ser obtenido resolviendo la ecuación vectorial 2.101.

2.8.2 Ecuación de transporte radiativo considerando las componentes de la radiación solar

La discusión anterior se limitó a considerar que la intensidad de radiación espectral provenía de una sola fuente sin componentes intrínsecos. Sin embargo, como se analizó en el apartado 2.2, el campo de radiación solar puede expresarse como la suma de una componente directa y una difusa. En términos de la intensidad de radiación espectral, esto puede expresarse de la siguiente manera (Modest, 2013):

$$I_\lambda(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) = I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) + I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) \tag{2.103}$$

En donde I_λ representa la intensidad de radiación espectral total, $I_{\lambda c}$ la intensidad de radiación espectral directa e $I_{\lambda d}$ la intensidad de radiación espectral difusa. Estos términos son funciones tanto de la posición dentro del fotobioreactor **x** como de la dirección de propagación $\hat{\mathbf{s}}$.

La intensidad de radiación espectral directa puede calcularse resolviendo la ecuación de transporte radiativo (ecuación 2.80) (Modest, 2013):

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) = -\kappa_{\lambda,ext} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) \\ = -\kappa_{\lambda,abs} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) - \kappa_{\lambda,sca} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) \tag{2.104}$$

La ecuación 2.104 señala que la intensidad de radiación espectral directa, que se propaga en la dirección $\hat{\mathbf{s}}$**,** disminuye su valor conforma atraviesa la suspensión de microorganismos debido a la absorción producida en las células y a la dispersión (out-scattering). Los términos de in-scattering y emisión se descartan debido a que no contribuyen con la radiación solar directa. La intensidad de radiación espectral difusa también puede calcularse resolviendo la ecuación de transporte radiativo (ecuación 2.80), reemplazando I_λ por la ecuación 2.103 (Modest, 2013):

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla [I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) + I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})] = \\ -\kappa_{\lambda,ext}[I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) + I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})] \\ + \frac{\kappa_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} [I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) + I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1)] \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \tag{2.105}$$

Separando términos de la ecuación 2.105 se tiene:

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) + \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) = \\ -\kappa_{\lambda,ext} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) - \kappa_{\lambda,ext} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) \\ + \frac{\kappa_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \\ + \frac{\kappa_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \tag{2.106}$$

Observando que la ecuación 2.104 está implícita en la ecuación 2.106, se puede llegar a la siguiente simplificación:

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) = -\mathscr{k}_{\lambda,ext} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})$$

$$+ \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}}) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \tag{2.107}$$

$$+ \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}}) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i$$

Descomponiendo el coeficiente efectivo de extinción espectral:

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) = -\mathscr{k}_{\lambda,abs} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) - \mathscr{k}_{\lambda,sca} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})$$

$$+ \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}}) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \tag{2.108}$$

$$+ \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}}) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}} \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i$$

De acuerdo a la ecuación 2.108, la magnitud de la intensidad de radiación espectral difusa se ve reforzada por la dispersión (in-scattering) tanto de la radiación directa como de la radiación difusa que proviene de otras direcciones $\hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}}$ distintas a la dirección de propagación $\hat{\mathbf{s}}$, y disminuye debido a los efectos de absorción y dispersión (out-scattering) conforme atraviesa la suspensión de microorganismos (Lee, Pruvost, He, Munipalli, & Pilon, 2014). Una particularidad de la ecuación 2.108 es que no está limitada a la dispersión isotrópica.

Para resolver la ecuación 2.104, es decir obtener el campo de irradiancia local proveniente de la radiación solar directa, procedemos como en el

apartado anterior multiplicando ambos miembros por un diferencial de ángulo sólido:

$$\int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})\, d\Omega = -\int_{4\pi} \mathcal{k}_{\lambda,ext} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.109}$$

Resolviendo la ecuación 2.109 en coordenadas cartesianas:

$$\nabla \cdot \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})\, d\Omega = -\int_{4\pi} \mathcal{k}_{\lambda,ext} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.110}$$

El coeficiente efectivo de extinción espectral es independiente del ángulo sólido, por lo que puede salir de la integral:

$$\nabla \cdot \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}})\, d\Omega = -\mathcal{k}_{\lambda,ext} \int_{4\pi} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.111}$$

Los términos dentro del integral corresponden al vector de irradiancia espectral y a la irradiancia espectral:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{c\lambda}(\mathbf{x}) = -\mathcal{k}_{\lambda,ext} q_{c\lambda}(\mathbf{x}) \tag{2.112}$$

La ecuación vectorial 2.112 se puede hacer aún más específica, empleando definamos la concentración másica de biomasa como C_{Bx} (kilogramos de biomasa por metro cúbico de suspensión):

$$\nabla \cdot \mathbf{q_{c\lambda}}(\mathbf{x}) = -\frac{k_{\lambda,ext}}{C_{Bx}} C_{Bx} q_{c\lambda}(\mathbf{x}) \tag{2.113}$$

Definiendo el coeficiente espectral de extinción másico como:

$$\mathrm{E}_{\lambda,ext} = \frac{k_{\lambda,ext}}{C_{Bx}} \tag{2.114}$$

Por tanto, la ecuación 2.113 se transforma en:

$$\nabla \cdot \mathbf{q_{c\lambda}}(\mathbf{x}) = -\mathrm{E}_{\lambda,ext} C_{Bx} q_{c\lambda}(\mathbf{x}) \tag{2.115}$$

La ecuación 2.115 es todavía dependiente de la longitud de onda. Integrando en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa se obtiene:

$$\nabla \cdot \int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathbf{q}_{c\lambda}(\mathbf{x}) d\lambda = -\int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathrm{E}_{\lambda,ext} C_{Bx} \mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) d\lambda \tag{2.116}$$

Para resolver la ecuación 2.116, se debe expresar el coeficiente de extinción espectral másico en función de los coeficientes espectrales másicos de absorción y scattering:

$$\nabla \cdot \int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathbf{q}_{c\lambda}(\mathbf{x}) d\lambda = -\int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \left(\mathrm{E}_{\lambda,abs} + \mathrm{E}_{\lambda,sca}\right) C_{Bx} \mathrm{q}_{\lambda}(\mathbf{x}) d\lambda \tag{2.117}$$

Empleando la gráfica 2.25, podemos observar que el coeficiente de scattering espectral másico es prácticamente constante entre 400nm y 700nm, tomando un valor de $200 m^2 kg_x^{-1}$. Además, dado que el coeficiente de

absorción espectral másico se asumió como constante en la sección anterior, podemos resolver la integral del lado derecho de la ecuación 2.117, definiendo esta vez unos coeficientes másicos promediados:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{q}_{\boldsymbol{cRFA}}(\mathbf{x}) = -(\mathrm{E}_{abs} + \mathrm{E}_{sca}) C_{Bx} \mathrm{q}_{cRFA}(\mathbf{x}) \tag{2.118}$$

En donde q_{cRFA} representa la irradiancia solar directa en la región del espectro de radiación fotosintéticamente activa. Las irradiancias de la ecuación 2.118 están expresadas en Wm^{-2}. Sin embargo, pueden convertirse a flux total de fotones mediante la ecuación 2.18:

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\frac{\mathbf{q}_{\mathbf{cRFA}}(\mathbf{x})\, \lambda}{\hbar c N_A} \right] = -(\mathrm{E}_{abs} + \mathrm{E}_{sca}) C_{Bx} \left[\frac{q_{cRFA}(\mathbf{x})\, \lambda}{\hbar c N_A} \right] \tag{2.119}$$

Entonces:

$$-\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{phc,RFA}}(\mathbf{x}) = (\mathrm{E}_{abs} + \mathrm{E}_{sca}) C_{Bx}\, F_{phc,RFA}(\mathbf{x}) \tag{2.120}$$

La ecuación 2.120 establece que el flux de fotones provenientes de la radiación solar directa, entre 400nm y 700nm, disminuye como consecuencia de la absorción y scattering de los mismos por la suspensión de microorganismos. Ambos miembros de la ecuación 2.120 tiene como unidades μmol m^{-3} s^{-1}.

Para obtener el campo de irradiancia proveniente de la radiación solar difusa, en primer lugar integramos la ecuación 2.108 multiplicándola por un diferencial de ángulo sólido:

$$\int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega$$

$$= -\int_{4\pi} \kappa_{\lambda,abs} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega - \int_{4\pi} \kappa_{\lambda,sca} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.121}$$

$$+ \int_{4\pi} \frac{\kappa_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i d\Omega$$

$$+ \int_{4\pi} \frac{\kappa_{\lambda,sca}}{4\pi} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \, d\Omega$$

Integrando en coordenadas cartesianas, extrayendo los coeficientes efectivos espectrales de las integrales dada su no dependía con el ángulo sólido, y agrupando convenientemente se tiene:

$$\nabla \cdot \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \, I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega$$

$$= -\kappa_{\lambda,abs} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega - \kappa_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.122}$$

$$+ \kappa_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) \left[\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \right] d\Omega_i$$

$$+ \kappa_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_1) \left[\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \vartheta(\hat{\mathbf{s}}_1 \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \right] d\Omega_i$$

Si se trabaja con dispersión isotrópica, los términos entre corchetes toman el valor de 1. Desde que los diferenciales $d\Omega$ y $d\Omega_i$ son argumentos empleados para indicar la integración sobre todos los ángulos sólidos, entonces $d\Omega_i = d\Omega$:

$$\nabla \cdot \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}}\, I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega$$

$$= -\mathscr{k}_{\lambda,abs} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega - \mathscr{k}_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega \tag{2.123}$$

$$+ \mathscr{k}_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_{\lambda c}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}}) d\Omega + \mathscr{k}_{\lambda,sca} \int_{4\pi} I_{\lambda d}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{s}}_{\mathrm{i}}) d\Omega$$

La integral del lado izquierdo de la ecuación 2.123 corresponde al vector de irradiancia espectral difusa, mientras que las integrales del lado derecho corresponden a las irradiancias espectrales difusa y directa. Reemplazando las integrales por irradiancias espectrales y eliminando términos se obtiene:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{\mathbf{d}\boldsymbol{\lambda}} = -\mathscr{k}_{\lambda,abs} q_{d\lambda} + \mathscr{k}_{\lambda,sca} q_{c\lambda} \tag{2.124}$$

Multiplicando y dividiendo el lado derecho de la ecuación 2.124 por la concentración másica de biomasa C_{Bx} se introducen los conceptos de coeficiente espectral másico de absorción y scattering:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{q}_{\mathbf{d}\boldsymbol{\lambda}} &= -\frac{\mathscr{k}_{\lambda,abs}}{C_{Bx}} C_{Bx} q_{d\lambda}(\mathbf{x}) + \frac{\mathscr{k}_{\lambda,sca}}{C_{Bx}} C_{Bx} q_{c\lambda}(\mathbf{x}) \\ &= -\mathrm{E}_{\lambda,abs} C_{Bx} q_{d\lambda}(\mathbf{x}) + \mathrm{E}_{\lambda,sca} C_{Bx} q_{c\lambda}(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{2.125}$$

Luego, integrando la ecuación 2.125 en la región del espectro fotosintéticamente activo:

$$\nabla \cdot \int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathbf{q}_{d\lambda}(\mathbf{x})d\lambda = -\int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathrm{E}_{\lambda,abs} C_{Bx} \mathrm{q}_{d\lambda}(\mathbf{x})d\lambda + \int_{\lambda=400}^{\lambda=700} \mathrm{E}_{\lambda,sca} C_{Bx} \mathrm{q}_{c\lambda}(\mathbf{x})d\lambda \tag{2.126}$$

Al igual que en los casos anteriores, los coeficientes espectrales másicos se promedian entre 400nm y 700nm, por lo cual la integración resulta en:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_{dRFA}(\mathbf{x}) = -\mathrm{E}_{abs} C_{Bx} \mathrm{q}_{dRFA}(\mathbf{x}) + \mathrm{E}_{sca} C_{Bx} \mathrm{q}_{cRFA}(\mathbf{x}) \tag{2.127}$$

En donde q_{dRFA} representa la irradiancia solar difusa en la región del espectro de radiación fotosintéticamente activa. Las irradiancias de la ecuación 2.127 están expresadas en Wm^{-2}. Sin embargo, pueden convertirse a flux total de fotones mediante la ecuación 2.18:

$$\nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{q}_{\mathbf{dRFA}}(\mathbf{x})\,\lambda}{\hbar c N_A}\right] = -\mathrm{E}_{abs} C_{Bx} \left[\frac{q_{dRFA}(\mathbf{x})\,\lambda}{\hbar c N_A}\right] + \mathrm{E}_{sca} C_{Bx} \left[\frac{q_{cRFA}(\mathbf{x})\,\lambda}{\hbar c N_A}\right] \tag{2.128}$$

Entonces:

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{phd,RFA}}(\mathbf{x}) = -\mathrm{E}_{abs} C_{Bx}\, F_{phd,RFA}(\mathbf{x}) + \mathrm{E}_{sca} C_{Bx}\, F_{phc,RFA}(\mathbf{x}) \tag{2.129}$$

La ecuación 2.120 determina el flux de fotones provenientes de la radiación solar difusa, entre 400nm y 700nm. Ambos miembros de la ecuación 2.129 tiene como unidades μmol m^{-3} s^{-1}. Sumando las ecuaciones 2.120 y 2.129, reordenando términos se llega a:

$$-\boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\mathbf{F}_{\mathbf{phc,RFA}}+\mathbf{F}_{\mathbf{phd,RFA}}\right)(\mathbf{x})=\mathrm{E}_{abs}C_{Bx}\left(F_{phc,RFA}+F_{phd,RFA}\right)(\mathbf{x}) \qquad (2.130)$$

En esencia, la ecuación 2.130 confirma los predicho por la ecuación 2.101, expresando que el flux de fotones provenientes de la luz solar, conformada por sus componentes directa y difusa en el espectro de la Radiación Fotosintéticamente Activa, disminuye como consecuencia de la absorción que se produce en los centros especializados de la célula encargados del proceso de fotosíntesis, lo que nuevamente pone de manifiesto el vínculo existente entre la fase fotónica y la biomasa.

La densidad volumétrica local de fotones absorbidos $\mathcal{A}(\mathbf{x})$ puede calcularse entonces en función de las componentes directa y difusa de la radiación solar:

$$\mathcal{A}(\mathbf{x})=\mathrm{E}_{abs}C_{Bx}\left(F_{phc,RFA}+F_{phd,RFA}\right)(\mathbf{x}) \qquad (2.131)$$

Con el empleo de la ecuación 2.131 se calculará la tasa de generación volumétrica local $R_B(\mathbf{x})$, es decir, la cinética de crecimiento de las cianobacterias.

Es importante notar que la ecuación 2.130 se incorporará al balance de energía, es decir, la ecuación 1.232 como el aporte del flux de radiación dentro del término $-\boldsymbol{\nabla}\cdot(\alpha^{k}\mathbf{q}^{k})$ (debe recordarse que $\mathbf{q}^{\mathbf{k}}$ estaba conformado por un aporte conductivo y otro radiativo), para de esta manera resolver el campo de temperaturas dentro del fotobioreactor.

2.9 Método de las ordenadas discretas

Uno de los objetivos de este trabajo de investigación es determinar el campo de irradiancia dentro del fotobioreactor de placa plana, para lo cual se debe resolver la ecuación 2.130. Entre las múltiples maneras que se ha propuesto

en la literatura para este fin, se encuentra el denominado método de las ordenadas discretas (Modest, 2013). Este método se basa en un esquema de volúmenes finitos, en los cuales cada octante del espacio angular 4π es dicretizado en ($N_\theta x N_\phi$) ángulos sólidos de extensión Ω, llamados ángulos de control. El ángulo θ se conoce como ángulo zenital, mientras que ϕ representa al ángulo azimutal. En el caso tridimensional se resuelven un total de 8 octantes, resultando en $8N_\theta x N_\phi$ direcciones $\hat{\mathbf{s}}$ (Martinek & Weimer, 2013). El método asume que un haz de radiación se propaga en unas pocas direcciones angulares en lugar de hacerlo en direcciones angulares continuas (Moghimi, Craig, & Meyer, 2015).

Para superficies grises, es decir aquellas cuya emisividad y absortividad no dependen de la longitud de onda de la radiación, el modelo matemático resuelve la ecuación de transporte radiativo para todos los espectros que forman la radiación solar. Sin embargo, en el caso de superficies no grises, el modelo permite dividir el espectro de radiación solar en bandas, resolviéndose para cada una de ellas $8N_\theta x N_\phi$ ecuaciones. Para cada volumen de control y ángulo sólido de intensidad de radiación constante el método de los volúmenes finitos integra la ecuación de transporte radiativo (Martinek & Weimer, 2013).

Las principales razones para escoger este método de la ecuación de transporte radiativo son (Moghimi et al., 2015):

- Es de fácil convergencia, especialmente en soluciones en serie.
- Determina la solución en la misma malla de discretización que las ecuaciones de conservación de la masa, cantidad de movimiento lineal y energía, lo que conlleva a un acoplamiento efectivo entre la temperatura de las superficies y la radiación.
- Puede ser aplicado para geometrías complejas para diferentes medios participantes tales con características no grises, scattering

anisotrópico, superficies no isotérmicas, medios absorbentes y emisores.

Los algoritmos que conforman el método no se abordará en este trabajo de investigación, aunque se pueden consultar en literatura especializada (Chui & Raithby, 1993; Murthy & Mathur, 1998; Raithby & Chui, 1990), debido a que se empleará el software Ansys Fluent 15.0, que habilita el empleo del método de ordenadas discretas para resolver la ecuación 2.130.

CAPÍTULO III

EXPERIMENTOS NUMÉRICOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

3.1 Introducción

En este capítulo se presenta la metodología con la cual se ejecutarán los experimentos numéricos con la ayuda del software ANSYS WORKBENCH 15.0. En primer lugar, se muestra el dominio experimental generado en el módulo DESIGN MODELER, el cual presenta algunas modificaciones respecto al de Reyna-Velarde et. al 2010. Luego, se modela conjuntamente la hidrodinámica y la transferencia de calor por radiación dentro del fotobioreactor de placa plana, mediante las ecuaciones expuestas en los capítulos anteriores y con el empleo del módulo FLUENT. Posterior a esto se analizan los resultados obtenidos y se presenta la validación del modelo.

3.2 Etapa de pre-procesamiento

3.2.1 Modelado de la geometría del fotobioreactor de placa plana en design modeler

Para iniciar los experimentos numéricos, es necesario previamente dibujar el dominio experimental en el cual se van a resolver todas las ecuaciones de conservación. Para este propósito se empleó el módulo DESIGN MODELER, una interface del tipo CAD que permite exportar rápidamente el diseño geométrico del dominio de fluido a otras etapas de simulación. La siguiente geometría fue concebida en el módulo anteriormente citado:

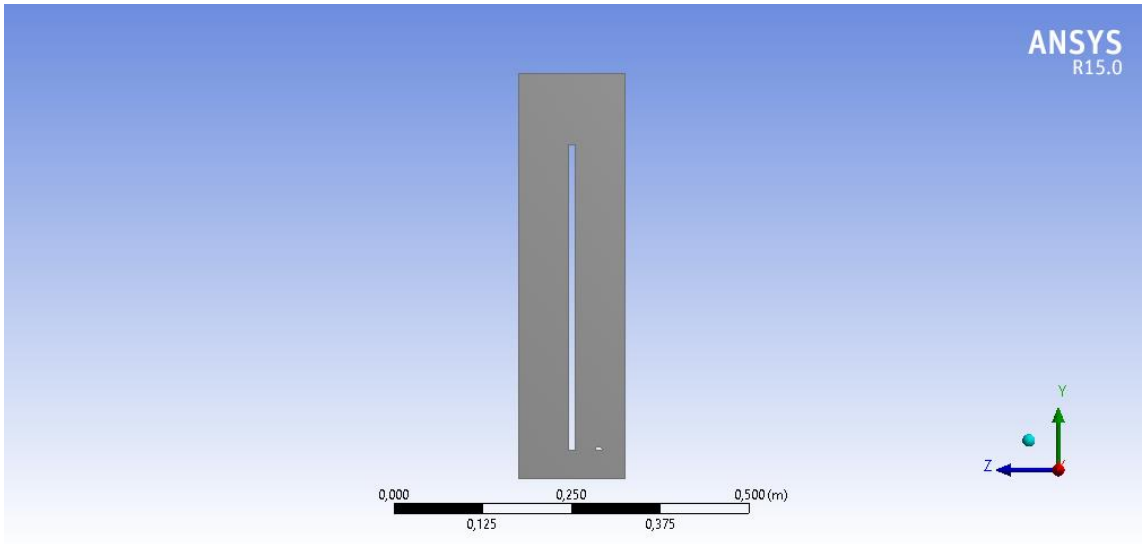


Figura 42 Geometría que representa el dominio experimental del fotobioreactor de placa plana. Fuente: El Autor.

Como se observa en la Figura 42, lo que está dibujado no corresponde a la geometría del fotobioreactor de placa plana, sino más bien a los que se encuentra en su interior, es decir, el dominio de fluido. Tal y como se describió en el capítulo 1, este fotobioreactor cuenta ya con unas dimensiones especificadas. Sin embargo, se han realizado algunas modificaciones que se detallan a continuación:

- Las dimensiones de la placa central no se describen en el trabajo de Reyna-Velarde et. al 2010, por lo cual se adoptó una dimensión de 10mm de espesor.
- Se realizaron investigaciones acerca de la configuración y las distancias desde la placa central hacia la parte superior e inferior del dominio experimental. Se concluyó que la placa central debe colocarse a una altura respecto de la base del equipo equivalente al 10% de la altura del fotobioreactor, y debe estar colocada respecto de la parte superior a una altura equivalente al 20% de la altura del fotobioreactor (Huang et al., 2015; Huang et al., 2014; Yu et al., 2009). Tomando en

cuenta que la altura del domino experimental es de 0.570m, se determinó que la placa central debe estar a 0.04m de la parte inferior y a 0.10m de la parte superior.

- Se diseñó un sparger (flauta) que atraviesa longitudinalmente al fotobioreactor de placa plana, en lugar del propuesto por Reyna-Velarde et. al 2010.
- El material del fotobioreactor fue modificado a vidrio semitransparente (Moghimi, Craig, & Meyer, 2015a, 2015b).

Con estas modificaciones, el esquema final con las dimensiones del dominio de fluido se presenta a continuación:

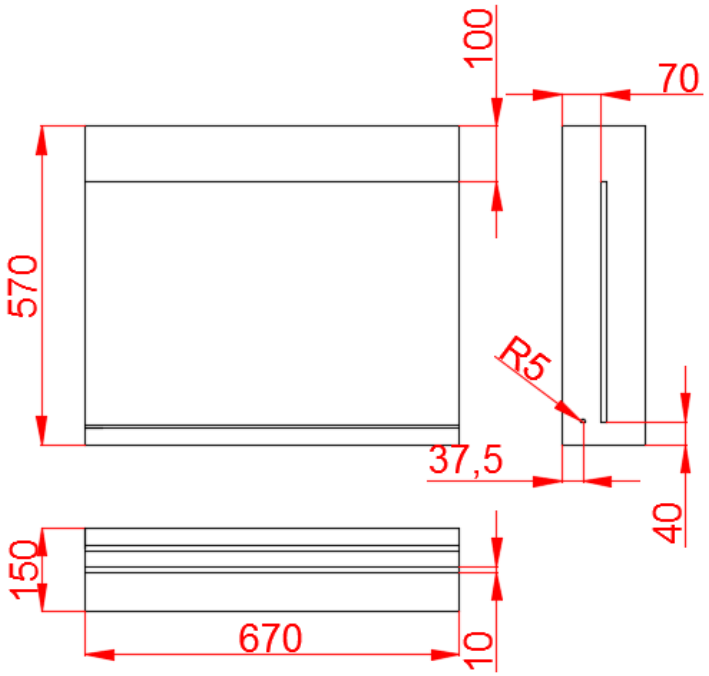


Figura 43 Esquema final con dimensiones del dominio de fluido. Fuente: El Autor.

Es importante analizar la orientación del dominio de fluido creado en DESIGN MODELER debido a que los siguientes pasos de la simulación se fundamentan en esta:

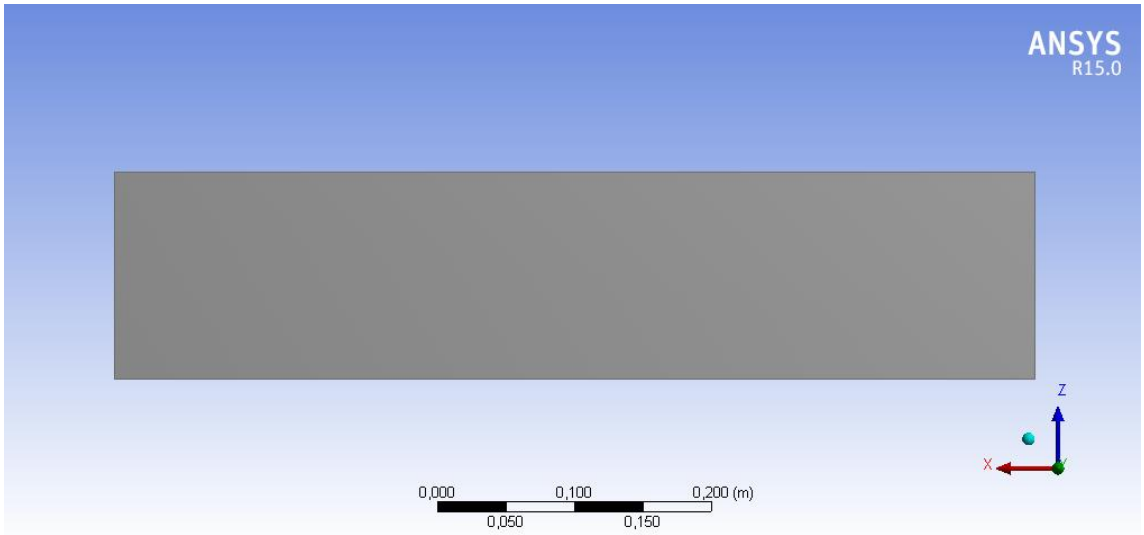


Figura 44 Vista superior del dominio de fluido. Fuente: El Autor.

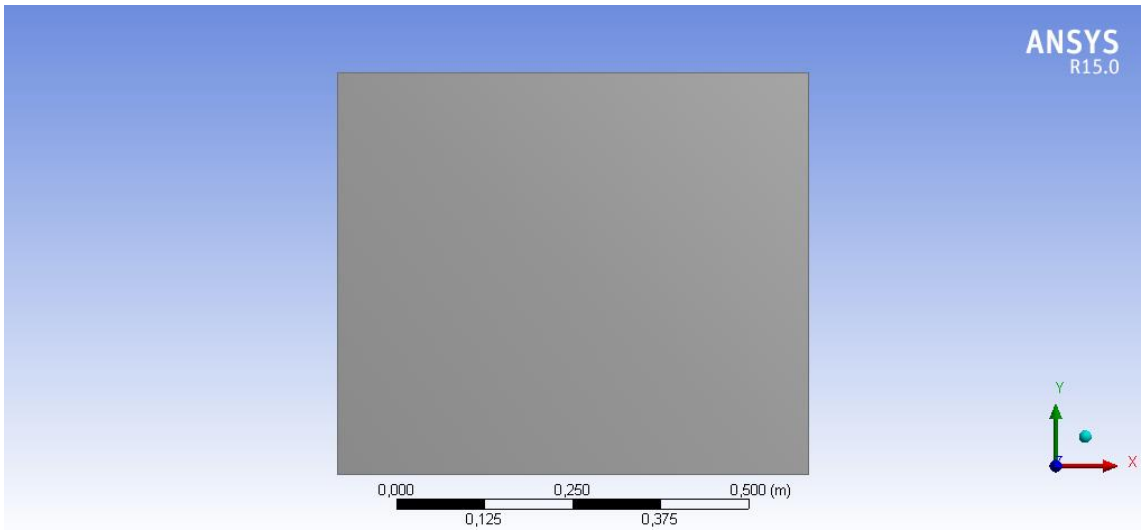


Figura 45 Vista lateral del dominio de fluido. Fuente: El Autor.

Como se observa en la Figura 44, la base del fotobioreactor de placa plana se encuentra en el plano XZ con la mayor de sus longitudes en dirección del eje x positivo, mientras que la parte lateral del mismo se encuentra en el plano XY, colocándose la altura del equipo en dirección del eje y positivo como se muestra en la Figura 45. Esto es importante, porque el vector de aceleración de la gravedad **g** deberá ubicarse en sentido contrario al eje y positivo,

adaptándose esto a cada una de las ecuaciones que tienen entre sus parámetros a **g**.

3.2.2 Mallado del dominio de fluido en meshing

Las ecuaciones de conservación efectivas y los modelos de turbulencia analizados se encuentran desarrollados en forma vectorial debido a que el dominio de fluido es de carácter tridimensional. En cada una de las modelaciones se asumió que el fluido que se encuentra dentro del fotobioreactor de placa plana es continuo con una fase dispersa en él.

Sin embargo, computacionalmente sería difícil poder considerar esta continuidad sin sacrificar tiempo computacional, por lo que se hace indispensable el empleo de métodos numéricos para la solución de las ecuaciones de conservación en el dominio de fluido en tiempos razonables de procesamiento. Esto es posible mediante la división del dominio de fluido en una serie de subdominios que no se sobreponen, llamados celdas o volúmenes de control. Entonces, la solución de las ecuaciones de conservación se define en los nodos (intersección de las aristas) de cada celda, siendo la exactitud de esta dependiente del número de celdas en los que se ha subdividido el dominio de fluido. Al conjunto de todas estas celdas se le conoce como malla, y en general, mientras más celdas contenga la malla mayor exactitud se obtendrá en la solución (Versteeg & Malalasekera, 2007).

Un compromiso tiene que establecerse en cuanto a la exactitud deseada de la solución, debido a que una malla más fina podría implicar mayor tiempo de procesamiento computacional. Las mallas óptimas no son uniformes debido a que pueden ser más finas en las áreas en donde se presentan más variaciones de los parámetros de operación, y más gruesas en regiones en donde ocurra pequeñas variaciones de los mismos (Versteeg & Malalasekera, 2007).

Sobre el 50% del tiempo empleado en la simulación de dominios de fluido en la industria están destinados al diseño y mallado del dominio de fluido (Versteeg & Malalasekera, 2007). Para optimizar los tiempos de pre-procesamiento, ANSYS WORKBENCH tiene incorporado un módulo denominado MESHING, que realiza el mallado de forma automática dependiendo del tipo de geometría. Sin embargo, de ser necesario se puede configurar el mallado de manera manual.

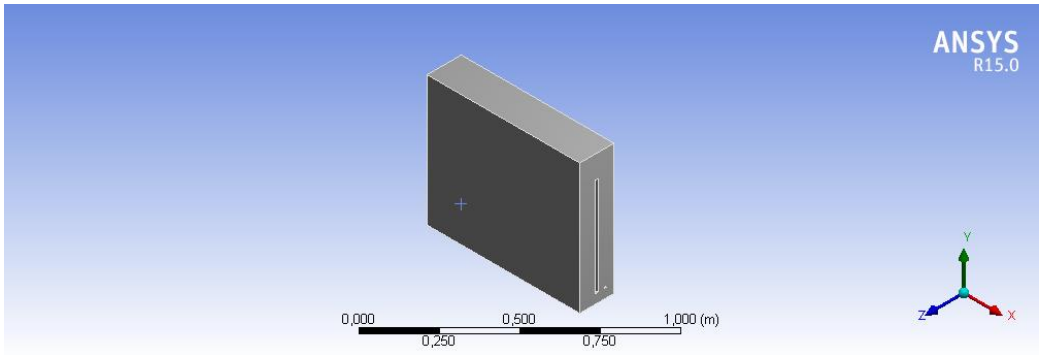


Figura 46 Dominio de fluido para el mallado. Fuente: El Autor.

En la Figura 46 se observa el dominio de fluido para el mallado. El software, automáticamente reconoce la geometría y realiza el mallado descrito por la Figura 47:

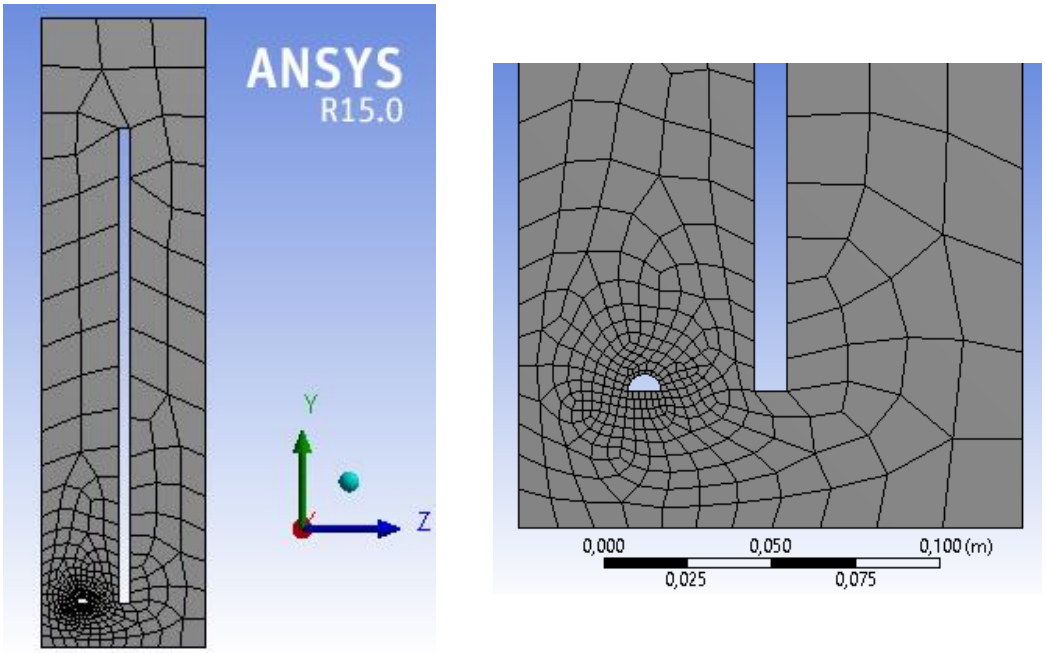


Figura 47 Mallado generado automáticamente por MESHING. A la izquierda se observa uno de las caras laterales del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. A la derecha se muestra el refinamiento de la malla alrededor del sparger. Fuente: El Autor.

Debe notarse que se ha realizado un refinamiento de la malla alrededor del Sparger. La malla está conformada por celdas hexaédricas, con cuadriláteros como caras, siendo altamente recomendada esta forma para el procesamiento numérico en el módulo FLUENT (Ansys, 2014).

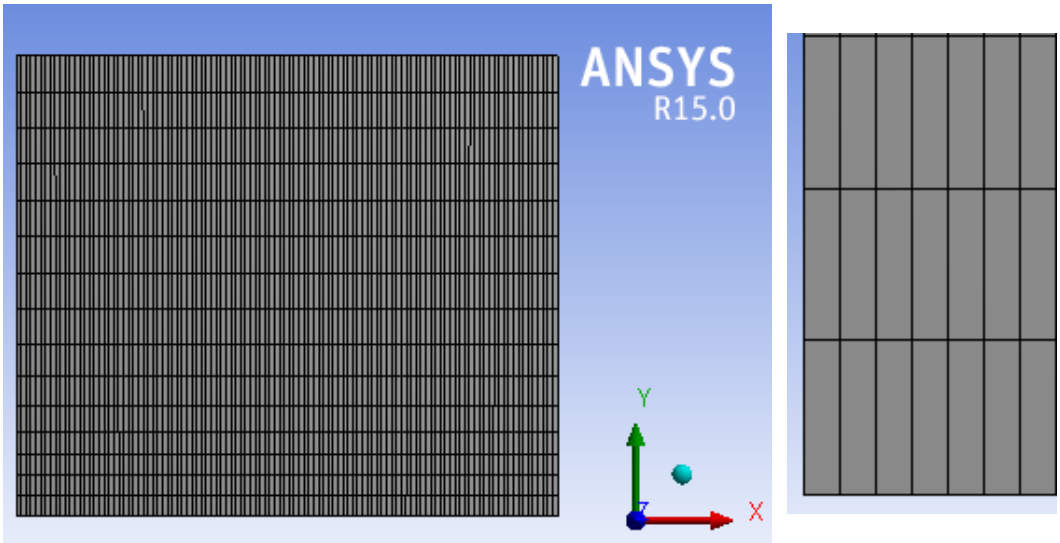


Figura 48 Mallado generado automáticamente por MESHING. A la izquierda se observa la cara frontal del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. A la derecha se muestra una ampliación de la malla generada. Fuente: El Autor.

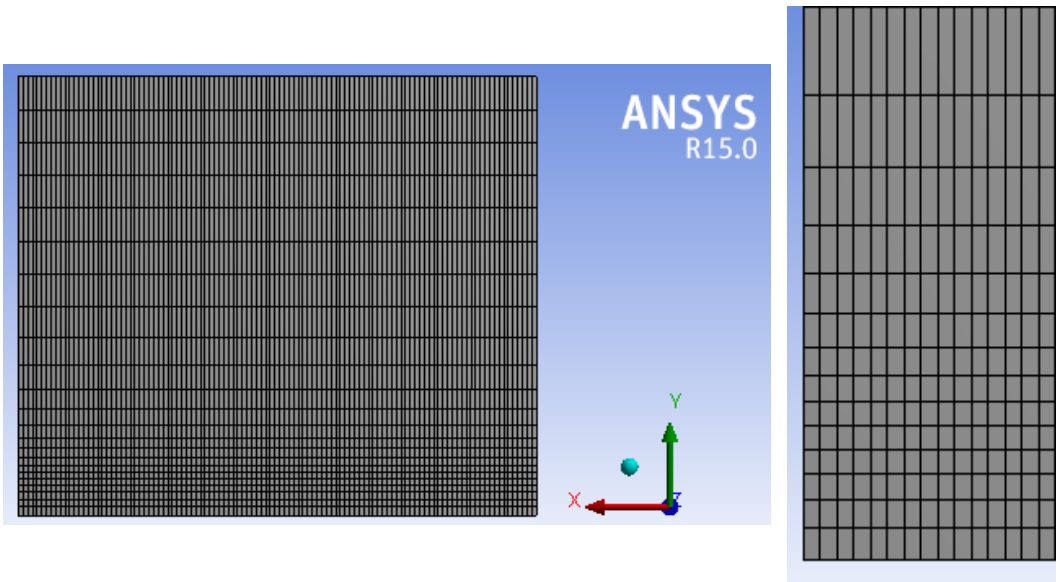


Figura 49 Mallado generado automáticamente por MESHING. A la izquierda se observa la cara frontal del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. A la derecha se muestra una ampliación de la malla generada. Fuente: El Autor.

En la Figura 48 se observa la uniformidad de la malla generada en la cara frontal del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. Nótese que el tamaño de las celdas es similar. Por el contrario, para la cara posterior se observa que el tamaño de las celdas no es el mismo, esto debido a que el sparger se encuentra próximo a este lado, siendo afectado por el refinamiento de la malla realizado para las caras laterales del dominio de fluido del fotobioreactor, como se muestra en la Figura 49.

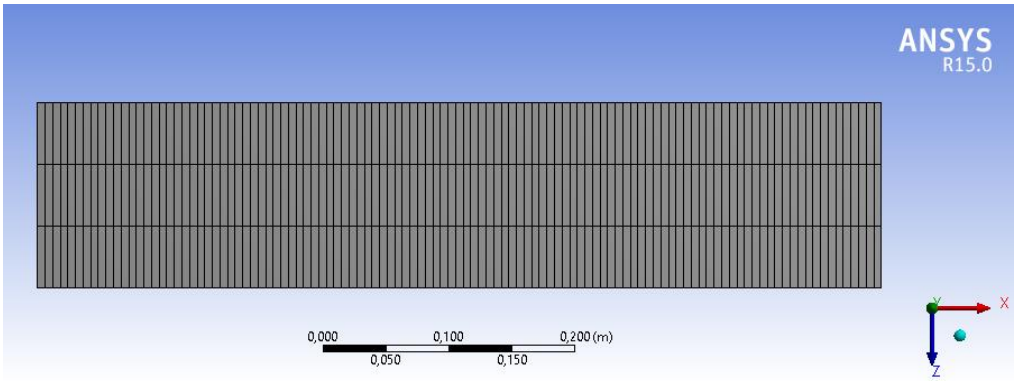


Figura 50 Mallado generado automáticamente por MESHING. Se observa la cara superior del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. Fuente: El Autor.

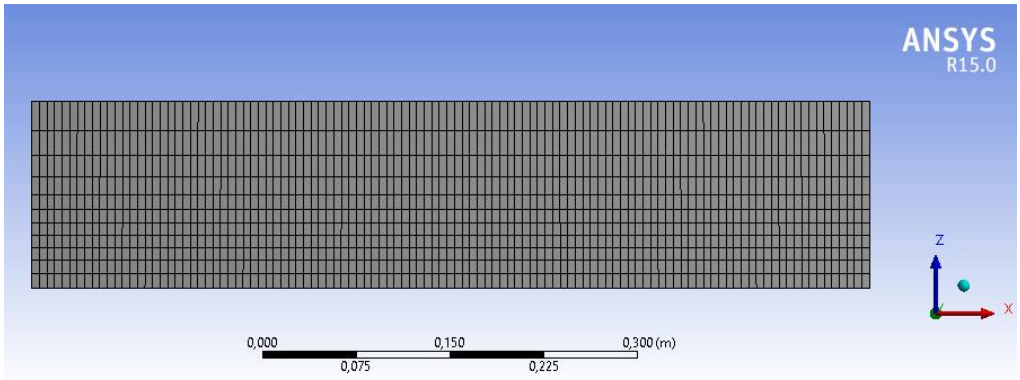


Figura 51 Mallado generado automáticamente por MESHING. Se observa la cara inferior del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. Fuente: El Autor.

En la Figura 50, se muestra el mallado generado para la parte superior del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. Nuevamente debe notarse la uniformidad de la malla generada. En la Figura 3.51 se observa el tamaño no uniforme de las celdas de la cara inferior del dominio de fluido, debido a la presencia del sparger. Las celdas son más grandes a medida que se alejan del sparger. La Figura 3.52 muestra el acoplamiento de las celdas entre caras del dominio experimental.

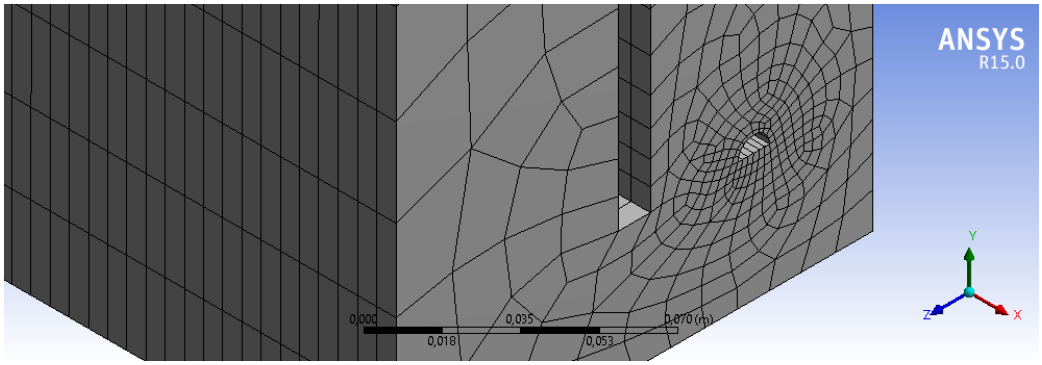


Figura 52 Acoplamiento de las celdas entre caras del dominio de fluido. Fuente: El Autor.

Las figuras anteriores han mostrado la malla que se generó automáticamente por MESHING. Ahora, es necesario analizar las dimensiones de las celdas y algunas estadísticas referentes a las mismas:

Tabla 12
Estadísticas generadas por MESHING respecto a las celdas del dominio del fluido

Tamaño mínimo de la celda	4.4478e-004m
Tamaño máximo de la celda	8.8957e-002m
Tamaño máximo de la cara	4.4478e-002m
Longitud mínima de la arista	1e-002m
Número de nodos	45696
Número de elementos	38849
Inclinación mínima	1,70300339587419E-02
Inclinación máxima	0,767987561638417
Inclinación promedio	0,255999615003582

La Tabla 12 muestra que el número de elementos o celdas es de 38849 y el número de nodos es de 45696. Aunque la simulación con este mallado no arrojó problema alguno, puede observarse que la distribución de elementos en las caras laterales no es uniforme del todo. Un parámetro que ayuda a establecer la calidad de las celdas generadas es su inclinación. Se recomienda que este parámetro sea menor a 0.95 (Ansys, 2014). Aunque esta malla cumple con esta condición según la Tabla 12, se puede lograr valores aún más bajos con un proceso de refinamiento de malla.

A. REFINAMIENTO DE LA MALLA

El módulo MESHING permite que el usuario refine la malla mediante la opción *relevance center*, la cual presenta tres opciones: *coarse, medium* o *fine*. Por defecto el mallado se realiza en el modo *coarse*. Por tanto, para refinar la malla se escoge la opción *fine*, obteniéndose los siguientes resultados:

Tabla 13
Estadísticas generadas por MESHING respecto a las celdas del dominio del fluido refinado

Tamaño mínimo de la celda	1.3027e-004m
Tamaño máximo de la celda	1.3027e-002m
Tamaño máximo de la cara	2.6054e-002m
Longitud mínima de la arista	1e-002m
Número de nodos	108876
Número de elementos	95360
Inclinación mínima	1,3057463323374E-10
Inclinación máxima	0,590940884152446
Inclinación promedio	0,112833306040029

Comparando los resultados de la Tabla 13 con la Tabla 12, podemos ver que el número de elementos se incrementó en un 59.26%, el número de nodos aumentó en un 58.02% y la inclinación promedio disminuyó en un 55.92%, resultando en una malla de mejor calidad. A continuación, se muestra la malla refinada:

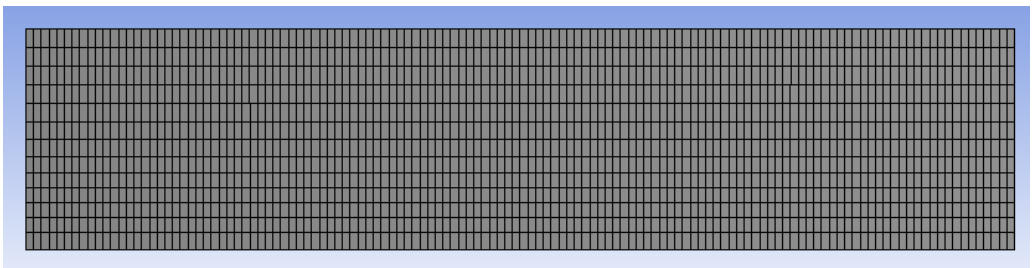


Figura 53 Vista inferior del dominio de fluido refinado. Fuente: El Autor.

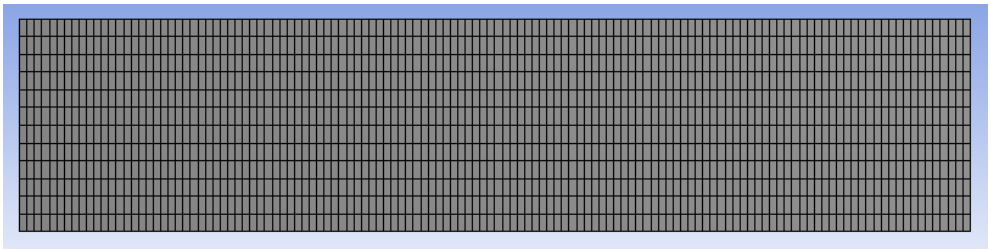


Figura 54 Vista superior del dominio de fluido refinado. Fuente: El Autor.

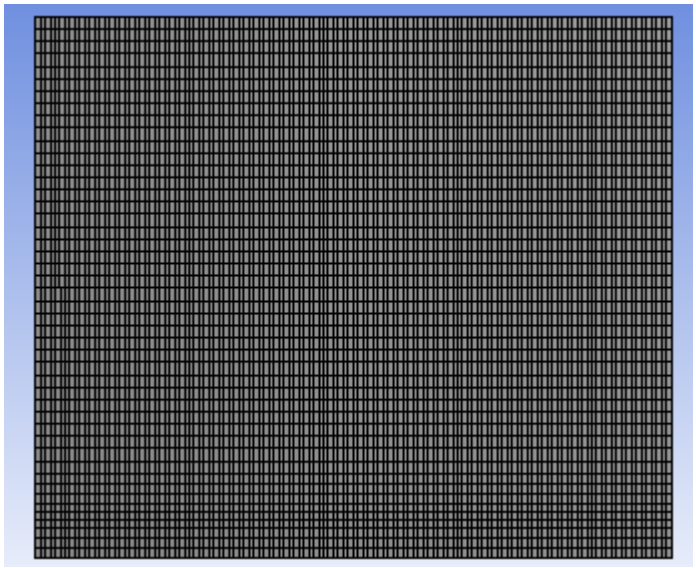


Figura 55 Vista frontal del dominio de fluido refinado. Fuente: El Autor.

Figura 56 Vista posterior del dominio de fluido refinado. Fuente: El Autor.

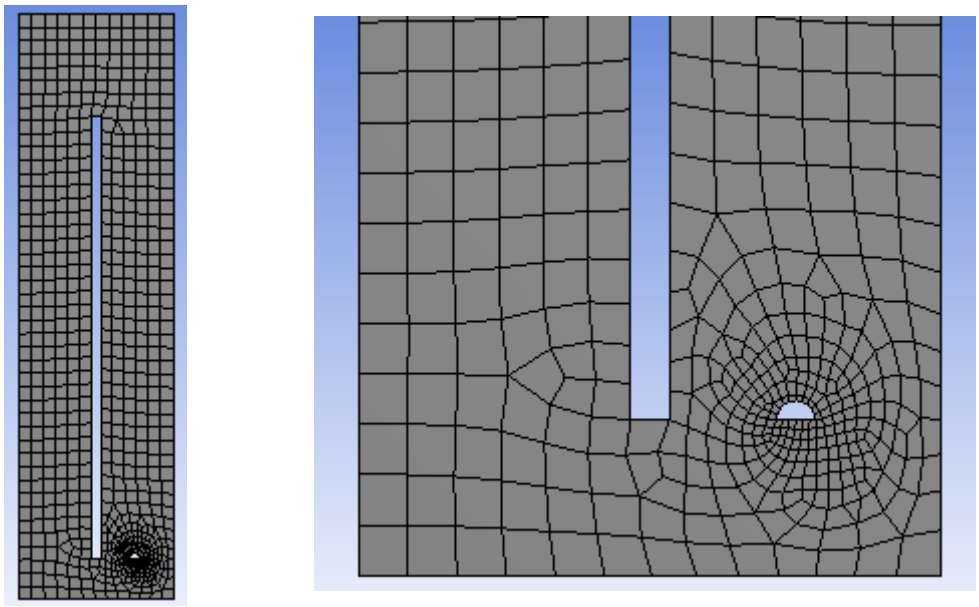


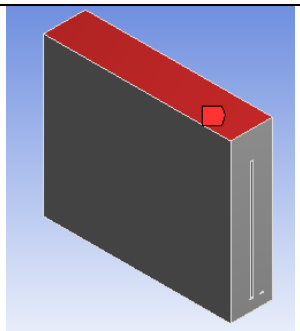
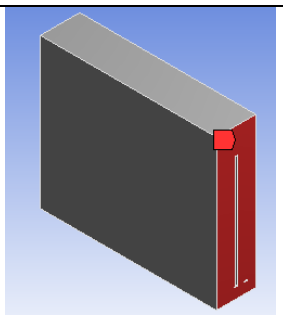
Figura 57 A la izquierda vista lateral del dominio de fluido refinado. A la derecha detalle de un nuevo refinamiento cerca del sparger. Fuente: El Autor.

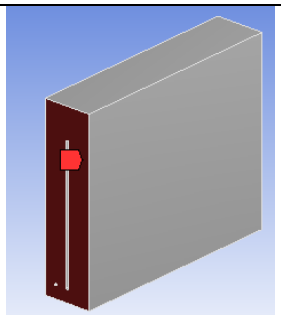
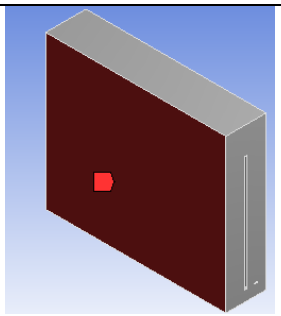
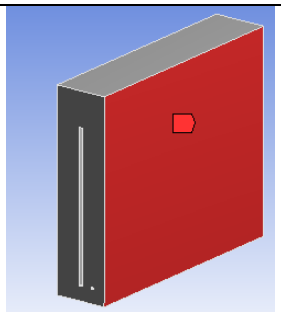
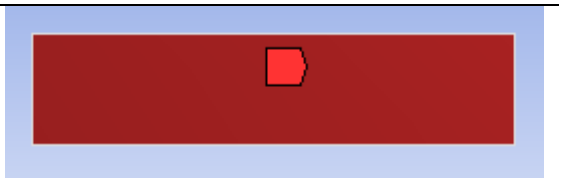
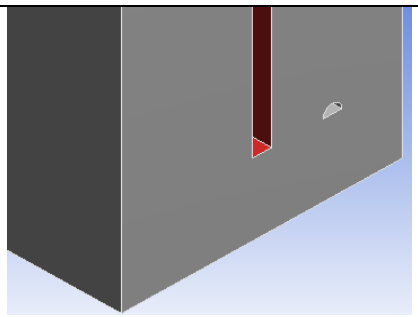
Como se presenta en las Figuras 3.53-3.57, la malla es más uniforme en las caras laterales. Esta malla se escogerá para realizar las simulaciones.

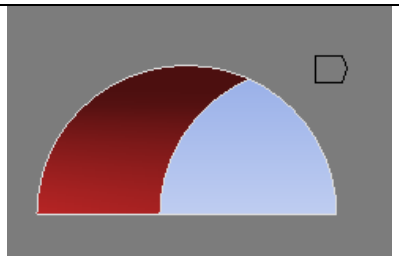
3.2.3 Superficies en donde se definirán las condiciones de frontera

El módulo FLUENT necesita que se definan las superficies en donde se especificarán las distintas condiciones de frontera del dominio de fluido del fotobioreactor de placa plana. A continuación, se presenta estas superficies:

Tabla 14
Superficies en donde se definirán las condiciones de frontera

Nombre de la Superficie	Esquema
OUTLET	
WALL1	

WALL3	
WALL2	
WALL4	
BASE	
INTERIOR WALL	

SPARGER WALL	
INLET	

3.3 Etapa de procesamiento

3.3.1 Metodología de experimentación numérica

La simulación se desarrollará en la malla presentada en la sección anterior. Se presenta a continuación la matriz con los códigos de los experimentos numéricos a realizarse:

Tabla 15
Matriz con los códigos de los experimentos numéricos a realizarse

HORA	Modo Estacionario	Modo Transitorio (5 min)
08:00	08E	
10:00	10E	
11:00	11E	
12:00	12E	12T
13:00	13E	
14:00	14E	
16:00	16E	

Se ha elegido al 20 de marzo de 2016 como el día de simulación, por coincidir con el equinoccio de marzo, mes que presenta uno de los mayores valores de irradiación global. No se analizará el día completo sino las horas listadas en la Tabla 15. Las ecuaciones de conservación efectivas y el modelo de turbulencia se resolverán en estado estacionario, y para validar los resultados obtenidos se realizará una simulación en estado transitorio a las 12:00 escogida de manera aleatoria. Debido a la gran demanda de tiempo computacional para la solución de este último, solamente se analizará 5min a partir de la hora indicada. La ubicación del fotobioreactor de placa plana con respecto al Sol se indica en la Figura 58:

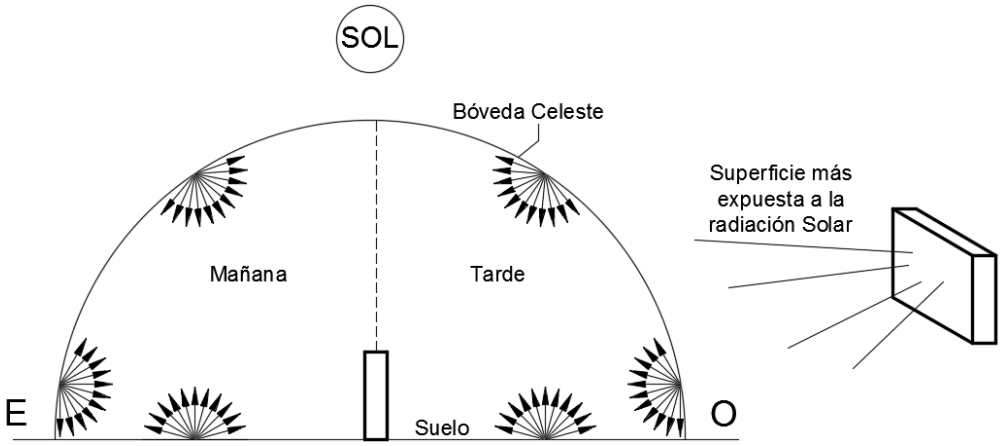


Figura 58 Posición del fotobioreactor de placa plana respecto al Sol. Fuente: El Autor.

Se ha procurado que las superficies más grandes del equipo queden expuestas a la irradiación solar normal directa (la una en horas de la mañana y la otra en la tarde), orientándolas al Este y al Oeste respectivamente. Las superficies laterales se supondrán solamente expuestas a la irradiación difusa, en conjunto con una de las superficies grandes sobre la cual no incida la irradiación normal directa en función de la hora del día. Todas las superficies de vidrio se supondrán semitransparentes, excepto la base que al estar en

contacto con el suelo no recibirá radiación solar de manera directa, pudiendo considerarla como opaca.

Tabla 16
Irradiancia normal directa y difusa, determinadas con la calculadora solar de FLUENT, para Pedernales Latitud 0.0701° Longitud -80.0536°

HORA	Irradiancia Normal Directa Wm^{-2}	Irradiancia Difusa Wm^{-2}	Irradiancia Total Wm^{-2}	Fracción Difusa
08:00	798.775	162.025	960.800	0.1686
10:00	977.192	217.879	1195.071	0.1823
11:00	1003.800	244.718	1248.518	0.1960
12:00	1014.86	223.070	1237.930	0.1802
13:00	1014.42	223.466	1237.886	0.1805
14:00	1002.33	224.513	1226.843	0.1830
16:00	916.155	197.303	1113.458	0.1772
PROMEDIO	923.981	213.282	1171.501	0.1821

En la Tabla 16 se detallan los valores de irradiancia directa y difusa para la localidad de Pedernales. Estos datos fueron obtenidos con la calculadora soler de FLUENT. A su vez, esta calculadora también permite determinar las componentes de la radiación difusa, tal y como se observa en la Tabla 17. Estos valores (ver tablas 16 y 17) serán introducidos en la ecuación de transporte radiativo para resolver el modelo de radiación solar por el método de las ordenadas discretas.

Tabla 17
Componentes de la irradiancia difusa para Pedernales, determinadas con la calculadora solar de FLUENT, para Pedernales Latitud 0.0701° Longitud -80.0536°

HORA	Difusa sobre Superficie Vertical Wm^{-2}	Difusa sobre Superficie Horizontal Wm^{-2}	Difusa reflejada desde el Suelo Wm^{-2}	Difusa Total Wm^{-2}
08:00	68.616	56.399	37.010	162.025
10:00	63.834	68.997	85.048	217.879
11:00	53.619	70.875	100.224	244.718
12:00	43.497	71.656	107.917	223.070
13:00	44.248	71.625	107.593	223.466
14:00	54.465	70.772	99.276	224.513
16:00	71.123	64.687	61.493	197.303
PROMEDIO	57.057	67.859	85.509	213.282

3.3.2 Procedimiento de solución

Todas las ecuaciones analizadas en los capítulos anteriores explicaron los fenómenos que están involucrados en la dinámica del fotobioreactor de placa plana. Estas ecuaciones son resueltas en cada uno de los nodos de la malla generada con lo cual, al resolverse todos los nodos, se obtendrá la solución general del modelo matemático. FLUENT resuelve en primer lugar las ecuaciones efectivas de conservación de la masa, cantidad de movimiento lineal y la SST k-ω con lo cual se obtienen la fracción volumétrica del gas, las componentes de la velocidad del líquido y gas y el valor de la energía cinética turbulenta k y su tasa de disipación ϵ. Debe destacarse que las fases continua y dispersa están acopladas mediante la fuerza de arrastre y la disipación turbulenta, elementos de la ecuación de conservación efectiva de la cantidad

de movimiento lineal. Luego, se incorpora estos resultados a la ecuación efectiva de conservación de la energía la cual añade independientemente el valor del campo de irradiancia determinado a través de la ecuación de transporte radiativo que considera las componentes directa y difusa de la radiación solar.

La determinación del recurso solar disponible lo realiza la calculadora solar de FLUENT, como se mostró en las Tablas 3.5 y 3.6, cuyos datos de entrada son la latitud, longitud, día y hora del día para estimar la irradiancia directa y difusa en el emplazamiento seleccionado. Los resultados se cargarán a la ecuación de transporte radiativo. Este procedimiento se realiza hasta que se presenta la convergencia de todas las ecuaciones involucradas, en estado estacionario, o hasta completar el número de pasos de tiempo establecidos en el caso de estado transitorio.

3.3.3 Materiales

Los materiales que intervendrán en la simulación son los siguientes:

Tabla 18
Materiales a emplearse durante la simulación en FLUENT

Material	Tipo	Representa	Observaciones
Agua	Líquido	Contenido dentro del fotobioreactor	Las propiedades físicas son establecidas por FLUENT.
Aire	Gas	Fase dispersa que entrará desde el sparger	Las propiedades físicas son establecidas por FLUENT.
Acero inoxidable	Sólido	Pared del sparger	Las propiedades físicas son establecidas por FLUENT, salvo la emisividad cuyo valor es de 0.30[1].
Vidrio semitransparente	Sólido	Paredes que recubren el dominio del fluido	Conductividad térmica[2]: 1.5 $Wm^{-1}K^{-1}$ Calor específico: 786 J $kg^{-1}K^{-1}$ Densidad: 650 Kg m^{-3} Coeficiente de absorción: 106m^{-1} Emisividad 0.9[2]

[1]Fuente: (Bergman, Incropera, DeWitt, & Lavine, 2011)

[2]Fuente: (Moghimi et al., 2015a, 2015b)

3.3.4 Condiciones de frontera

A continuación se presenta un esquema genérico (ver tabla 19) de las condiciones de frontera empleadas para la solución de las ecuaciones de conservación, el modelo de turbulencia y la ecuación de transporte radiativo, requeridas por FLUENT.

Tabla 19
Condiciones de frontera requeridas por FLUENT

Modelo	Condición en FLUENT	Fases/ Zona	Especificaciones	Valor
Conservación de la masa, cantidad de movimiento lineal y energía	Inlet	Mixture	Intensidad de turbulencia	
			Diámetro hidráulico	
			Presión manométrica	
			Emisividad	
		Liquid	Velocidad del líquido	
			Temperatura del líquido	
		Gas	Velocidad del gas	
			Temperatura del gas	
			Fracción volumétrica de gas	
	Outlet	Mixture líquid, gas	Tipo	Degassing
Conservación de la energía y ecuación de transporte radiativo.	Wall	Wall1	Flujo de calor	0
			Superficie	Semitransp.
		Wall2	Flujo de calor	0
			Superficie	Semitransp.
		Wall3	Flujo de calor	0
			Radiación	Semitransp.
		Wall4	Flujo de calor	0
			Superficie	Semitransp.
		Interior wall	Flujo de calor	0
			Superficie	Semitransp.
		Sparger wall	Flujo de calor	0
			Superficie	Opaca
			Emisividad	
		Base	Flujo de calor	0
			Superficie Emisividad	Opaca

Es importante definir a la intensidad de turbulencia como una medida de la presencia de torbellinos turbulentos en el fluido. Luego, conviene distinguir que para un medio opaco la emisividad y absortividad no dependen de la

longitud de onda de la radiación, mientras que para un medio semitransparente tal dependencia existe.

Debe destacarse la condición de frontera denominada degassing. Esta condición previene que el líquido abandone el dominio experimental. El gas es removido del dominio experimental mediante un sumidero de masa que es calculado usando el flujo de masa normal a la frontera de las celdas que se encuentran próximas a la superficie definida como outlet (Ansys, 2014).

También es menester definir al diámetro hidráulico, un equivalente del diámetro de tuberías circulares pero aplicado a geometrías que distan de ser una circunferencia. Este viene determinado para un ducto rectangular mediante:

$$D_h = \frac{2ab}{a+b} \tag{3.1}$$

En donde a y b representan respectivamente el ancho y el largo del rectángulo. En la Figura 3.2 se puede observar que a=0.07m y b=0.670m, por lo cual el diámetro hidráulico del ducto es de 0.1267m.

3.3.5 Condiciones iniciales

Para la solución de los distintos modelos matemáticos que intervienen en la simulación, FLUENT necesita un valor inicial que pueda habilitar los algoritmos internos del módulo. Para ello, se debe especificar los siguientes parámetros:

Tabla 20
Condiciones iniciales para la simulación

Modelo	Parámetro
Conservación de masa, cantidad de movimiento lineal	Velocidad del líquido en x
	Velocidad del líquido en y
	Velocidad del líquido en z
	Velocidad del gas en x
	Velocidad del gas en y
	Velocidad del gas en z
	Fracción inicial de gas
	Energía cinética turbulenta
	Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta
	Presión manométrica
Conservación de la energía	Temperatura del líquido
	Temperatura del gas

3.3.6 Ejecución de experimentos numéricos

Los experimentos numéricos se realizaron en las horas listadas en la Tabla 15. Las condiciones de frontera aplicadas se muestran en las Tablas 21 y 22. Obsérvese que la única diferencia está en la temperatura del líquido.

A. Condiciones de frontera para los experimentos

Tabla 21
Condiciones de frontera para los experimentos 08E, 10E, 14E y 16E

Modelo	Condición en FLUENT	Fases/ Zona	Especificaciones	Valor
Conservación de la masa, cantidad de movimiento lineal y energía	Inlet	Mixture	Intensidad de turbulencia	5%
			Diámetro hidráulico	0.1267m
			Presión manométrica	0Pa
			Emisividad	0.95
		Liquid	Velocidad del líquido	0 ms^{-1}
			Temperatura del líquido	24°C
		Gas	Velocidad del gas	24 ms^{-1}
			Temperatura del gas	24°C
			Fracción volumétrica de gas	0.3
	Outlet	Mixture líquid, gas	Tipo	Degassing
Conservación de la energía y ecuación de transporte radiativo.	Wall	Wall1	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Semitransp.
		Wall2	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Semitransp.
		Wall3	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Radiación	Semitransp.
		Wall4	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Semitransp.
		Interior wall	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Semitransp.
		Sparger wall	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Opaca
			Emisividad	0.3
		Base	Flujo de calor	0
			Superficie	Opaca
			Emisividad	0.9

Tabla 22
Condiciones de frontera para los experimentos 11E, 12E y 13E

Modelo	Condición en FLUENT	Fases/ Zona	Especificaciones	Valor
Conservación de la masa, cantidad de movimiento lineal y energía	Inlet	Mixture	Intensidad de turbulencia	5%
			Diámetro hidráulico	0.1267m
			Presión manométrica	0Pa
			Emisividad	0.95
		Liquid	Velocidad del líquido	0 ms^{-1}
			Temperatura del líquido	27°C
		Gas	Velocidad del gas	24 ms^{-1}
			Temperatura del gas	24°C
			Fracción volumétrica de gas	0.3
	Outlet	Mixture líquid, gas	Tipo	Degassing
Conservación de la energía y ecuación de transporte radiativo.	Wall	Wall1	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Semitransp.
		Wall2	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Semitransp.
		Wall3	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Radiación	Semitransp.
		Wall4	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Semitransp.
		Interior wall	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Semitransp.
		Sparger wall	Flujo de calor	0 Wm^{-2}
			Superficie	Opaca
			Emisividad	0.3
		Base	Flujo de calor	0
			Superficie	Opaca
			Emisividad	0.9

El tamaño de burbuja escogido para el aire es de 0.001m, basado en literatura que ubica a este valor como efectivo para los propósitos de mezclado (Krishnamoorthy, Klosterman, & Shallbetter, 2014). En las Tablas 21 y 22 no debe confundirse el flujo de calor con la irradiancia incidente, debido a que el primero hace referencia a una fuente de calor adicional al Sol que proporcione energía calórica en la superficie del fotobioreactor analizada en cuestión, y la segunda hace referencia a lo que la calculadora solar determina, y que posteriormente ingresa a la ecuación de transporte radiativo.

Para establecer la temperatura del líquido, se supuso que este está en equilibrio con el ambiente, cuya temperatura para el día y hora especificados es de 24°C (o 27°C) (https://eosweb.larc.nasa.gov). Para el caso del gas, se asume que al salir del cilindro se expande, con lo cual decrece la temperatura de sus alrededores momentáneamente. Luego, se equilibra con la temperatura del medio ambiente que puede suponerse como una fuente o sumidero de temperatura. Por tanto, alcanza la temperatura de 24°C (o 27°C).

B. Condiciones iniciales de los experimentos

Los experimentos se inicializaron con los siguientes valores de los parámetros listados en las Tablas 23 y 24:

Tabla 23
Condiciones iniciales para los experimentos 08E, 10E, 14E y 16E

Modelo	Parámetro	Valor
Conservación de masa, cantidad de movimiento lineal	Velocidad del líquido en x	$0ms^{-1}$
	Velocidad del líquido en y	$0ms^{-1}$
	Velocidad del líquido en z	$0ms^{-1}$
	Velocidad del gas en x	$0ms^{-1}$
	Velocidad del gas en y	$0.2ms^{-1}$
	Velocidad del gas en z	$0ms^{-1}$
	Fracción inicial de gas	0
	Energía cinética turbulenta	1
	Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta	1
	Presión manométrica	0Pa
Conservación de la energía	Temperatura del líquido	24°C
	Temperatura del gas	24°C

Tabla 24
Condiciones iniciales para los experimentos 11E, 12E y 13E

Modelo	Parámetro	Valor
Conservación de masa, cantidad de movimiento lineal	Velocidad del líquido en x	$0ms^{-1}$
	Velocidad del líquido en y	$0ms^{-1}$
	Velocidad del líquido en z	$0ms^{-1}$
	Velocidad del gas en x	$0ms^{-1}$
	Velocidad del gas en y	$0.2ms^{-1}$
	Velocidad del gas en z	$0ms^{-1}$
	Fracción inicial de gas	0
	Energía cinética turbulenta	1
	Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta	1
	Presión manométrica	0Pa
Conservación de la energía	Temperatura del líquido	27°C
	Temperatura del gas	24°C

3.4 Etapa de post-procesamiento. Análisis de resultados

3.4.1 Contornos de fracciones volumétricas de líquido

En las Figuras 59-65 se muestran los contornos de las fracciones volumétricas del líquido en el fotobioreactor de placa plana, obtenidos al final de 2250 iteraciones tras lo cual las simulaciones llegaron a converger, en una sección transversal ubicada en la mitad del equipo.

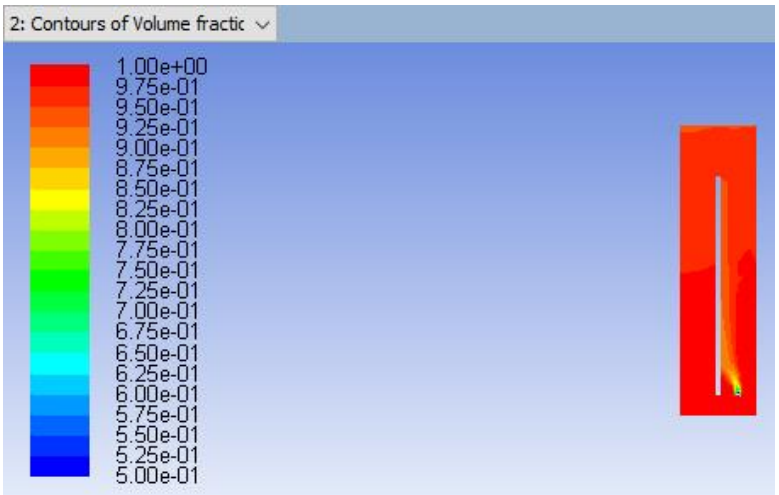


Figura 59 Contornos de fracción volumétrica de líquido (08E). Fuente: El Autor.

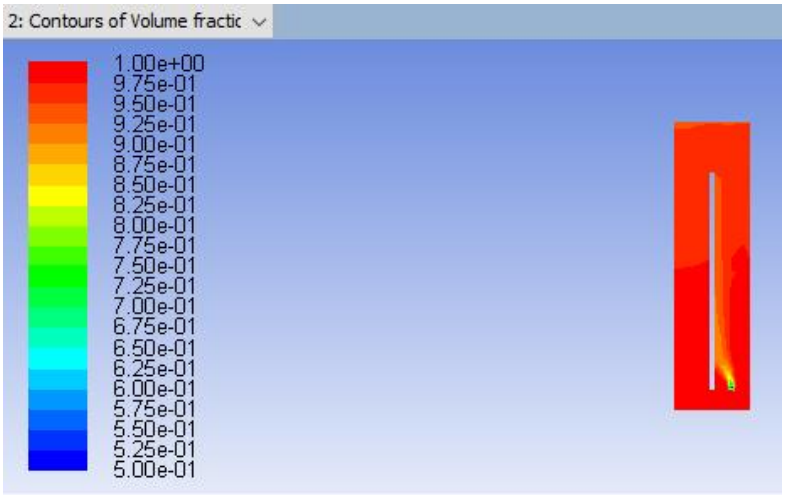


Figura 60 Contornos de fracción volumétrica de líquido (10E). Fuente: El Autor.

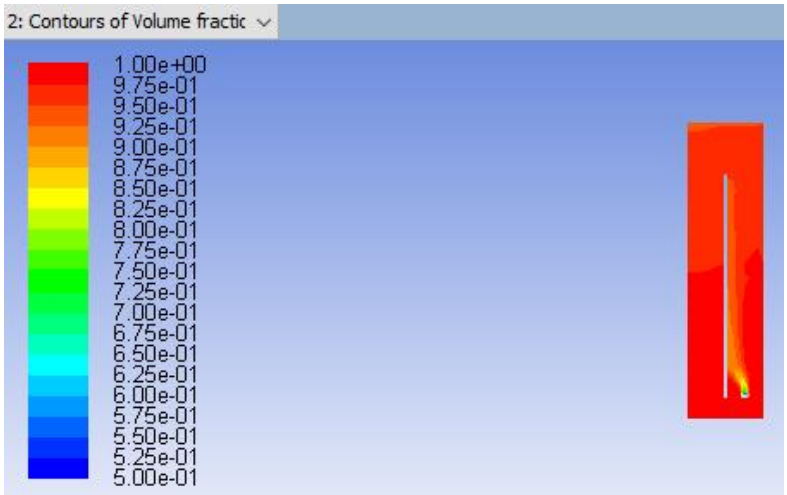


Figura 61 Contornos de fracción volumétrica de líquido (11E). Fuente: El Autor.

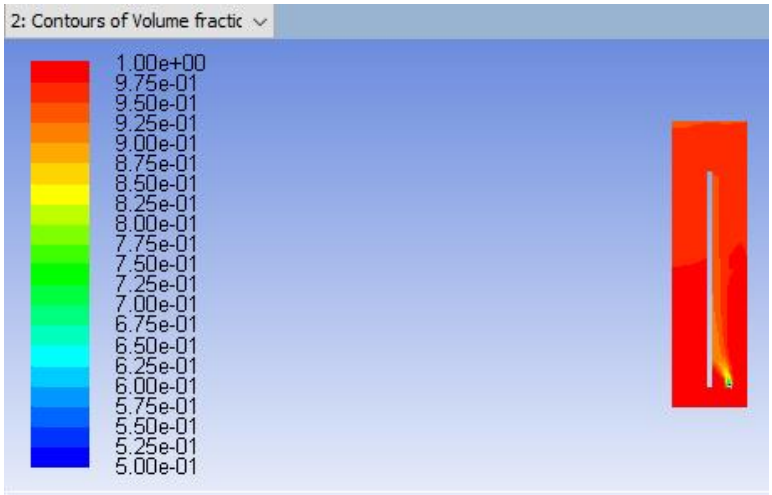


Figura 62 Contornos de fracción volumétrica de líquido (12E). Fuente: El Autor.

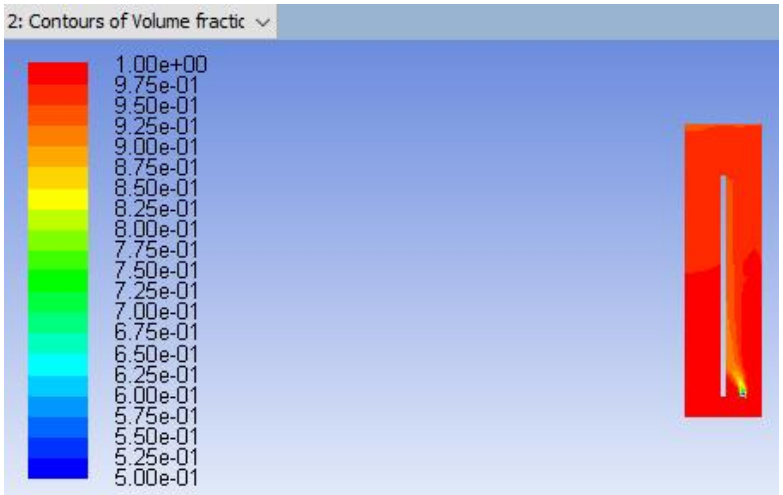


Figura 63 Contornos de fracción volumétrica de líquido (13E). Fuente: El Autor.

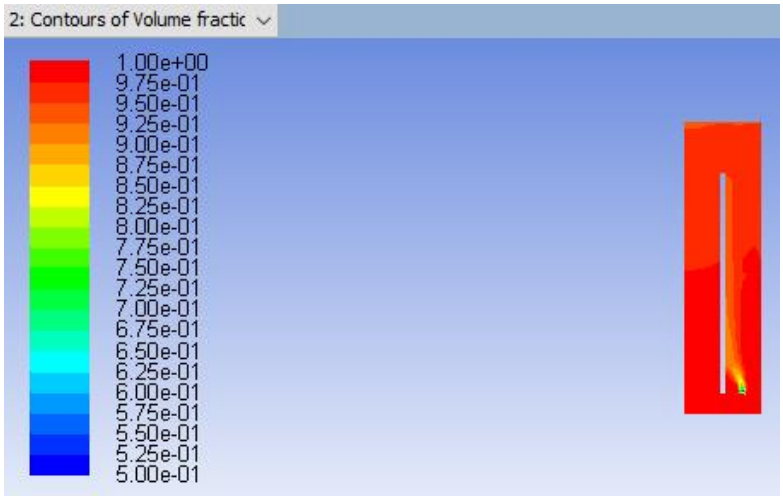


Figura 64 Contornos de fracción volumétrica de líquido (14E). Fuente: El Autor.

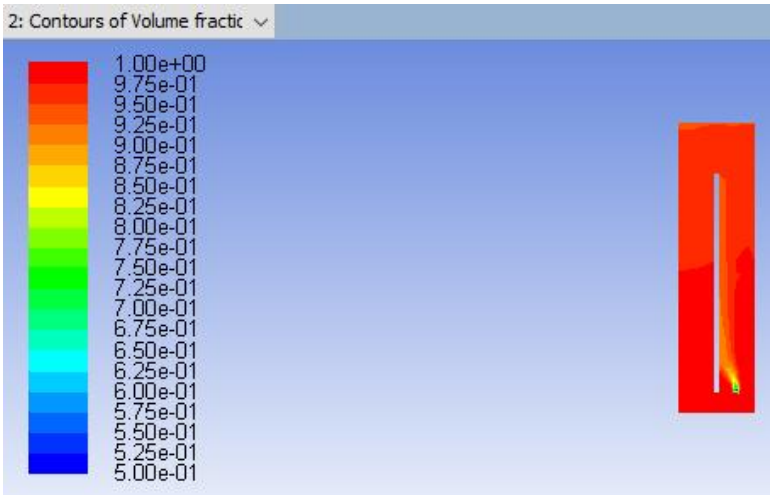


Figura 65 Contornos de fracción volumétrica de líquido (16E). Fuente: El Autor.

Se puede observar que no existe mayor diferencia entre las Figuras 59-65, lo que quiere decir que la irradiancia solar y la temperatura no afectan en mayoritariamente a los fluidos. Esto puede deberse a que la viscosidad del líquido no varía significativamente con la temperatura, pasando de 1.009×10^{-3} a 20°C a 0.654×10^{-3} a 40°C, es decir una variación del 35.18%, que no facilita ni dificulta el arrastre del gas en el líquido. En el sparger se encuentra

la menor fracción volumétrica de líquido (cercana a cero), que corresponde a la mayor fracción volumétrica de gas (30%). Por la formación de un camino de burbujas continuo, estas tienden a pegarse en la placa central del fotobioreactor. La aplicación de la condición de frontera degassing provoca que parte de las burbujas abandonan el dominio de fluido, con lo cual estas no logran alcanzar la parte inferior izquierda del fotobioreactor de placa plana, acumulándose únicamente desde aproximadamente la mitad del dominio de fluido hacia arriba por lo cual la fracción volumétrica de líquido en esta zona alcanza valores entre 92.5% y 95%. Debe notarse que al disminuir la altura de la placa central con respecto al límite líquido, se facilita que parte de las burbujas alcancen la mitad de la zona del fotobioreactor en la cual no se produce el burbujeo.

3.4.2 Contornos de velocidad del líquido

Las Figuras 66-72 presentan los contornos de velocidad de la fase líquida:

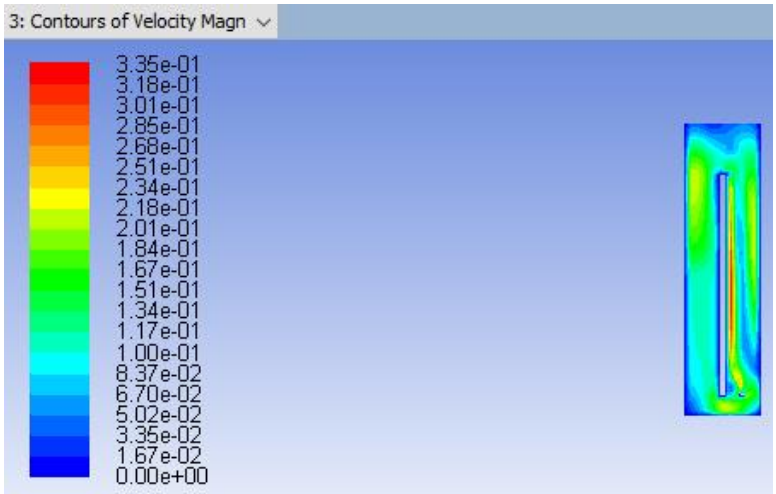


Figura 66 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (08E). Fuente: El Autor.

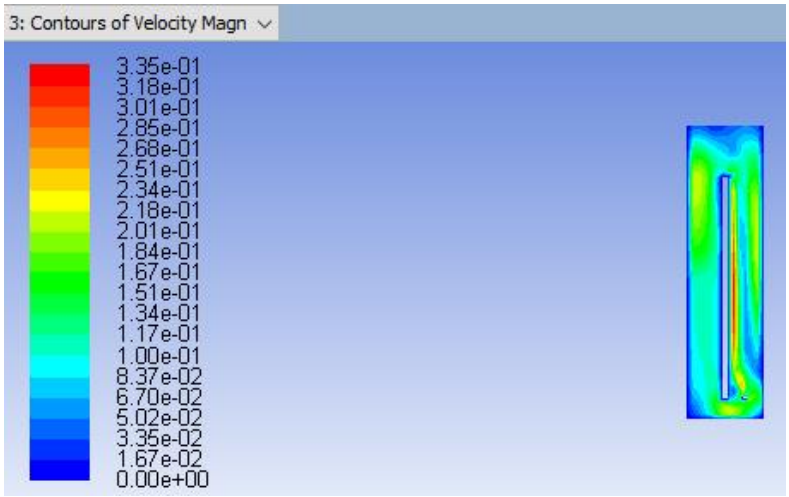


Figura 67 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (10E). Fuente: El Autor.

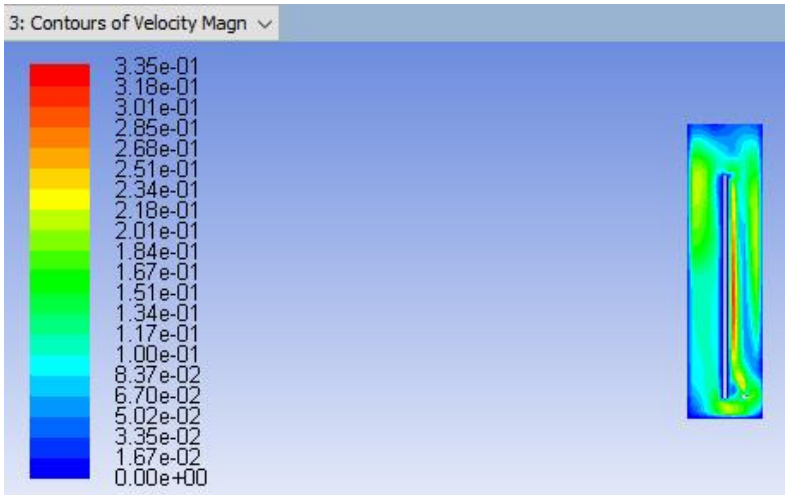


Figura 68 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (11E). Fuente: El Autor.

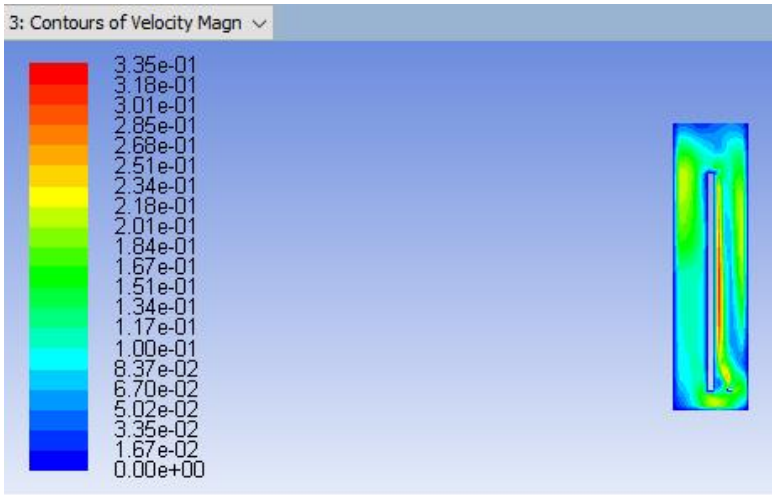


Figura 69 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (12E). Fuente: El Autor.

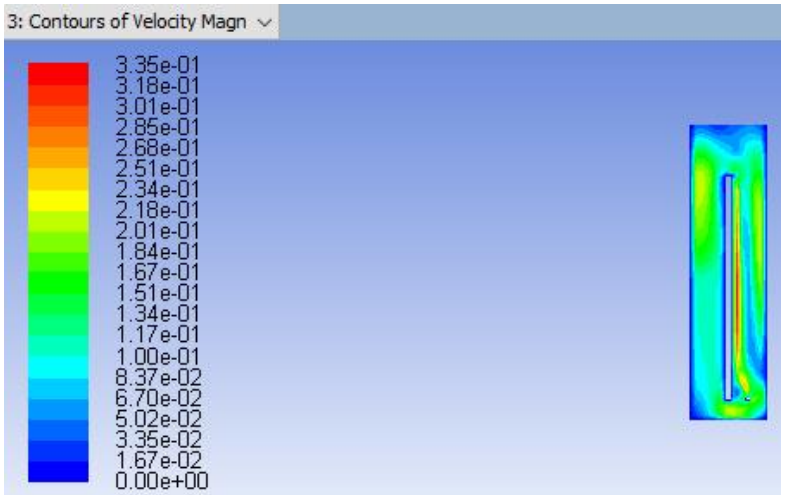


Figura 70 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (13E). Fuente: El Autor.

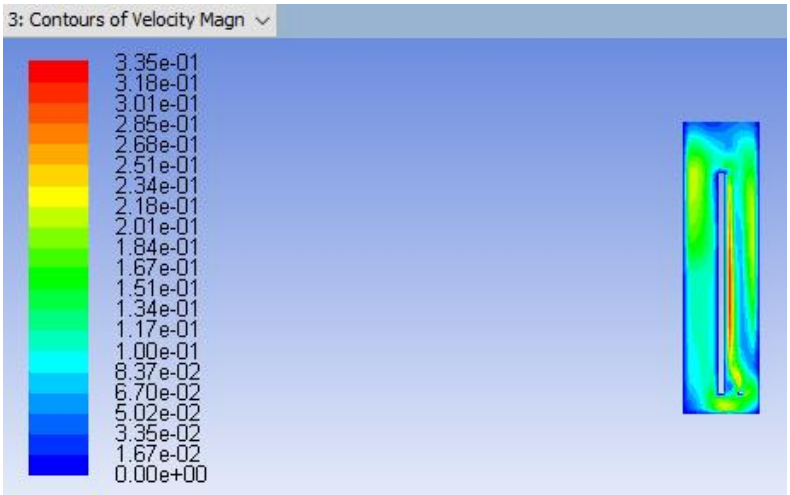


Figura 71 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (14E). Fuente: El Autor.

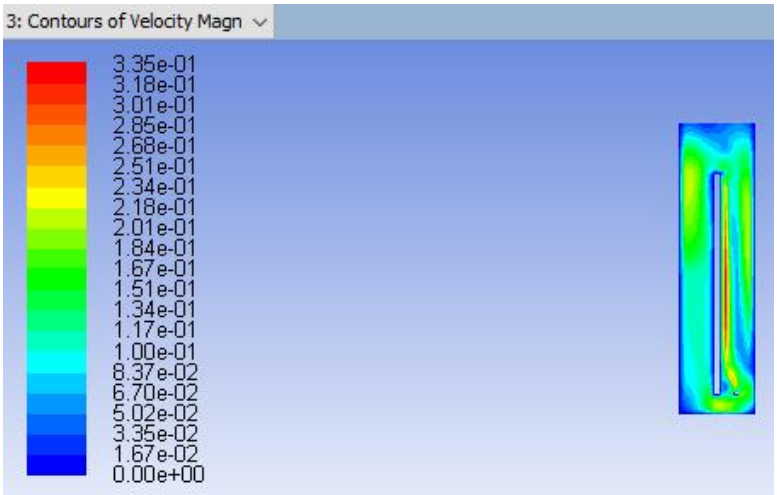


Figura 72 Contornos de velocidad de la fase líquida en ms^{-1} (16E). Fuente: El Autor.

Se observa que no existe mayor diferencia en los perfiles obtenidos, probablemente porque la viscosidad del fluido no varía con la temperatura y no afecta en general el arrastre del gas en el líquido, como se analizó anteriormente. Se observa con claridad que las burbujas de aire provocan la circulación de líquido alrededor de la placa plana. Este fenómeno puede

atribuirse a la diferencia de densidades que se alcanza entre las dos zonas del fotobioreactor que se encuentran separadas por la placa central.

Al encontrarse la placa central un poco distante del límite superior del líquido facilita su circulación, al contrario de lo que sucede en la parte inferior en donde se presenta el efecto Venturi, es decir, se produce una disminución de la presión y un consiguiente aumento de la velocidad, de aproximadamente 2.20ms^{-1}. En la zona superior e inferior se registran velocidades mayores, tal como se muestra en la escala de colores, e inclusive se puede notar la formación de pequeños remolinos en los costados superiores de la placa, que no superan los 2.34ms^{-1}. La mayor velocidad se produce adyancente a la placa central tomando un valor alrededor de los 3.18ms^{-1}, es decir, un 37% más que la velocidad de entrada del líquido. En promedio, la velocidad del fluido puede ubicarse entre 1 y 1.2ms^{-1}, siendo superior en un 80% y un 83% a la velocidad de entrada del gas.

3.4.3 Contornos de irradiancia incidente en las superficies y distribución de la radiación fotosintéticamente activa en el interior del fotobioreactor de placa plana

Los resultados que se presentan a continuación están divididos en dos partes: a) un análisis de la irradiancia solar total incidente sobre las superficies del fotobioreactor, y b) un estudio de la distribución de la irradiancia solar en una sección transversal del equipo, pero en una banda entre 400 y 700nm. En la Figura 73 se muestra los contornos de irradiancia incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana a las 08H00:

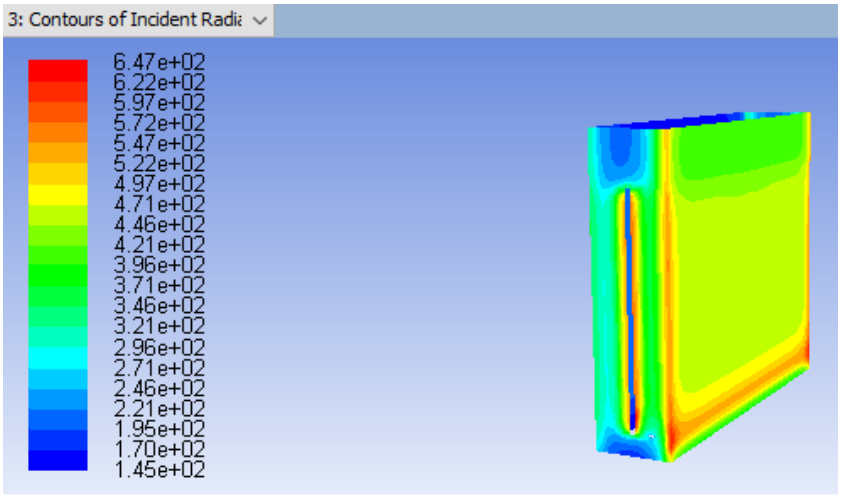


Figura 73 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (08E). Fuente: El Autor.

Esta es mayor en la base del equipo, probablemente por la irradiancia difusa que se suma a la componente normal directa, alcanzando valores alrededor de los 547 Wm^{-2}. A las 08H00, la irradiancia incidente se concentra en la parte central de la superficie de incidencia del fotobioreactor de placa plana, tomando valores alrededor de 446Wm^{-2}, mismos que corresponden a un 46.41% de la irradiancia total (960.8 Wm^{-2}).

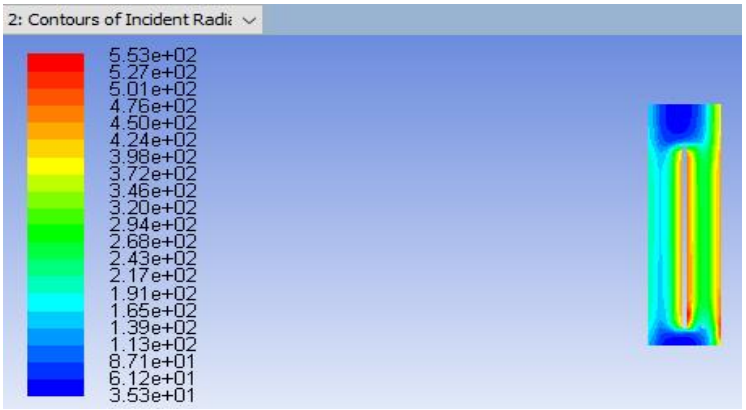


Figura 74 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (08E). Fuente: El Autor.

En una banda espectral entre los 400nm y 700nm, la Figura 74 muestra que la cara que está en contacto directo con la radiación solar logra transmitir la misma solo hasta aproximadamente la mitad del equipo con valores alrededor de 268Wm^{-2} (27.89% del total) en la corriente central del lado derecho de la placa central, como indica la escala de colores, formándose de esta manera 2 zonas con distintos valores de irradiación, estando la menor de ellas alrededor de 165Wm^{-2} (17.17% del total). Esto provocará el denominado Flashing Light effect (Degen, Uebele, Retze, Schmid-Staiger, & Trösch, 2001), es decir, zonas en donde las cianobacterias crecerán con mayor rapidez y otras en donde no debido a las diferencias de irradiancia. De ahí que es indispensable que el cultivo pueda tener oportunidad de atravesar la zona con mayor irradiación tantas veces como sea posible, lográndose este efecto con el aumento de la velocidad del líquido.

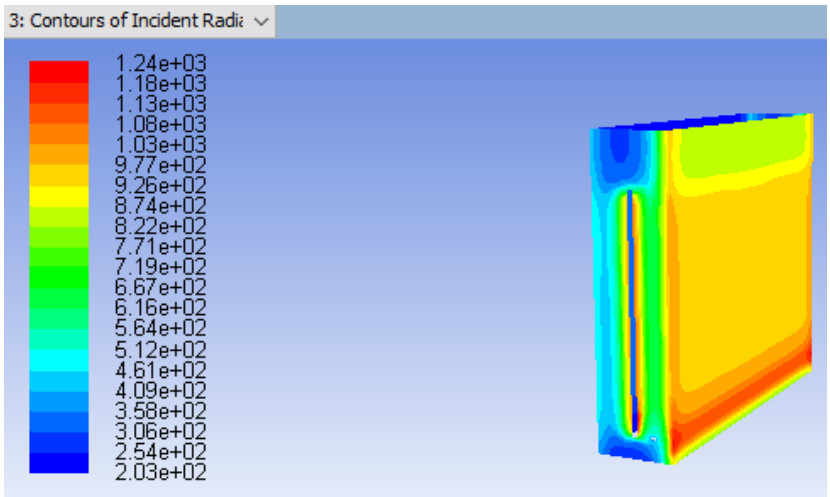


Figura 75 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (10E). Fuente: El Autor.

En la Figura 75 se muestra los contornos de irradiancia incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana, a las 10H00. La parte baja de la superficie de incidencia del fotobioreactor alcanza valores de

irradiancia cercanos a 1030Wm^{-2}, y la parte central toma valores alrededor de 926Wm^{-2}, lo que corresponde a un 77.48% de la irradiancia total incidente (1195.071Wm^{-2}).

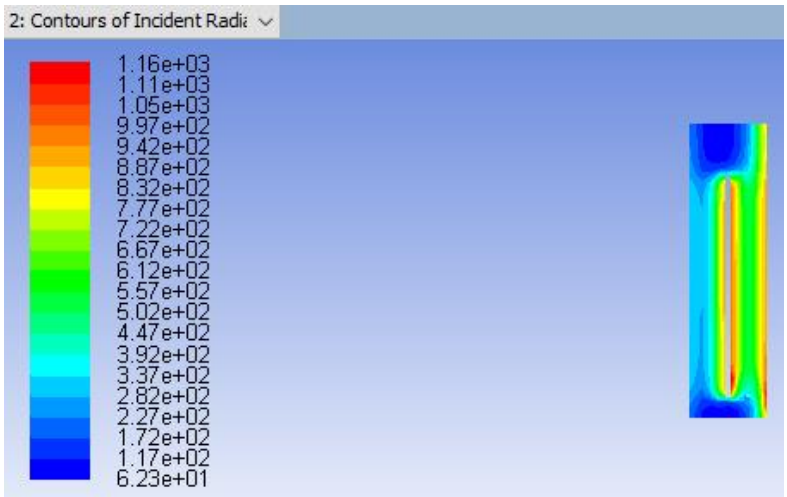


Figura 76 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (10E). Fuente: El Autor.

La Figura 76 permite apreciar que el Flashing Light effect todavía sigue presente, creando una zona con una irradiancia aproximada de 612Wm^{-2} en la zona cercana a la superficie de incidencia, y un valor alrededor de 337Wm^{-2} en la zona de menor irradiancia. Comparada con la Figura 74, se observa que la irradiancia ha aumentado en un 51.03% en la zona que se encuentra a la izquierda de la placa central.

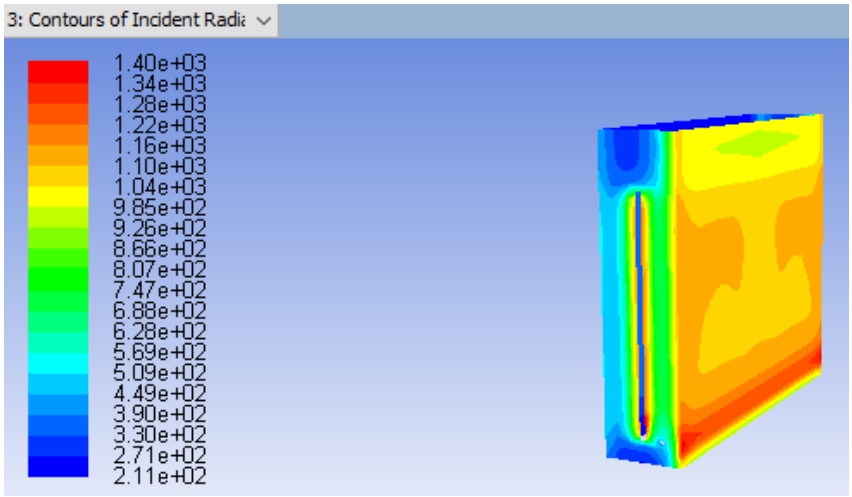


Figura 77 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (11E). Fuente: El Autor.

En la Figura 77 se muestra los contornos de irradiancia incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana a las 11H00. La parte baja de la superficie de incidencia del fotobioreactor alcanza valores de irradiancia cercanos a $1220Wm^{-2}$, y la parte central toma valores alrededor de $1100Wm^{-2}$ en los costados, lo que corresponde a un 89.53% de la irradiancia total y aproximadamente $1040Wm^{-2}$ en el centro correspondiente a un 84.65% del total incidente ($1228.518Wm^{-2}$).

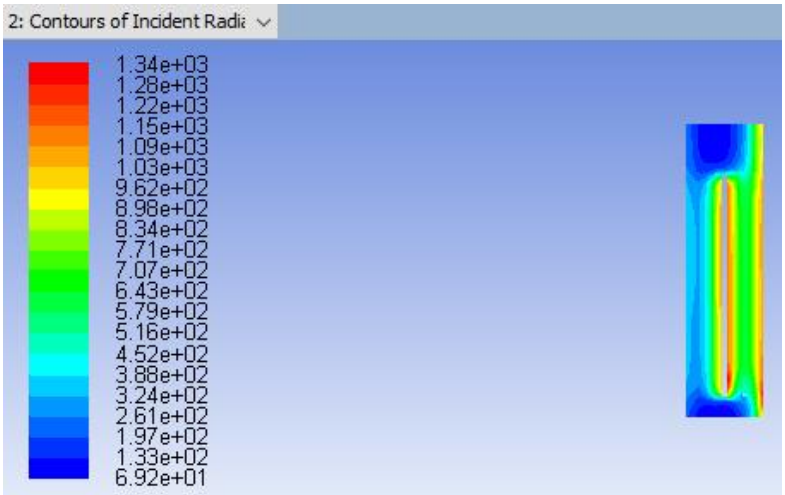


Figura 78 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (11E). Fuente: El Autor.

La Figura 78 permite apreciar que el Flashing Light effect todavía sigue presente, creando una zona con una irradiancia aproximada de $643Wm^{-2}$ en la zona cercana a la superficie de incidencia, y un valor alrededor de $388Wm^{-2}$ en la zona de menor irradiancia. Comparada con la Figura 76, se observa que la irradiancia ha aumentado 13.14% en la zona que se encuentra a la izquierda de la placa central, es decir, relativamente poco.

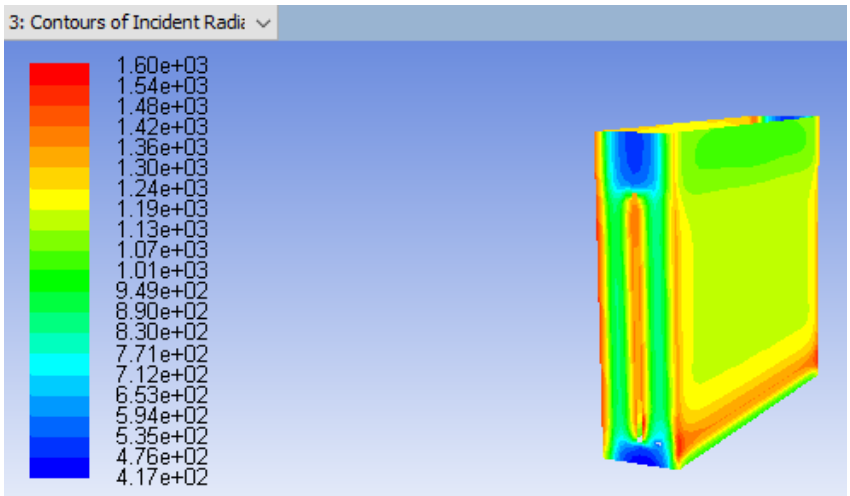


Figura 79 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (12E). Fuente: El Autor.

En la Figura 79 se muestra los contornos de irradiancia incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana a las 12H00. La parte baja de la superficie de incidencia del fotobioreactor alcanza valores de irradiancia cercanos a 1200Wm^{-2}, y la parte central toma valores alrededor de 1070Wm^{-2}, lo que corresponde a un 86.43% de la irradiancia total incidente (1237.930Wm^{-2}). Los valores altos de irradiancia en la parte baja pueden deberse al aumento de los valores de las componentes difusa sobre superficie horizontal y la reflejada desde el suelo, con respecto a los casos anteriores, como se muestra en la Tabla 16.

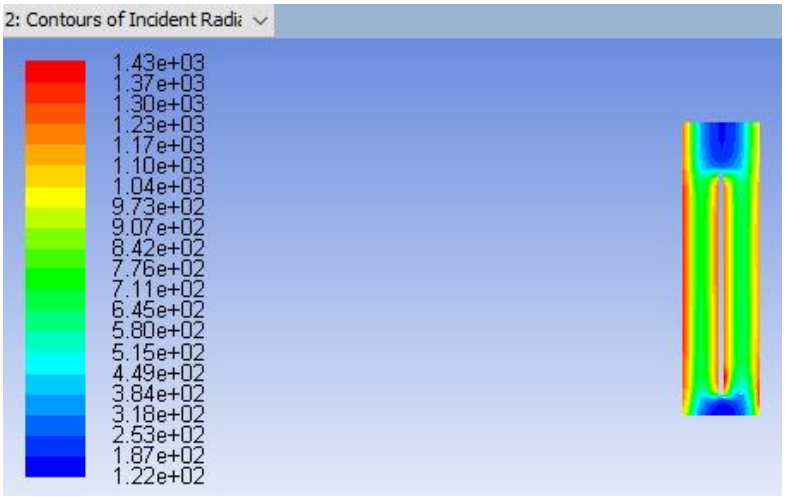


Figura 80 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (12E). Fuente: El Autor.

Debido a que el 20 de marzo corresponde al equinoccio, el Sol alcanzará el punto más alto con relación a un observador formando una perpendicular perfecta con el ecuador terrestre. Por tanto, a las 12H00 el Sol incidirá sobre la parte superior del equipo logrando una uniformidad de irradiancia en ambos lados de la placa central del fotobioreactor, como se observa en la Figura 80, alcanzando un valor de aproximadamente 711Wm^{-2} equivalente al 62.28% de la irradiancia incidente total.

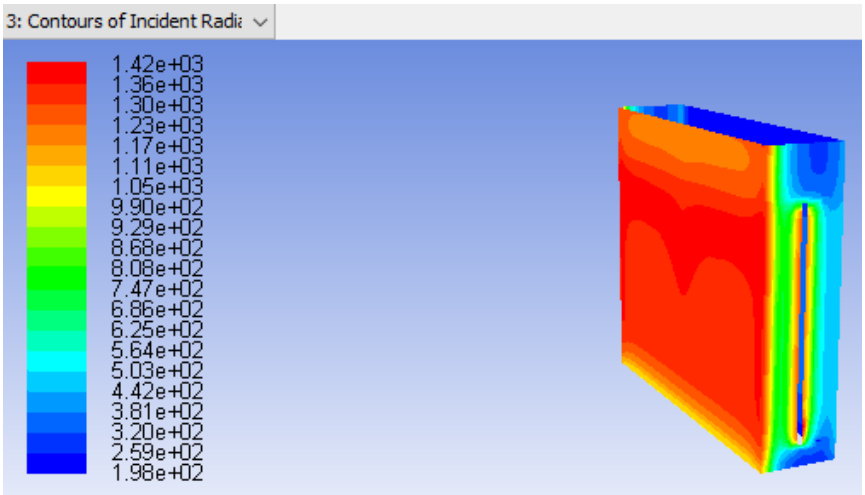


Figura 81 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (13E). Fuente: El Autor.

En la Figura 81 se muestra los contornos de irradiancia incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana a las 13H00. Ahora, la radiación solar incide en la superficie opuesta, en referencia a los casos 08E-11E. En la parte central de la superficie de incidencia el fotobioreactor alcanza valores de irradiancia cercanos a 1230Wm^{-2}, correspondiente a un 99.36% de la irradiancia total incidente (1237.886 Wm^{-2}). Este es el valor más alto de incidencia en una superficie analizado durante toda la experimentación.

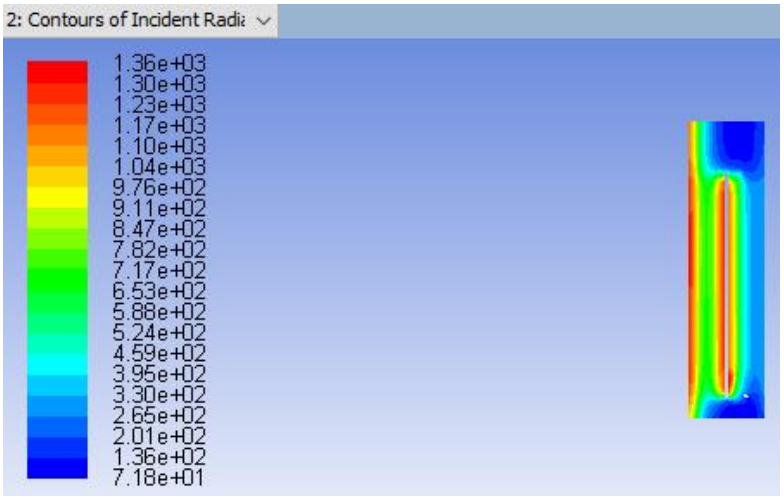


Figura 82 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (13E). Fuente: El Autor.

Como se muestra en la Figura 82, ahora la parte más irradiada está en la parte posterior del equipo. Nuevamente se observa el Flashing Light effect, presentándose esta vez valores de irradiancia de aproximadamente $717Wm^{-2}$, equivalente al 57.92% del total incidente al lado izquierdo de la placa central y en la zona de menor irradiancia se alcanza los $459Wm^{-2}$ correspondiente al 37.07% del total incidente.

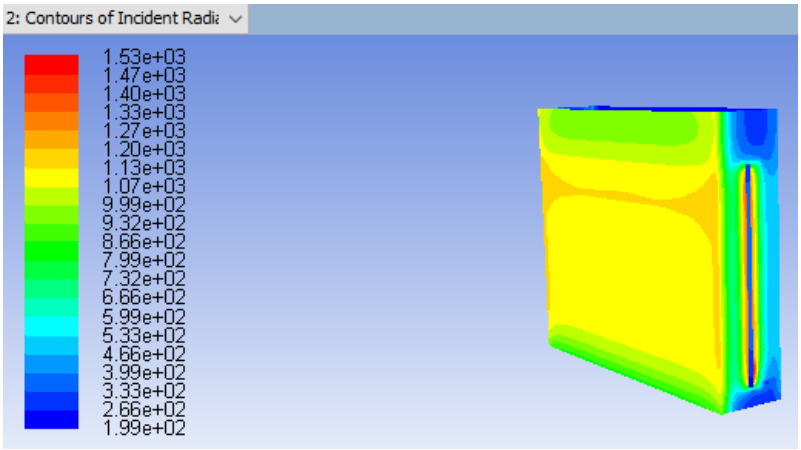


Figura 83 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (14E). Fuente: El Autor.

En la Figura 83 se muestra los contornos de irradiancia incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana a las 14H00. En la parte central de la superficie de incidencia el fotobioreactor alcanza valores de irradiancia cercanos a $1070Wm^{-2}$, correspondiente a un 87.21% de la irradiancia total incidente ($1226.843Wm^{-2}$).

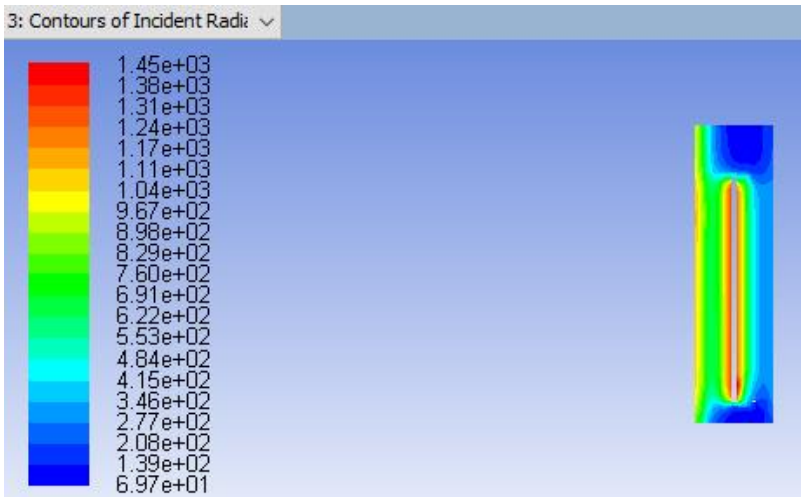


Figura 84 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (14E). Fuente: El Autor.

Como se muestra en la Figura 84, el Flashing Light effect está presente, alcanzándose esta vez valores de irradiancia de aproximadamente 691Wm^{-2}, equivalente al 56.32% del total incidente al lado izquierdo de la placa central y en la zona de menor irradiancia se alcanza los 346Wm^{-2} correspondiente al 28.20% del total incidente.

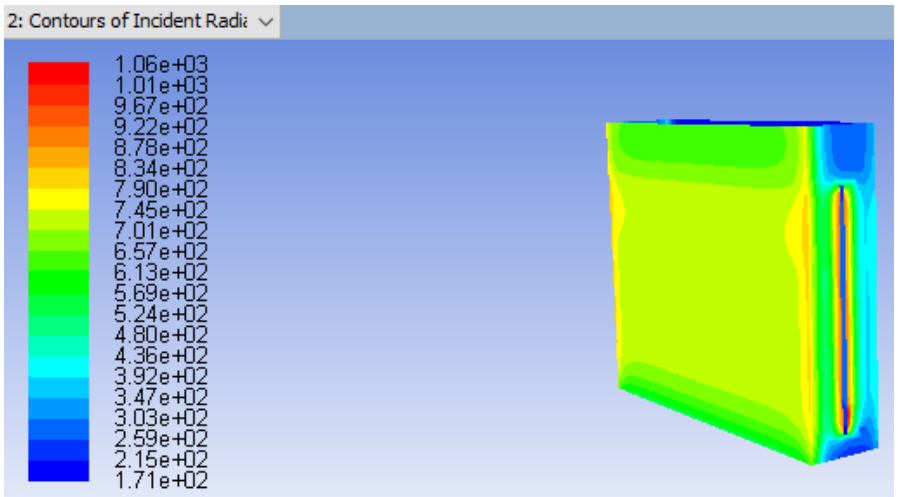


Figura 85 Contornos de Irradiancia solar incidente en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana en Wm^{-2} (16E). Fuente: El Autor.

En la Figura 85 se muestra los contornos de irradiancia incidente en en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana a las 16H00. En la parte central de la superficie de incidencia el fotobioreactor alcanza valores de irradiancia cercanos a 701Wm^{-2}, correspondiente a un 62.95% de la irradiancia total incidente (1113.458Wm^{-2}).

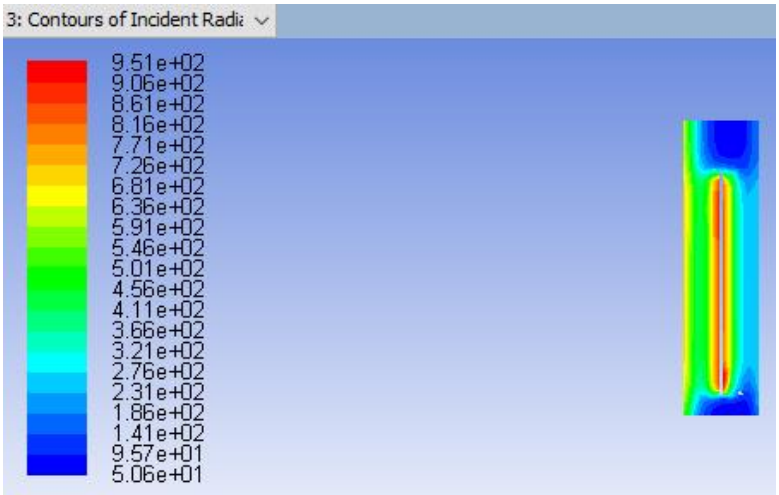


Figura 86 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} (16E). Fuente: El Autor.

Como se muestra en la Figura 86, el Flashing Light effect está presente, alcanzándose esta vez valores de irradiancia de aproximadamente $456Wm^{-2}$, equivalente al 40.95% del total incidente al lado izquierdo de la placa central y en la zona de menor irradiancia se alcanza los $276Wm^{-2}$ correspondiente al 24.78% del total incidente.

En general, se observa que entre las 11H00 y las 13H00, la irradiancia recibida por las superficies del equipo es más alta que en otras horas del día, lo que debería corresponderse con un aumento de la temperatura, como se mostrará a continuación.

3.4.4 Contornos de temperatura

En la Figura 87 se muestran los contornos de temperatura en la sección transversal del fotobioreactor de placa plana las 08H00. Con los valores de irradiancia previamente citados, se alcanza un aumento de 5°C con respecto a la temperatura de entrada de los fluidos. Es importante notar que la

temperatura se ha uniformizado en el equipo por convección forzada, es decir, el movimiento del líquido debido a la corriente de burbujas.

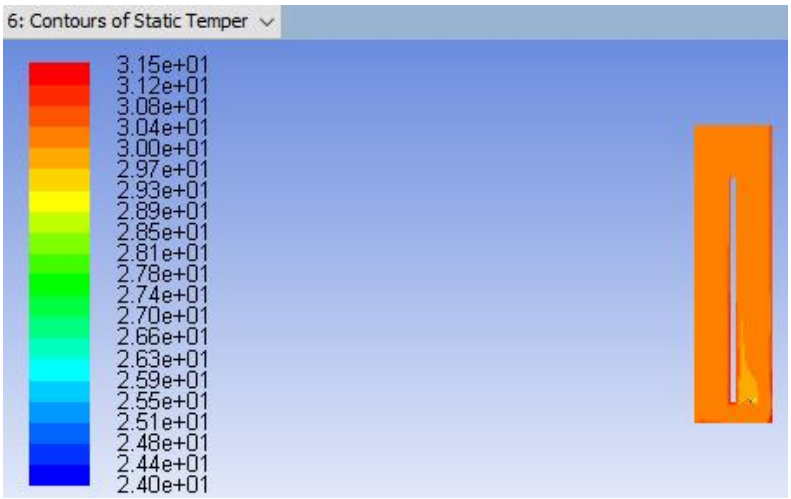


Figura 87 Contornos de temperatura en °C (08E). Fuente: El Autor.

Cercano a la superficie que recibe directamente la radiación, se alcanzan 31°C de temperatura, probablemente por el aumento de la energía interna del vidrio semitransparente ocasionada por la irradiación incidente.

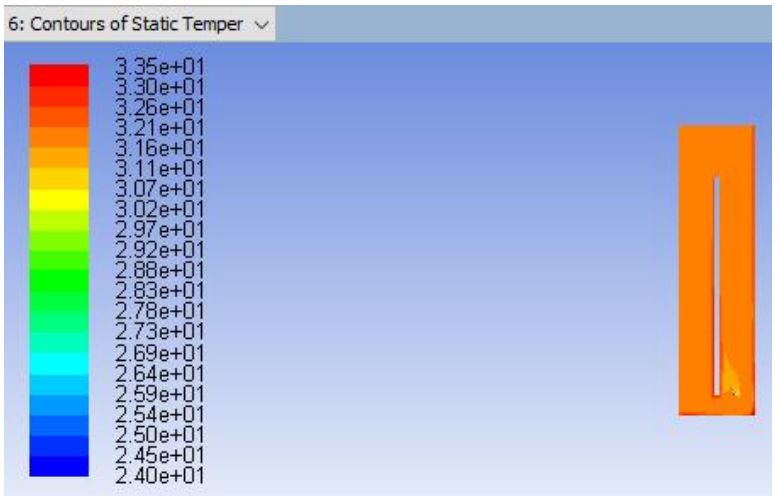


Figura 88 Contornos de temperatura en °C (10E). Fuente: El Autor.

A las 10H00, la temperatura es uniforme debido a la explicación provista anteriormente, alcanzando valores de 31.6°C en el seno del líquido, y de 33.5°C en zonas cercanas a las paredes. La diferencia de temperatura producida es de 7.6°C con referencia a la temperatura de entrada del líquido.

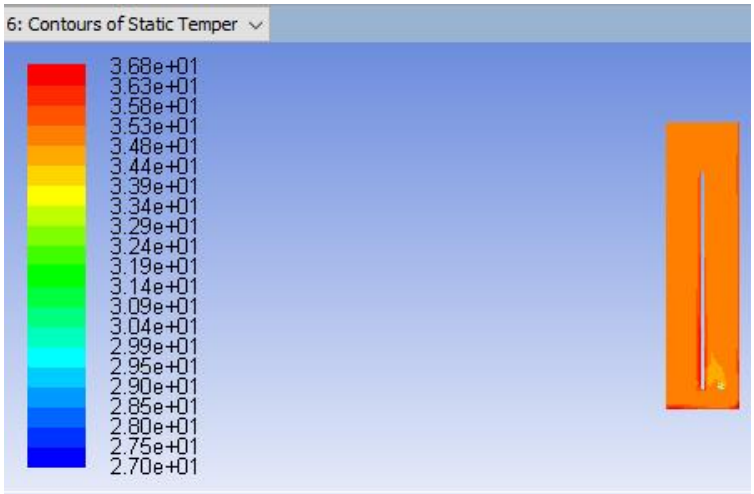


Figura 89 Contornos de temperatura en °C (11E). Fuente: El Autor.

A las 11H00, la temperatura es uniforme nuevamente, salvo en la base y en las zonas cercanas a las paredes del equipo. Se alcanzan valores de 34.8°C en el seno del líquido, y de 36.8°C en zonas cercanas a las paredes.

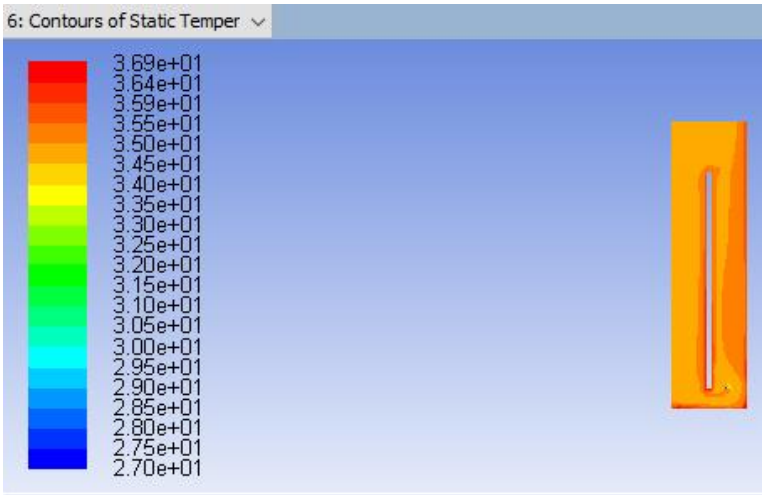


Figura 90 Contornos de temperatura en °C (12E). Fuente: El Autor.

A las 12H00, la temperatura ya no es uniforme en el seno del líquido como se muestra en la Figura 90. Probablemente este comportamiento es debido a que a esta hora el sol se encuentra perpendicular al equipo, y al no incidir directamente en las paredes, permite que estas descarguen la energía interna acumulada hacia el ambiente y al interior del líquido, formando los gradientes de temperatura que se observan en la Figura 90. La temperatura al interior oscila entre 34°C y 35°C, es decir, se produce un aumento de alrededor de 7°C con respecto a la temperatura de ingreso del líquido.

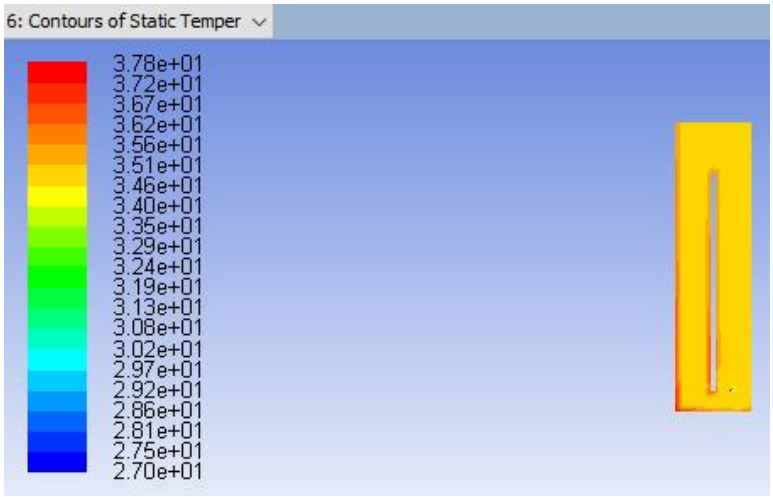


Figura 91 Contornos de temperatura en °C (13E). Fuente: El Autor.

Para las 13H00, la temperatura se encuentra alrededor de 34.6 y 35.1°C, lo que aproximadamente da 7°C de diferencia con respecto a la temperatura de entrada del líquido, alcanzando en las zonas cercanas a las paredes 37.8°C, como se observa en la Figura 91. Nótese que ahora este calentamiento se produce en la superficie contraria, con referencia a la analizada en los casos anteriores. Los gradientes han desaparecido y la temperatura vuelve a ser nuevamente uniforme en el seno del líquido.

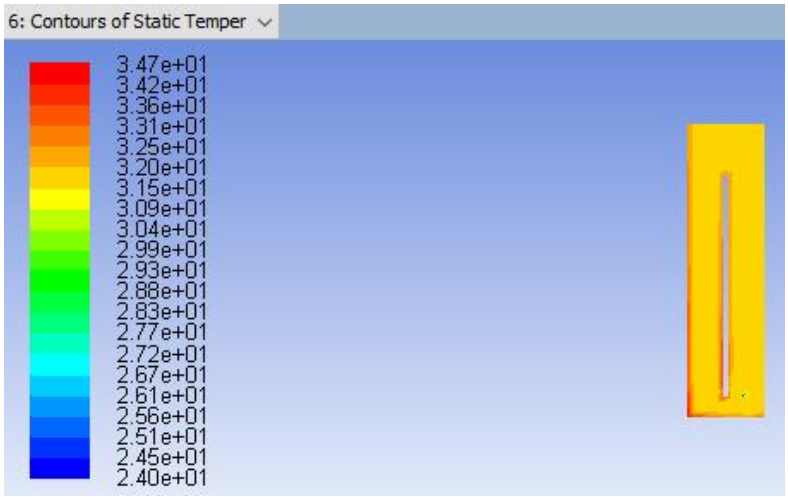


Figura 92 Contornos de temperatura en °C (14E). Fuente: El Autor.

Para las 14H00, la temperatura se encuentra alrededor de 31.5 y 32°C, alcanzando en las zonas cercanas a las paredes 34.7°C, como se observa en la Figura 92. Ahora, por la disminución de la irradiancia incidente, la temperatura empezó a descendió en 3°C respecto al caso anterior.

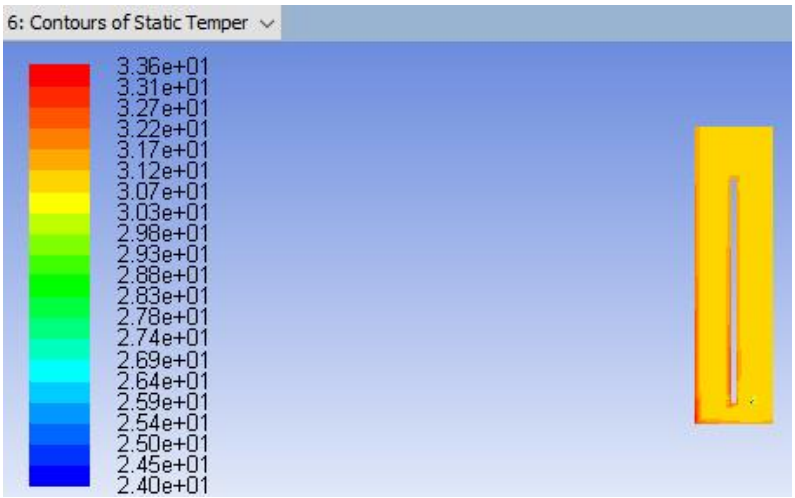


Figura 93 Contornos de temperatura en °C (14E). Fuente: El Autor.

Para las 16H00, la temperatura se encuentra alrededor de 30.7 y 31.2°C, alcanzando en las zonas cercanas a las paredes 33.6°C, como se observa en

la Figura 93. La disminución de temperatura con respecto al caso anterior es nada más que 1°C, producido por la disminución de la irradiancia incidente.

3.4.5 Determinación de la cinética de crecimiento de la *Arthrospira Platensis*

Como se revisó en el capítulo anterior, la cinética de crecimiento de la cianobacteria *Arthrospira Platensis* está vinculada directamente al campo de irradiancia presente en el fotobioreactor de placa plana. Por tanto, para el día 20 de marzo, se analizará en primer lugar la distribución de la irradiancia total a lo largo del día, como se muestra en la Figura 94:

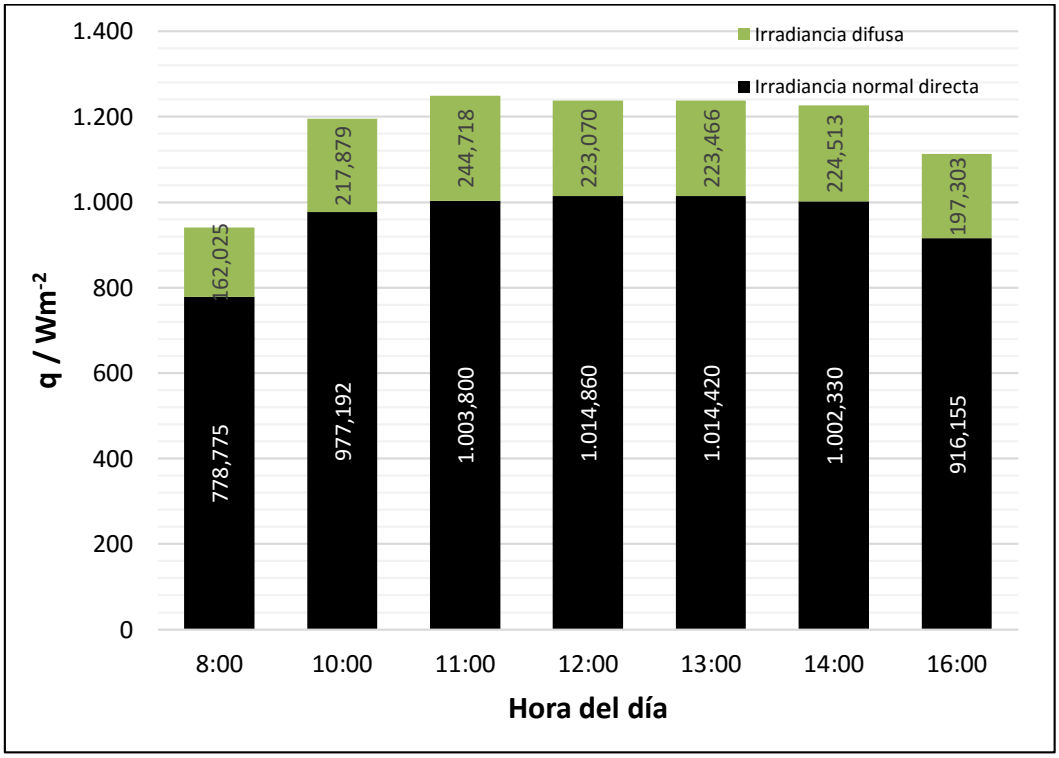
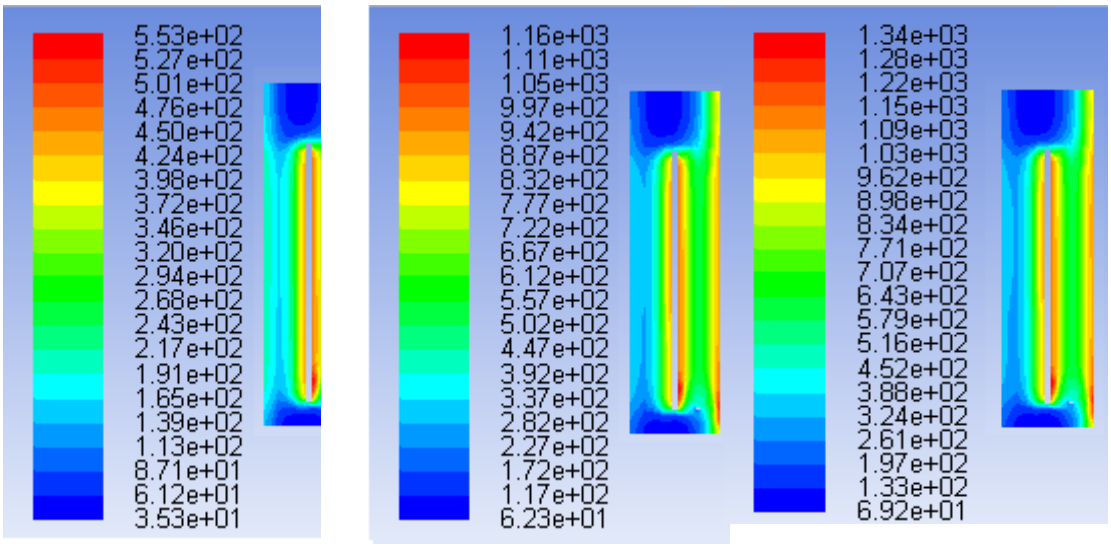


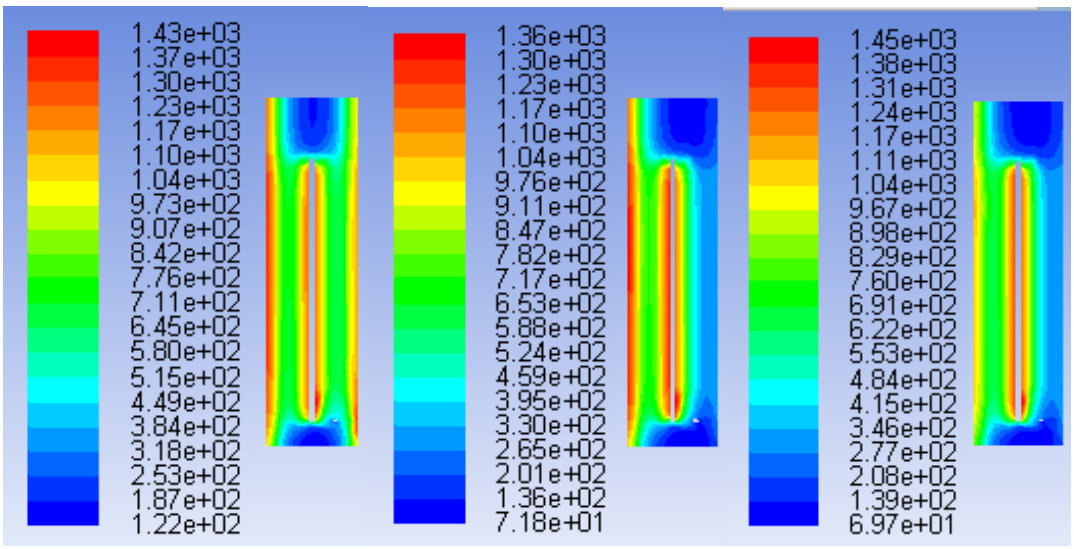
Figura 94 Irradiancia normal directa y difusa para el 20 de marzo de 2016. Fuente: El Autor.

Se puede observar que desde las 10:00 hasta las 14:00 casi no existe diferencia en los valores de irradiancia normal directa y difusa. A las 11H00 se alcanza el mayor valor de irradiancia total y difusa, aunque a las 12H00 se produce mayor irradiancia directa normal. Sin embargo, de esta radiación solo nos interesa una banda entre 400nm y 700nm, conocida como región del espectro de la radiación Fotosintéticamente Activa, que es en donde se desarrollan las cianobacterias.

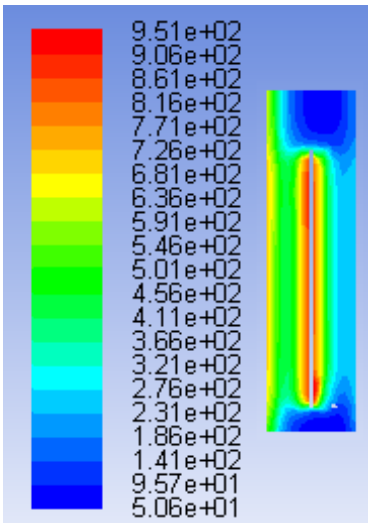
Ahora, compararemos los valores obtenidos de manera aproximada en la sección anterior en esta región del espectro:



08:00 10:00 11:00



12:00 13:00 14:00



16:00

Figura 95 Distribución de la irradiancia solar entre 400nm y 700nm al interior del fotobioreactor en Wm^{-2} de los experimentos realizados. Fuente: El Autor.

De estos perfiles se obtuvieron los siguientes valores de irradiancia total en la rama izquierda y derecha del fotobioreactor:

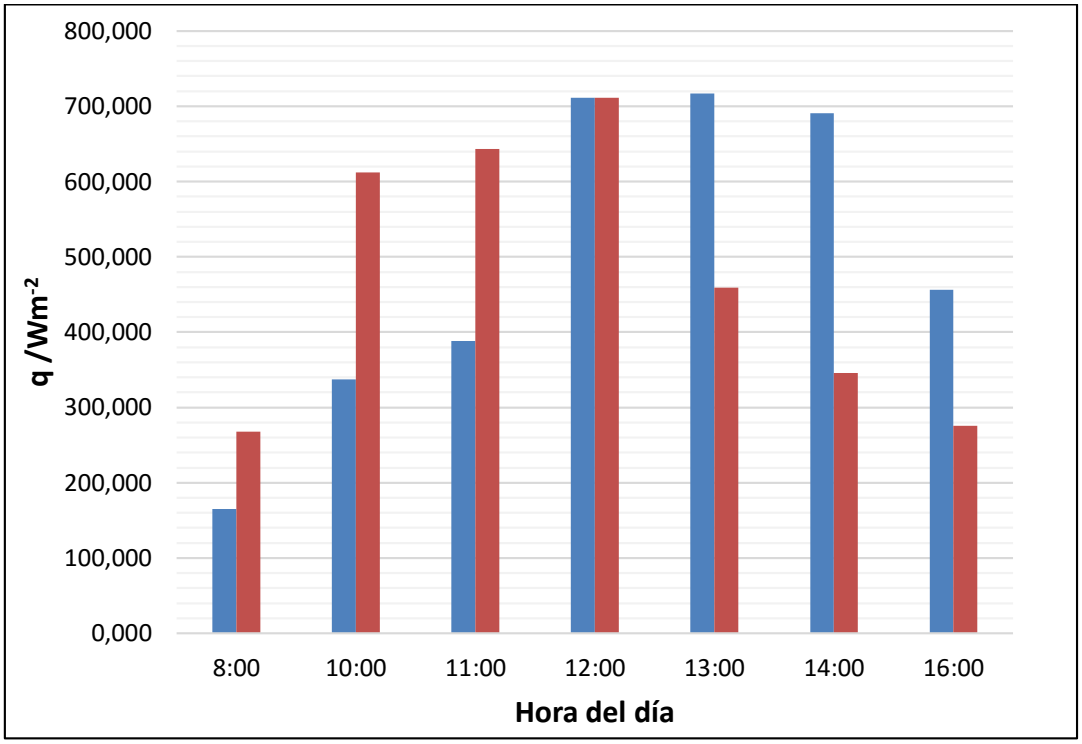


Figura 96 Irradiancia total entre 400nm y 700nm en la rama izquierda (azul) y derecha (rojo) del fotobioreactor. Fuente: El Autor.

Como se muestra en la Figura 96, en la mañana los valores de irradiancia total son mayores en la rama derecha, y en la tarde los de la rama izquierda. Solo a las 12H00 los valores se igualan debido a la posición del Sol respecto al plano ecuatorial. Para los cálculos cinéticos, sin embargo, es necesario expresar los valores anteriores en forma de flux de fotones. Este cálculo se desarrolla empleando la ecuación 2.18, para lo cual debe escogerse una longitud de onda. Los datos de irradiancia total recogidos corresponden a una banda entre 400nm y 700nm, por lo cual se asumirá que toda la irradiancia incide con una longitud de onda promedio de 550nm. Otra cuestión que se debe notar es que la velocidad de la luz no debe colocarse como si estuviera en el vacío, sino más bien debe corregirse tomando en cuenta el índice de refracción del agua de 1.33 Los datos se muestran en la Tabla 25:

Tabla 25
Irradiancia y Flux de fotones a 550nm, en la región del espectro de la radiación Fotosintéticamente Activa, en las ramas derecha e izquierda del fotobioreactor

Hora	Rama derecha		Rama izquierda	
	Irradiancia Wm^{-2}	Flux de fotones $\mu mol\ m^{-2}\ s^{-1}$	Irradiancia Wm^{-2}	Flux de fotones $\mu mol\ m^{-2}\ s^{-1}$
8:00	165.000	976.935	268.000	1586.779
10:00	337.000	1995.315	612.000	3623.540
11:00	388.000	2297.277	643.000	3807.085
12:00	711.000	4209.700	711.000	4209.700
13:00	717.000	4245.225	459.000	2717.655
14:00	691.000	4091.284	346.000	2048.602
16:00	456.000	2699.892	276.000	1634.145

En primer lugar, se comprobará en que región de la curva 2.18 se encuentra el crecimiento de la *Arthrospira Platensis* bajo estas condiciones de irradiancia. Por tanto, se empleará la ecuación 2.31 para graficar la curva de crecimiento de la cianobacteria en función del flux de fotones. Los resultados se muestran en la Tabla 26:

Tabla 26
Tasa específica de crecimiento μ y Concentración de biomasa C_{Bx}

Horas	Rama derecha			Rama izquierda		
	Flux de fotones $\mu mol\ m^{-2}\ s^{-1}$	μ h^{-1}	C_{Bx} $Kg_x m^{-3}$	Flux de fotones $\mu mol\ m^{-2}\ s^{-1}$	μ h^{-1}	C_{Bx} $Kg_x\ m^{-3}$
0	976.935	0.073	0.200	1586.779	0.073	0.200
2	1995.315	0.073	0.231	3623.540	0.073	0.231
3	2297.277	0.073	0.249	3807.085	0.073	0.249
4	4209.700	0.073	0.268	4209.700	0.073	0.268
5	4245.225	0.073	0.288	2717.655	0.073	0.288
6	4091.284	0.073	0.310	2048.602	0.073	0.310
8	2699.892	0.073	0.359	1634.145	0.073	0.359

La concentración C_{Bx} fue calculada empleando la ecuación de Monod (Pilon, Berberoğlu, & Kandilian, 2011):

$$\frac{dC_{Bx}}{dt} = \mu C_{Bx} \tag{3.2}$$

En donde, al igual que en casos anteriores, C_{Bx} es la concentración de biomasa expresada en $Kg_x m^{-3}$ y μ representa la tasa específica de crecimiento de la cianobacteria, en h^{-1} tomando como μ_{max}=0.073h^{-1}, tal y como revisó en apartados anteriores. Estos resultados fueron graficados, tal y como lo indica la Figura 97. Como se observa en esta, los niveles de irradiancia incidentes provocan que la tasa de crecimiento de la cianobacteria en estudio se encuentre en la región de saturación lumínica, con lo cual, el crecimiento de la cianobacteria se vuelve independiente del nivel de irradiancia incidente.

Puede observarse que a las 08H00, partiendo de una concentración inicial de *Arthrosphira Platensis* de 0.2kg m^{-3} (Pruvost, Cornet, Goetz, & Legrand, 2011), a las 16H00 la concentración se ha incrementado un 44.28% llegando a aproximadamente 0.35kg m^{-3}. Si se desea mejorar la tasa de producción, se debe exponer a las cianobacterias a un nivel de irradiancia que las ubique en la zona de crecimiento limitada por la luz, y no en la saturación.

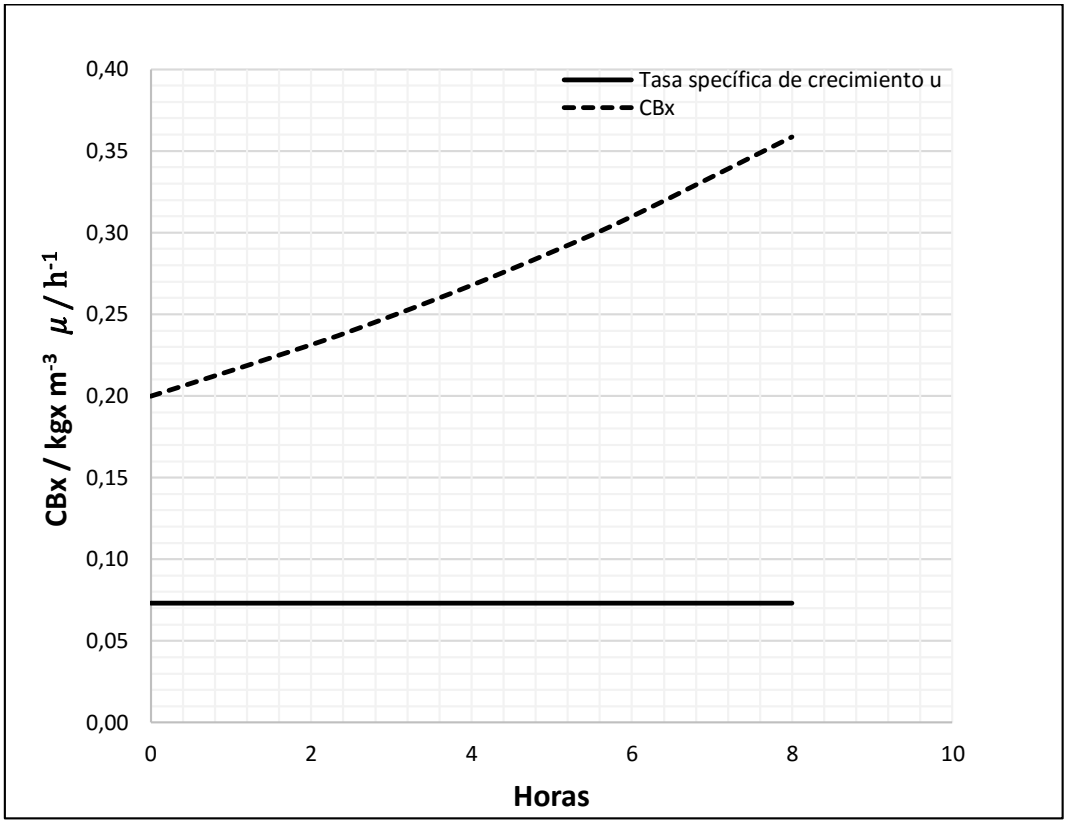


Figura 97 Tasa de crecimiento y concentración de la cianobacteria *Arthrospira Platensis*. Fuente: El Autor.

De lo anterior también se puede deducir que la tasa de incremento de la concentración con respecto al tiempo es directamente proporcional a la concentración presente de biomasa en el fotobioreactor:

$$R_{Bx} = \mu C_{Bx} \tag{3.3}$$

Debido a que con los valores de irradiancia obtenidos la tasa de crecimiento específica de la cianobacteria es constante. En la sección 2.7, se desarrollaron las ecuaciones para determinar la cinética de crecimiento de la *Arthrospira Platensis* tomando en cuenta directamente los factores que tienen que ver con el transporte radiativo. Combinando las ecuaciones 2.40-2.42 y la 2.131 se llega a:

$$R_B(\mathbf{x}) = \varpi_M \frac{F_{phs,0.5}}{F_{phs,0.5} + F_{ph}(\mathbf{x})} \bar{\phi}_B \mathrm{E}_{abs} C_{Bx} \left(F_{phc,RFA} + F_{phd,RFA} \right)(\mathbf{x}) \qquad (3.4)$$

Para la solución de la ecuación 3.3, se tomará un valor medio de la eficiencia termodinámica máxima para la conversión fotónica ϖ_M de 0.79, un valor promedio de la constante de saturación media de la fotosíntesis $F_{phs,0.5}$ de 90μmol m^{-2}s^{-1} , un rendimiento cuántico másico $\bar{\phi}_B$ de 1.85×10^{-9} kg$_x$ μmol^{-1} y un coeficiente de absorción másico E_{abs} de 150 m^2 kg$_x^{-1}$. También debe notarse que:

$$F_{ph}(\mathbf{x}) = \left(F_{phc,RFA} + F_{phd,RFA} \right)(\mathbf{x}) \qquad (3.5)$$

Resolviendo la ecuación 3.4 se obtienen los siguientes resultados:

Tabla 27
Velocidades de reacción local en la rama derecho e izquierda en el fotobioreactor de placa plana

Tiempo s	Rama derecha		Rama izquierda	
	Flux de fotones μmol m^{-2} s^{-1}	$R_B(x)$ mg$_x$ m^{-3} s^{-1}	Flux de fotones μmol m^{-2} s^{-1}	$R_B(x)$ mg$_x$ m^{-3} s^{-1}
0	976.934	0.005701355	1586.778	0.006008737
7200	1995.315	0.007078459	3623.539	0.007308065
10800	2297.276	0.007685145	3807.084	0.007876604
14400	4209.700	0.008503934	4209.700	0.008503934
18000	4245.225	0.009150576	2717.654	0.008978344
21600	4091.284	0.00983093	2048.602	0.009496057
25200	2699.892	0.011172679	1634.145	0.01080189

Debe considerarse que los resultados obtenidos no son dependientes de manera directa del tiempo, tal y como se observa en la ecuación 3.4. Por esto, se registra un valor de velocidad de reacción al tiempo 0s, debido principalmente a la concentración de la biomasa presente en esos instantes,

y a la conversión infinitesimal ocurrida cercana a este valor de tiempo. En la Tabla 27 se puede analizar que respecto del tiempo 0, la velocidad de reacción a los 25200s (16h) aumentó un 48.97% en la rama derecha, mientras que en la rama izquierda aumentó un 44.44%. Cabe mencionar que este aumento de velocidad se produce con un valor relativamente bajo de flux de fotones, respcto a los citados en la Tabla 27. La velocidad de reacción graficada en contra del tiempo se muestra en la Figura 98:

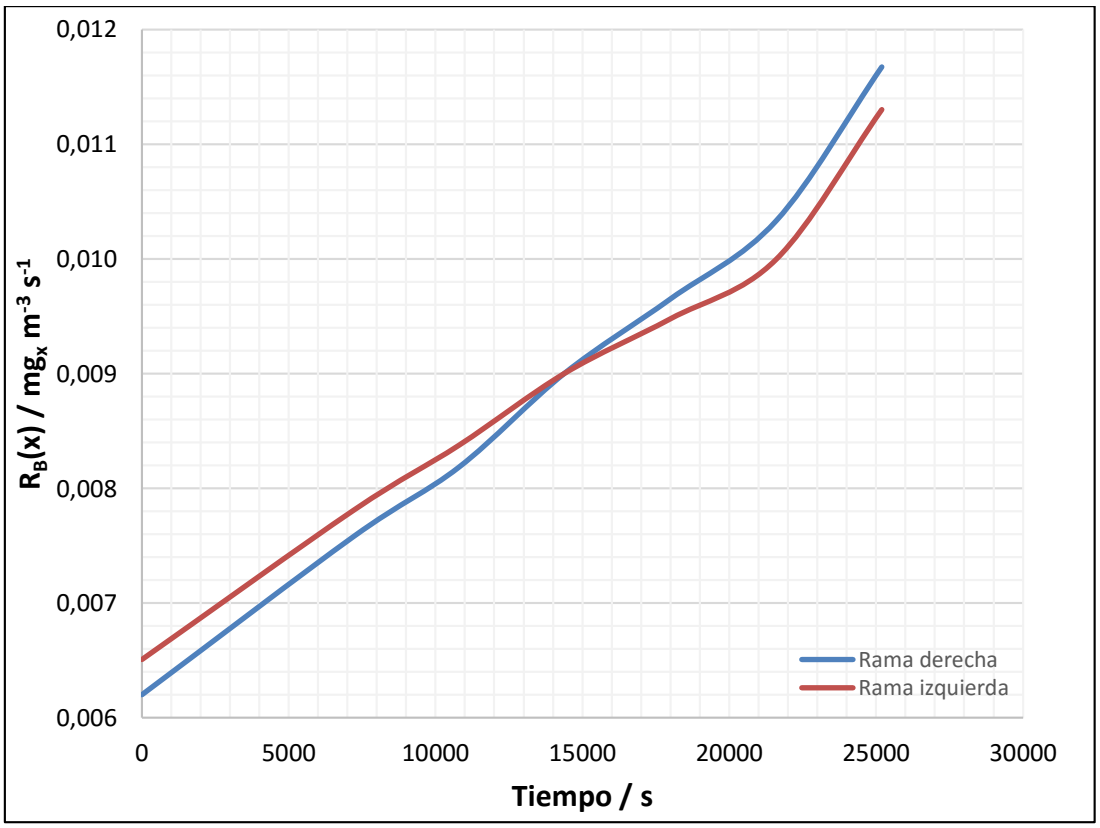


Figura 98 Velocidad de crecimiento de la cianobacteria *Arthrosphira Platensis* bajo las condiciones de irradiancia de los experimentos numéricos. Fuente: El Autor.

Como puede verse en la Figura 98, la velocidad de reacción local expresada en $mg_x m^{-3} s^{-1}$ aumenta desde las 08H00 hasta las 16H00, alcanzando un máximo a esta hora de 0.0111 en la rama derecha y 0.0108 en la rama

izquierda. Nótese que este es un efecto acumulado, debido a que la velocidad de reacción en las ecuaciones 3.3 y 3.4 es proporcional a la concentración de biomasa, misma que aumenta en el periodo de análisis de manera continua según la Figura 97. Si este no fuera el caso, se debería formar una especie de campana cuyos máximos se alcanzan entre las 11H00 y las 13H00, como se muestra en la Figura 99, calculada a concentración de biomasa constante tomada como el valor promedio de las concentraciones C_{Bx} de la Tabla 26, equivalente a $0.27 kg_x m^{-3}$ situación que no se presenta en un reactor de tipo batch.

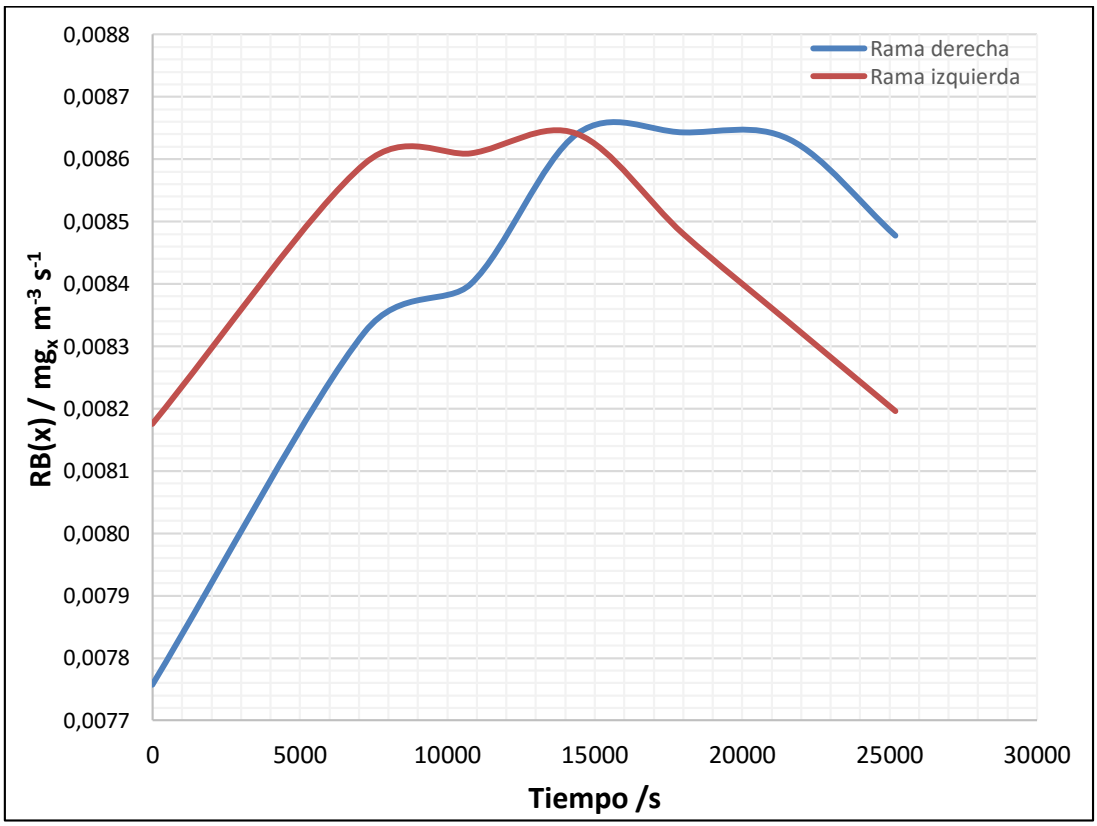


Figura 99 Velocidad de crecimiento de la cianobacteria Arthrosphira Platensis bajo las condiciones de irradiancia de los experimentos numéricos, y concentración constante. Fuente: El Autor.

Aunque se presenta crecimiento de las cianobacterias, en las condiciones de irradiancia de Pedernales el 20 de marzo de 2016, el crecimiento se encuentra en una zona de saturación lo que no posibilita que la velocidad de reacción aumente más allá de los valores presentados anteriormente. En estos casos, en donde el fotobioreactor de placa plana esté expuesto a condiciones de irradiancia solar, se debe tomar en cuenta mecanismos que ayuden a bloquear la irradiancia incidente si esta pasa del límite máximo de la zona de crecimiento limitado por la luz, que para algunas variedades de Arthrosphira Platensis como la del lago Chitu en Etiopía alcanza un valor de 200μmol m^{-2} s^{-1}.

3.5 Análisis de validez y convergencia

3.5.1 Análisis de validez del modelo

Para validar un modelo matemático se pueden emplear dos caminos: a) Comparar los datos generados por el sistema real con los procedentes del modelo matemático y, b) Contrastar el modelo matemático obtenido con uno validado previamente en un sistema similar, cuyo rango de aplicación se conoce (Rasmuson, Andersson, Olsson, & Andersson, 2014) (Tarifa, 2001). Esta segunda opción se prefiere en casos en donde realizar la experimentación no es posible por costos, seguridad, etc. remplazándose el sistema real por una versión simplificada con la cual se experimentará, proceso conocido como simulación (Tarifa, 2001).

En esta investigación se opta por el segundo camino, especialmente por los costos que implica la adquisición de los sensores de medición de radiación en medios líquidos, sensores de temperatura, sensores fotométricos (para determinar la concentración del medio de cultivo), sensores de oxígeno disuelto y pH, entro otros.

Modelar el fenómeno de radiación en geometrías cartesianas, en medios acuosos que presentan turbiedad por la presencia de microorganismos y que se encuentran en movimiento en conjunto con fluidos en diferentes fases implica dificultades que han sido superadas con el empleo de métodos numéricos que requieren tiempos de procesamiento computacional elevados, o simplificaciones de la ecuación de transporte radiativo. Uno de los métodos propuestos para la solución de la mencionada ecuación es la denomina aproximación de dos fluxes (Mengüç & Viskanta, 1983). Esta aproximación ha sido ya empleada en el modelamiento de fotobioreactores de placa plana bajo luz artificial (J.-F. Cornet, Dussap, & Gros, 1998; J.-F. Cornet, Dussap, Gros, Binois, & Lasseur, 1995; J. Cornet, Dussap, & Dubertret, 1992; Pottier et al., 2005) y bajo radiación solar (Pottier et al., 2005; J Pruvost et al., 2011; Jeremy Pruvost, Cornet, Goetz, & Legrand, 2012), en los cuales se han cotejado los datos experimentales con los del modelo matemático.

Esencialmente, la aproximación de dos fluxes considera que la dispersión de la radiación dentro del medio de cultivo está confinada en las direcciones ascendentes y descendentes (en la misma línea de acción) (Pottier et al., 2005). Este modelo es apto para incluir las componentes directa y difusa isotrópica de la radiación solar (J Pruvost et al., 2011). Para el desarrollo de las ecuaciones que rigen la aproximación de dos fluxes, se considera que la distribución de luz solar en el interior del fotobioreactor de placa plana es de carácter unidimensional, es decir, el campo de radiación varía a lo largo de la coordenada z. La estrategia que emplea el modelo es considerar el campo de radiación generado por cada una de estas componentes por separado, tomando en cuenta que la radiación incidente no es normal, con lo cual se considera el ángulo de incidencia θ sobre la superficie del equipo (ver figura 100):

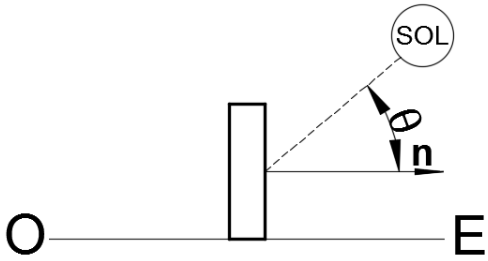


Figura 100 Ángulo de incidencia de la radiación solar sobre la superficie del fotobioreactor. Fuente: El Autor.

La irradiancia total en la región del espectro de la radiación fotosintéticamente activa dentro del medio de cultivo puede ser calculada a partir de (J Pruvost et al., 2011):

$$q_{RFA}(\mathrm{z}) = q_{RFA,c}(z) + q_{RFA,d}(z) \tag{3.6}$$

En donde el subíndice *c* se refiere al componente directo y *d* al componente difuso. La componente directa se obtiene mediante (J Pruvost et al., 2011):

$$q_{RFA,c}(z) = q_{ND}\frac{2}{cos\theta}\frac{(1+\alpha)\exp[-E_{tc}(z-L)] - (1-\alpha)\exp[E_{tc}(z-L)]}{(1+\alpha)^2\exp[E_{tc}L] - (1-\alpha)^2\exp[-E_{tc}L]} \tag{3.7}$$

En la ecuación 3.7 q_{ND} representa la irradiancia normal directa proveniente de los cálculos del campo solar (obtenido con la calculadora solar de FLUENT en este trabajo), L es el espesor del fotobioreactor (0,150m) y z es la coordenada para el análisis:

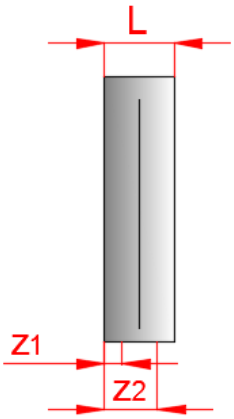


Figura 101 Espesor del fotobioreactor y coordenadas de análisis. Fuente: El Autor.

Nótese en la Figura 101 que z_1 es la coordenada en la mitad de la rama izquierda (0.0375m) y z_2 es la coordenada en la mitad de la rama derecha (0.1125m) del fotobioreactor empleado en esta investigación, coordenadas a emplearse en los cálculos con las ecuaciones 3.7 y 3.8. La componente difusa isotrópica se obtiene a través de (J Pruvost et al., 2011):

$$q_{RFA,c}(z) = 4q_{DF}\frac{(1+\alpha)\exp[-E_{td}(z-L)] - (1-\alpha)\exp[E_{td}(z-L)]}{(1+\alpha)^2\exp[E_{td}L] - (1-\alpha)^2\exp[-E_{td}L]} \qquad (3.8)$$

En donde q_{DF} representa la irradiancia difusa isotrópica proveniente de los cálculos del campo solar (obtenido con la calculadora solar de FLUENT en ente trabajo). Las contantes del modelo están en función de las propiedades radiativas del medio de cultivo (J Pruvost et al., 2011):

$$\alpha = \sqrt{\frac{E_a}{E_a + 2bE_s}} \qquad (3.9)$$

En donde E_a y E_s son los conocidos coeficientes promedio másicos de absorción y scattering, que para la Arthrospira Platensis alcanzan valores de $150m^2kg_x^{-1}$ y $200m^2kgx^{-1}$ respectivamente(J. Cornet et al., 1992). El

coeficiente b se conoce con el nombre de coeficiente radiativo de retrodispersión, y para el cultivo en estudio alcanza un valor de 0.03 (J Pruvost et al., 2011). Formulado tal y como se indica en la ecuación 3.9, α representa el módulo lineal de dispersión de la ecuación de aproximación de dos fluxes y varía de 0 (medio perfectamente dispersante) a 1 (medio perfectamente absorbente). Este módulo cuantifica la respectiva importancia de los fenómenos de absorción y scattering en el medio de cultivo (Pottier et al., 2005).

Otro término presente en las ecuaciones 3.7 y 3.8 es el denominado coeficiente de extinción para la radiación directa de la aproximación de dos fluxes, dado por(Pottier et al., 2005):

$$E_{tc} = \frac{\alpha C_{Bx}}{cos\theta}(E_a + 2bE_s) \tag{3.10}$$

En donde C_{Bx} es la concentración de biomasa dado en $kg_x m^{-3}$. Así mismo, se puede encontrar en las ecuaciones 3.7 y 3.8 al coeficiente de extinción para la radiación difusa de la aproximación de dos fluxes, dado por(Pottier et al., 2005):

$$E_{td} = 2\alpha C_{Bx}(E_a + 2bE_s) \tag{3.11}$$

Las ecuaciones 3.6-3.11 constituyen el modelo de aproximación de dos fluxes. Para calcular la distribución de radiación solar al interior del fotobioreactor de placa plana mediante este modelo, en primer lugar se procederá a calcular el ángulo de incidencia θ empleando la siguiente ecuación (Duffie & Beckman, 2013):

$$cos\theta = -sen\delta\ cos\emptyset\ cos\gamma + cos\delta\ sen\emptyset\ cos\gamma\ cos\omega + cos\delta\ sen\gamma\ sen\omega \qquad (3.12)$$

Duffie y Beckman recomiendan emplear esta ecuación cuando el ángulo entre el plano de incidencia de la radiación y la superficie horizontal β es 90° (ver figura 102). El ángulo ϕ corresponde a la latitud, que para la localidad de Pedernales alcanza un valor de 0.0701°. El ángulo γ se conoce como ángulo azimutal superficial, que corresponde al espacio de plano comprendido entre el eje sur y la normal a la superficie de incidencia, como se muestra en la Figura 102. Obsérvese que en este caso la normal apunta hacia el este. Este ángulo es negativo hacia el este y positivo hacia el oeste. Por tanto, para este caso toma un valor de -90°.

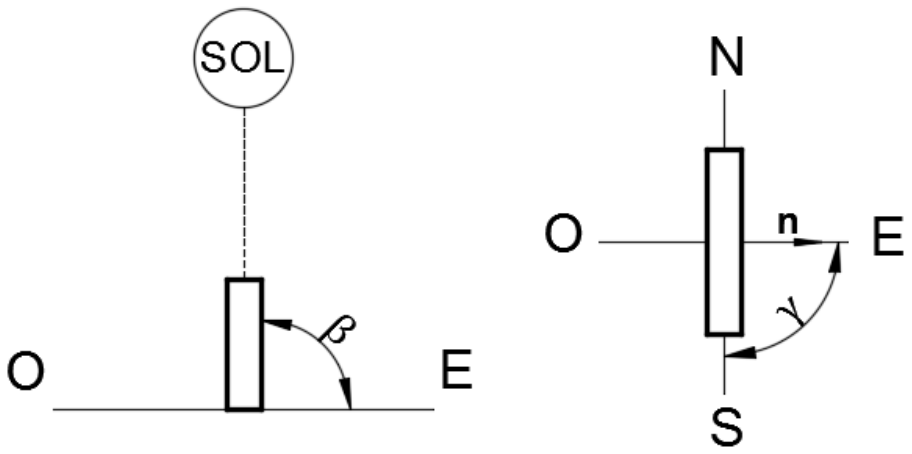


Figura 102 Ángulos que describen la posición del equipo en las coordenadas geográficas. Fuente: El Autor.

El ángulo δ es conocido como declinación y se obtiene mediante (Duffie & Beckman, 2013):

$$\delta = 23.45sen\left(360\frac{284+n}{365}\right) \tag{3.13}$$

En donde n corresponde al n-ésimo día del año. El 20 de marzo de 2016 corresponde al día 79. El ángulo horario ω se calcula a través de:

$$\omega = 15(t-12) \tag{3.14}$$

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 28:

Tabla 28
Ángulo de incidencia

Tiempo h	ω	**cosθ**	θ
8	-60°	0.866	30.014°
10	-30°	0.499	60.006°
11	-15°	0.258	75.007°
12	0°	0	90°
13	15°	-0.258	104.992°
14	30°	-0.499	119.993°
16	60°	-0.866	149.985°

Como se puede ver, el ángulo de incidencia para la tarde supera los 90°, con lo cual el Sol estará detrás de la superficie sobre la cual se proyectó su normal. Con estos resultados se calculó la irradiancia al interior del fotobioreactor empleando las ecuaciones 3.7 y 3.7, y los valores de concentración de biomasa obtenidos anteriormente. Los resultados se muestran en la Tabla 29:

Tabla 29
Irradiancia dentro del fotobioreactor tanto en la rama izquierda como en la rama derecha

Tiempo h	C_{Bx} $Kg_x m^{-3}$	E_{tc}	E_{td}	Rama izquierda $q_{RFA,c}$ Wm^{-2}	Rama izquierda $q_{RFA,d}$ Wm^{-2}	Rama izquierda q_{RFA} Wm^{-2}	Rama derecha $q_{RFA,c}$ Wm^{-2}	Rama derecha $q_{RFA,d}$ Wm^{-2}	Rama derecha q_{RFA} Wm^{-2}
8	0.200	34.646	60.001	224.933	56.204	281.137	142.604	31.113	173.716
10	0.231	69.447	69.433	525.503	100.543	626.046	276.675	64.857	341.532
11	0.249	144.358	74.691	547.503	108.293	655.796	321.764	76.431	398.195
12	0.268								
13	0.288	167.051	86.432	387.645	86.947	474.592	596.938	131.837	728.775
14	0.310	92.996	92.978	294.166	65.729	359.895	575.012	134.032	709.044
16	0.359	62.128	107.593	226.087	56.217	282.304	387.645	80.947	468.592

Tabla 30
Diferencia entre el campo de irradiancia obtenido con el modelo de aproximación de dos fluxes y el método de las ordenadas discretas al interior del fotobioreactor

	Rama izquierda				Rama derecha			
t iempo h	**Two fluxes q Wm^{-2}**	**Ordenaas discretas q Wm^{-2}**	**E. Abs. Wm^{-2}**	**E. Rel. %**	**Two fluxes q Wm^{-2}**	**Ordenaas discretas q Wm^{-2}**	**E. Abs. Wm^{-2}**	**E. Rel. %**
8	281,137	268,000	13,137	4,902	173,716	165,000	8,716	5,283
10	626,046	612,000	14,046	2,295	341,532	337,000	4,532	1,345
11	655,796	643,000	12,796	1,990	398,195	388,000	10,195	2,628
13	474,592	459,000	15,592	3,397	728,775	717,000	11,775	1,642
14	359,895	346,000	13,895	4,016	709,044	691,000	18,044	2,611
16	282,304	276,000	6,304	2,284	468,592	456,000	12,592	2,761

Debe notarse en la Tabla 29 que no se han calculado los valores para las 12H00, debido a que en este momento el ángulo de incidencia es 90°, lo que

produce una indeterminación en las ecuaciones 3.7 y 3.10 al tomar el coseno un valor de 0. Los datos obtenidos con el modelo de aproximación de dos fluxes se contrastarán con los obtenidos con el método de las ordenadas discretas que emplea el módulo FLUENT para resolver el campo de irradiancia:

La comparación de los resultados entre el método de ordenadas discretas y el de dos fluxes se muestra en la Tabla 30. En la rama izquierda el error relativo porcentual máximo es del 4% y en la derecha el 5%, obtenidos ambos a las 08H00. El error relativo mínimo para la rama izquierda es de alrededor del 2% mientras que en la rama derecha es del 1.64%. Esto demuestra que el modelo matemático obtenido en este trabajo y resuelto con el método de las ordenadas discretas predice con una desviación máxima del 5% con respecto al modelo de aproximación de dos fluxes. En las Figuras 103 y 104 se muestra el comportamiento antes descrito en ambas ramas del fotobioreactor.

Es importante notar que los valores predichos por el modelo de esta investigación son menores a los predichos por el modelo de aproximación de dos fluxes. Esto puede ser debido a que este último no considera que el material del cual está constituida la superficie puede absorber y reflejar parte de la energía radiante incidente. También es importante destacar que las mayores desviaciones con respecto al modelo de dos fluxes se dan entre las 11H00 y 13H00 según lo muestran las Figuras 103 y 104, lo que probaría que mientras más alto es el valor de la irradiancia incidente (ver tabla 16) más error se presenta al no considerar el material de la superficie.

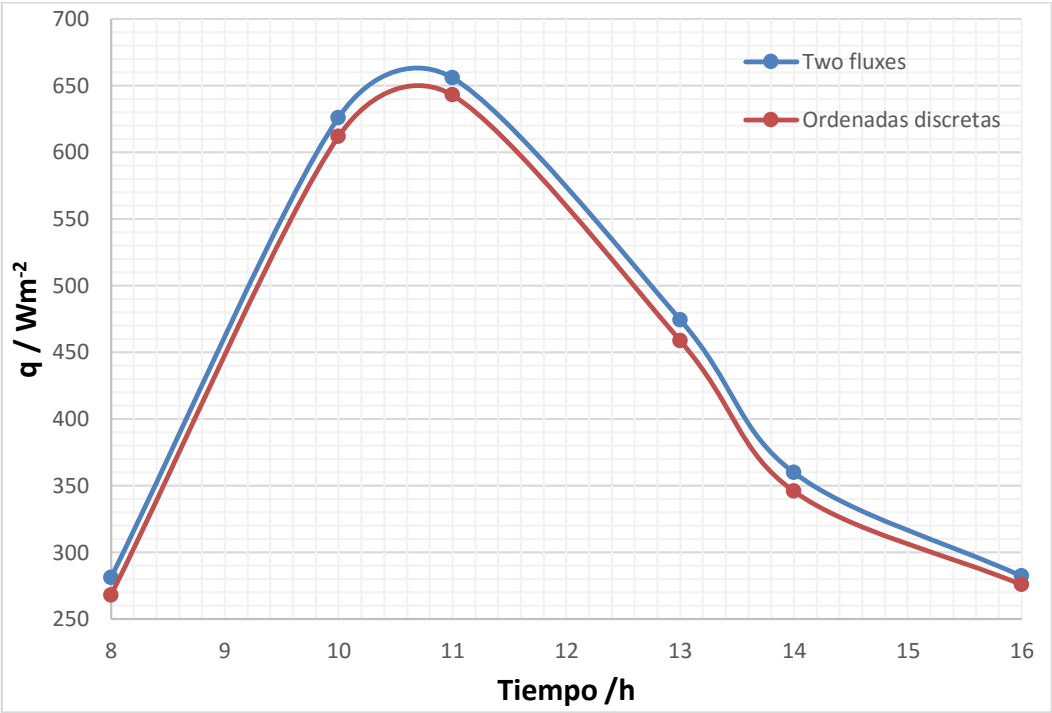


Figura 103 Comparación de los valores de irradiancia obtenidos con el modelo de aproximación de dos fluxes y el modelo matemático propuesto en esta investigación para la rama izquierda del fotobioreactor. Fuente: El Autor.

El modelo de aproximación de dos fluxes ha sido probado en diferentes aplicaciones y con diferentes microorganismos como puede observarse en las referencias. Para observar cuanto puede desviarse de los datos experimentales, se presentan las Figuras 105-107. En estas se muestra la gráfica de la irradiancia relativa (q_{RFA}/q_{RI}) en donde q_{RI} representa la irradiancia incidente versus la distancia normalizada z/L. La radiación fue provista empleando lámparas artificiales localizadas a 80mm del fotobioreactor de placa plana (solo de un lado). Para medir la intensidad de la irradiancia incidente, se empleó un sensor de coseno plano, un sensor esférico y el método de reacción del actinómetro. Los valores obtenidos fueron 310±20 μmol $m^{-2}s^{-1}$, 440±30 μmol $m^{-2}s^{-1}$ y 440±30 μmol $m^{-2}s^{-1}$ respectivamente, por lo cual se tomó este último para los cálculos (Pottier et al., 2005).

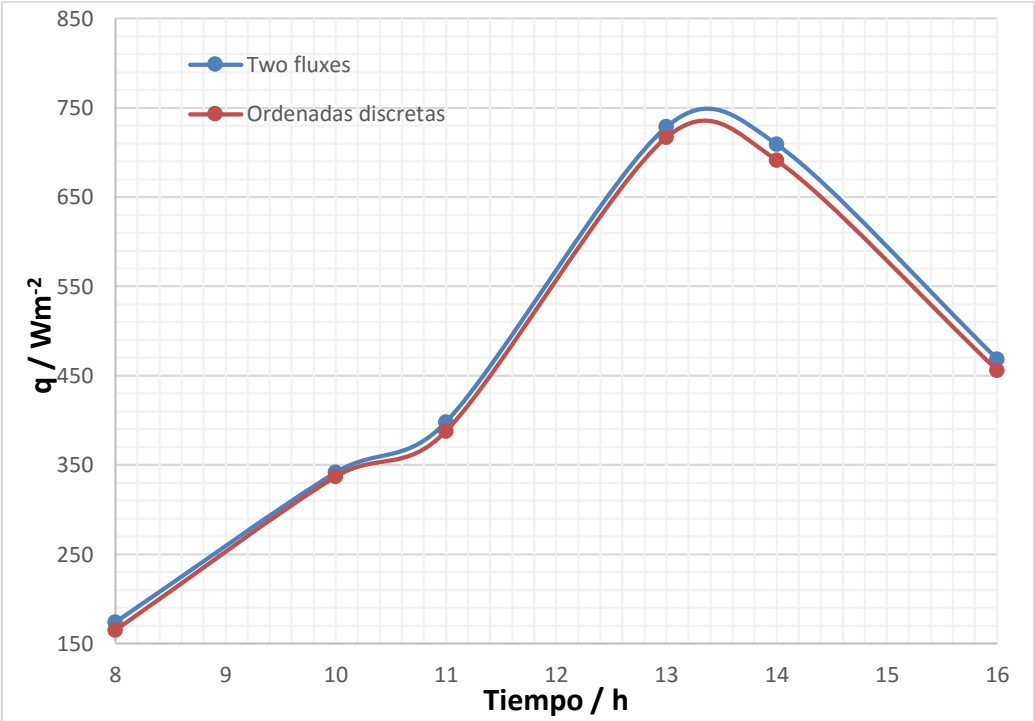


Figura 104 Comparación de los valores de irradiancia obtenidos con el modelo de aproximación de dos fluxes y el modelo matemático propuesto en esta investigación para la rama izquierda del fotobioreactor. Fuente: El Autor.

El microorganismo empleado fue la Chlamydomonas Reinhardtii en concentraciones de 0.09gL^{-1}, 0.25gL^{-1} y 0.49gL^{-1}. Para medir la distribución de luz al interior del fotobioreactor de placa plana en el medio de cultivo se empleó un sensor esférico cuántico de 3mm de diámetro. En las Figuras 105-107 se muestra que los puntos experimentales se encuentran bastante próximos a los valores predichos por el modelo (línea sólida negra) (Pottier et al., 2005).

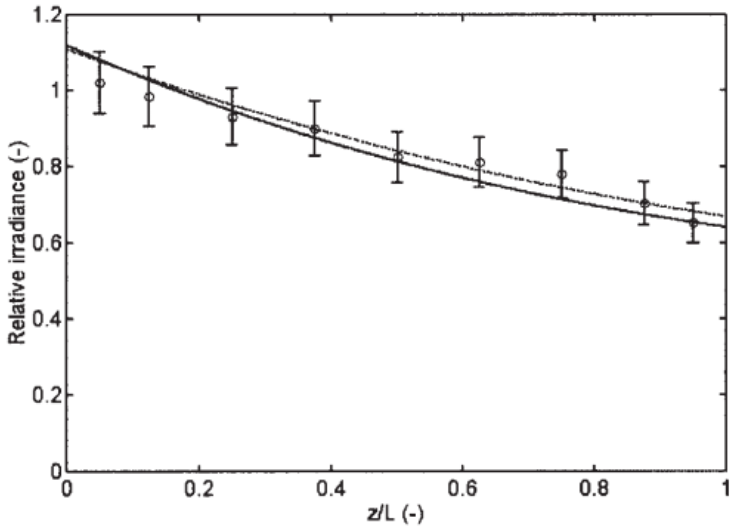


Figura 105 La línea sólida negra muestra la radiación en el rango fotosintéticamente activo predicho por el modelo y los puntos los datos experimentales, con C_{Bx} de 0.09 gL^{-1} obtenidos con un sensor cuántico esférico de 3mm de diámetro. Fuente: Pottier et. al 2005.

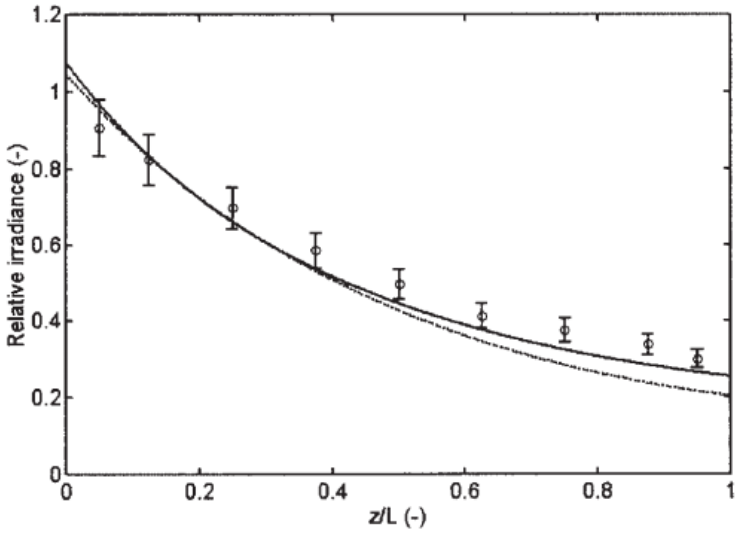


Figura 106 La línea sólida negra muestra la radiación en el rango fotosintéticamente activo predicho por el modelo y los puntos los datos experimentales, con C_{Bx} de 0.25 gL^{-1} obtenidos con un sensor cuántico esférico de 3mm de diámetro. Fuente: Pottier et. al 2005.

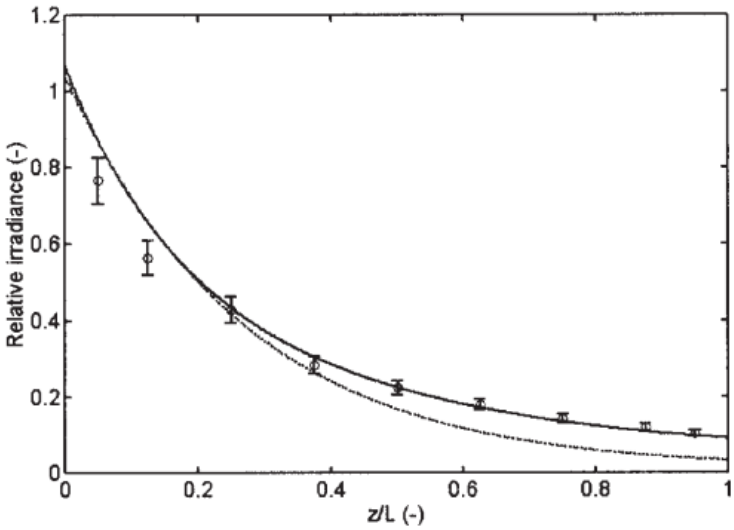


Figura 107 La línea sólida negra muestra la radiación en el rango fotosintéticamente activo predicho por el modelo y los puntos los datos experimentales, con C_{Bx} de 0.49 gL^{-1} obtenidos con un sensor cuántico esférico de 3mm de diámetro. Fuente: Pottier et. al 2005.

Además del experimento descrito, otras investigaciones apoyadas en la descrita han empleado el modelo de aproximación de dos fluxes, con el microorganismo *Arthrospira Platensis* con radiación solar (J Pruvost et al., 2011; Jeremy Pruvost et al., 2012) . Se puede entonces concluir que el modelo matemático propuesto en esta investigación predice la tendencia del comportamiento de la distribución de luz al interior del fotobioreactor con una precisión adecuada, comparado con el modelo de aproximación de dos fluxes. Debido a que los valores de irradiancia están próximos, es de esperarse también que los datos cinéticos no varíen sustancialmente.

3.5.2 Análisis de convergencia del modelo

La primera prueba para validar los modelos matemáticos fue la convergencia en las diferentes corridas experimentales. Aunque no existe una

métrica universal para juzgar la convergencia, se recomienda que los residuales decrezcan a 10^{-3} para todas las ecuaciones de conservación excepto para la energía, turbulencia y radiación, cuyo valor debe situarse alrededor de 10^{-5} (Ansys, 2014). Aunque no definitivo, este criterio es una buena guía para establecer si existe o no convergencia de los modelos matemáticos. A continuación, se presenta las gráficas de los residuales para los experimentos ejecutados:

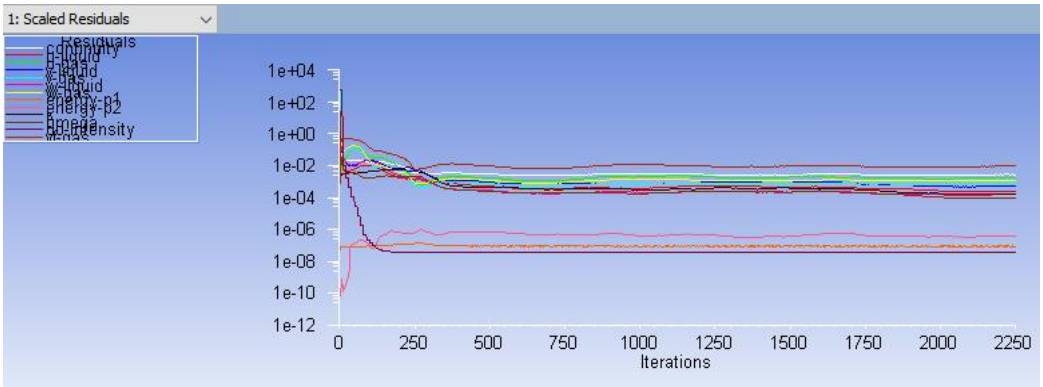


Figura 108 Residuales para el experimento 08E. Fuente: El Autor.

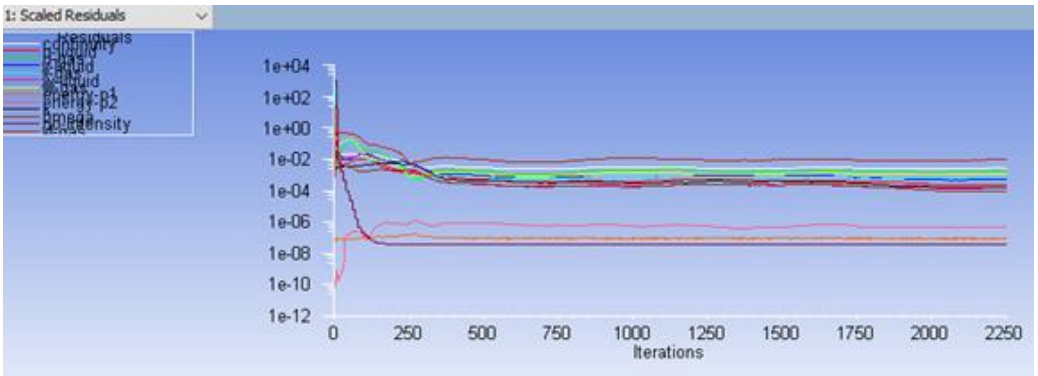


Figura 109 Residuales para el experimento 10E. Fuente: El Autor.

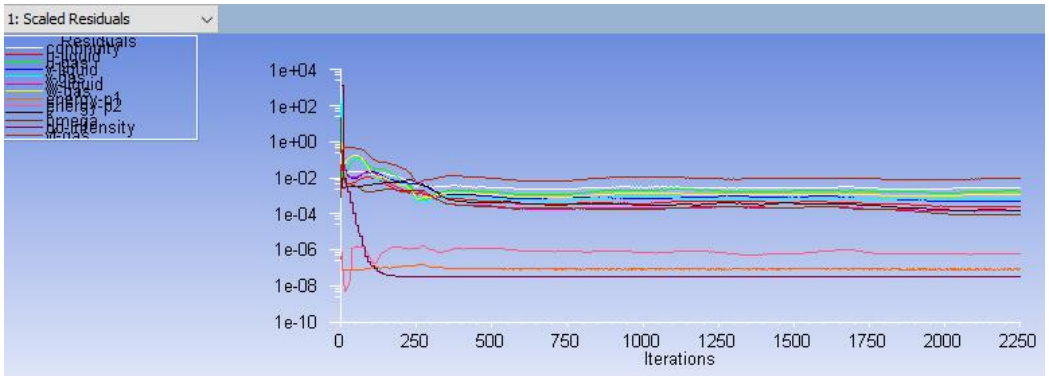


Figura 110 Residuales para el experimento 11E. Fuente: El Autor.

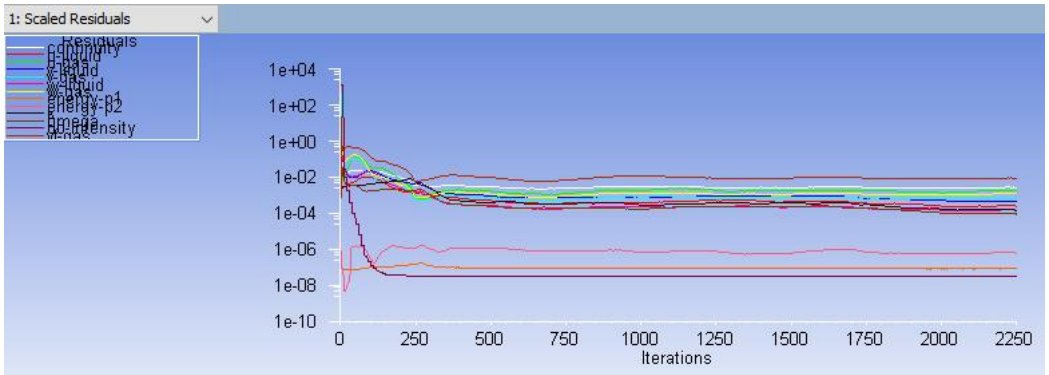


Figura 111 Residuales para el experimento 12E. Fuente: El Autor.

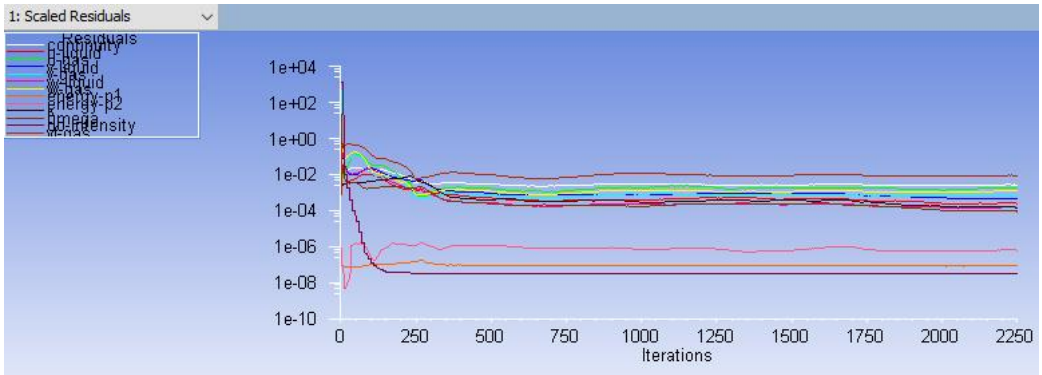


Figura 112 Residuales para el experimento 13E. Fuente: El Autor.

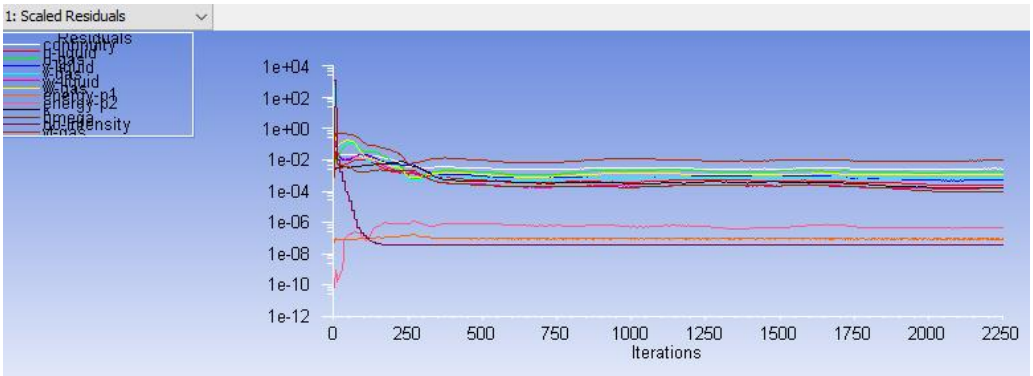


Figura 113 Residuales para el experimento 14E. Fuente: El Autor.

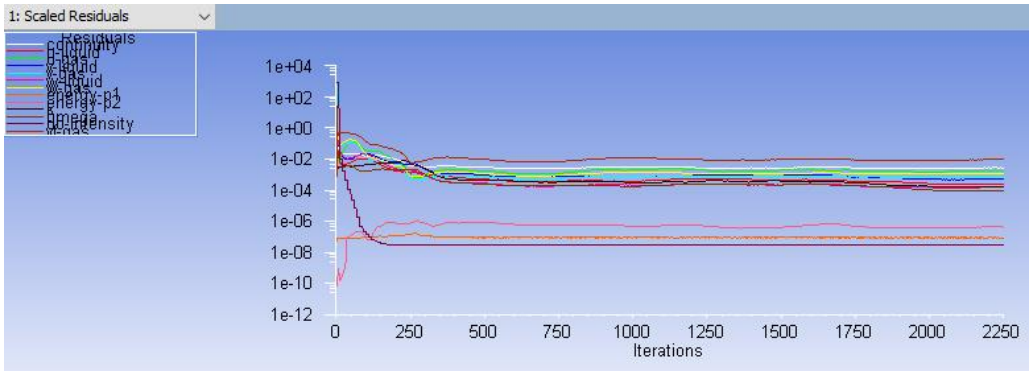


Figura 114 Residuales para el experimento 14E. Fuente: El Autor.

Observando las Figuras 108-114, los residuales de las ecuaciones de conservación oscilan alcanzan valores entre los residuales de 10^{-2} a 10^{-3}, y los de las ecuaciones de energía, radiación y turbulencia alcanzan valores cercanos a 10^{-6}, cumpliendo con el criterio de convergencia estipulado por ANSYS. Sin embargo. Las gráficas de residuales no presentan mayores variaciones a partir de las 500 iteraciones aproximadamente y convergen a las 2250 iteraciones. Adicional a esto, estas gráficas no se diferencian entre ellas, probando la robustez de la solución a pesar de modificar las condiciones de radiación.

Para confirmar el criterio de robustez, las ecuaciones fueron resueltas en estado transitorio. Mediante un proceso de aleatorización, el experimento se

escogió realizar a las 12H00. Los resultados que se muestran a continuación se realizaron bajo las mismas condiciones iniciales y de frontera, simulando 5min con un número de pasos de tiempo de 600, tamaño del paso de 0.5s y un número de iteraciones por paso de tiempo de 10:

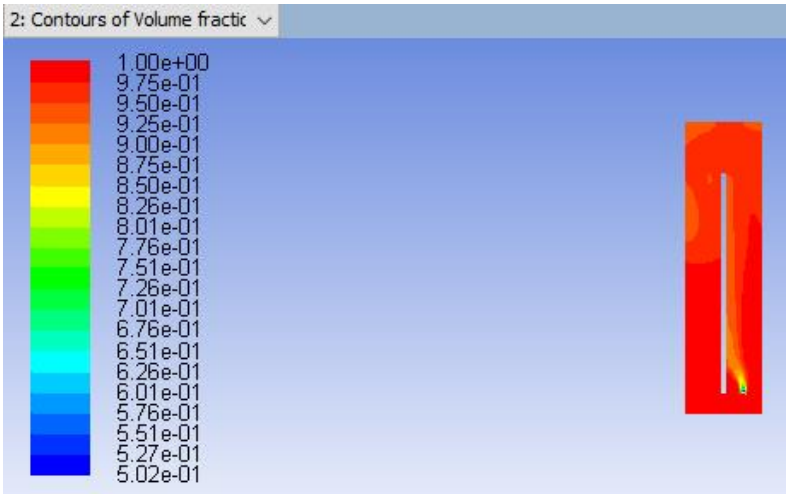


Figura 115 Contornos de fracción volumétrica de líquido (12T). Fuente: El Autor.

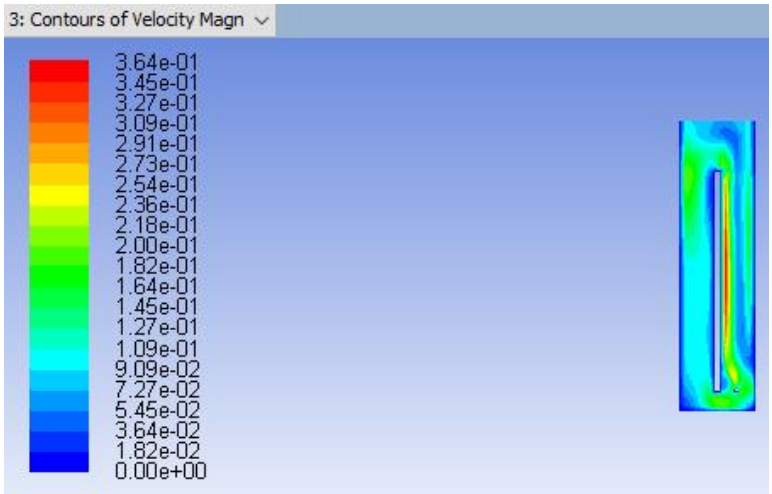


Figura 116 Contornos de velocidad del líquido en ms^{-1} (12T). Fuente: El Autor.

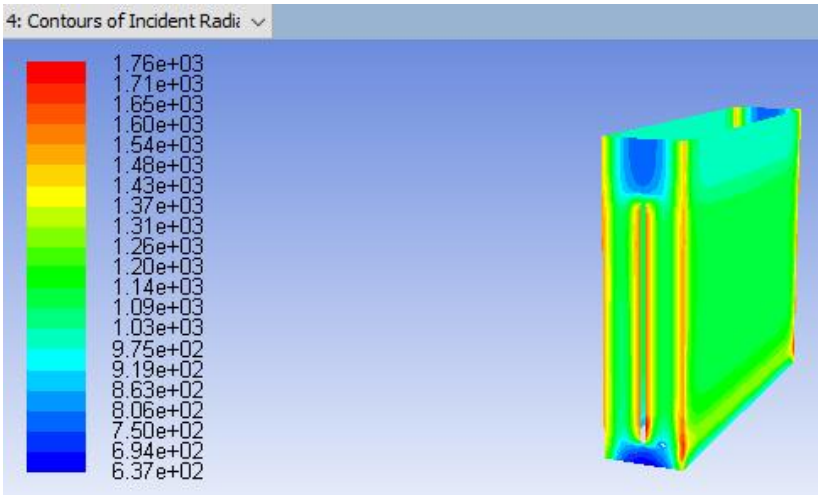


Figura 117 Contornos de irradiancia en Wm-2 (12T). Fuente: El Autor.

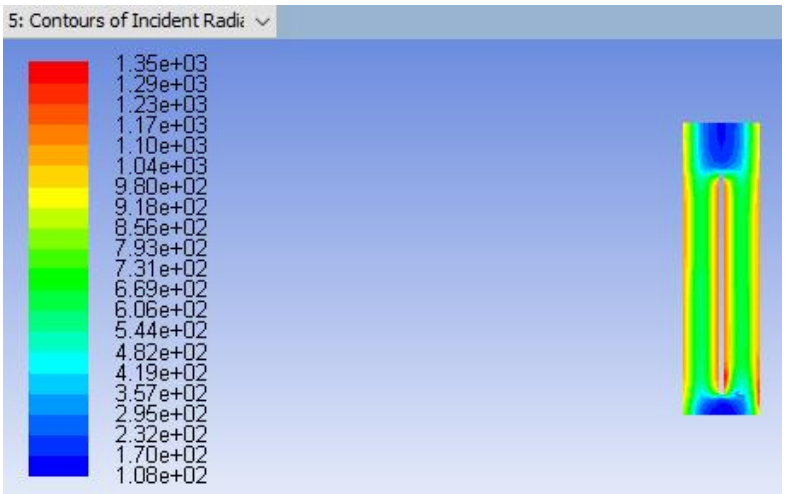


Figura 118 Contornos de irradiancia en Wm^{-2} (12T). Fuente: El Autor.

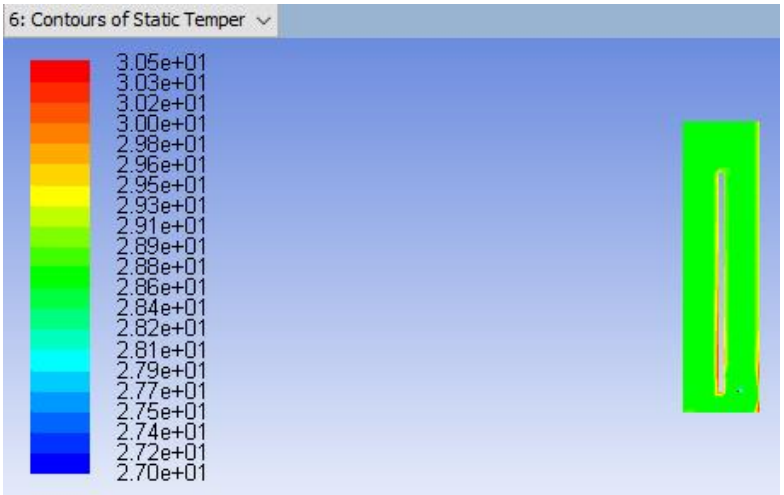


Figura 119 Contornos de irradiancia en Wm^{-2} (12T). Fuente: El Autor.

Las Figuras 115-119 muestran claramente las semejanzas entre este experimento y su homólogo en estado estacionario. Los contornos de fracción volumétrica y de velocidad casi toman la forma exacta de la simulación estacionaria. En cuanto a los de radiación y temperatura, a los 5min todavía no alcanzan los valores del estado estacionario, pero muestran semejanzas en las etapas iniciales de simulación. Si se dejara transcurrir más tiempo de simulación, es probable que terminen con los mismos contornos que el experimento 12E. Esto nos da una idea del tiempo estimado para que el sistema del fotobioreactor de placa plana pueda alcanzar el estado estacionario.

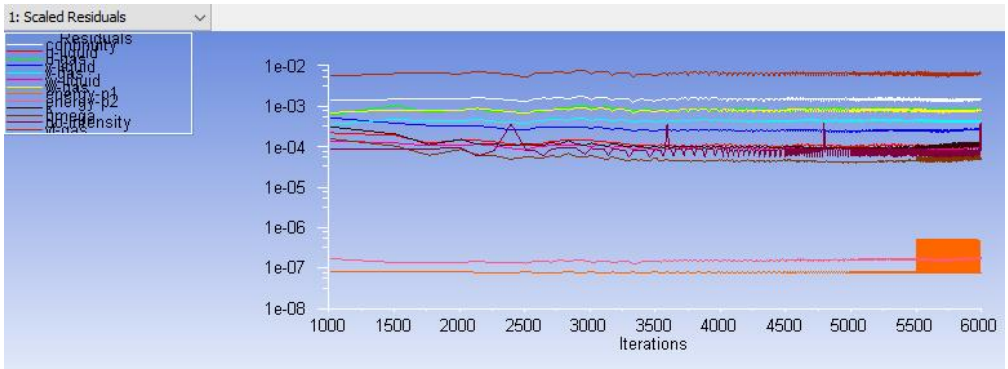


Figura 120 Residuales para el experimento 12T. Fuente: El Autor.

La Figura 120 muestra la convergencia de los residuales. Están alrededor de los valores recomendados por ANSYS, y además se nota que las variaciones entre las 10 iteraciones correspondientes a cada paso de tiempo en la convergencia al final son prácticamente despreciables por lo cual aparecen regiones sólidas al final de las líneas, señal de que se ha alcanzado la convergencia.

CAPÍTULO IV

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1 Conclusiones

El presente trabajo de investigación ha permitido conocer la interacción entre los distintos fenómenos de transporte que se presentan en las superficies y al interior del fotobioreactor de placa plana, pudiendo determinar la tendencia del comportamiento del sistema. Las siguientes son las conclusiones que se han podido extraer del modelado y simulación realizados:

- Los experimentos numéricos fueron realizados para el día 20 de marzo de 2016 (equinoccio), entre las 08H00 y 16H00, para los cuales se programaron condiciones iniciales y de frontera. En las simulaciones en estado estacionario, las ecuaciones de conservación, turbulencia y de transporte radiativo convergen a las 2250 iteraciones. En el caso del estado transitorio, se logró simular 5min de la dinámica del fotobioreactor de placa plana, con 600 pasos de tiempo, 10 iteraciones por paso de tiempo y un tamaño de paso de 0.5s.
- Se modeló la dinámica de fluidos al interior del fotobioreactor de placa plana, considerando al medio líquido como continuo y a las burbujas de gas como medio disperso, es decir, un fluido bifásico disperso.
- La fracción volumétrica de gas en el líquido es mayor cerca del sparger, y va disminuyendo conforme el gas abandona el dominio experimental. Se alcanzaron porcentajes entre el 92.5% y 95% de fracción volumétrica de líquido en la parte superior del fotobioreactor, lo que da cuenta de que entre el 5 y el 7.5% en volumen de gas se encuentra presente en esta zona.
- El gas disperso en líquido, permite que este pueda circular alrededor de la placa central, con velocidades considerables que están en el

rango de $1ms^{-1}$ a $1.2ms^{-1}$, es decir un 80% y un 83.33% superiores a la velocidad de entrada del gas. También, debido a las corrientes turbulentas, se forman remolinos, especialmente en la parte superior del equipo alcanzando velocidades aproximadas de $2.34ms^{-1}$. En la parte inferior del fotobioreactor se presenta un fenómeno tipo Venturi, en donde se produce un aumento de la velocidad, llegando a valores de $2.20ms^{-1}$, por la disminución de presión debido a que la placa central está más cerca de la base del equipo formando una especie de callejón estrecho.

- El modelo de turbulencia k-ω SST ha demostrado no presentar problemas de convergencia bajo las condiciones de los experimentos numéricos, llegando a describir inclusive la formación de un camino de burbujas que se pegan a la placa central, que presenta una velocidad de $3.18ms^{-1}$, siendo 93.71% más alta que la velocidad de ingreso del gas.
- Se obtuvo el campo de irradiancia incidente en el fotobioreactor de placa plana considerando las componentes difusa y dispersa de la radiación solar, determinadas a través de la calculadora solar de FLUENT, para la ciudad de Pedernales ubicada en una Latitud de 0.0701° y una Longitud de -80.0536°. Se observó que entre las 12H00 y 13H00 se presentan los picos máximos de irradiancia total ($1237.930Wm^{-2}$ y $1237.886Wm^{-2}$ respectivamente). Esta irradiancia incide en las superficies exteriores del fotobioreactor de placa plana.
- De especial interés en esta investigación fue una región del espectro de la radiación solar conocida como Radiación Fotosintéticamente Activa en una banda de longitud de onda entre los 400nm y 700nm, correspondientes a una porción del espectro electromagnético en donde las cianobacterias pueden desarrollarse. Se obtuvo la distribución de irradiancia solar entre 400nm y 700nm en una sección transversal del fotobioreactor de placa plana, resolviendo la ecuación

de transporte radiativo mediante el método de ordenadas discretas. Aquí se observó la formación de dos zonas: una de mayor y otra de menor irradiancia, fenómeno conocido como el Fashing Light Effect en donde las cianobacterias presentaron diferentes velocidades de crecimiento. Los mayores valores de irradiancia entre 400nm y 700nm se dieron a las 12H00, igualándose los valores en ambas zonas, alcanzando los 711wm^{-2}.

- Al calcular la evolución de la concentración con el tiempo, mediante la ecuación de Monod, se determinó que el crecimiento de la cianobacteria *Arthrosphira Platensis* está en una fase de saturación lumínica, lo que implicó que la tasa específica de crecimiento fuese independiente del flux de fotones, es decir constante en un valor de 0.073h^{-1}, provocando esto que la velocidad de crecimiento fuera directamente proporcional a la concentración de la cianobacteria en el medio de cultivo. Esto provocó también que las concentraciones obtenidas en la rama izquierda y derecha del fotobioreactor fueran iguales, partiendo de 0.2kg$_x$m^{-3}, incrementándose este valor hasta las 16H00 en un 44.28%.
- Al ingresar los valores de concentración anteriores en la ecuación cinética de crecimiento de la cianobacteria en estudio, se obtuvieron las gráficas que describen como evoluciona la velocidad de reacción con el tiempo. Se mostró que, desde las 08H00 hasta las 16H00, el crecimiento es continuo pero menor con respecto a los que sucedería si el crecimiento se ubicara en una fase de crecimiento limitado por la luz. En la rama derecha, la menor velocidad de crecimiento obtenida fue de 0.00570 mg$_x$m^{-3}s^{-1}, incrementándose hasta 0.01117 mg$_x$m^{-3}s^{-1}, es decir, un aumento del 48.97% hasta las 16H00. En cuanto a la rama izquierda, la menor velocidad de crecimiento obtenida fue de 0.00600 mg$_x$m^{-3}s^{-1}, incrementándose hasta 0.01080 mg$_x$m^{-3}s^{-1}, es decir, un aumento del 44.44% hasta las 16H00.

- Se validó el modelo matemático obtenido con el modelo de aproximación de dos fluxes. Para ello, se compararon los valores de irradiancia obtenidos en el interior del fotobioreactor por cada uno de los modelos. El error relativo porcentual máximo alcanzado fue de 5%. Al mismo tiempo se analizó que el modelo de aproximación de dos fluxes predice eficientemente los datos experimentales, siendo además ampliamente utilizado en investigaciones relacionadas con fotobioreactores, por lo cual se concluyó que el modelo matemático desarrollado puede emplearse para predecir la tendencia de la distribución lumínica al interior del fotobioreactor de placa plana.
- Se probó que los residuales están cerca de 10^{-3} para las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento lineal, y cercanos a 10^{-5} para las ecuaciones de conservación de energía, radiación y turbulencia cumpliendo la solución con el criterio de convergencia de ANSYS.
- Se probó la robustez de la solución mediante una simulación en estado transitorio, en un periodo de 5min, obteniéndose soluciones parecidas a las obtenidas en estado estacionario.
- Los resultados del modelado matemático son válidos solamente para las condiciones de radiación solar de la localidad de Pedernales y para el microorganismo *Arthrospira Platensis*.

4.2 Recomendaciones

Se presentan a continuación las siguientes recomendaciones:

- Realizar simulaciones en más días a lo largo del año, para ver la influencia de los cambios de radiación solar en el crecimiento de las cianobacterias.

- Refinar aún más la malla, para ver si existe diferencia en las soluciones obtenidas.
- Cotejar con un fotobioreactor experimental de dimensiones similares, en donde se pueda analizar el crecimiento de las cianobacterias bajo condiciones similares a las de los experimentos numéricos.

REFERENCIAS

CAPÍTULO I

Andersson, B., Andersson, R., Håkansson, L., Mortensen, M., Sudiyo, R., & Van Wachem, B. (2011). *Computational fluid dynamics for engineers*: Cambridge University Press.

Ansys, A. F. (2011). 14.0 Theory Guide. *ANSYS inc*, 390-391.

Badalassi, V., Ceniceros, H., & Banerjee, S. (2003). Computation of multiphase systems with phase field models. *Journal of Computational Physics, 190*(2), 371-397.

Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2002). Transport phenomena. 2nd. *New York*.

Borgnakke, C., & Sonntag, R. E. (2009). *Fundamentals of thermodynamics*: Wiley.

Bourloutski, E., & Sommerfeld, M. (2004). Euler/Lagrange calculations of gas-liquid-solid-flows in bubble columns with phase interaction *Bubbly Flows* (pp. 243-259): Springer.

Clift, R., Grace, J. R., & Weber, M. E. (2005). *Bubbles, drops, and particles*: Courier Corporation.

Crowe, C. T., Schwarzkopf, J. D., Sommerfeld, M., & Tsuji, Y. (2011). *Multiphase flows with droplets and particles*: CRC press.

Deen, W. M. (1998). *Analysis of Transport Phenomena, Topics in Chemical Engineering* (Vol. 3): Oxford University Press, New York.

Dehbi, A. (2008). Turbulent particle dispersion in arbitrary wall-bounded geometries: A coupled CFD-Langevin-equation based approach. *International Journal of Multiphase Flow, 34*(9), 819-828.

Delhaye, J., & Achard, J. (1976). *On the averaging operators introduced in two-phase flow modeling.* Paper presented at the Proceedings CSNI Specialist Meeting in transient two-phase flow.

Delhaye, J., & Achard, J. (1978). *On the use of averaging operators in two phase flow modeling: Thermal and Aspects of Nuclear Reactor Safty, 1: Light Water Reactors.* Paper presented at the ASME winter meeting.

Demirel, Y. (2007). *Nonequilibrium thermodynamics: transport and rate processes in physical, chemical and biological systems*: Elsevier.

Eu, B. C. (2002). *Generalized Thermodynamics: Thermodynamics of Irreversible Processes and Generalized Hydrodynamics* (Vol. 124): Springer Science & Business Media.

Faghri, A., & Zhang, Y. (2006). *Transport phenomena in multiphase systems*: Academic Press.

Hanratty, T. J. (2013). *Physics of Gas-liquid Flows*: Cambridge University Press.

Jakobsen, H. A. (2008). Chemical reactor modeling. *Multiphase Reactive Flows, Berlin, Germany: Springer-Verlag*.

Johnson, R. W. (1998). *Handbook of fluid dynamics*: Crc Press.

Kleinstreuer, C. (2003). *Two-phase flow: theory and applications*: CRC Press.

Krueger, B., Wirtz, S., & Scherer, V. (2015). Measurement of drag coefficients of non-spherical particles with a camera-based method. *Powder Technology, 278*, 157-170.

Lee, H. (2008). *Compressible multi phase and multi species flow closure model and turbulent analysis for Rayleigh-Taylor instability*: ProQuest.

Li, A., & Ahmadi, G. (1992). Dispersion and deposition of spherical particles from point sources in a turbulent channel flow. *Aerosol science and technology, 16*(4), 209-226.

Mase, G. T., Smelser, R. E., & Mase, G. E. (2009). *Continuum mechanics for engineers*: CRC press.

McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. (2007). *Unit operations of chemical engineering* (Vol. 5): McGraw-Hill New York.

Menter, F. R. (1994). Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA journal, 32*(8), 1598-1605.

Muñoz-Cobo, J. L., Chiva, S., Essa, M. A. A. E. A., & Mendes, S. (2012). Simulation of bubbly flow in vertical pipes by coupling Lagrangian and Eulerian models with 3D random walks models: Validation with experimental data using multi-sensor conductivity probes and Laser Doppler Anemometry. *Nuclear Engineering and Design, 242*, 285-299.

Olivella, X. O., & de Saracíbar Bosch, C. A. (2002). *Mecánica de medios continuos para ingenieros*: Univ. Politèc. de Catalunya.

Pandey, A. (2011). *Biofuels: alternative feedstocks and conversion processes*: Academic Press.

Posten, C., & Walter, C. (2013). *Microalgal biotechnology: potential and production*: Walter de Gruyter.

Ranade, V. V. (2001). *Computational flow modeling for chemical reactor engineering* (Vol. 5): Academic press.

Reddy, J. N. (2013). *An introduction to continuum mechanics*: Cambridge University Press.

Reyna-Velarde, R., Cristiani-Urbina, E., Hernández-Melchor, D. J., Thalasso, F., & Cañizares-Villanueva, R. O. (2010). Hydrodynamic and mass transfer characterization of a flat-panel airlift photobioreactor with high light path. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 49*(1), 97-103.

Sadd, M. H. (2009). *Elasticity: theory, applications, and numerics*: Academic Press.

Sommerfeld, M. (2000). Theoretical and experimental modelling of particulate flows. *Lecture series, 6*, 3-7.

Suzzi, D., Radl, S., & Khinast, J. (2009). Validation of Euler-Euler and Euler-Lagrange approaches in the simulation of bubble swarms. *Chemical Engineering Transactions, 17*, 585-590.

Tennekes, H., & Lumley, J. L. (1972). *A first course in turbulence*: MIT press.

Tester, J. W., & Modell, M. (1997). *Thermodynamics and its Applications*: Prentice Hall PTR.

Tomiyama, A., Žun, I., Higaki, H., Makino, Y., & Sakaguchi, T. (1997). A three-dimensional particle tracking method for bubbly flow simulation. *Nuclear Engineering and Design, 175*(1), 77-86.

Wilkes, J. O. (2006). *Fluid Mechanics for Chemical Engineers with Microfluidics and CFD*: Pearson Education.

Wörner, M. (2003). *A compact introduction to the numerical modeling of multiphase flows*: Forschungszentrum Karlsruhe.

Yeoh, G. H., & Tu, J. (2009). *Computational techniques for multiphase flows*: Elsevier.

Yunus, A. C., & Cimbala, J. M. (2006). Fluid mechanics: fundamentals and applications. *International Edition, McGraw Hill Publication*, 185-201.

CAPÍTULO II

Aboal, M., Puig, M., Ríos, H., & López-Jiménez, E. (2000). Relationship between macroinvertebrate diversity and toxicity of Cyanophyceae (Cyanobacteria) in some streams from eastern Spain. *PROCEEDINGS-INTERNATIONAL ASSOCIATION OF THEORETICAL AND APPLIED LIMNOLOGY, 27*(1), 555-559.

Aboal, M., Puig, M. Á., & Asencio, A. D. (2005). Production of microcystins in calcareous Mediterranean streams: the Alharabe River, Segura River basin in south-east Spain. *Journal of Applied Phycology, 17*(3), 231-243.

Ali, S. K., & Saleh, A. M. (2012). Spirulina-an overview. *Int J Pharm Pharm Sci, 4*(3), 9-15.

ASHRAE. (2001). *Fundamentals* (Vol. 111).

Balloni, W., Tomaselli, L., Giovannetti, L., & Margheri, M. (1980). Biologia fondamentale del genere Spirulina. *Prospettive della coltura di Spirulina in Italia. Consiglio Nazionale delle Ricerche, Rome*, 49-85.

Becker, E. W. (1994). *Microalgae: biotechnology and microbiology* (Vol. 10): Cambridge University Press.

Bergman, T. L., Incropera, F. P., & Lavine, A. S. (2011). *Fundamentals of heat and mass transfer*: John Wiley & Sons.

Blanken, W., Cuaresma, M., Wijffels, R. H., & Janssen, M. (2013). Cultivation of microalgae on artificial light comes at a cost. *Algal Research, 2*(4), 333-340.

Cengel, Y. A., & Ghajar, A. (2011). Heat and Mass Transfer (A Practical Approach, SI Version): McGraw-Hill Education.

Cornet, J., Dussap, C., & Gros, J. (1994). Conversion of radiant light energy in photobioreactors. *AIChE Journal, 40*(6), 1055-1066.

Cornet, J. F., & Dussap, C. G. (2009). A simple and reliable formula for assessment of maximum volumetric productivities in photobioreactors. *Biotechnology progress, 25*(2), 424-435.

Chui, E., & Raithby, G. (1993). Computation of radiant heat transfer on a nonorthogonal mesh using the finite-volume method. *Numerical Heat Transfer, 23*(3), 269-288.

Dauchet, J., Cornet, J.-F., Gros, F., Roudet, M., & Dussap, C.-G. (2016). Photobioreactor Modeling and Radiative Transfer Analysis for Engineering Purposes. *Advances in Chemical Engineering*.

Duffie, J. A., & Beckman, W. A. (2006). Solar engineering of thermal processes. *John Willey & Sons, New York*.

Farges, B., Laroche, C., Cornet, J. F., & Dussap, C. G. (2009). Spectral kinetic modeling and long-term behavior assessment of Arthrospira platensis growth in photobioreactor under red (620 nm) light illumination. *Biotechnology progress, 25*(1), 151-162.

Fitzpatrick, R. (2008). *Maxwell's Equations and the Principles of Electromagnetism*: Jones & Bartlett Publishers.

García, M., & Arribas, L. (1999). Energía solar fotovoltaica y cooperación al desarrollo. *Editorial IEPALA. Madrid, España, 201*.

Grant, W. (2006). Alkaline environments and biodiversity. *Extremophiles; Encyclopedia of Life Support Systems (EOLSS). Oxford: EOLSS publishers*.

Howell, J. R., Menguc, M. P., & Siegel, R. (2010). *Thermal radiation heat transfer*: CRC press.

Iltis, A. (1968). Tolerance de salinite de Spirulina platensis (Gom.) Geitl.,(Cyanophyta) dans les mares natronees du Kanem (Tchad). *Cahiers ORSTOM. Série Hydrobiologie, 2*(3-4), 119-125.

Janssen, M. (2016). Microalgal Photosynthesis and Growth in Mass Culture. *Advances in Chemical Engineering*.

Jia, X.-H., Shi, D.-J., Kang, R.-J., Li, H.-M., Liu, Y., An, Z.-Z., . . . Du, G.-S. (2008). Allelopathic inhibition by Scenedesmus obliquus of photosynthesis and growth of Microcystis aeruginosa *Photosynthesis. Energy from the Sun* (pp. 1339-1342): Springer.

Ke, B. (2001). *Photosynthesis photobiochemistry and photobiophysics* (Vol. 10): Springer Science & Business Media.

Kebede, E., & Ahlgren, G. (1996). Optimum growth conditions and light utilization efficiency of Spirulina platensis (= Arthrospira fusiformis)(Cyanophyta) from Lake Chitu, Ethiopia. *Hydrobiologia, 332*(2), 99-109.

Komárek, J., & Anagnostidis, K. (2005). Cyanoprokaryota, Part 2: Oscillatoriales, Süsswasserflora von Mitteleuropa, Bd 19/2: Elsevier/Spektrum Akademischer Verlag: Heidelberg, Germany.

Kumar, M., Kulshreshtha, J., & Singh, G. P. (2011). Growth and biopigment accumulation of cyanobacterium Spirulina platensis at different light intensities and temperature. *Brazilian Journal of Microbiology, 42*(3), 1128-1135.

LeBlanc, S., Pick, F. R., & Aranda-Rodriguez, R. (2005). Allelopathic effects of the toxic cyanobacterium Microcystis aeruginosa on duckweed, Lemna gibba L. *Environmental toxicology, 20*(1), 67-73.

Lee, E., Pruvost, J., He, X., Munipalli, R., & Pilon, L. (2014). Design tool and guidelines for outdoor photobioreactors. *Chemical Engineering Science, 106*, 18-29.

Leema, J. M., Kirubagaran, R., Vinithkumar, N., Dheenan, P., & Karthikayulu, S. (2010). High value pigment production from Arthrospira (Spirulina) platensis cultured in seawater. *Bioresource Technology, 101*(23), 9221-9227.

Liou, K.-N. (2002). *An introduction to atmospheric radiation* (Vol. 84): Academic press.

Mandalam, R. K., & Palsson, B. Ø. (1998). Elemental balancing of biomass and medium composition enhances growth capacity in high-density Chlorella vulgaris cultures.

Marquez, F. J., Sasaki, K., Nishio, N., & Nagai, S. (1995). Inhibitory effect of oxygen accumulation on the growth of Spirulina platensis. *Biotechnology letters, 17*(2), 225-228.

Martinek, J., & Weimer, A. W. (2013). Evaluation of finite volume solutions for radiative heat transfer in a closed cavity solar receiver for high temperature solar thermal processes. *International Journal of Heat and Mass Transfer, 58*(1), 585-596.

Modest, M. F. (2013). *Radiative heat transfer*: Academic press.

Moghimi, M., Craig, K., & Meyer, J. P. (2015). *A novel computational approach to the combine optical and thermal modelling of a linear fresnel collector receiver*.

Moss, B., McKee, D., Atkinson, D., Collings, S., Eaton, J., Gill, A., . . . Wilson, D. (2003). How important is climate? Effects of warming, nutrient addition and fish on phytoplankton in shallow lake microcosms. *Journal of applied Ecology, 40*(5), 782-792.

Murthy, J., & Mathur, S. (1998). Finite volume method for radiative heat transfer using unstructured meshes. *Journal of thermophysics and heat transfer, 12*(3), 313-321.

Packer, M. (2009). Algal capture of carbon dioxide; biomass generation as a tool for greenhouse gas mitigation with reference to New Zealand energy strategy and policy. *Energy Policy, 37*(9), 3428-3437.

Pandey, A. (2011). *Biofuels: alternative feedstocks and conversion processes*: Academic Press.

Pilon, L., Berberoğlu, H., & Kandilian, R. (2011). Radiation transfer in photobiological carbon dioxide fixation and fuel production by microalgae. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 112*(17), 2639-2660.

Pilon, L., & Kandilian, R. (2016). Interaction Between Light and Photosynthetic Microorganisms. *Advances in Chemical Engineering*.

Posten, C. (2009). Design principles of photo-bioreactors for cultivation of microalgae. *Engineering in Life Sciences, 9*(3), 165-177.

Posten, C., & Walter, C. (2013). *Microalgal biotechnology: potential and production*: Walter de Gruyter.

Pruvost, J., Cornet, J., Goetz, V., & Legrand, J. (2011). Modeling dynamic functioning of rectangular photobioreactors in solar conditions. *AIChE Journal, 57*(7), 1947-1960.

Pruvost, J., Cornet, J., Goetz, V., & Legrand, J. (2012). Theoretical investigation of biomass productivities achievable in solar rectangular photobioreactors for the cyanobacterium Arthrospira platensis. *Biotechnology progress, 28*(3), 699-714.

Raithby, G., & Chui, E. (1990). A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media. *Journal of Heat Transfer, 112*(2), 415-423.

Ren, L.-J., Ji, X.-J., Huang, H., Qu, L., Feng, Y., Tong, Q.-Q., & Ouyang, P.-K. (2010). Development of a stepwise aeration control strategy for efficient docosahexaenoic acid production by Schizochytrium sp. *Applied microbiology and biotechnology, 87*(5), 1649-1656.

Richmond, A. (2008). *Handbook of microalgal culture: biotechnology and applied phycology*: John Wiley & Sons.

Shulter, M., & Kargi, F. (2000). Bioprocess engineering basic concept. *New Delhi: Parentice-Hall of India Pvt Ltd*.

Suh, I. S., & Lee, C.-G. (2003). Photobioreactor engineering: design and performance. *Biotechnology and Bioprocess Engineering, 8*(6), 313-321.

Takache, H., Christophe, G., Cornet, J. F., & Pruvost, J. (2010). Experimental and theoretical assessment of maximum productivities for the microalgae Chlamydomonas reinhardtii in two different geometries of photobioreactors. *Biotechnology progress, 26*(2), 431-440.

Torzillo, G., Bernardini, P., & Masojídek, J. (1998). Online monitoring of chlorophyll fluorescence to assess the extent of photoinhibition of photosynthesis induced by high oxygen concentration and low temperature and its effect onthe

productivity of outdoor cultures of Spirulina platensis (Cyanobacteria). *Journal of phycology, 34*(3), 504-510.

Torzillo, G., Sacchi, A., Materassi, R., & Richmond, A. (1991). Effect of temperature on yield and night biomass loss in Spirulina platensis grown outdoors in tubular photobioreactors. *Journal of Applied Phycology, 3*(2), 103-109.

Tredici, M. R., Papuzzo, T., & Tomaselli, L. (1986). Outdoor mass culture of Spirulina maxima in sea-water. *Applied Microbiology and Biotechnology, 24*(1), 47-50.

Vonshak, A. (1997). *Spirulina platensis arthrospira: physiology, cell-biology and biotechnology*: CRC Press.

Vonshak, A., Guy, R., & Guy, M. (1988). The response of the filamentous cyanobacterium Spirulina platensis to salt stress. *Archives of Microbiology, 150*(5), 417-420.

Whitton, B. A. (2012). *Ecology of cyanobacteria II: their diversity in space and time*: Springer Science & Business Media.

Wong, L., & Chow, W. (2001). Solar radiation model. *Applied Energy, 69*(3), 191-224.

CAPÍTULO III

Ansys. (2014). Ansys Fluent 15.0 Users Guide *Inc., April*.

Bergman, T. L., Incropera, F. P., DeWitt, D. P., & Lavine, A. S. (2011). *Fundamentals of heat and mass transfer*: John Wiley & Sons.

Cornet, J.-F., Dussap, C., & Gros, J.-B. (1998). Kinetics and energetics of photosynthetic micro-organisms in photobioreactors *Bioprocess and algae reactor technology, apoptosis* (pp. 153-224): Springer.

Cornet, J.-F., Dussap, C., Gros, J.-B., Binois, C., & Lasseur, C. (1995). A simplified monodimensional approach for modeling coupling between radiant light transfer and growth kinetics in photobioreactors. *Chemical Engineering Science, 50*(9), 1489-1500.

Cornet, J., Dussap, C., & Dubertret, G. (1992). A structured model for simulation of cultures of the cyanobacterium Spirulina platensis in photobioreactors: I. Coupling between light transfer and growth kinetics. *Biotechnology and Bioengineering, 40*(7), 817-825.

Degen, J., Uebele, A., Retze, A., Schmid-Staiger, U., & Trösch, W. (2001). A novel airlift photobioreactor with baffles for improved light utilization through the flashing light effect. *Journal of Biotechnology, 92*(2), 89-94.

Duffie, J. A., & Beckman, W. A. (2013). *Solar engineering of thermal processes* (Vol. 3): Wiley New York.

Huang, J., Kang, S., Wan, M., Li, Y., Qu, X., Feng, F., . . . Li, W. (2015). Numerical and experimental study on the performance of flat-plate photobioreactors with different inner structures for microalgae cultivation. *Journal of Applied Phycology, 27*(1), 49-58.

Huang, J., Li, Y., Wan, M., Yan, Y., Feng, F., Qu, X., . . . Fan, J. (2014). Novel flat-plate photobioreactors for microalgae cultivation with special mixers to promote mixing along the light gradient. *Bioresource technology, 159*, 8-16.

Krishnamoorthy, G., Klosterman, R., & Shallbetter, D. (2014). A Radiative Transfer Modeling Methodology in Gas-Liquid Multiphase Flow Simulations. *Journal of Engineering, 2014*.

Mengüç, M., & Viskanta, R. (1983). Comparison of radiative transfer approximations for a highly forward scattering planar medium. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 29*(5), 381-394.

Moghimi, M., Craig, K., & Meyer, J. P. (2015a). *A novel computational approach to the combine optical and thermal modelling of a linear fresnel collector receiver*.

Moghimi, M., Craig, K., & Meyer, J. P. (2015b). Optimization of a trapezoidal cavity absorber for the Linear Fresnel Reflector. *Solar Energy, 119*, 343-361.

Pilon, L., Berberoğlu, H., & Kandilian, R. (2011). Radiation transfer in photobiological carbon dioxide fixation and fuel production by microalgae. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 112*(17), 2639-2660.

Pottier, L., Pruvost, J., Deremetz, J., Cornet, J. F., Legrand, J., & Dussap, C. (2005). A fully predictive model for one- dimensional light attenuation by Chlamydomonas reinhardtii in a torus photobioreactor. *Biotechnology and Bioengineering, 91*(5), 569-582.

Pruvost, J., Cornet, J., Goetz, V., & Legrand, J. (2011). Modeling dynamic functioning of rectangular photobioreactors in solar conditions. *AIChE Journal, 57*(7), 1947-1960.

Pruvost, J., Cornet, J., Goetz, V., & Legrand, J. (2012). Theoretical investigation of biomass productivities achievable in solar rectangular photobioreactors for the cyanobacterium Arthrospira platensis. *Biotechnology progress, 28*(3), 699-714.

Rasmuson, A., Andersson, B., Olsson, L., & Andersson, R. (2014). *Mathematical Modeling in Chemical Engineering*: Cambridge University Press.

Tarifa, E. (2001). Teoría de modelos y simulación. *Facultad de Ingeniería, Universidad de Jujuy*.

Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). *An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method*: Pearson Education.

Yu, G., Li, Y., Shen, G., Wang, W., Lin, C., Wu, H., & Chen, Z. (2009). A novel method using CFD to optimize the inner structure parameters of flat photobioreactors. *Journal of Applied Phycology, 21*(6), 719-727.