



REVISTA TÉCNICA

DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

Una Revista Internacional Arbitrada
que está indizada en las publicaciones
de referencia y comentarios:

- SCOPUS
- Compendex
- Chemical Abstracts
- Metal Abstracts
- World Aluminium Abstracts
- Mathematical Reviews
- Petroleum Abstracts
- Current Mathematical Publications
- MathSci
- Revenct
- Materials Information
- Periódica
- Actualidad Iberoamericana

UNIVERSIDAD DEL ZULIA



REVISTA TÉCNICA
DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA

"Buscar la verdad y afianzar los valores trascendentes", misión de las universidades en su artículo primero, inspirado en los principios humanísticos. Ley de Universidades 8 de septiembre de 1970.

CFD model to characterize the transport of the flame retardant BDE 99 in a secondary facultative lagoon

*Andrés Mauricio Zapata Rivera** , *Miguel Ricardo Peña Varón* 

Instituto Cinara, Facultad de Ingeniería, Universidad del Valle, A.A. 25157, Cali-Colombia

*Autor de Contacto: andres.zapata@correounivalle.edu.co

<https://doi.org/10.22209/rt.v43n1a06>

Recepción: 10/10/2018 | Aceptación: 29/11/2019 | Publicación: 20/12/2019

Abstract

A CFD-3D model was built to represent the BDE 99 flame retardant transport, in a facultative lagoon of surface area 83,22 m², depth 1,48 m and hydraulic retention time of 3,99 days. The model included a mixture of water, suspended solids, and retardant. It was built using ANSYS Inc. Fluent® (V.16.1). The results were validated with a study of tracers, accuracy test and experimental data of retardant concentration. The experimental concentration of flame retardant in the effluent was modeled with a 74 % of accuracy and correctly predicts the tracer's peak of maximum concentration time of appearance (2h). The absolute mean deviation and the relative mean deviation showed relative errors between the model and the experimental data of 2% and 11% respectively. The sum of the squared errors for the model and the experimental data were 0.130 and 0.390 respectively. The results showed that the model accurately represents fluid velocity in the field, the concentration profile and transport phenomenon of the flame-retardants in these treatment systems, with the model, design improvements that optimize the elimination of these organic compounds in this treatment system could be evaluated.

Keywords: Computational Fluid Dynamics; emerging pollutants; multiphasic models; tracer.

Modelo CFD para caracterizar el transporte del retardante de llama BDE 99 en una laguna facultativa usada para el tratamiento de aguas residuales municipales

Resumen

Se construyó un modelo CFD-3D para representar el transporte del retardante BDE 99 en una laguna facultativa de área superficial 83,22 m², profundidad 1,48 m y tiempo de retención hidráulico 3,99 días, incluyó una mezcla de agua, sólidos suspendidos y retardante. Se utilizó ANSYS Inc. Fluent® (V.16.1). Los resultados se validaron con un estudio de trazadores, pruebas de bondad de ajuste y datos experimentales de la concentración del retardante. El modelo representa con una exactitud de 74 % los datos experimentales de concentración de retardante en el efluente y simula correctamente el tiempo de aparición (2 h) del pico de máxima concentración de trazador. La desviación media absoluta y media relativa presentaron porcentajes de error entre el modelo y los datos experimentales de 2 % y 11 % respectivamente. La sumatoria de errores al cuadrado para el modelo y datos experimentales fueron 0,130 y 0,390 respectivamente. En conclusión, el modelo representa correctamente el campo de velocidad del fluido y el transporte del retardante de llama, con este se podrían evaluar mejoras de diseño que optimicen la eliminación de estos contaminantes orgánicos en las lagunas facultativas.

Palabras clave: Dinámica de Fluidos Computacional; contaminantes emergentes; modelos multifásicos; trazadores.

Introducción

Las Lagunas Facultativas (LFs) son una de las tecnologías más importantes para la descontaminación de aguas residuales (AR) [1], gracias a sus bajos costos, su alta eficiencia, la simplicidad de su diseño y su fácil operación y mantenimiento, [2]. Estas generan efluentes que pueden utilizarse para el reciclaje de nutrientes en la agricultura ó la recuperación de suelos [3]. Su diseño, favorece el desarrollo de una amplia variedad de microorganismos y procesos físicos, químicos y biológicos [4] que al interrelacionarse favorecen la depuración de las aguas contaminadas [5]. A pesar de sus ventajas, una de sus deficiencias más importante, es la elevada concentración de sólidos suspendidos (SS) en el efluente [6]. Recientemente se ha demostrado que los SS son un medio de transporte eficaz para contaminantes hidrófobos como los bifenilos policlorados (PCBs) y los retardantes de llama bromados (PBDEs) [7]. Investigaciones en Canadá, mostraron elevadas concentraciones de PBDEs en los efluentes de LFs, asociadas a altas concentraciones de sólidos suspendidos [8]. Por las razones expuestas, el objetivo de este estudio fue caracterizar el perfil de concentración y el transporte del retardante de llama 2,2',4,4',5 - Pentabromodifenil éter (BDE 99, CASRN 60348-60-9) en una laguna facultativa secundaria, localizada en el municipio de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia. Para ello, se construyó un modelo en 3 dimensiones (3D) utilizando técnicas de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD por sus siglas en inglés). El modelo incluyó una mezcla multifásica de agua, sólidos suspendidos y BDE 99. La hidrodinámica del modelo se validó con un estudio de trazadores usando rodamina WT (RWT) y las pruebas de bondad de ajuste desviación media absoluta (DMA%), desviación media relativa (DMR%), la sumatoria de los errores al cuadrado (SSE) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE). También se validó el perfil de concentración y el transporte del BDE 99 con datos experimentales de concentración medidos en el punto medio y el efluente de la laguna. La importancia de este estudio radica en que se caracterizó, con el uso de un modelo CFD-3D el transporte del contaminante orgánico emergente BDE 99 en una laguna facultativa secundaria, lo que abre la posibilidad de usar este tipo de modelos para proponer mejoras de diseño que favorezcan la biodegradación de estos contaminantes.

Materiales y Métodos

Localización de la laguna facultativa secundaria

La laguna se localiza en la Estación de Investigación de Aguas Residuales y Reuso del municipio de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia a 3° 43' 50" latitud Norte y 76° 16' 20" longitud Oeste, sobre los 1040 m.s.n.m. La temperatura y la precipitación anual promedio en el municipio son 24 °C y 1280 mm respectivamente. El caudal medio de entrada de agua residual a la LF es 23,76 m³.día⁻¹. La entrada consta de una cámara de distribución

de caudal que transporta el agua residual hasta una tubería sumergida de 0,0546 m de diámetro donde el caudal es regulado usando una válvula de globo. La salida se hace por un tubo sumergido de PVC de igual diámetro que la entrada. Ambas tuberías se ubican de forma paralela al lado más largo de la laguna. El área superficial de la LF fue 83,22 m², El ancho del espejo de agua 5,70 m, el largo 14,60 m y una pendiente (l:z v:h) 1:1, la profundidad del agua 1,48 m y el tiempo de retención hidráulico teórico 3,99 días. Se diseñó para una carga orgánica de 279 kg DBO.Ha⁻¹.d⁻¹.

Estudio de trazadores

El campo hidrodinámico se validó con un estudio de trazadores. A pesar de las desventajas que presenta para este tipo de sistemas de tratamiento, en el estudio se usó rodamina WT (RWT) como trazador siguiendo la metodología desarrollada por [9]. La RWT se seleccionó gracias a que el método de cuantificación es económico, confiable y permite la detección en línea en el efluente. Se empleó la técnica de estímulo - respuesta con señal de pulso.

Para el estudio, se tomaron 3,28 ml del trazador (0,76 g de ingrediente activo) y se enrasaron a un litro con agua del afluente de la LF con el propósito de mantener la misma temperatura [10]. La solución resultante tuvo una concentración de 0,328 %V/V y fue adicionada en la cámara de distribución de caudal. La concentración del trazador se cuantificó en el efluente en línea, utilizando la fluorescencia como técnica de detección. El intervalo entre cada medición fue 0,25 h, por un periodo de 240 h. Se usó un fluorómetro Turner M 8000 - 010 con un rango lineal de detección entre 0,4 µg.kg⁻¹ y 300 µg.kg⁻¹. Las longitudes de onda empleadas fueron de 550 nm y >570 nm, con los datos se construyó la curva de distribución de los tiempos de residencia (DTR) normalizada. Durante el estudio se mantuvo constante el caudal de entrada en 0,27 L.s⁻¹. Para simular la inyección del trazador en el modelo, se probaron dos aproximaciones: el modelo de fase discreta (DPM) y el modelo de especies químicas. El DPM requirió un mayor gasto de recursos computacionales y los resultados no fueron satisfactorios. Por tal razón, se utilizó el modelo de especies químicas, resolviendo las ecuaciones del fluido en estado estable y luego, la ecuación de la rodamina en estado transitorio.

Cuantificación del retardante de llama BDE 99

Se cuantificó la concentración de los bifenilos policlorados (PCBs) 44 y 66, el plaguicida Endrín y el retardante de llama BDE 99. Para ello, se tomaron muestras de sólidos suspendidos en el afluente, el efluente y el bentos en el punto medio de la laguna. El ensayo de laboratorio se realizó siguiendo la metodología del método "QuEChERS Original modificado", implementado y validado por estudio previo realizado en la LF [11]. La solución intermedia se preparó a partir de una mezcla

certificada de PBDEs con una concentración de 50 ug/mL marca Restek, Restek Corporation, U.S.A. A partir de esta solución se prepararon las curvas de calibración y se realizó el aseguramiento de calidad del método para la confiabilidad de los resultados. La cuantificación se realizó en un equipo de cromatografía de gases acoplado con detector de masas de referencia TSQTM 8000 Evo Triple Quadrupole GC-MS/MS, Thermo Fisher Scientific, USA. Los límites de detección (LDD) y cuantificación (LDC) fueron 5 y 10 ppb respectivamente. Con estos resultados se validó el perfil de concentración y el transporte del BDE 99 en el modelo.

Validación de resultados

Los resultados fueron validados en términos del tiempo de retención, la varianza de la curva de distribución de los tiempos de residencia (DTR) normalizada, el número de dispersión y el tiempo de aparición de máxima concentración del trazador, según lo propuesto por [20]. Se aplicaron pruebas de bondad de ajuste que incluyeron el cálculo de la desviación media absoluta (DMA%), la desviación media relativa (DMR%) como medidas del error entre los datos calculados y experimentales y la sumatoria de los errores al cuadrado (SSE) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE) usada como bondad de ajuste en la DTR [21]. Finalmente las dos series de datos experimental y simulada fueron comparadas aplicando la prueba de Shapiro Wilks ($n > 50$) para evaluar normalidad y la prueba no paramétrica Test de Levene para comparar las varianzas de las series de datos ($P < 0,05$).

Especificaciones del modelo CFD

Geometría y discretización

El modelo se desarrolló usando el programa ANSYS Inc. Fluent® (V.16.1), en una estación de trabajo Dell Precision TX 3500, procesador Intel® Xeon® X3470 (8MB Caché, 2,93 GHz, Turbo, HT). La geometría se construyó con el software ANSYS Desing Modeller® by Ansys Inc versión 16.1 de acuerdo a las dimensiones reales de la LF. Para la discretización se empleó el método de volúmenes finitos. Se crearon tres mallas, dividiendo el dominio computacional en 16452 elementos hexagonales de 0,5 m para la primera, 161890 elementos hexagonales de 0,05 m para la segunda y 276470 elementos hexagonales de 0,025 m para la tercera. Cada una se construyó utilizando el programa Ansys Inc® ICEM CFD™ meshing software (V 16.1). Se realizó una prueba de independencia de malla que permitió seleccionar la de 161890 como la más adecuada para el modelo. La calidad de los elementos se evaluó con los métodos del determinante y del ángulo interno. Con el primero se garantizó una calidad de los elementos superior a 0,5 (valor mínimo aceptable 0,3) y con el segundo ángulos internos superiores a 90° [12]. La Figura 1 muestra la geometría (Figura 1a) y malla (Figura 1b) del modelo CFD utilizada para la simulación.

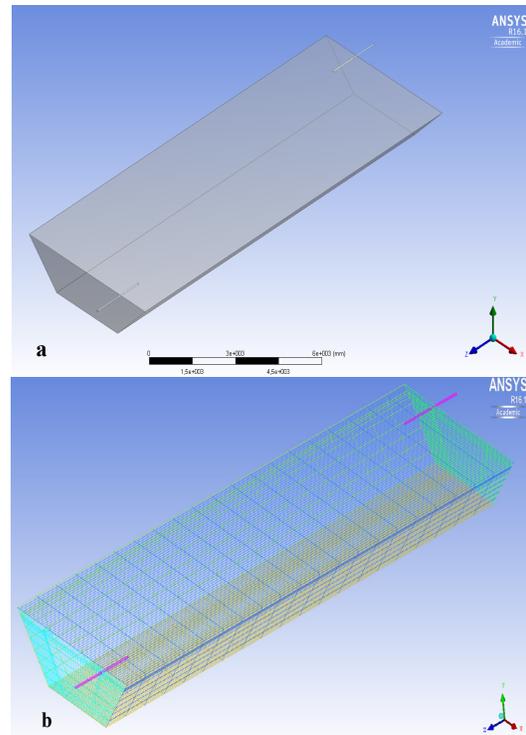


Figura 1. Geometría y malla del modelo CFD-3D

Condiciones de frontera

Para la entrada, se utilizó la condición de frontera “velocity inlet”, que establece velocidades vectoriales y propiedades escalares del fluido en el afluente. Se estableció una velocidad de entrada de $0,115 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, que corresponde a la velocidad real de entrada del fluido, una intensidad de turbulencia de 5,29 %, un diámetro hidráulico de 0,0546 m, número de Reynolds (Re) 5822 y parámetros k y ϵ de $5,78 \text{ e-}5$ y $8,00 \text{ e-}6$ respectivamente. Estos valores se calcularon de acuerdo a las condiciones de operación de la laguna. Para los sólidos suspendidos se utilizó como condición de frontera en la entrada, la concentración promedio medida semanalmente durante un periodo de dos años. Este valor correspondió a $0,041 \text{ \%P/V}$. La concentración de sólidos no incluyó la biomasa de algas generada en la laguna. Se acopló a la salida, el modelo Euleriano con la condición de frontera “pressure outlet”. El modelo de especies químicas se utilizó para el transporte del BDE 99, siendo el agua la fase principal. Ambos modelos se acoplaron con el fenómeno de difusión desde el afluente con una concentración para el retardante de $0,01 \text{ \%P/V}$. El transporte del retardante en los sólidos se representó con cinética de pseudo-segundo orden según [7] (ecuación 1):

$$\frac{dq}{dt} = k_2(q_s - q)^2 \quad (1)$$

Donde:

K_2 = Es la constante de adsorción en los sólidos [1,58 e-4 min⁻¹]

t = Es el tiempo de adsorción en los sólidos [min]

q_0 y q = Son la masa inicial y remanente de retardante [kg]

En la salida, se calculó un número de Reynolds de 506 y parámetros k y ϵ de 8,00 e-7 y 1,00 e-8 respectivamente. Para las paredes, se utilizó la condición de frontera "Wall" que simula condiciones de frontera sólidas para fluidos viscosos.

Propiedades de los materiales

Se determinaron las propiedades del fluido, la fase discreta (SS) y la especie química (BDE 99). El agua se asumió como incompresible exhibiendo comportamiento newtoniano. Los siguientes valores se asignaron al fluido: densidad (ρ) 1020 kg.m⁻³ [13] y viscosidad (μ) 0,0011 kg.m⁻¹s⁻¹ [14]. Las propiedades de la fase discreta: densidad (ρ) 1170 kg.m⁻³ [15], la distribución del diámetro de las partículas fue: mínimo 1 e-5 m, promedio 5 e-5 m y máximo 8 e-5 m [16]. Las propiedades del BDE 99 fueron: densidad (ρ) 3200 kg.m⁻³, peso molecular 564,69 kg.kmol⁻¹ [17] y diámetro de partícula 2,00 e⁻⁵ m [18].

Ecuaciones gobernantes

Se basaron en las ecuaciones de Navier-Stokes (ecuaciones 2 a 5), resueltas en estado transitorio para el fluido y la fase dispersa. Se utilizaron las ecuaciones de continuidad, momento y turbulencia en 3D. Tuvieron un enfoque multifásico Euleriano, debido a que ofreció mejores resultados y menor gasto de recursos computacionales que el enfoque Lagrangiano.

Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \delta_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \delta_q \vec{V}_q) = \sum_{p=1}^n (m_{pq} - m_{qp}) + S_q \quad (2)$$

Ecuación de momento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla_p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3)$$

Modelo de turbulencia

En el modelo CFD se probaron tres modelos de turbulencia $k-\epsilon$ (RNG, Estándar y Realizable), el único modelo convergente en la solución fue el Realizable,

recomendado para flujos con comportamiento laminar o transitorio [12]. Las ecuaciones del modelo de turbulencia $k-\epsilon$ Realizable fueron:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (4)$$

y,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \epsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} C_{2\epsilon} G_b + S_\epsilon \quad (5)$$

Se asumieron las constantes del modelo de turbulencia Realizable por defecto, con los siguientes valores: $C_1 \epsilon = 1,44$; $C_2 \epsilon = 1,92$; $C_\mu = 0,09$ [12, 19-21].

Resultados y Discusión

Estudio de trazadores: modelo CFD Vs resultados experimentales

El modelo de especies químicas necesito 80 % menos recursos computacionales que el DPM y brindó resultados satisfactorios al compararlos con el ensayo de trazadores experimental. Los resultados de la validación del modelo, la comparación de los tiempos de retención, la varianza, el número de dispersión y los resultados de las pruebas de bondad de ajuste se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Comparación de resultados estudio de trazadores: CFD Vs experimental

Parámetro	Estudio 1	Modelo CFD
Tiempo de retención experimental (h)	75	70
Tiempo de retención teórico (h)	95,76	95,76
Tiempo de aparición de pico de máxima concentración (h)	2	2
Varianza (σ^2)	4602	4607
Número de dispersión (δ)	0,406	0,478
Porcentaje de error de los tiempos de retención (%)	22	26
Desviación media absoluta (DMA%)	0,050	0,049
Desviación media relativa (DMR%)	0,137	0,122
Sumatoria de los errores al cuadrado (SSE)	0,390	0,130
Raíz del error cuadrático medio (RMSE)	0,175	0,073

Los resultados de las pruebas de bondad muestran que los errores obtenidos para la DMA% y

la DMR% entre el modelo y los datos experimentales de trazadores correspondieron al 2 % y 11 % respectivamente. La sumatoria de los errores al cuadrado (SSE) para el modelo y los datos experimentales fueron 0,130 y 0,390 respectivamente, mientras la raíz del error cuadrático medio (RMSE) usada como bondad de ajuste en la DTR presentaron porcentajes de error del 0,175 para los datos experimentales y 0,073 para el modelo CFD indicando que el modelo presenta menor variabilidad y mayor robustez en los resultados. Los errores pueden presentarse como consecuencia del error inducido por el uso de la RWT en el ensayo experimental de trazadores. Lin et al., (2003) [22], argumentaron que la estructura de la molécula de rodamina favorece un mayor valor del coeficiente octanol-agua ($K_{ow} = 89,13$) haciendo que la adsorción sobre la superficie de las partículas de materia orgánica sea el mecanismo preferido por la molécula y el que más favorece la pérdida de trazador. Esto se debe a que al adherirse cobran relevancia fenómenos hidrodinámicos como zonas de recirculación y zonas muertas, donde el material particulado incrementa su tiempo de permanencia dentro de la laguna y sufre en mayor proporción procesos de sedimentación que depositan la rodamina WT en el bentos de la laguna. Esto explicaría por que la recuperación del trazador en el estudio de campo fue 74 %. Pérez et al., (2011) [23] sugieren que la recuperación ideal de este trazador debería ser del 90 % para mayor confiabilidad del estudio y mejor predicción del comportamiento hidrodinámico. Sin embargo, estos porcentajes son difíciles de alcanzar en los estudios de campo, por lo que experimentalmente se han reportado porcentajes de recuperación que van desde el 29 % hasta el 80 % [23]. La Figura 2 muestra que el pico **máximo de concentración** del modelo aparece en el mismo tiempo (dos horas) que el estudio experimental y que el tiempo de simulación asignado al modelo CFD no fue suficiente para alcanzar una concentración de trazador igual a cero en el efluente. la prueba de Shapiro Wilks ($n > 50$) demostró que no había normalidad ($P < 0,05$) en las series de datos, mientras la prueba no paramétrica Test de Levene demostró que no había diferencias estadísticamente significativas entre estas ($P < 0,05$).

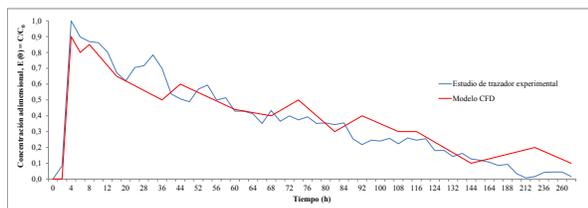


Figura 2. Distribución de tiempos de residencia del trazador experimentales y del modelo CFD.

Los mejores resultados en convergencia, número de iteraciones y estabilidad de residuales se obtuvieron con el modelo $k-\epsilon$ Realizable. Diferentes investigaciones en las que se ha simulado el campo hidrodinámico de

LF recomiendan el uso del modelo estándar [24]. Sin embargo, en este estudio la selección del modelo se realizó determinando el comportamiento del fluido: laminar, transitorio o turbulento [12]. Este aspecto no se menciona en los artículos de modelación CFD revisados y es fundamental para la selección. El modelo Estándar se recomienda para flujos completamente turbulentos ($Re > 4000$) y el Realizable para flujos laminares ($Re < 2000$) o transitorios ($2000 < Re < 4000$) [12]. En este estudio, el fluido en la LF presentó un número de Reynolds de 5822 en la tubería de entrada, 506 para la de salida y 840 en la sección transversal de la laguna, esto confirmó la selección del modelo Realizable como la **más** acertada para el campo hidrodinámico del modelo. Para los perfiles de concentración de los SS se usó el modelo "Mixture" [25]. El uso de este modelo disminuyó el tiempo de computo y el gasto computacional en 13 % al compararlo con el modelo "Euleriano". La Figura 3 presenta el campo de velocidades del modelo. La figura muestra tres zonas de recirculación del fluido (puntos 1, 2 y 3) y magnitudes de velocidad cercanas a $0,115 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ en la entrada y $0,088 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ en las zonas adyacentes. Así mismo, una zona de corto circuito paralela a la entrada. Estas zonas están influenciadas por la mezcla inducida por la entrada de flujo a la laguna [26].

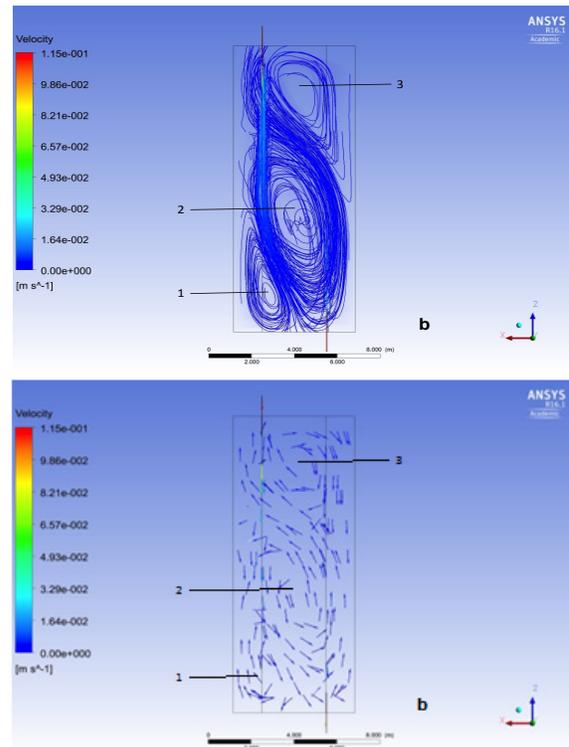


Figura 3. Campo vectorial de velocidades del modelo CFD

Determinación experimental del retardante de llama BDE 99

Los resultados de la concentración de los bifenilos policlorados (PCBs) 44 y 66, el plaguicida Endrín y el retardante de llama BDE 99 se presentan en la Tabla 2. La laguna presentó eficiencias de eliminación para estos compuestos entre 69 % y 92 %. Kim et al., (2013)[8] evaluaron la eficiencia de eliminación de los congéneres PBDE 47 al 209 en dos lagunas facultativas secundarias localizadas en Canadá y encontraron eficiencias de eliminación entre 36 % y 90 %. Los valores más bajos correspondieron a la época invernal y los más altos a la temporada de verano con temperaturas entre 28 °C y 30 °C, similares a las encontradas en Ginebra-Valle del Cauca. También, encontraron que la eficiencia de eliminación de los PBDE es inversamente proporcional a la concentración de sólidos en el efluente. En este estudio, la concentración de SS en el efluente correspondiente a la concentración de BDE 99 cuantificada fue 22,3 mg.l⁻¹ y una eficiencia de eliminación del 53 %, por lo que los resultados experimentales encontrados en este estudio, son acordes a los hallazgos de [8].

Tabla 2. Concentración de compuestos orgánicos en la laguna

Compuesto	Entrada	Salida	Punto medio (1,40m)			% Eliminación
	µg.kg ⁻¹					
Aldrín	<5	<5	<5	<5	<5	---
PCB_44	18,9	<5	49,0	<5	<5	74,0
PCB_66	64,5	<5	49,2	41,2	77,2	92,0
4,4-DDE	<5	<5	<5	<5	<5	---
Endrín	50,45	<5	<5	<5	<5	90,0
4,4-DDD	<5	<5	<5	<5	<5	---
BDE 99	16,16	5	32,2	115,3	36,1	69,0
BDE 100	<5	<5	<5	<5	<5	---

De acuerdo a los resultados de la Tabla 2 y lo reportado por [8], es posible colegir que este tipo de sistemas de tratamiento localizados en zonas tropicales, poseen ventajas para la eliminación de este tipo de compuestos, frente a sus análogos localizados en latitudes más al norte o sur del planeta. Otra ventaja de las LFs localizadas en regiones tropicales, es la abundancia de radiación solar y la estabilidad de los periodos de insolación de la superficie de la laguna. Investigaciones a escala de laboratorio demostraron que la bio-fotodegradación de los PBDE es un proceso importante en la eliminación de este tipo de compuestos [27]. La limitación más importante es la presencia en el volumen de agua de sustancias húmicas y SS. Según [27] las moléculas de los PBDE se adhieren a la superficie de los sólidos facilitando su transporte hasta el efluente y limitando el efecto de la radiación solar responsable de la eliminación por foto-degradación. La eliminación de compuestos como los PBDE en las lagunas facultativas es un área de

investigación con muchos interrogantes por responder. Esto, por que las investigaciones hasta el momento han sido a escala de laboratorio sin tener en cuenta las variaciones ambientales y climatológicas del sitio donde se localizan las lagunas. Tampoco, ha sido evaluada la degradación por microorganismos. Esta última, con mucho potencial en este tipo de sistemas de tratamiento gracias a la presencia de cofactores como la temperatura, las condiciones super-óxicas en ciertas regiones de la LF y la presencia de exo-enzimas microbianas.

Escenario CFD para transporte del Retardante de llama BDE 99

Para este escenario el tiempo computacional fue 2,51 veces el TRH. En este periodo el modelo alcanzó una concentración en el efluente para el BDE 99 de 0,00876 %P/V. Esto corresponde a una eficiencia de eliminación de 87 %. Al comparar la eficiencia simulada (87 %) con la real (69 %) se obtuvo un porcentaje de error del 26 %. Adicionalmente, se realizó seguimiento a la concentración simulada del BDE 99 en el punto medio de la laguna a una profundidad de 1,47 m. La Tabla 3 muestra los porcentajes de error obtenidos entre los datos simulados y experimentales en este punto de la laguna.

Tabla 3. Resultados experimentales y simulados de concentración de BDE 99 medidos en el centro de la laguna

Profundidad (1,40 m)	Experimental	Modelo CFD	Error (%)
	%P/V	%P/V	
Muestra 1	3,22 e-7	4,34 e-7	35
Muestra 2	1,15 e-6	4,34 e-7	62
Muestra 3	3,61 e-7	4,34 e-7	20

La Figura 4 muestra el perfil transversal de la concentración del BDE 99, este presenta un gradiente similar al de los sólidos suspendidos (decreciente desde el fondo hasta la superficie) y es un indicador del efecto que tienen los sólidos sobre el transporte del retardante.

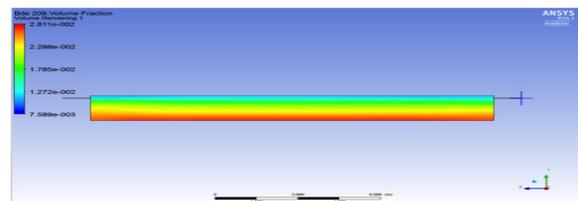


Figura 4. Perfiles de concentración del retardante de llama BDE 99

Autores como [27] y [7], encontraron correlaciones positivas entre las concentraciones de

solidos y el retardante BDE 99 en experimentos a escala de laboratorio. La hidrofobicidad del retardante ($K_{ow} = 6,97$) favorece su adsorción sobre la superficie de las pequeñas partículas en suspensión y esto explicaría la similitud entre los perfiles.

Conclusiones

La desviación media absoluta (DMA%) y la desviación media relativa (DMR%) presentaron porcentajes de error entre el modelo y los datos experimentales del ensayo de trazadores de 2 % y 11 % respectivamente. Los resultados demuestran que las técnicas de modelación CFD pueden aplicarse a este tipo de sistemas de tratamiento para representar fenómenos complejos como el transporte de contaminantes orgánicos y que pueden usarse para evaluar mejoras de diseño que aumenten las eficiencias de degradación de este tipo de contaminantes en las lagunas facultativas.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la universidad del Valle y a Colciencias por su programa de crédito-beca condonable administrado por Colfuturo por la financiación de esta investigación.

Referencias Bibliográficas

- [1] Butler E., Hung Y., Suleiman M., Yeh R., Liu R., y Fu Y.: Oxidation pond for municipal wastewater treatment. *Applied Water Science*, (2015) <https://doi.org/10.1007/s13201-015-0285-z>
- [2] Olukanni D., y Ducoste J.: Optimization of waste stabilization pond design for developing nations using computational fluid dynamics. *Ecological Engineering*, Vol. 37(11) (2011) 1878–1888. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2011.06.003>
- [3] Cai T., Park S., y Li Y.: Nutrient recovery from wastewater streams by microalgae: Status and prospects. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. 19 (2013) 360–369. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2012.11.030>
- [4] Pham D., Everaert G., Janssens N., Alvarado A., Nopens I., y Goethals, P.: Algal community analysis in a waste stabilisation pond. *Ecological Engineering*, Vol. 73 (2014) 302–306. <https://doi.org/10.1016/j.ecoleng.2014.09.046>
- [5] Fukami K., Nishijima T., y Ishida Y.: Stimulative and inhibitory effects of bacteria on the growth of microalgae. *Hydrobiologia*, Vol. 358 (1997) 185–191.
- [6] Mara D.: *Domestic Wastewater treatment in Developing Countries*. Earth Scan Pub. London UK, (2004)
- [7] Deng D., y Tam N.: Adsorption-uptake-metabolism kinetic model on the removal of BDE-47 by a *Chlorella* isolate. *Environmental Pollution*, Vol. 212 (2016) 290–298. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2016.01.063>
- [8] Kim M., Guerra P., Theocharides M., Barclay K., Smyth S., y Alaei M.: Parameters affecting the occurrence and removal of polybrominated diphenyl ethers in twenty Canadian wastewater treatment plants. *Water Research*, Vol. 47 (7) (2013) 2213–2221. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2013.01.031>
- [9] Aponte A.: Innovación mediante modelado hidrodinámico y ecológico de lagunas facultativas secundarias para la reducción de la contaminación hídrica por aguas residuales municipales en zonas tropicales. Universidad del Valle. Cali-Colombia, (2013).
- [10] Broughton A., y Shilton A.: Tracer studies on an aerated lagoon. *CEUR Workshop Proceedings*, Vol. 1542 (2012) 33–36. <https://doi.org/10.2166/wst.2012.906>
- [11] Castro N. Optimización de métodos analíticos en la determinación de contaminantes orgánicos persistentes en aire y sedimentos. Universidad del Valle. Cali-Colombia, (2018).
- [12] ANSYS.: *Ansys Fluent Theory Guide*. Ansys, Ed. Vol. 15317. New York, (2013). [https://doi.org/10.1016/0140-3664\(87\)90311-2](https://doi.org/10.1016/0140-3664(87)90311-2)
- [13] Stafford D., Hawkes D. y Horton R.: *Methane production from waste organic matter*. CRC Press. Boca Raton FL, (2013). <https://doi.org/10.1007/s13398-014-0173-7.2>
- [14] Environmental Protection Agency USEPA.: *Waste water collection, treatment and storage*. USEPA Ed. Ap-42 Vol. 80. Washington, D.C. (1995).
- [15] Huggins D., Piedrahita R., y Rumsey T.: Analysis of sediment transport modeling using computational fluid dynamics (CFD) for aquaculture raceways. *Aquacultural Engineering*, Vol. 31(3–4) (2004) 277–293. <https://doi.org/10.1016/j.aquaeng.2004.05.007>
- [16] Pevere A., Guibaud G., Van Hullebusch E., Lens P., y Baudu, M.: Viscosity evolution of anaerobic granular sludge. *Biochemical Engineering Journal*, Vol. 27(3) (2006) 315–322. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2005.08.008>
- [17] Environmental Protection Agency USEPA.: *Toxicological Review of BDE 209*. USEPA Ed. Washington,

- D.C, 2010.
- [18] Su P, Hou C., Sun D, Feng D, Halldorson T, Ding Y, Tomy G.: Laboratory study of the particle-size distribution of Decabromodiphenyl ether (BDE-209) in ambient air. *Chemosphere*, Vol. 144 (2016) 241-248. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2015.08.049>
- [19] Versteeg M.: An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method. Longman Group Ltd, Ed. New York, 1995.
- [20] Ramesh B., y Nilesh G.: Modeling of Residence Time Distribution in FLUENT. *Ecological Modelling*, Vol. 35(4) (2015) 1-3.
- [21] Pérez J., Aldana G., y Arguello G.: Modelo de Dispersión Axial para Sistemas de Flujo Continuo Ajustado a las Condiciones de Borde. *Información Tecnológica*, Vol. 27(1) (2016) 169-180. <https://doi.org/10.4067/S0718-07642016000100018>
- [22] Lin A, Debroux j., Cunningham J. y Reinhard M.: Comparison of rhodamine WT and bromide in the determination of hydraulic characteristics of constructed wetlands. *Ecological Engineering*, Vol. 20 (1) (2003) 75-88. [https://doi.org/10.1016/S0925-8574\(03\)00005](https://doi.org/10.1016/S0925-8574(03)00005)
- [23] Pérez N., Peña M. y Sanabria J.: Comunidades bacterianas involucradas en el ciclo del nitrógeno en humedales construidos. *Ingeniería y Competitividad*, Vol. 11(2) (2011) 83-92.
- [24] Alvarado A., Sanchez E., Durazno G., Vesvikar M., y Nopens I.: CFD analysis of sludge accumulation and hydraulic performance of a waste stabilization pond. *Water Science and Technology*, Vol. 66 (11) (2012) 2370-2377. <https://doi.org/10.2166/wst.2012.450>
- [25] ANSYS.: Ansys Fluent 14.0 Tutorial Guide. Ansys INC, Ed., Vol. 15317. New York, 2009. [https://doi.org/10.1016/0140-3664\(87\)90311-2](https://doi.org/10.1016/0140-3664(87)90311-2)
- [26] Sah L., Rousseau L., Hooijmans C., y Lens L.: 3D model for a secondary facultative pond. *Ecological Modelling*, Vol. 222 (9) (2011) 1592-1603. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2011.02.021>
- [27] Leal J., Esteves V., y Santos E.: BDE-209: Kinetic studies and effect of humic substances on photodegradation in water. *Environmental Science y Technology*, Vol. 47(24) (2013) 14010-14017. <https://doi.org/10.1021/es4035254>



UNIVERSIDAD
DEL ZULIA

REVISTA TECNICA

DE LA FACULTAD DE INGENIERIA
UNIVERSIDAD DEL ZULIA

Vol. 43. N°1, Enero - Abril 2020, pp. 03 - 56 _____

*Esta revista fue editada en formato digital y publicada en Diciembre de 2019, por el **Fondo Editorial Serbiluz**, Universidad del Zulia. Maracaibo-Venezuela*

www.luz.edu.ve

www.serbi.luz.edu.ve

www.produccioncientifica.luz.edu.ve