

UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA

Cálculos de campos de flujo en columnas de burbujeo

Anny Carolina Santodomingo Rojas

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental
Bogotá D.C., Colombia
2019

Cálculos de campos de flujo en columnas de burbujeo

Anny Carolina Santodomingo Rojas

Tesis presentada como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ingeniería Química – Ingeniería Química

Director:

Hugo Martín Galindo Valbuena Ph D

Línea de investigación:

Flujo de fluidos y mezclado en reactores químicos

Grupo de Investigación:

Ingeniería de reactores químicos empleando CFD

Universidad Nacional de Colombia

Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental

Bogotá D.C., Colombia

2019

*A Federico, mi esposo, mi apoyo, mi
compañero de vida.*

Agradecimientos

Al Ingeniero Hugo Martín Galindo Valbuena, gracias por su guía, su dedicación, su tiempo, su motivación y el apoyo, comprensión y paciencia que siempre tuvo conmigo. Gracias por aceptarme como su estudiante y por su invaluable labor.

A la Universidad Nacional de Colombia, gracias por permitirme continuar con mi educación y brindarme los conocimientos y recursos para realizar este trabajo.

To Dr. Khurram Imran Khan, your help has been invaluable during this process, thanks for clarifying my doubts and answering my questions at the most difficult moment of this investigation, thank you for your patience and kindness.

A Federico, mi esposo, quien fue mi más grande soporte, gracias por nunca perder la fe en mí.

A mi familia, especialmente a mi tía Blanca quien siempre me ha querido como a una hija, gracias por tener siempre las puertas de su corazón y de su casa abiertas para mí.

Resumen

En este trabajo se abordó el problema del cálculo de los campos de flujo en un sistema multifásico aire-agua contenido en una columna de burbujeo rectangular mediante el empleo de modelos computacionales. El cálculo de los campos vectoriales de velocidad y escalares de retención del gas abarcó tres caudales del flujo gas a través de la columna de líquido; los resultados obtenidos de las simulaciones computacionales fueron validados mediante datos experimentales, reportados en la literatura, de velocidad axial del líquido y retención del gas. Los modelos computacionales se implementaron en estado transitorio debido al carácter dinámico intrínseco de la operación de las columnas de burbujeo; estos modelos incluyeron la familia de modelos de dos ecuaciones $k - \varepsilon$ para la clausura de la turbulencia, la aproximación Euleriano-Euleriano para el flujo multifásico, las aproximaciones disperso y por fase para el flujo turbulento multifásico y, en algunos casos, balances de población y la aproximación Euleriana-Lagrangiana. Adicionalmente se realizaron experimentos numéricos para evaluar el impacto que ejercen algunas variables de la simulación tales como discretización espacial del dominio, fuerzas interfaciales, etc. en la calidad de las predicciones de las simulaciones.

La complejidad numérica del problema, manifestada especialmente en la convergencia de las soluciones altamente susceptible al modelo computacional evaluado, estableció como punto de partida para los ensayos numéricos el empleo del caudal de gas más bajo considerado en esta tesis; los ensayos con este caudal permitieron efectuar especificaciones generales del cálculo tales como el uso de un mallado estructurado, el tamaño de los elementos del arreglo, la inclusión de fuerzas diferentes a la de arrastre, etc.

Los resultados obtenidos de las simulaciones mostraron un papel determinante en el patrón de flujo ejercido por la fuerza de sustentación; sin la participación de esta fuerza el flujo del gas (o pluma de gas) no exhibe un comportamiento oscilante durante el ascenso,

llevando a unos perfiles promedio calculados de velocidad y de retención del gas alejados de los datos experimentales. La consideración de la fuerza de masa virtual introdujo alguna mejora marginal en la capacidad predictiva del modelo sin afectar apreciablemente la velocidad del cálculo numérico; esta mejora no es significativa comparada con las acarreadas por las fuerzas de arrastre y de sustentación. De la familia de modelos $k - \varepsilon$ para la clausura de la turbulencia, el RNG produjo los resultados más acertados a medida que el nivel de turbulencia se incrementó mediante el cambio del caudal del gas.

La implementación de los balances de población no llevó a una mejora sustancial en las predicciones que justificara el incremento apreciable de los requerimientos computacionales que conlleva la consideración de estos balances en el modelamiento computacional de la columna. Finalmente, el modelamiento realizado para cada uno de los caudales de aire predijo satisfactoriamente los datos experimentales, validando para este caso la aplicación de los modelos computacionales en columnas de burbujeo.

Palabras clave: CFD, campos de flujo, columna de burbujeo, turbulencia, multifásico, balance de población.

Abstract

In this work the problem of flow fields calculation in a multi-phase air-water system contained in a rectangular bubble column by using computational models was approached. The vector velocity and scalar gas holdup fields calculation covered three gas flow rates through the liquid column; the results obtained from the computational simulations were validated by experimental data, reported in the literature, about axial velocity of the liquid and gas holdup. The computational models were implemented under non steady state due to the intrinsic dynamic character of bubble columns operation; the computational models included the family of $k - \varepsilon$ two equation models for turbulence closure, the Eulerian-Eulerian approach for the multiphase flow, the dispersed and per phase approximations for the multiphase turbulent flow and, in some cases, population balances and the Eulerian-Lagrangian approach. Additionally, numerical experiments were carried out to evaluate the impact of some simulation variables such as spatial discretization of the domain, interfacial forces, etc. in the quality of the simulation predictions.

The numerical complexity of the problem brought about by the convergence of the highly susceptible solutions of the evaluated computational model, pointed out the lowest gas flow considered in this thesis as the starting point for the numerical trials; trials carried out with this flow led to the definition of a general framework to perform the calculations; the framework was composed of the use of a structured mesh, the size of the elements of the array, the inclusion of forces other than the drag, etc.

The simulation results showed that the lift force displayed a determining role on the flow pattern; if this force is not considered into the simulation, the gas flow pattern (or gas plume) does not display any oscillating behavior during the rise of the bubbles, leading to a calculated average velocity and gas holdup profiles far from the experimental data. The inclusion of the virtual mass force led to a marginal improvement for the predictive capacity of the computational model; no appreciable effect on the numerical calculation speed was

observed with this force. This force does not bring on any significant improvement compared to the one produced by the drag and lift forces. Regarding the family of $k - \varepsilon$ turbulence models, the RNG produced the most accurate results as the level of turbulence was increased by changing the gas flow rate.

The implementation of the population balances did not lead to a substantial improvement in the predictions that could justify to pay an appreciable increase of the computational requirements coming from considering this kind of balances. Finally, the computational models used to run the simulations for each one of the airflows showed satisfactory predictions when validated with experimental data.

Keywords: CFD, flow fields, bubble column, turbulence, multiphase, population balance.

Contenido

	Pág.
Resumen.....	IX
Lista de figuras.....	XV
Lista de tablas.....	XIX
Introducción.....	1
1. Marco teórico.....	5
1.1 Columnas de burbujeo	5
1.2 Flujo turbulento	7
1.3 Ecuación de Navier-Stokes (NS).....	8
1.4 Abordaje de la turbulencia en el proceso de solución de la ecuación de NS	9
1.4.1 Simulación numérica directa (DNS).....	9
1.4.2 Simulación de grandes vórtices (LES).....	10
1.4.3 Aproximación estadística - Ecuación de Navier Stokes promediada por Reynolds (RANS).....	10
1.5 Flujo multifásico disperso	16
1.5.1 Flujo polvoriento y Euleriano de equilibrio.....	16
1.5.2 Aproximación Lagrangiana-Euleriana	17
1.5.3 Aproximación Euleriana o de dos fluidos	18
1.6 Balances de población	19
2. Columna de burbujeo.....	22
2.1 Descripción del sistema.....	22
2.2 Datos experimentales para la validación de las simulaciones	24

3. Metodología.....	26
4. Modelamiento del sistema seleccionado	29
4.1 Geometría.....	29
4.2 Mallado	30
4.3 Criterios de convergencia	34
4.4 Modelado computacional con tamaño de burbuja fijo para un caudal de aire de 48 L/h.	35
4.4.1 Selección de los esquemas de discretización y de los métodos de solución .	35
4.4.2 Selección inicial de modelos.....	38
4.4.3 Resultados cuantitativos de predicción de campos de flujo con el Modelo computacional 0.....	42
4.4.4 Ensayos cualitativos para la reformulación de los parámetros del Modelo computacional 0.....	45
4.4.5 Resultados cuantitativos de predicción de campos de flujo con el Modelo computacional 1.....	53
4.4.6 Efecto de algunas variables en el ajuste del Modelo computacional 1.....	67
4.5 Modelado con distribución de tamaño de burbuja. Caudal de aire de 48 L/h.....	79
4.5.1 Selección de los esquemas de discretización y de los métodos de solución .	79
4.5.2 Selección de modelos	80
4.5.3 Resultados cuantitativos de predicción de campos de flujo con el Modelo computacional 8.....	81
4.6 Modelado con tamaño de burbuja fijo. Caudal de aire de 260 L/h.....	85
4.7 Modelado con tamaño de burbuja fijo. Caudal de aire de 600 L/h.....	88
5. Especificación de parámetros para el modelamiento computacional del sistema seleccionado	93
5.1 Geometría y Mallado.....	94
5.2 Esquemas de discretización y métodos de solución	96
5.3 Factores de Relajación y paso de tiempo	96
5.4 Modelos de flujo.....	97
6. Conclusiones y recomendaciones	101
6.1 Conclusiones	101
6.2 Recomendaciones	102

Anexo A.....	104
Bibliografía.....	107

Lista de figuras

	Pág.
Figura 1-1: Comportamiento típico de la velocidad en un punto de un flujo turbulento [17].	11
Figura 2-1: Geometría de la columna de burbujeo modelada. Adaptado de [39].	22
Figura 2-2: Columna de burbujeo seleccionada. Caudal de aire de 48 L/h (izq.) [40], 260 L/h (centro) [40] y 600 L/h (der.) [41].	23
Figura 3-1: Metodología empleada para el modelamiento CFD de la columna de burbujeo.	28
Figura 4-1: Comparación de la velocidad axial promedio obtenida con el Modelo computacional 1 (Tabla 4-6) y las mallas de la Tabla 4-1.	33
Figura 4-2: Campos instantáneos de velocidad del agua obtenidos con el Modelo computacional 1 (Tabla 4-6) y las mallas A (izq.), B (centro) y C (der.) de la Tabla 4-1. .	34
Figura 4-3: Comparación de contornos instantáneos de retención de gas utilizando el Modelo computacional 1 (Tabla 4-6), el arreglo C y diferentes esquemas de discretización para presión y gradiente. PRESTO! y Least Squares Cell Based (izq.), Body Force Weighted y Least Squares Cell Based (centro), PRESTO! y Green-Gauss Node-Based (der.)	37
Figura 4-4: Comparación del perfil de velocidad axial calculado y datos experimentales (caudal de aire: 48 L/h).	44
Figura 4-5: Comparación del perfil de retención de gas calculado y datos experimentales (caudal de aire: 48 L/h).	44
Figura 4-6: Ensayo 1. Contornos de retención de gas con diferentes modelos de clausura de la turbulencia de la familia $k - \varepsilon$: Standard (Modelo 0, izq.), RNG (centro), Realizable (der.)	47

Figura 4-7: Ensayo 2. Contornos de retención de gas con diferentes coeficientes para la fuerza de sustentación: 0 (Modelo 0, izq.), 0,2 (der.).....	48
Figura 4-8: Ensayo 3. Contornos de retención de gas con diferentes coeficientes para la fuerza de masa virtual: 0 (Modelo 0, izq.), 0,5 (der.).....	49
Figura 4-9: Ensayo 4. Contornos de retención de gas con modelamiento de la tensión superficial: 0 N/m (Modelo 0, izq.), 0,071 N/m (der.).....	49
Figura 4-10: Ensayo 5. Contornos de retención de gas con diferentes modelos de turbulencia multifásica: Disperso (Modelo 0, izq.), Por Fase (der.).....	50
Figura 4-11: Ensayo 6. Contornos de retención de gas con diferentes condiciones de frontera para la turbulencia: I, L (izq.), $I, \mu T / \mu$ (centro), I, DH (Modelo 0, der.).....	51
Figura 4-12: Ensayo 7. Contornos de retención de gas con diferentes condiciones para la velocidad de entrada de aire: $v = 0,23 \text{ m/s}, \alpha = 0,2$ (Modelo 0, izq.), $v = 3,3 \text{ m/s}, \alpha = 0,014$ (der.).....	52
Figura 4-13: Comparación del perfil de velocidad axial del Modelo computacional 1 para diferentes pasos de tiempo y factores de relajación. PT1: Paso de tiempo 0,006 s y factores de relajación de la Tabla 4-4. PT2: Paso de tiempo 0,01 s y factores de relajación de la Tabla 4-7.....	55
Figura 4-14: Comparación del perfil de retención de gas obtenido con el Modelo computacional 1 para diferentes pasos de tiempo y factores de relajación. PT1: Paso de tiempo 0,006 s y factores de relajación de la Tabla 4-4. PT2: Paso de tiempo 0,01 s y factores de relajación de la Tabla 4-7.....	56
Figura 4-15: Comparación del perfil de velocidad axial con diferente inclusión de fuerzas interfaciales. Modelo computacional 0: fuerza de arrastre. Modelo computacional 1: fuerzas de arrastre, sustentación y masa virtual.	57
Figura 4-16: Comparación del perfil de retención de gas con diferente inclusión de fuerzas interfaciales. Modelo computacional 0: fuerza de arrastre. Modelo computacional 1: fuerzas de arrastre, sustentación y masa virtual.	57
Figura 4-17: Comparación del perfil de retención de gas obtenido con el Modelo computacional 1 para tiempos de promediado diferentes.....	59
Figura 4-18: Comparación del perfil de velocidad axial del agua calculado con el Modelo computacional 1 con tiempos de promediado diferentes.	60
Figura 4-19: Desviación de la velocidad axial promediada en el tiempo predicha por el Modelo computacional 1.....	60

Figura 4-20: Perfiles de velocidad axial calculados y experimentales sobre una línea horizontal a diferentes alturas de la columna con respecto al distribuidor: 25 cm (arriba), 13 cm (abajo).....	62
Figura 4-21: Desviación de la velocidad axial promediada en el tiempo predicha por el Modelo computacional 1 a diferentes alturas de la columna.	63
Figura 4-22: Campos promediados de velocidad del agua calculados con el Modelo computacional 1.....	64
Figura 4-23: Campos instantáneos de velocidad del agua calculados con el Modelo 1 para un hemicuasiperiodo de oscilación de la pluma.	65
Figura 4-24: Periodo de oscilación de la pluma de burbujas obtenido con el Modelo 1 y la malla C.....	66
Figura 4-25: Periodo de oscilación de la pluma de burbujas obtenido con el Modelo 1 y mallas gruesas.....	67
Figura 4-26: Comparación de los perfiles promediados de retención de gas obtenidos con los modelos Disperso y Por Fase para la turbulencia multifásica.	68
Figura 4-27: Comparación de los perfiles promediados de velocidad axial del agua obtenidos con los modelos Disperso y Por Fase para la turbulencia multifásica.	69
Figura 4-28: Comparación de los perfiles de velocidad axial promedio obtenidos con la incorporación de diferentes fuerzas interfaciales en los Modelos computacionales 0 (fuerza de arrastre), 1 (arrastre, sustentación y masa virtual), 3 (arrastre y masa virtual) y 4 (arrastre y sustentación).	70
Figura 4-29: Comparación de los perfiles de retención de gas promedio obtenidos con la incorporación de diferentes fuerzas interfaciales en los Modelos computacionales 0, 1, 3 y 4.....	71
Figura 4-30: Contornos instantáneos de retención de gas obtenidos con la incorporación de diferentes fuerzas interfaciales en los Modelos computacionales 0, 1 (arriba izq. y der. respectivamente), 3 y 4 (abajo izq. y der. respectivamente).....	72
Figura 4-31: Comparación de los perfiles de velocidad axial promedio obtenidos con diferentes coeficientes para el cálculo de la fuerza de sustentación (0,14 y 0,2).....	73
Figura 4-32: Comparación de los perfiles de retención de gas promedio obtenidos con diferentes coeficientes para el cálculo de la fuerza de sustentación (0,14 y 0,2).....	74
Figura 4-33: Comparación de los perfiles de velocidad axial promedio con diferentes modelos de clausura de la turbulencia $k - \varepsilon$ a diferentes alturas de la columna: 37 cm (arriba), 25 cm (medio), 13 cm (abajo).	76

Figura 4-34: Desviación de la velocidad axial promediada en el tiempo predicha por los diferentes modelos de turbulencia de la familia $k - \varepsilon$ para diferentes alturas de la columna: 37 cm (arriba), 25 cm (medio), 13 cm (abajo).....	77
Figura 4-35: Comparación de los perfiles de velocidad axial promediados obtenidos con el balance de población (PB, Modelo 8) y con tamaño de burbuja fijo (TBF, Modelo 1)..	82
Figura 4-36: Comparación de los perfiles de retención de gas promediados obtenidos con el balance de población (PB, Modelo 8) y con tamaño de burbuja fijo (TBF, Modelo 1)..	83
Figura 4-37: Variación del tamaño de burbuja medio con la altura sobre una línea vertical en el centro de la columna.....	84
Figura 4-38: Contorno de diámetro de burbuja medio.....	84
Figura 4-39: Comparación de los perfiles de retención de gas calculados con los Modelos computacionales 1, 9, 13 y 14 y los datos experimentales (caudal de aire: 260 L/h).	87
Figura 4-40: Contornos instantáneos de retención de gas obtenidos con los Modelos 10 (izq.), 11 (centro) y 12 (der.) para el caudal de 260 L/h.	88
Figura 4-41: Perfiles de velocidad axial promedio obtenidos con los Modelos computacionales 19 y 20 para una línea horizontal ubicada a 39 cm del distribuidor.	91
Figura A-1: Contornos instantáneos de retención de gas obtenidos con la incorporación de diferentes fuerzas interfaciales en los Modelos computacionales: Fuerza de arrastre (izq.), Fuerzas de arrastre y sustentación (centro y der., hemicuasiperiodo de oscilación de la pluma).	106

Lista de tablas

	Pág.
Tabla 1-1: Ecuaciones de conservación.....	8
Tabla 1-2: Modelos de dos ecuaciones más utilizados [14].	14
Tabla 2-1: Condiciones de operación de la columna de burbujeo modelada. Adaptado de [39].....	23
Tabla 2-2: Datos experimentales para validación de campos de flujo calculados.	25
Tabla 3-1: Simulaciones efectuadas para las validaciones cuantitativas de los modelos computacionales.	27
Tabla 4-1: Arreglos computacionales evaluados en la independencia de malla.....	31
Tabla 4-2: Criterios de calidad para las mallas empleadas en las simulaciones.	31
Tabla 4-3: Modelo computacional 0. Parámetros de simulación empleados en el ensayo numérico inicial con caudal de aire de 48 L/h.....	42
Tabla 4-4: Factores de relajación establecidos para acelerar la convergencia (caudal de aire: 48 L/h).....	43
Tabla 4-5: Parámetros evaluados en los ensayos cualitativos (caudal de aire: 48 L/h)...	46
Tabla 4-6: Modelo computacional 1. Especificaciones establecidas con base en los ensayos cualitativos de la sección 4.4.4.....	53
Tabla 4-7: Factores de relajación utilizados después de los 150 segundos de cálculo (caudal de aire: 48 L/h).	55
Tabla 4-8: Parámetros de correlación para la velocidad axial del líquido con datos experimentales y simulaciones utilizando el Modelo 1 con diferente tiempo de promediado.	61
Tabla 4-9: Parámetros de correlación para la velocidad axial calculada del líquido con datos experimentales a diferentes alturas de la columna (medidas desde el distribuidor).	63

Tabla 4-10: Parámetros evaluados en los diferentes Modelos computacionales generados con cambios de un parámetro (caudal de aire: 48 L/h).....	68
Tabla 4-11: Parámetros de correlación para la velocidad axial promedio del líquido con datos experimentales utilizando modelos de clausura de la turbulencia de la familia $k - \epsilon$ a diferentes alturas de la columna.....	79
Tabla 4-12: Clases en las que se dividió la fase dispersa.....	80
Tabla 4-13: Factores de relajación utilizados en la simulación con balances de población (caudal de aire: 48 L/h).....	82
Tabla 4-14: Factores de relajación utilizados con la simulación para el caudal de aire de 260 L/h.....	85
Tabla 4-15: Variación de parámetros en las simulaciones realizadas con un caudal de aire de 260 L/h.....	86
Tabla 4-16: Modelo computacional 15. Parámetros empleados para la simulación inicial de la columna con un caudal de aire de 600 L/h.....	89
Tabla 4-17: Variación de parámetros en las simulaciones realizadas con un caudal de aire de 600 L/h.....	90
Tabla 4-18: Factores de relajación utilizados en las simulaciones con el Modelo computacional 20 (caudal de aire: 600 L/h).....	92
Tabla 5-1: Números de Reynolds superficiales característicos de las condiciones de operación de la columna en esta tesis.....	93
Tabla 5-2: Esquemas de discretización y algoritmo de solución de ecuaciones gobernantes seleccionados para la realización efectiva de las simulaciones.....	96
Tabla 5-3: Rango de factores de relajación que aceleraron la convergencia en las simulaciones.....	97
Tabla 5-4: Modelos de flujo que predijeron resultados aceptables para la columna de burbujeo operando en los tres caudales de gas modelados.....	98
Tabla 5-5: Modelos de flujo que debieron cambiarse debido al incremento del caudal de gas.....	99
Tabla A-1: Parámetros de simulación del Modelo computacional utilizando la aproximación al flujo multifásico Euleriana-Lagrangiana (caudal de aire: 48 L/h).....	105
Tabla A-2: Factores de relajación establecidos para acelerar la convergencia (caudal de aire: 48 L/h).....	106

Introducción

En la aproximación clásica al diseño de reactores los modelos de flujo empleados tales como mezcla perfecta y flujo pistón están elaborados con base en niveles de mezcla completamente definidos. Esta descripción sencilla en implementación y cálculo no representa el comportamiento real de los campos de flujo, llevando, por lo tanto, a incertidumbre en la predicción del desempeño real del equipo [1]. La ingeniería clásica sobrelleva esta limitación mediante correlaciones empíricas, que no están siempre disponibles para el caso de interés e implican costos apreciables en investigación experimental [2].

Con el fin de minimizar la incertidumbre en el diseño de un reactor químico debe acudir a una cuantificación confiable del mezclado en el flujo de fluidos; esto puede lograrse indirectamente a través del cálculo de las distribuciones de propiedades del flujo tales como velocidad, temperatura y concentración. Con la información provista por los campos de flujo en una unidad de proceso la ingeniería de reactores químicos puede modificar la geometría y las dimensiones del equipo en función del mejoramiento del mezclado y por ende del desempeño de la unidad de conversión.

El desarrollo acelerado de la capacidad de procesamiento de los computadores ha promovido la consolidación de campos de investigación como la dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés) dedicados al cálculo confiable de campos de flujo [3]. Mediante la dinámica de fluidos computacional la ingeniería de reactores se potencializa a través de la solución de la ecuación de Navier-Stokes y de los principios de conservación generales de materia y de energía para los flujos en equipos de procesamiento.

Anterior a la disponibilidad de equipos de cómputo robustos, el diseño de reactores químicos se basaba exclusivamente en información experimental obtenida en modelos a escala laboratorio; este proceso demandaba la disponibilidad de un prototipo del equipo adecuado para las pruebas experimentales que permitiera determinar el nivel de mezclado

tal como la distribución de tiempos de residencia. Las deficiencias mostradas por el estudio experimental llevaban a cambios en el diseño del equipo y a nuevos ensayos en un proceso cíclico de búsqueda del mejor diseño caracterizado por su costo, lentitud y complejidad operativa [2].

El propósito de la presente investigación fue el de predecir los campos de flujo en una columna de burbujeo mediante el empleo de CFD; la selección de este tipo de equipo se efectuó debido a sus aplicaciones industriales numerosas en procesos constituidos por sistemas multifásicos dispersos. Para este tipo de equipos de contacto multifásico la capacidad descriptiva de la ingeniería de reactores clásica es muy limitada debido a la relación compleja que se presenta entre las variables que intervienen en la descripción del flujo y del contacto de las dos fases. En la literatura no existe un consenso acerca de la formulación correcta del problema de flujo gas-líquido o de la capacidad de los modelos computacionales para predecir los regímenes de flujo observados experimentalmente para estos equipos [4].

Los campos de flujo simulados para la columna de burbujeo mediante dinámica de fluidos computacional serán validados con datos experimentales reportados en la literatura; esta validación es un medio directo para comprobar la validez del modelo planteado y la aplicabilidad de CFD en los sistemas modelados.

El capítulo 1 presenta brevemente la importancia y las aplicaciones de las columnas de burbujeo junto con la teoría y los modelos más importantes para el desarrollo de esta investigación.

El capítulo 2 define el problema objetivo de la presente investigación; esta componente del documento especifica los parámetros operativos y de diseño de la columna de burbujeo a la que se le calcularán los campos de flujo y los datos experimentales con los que se validaron los resultados.

En el capítulo 3 se establece la metodología general asumida en la solución del problema y describe los recursos disponibles para realizar esta investigación; con los elementos mostrados en este capítulo se estructuró el proceso para la realización de la presente investigación.

El capítulo 4 describe la implementación del procedimiento en Ansys Fluent®, la selección de los modelos utilizados y el nivel de correlación de los cálculos de campos de flujo obtenidos con CFD y los datos experimentales reportados en la literatura.

Finalmente, las conclusiones y recomendaciones de esta investigación se presentan en el capítulo 5.

1. Marco teórico

1.1 Columnas de burbujeo

Los esquemas de contacto gas-líquido desarrollados en equipos de proceso tales como columnas vacías o empacadas o tanques agitados presentan aplicaciones industriales intensivas en procesos químicos como los efectuados en la industria petrolera, química, bioquímica, farmacéutica, metalúrgica, nuclear, entre otras [5], [6], especialmente en reacciones que debido a sus cinéticas lentas requieren alta retención de líquido [7]. Para este tipo de contacto multifásico la resistencia a la transferencia de masa interfacial se concentra usualmente en la fase líquida, lo que conlleva a la operación de los reactores bajo condiciones que producen áreas de contacto interfacial elevadas tal como las que ofrece el régimen disperso de la fase gaseosa en el medio continuo constituido por la fase líquida [8].

Los reactores de columna de burbujeo presentan ventajas comparativas con otros equipos para el contacto gas-líquido proporcionadas por factores tales como construcción simple, altas tasas de transferencia de calor y masa, ausencia de partes mecánicas móviles, durabilidad del catalizador y costos de operación y mantenimiento bajos [9], [10]; sin embargo, tienen como desventaja principal la variación local acentuada de propiedades. La distribución del tamaño de burbuja, las propiedades de la turbulencia, las características hidrodinámicas del flujo y la retención de gas y por lo tanto el mezclado son ejemplo de propiedades que presentan variación espacial apreciable en toda la extensión de la columna [11], [12].

Esta variación es, sin lugar a dudas, un aspecto crítico en el diseño y desempeño del reactor de columna de burbujeo debido a que el mezclado local está directamente relacionado con la selectividad del producto deseado y en algunos casos con factores de seguridad. Los costos elevados de la investigación experimental sobre el comportamiento espacial de las propiedades en columnas de burbujeo han promovido el desarrollo y

aplicación de modelos computacionales capaces de estimar la distribución de los campos en el sistema multifásico en función de variables operativas y de diseño, facilitando el diseño y escalado de estos equipos [11].

Pese a los avances logrados tanto en la descripción experimental como en el modelamiento de flujos burbujeantes, la dinámica de flujo en una columna de burbujeo carece aún de modelos computacionales y fenomenológicos suficientemente robustos para brindar una descripción completa de las propiedades del flujo; la complejidad acarreada por el cálculo de campos de flujo en columnas de burbujeo radica en el número elevado de escalas de longitud y de tiempo coexistiendo en el seno del fluido y en la sensibilidad del fenómeno a factores operativos y de diseño, tales como la velocidad superficial de la fase dispersa, el modo de inyección de la misma, la geometría de la columna, la altura del líquido, etc. [15]. La comprensión física de las escalas espaciales y temporales locales sigue siendo aún muy limitada, restringiendo las herramientas de modelado a fracciones bajas de gas [13]; por lo tanto, la investigación en columnas de burbujeo es un campo en desarrollo.

La dinámica de fluidos computacional ha integrado modelos computacionales y métodos de cálculo aceptables en el estudio de columnas de burbujeo; la mayoría de los modelos de flujo para predecir las características del régimen heterogéneo publicados antes de 1990 abarcaron aproximaciones unidimensionales, que al requerir de información experimental del perfil radial de retención de gas y de la viscosidad turbulenta perdieron generalidad [14]. Actualmente se dispone de herramientas de software y hardware capaces de procesar modelos computacionales de columnas de burbujeo que se extienden a dos y tres dimensiones bajo las aproximaciones Euleriano-Euleriano o Euleriano-Lagrangiano. Estos modelos pueden incluir el comportamiento de las celdas de circulación, la transferencia interfacial de energía y de masa, el efecto de la dispersión turbulenta en la retención de gas, modelos de clausura de diferente naturaleza y los efectos de las fuerzas interfaciales de arrastre, masa virtual y sustentación [15].

En general, los pasos limitantes en la derivación e implementación de modelos de dinámica de fluidos computacional para columnas de burbujeo son la formulación de condiciones de frontera apropiadas, los modelos de clausura de Reynolds para cuantificar los efectos de la turbulencia, las interacciones interfaciales y los procesos de coalescencia y ruptura de burbujas [13].

1.2 Flujo turbulento

El flujo turbulento se caracteriza principalmente por la irregularidad tridimensional del movimiento de un fluido; dentro de esta irregularidad se distinguen estructuras rotacionales, denominadas vórtices, coexistiendo bajo diferentes escalas de longitud y de tiempo. Comparado con el flujo laminar, el flujo turbulento es intermitente, altamente desorganizado, difusivo y disipativo e inestable: demanda el suministro continuo de energía para sostener la formación y coexistencia de vórtices multiescala.

La translación e interacción de los vórtices de diferentes escalas conlleva a un mezclado eficiente de los contenidos de los elementos de volumen inmersos en los vórtices. El mezclado eficiente en el flujo turbulento promueve velocidades elevadas de transporte de momentum, masa y energía [16].

Las escalas de longitud de los vórtices están distribuidas continuamente entre dos límites de longitud característica, siendo el mayor la escala integral y el menor la escala de Kolmogórov. La escala integral presenta órdenes de magnitud similares a las del equipo que contiene al flujo y sus movimientos son gobernados por efectos inerciales, el flujo global del fluido y la geometría del flujo. El trabajo de estiramiento efectuado por el flujo medio sobre los vórtices grandes proporciona la energía que mantiene la turbulencia. Este proceso de deformación es el mecanismo de transferencia de energía cinética entre escalas sucesivamente descendentes e inferiores a aquellas de órdenes de magnitud similares a las de la geometría de flujo: los vórtices más pequeños son estirados por vórtices más grandes y de esta manera transfieren energía a escalas de longitud continuamente más pequeñas [16]; la velocidad a la cual se cede la energía de los vórtices de mayor tamaño a los de tamaño inferior determina las propiedades de los movimientos de éstos.

La distribución de energía entre las escalas del movimiento turbulento entrega la mayor proporción a los vórtices más grandes y despliega una reducción continua con la disminución de la escala, por lo que los vórtices más pequeños tienen el contenido más bajo de energía. Las escalas más pequeñas son denominadas las escalas de Kolmogórov. Este patrón de la distribución de la energía en función de la escala es evidenciado a través del espectro de energía turbulenta en términos del número de onda.

El proceso de transferencia de energía desde grandes escalas a pequeñas escalas se denomina “cascada de energía”. A medida que las escalas de longitud (y tiempo) se reducen, comienza el predominio de los efectos viscosos. En los movimientos de la escala de Kolmogórov el trabajo se realiza contra la acción de esfuerzos viscosos, disipando en forma de calor la energía asociada con los movimientos de los vórtices. Esta disipación introduce las pérdidas mayores de energía asociadas con flujos turbulentos [14].

1.3 Ecuación de Navier-Stokes (NS)

La ecuación de Navier-Stokes (NS) puede predecir los campos de velocidad para el intervalo completo de escalas de los movimientos de vórtices del flujo turbulento. Esta ecuación junto con las de continuidad y de conservación general de especies y de energía (Tabla 1-1) proporciona las herramientas de cálculo de los campos de velocidad, de temperatura y de concentración para el flujo turbulento.

La ecuación de Navier-Stokes considera ρ y μ constantes y comportamiento newtoniano del fluido; la deducción de ésta y otras ecuaciones de conservación se encuentra reportada en la bibliografía [17].

Tabla 1-1: Ecuaciones de conservación.

Ecuación de Continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho v) \quad (1.1)$$

Conservación de Cantidad de Movimiento

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho v = -[\nabla \cdot \rho v v] - \nabla p - [\nabla \cdot \tau] + \rho g \quad (1.2)$$

Conservación de la Energía Cinética

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 \right) = - \left(\nabla \cdot \frac{1}{2} \rho v^2 v \right) - (\nabla \cdot p v) - p(-\nabla \cdot v) - (\nabla \cdot (\tau \cdot v)) - (-\tau : \nabla v) + \rho(v \cdot g) \quad (1.3)$$

Tabla 1-1: (Continuación)

Ecuación de Navier Stokes

$$\frac{Dv_j}{Dt} = \frac{\partial v_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i v_j) = \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 v_j - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_j} + g_j \quad (1.4)$$

Por componentes:

$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right] + \rho g_x \quad (1.5)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right] + \rho g_y \quad (1.6)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] + \rho g_z \quad (1.7)$$

1.4 Abordaje de la turbulencia en el proceso de solución de la ecuación de NS

El modelamiento de la turbulencia ha sido abordado a través de diferentes aproximaciones: simulación numérica directa, simulación de grandes vórtices y aproximación estadística.

1.4.1 Simulación numérica directa (DNS)

La DNS implica la solución numérica completa de la ecuación de Navier-Stokes sin introducir modelamiento alguno, por lo que demanda un costo computacional alto. La simulación numérica directa proporciona información muy detallada sobre el flujo, la cual es casi imposible de medir experimentalmente [18]. Una descripción detallada de los métodos numéricos utilizados en la DNS puede encontrarse en [19].

1.4.2 Simulación de grandes vórtices (LES)

La DNS emplea más del 99% del gasto computacional en la resolución del rango de disipación (escala de Kolmogórov) del espectro de energía turbulenta para números de Reynolds altos; sin embargo, las escalas que contienen mayor energía determinan la mayoría de las propiedades de transporte que dependen del flujo. En este sentido, la DNS invierte la mayor parte del esfuerzo computacional en la resolución de escalas que no son muy importantes para determinar cantidades de segundo orden como los esfuerzos de Reynolds y las densidades de flujo turbulento de cantidades escalares [18].

La LES aborda esta limitación resolviendo solo las escalas más grandes (dependientes del flujo). Para un número de Reynolds suficientemente alto las escalas pequeñas son independientes del flujo y, por lo tanto, puedan modelarse con éxito mediante un modelo de escala apropiado [14], lo cual implica un modelo de clausura para la micromezcla y las reacciones químicas [18].

La aplicación de LES presentan limitaciones debido a que requiere una malla muy fina y un paso de tiempo pequeño como resultado del carácter anisotrópico y transiente de los vórtices más grandes [20]; estos requerimientos de la discretización espacial y temporal conllevan a un mayor costo computacional en términos de recursos y de tiempo en comparación con el abordaje estadístico de la turbulencia.

1.4.3 Aproximación estadística - Ecuación de Navier Stokes promediada por Reynolds (RANS)

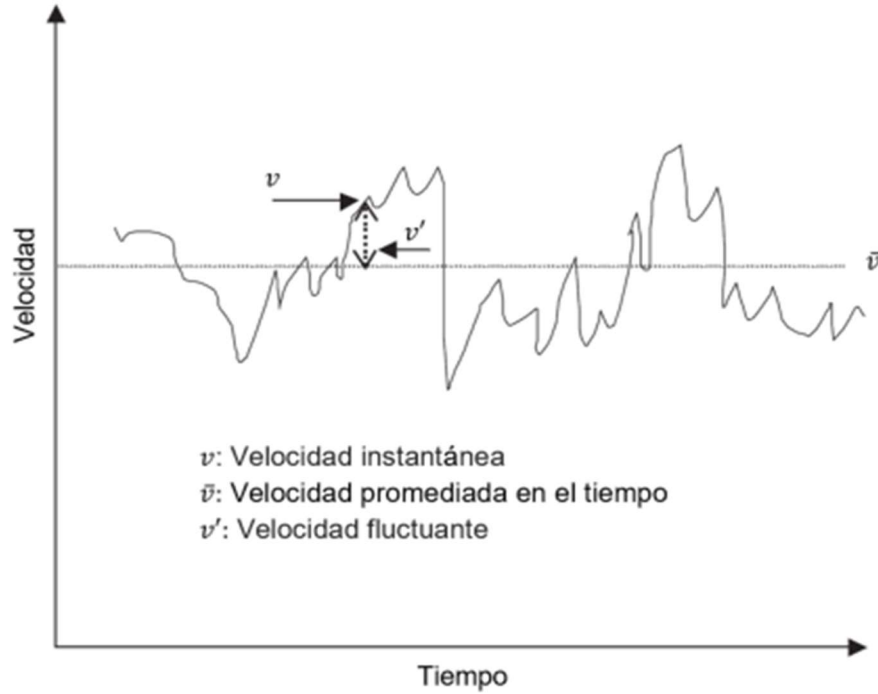
La naturaleza aleatoria del flujo turbulento es la base para su modelaje con enfoque estadístico; dicho abordaje describe el flujo turbulento en función de un parámetro estadístico del flujo tal como la velocidad media (o concentración o temperatura media). La descomposición de Reynolds, ilustrada en la Figura 1-1, representa la variación típica de la velocidad del fluido en un punto del flujo turbulento; mediante esta descomposición la velocidad instantánea en un punto, v , se compone de los aportes aditivos de una velocidad promedio, \bar{v} , y de las fluctuaciones de velocidad alrededor del promedio, v' :

$$v = \bar{v} + v' \quad (1.8)$$

La velocidad promedio se estima con base en las observaciones puntuales de la velocidad en función del tiempo:

$$\bar{v} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} v(s) ds \quad (1.9)$$

Figura 1-1: Comportamiento típico de la velocidad en un punto de un flujo turbulento [17].



La aplicación de la descomposición de Reynolds en la ecuación de NS (1.4), y el posterior promediado en función del tiempo de esta ecuación conduce a la ecuación de Navier Stokes promediada por la descomposición de Reynolds (RANS), la cual se muestra a continuación:

$$\rho \frac{D\bar{v}_j}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \bar{p} \delta_{ij} - \rho \overline{(v'_i v'_j)} \right] + \rho g_j \quad (1.10)$$

La ecuación RANS contienen un término nuevo, $-\rho \overline{(v'_i v'_j)}$, que representa la transferencia de cantidad de movimiento debido al campo de velocidad fluctuante, i. e. la turbulencia. Estos términos se denominan también esfuerzos de Reynolds o esfuerzos turbulentos:

$$\bar{\tau}_{ij}^{(t)} = \rho(\overline{v'_i v'_j}) \quad (1.11)$$

Por lo tanto, se cuenta con trece incógnitas: $\bar{v}_x, \bar{v}_y, \bar{v}_z, \bar{p}$ y nueve esfuerzos de Reynolds $-\rho(\overline{v'_i v'_j})$ y cuatro ecuaciones independientes que rigen el campo de velocidad: tres ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento y la ecuación de continuidad o la ecuación de Poisson para \bar{p} .

Las ecuaciones de cambio para los esfuerzos de Reynolds conllevan a la introducción de los términos de orden mayor $\overline{v'_i v'_j v'_k}$; similarmente, las ecuaciones de cambio para $\overline{v'_i v'_j v'_k}$ contienen las correlaciones de orden superior siguiente $\overline{v'_i v'_j v'_k v'_l}$ y así sucesivamente [11]. Esta jerarquía interminable de ecuaciones de cambio ha sido truncada a través de la introducción de empirismos destinados a la obtención de un conjunto cerrado de ecuaciones para el cálculo de las distribuciones de velocidad y presión [21]. Esta aproximación basada en empirismos, conocida como el "problema de clausura", se incluye en los modelos de turbulencia, que son conjuntos de ecuaciones destinados a relacionar las variables desconocidas de las ecuaciones RANS con cantidades conocidas. En general, para una variable escalar ϕ se tiene una ecuación de conservación y cuatro incógnitas ($\bar{\phi}$ y tres densidades de flujo turbulento del escalar $\overline{u' \phi'}$).

Los modelos de turbulencia basados en RANS se clasifican entre los que emplean la hipótesis de Boussinesq de la viscosidad turbulenta para la correlación de los esfuerzos de Reynolds y los que incorporan ecuaciones de transporte independientes para cada uno de éstos. Los primeros modelos demandan recursos de computo inferiores a los requeridos por los segundos [22].

Los modelos de viscosidad turbulenta establecen analogías entre los movimientos a nivel molecular y la turbulencia, visualizando los vórtices como entidades similares a las moléculas que experimentan colisiones e intercambio de momentum y obedecen a leyes similares a la teoría cinética de los gases [14]. Debido a lo anterior, se desarrolla la siguiente ecuación:

$$-\rho(\overline{v'_i v'_j}) = \mu_T \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\mu_T \frac{\partial \bar{v}_k}{\partial x_k} + \rho k \right) \quad (1.12)$$

La viscosidad turbulenta, μ_T , no es una propiedad del fluido (a diferencia de la viscosidad molecular) y depende del estado local del flujo o turbulencia. La viscosidad turbulenta es, además, un escalar susceptible de variación significativa en el dominio de flujo. En la relación (1.12) k es la energía cinética turbulenta y se expresa en la ecuación (1.13) usando la notación de Einstein:

$$k = \frac{1}{2} \overline{(v'_i v'_i)} \quad (1.13)$$

La analogía establecida entre el comportamiento de los vórtices y el de las moléculas en un gas permite expresar la viscosidad turbulenta en función de escalas características de velocidad y de longitud de la turbulencia, u_T y l_T respectivamente:

$$\mu_T \propto \rho u_T l_T$$

Los modelos de turbulencia basados en la hipótesis de Boussinesq calculan la viscosidad turbulenta mediante ecuaciones que estiman indirectamente estas escalas características de longitud y de velocidad turbulenta. El número de ecuaciones diferenciales parciales empleadas para esta estimación jerarquiza los modelos en aquellos de cero ecuaciones, una, dos y tres. Los modelos de cero ecuaciones basan sus estimativos en ecuaciones algebraicas y por ende no ofrecen resultados satisfactorios en muchos escenarios debido a que no consideran convección ni difusión de energía [23]. Las ecuaciones diferenciales parciales empleadas en estos modelos corresponden a ecuaciones de transporte generalizadas de variables de la turbulencia.

Los modelos de dos ecuaciones (diferenciales parciales) presentan la mayor acogida para la simulación de campos de flujo unifásico y multifásicos tal como puede apreciarse en la literatura disponible, en la que se presentan y aplican diferentes modelos de esta naturaleza. En todos los modelos de dos ecuaciones una de las ecuaciones corresponde siempre a la de transporte de energía cinética turbulenta y la segunda variable elegida para la ecuación de transporte constituye el factor diferenciador entre los modelos. La variable elegida para la segunda ecuación de transporte se define usualmente a partir de la relación [14]:

$$z = k^m l_T^n \quad (1.14)$$

Algunas de las variables de la turbulencia más utilizadas para construir la segunda ecuación se muestran en la Tabla 1-2.

Tabla 1-2: Modelos de dos ecuaciones más utilizados [14].

z	m	n
Frecuencia de turbulencia de energía contenida en vórtices, f	1/2	-1
Cuadrado de las fluctuaciones de vorticidad promediadas en el tiempo, W	1	-2
Tasa de disipación de energía turbulenta, ε	3/2	-1
Producto de energía y escala de longitud, kl	1	1

La especificación $z = \varepsilon$ conduce al modelo de turbulencia denominado $k - \varepsilon$; este modelo ha sido extensamente estudiado y utilizado y es recomendado en aplicaciones industriales para los flujos internos típicos encontrados en reactores [14], [24]. En este modelo la viscosidad turbulenta se relaciona con k y ε mediante la siguiente ecuación, en la que C_μ es un coeficiente empírico:

$$\mu_T = \frac{C_\mu \rho k^2}{\varepsilon} \quad (1.15)$$

La forma modelada de las ecuaciones de transporte para k y ε se presentan abajo:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + G - \rho \varepsilon \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_i \varepsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + \frac{\varepsilon}{k} (C_1 G - C_2 \rho \varepsilon) \quad (1.17)$$

En este par de ecuaciones, el primer término del lado izquierdo representa la acumulación, seguida por el término que describe el transporte convectivo. En el lado derecho del igual aparece, primero, el término correspondiente al transporte difusivo; G representa la generación, asociada a la conversión de energía cinética media a energía cinética turbulenta para la ecuación de k , y al estiramiento de los vórtices por el flujo medio y el flujo fluctuante para la ecuación de ε . El término de disipación en la ecuación de k es simplemente ε y el término de disipación en la ecuación de ε no puede ser modelado individualmente, pero la diferencia entre generación y disipación de ε es modelada con la

ayuda de dos constantes empíricas [14]. En las ecuaciones anteriores, σ_k y σ_ε son los números de Prandtl turbulentos para k y ε respectivamente, los cuales relacionan la difusividad turbulenta de k y ε con la viscosidad turbulenta; C_1 y C_2 son constantes empíricas. Las magnitudes de C_1 , C_2 y C_μ se obtienen con la ayuda de información experimental sobre flujos simples.

Además de la hipótesis de viscosidad turbulenta, la familia de modelos $k - \varepsilon$ introduce la suposición de turbulencia isotrópica y una formulación de gradiente lineal en términos de cantidades medias del flujo [25]. El modelo $k - \varepsilon$ Standard es eficiente computacionalmente [20], pero predice valores muy altos de generación de turbulencia en regiones donde el flujo medio es altamente acelerado o desacelerado [14].

Las dos modificaciones más utilizadas de la familia de modelos $k - \varepsilon$ son el modelo $k - \varepsilon$ RNG y el Realizable. El primero deriva las ecuaciones para k y ε utilizando la teoría de renormalización de grupos para eliminar los vórtices de escala pequeña expresando su efecto en términos de escalas mayores y una viscosidad modificada [26]. Este modelo permite obtener mejores resultados con simulaciones en regiones con bajo número de Reynolds y cuando el flujo cambia de dirección repentinamente. La principal diferencia es que este modelo modifica la ecuación para ε introduciendo el efecto de la distorsión del flujo medio en la disipación de la turbulencia, adicionalmente, la viscosidad turbulenta es modelada de una forma diferente con el fin de considerar zonas donde el flujo no es completamente turbulento [27]. Sin embargo, RNG presenta como desventaja la predicción de niveles de turbulencia más bajos y puede subestimar el valor de k , además este modelo no ha sido ampliamente validado como el $k - \varepsilon$ Standard [28].

El modelo $k - \varepsilon$ Realizable utiliza una ecuación para la tasa de disipación basada en la ecuación de transporte de la fluctuación de vorticidad cuadrada media y una formulación alternativa para la viscosidad turbulenta; este modelo está construido de modo que los esfuerzos de Reynolds satisfagan algunas restricciones matemáticas consistentes con la realidad física de los flujos turbulentos [29]. Este modelo se usa para flujos que presentan una gran tasa de deformación, es decir, flujos con rotación y curvatura importantes, por lo tanto, funciona mejor que el $k - \varepsilon$ Standard para flujos con múltiples vórtices, recirculación y flujos separados. Los problemas principales radican en su baja estabilidad y la demanda superior de recursos computacionales a los requeridos para la formulación estándar [27].

1.5 Flujo multifásico disperso

El modelado de flujo multifásico dispone de diferentes aproximaciones computacionales entre las cuales se encuentran: flujo polvoriento (dusty gas), Euleriano de equilibrio, Euleriana-Euleriana, y Lagrangiana-Euleriana. La aplicación de una aproximación específica está sujeta a los tamaños relativos de las partículas dispersas y a la fracción en volumen de la fase dispersa.

La fracción en volumen ocupado por la fase dispersa (ϕ_v) y la carga másica (ϕ_m), definida como la relación de masas entre la fase dispersa y la fase continua (o fase de arrastre), son los parámetros determinantes del nivel de interacción entre las fases. Cuando ambos parámetros son pequeños, el efecto de las partículas sobre el comportamiento de la fase continua puede ignorarse debido a que el flujo de la fase continua determina el comportamiento de la fase dispersa (acople de una-vía). Si la masa de fase dispersa es comparable con la de fase continua, el efecto de la fase particulada sobre el comportamiento dinámico de la continua debe considerarse en el análisis (acople de dos-vías). Para valores mayores de ϕ_v la interacción entre partículas (colisiones, aglomeraciones y fractura) es relevante, conduciendo al acople de 4-vías [14].

1.5.1 Flujo polvoriento y Euleriano de equilibrio

La aproximación de flujo polvoriento asume que las partículas dispersas siguen el flujo de la fase continua (o fase de arrastre) debido al tamaño reducido del particulado; esta suposición permite considerar al sistema fase continua-fase dispersa como un único fluido cuya densidad depende de la fracción másica local de las partículas suspendidas en el flujo. La simplificación de un único fluido implica un conjunto único de ecuaciones de conservación de masa, momentum y energía para la mezcla y de una ecuación de concentración para la fase particulada [14].

La aproximación Euleriana de equilibrio retiene la simplicidad del flujo polvoriento al suponer que el movimiento de las partículas es establecido por el flujo que las rodea debido a su tamaño reducido; sin embargo, asume que las partículas pueden desplazarse con velocidad diferente a la de la fase de arrastre (fase continua) ya que calcula la velocidad de la partícula con base en la velocidad de la fase continua y una corrección establecida con el número de Stokes. Esta aproximación requiere de la resolución de un conjunto único

de ecuaciones de conservación para la fase continua o de arrastre junto con una ecuación para la concentración de las partículas [14].

1.5.2 Aproximación Lagrangiana-Euleriana

Esta aproximación emplea una descripción Lagrangiana para las partículas y una Euleriana para la fase continua. Con el enfoque Lagrangiano se efectúa el seguimiento de la posición, cantidad de movimiento, masa y energía de las partículas. Las ventajas de esta aproximación radican en la ausencia de restricciones para el tamaño de las partículas de la fase dispersa y en el manejo sencillo de la polidispersidad [17]; la desventaja principal es la intensidad computacional alta demandada por este modelo, restringiendo, por lo tanto, su aplicación a la simulación de columnas pequeñas y sistemas con una fracción baja de volumen de la fase dispersa (<10%) [12], [33].

La descripción completa del movimiento de la partícula requerirá del campo de flujo de la fase continua, el cual es cuantificado por las ecuaciones de conservación en el marco de referencia Euleriano; usando notación tensorial para las ecuaciones de continuidad y de momentum:

$$\frac{\partial(\alpha_C \rho_C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_C \rho_C U_C) = S_C \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial(\alpha_C \rho_C U_C)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_C \rho_C U_C U_C) = -\alpha_C \nabla p - \nabla \cdot (\alpha_C \tau_C) + \alpha_C \rho_C g + S_{Cm} \quad (1.19)$$

El subíndice C indica la fase continua y S_C y S_{Cm} representan el intercambio de masa y de cantidad de movimiento, respectivamente, entre las fases dispersa y continua.

La descripción Lagrangiana de la fase dispersa acude a la aplicación de la segunda Ley de Newton a las partículas:

$$m_p \frac{du_p}{dt} = F_p + F_D + F_{VM} + F_L + F_H + F_G \quad (1.20)$$

m_p y u_p son la masa y velocidad de la partícula, respectivamente, y F las fuerzas que actúan sobre esta. F_p : fuerza debido al gradiente de presión en la fase continua. F_G : fuerza

de gravedad. F_D : fuerza de arrastre, causada por la diferencia de velocidades entre las fases (velocidad de deslizamiento). F_L : fuerza de sustentación que es la que gobierna el movimiento lateral de las burbujas durante su ascenso a través de la columna. F_{VM} : fuerza de masa virtual, producida por el arrastre y aceleración de parte de la fase continua que rodea la partícula debido al movimiento de la partícula con referencia a la fase continua; el arrastre acelerado de la fase continua se manifiesta como una masa adicionada de la partícula [30].

1.5.3 Aproximación Euleriana o de dos fluidos

Esta aproximación concibe a las dos fases como medios fluidos continuos inter penetrantes y describe el movimiento en un sentido macroscópico, lo cual es preferible en aplicaciones industriales [31]. La aproximación de dos fluidos requiere de la formulación de principios de conservación de momentum, masa y energía para cada una de las dos fases; las fases interactúan entre sí mediante procesos de transporte interfacial y los términos de transporte se consideran como fuentes o sumideros en las respectivas ecuaciones. En esta aproximación el tamaño de las partículas puede ser superior al considerado en las aproximaciones de flujo polvoriento y Euleriano de equilibrio, pero es computacionalmente más intensiva que estas debido al conjunto adicional de ecuaciones de transporte, especialmente para sistemas polidispersos con distribuciones amplias de tamaño de partícula [32].

Para el análisis Euleriano se tiene:

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k = 1 \quad (1.21)$$

Los α_k representan las fracciones en volumen de las fases presentes (subíndice k).

La ecuación de continuidad para cada fase será:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k U_k) = \sum_{p=1, p \neq k}^n S_{pk} \quad (1.22)$$

k representa la fase y S_{pk} la transferencia de masa desde la fase p hacia la fase k .

La ecuación de cantidad de movimiento, en notación tensorial, para cada fase será:

$$\frac{\partial(\alpha_k \rho_k U_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k U_k U_k) = -\alpha_k \nabla p - \nabla \cdot (\alpha_k \tau_k) + \alpha_k \rho_k g + F_k + F_g \quad (1.23)$$

F_k describe al intercambio de momentum interfacial entre la fase k y las otras fases presentes. El acople de términos interfaciales debe satisfacer la condición: $F_{kq} = -F_{qk}$.

Las fuerzas interfaciales relevantes en las columnas de burbujeo fueron enumeradas previamente en la aproximación Lagrangiana-Euleriana. Existen otras fuerzas interfaciales tales como la tensión superficial, la fuerza de dispersión turbulenta que cuantifica el aporte de vórtices más grandes que el tamaño de burbuja en la dispersión de las mismas [11], la lubricación de pared que tiende a empujar la fase dispersa lejos de las paredes y modelos para incluir el aporte de la fuente de turbulencia de interfase [22]. Sin embargo, la introducción de estas fuerzas en los modelos computacionales no es muy frecuente debido a que su aporte es despreciable comparado con las fuerzas de arrastre y de sustentación [33].

1.6 Balances de población

En las columnas de burbujeo el tamaño inicial de las burbujas va cambiando durante su ascenso por la columna debido a factores tales como la turbulencia, la expansión por cambio de presión hidrostática, fenómenos de coalescencia y ruptura, etc. [34]. Una distribución variable de tamaños de burbuja incide en el desempeño del equipo a través de la modificación del patrón de circulación del líquido, la velocidad de este y el área interfacial [35].

Desafortunadamente, la inclusión de los cambios de distribución de tamaño de burbuja en los modelos computacionales de las columnas de burbujeo acarrea complicaciones adicionales en el proceso de cálculo de los campos de flujo. Estas complicaciones se deben básicamente a dos factores, siendo el primero la introducción de ecuaciones adicionales (balance general de población y modelos de clausura) computacionalmente costosos debido a su carácter integro-diferencial; el segundo factor recae en la inestabilidad introducida en la convergencia de los algoritmos de dinámica de fluidos computacional promovida por la relación intrínseca entre el tamaño de burbuja y su

distribución con la velocidad de ascenso de las mismas y las fuerzas de interacción interfacial, especialmente la de arrastre y las que tienen un efecto en el movimiento lateral de la burbuja [36].

El balance de población para una función de densidad de distribución en número que depende del tamaño de burbuja d (diámetro), la posición local en el dominio del flujo \vec{r} y el tiempo t , $f(d, \vec{r}, t)$ es:

$$\frac{\partial f(d, \vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla_{\vec{r}} \cdot (\vec{V} f(d, \vec{r}, t)) + \frac{\partial}{\partial d} (v_d(d, \vec{r}, t) f(d, \vec{r}, t)) - (B_B(d, \vec{r}, t) + B_C(d, \vec{r}, t) - D_B(d, \vec{r}, t) - D_C(d, \vec{r}, t)) = 0 \quad \left[\frac{1}{\text{sm}^3(\text{m})} \right] \quad (1.24)$$

En este balance el vector \vec{V} representa la velocidad lineal de flujo y v_d la velocidad de cambio del diámetro debido a fenómenos tales como cristalización o transferencia de masa. Por lo tanto $\vec{V} f(d, \vec{r}, t)$ y $v_d(d, \vec{r}, t) f(d, \vec{r}, t)$ representan las densidades de flujo de partículas hacia o desde el estado (d, \vec{r}, t) .

Los términos B_B y B_C representan el nacimiento de partículas del estado (d, \vec{r}, t) debido a mecanismo de ruptura y de coalescencia, respectivamente. Los términos D_B y D_C similarmente describen la muerte de partículas por los mismos mecanismos. Una explicación detallada del proceso de obtención del balance general y de cada término esta fuera del alcance de este texto y puede encontrarse en la literatura.

Similar al problema de clausura de la turbulencia, los balances de población requieren de modelos para la clausura de los términos de nacimiento y de muerte por ruptura y por coalescencia. En [16], [37] y [38] se presenta una revisión de los modelos empleados en los balances; algunos de estos modelos están en función de propiedades de la turbulencia tales como la velocidad de disipación de energía turbulenta y energía cinética turbulenta.

Dentro de los métodos numéricos disponibles para la solución de los balances de población, los enfocados en el cálculo de los momentos de la función de distribución de densidad en número presentan mayor acogida por su costo computacional. Estos métodos convierten los balances de población integro diferenciales en ecuaciones diferenciales parciales: una ecuación para cada momento de la función de densidad. Algunos ejemplos de estos métodos son el método de momentos estándar, el método de momentos de cuadratura (QMOM), el método de los momentos de cuadratura directa (DQMOM), etc.

Además de los métodos comentados previamente, la solución numérica de los balances de población dispone, también, del método discreto, que acarrea la discretización de la función de distribución del tamaño de partícula en clases determinadas por el intervalo de variación del diámetro de la burbuja; esta aproximación conlleva inevitablemente a la formulación de un balance de población en función de la fracción en volumen para cada clase [35]. Este método requiere un conocimiento previo de la distribución de tamaño de burbuja; sin embargo, tiene como ventaja que proporciona la función de densidad en número, la cual, en otros métodos debe ser construida a partir de los momentos.

2. Columna de burbujeo

2.1 Descripción del sistema

El trabajo desarrollado en esta tesis se enfocó en la simulación de los campos de flujo en la columna de burbujeo rectangular descrita en la Figura 2-1 bajo las condiciones de operación registradas en la Tabla 2-1; la Figura 2-2 presenta fotografías de la operación de este equipo. La selección tanto de la geometría de la columna como de las condiciones de operación obedeció a la disponibilidad de información experimental requerida para la validación de los modelos de flujo evaluados.

Figura 2-1: Geometría de la columna de burbujeo modelada. Adaptado de [39].

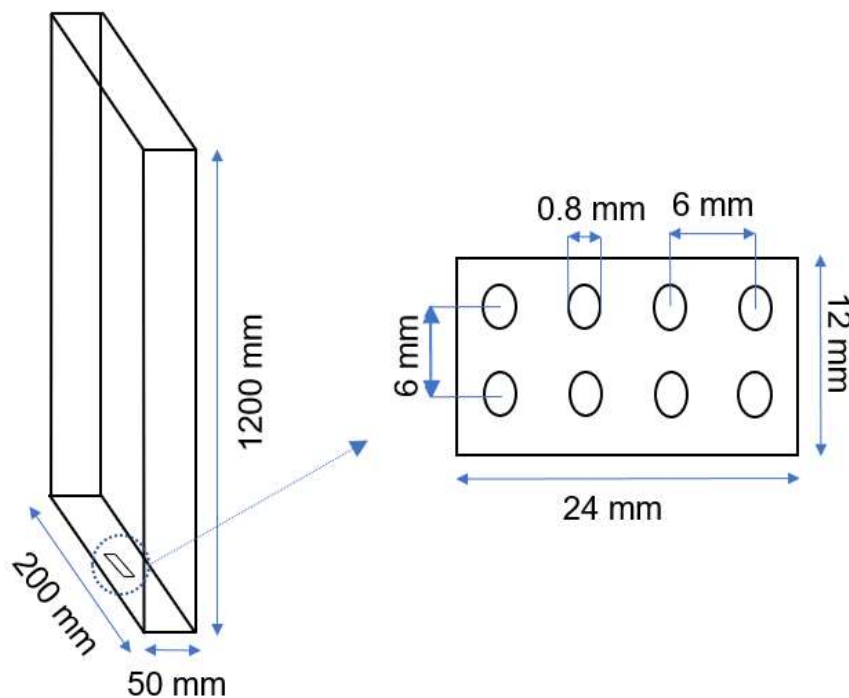
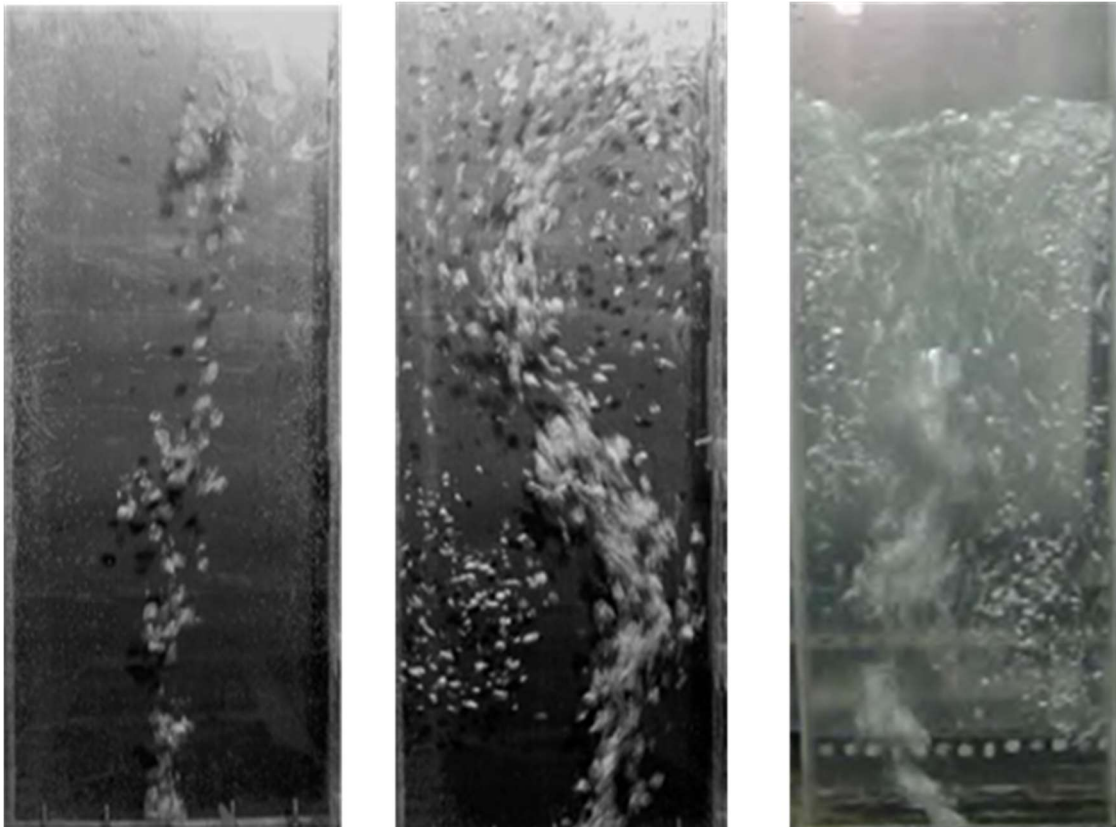


Tabla 2-1: Condiciones de operación de la columna de burbujeo modelada. Adaptado de [39].

Fase continua	Agua líquida @ 25°C
Fase dispersa	Aire @ 25°C
Nivel inicial de líquido	450 mm
Caudal de gas	48, 260 y 600 L/h
Caudal de líquido	0 L/h
Presión de operación	Atmosférica

Figura 2-2: Columna de burbujeo seleccionada. Caudal de aire de 48 L/h (izq.) [40], 260 L/h (centro) [40] y 600 L/h (der.) [41].



2.2 Datos experimentales para la validación de las simulaciones

El costo y la complejidad de mediciones experimentales de campos de flujo en columnas de burbujeo han sido factores limitantes en la generación y adquisición de información confiable, llevando, por lo tanto, a que los datos disponibles estén confinados en intervalos limitados de condiciones de operación, por ejemplo, velocidad superficial del gas baja. Debido a lo anterior, la mayoría de las investigaciones experimentales se limitan a la observación del movimiento de la pluma de burbujas y patrones de circulación del líquido [41]. En la Tabla 2-2 se resumen las fuentes de los datos experimentales de campos de flujo utilizadas para validar las simulaciones realizadas en la presente investigación.

Dentro de los reportes encontrados en la literatura, el estudio desarrollado por Pflieger, Gomes, Gilbert y Wagner [39] es, posiblemente, el más significativo al cuantificar los campos de flujo de una columna de burbujeo rectangular [41]. Esta investigación utilizó anemometría láser doppler (LDA) y métodos de procesamiento de imágenes (PTV, PIV) para la adquisición de los datos [39]. Los datos de retención de gas experimentales con caudal de 48 L/h utilizados en la presente tesis fueron tomados de la referencia anterior. Los datos experimentales de retención de gas con caudal de 260 L/h, reportados en Buwa, Deo y Ranade [40], provienen de los experimentos realizados por Buwa y Ranade, quienes se valieron de una sonda de conductividad de punta única, métodos de procesamiento de datos y procedimiento de validación fotográfica para realizar las mediciones [42].

Los datos experimentales de velocidad axial del líquido se tomaron de las investigaciones publicadas por Upadhyay, Pant y Roy [41] y Upadhyay [43], en donde se validó la precisión del método de seguimiento de partículas radioactivas con base en los resultados obtenidos por Pflieger *et al.* Las observaciones experimentales sobre la dinámica de flujo se toman de Upadhyay *et al.* [41]

A menos que se indique lo contrario, los perfiles de velocidad axial y retención de gas se reportan sobre una línea horizontal ubicada en el centro de la columna a una altura de 0,37 m del distribuidor.

Tabla 2-2: Datos experimentales para validación de campos de flujo calculados.

Caudal de aire	Datos Experimentales	Fuente
48 L/h	Retención de gas	[39]
	Velocidad axial del líquido	[43]
260 L/h	Retención de gas	[40]
600 L/h	Velocidad axial del líquido	[41]
48, 260 y 600 L/h	Dinámica de flujo	[41]

3. Metodología

El software Ansys Fluent® V. 19.2 fue empleado para la implementación del modelamiento CFD de la columna de burbujeo descrita en la sección 2.1. La licencia del software fue adquirida a través del proyecto de investigación “*Aplicación de la dinámica de fluidos computacional a la ingeniería de reactores químicos homogéneos y heterogéneos*”, financiado por la Convocatoria Nacional de Proyectos para el Fortalecimiento de la Investigación, Creación e Innovación de la Universidad Nacional de Colombia 2016-2018.

Las simulaciones se efectuaron en un servidor DELL PRECISION T1600 que cuenta con un procesador Intel® Xeon de 12 núcleos y 16 Gb de memoria RAM y en un servidor DELL PRECISION T5810 con procesador Intel® Xeon de 5 núcleos y 8 Gb de memoria RAM. Las simulaciones tuvieron una duración entre 10 y 60 días dependiendo de los modelos integrados en el modelo computacional, el caudal de aire, el paso de tiempo y el tiempo de flujo requerido.

Aunque el modelamiento computacional por CFD de una columna de burbujeo abarca desde los modelos pertinentes para el flujo, la turbulencia y el sistema multifásico hasta la creación de la geometría y del mallado y la definición de parámetros estrictamente numéricos como discretización y solución de ecuaciones discretas y relajación, en esta tesis el uso del término *Modelo computacional* se referirá al conjunto integrado por: modelo de clausura de la turbulencia, modelo de pared, modelo de turbulencia de flujo multifásico, método de modelamiento del flujo multifásico, distribución de tamaño de burbuja, fuerzas interfaciales y la clausura de fuerzas interfaciales (modelos para el cálculo de los coeficientes de estas fuerzas), condiciones de frontera (entrada de agua, entrada y salida de aire) y paso de tiempo.

En la Tabla 3-1 se resumen los parámetros y variables de respuesta evaluadas en esta investigación. La validación de las predicciones efectuadas con los modelos se realizó mediante comparación con datos experimentales reportados en la literatura (sección 2.2),

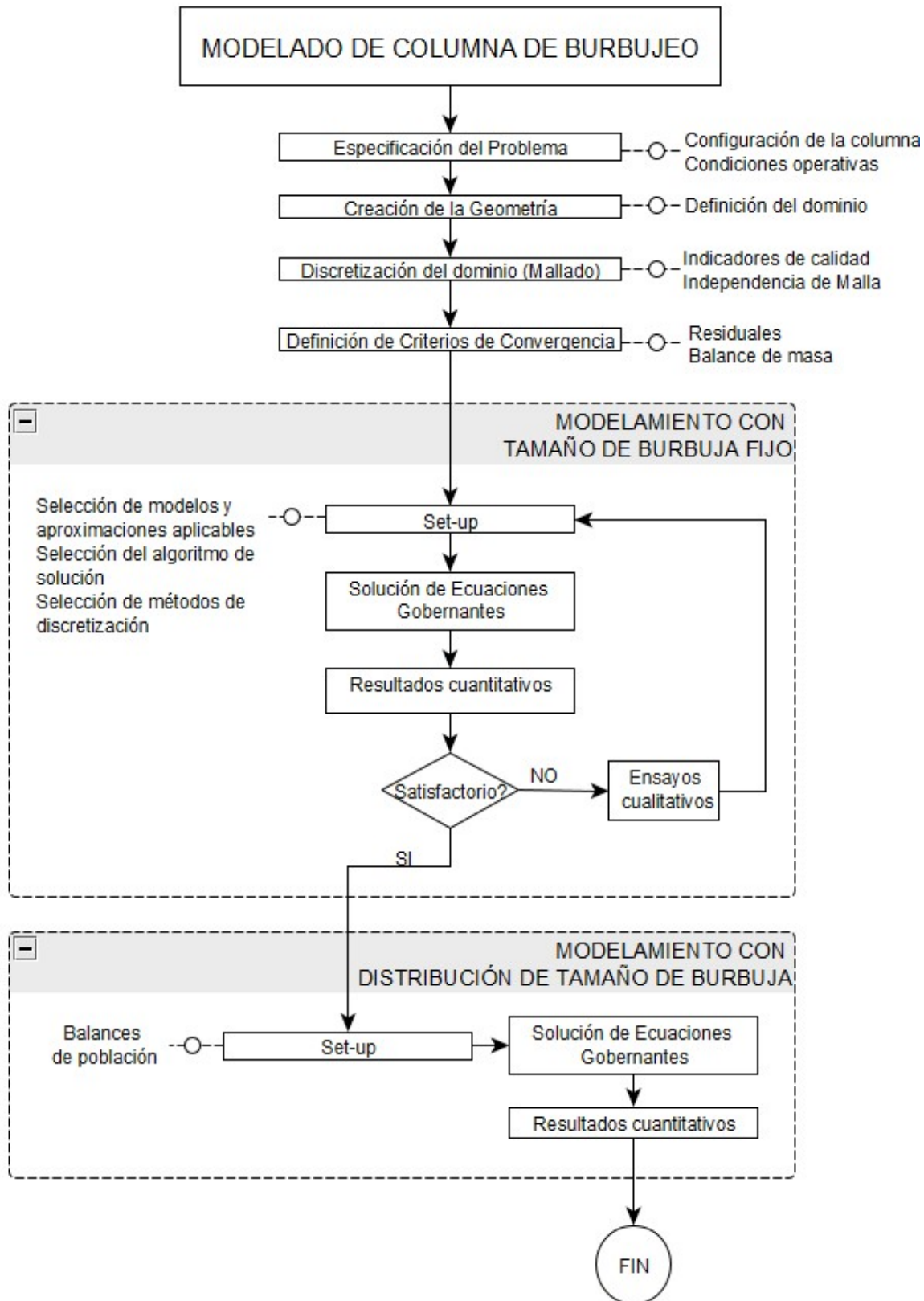
calculando el coeficiente de determinación (R^2) para la correlación estadística entre el modelo y los datos y determinando el error cuadrático medio (RMSE).

La Figura 3-1 presenta las etapas establecidas para el modelamiento computacional de la columna de burbujeo con el menor caudal de aire (48 L/h) en la presente investigación. La primera parte del trabajo abarcó experimentos numéricos con parámetros de simulación considerando un tamaño de burbuja único. Posteriormente, se incluyó en la simulación un modelo de balance de población para determinar el aporte de la distribución de tamaño de burbuja en la predicción de los campos de flujo. Finalmente se realizaron las simulaciones con mayor flujo de aire de entrada (260 y 600 L/h), teniendo como base los parámetros ajustados para la simulación de 48 L/h.

Tabla 3-1: Simulaciones efectuadas para las validaciones cuantitativas de los modelos computacionales.

Caudal de aire	Parámetro Estudiado	Variable de respuesta
<i>Tamaño de burbuja fijo</i>		
48 L/h	Validación del modelo computacional	Velocidad axial Retención de gas Periodo de oscilación de la pluma
	Modelo de turbulencia multifásica	
	Clausura de fuerzas interfaciales	Velocidad axial
	Fuerza de sustentación	Retención de gas
	Modelo de clausura de la turbulencia	
260 L/h	Validación del modelo computacional	Retención de gas
600 L/h	Validación del modelo computacional	Velocidad axial
<i>Distribución de tamaño de burbuja</i>		
48 L/h	Validación del modelo computacional	Velocidad axial Retención de gas Diámetro de burbuja medio

Figura 3-1: Metodología empleada para el modelamiento CFD de la columna de burbujeo.



4. Modelamiento del sistema seleccionado

4.1 Geometría

Ansys DesignModeler® se empleó para construir la geometría de la columna descrita en la sección 2.1. El modelamiento abarcó las tres dimensiones debido a que las simulaciones en 2D presentan limitaciones predictivas de la dinámica del flujo y tienden a sobre predecir la turbulencia [39].

La geometría simulada presenta dos modificaciones a la utilizada por Pflieger *et al.* [39]; la primera tuvo como propósito la disminución del tiempo de cálculo mediante la reducción de la altura de la columna, acortando el espacio de aire encima de la interfase agua-aire. El factor de seguridad recomendado para este espacio es de 2 veces la altura final estimada del agua en la columna [44]; sin embargo, se utilizó un factor de 1,5 veces, el cual no introdujo dificultades debido a que la fracción del agua en el interior de la torre siempre se mantuvo constante.

La segunda modificación consistió en la representación del distribuidor como una placa rectangular de 24 mm x 12 mm; este arreglo de esta sección sustituyó al original, constituido por orificios circulares con diámetro muy inferior a las demás dimensiones del equipo. El cambio en la configuración del distribuidor obedeció a la necesidad de facilitar el desarrollo del mallado y la convergencia del proceso de solución de las ecuaciones, además, está demostrado que esta modificación no afecta los resultados de las simulaciones [11].

4.2 Mallado

La construcción de mallados estructurados y no estructurados para las simulaciones de los campos de flujo de la columna de burbujeo se efectuó con Ansys Meshing®; pruebas realizadas con ambos tipos de arreglos permitieron descartar la aplicación de las mallas no estructuradas en esta tesis debido a las deficiencias que mostraron en la convergencia y al costo computacional superior que esto conllevó en comparación con los arreglos estructurados. El arreglo seleccionado para este trabajo fue, finalmente, uno estructurado hexagonal uniforme, que presenta como ventaja adicional dispersiones numéricas bajas (falsa difusión baja) al estar alineado con el flujo en columnas de burbujeo [45], [26].

Las cuatro mallas reportadas en la Tabla 4-1, caracterizadas por niveles de discretización espacial diferentes, se emplearon para evaluar el efecto del tamaño de los elementos en la difusión numérica de los resultados de la simulación y la independencia de malla. Estas cuatro mallas presentaron magnitudes altamente satisfactorias de los indicadores de calidad (deformación, calidad ortogonal y calidad de los elementos), tal como puede apreciarse en la Tabla 4-2, en la que también se incluyen los valores recomendados en la literatura para estos indicadores.

La deformación (skewness) es un parámetro de calidad del mallado importante para el método de volúmenes finitos [44] ya que mide la equilateralidad de las caras de los elementos. Caras perfectamente equiláteras presentan una magnitud de cero [45]; magnitudes de deformación de las caras muy altas conllevan a problemas de convergencia.

La calidad ortogonal o indicador de ortogonalidad compara los elementos de la malla con un cubo perfecto. El análisis de este indicador para una malla se efectúa con base en la magnitud registrada por el elemento con la ortogonalidad más baja de todo el arreglo; esta consideración se sustenta en los problemas de convergencia que pueden promoverse por la presencia de al menos un único elemento fuera de los intervalos de aceptación de este criterio de calidad.

La calidad de los elementos relaciona el volumen y la longitud de las aristas del sólido; una magnitud de 0 para la calidad de un elemento significa que éste tiene volumen negativo o no tiene.

Tabla 4-1: Arreglos computacionales evaluados en la independencia de malla.

	Tamaño de Malla	Número de Elementos
Malla A	26x7x48	14784
Malla B	45x13x75	43875
Malla C	91x26x150	354900
Malla D	114x33x188	707256

Tabla 4-2: Criterios de calidad para las mallas empleadas en las simulaciones.

	Parámetro		
	Deformación (Skewness)	Calidad Ortogonal	Calidad de los Elementos
	Rango de valores		
Malla A	2×10^{-10} - $3,8 \times 10^{-6}$	1	0,41- 0,58
Malla B	$1,6 \times 10^{-10}$ - $3,8 \times 10^{-6}$	1	0,63-0,68
Malla C	$1,6 \times 10^{-10}$ - 1×10^{-5}	1	0,63-0,65
Malla D	$1,5 \times 10^{-10}$ - $1,3 \times 10^{-5}$	1	0,57-0,66
Valor recomendado	<0,8 [44]	>0,01 [45]	>0 [45]

La Figura 4-1 muestra la velocidad axial promedio obtenida con simulaciones desarrolladas utilizando el Modelo computacional 1, descrito en la Tabla 4-6, y los arreglos contenidos en la Tabla 4-1. En general, las velocidades calculadas muestran similitud apreciable para las mallas A, B y C; este patrón de comportamiento también fue encontrado por Gupta y Roy [35] quienes evaluaron arreglos con discretización espacial similar a la de dichas mallas.

En el caso de la Malla D, la cual es la más fina de todas, los resultados obtenidos fueron físicamente inconsistentes, ya que la pluma no presentó oscilaciones inclusive después de 700 segundos de flujo simulados; como consecuencia la distribución radial del gas diverge apreciablemente de las otras mallas evaluadas y de las mediciones experimentales. Otros autores también han encontrado que al disminuir el tamaño de la malla, las predicciones calculadas se alejan de los datos experimentales [11], [30], [46].

Este comportamiento de la malla D cae en el debate que se suscita en la relación entre el tamaño de las entidades dispersas y el tamaño de los elementos del mallado. Algunas referencias afirman que en simulaciones 3D las mallas muy finas no empeoran las predicciones de los modelos computacionales e incluso capturan mejor las estructuras características del flujo turbulento [4], [47], [48].

En contraste, otros autores [25], [49], [50], [51] establecen que para modelar el flujo multifásico se debe limitar el tamaño mínimo de los elementos, dado que las ecuaciones están promediadas en volumen, el tamaño del elemento no debe ser más pequeño que la escala de longitud característica de la fase dispersa, es decir, en este caso no debe ser menor que el diámetro de la burbuja. En la investigación de Bech [52] se encontró que los resultados de las simulaciones dependen de la longitud de las escalas de movimiento que se representan, debido a que los modelos de turbulencia introducen nuevos modos de inestabilidad en la oscilación de la pluma a medida que la malla se refina, de esta forma, relacionó el tamaño que deben tener los elementos de la malla con la escala de longitud de Kolmogórov, encontrando un punto de cambio a partir del cual un refinamiento adicional conlleva a predicciones alejadas de la realidad experimental. Los resultados mostrados en la Figura 4-1 se encuentran acorde con lo planteado por este último grupo de autores, que sostiene que en simulaciones con flujos multifásicos existe un tamaño mínimo de malla para obtener predicciones consistentes con los datos experimentales.

Además de la independencia de malla, otro de los factores que determinan el nivel de discretización espacial del arreglo es la difusión numérica, o falsa difusión, de los resultados, la cual en las columnas de burbujeo introduce incertidumbre en la predicción del patrón de recirculación local en la parte superior de la columna tal como lo estableció Buwa *et al.* [40]; la Figura 4-2 registra el alcance de este comportamiento local de la simulación en la parte superior del dominio de la fase líquida para los tres de los cuatro tamaños de elemento evaluados, la malla D no fue considerada en esta comparación por su incapacidad para predecir un patrón de flujo coherente con las observaciones experimentales. Una inspección de este campo local para los tres arreglos presenta a la malla C como la más adecuada en la predicción del patrón de recirculación del líquido. Este resultado y el comentado en el párrafo previo llevaron a la selección del arreglo C para el desarrollo de todas las simulaciones de este trabajo.

La malla seleccionada (malla C) fue adicionalmente evaluada con el método de convergencia de mallado (GCI), que estima el error de discretización; este método es ampliamente recomendado y probado en múltiples modelos computacionales para la estimación de la incertidumbre numérica [53]. El error estimado de discretización de 3,1 % para la malla C es inferior al límite máximo de 5% reportado en la literatura para los cálculos basados en el modelo de RANS, que son los empleados en la presente investigación [54].

Figura 4-1: Comparación de la velocidad axial promedio obtenida con el Modelo computacional 1 (Tabla 4-6) y las mallas de la Tabla 4-1.

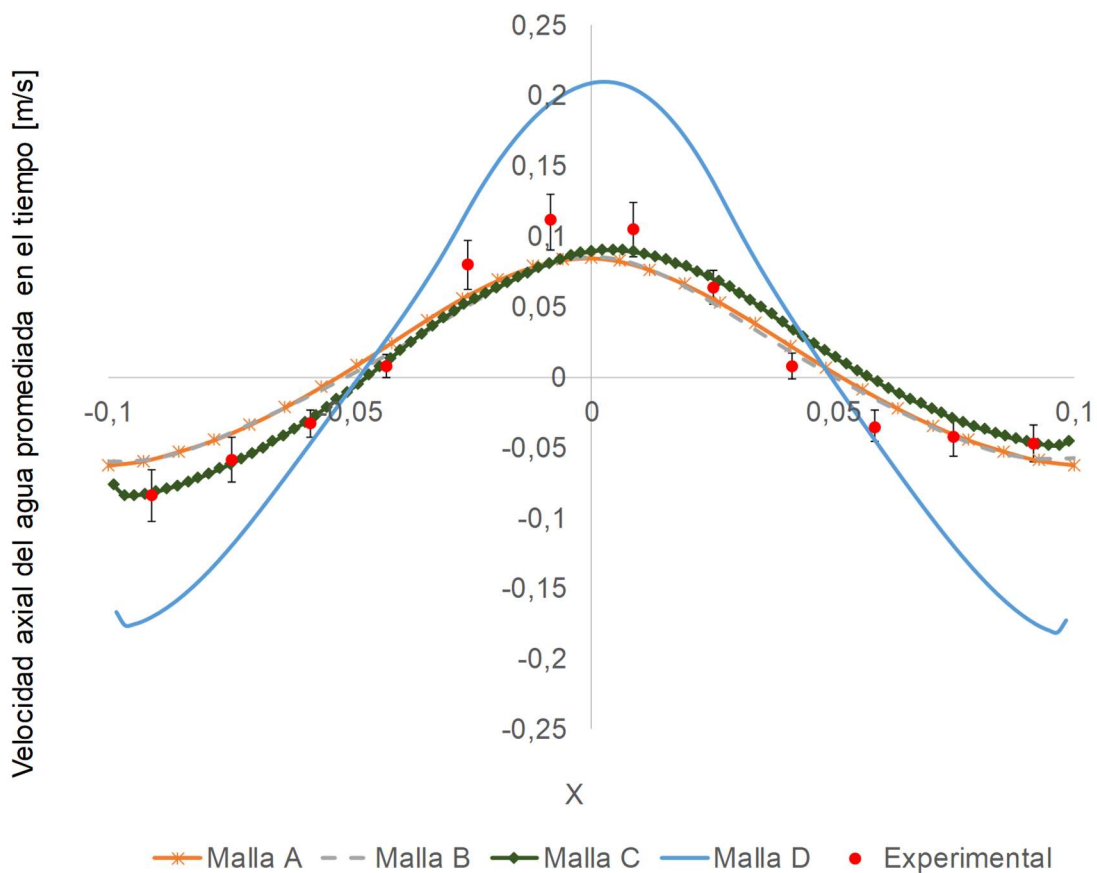
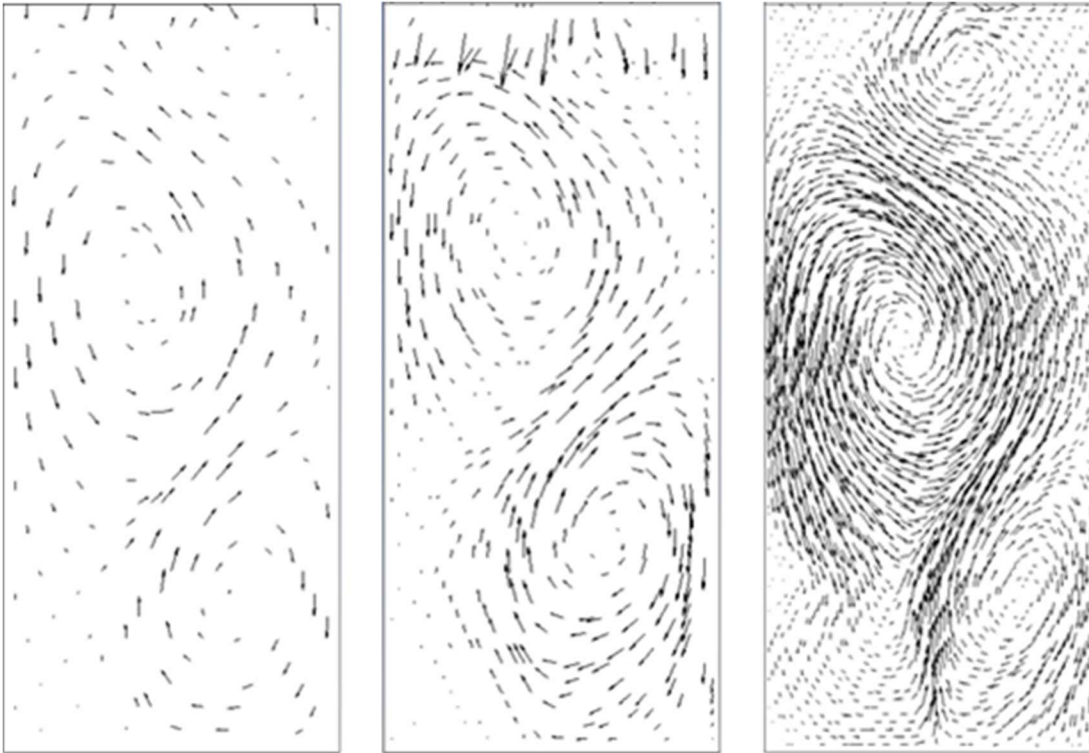


Figura 4-2: Campos instantáneos de velocidad del agua obtenidos con el Modelo computacional 1 (Tabla 4-6) y las mallas A (izq.), B (centro) y C (der.) de la Tabla 4-1.



4.3 Criterios de convergencia

Los criterios de convergencia establecidos en esta tesis para la solución de las ecuaciones gobernantes del flujo fueron:

- Residuales: es la diferencia cuadrática entre los valores de una función obtenidos en la última iteración y la recurrencia previa [55]. El valor máximo asignado fue de 10^{-3} .
- Balance de masa: se garantizaron la conservación de la masa del líquido dentro del dominio de solución y la coincidencia de los flujos másicos del gas promediados en el tiempo [44].

Los resultados de las simulaciones fueron colectados en forma puntual (o instantánea) y en forma promediada en el tiempo. La adquisición de datos puntuales abarcó el período no estacionario de la simulación comprendido entre el arranque de la inyección del flujo de gas en la columna llena de líquido y el alcance de un estado de operación estadísticamente

pseudoestacionario, caracterizado por un comportamiento oscilatorio cuasiperiódico de la pluma de burbujas durante su ascenso a través de la columna. La adquisición de datos promediados en el tiempo de las soluciones de las ecuaciones gobernantes de flujo se dio durante el estado estadísticamente pseudoestacionario; el seguimiento de la velocidad del agua en puntos fijos de la columna permitió establecer el momento en el que se alcanzan las oscilaciones cuasiperiódicas de la pluma.

4.4 Modelado computacional con tamaño de burbuja fijo para un caudal de aire de 48 L/h.

La disponibilidad de la geometría y del mallado C y la definición de los criterios de convergencia promovieron al paso siguiente de la simulación, constituido por la selección de: i) los esquemas de discretización de las ecuaciones gobernantes del flujo, ii) los métodos de solución de las ecuaciones discretas, iii) los modelos de flujo turbulento, de pared y de flujo multifásico, iv) el método de modelamiento de turbulencia para flujo multifásico y v) los modelos de clausura de fuerzas interfaciales.

Las condiciones de operación de presión y de temperatura de la columna y la altura de llenado de líquido permiten aceptar el tratamiento de gas ideal para el gas y densidad constante para el flujo. Las propiedades físicas de las fases fueron tomadas de la base de datos de materiales de Ansys Fluent®.

4.4.1 Selección de los esquemas de discretización y de los métodos de solución

Esta sección describe los esquemas de discretización aplicados a las ecuaciones gobernantes de flujo y el algoritmo seleccionado para la resolución de las ecuaciones discretas. En [26] se describen detalladamente estos dos aspectos primordiales en la definición de un problema de dinámica de fluidos computacional.

La adopción de un comportamiento incompresible para el flujo de aire llevó a la selección de un algoritmo basado en el acople presión-velocidad para la solución de las ecuaciones discretas de flujo; por lo tanto, el campo de velocidad se calculó con las ecuaciones de momentum y el campo escalar de presión se evaluó mediante la ecuación de presión, o

de corrección de presión, obtenida a partir de la manipulación de las ecuaciones discretas de continuidad y de momentum [29]. El algoritmo utilizado en este trabajo fue Phase Coupled SIMPLE; este algoritmo es una extensión del algoritmo SIMPLE para flujos multifásicos y ha probado ser eficiente para este tipo de sistemas [56], [47].

La selección de la formulación de velocidad absoluta obedeció a su efecto directo en la reducción de la difusión numérica de las soluciones debido a que la mayor parte del flujo en el dominio no es rotacional [22].

Los esquemas de discretización recomendados en la literatura [44], [57] y empleados en este trabajo para estimar las propiedades en las caras de los volúmenes de control fueron PRESTO! para la presión y Least Squares Cell Based para el gradiente de las propiedades escalares. Ensayos numéricos realizados en esta tesis con esquemas diferentes muestran resultados incapaces de describir la realidad física ya que no predicen la oscilación de la pluma de burbujas tal como puede apreciarse en la Figura 4-3. La aplicación del esquema QUICK abarcó el resto de propiedades; la selección de QUICK fue motivada por su uso difundido en flujos turbulentos, puesto que pondera preferencialmente, mediante dos nodos de los tres empleados en la discretización, el aporte convectivo sobre el aporte difusivo en la estimación del valor de las propiedades.

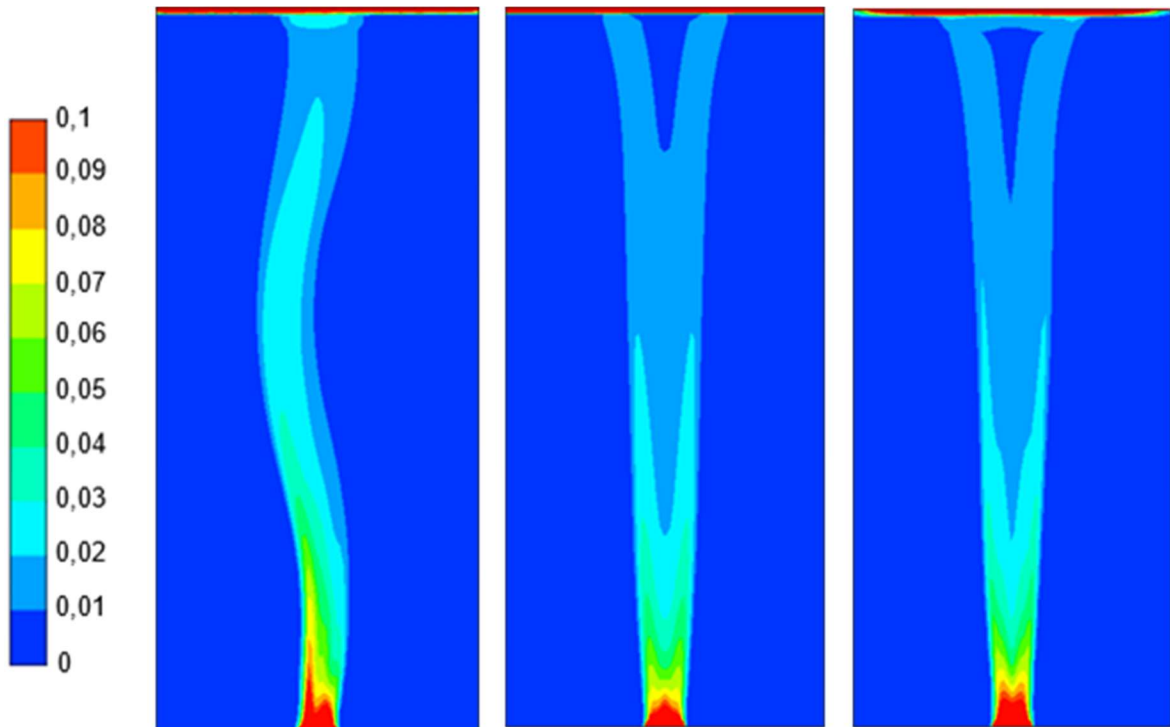
La adopción del esquema implícito de primer orden para la discretización de las derivadas temporales fue promovida por la difusividad numérica aceptable que registra en mallas hexaédricas [20]; esquemas de orden mayor producen resultados cuestionables para este tipo de sistemas [47], además de dificultar la convergencia [56].

Algunas referencias reportan magnitudes comprendidas entre 0,2 y 0,3 para el número de Courant¹ adecuado en sistemas multifásicos [47]; las simulaciones realizadas en esta investigación encontraron un número de Courant apropiado ligeramente mayor a 0,5. La diferencia significativa entre el número de Courant encontrado en este trabajo y el valor teórico es consistente con observaciones efectuadas por algunos investigadores, que establecen que este número debe determinarse en función de los requerimientos de la

¹ El *número de Courant –Friedrichs–Lewy (CFL)* es el cociente entre el intervalo de tiempo y el tiempo de residencia en un volumen finito, sirve como condición de convergencia para la solución numérica de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales.

convergencia de cada sistema, excluyendo, por lo tanto, su definición a priori para establecer el nivel de discretización [47], [58].

Figura 4-3: Comparación de contornos instantáneos de retención de gas utilizando el Modelo computacional 1 (Tabla 4-6), el arreglo C y diferentes esquemas de discretización para presión y gradiente. PRESTO! y Least Squares Cell Based (izq.), Body Force Weighted y Least Squares Cell Based (centro), PRESTO! y Green-Gauss Node-Based (der.).



La formulación de la fracción de volumen empleó un esquema implícito debido a la flexibilidad alta que ofrece en función del tamaño del paso de tiempo; el esquema implícito no está sujeto a las restricciones de estabilidad impuestas por el criterio del número de Courant, contrario a la dependencia que si registra la formulación explícita [25], [49].

La especificación de un número máximo de 25 iteraciones para cada paso de tiempo en las simulaciones con tamaño de burbuja fijo siguió recomendaciones encontradas en la literatura [44]; la simulación procede al siguiente paso de tiempo en caso de no alcanzarse la convergencia con estas iteraciones disponibles. Sin embargo, la convergencia de la

solución lograda en menos de 10 iteraciones mediante el ajuste del paso del tiempo y de los factores de relajación² restó relevancia a este parámetro.

Finalmente, la implementación de las simulaciones con sistemas multifásicos, especialmente las que abarcan balances de población para resolver distribuciones de tamaño, requiere de doble precisión [55]; los números después de la coma serán representados como valores de 64 bits, aunque el requerimiento computacional es mayor.

4.4.2 Selección inicial de modelos

La falta de consenso en la literatura sobre la formulación adecuada del problema de flujo gas-líquido y los alcances de los diferentes modelos para predecir los patrones de flujo observados experimentalmente [4], llevó a que se realizara una selección inicial de modelos, los cuales fueron modificados posteriormente teniendo como base la comparación de las predicciones de estos y los datos experimentales.

Esta sección abarca la selección inicial de los modelos para la clausura de la turbulencia, la región cercana a la pared y la aproximación al flujo multifásico empleados en las simulaciones desarrolladas en la investigación. También incluye el método de modelamiento de la turbulencia del flujo multifásico, la clausura de fuerzas interfaciales como la de arrastre y la especificación de condiciones frontera y otros parámetros de las simulaciones de la columna de burbujeo.

El modelo de flujo laminar no fue considerado en esta investigación debido a que predice deficientemente los campos de flujo en sistemas multifásicos incluso para números de Reynolds muy bajos [39]. La selección para el desarrollo de esta investigación de los modelos RANS basados en la hipótesis de viscosidad turbulenta para abordar el problema de clausura de la turbulencia fue determinada por los recursos computacionales disponibles. Estos modelos han mostrado versatilidad en su aplicación a un espectro amplio de problemas de ingeniería, incluyendo flujos multifásicos, y niveles de precisión satisfactorios en las soluciones provistas [22], [54].

² El *factor de relajación* es una corrección al cambio en el valor de las variables de entrada en cada nueva iteración.

Del conjunto de modelos RANS basados en hipótesis de viscosidad turbulenta, los de una ecuación fueron descartados debido a que están adaptados para aplicaciones aerodinámicas, restándoles capacidades predictivas aceptables de flujos industriales turbulentos [29]; los modelos de dos ecuaciones son históricamente los modelos de turbulencia más utilizados en la dinámica de fluidos computacional para aplicaciones industriales [22].

Entre los modelos de dos ecuaciones disponibles, el $k - \varepsilon$ ha sido objeto de numerosos estudios y aplicaciones que han validado su eficiencia en la descripción de flujos turbulentos para sistemas unifásicos y multifásicos, tales como los observados en los flujos internos típicos encontrados en reactores [14], [24]; este modelo (el $k - \varepsilon$) dispone de las modalidades o variaciones Standard, RNG y Realizable.

Los factores descritos previamente llevaron a la selección del modelo $k - \varepsilon$ para desarrollar las simulaciones de esta investigación; inicialmente, fue empleada la variación Standard por ser la más utilizada en aplicaciones industriales debido a su robustez, bajo costo computacional y precisión razonable para una amplia gama de flujos turbulentos incluyendo columnas de burbujeo [22], [56].

El modelo de Menter-Lechner fue adoptado para el tratamiento de la región cercana a la pared; este modelo integra el grupo de modelos de tratamiento de pared categorizados como insensibles o con baja sensibilidad a y^+ , los cuales producen mejores predicciones del esfuerzo de corte en la pared. Adicionalmente, el modelo de Menter-Lechner mejora el tratamiento iterativo y la linealización de los modelos de dos ecuaciones [22].

La aproximación Euleriana-Euleriana se empleó para modelar el sistema multifásico gas-líquido en la columna de burbujeo debido a la versatilidad que registra en la simulación de procesos multifásicos bajo costos computacionales moderados [22]; en comparación con otras aproximaciones disponibles para flujo multifásico tales como VOF o Mixture, la aproximación Euleriana-Euleriana permite el cálculo de fuerzas de interacción entre fases que afectan drásticamente el desplazamiento de las burbujas durante el ascenso a través de la columna. Además de la ausencia del modelamiento de fuerzas, la diferencia apreciable entre las densidades de los fluidos involucrados fue otro factor ponderado en el descarte de la aproximación Mixture. Con respecto a la aproximación Euleriana-

Lagrangiana el consumo extenso de recursos computacionales se configuró en esta investigación como la mayor limitante de su aplicación extensiva.

El modelamiento de la turbulencia en flujos multifásicos dispone de los métodos disperso y por fase para el modelo $k - \varepsilon$. El método disperso aplica el modelo $k - \varepsilon$ exclusivamente a la fase continua y relaciona algebraicamente las cantidades turbulentas de la fase dispersa con las propiedades correspondientes de la fase continua; este método es para concentraciones bajas de la fase dispersa. El método por fase aplica ecuaciones de transporte $k - \varepsilon$ para cada fase presente en el medio. Se selecciona el modelo disperso debido a que la fase dispersa se encuentra diluida en la fase continua por el bajo flujo de aire.

La fase discreta requiere adicionalmente de la distribución del tamaño de burbuja para las simulaciones. En esta sección esta propiedad se modela como monodispersa (tamaño de burbuja único y fijo durante el ascenso). El diámetro de la burbuja calculado mediante la correlación de Vogelphohl-Gaddis (Ecuación 4.1) fue de 5 mm; esta correlación puede aplicarse confiablemente para una variedad amplia de regímenes de flujo y de sistemas, incluyendo agua-aire y para orificios en el distribuidor comprendidos entre 0,2 y 6 mm de diámetro [59].

$$d_b^3 = S + \frac{L}{d_b} + \frac{T}{d_b^2} \quad (4.1)$$

Donde,

$$S = \frac{6d_h\sigma}{(\rho_L - \rho_G)g} \left(1 - \frac{4\rho_G Q_h^2}{\pi d_h^3 \sigma} \right) \quad (4.2)$$

$$L = \frac{81\mu Q_h}{\pi(\rho_L - \rho_G)g} \quad (4.3)$$

La magnitud del diámetro de burbuja estimado con el modelo anterior coincide con las mediciones experimentales reportadas en la literatura [11].

El modelo de Schiller Naumann se empleó para cuantificar la fuerza de interacción interfacial de arrastre debido a la confiabilidad de sus estimaciones, especialmente en medios constituidos por burbujas pequeñas y esféricas (diámetro no mayor a 1 cm)

características de la baja velocidad superficial del régimen homogéneo [44], [60]. De acuerdo con la literatura, la fuerza de arrastre puede ser superior a las demás fuerzas interfaciales en un factor de 100; esta observación ha llevado a un gran número de investigaciones publicadas a despreciar fuerzas interfaciales diferentes a la de arrastre con el fin de facilitar la convergencia de las soluciones de las ecuaciones [33], [56]. En esta tesis se introdujo la misma consideración inicialmente.

La velocidad del gas se usó como condición de frontera en el distribuidor; la estimación de esta velocidad empleó la velocidad de ascenso de las burbujas y la fracción de gas que garantiza el caudal de entrada a la columna [14]. La correlación de Clift, aplicable para burbujas de aire en agua de más de 1,3 mm de diámetro [61], se empleó para calcular la velocidad de ascenso de las burbujas:

$$u_{slip} = \sqrt{\frac{2,14\sigma}{\rho_w d_b} + 0,505gd_b} \quad (4.4)$$

Para las condiciones de frontera de las ecuaciones de transporte de las propiedades turbulentas se seleccionaron el diámetro hidráulico y la intensidad de la turbulencia, calculadas como se reporta en la literatura [14]. Estas condiciones de frontera se utilizaron debido a que facilitaron la convergencia. Como condición frontera de salida se seleccionó la presión atmosférica, con fracción de volumen de gas de 1 en el flujo reverso. Se utilizó una condición de frontera de no deslizamiento para las paredes impermeables, la cual asume que los gradientes de velocidad son nulos en las paredes [4], [11].

Con base en lo anterior se especificó el Modelo computacional 0 para la simulación inicial con caudal de aire de 48 L/h, el cual se resume en la Tabla 4-3.

Tabla 4-3: Modelo computacional 0. Parámetros de simulación empleados en el ensayo numérico inicial con caudal de aire de 48 L/h.

Modelo de clausura de la turbulencia	$k - \varepsilon$ Standard
Modelo de pared	Menter Lechner
Modelo de turbulencia de flujo multifásico	Disperso
Modelo de flujo multifásico	E-E
Diámetro de burbuja	5 mm
Fuerzas interfaciales	Arrastre con modelo de Schiller Naumann
Condición de frontera (entrada de agua)	Velocidad: 0 m/s Intensidad de la turbulencia: 2% Diámetro hidráulico: 0,016 m
Condición de frontera (entrada de gas)	Velocidad: 0,23 m/s Fracción de volumen: 0,2
Condición de frontera (salida aire)	Presión atmosférica Fracción de volumen flujo reverso: 1
Paso de tiempo	0,006 s hasta los 150 s, después 0,01 s. Formulación implícita

4.4.3 Resultados cuantitativos de predicción de campos de flujo con el Modelo computacional 0

Esta sección muestra las predicciones de campos de flujo obtenidos con el Modelo computacional 0 y la malla C (sección 4.2). La validación de las simulaciones se efectuó a través de la comparación entre los datos experimentales y los datos calculados promediados en el tiempo.

Con el fin de acelerar la convergencia se probaron diferentes factores de relajación; la Tabla 4-4 muestra las magnitudes que aceleraron eficientemente los cálculos. Adicionalmente se modificó el paso de tiempo con el fin de reducir el tiempo de cálculo sin afectar la convergencia; a través de los ensayos numéricos pudo establecerse que 0,006 s fue el paso de tiempo máximo que pudo emplearse antes de los 150 segundos de flujo sin comprometer la convergencia del sistema numérico; posterior a este tiempo, este factor

se incrementó a 0,01 s manteniendo aproximadamente el mismo número de iteraciones. La adquisición de datos promediados se efectuó durante otros 150 segundos de flujo.

Tabla 4-4: Factores de relajación establecidos para acelerar la convergencia (caudal de aire: 48 L/h).

Presión	0,5
Densidad	1
Fuerzas de cuerpo	0,5
Momentum	0,5
Fracción de volumen	0,5
Energía cinética de la turbulencia	0,8
Velocidad de disipación de la energía turbulenta	0,8
Viscosidad turbulenta	1

Los resultados promediados de las simulaciones se muestran en las Figuras 4.4 y 4.5. Estas dos figuras muestran una desviación apreciable entre los datos calculados y los experimentales en el dominio localizado alrededor del centro de la columna, pese a que ambos tipos de información despliegan patrones de comportamiento similar. Estas desviaciones locales son superiores para la retención del gas.

Las diferencias entre los datos experimentales y las predicciones de la simulación con el Modelo computacional 0 promovieron la realización de un análisis cualitativo orientado a efectuar cambios de parámetros en este modelo con el fin de mejorar los resultados. Los ensayos cualitativos compararon el efecto de los cambios en los parámetros en la predicción de los contornos de retención de gas. La descripción de este proceso se encuentra en la sección 4.4.4.

Figura 4-4: Comparación del perfil de velocidad axial calculado y datos experimentales (caudal de aire: 48 L/h).

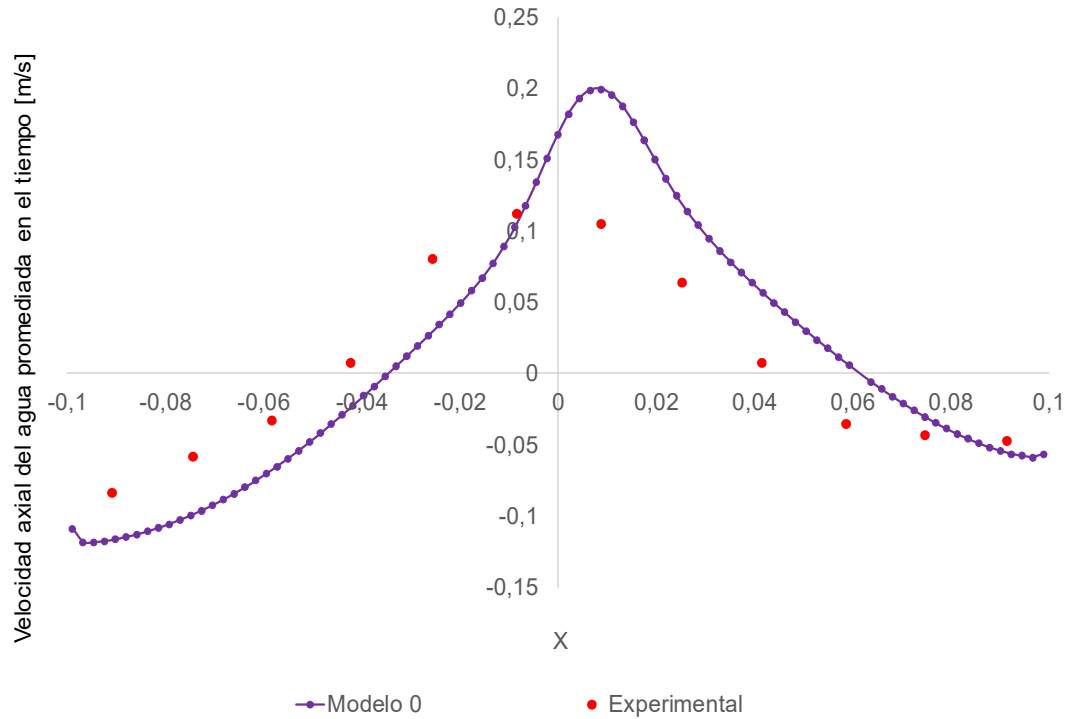
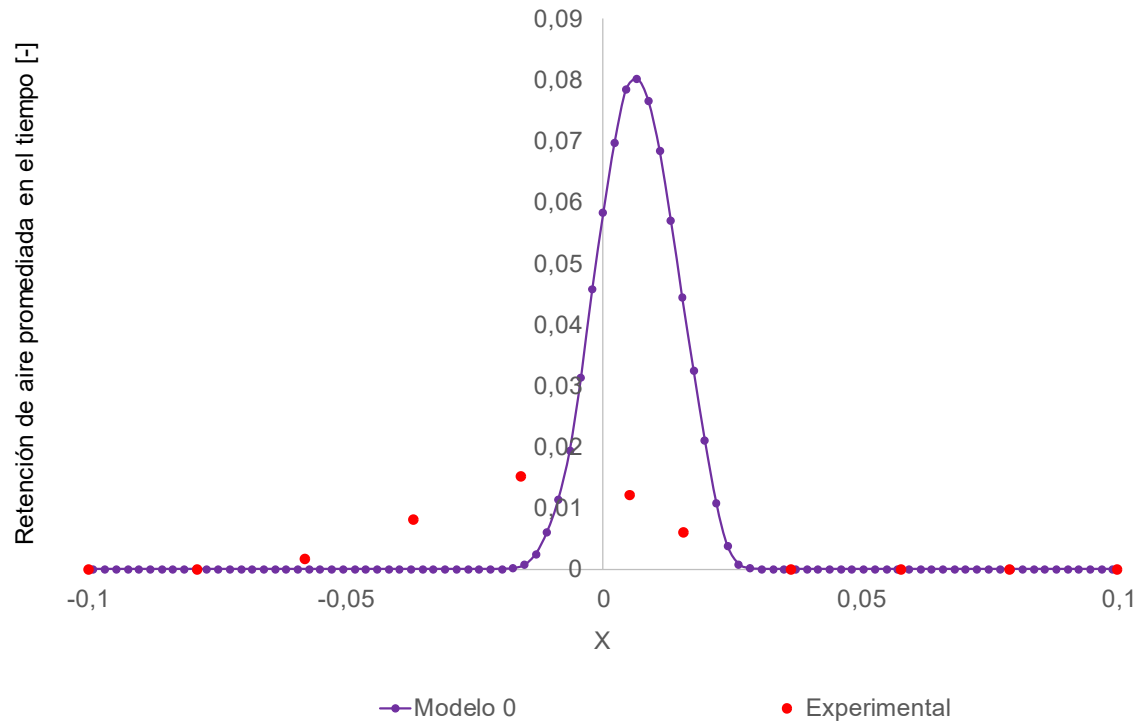


Figura 4-5: Comparación del perfil de retención de gas calculado y datos experimentales (caudal de aire: 48 L/h).



4.4.4 Ensayos cualitativos para la reformulación de los parámetros del Modelo computacional 0

El impacto en los resultados de las simulaciones introducido por el cambio en varios de los parámetros del Modelo computacional 0 se evaluó cualitativamente mediante los contornos instantáneos de retención del gas obtenidos en ensayos numéricos efectuados con una duración máxima de 30 segundos de flujo. La información obtenida llevó a la reformulación del Modelo computacional 0 con el fin de mejorar las predicciones de las simulaciones. La Tabla 4-5 reporta los parámetros evaluados y la bibliografía que soporta los cambios estudiados en cada ensayo numérico. Cada uno de los ensayos descritos en la Tabla 4-5 modificó exclusivamente el parámetro al que se hace referencia (en el ensayo) y mantuvo a los demás como estaban establecidos para el Modelo computacional 0.

El modelo de pared no se seleccionó como variable para los ensayos debido a que la mayor desviación de las predicciones se encuentra en el centro de la columna. El modelo de flujo multifásico E-E también se mantuvo fijo debido a la economía computacional que ofrece en comparación con el modelo Euleriano-Lagrangiano y al consenso en la literatura sobre su aplicación acertada en columnas de burbujeo.

El modelamiento de la fuerza de arrastre tampoco se incluyó como variable debido a que el modelo de Schiller Naumann es ampliamente aceptado en el régimen de operación en el que se encuentra la columna de burbujeo con el caudal de aire de 48 L/h [44], [60].

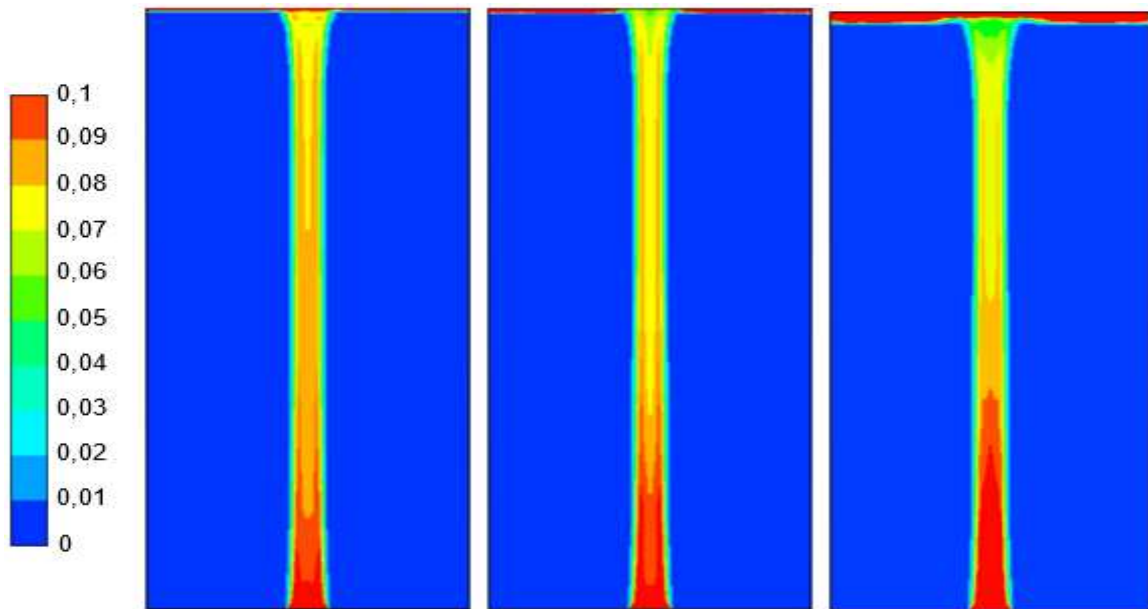
El término de la interacción turbulenta no se consideró ya que puede despreciarse en la mayoría de los casos debido a que su aporte es muy bajo y ralentiza notablemente la convergencia [11], [22]. Los modelos de lubricación de pared y de dispersión turbulenta generalmente se desprecian para éste tipo de aplicaciones y sólo se utilizan en columnas de burbujeo bajo condiciones extremas de operación tales como una velocidad superficial del gas muy alta [54], [60].

Tabla 4-5: Parámetros evaluados en los ensayos cualitativos (caudal de aire: 48 L/h).

	Parámetro Estudiado	Definición Valor-Rango	Referencias
Ensayo 1	Modelo de clausura de turbulencia	Standard RNG Realizable	[12], [22] [35], [56], [60] [22]
Ensayo 2	Fuerza de sustentación	Coef. 0 Coef. 0,2	[33], [35], [56], [47] [4], [54], [60], [62]
Ensayo 3	Fuerza de masa virtual	Coef. 0 Coef. 0,5	[33], [35], [54], [56], [47] [4], [60]
Ensayo 4	Tensión superficial	0 N/m 0,071 N/m	[33], [56], [47] [12], [63]
Ensayo 5	Modelo de turbulencia multifásica	Disperso Por Fase	[56], [47] [12]
Ensayo 6	Condición de frontera de la turbulencia (entrada de agua)	Intensidad de la turbulencia 2% Escala de la turbulencia 0,02 m Intensidad de la turbulencia 2% Relación de viscosidad 10 Intensidad de la turbulencia 2% Diámetro hidráulico 0,016	[12], [14] [14] [14]
Ensayo 7	Condición de frontera (entrada de aire)	Velocidad 0,23 m/s Fracción de volumen 0,2 Velocidad 3,3 m/s Fracción de volumen 0,014	[11], [14], [35], [64] [12]
Ensayo 8	Condición de frontera (salida de aire)	Salida presión Entrada velocidad Desgasificación	[44] [11], [14], [35], [64] [65]

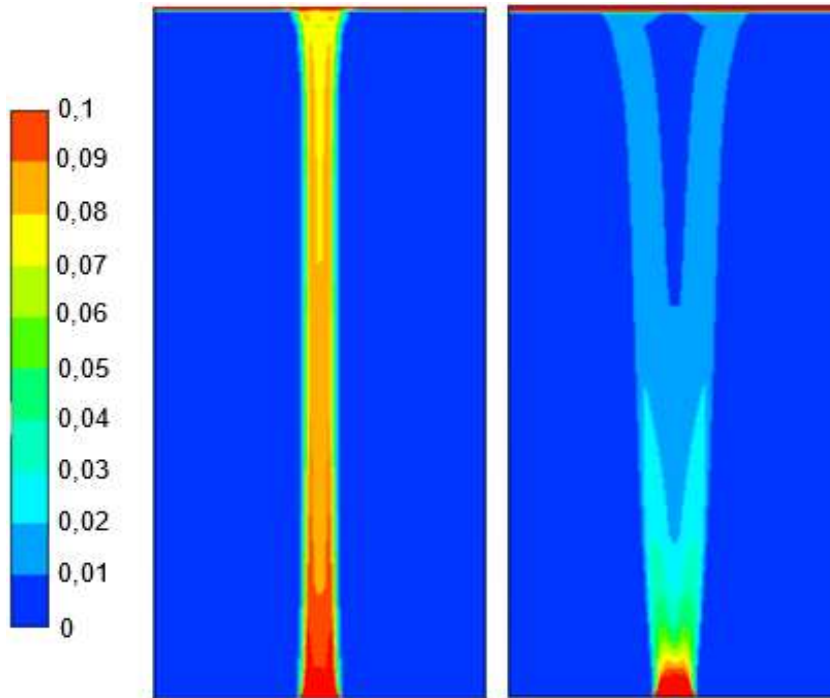
La Figura 4-6 presenta los resultados concernientes a la evaluación del efecto del modelo de clausura de la turbulencia (Ensayo 1); no se evidenció un cambio significativo entre los contornos de retención de gas predichos por las tres variantes del modelo $k - \varepsilon$.

Figura 4-6: Ensayo 1. Contornos de retención de gas con diferentes modelos de clausura de la turbulencia de la familia $k - \varepsilon$: Standard (Modelo 0, izq.), RNG (centro), Realizable (der.).



La evaluación también incluyó fuerzas interfaciales adicionales a la de arrastre pese a que la mayoría de los autores reportan estas fuerzas como despreciables [33], [35], [56]. Las simulaciones del Ensayo 2 abarcaron la fuerza de sustentación modelada con un coeficiente constante debido a que la distribución de tamaño de burbujas no es significativamente amplia; un valor de 0,2 se estableció para este coeficiente a partir del modelo de Tomiyama, que es el más utilizado para la fuerza de sustentación en columnas de burbujeo por su flexibilidad ante diferentes condiciones de operación [54]. Los resultados cualitativos mostraron una diferencia considerable en los contornos de retención de gas tras la inclusión de la fuerza de sustentación en los cálculos (Figura 4-7).

Figura 4-7: Ensayo 2. Contornos de retención de gas con diferentes coeficientes para la fuerza de sustentación: 0 (Modelo 0, izq.), 0,2 (der.).



Usualmente la tensión superficial y la fuerza de masa virtual no son consideradas en simulaciones de éste tipo debido a la relevancia insignificante de la primera interacción en flujos turbulentos [47] y al aporte mínimo de la segunda en columnas de más de 15 cm de diámetro [54], [47]. La poca relevancia de ambas es reportada con base en el aporte que introducen las fuerzas de arrastre y sustentación [35]. Algunos autores argumentan que la importancia de incluir la fuerza de masa virtual en columnas de burbujeo radica en su capacidad de moderar el aumento de las velocidades de ascenso de las burbujas, facilitando la estabilización del flujo en el cálculo numérico [4].

Los ensayos realizados con la consideración de estas dos interacciones (Ensayos 3 y 4) no produjeron diferencias apreciables en los contornos de retención del gas (Figuras 4.8 y 4.9); en esta investigación se decidió mantener la fuerza de masa virtual en los modelos empleados en las simulaciones debido a que en los ensayos de evaluación efectuados en esta sección no se observó mayor impacto de este término en la velocidad de convergencia de los cálculos. El coeficiente de esta fuerza especificado para los cálculos fue constante e igual a 0,5, ya que es un valor utilizado frecuentemente para burbujas esféricas en un fluido [4], [60].

Figura 4-8: Ensayo 3. Contornos de retención de gas con diferentes coeficientes para la fuerza de masa virtual: 0 (Modelo 0, izq.), 0,5 (der.).

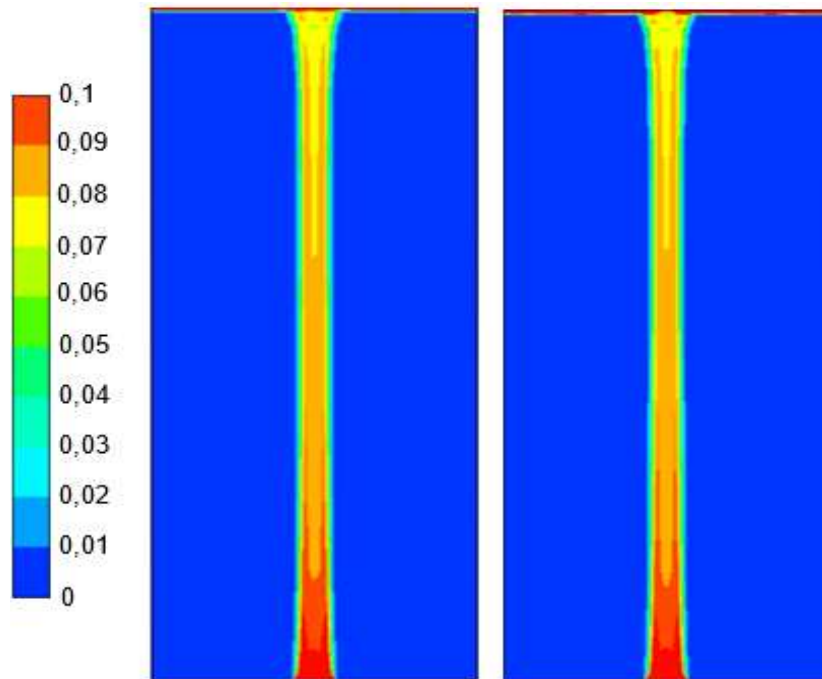
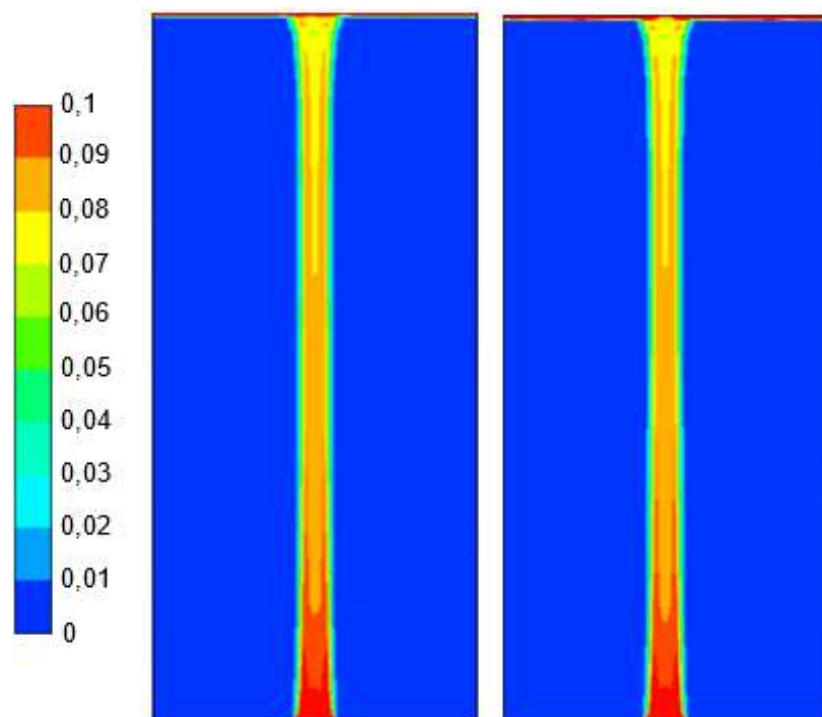
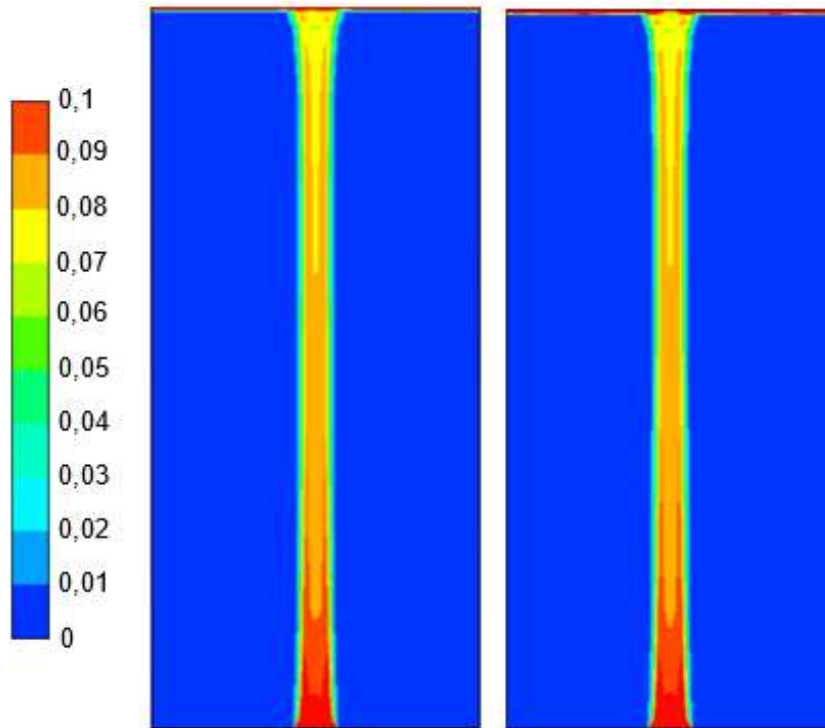


Figura 4-9: Ensayo 4. Contornos de retención de gas con modelamiento de la tensión superficial: 0 N/m (Modelo 0, izq.), 0,071 N/m (der.).



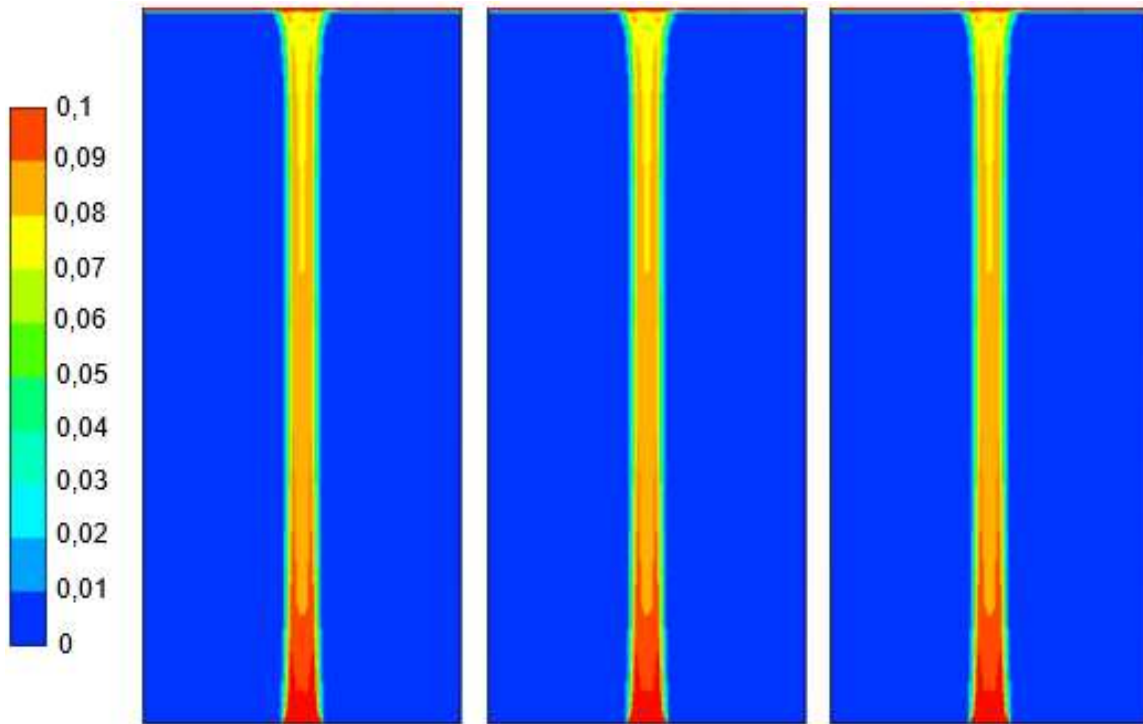
La Figura 4-10 presenta el efecto que en los contornos de retención de gas introducen los métodos Disperso y Por Fase para el modelamiento de la turbulencia en flujo multifásico; no hay diferencias apreciables en los contornos introducidas por estos dos modelos.

Figura 4-10: Ensayo 5. Contornos de retención de gas con diferentes modelos de turbulencia multifásica: Disperso (Modelo 0, izq.), Por Fase (der.).



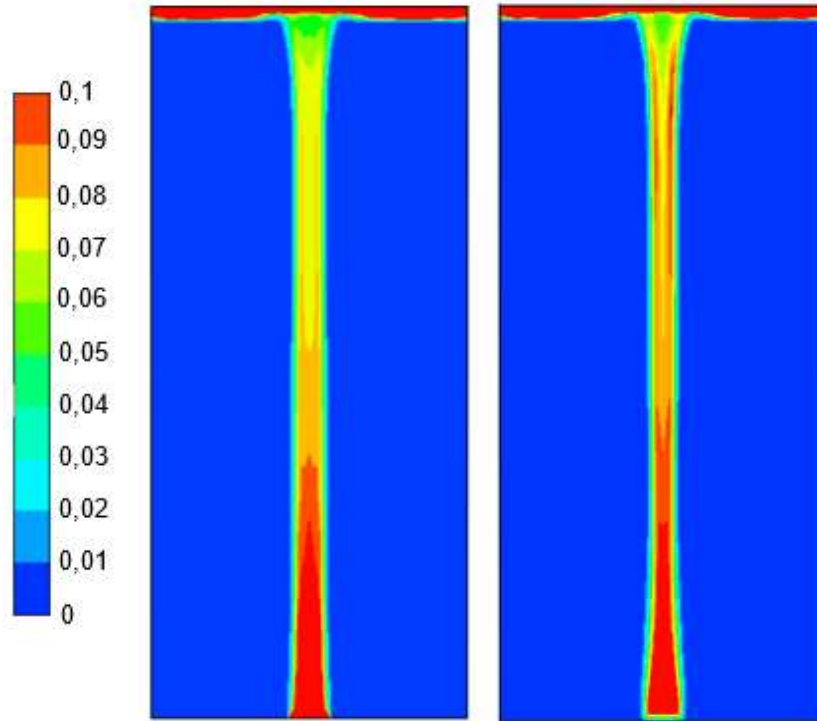
Para las condiciones frontera de la turbulencia (Ensayo 6) se probó con intensidad y escala de la turbulencia (I, L), intensidad de la turbulencia y relación de viscosidad ($I, \mu_T/\mu$) y con intensidad de la turbulencia y diámetro hidráulico (I, D_H). Los resultados cualitativos no muestran diferencias predictivas entre los componentes evaluados de este parámetro (Figura 4-11); este comportamiento es esperado debido a que las condiciones de frontera de la turbulencia solo afectan los resultados a través de los términos difusivos por la ausencia del aporte convectivo (la velocidad de entrada del agua es cero).

Figura 4-11: Ensayo 6. Contornos de retención de gas con diferentes condiciones de frontera para la turbulencia: I, L (izq.), $I, \mu_T/\mu$ (centro), I, D_H (Modelo 0, der.).



Para la condición de frontera de entrada de aire (Ensayo 7) se utilizó la velocidad (3,3 m/s) que garantiza el flujo volumétrico de aire; la fracción de volumen del gas se determinó con la relación de áreas entre los orificios del distribuidor original y el área del distribuidor representado en la geometría (0,014) [12]. No se obtuvieron diferencias tan marcadas con el cambio de magnitud en esta condición de frontera (Figura 4-12), lo cual se espera ya que la velocidad superficial del gas se mantiene constante. Es importante recalcar que los cálculos numéricos se facilitan si se fija la velocidad de entrada del gas como la velocidad de ascenso de las burbujas, la cual es diferente a la velocidad del gas antes del distribuidor [14].

Figura 4-12: Ensayo 7. Contornos de retención de gas con diferentes condiciones para la velocidad de entrada de aire: $v = 0,23 \text{ m/s}$, $\alpha = 0,2$ (Modelo 0, izq.), $v = 3,3 \text{ m/s}$, $\alpha = 0,014$ (der.).



Adicionalmente, en la cima de la columna se evaluaron condiciones de frontera de entrada de velocidad [14] y desgasificación [65] (Ensayo 8); en todos los casos, con la primera no se logró la convergencia y con la segunda se obtuvo una retención de gas anormalmente baja, esto debido probablemente a que esta condición de frontera requiere inicializar las variables con valores muy cercanos al estado estacionario [22] que no están usualmente disponibles.

A partir de los ensayos realizados en esta sección pudo establecerse que la única variable con un impacto significativo en los contornos de retención de gas fue la fuerza de sustentación, por lo tanto, ésta fue incluida en la reformulación del Modelo computacional 0.

4.4.5 Resultados cuantitativos de predicción de campos de flujo con el Modelo computacional 1

Con base en los resultados de los ensayos cualitativos se establecieron las nuevas especificaciones para las simulaciones que se presentan en la Tabla 4-6, generando así el Modelo computacional 1. La introducción de la fuerza de sustentación es el cambio más importante en este nuevo modelo; las fuerzas de masa virtual, tensión superficial e interacción turbulenta también fueron incluidas a pesar de no mostrar un impacto tan significativo como el de la fuerza de sustentación debido a que en las simulaciones anteriormente realizadas no afectaron la convergencia.

Tabla 4-6: Modelo computacional 1. Especificaciones establecidas con base en los ensayos cualitativos de la sección 4.4.4.

Modelo de clausura de la turbulencia	$k - \varepsilon$ Standard
Modelo de pared	Menter Lechner
Modelo de flujo multifásico	E-E
Diámetro de burbuja	5 mm
Fuerza de arrastre	Modelo de Schiller Naumann
Fuerza de sustentación	Coef. 0,2 (modelo de Tomiyama)
Fuerza de masa virtual	Coef. 0,5
Tensión superficial	0,071 N/m
Interacción turbulenta	Simonin <i>et al.</i> Coef 1
Modelo de turbulencia de flujo multifásico	Disperso
Condición de frontera de la turbulencia (entrada de agua)	Intensidad de la turbulencia 2% Escala de la turbulencia 0,02 m
Condición de frontera (entrada de aire)	Velocidad 0,23 m/s Fracción de volumen: 0,2
Condición de frontera (salida de aire)	Salida presión
Condición de frontera (paredes)	No deslizamiento
Formulación	Implícita

La periodicidad de las oscilaciones transversales de la pluma de burbujas durante su ascenso a través de la columna permite discriminar en el comportamiento hidrodinámico del flujo un periodo netamente transiente y uno estadísticamente pseudoestacionario, caracterizado por un patrón oscilatorio cuasiperiódico de la pluma de burbujas durante su ascenso. El periodo transiente se extiende entre el arranque de la inyección del flujo de gas en la columna llena de líquido y el alcance del patrón cuasiperiódico y el periodo pseudoestacionario inicia con el alcance de este patrón. El conjunto de modelos empleados en esta tesis para la simulación de los campos de flujo puede predecir satisfactoriamente la presencia de estos periodos en el flujo de la columna y establecer confiablemente la frontera entre ambos (patrón cuasiperiódico). En esta simulación se alcanzó el comportamiento oscilatorio cuasiperiódico de la pluma de burbujas a los 150 segundos de flujo, después de lo cual, se comenzaron a promediar los resultados; dicho promedio se extendió durante otros 180 segundos.

La aceleración de la convergencia provista por el alcance de la operación pseudoestacionaria permitió incrementar el paso de tiempo desde 0,006 a 0,01 s sin comprometer el número de iteraciones requeridas para converger. Igualmente, este efecto también llevó a la modificación de los factores de relajación desde aquellos reportados en la Tabla 4-4 a aquellos en la Tabla 4-7 a partir de los 150 s, logrando acelerar los cálculos computacionales. Con el fin de verificar el efecto que pueden producir los cambios de paso de tiempo y de factores de relajación en las simulaciones se efectuaron comparaciones de resultados obtenidos con los dos conjuntos de especificaciones en las Figuras 4-13 y 4-14; una inspección de las curvas permite apreciar que estos cambios no afectaron significativamente los resultados obtenidos.

Tabla 4-7: Factores de relajación utilizados después de los 150 segundos de cálculo (caudal de aire: 48 L/h).

Presión	0,3
Densidad	1
Fuerzas de cuerpo	0,3
Momentum	0,3
Fracción de volumen	0,3
Energía cinética de la turbulencia	0,7
Velocidad de disipación de la energía turbulenta	0,7
Viscosidad turbulenta	0,9

Figura 4-13: Comparación del perfil de velocidad axial del Modelo computacional 1 para diferentes pasos de tiempo y factores de relajación. PT1: Paso de tiempo 0,006 s y factores de relajación de la Tabla 4-4. PT2: Paso de tiempo 0,01 s y factores de relajación de la Tabla 4-7.

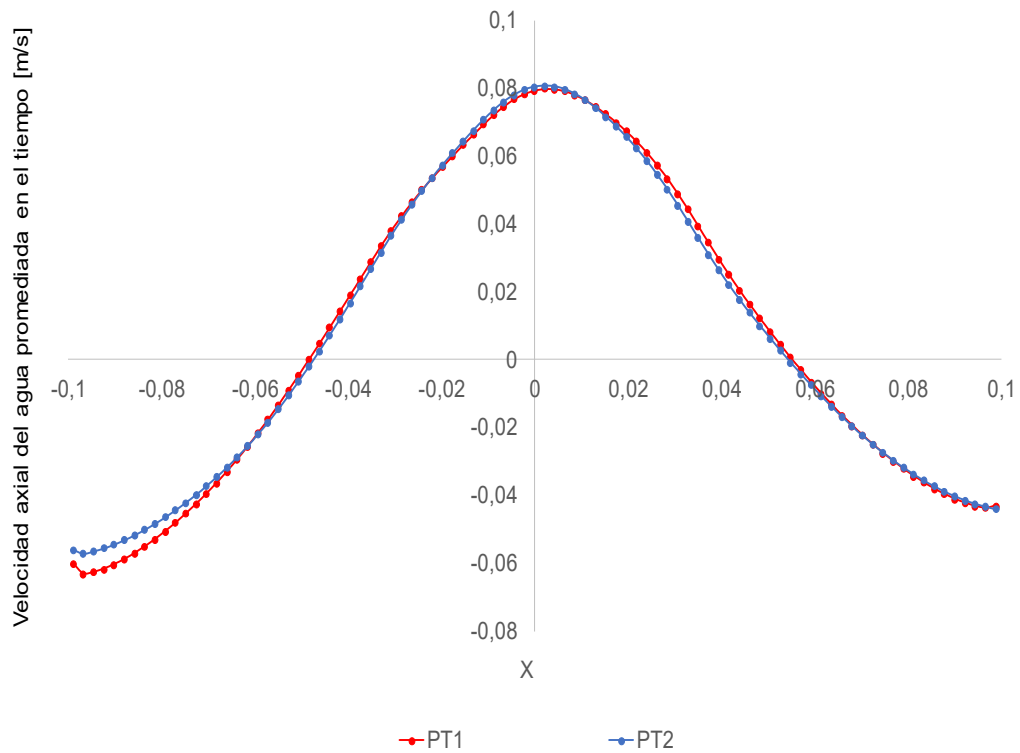
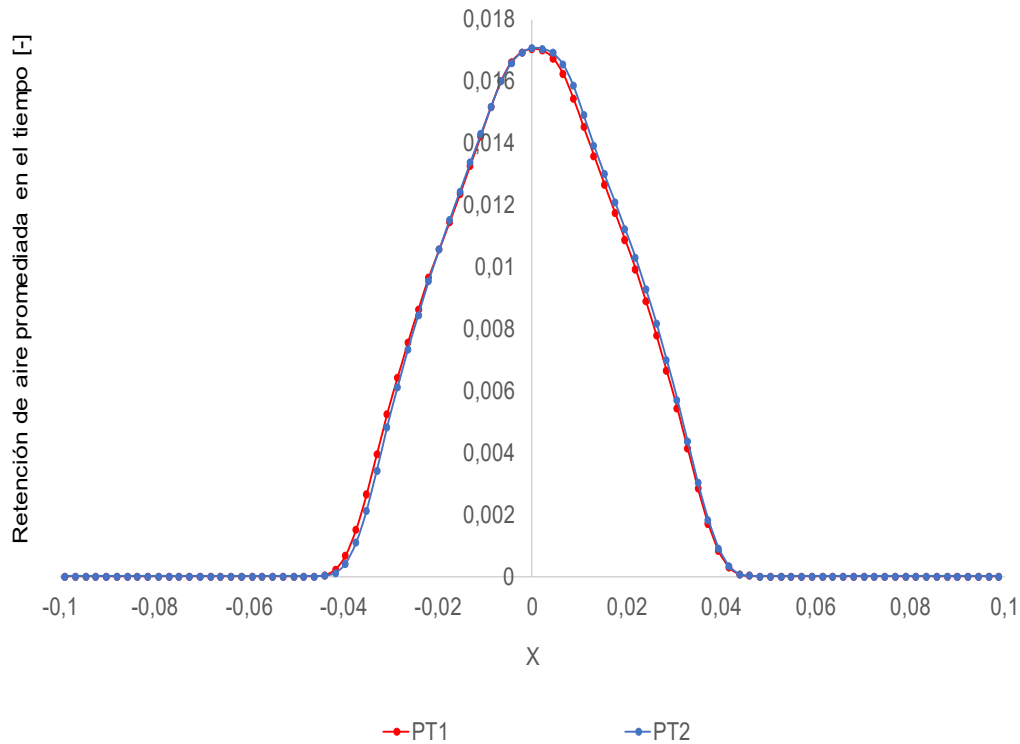


Figura 4-14: Comparación del perfil de retención de gas obtenido con el Modelo computacional 1 para diferentes pasos de tiempo y factores de relajación. PT1: Paso de tiempo 0,006 s y factores de relajación de la Tabla 4-4. PT2: Paso de tiempo 0,01 s y factores de relajación de la Tabla 4-7.



La comparación de los resultados provistos por el Modelo computacional 1 con los datos experimentales puede observarse en las Figuras 4-15 y 4-16, en donde también se incorporaron los resultados obtenidos con el Modelo computacional 0 (sección 4.4.3). Como se mencionó anteriormente, estos modelos difieren en las fuerzas interfaciales implementadas.

Figura 4-15: Comparación del perfil de velocidad axial con diferente inclusión de fuerzas interfaciales. Modelo computacional 0: fuerza de arrastre. Modelo computacional 1: fuerzas de arrastre, sustentación y masa virtual.

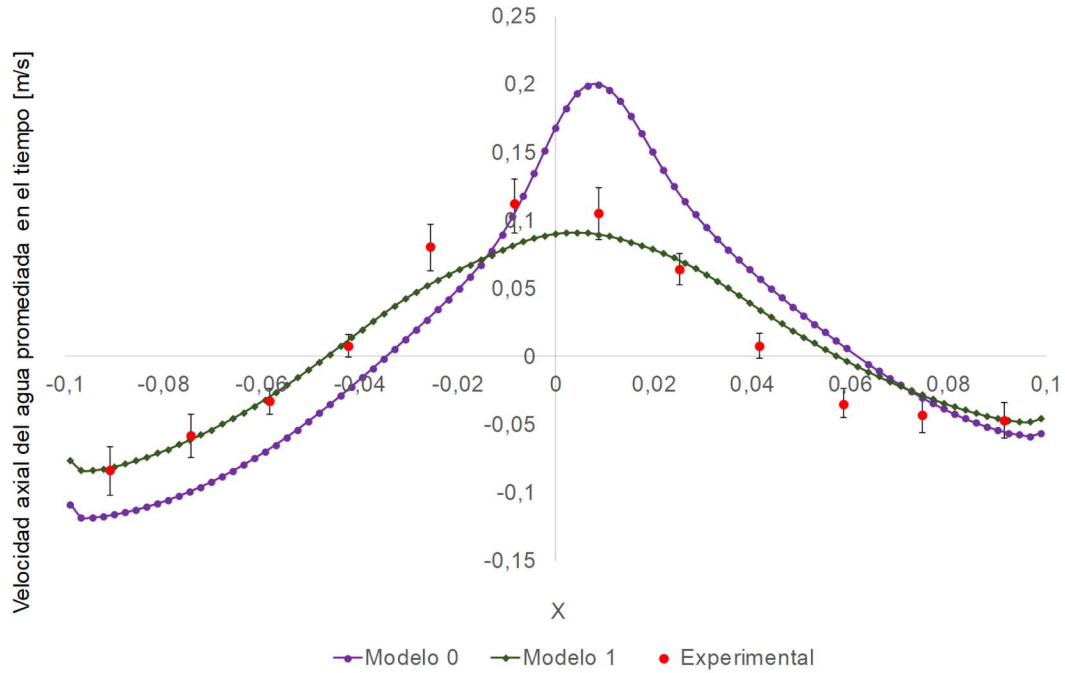
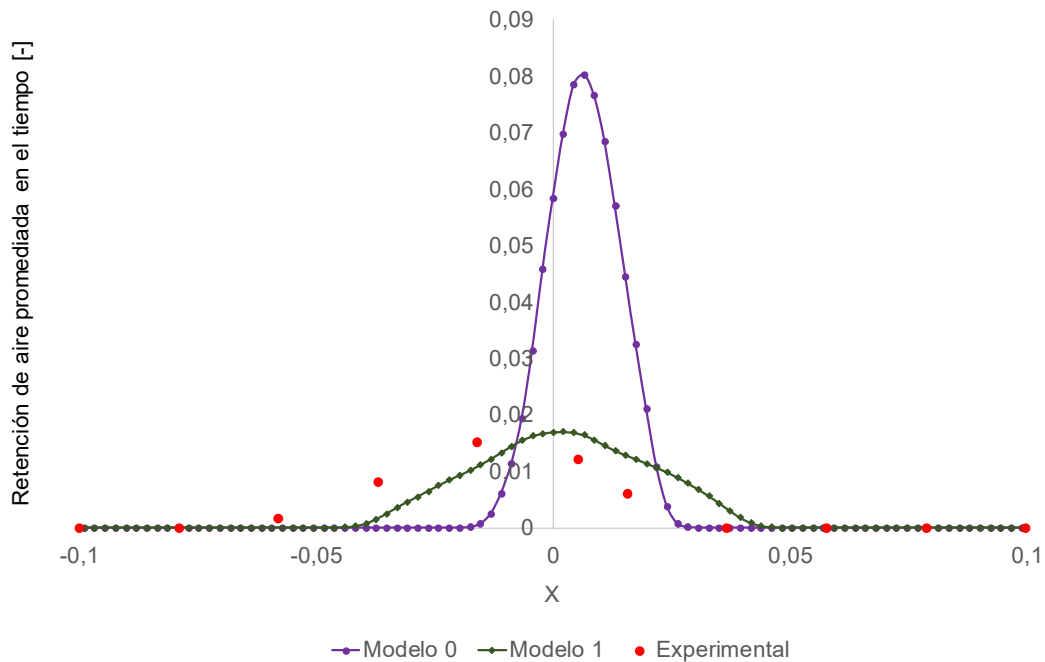


Figura 4-16: Comparación del perfil de retención de gas con diferente inclusión de fuerzas interfaciales. Modelo computacional 0: fuerza de arrastre. Modelo computacional 1: fuerzas de arrastre, sustentación y masa virtual.



Tal como puede observarse en las Figuras 4-15 y 4-16, la nueva clausura de fuerzas interfaciales mejoró apreciablemente la predicción de los campos de flujo. Este resultado adquiere relevancia mayor en el marco de reportes realizados por un gran número de autores desestimando el aporte de fuerzas diferentes a la de arrastre para el modelamiento de la interacción interfacial entre las fases. Los resultados obtenidos en la presente investigación muestran que la exclusión de la fuerza de sustentación lleva a la sobre predicción de los campos de flujo en dominios alrededor del centro de la columna, especialmente para la concentración de gas; esta sobreestimación puede alcanzar magnitudes de hasta 8 veces la concentración local experimental. Para el diseño de reactores las falencias descriptivas de los campos de flujo surgidas de la exclusión de fuerzas interfaciales importantes en el modelamiento pueden llevar a errores de cálculo en el nivel del mezclado de los equipos y por ende a la predicción equivocada del desempeño del reactor.

Algunos autores atribuyen en sus reportes el desfase entre los perfiles calculados y experimentales a un tiempo insuficiente de promediado de los resultados producidos por la simulación, e incluso recomiendan efectuar este manejo de datos para un mínimo de 10 ciclos cuasiperiódicos de oscilación de la pluma [11]. Con el fin de verificar esta afirmación, en este trabajo se efectuó un ensayo numérico abarcando un tiempo de promediado de 11 periodos de oscilación de la pluma (750 segundos calculados); los resultados presentados en las Figuras 4-17 y 4-18 no muestran diferencias apreciables en los perfiles de retención del gas y de velocidad, respectivamente, obtenidos con tiempos de promediado bastantes diferentes (330 y 750 s). La correlación estadística de los perfiles obtenidos con los tiempos de promediado 330 y 750 s, mostrada en la Figura 4-19 y registrada en la Tabla 4-8, ratifica la insensibilidad de esta operación entre los dos números de ciclos ensayados. Con base en esta relación entre ciclos y calidad del promediado se establecieron 3 cuasiperiodos de oscilación de la pluma (alrededor de 330 segundos calculados) para el promediado en las simulaciones siguientes realizadas.

Uno de los aspectos que suscita especial inquietud es la asimetría de los datos experimentales de retención del gas, que en algunas referencias es atribuida a un tiempo de experimentación insuficiente para la recolección de datos representativos. En el caso de una velocidad superficial del gas baja, el periodo de oscilación de la pluma es alto, lo que hace difícil realizar mediciones durante el tiempo suficiente para obtener perfiles de

retención de gas simétricos [40]. Otros autores, sin embargo, sostienen que se debe más bien al retraso de la adquisición de datos experimentales [62].

Figura 4-17: Comparación del perfil de retención de gas obtenido con el Modelo computacional 1 para tiempos de promediado diferentes.

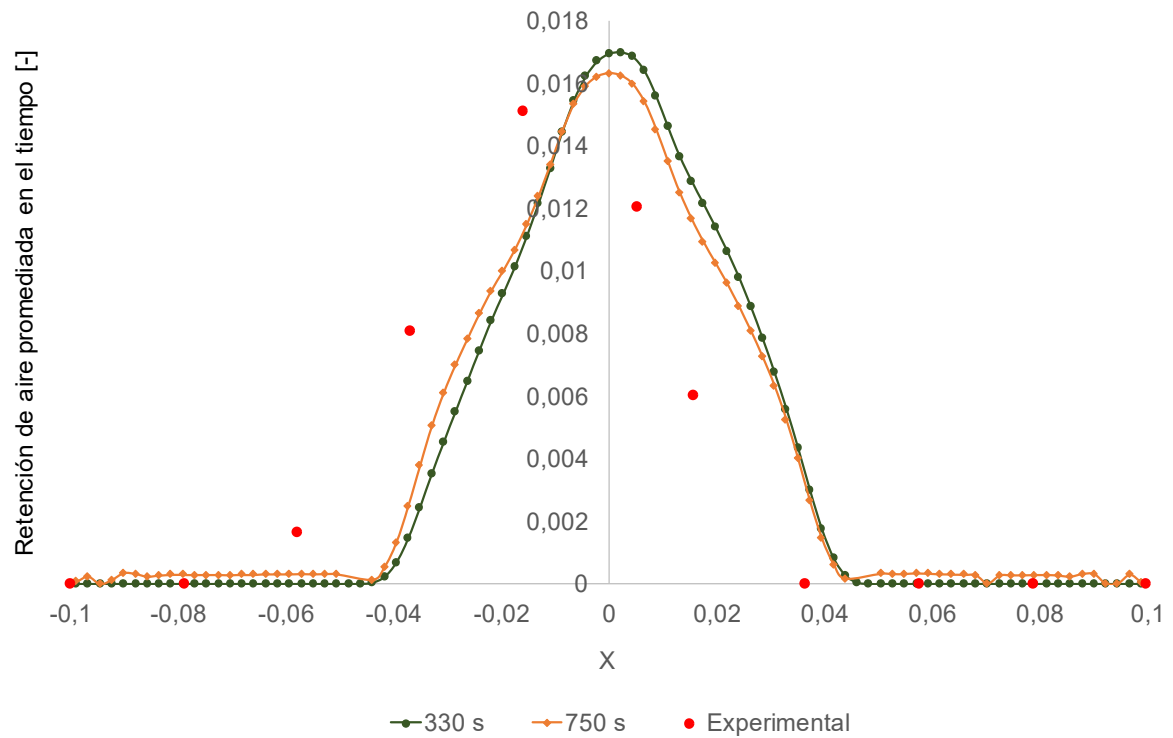


Figura 4-18: Comparación del perfil de velocidad axial del agua calculado con el Modelo computacional 1 con tiempos de promediado diferentes.

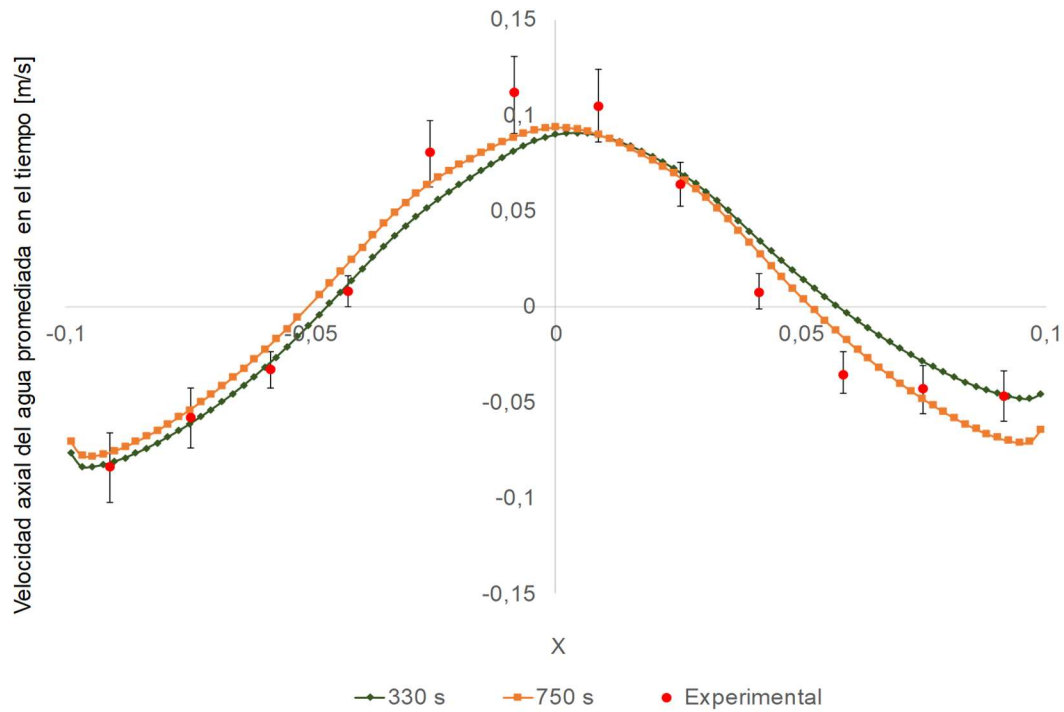


Figura 4-19: Desviación de la velocidad axial promediada en el tiempo predicha por el Modelo computacional 1.

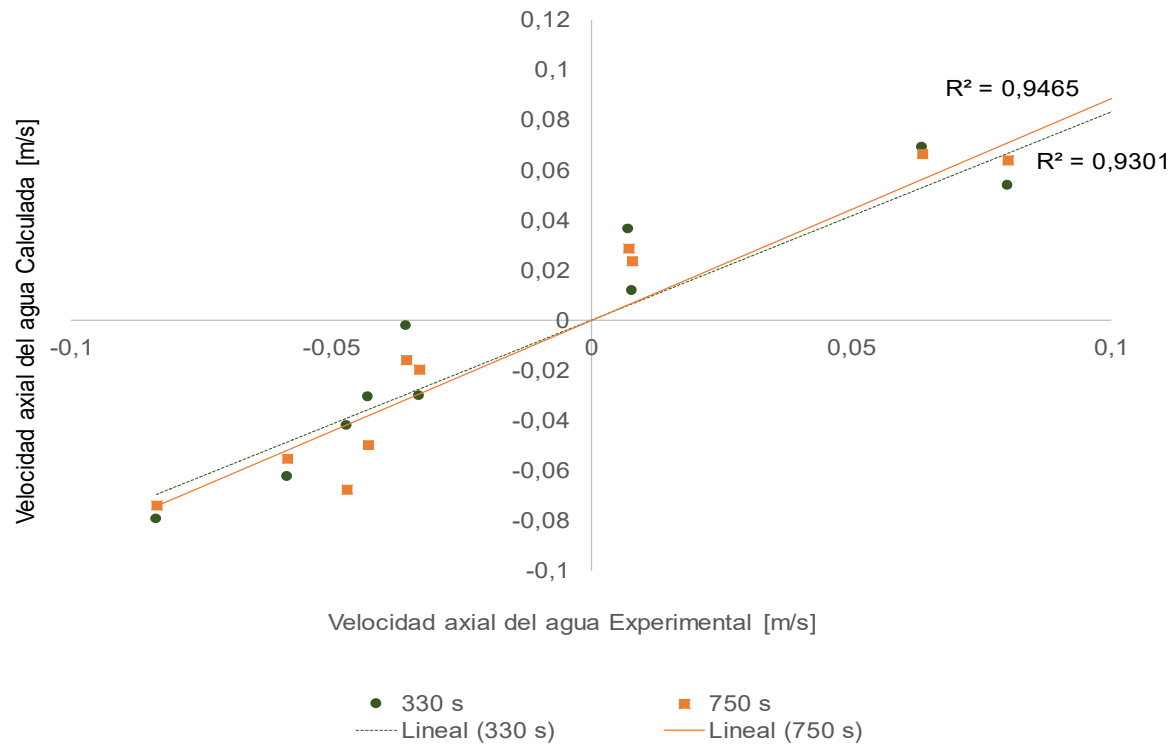


Tabla 4-8: Parámetros de correlación para la velocidad axial del líquido con datos experimentales y simulaciones utilizando el Modelo 1 con diferente tiempo de promediado.

Parámetro	330 s	750 s
R ²	0,93	0,947
RMSE	0,018	0,015

Para el caso de la velocidad axial del agua, la inclusión de la fuerza de sustentación (Modelo computacional 1) llevó a una correlación satisfactoria de los perfiles calculados y experimental para diferentes alturas en la columna, tal como puede apreciarse en la Figura 4-15 y Tabla 4-8 para una altura en la columna de 37 cm con respecto al distribuidor y en la Figura 4-20 para las alturas de 25 y 13 cm. La Figura 4-21 y la Tabla 4-9 muestran también una buena correlación entre las predicciones y los datos experimentales.

La mayor diferencia con los datos experimentales se localiza en los extremos de la columna, en donde la retención muy baja del gas resta importancia sustancial al acople entre las fases, llevando prácticamente a la solución de un problema de una sola fase [35]; por lo tanto, estas diferencias pueden deberse a que la suposición de comportamiento isotrópico de la turbulencia, característica de los modelos $k - \varepsilon$, pierde validez en los extremos de la columna donde se presenta retroflujo, impactando la calidad de las simulaciones.

Figura 4-20: Perfiles de velocidad axial calculados y experimentales sobre una línea horizontal a diferentes alturas de la columna con respecto al distribuidor: 25 cm (arriba), 13 cm (abajo).

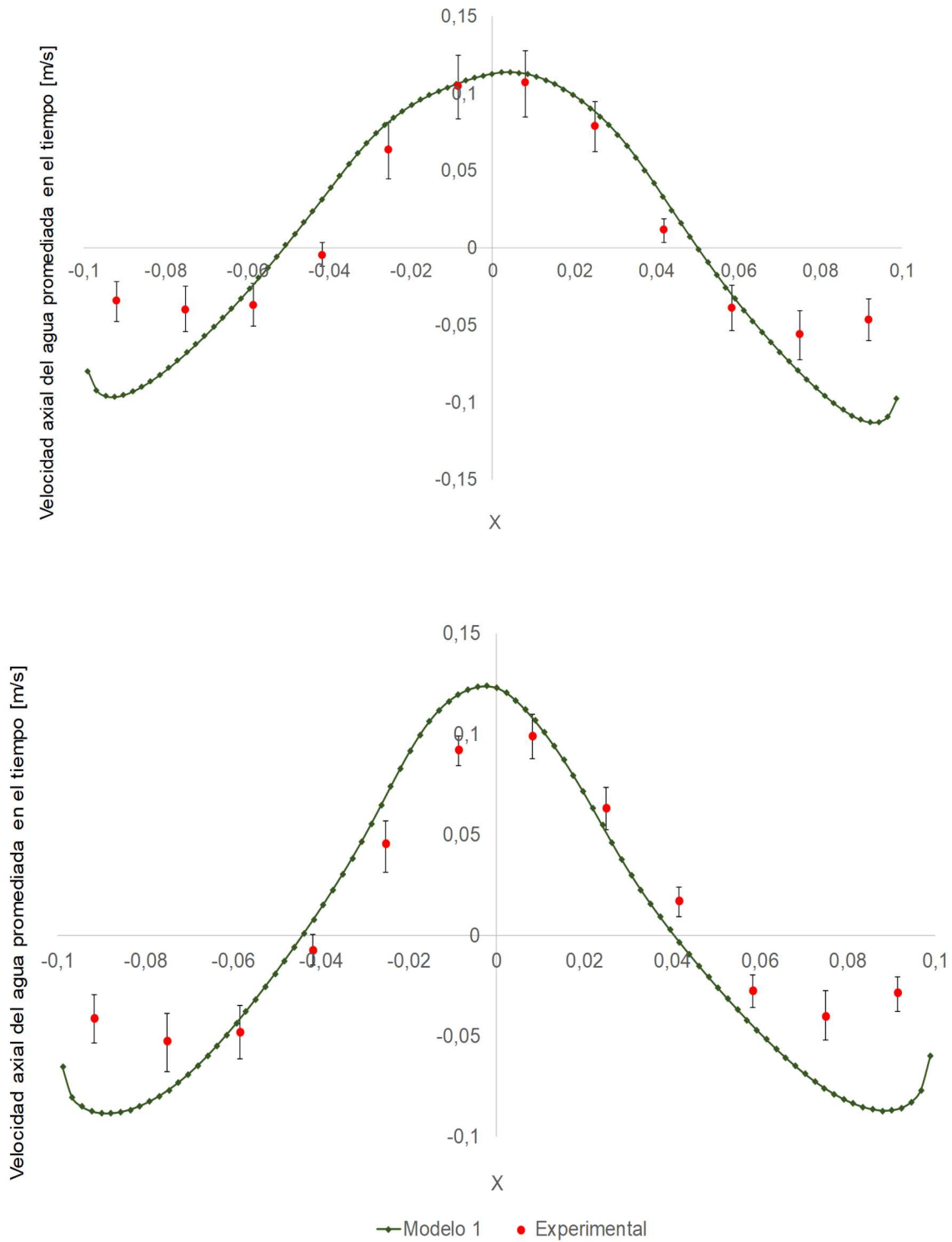


Figura 4-21: Desviación de la velocidad axial promediada en el tiempo predicha por el Modelo computacional 1 a diferentes alturas de la columna.

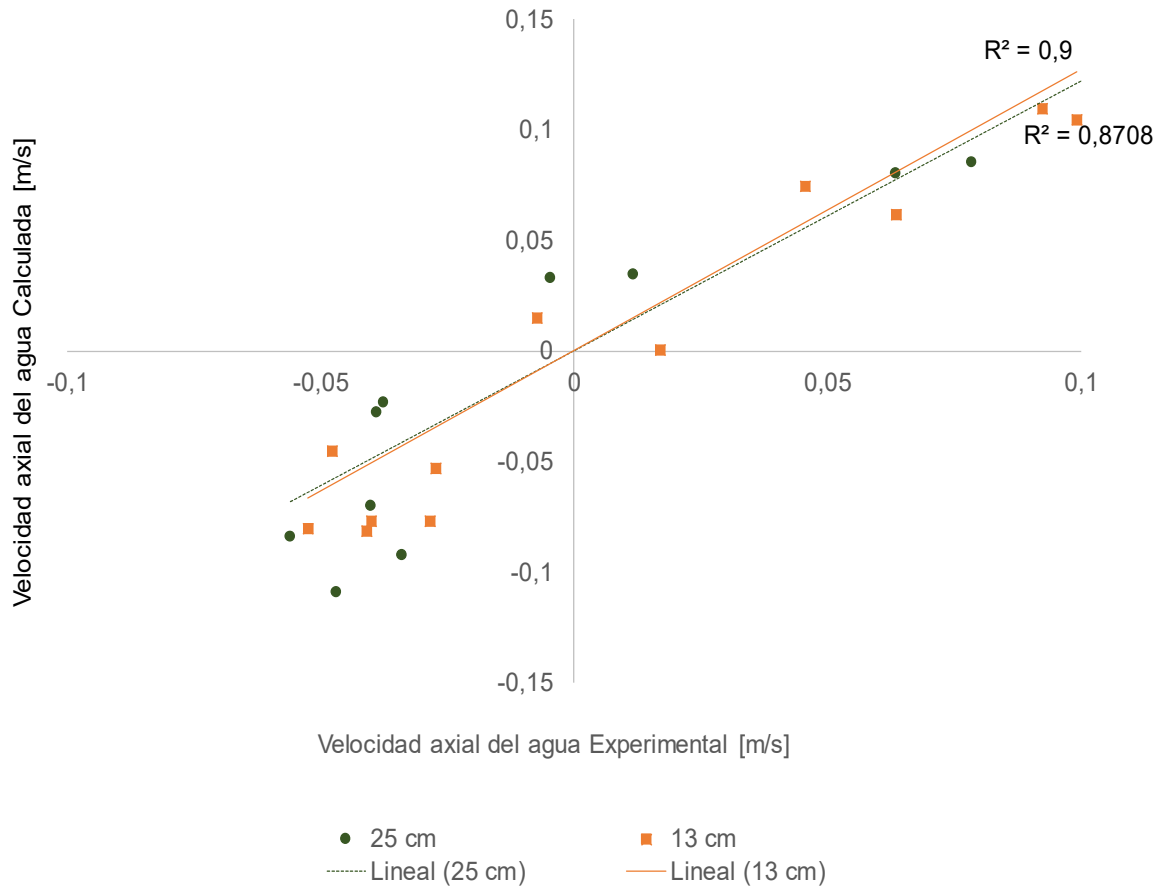


Tabla 4-9: Parámetros de correlación para la velocidad axial calculada del líquido con datos experimentales a diferentes alturas de la columna (medidas desde el distribuidor).

Parámetro	37 cm	25 cm	13 cm
R ²	0,93	0,87	0,9
RMSE	0,018	0,031	0,027

De acuerdo con el mapa de regímenes de flujo reportado en [41], la pluma de burbujas debe presentar oscilaciones y el movimiento del líquido debe seguir un patrón promedio conocido como “torre de enfriamiento”, que consiste en el ascenso y descenso del líquido por el centro de la columna y los lados respectivamente, por lo que se forman dos celdas

de circulación; éste comportamiento se predice con el modelo computacional y se observa en la Figura 4-22.

Las observaciones experimentales del flujo en la columna muestran la presencia de 3 vórtices inestables, los cuales son también predichos por el modelo computacional tal como puede observarse en la Figura 4-23; los vórtices en esta figura están señalados con cruces para las dos figuras que representan un hemicuasiperiodo de la oscilación de la pluma de burbujas durante el ascenso.

Figura 4-22: Campos promediados de velocidad del agua calculados con el Modelo computacional 1.

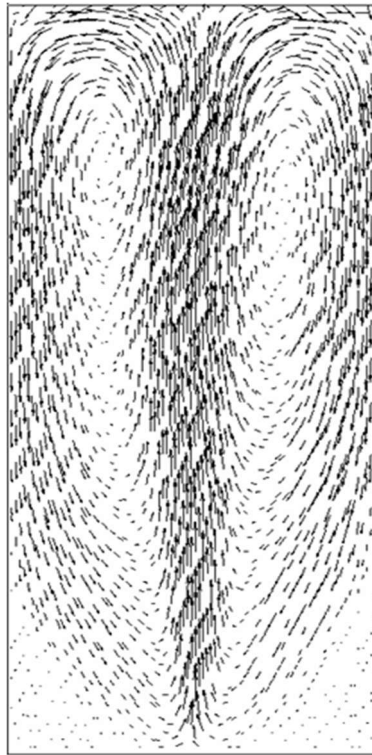
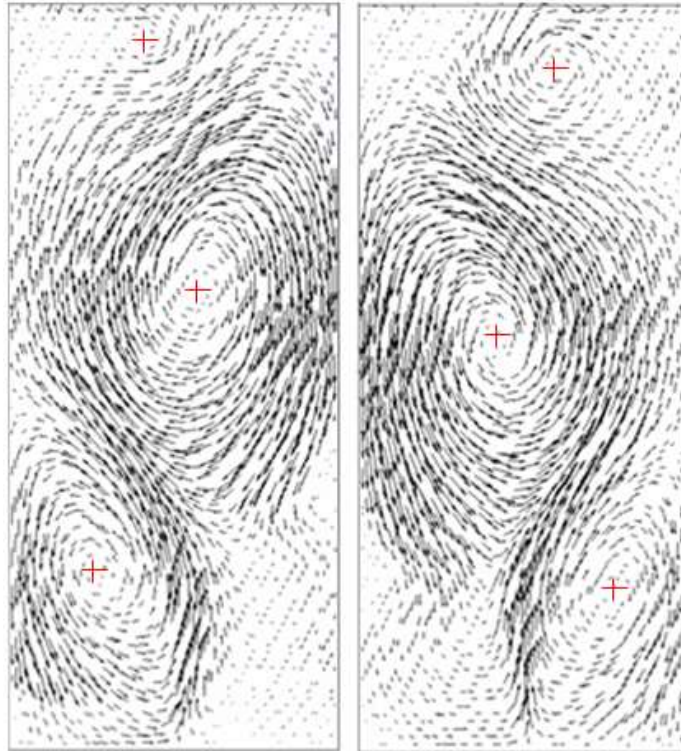


Figura 4-23: Campos instantáneos de velocidad del agua calculados con el Modelo 1 para un hemicuasiperiodo de oscilación de la pluma.



La medición experimental del período de oscilación de la pluma ha mostrado diferencias apreciables entre las investigaciones publicadas; en el 2013, Upadhyay *et al.* [41] reportó una magnitud de 60 s aproximadamente. Investigaciones anteriores a Upadhyay *et al.* registraron magnitudes experimentales comprendidas entre 12 y 16 s [11], [40], [42], [66], las cuales, adicionalmente, han sido validadas a través de modelamiento computacional [11], [39], [40]. En particular para los resultados de esta tesis, la predicción del periodo de oscilación promedio de la pluma con el Modelo computacional 1 fue de 56 s, tal como está establecido en la Figura 4-24; este valor se aleja apreciablemente de los trabajos de simulación reportados en la literatura y se acerca al valor experimental obtenido por Upadhyay *et al.* [41].

La Figura 4-25 ofrece una explicación factible a la divergencia reportada en el periodo de oscilación obtenido con los ensayos numéricos. Esta figura muestra los periodos de oscilación provenientes de simulaciones utilizando el Modelo computacional 1 y dos mallas más gruesas (Mallas A y B, sección 4.2) que la malla seleccionada en este trabajo; los periodos de oscilación entre 15 y 16,5 s obtenidos con estas mallas son similares al

reportado en las investigaciones experimentales previas a la efectuada por Upadhyay *et al.* y en investigaciones numéricas previas a la efectuada en este trabajo. Por lo tanto, los valores bajos de oscilación de la pluma predichos por modelos CFD pueden deberse al error de la discretización espacial, tal como se observa con las dos mallas gruesas que no pasaron la prueba de difusividad numérica.

Figura 4-24: Periodo de oscilación de la pluma de burbujas obtenido con el Modelo 1 y la malla C.

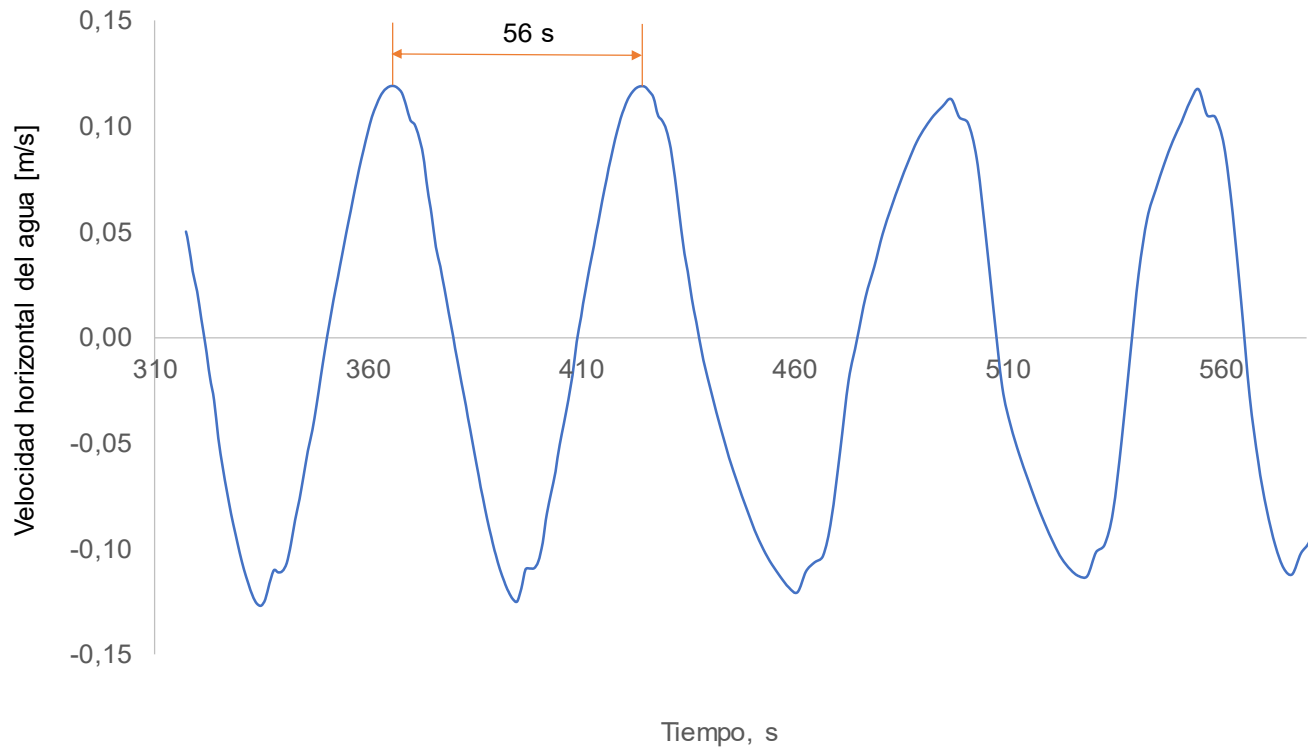
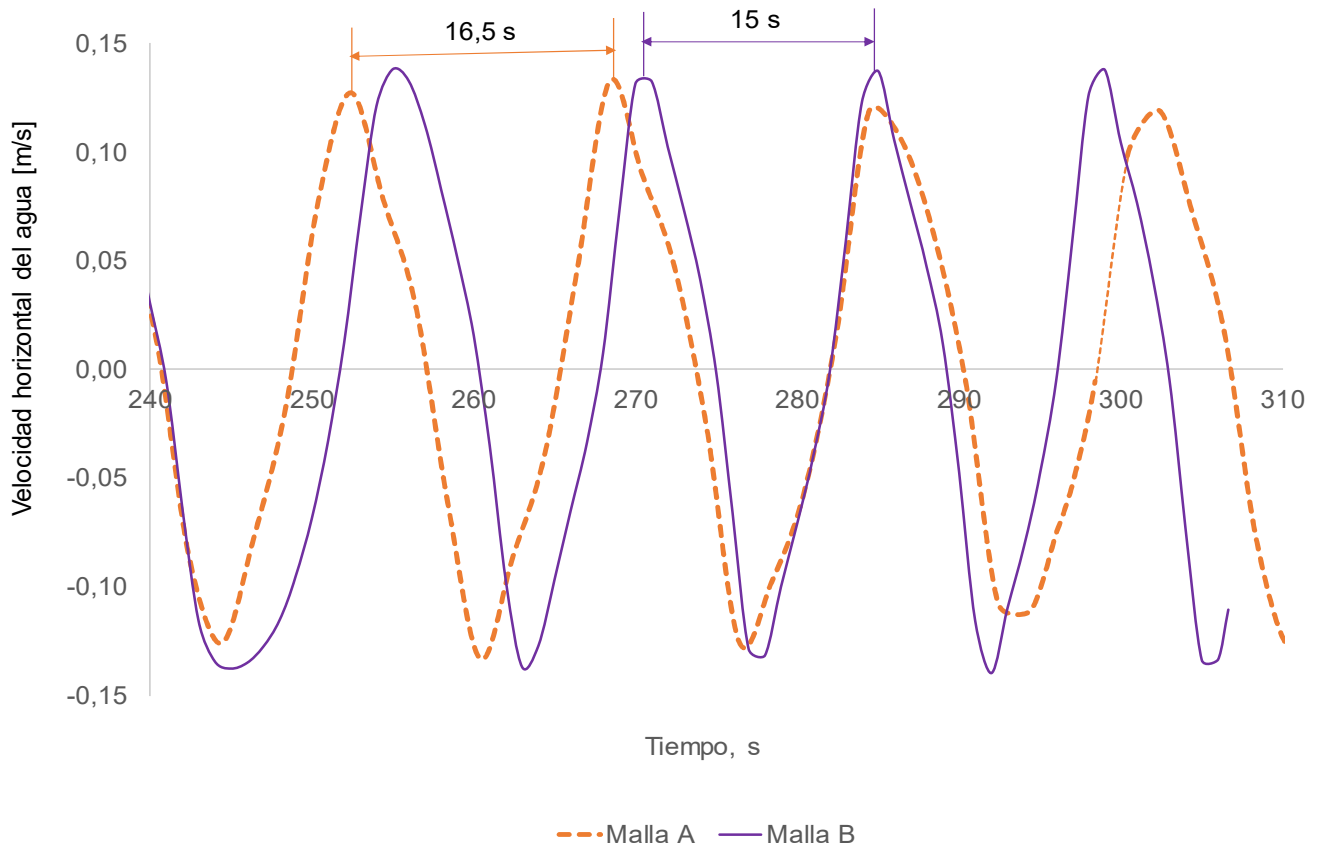


Figura 4-25: Periodo de oscilación de la pluma de burbujas obtenido con el Modelo 1 y mallas gruesas.



4.4.6 Efecto de algunas variables en el ajuste del Modelo computacional 1

En esta sección se evaluó cuantitativamente el impacto que presentan las variables modelo de turbulencia multifásica, clausura de fuerzas interfaciales, magnitud del coeficiente de la fuerza de sustentación y modelo de clausura de turbulencia en las capacidades predictivas de campos de flujo del Modelo computacional 1. La Tabla 4-10 reporta los nuevos Modelos computacionales generados por los cambios junto con el parámetro que se evalúa en cada uno; los otros parámetros de los modelos se mantuvieron iguales a los del 1.

Las simulaciones en esta etapa se llevaron a cabo hasta 330 segundos de flujo, similar a lo ocurrido cuando se implementó el Modelo 1; la oscilación cuasiperiódica de la pluma se alcanzó a los 150 segundos de flujo.

Tabla 4-10: Parámetros evaluados en los diferentes Modelos computacionales generados con cambios de un parámetro (caudal de aire: 48 L/h).

Parámetro Estudiado	Definición	
Modelo de turbulencia multifásica	Por Fase	Modelo 2
Modelamiento de fuerzas interfaciales	Fuerzas de arrastre y masa virtual	Modelo 3
	Fuerzas de arrastre y sustentación	Modelo 4
Magnitud del coeficiente de la fuerza de sustentación	Coef. 0,14	Modelo 5
Modelo de clausura de turbulencia	RNG	Modelo 6
	Realizable	Modelo 7

La selección del modelo Disperso para la turbulencia multifásica se justificó en la sección 4.4.2; sin embargo, el Modelo computacional 2 implementa el modelo Por Fase debido a la presencia exclusiva de aire por encima del nivel del agua. Las Figuras 4-26 y 4-27 muestran ausencia de diferencias predictivas entre los dos modelos; esto conlleva a la continuidad en el uso del modelo Disperso en este trabajo ya que requiere un menor consumo computacional.

Figura 4-26: Comparación de los perfiles promediados de retención de gas obtenidos con los modelos Disperso y Por Fase para la turbulencia multifásica.

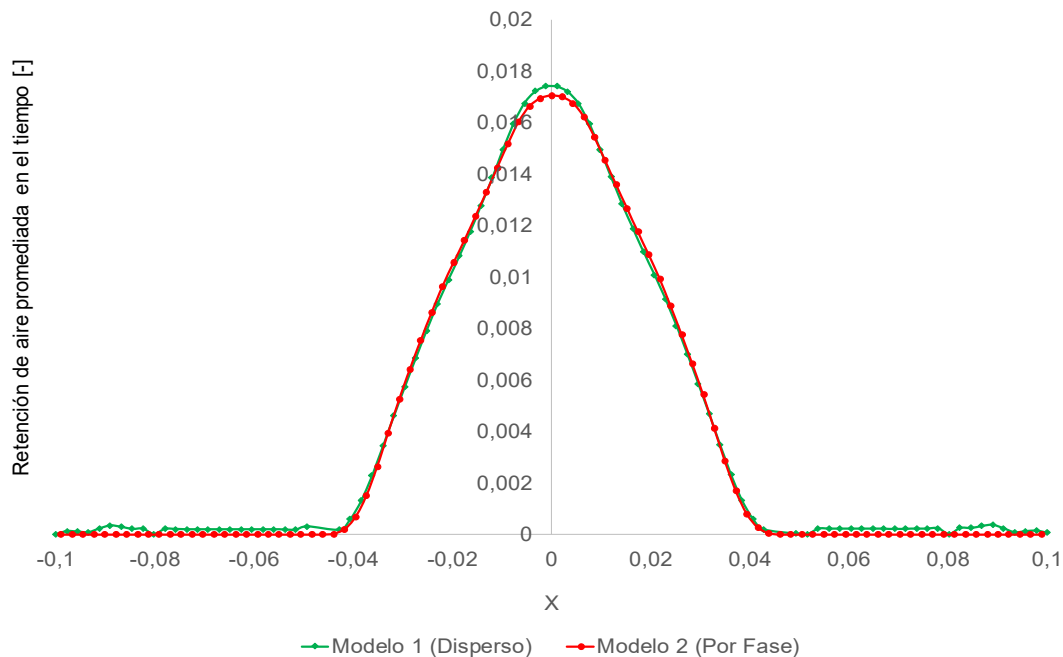
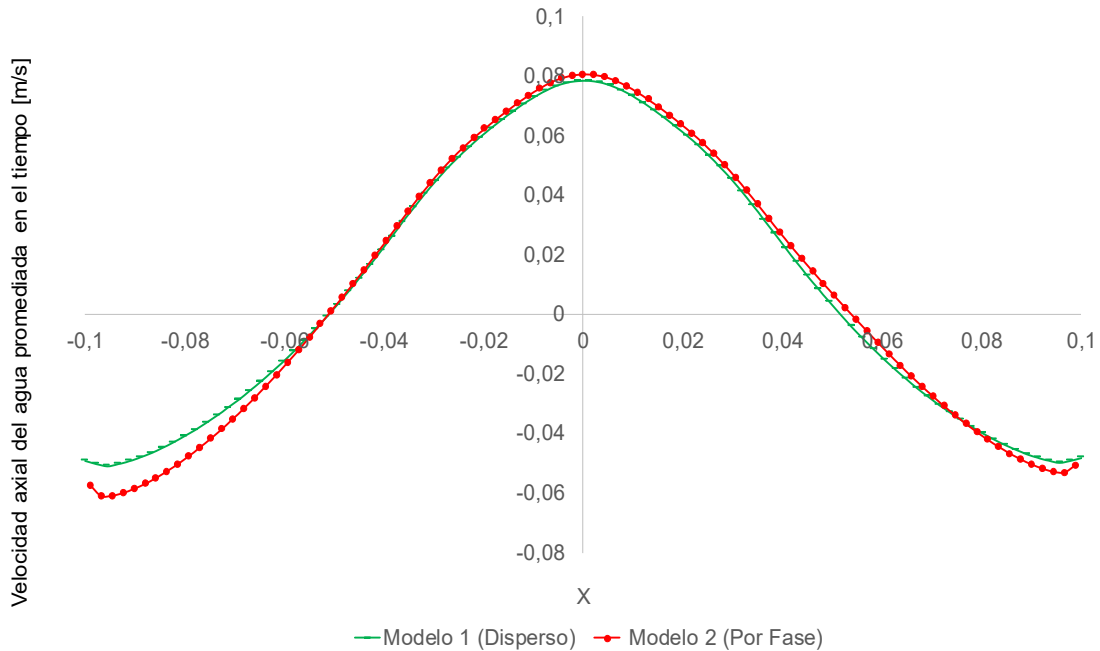


Figura 4-27: Comparación de los perfiles promediados de velocidad axial del agua obtenidos con los modelos Disperso y Por Fase para la turbulencia multifásica.



Adicionalmente, se evaluó la implementación de diferentes clausuras de fuerzas interfaciales combinando las fuerzas de arrastre (D), sustentación (L) y masa virtual (MV), que son las más importantes para la aplicación aquí estudiada. Las Figuras 4-28 y 4-29 presentan los resultados de las predicciones efectuadas con los Modelos computacionales 0, 1, 3 y 4; tal como se describe en las Tablas 4-3, 4-6 y 4-10. El Modelo 0 incorporó solamente la fuerza de arrastre, el Modelo 1 integró arrastre, sustentación y masa virtual, el 3 arrastre y masa virtual y el 4 arrastre y sustentación. La comparación de estas curvas calculadas en función de los datos experimentales permite apreciar a través de los Modelos 1 y 4 el peso preponderante que tiene la fuerza de sustentación con respecto a la de masa virtual sobre la calidad de la predicción; este efecto de mejora predictiva que conlleva la fuerza de sustentación puede atribuirse a su capacidad de introducir el comportamiento oscilatorio de la pluma, ya que gobierna el movimiento lateral de las burbujas; es este movimiento hacia las paredes (en ausencia de la fuerza de dispersión turbulenta) lo que “aplana” un poco los perfiles retención de gas y de velocidad axial. Lo anterior contrasta con algunos autores que afirman que a baja velocidad superficial del gas puede obviarse la fuerza de sustentación debido a que los gradientes de velocidad del líquido no son significativos y porque la distribución de tamaño de burbuja no es muy amplia y la fuerza

de sustentación distribuye las burbujas radialmente según su tamaño [67]. La Figura 4-30 muestra el efecto de la fuerza de sustentación en los contornos de retención del gas, para los Modelos 1 y 4 puede observarse dispersión transversal de la pluma. Además, los patrones de flujo producidos por los Modelos 0 y 3 no presentan oscilaciones transversales, a diferencia de aquellos predichos por los Modelos 1 y 4 (ver Figura 4-23).

La introducción de la fuerza de masa virtual en el Modelo computacional 1 llevó a una leve mejoría de la predicción de la velocidad promedio en la región cercana a la pared; este resultado, obtenido con tamaño de burbuja fijo, es similar al reportado en [60], donde los cálculos de campos de flujo además de considerar las fuerzas de sustentación y de masa virtual también incluyen balances de población.

Figura 4-28: Comparación de los perfiles de velocidad axial promedio obtenidos con la incorporación de diferentes fuerzas interfaciales en los Modelos computacionales 0 (fuerza de arrastre), 1 (arrastre, sustentación y masa virtual), 3 (arrastre y masa virtual) y 4 (arrastre y sustentación).

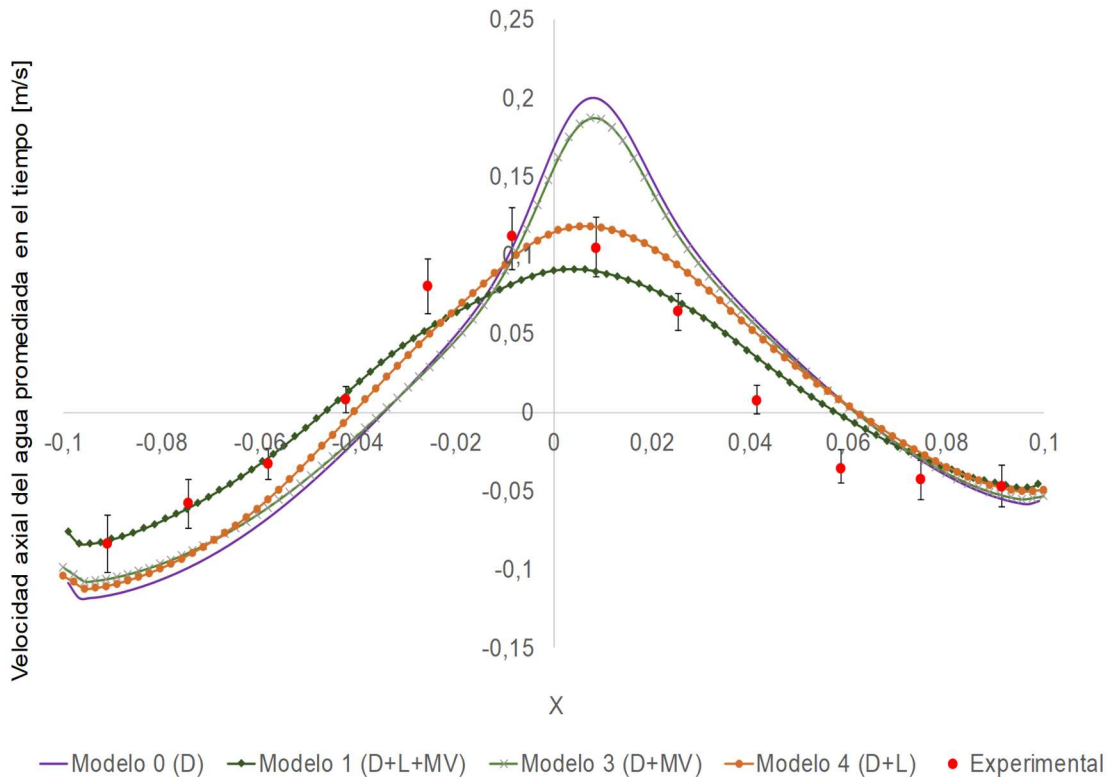


Figura 4-29: Comparación de los perfiles de retención de gas promedio obtenidos con la incorporación de diferentes fuerzas interfaciales en los Modelos computacionales 0, 1, 3 y 4.

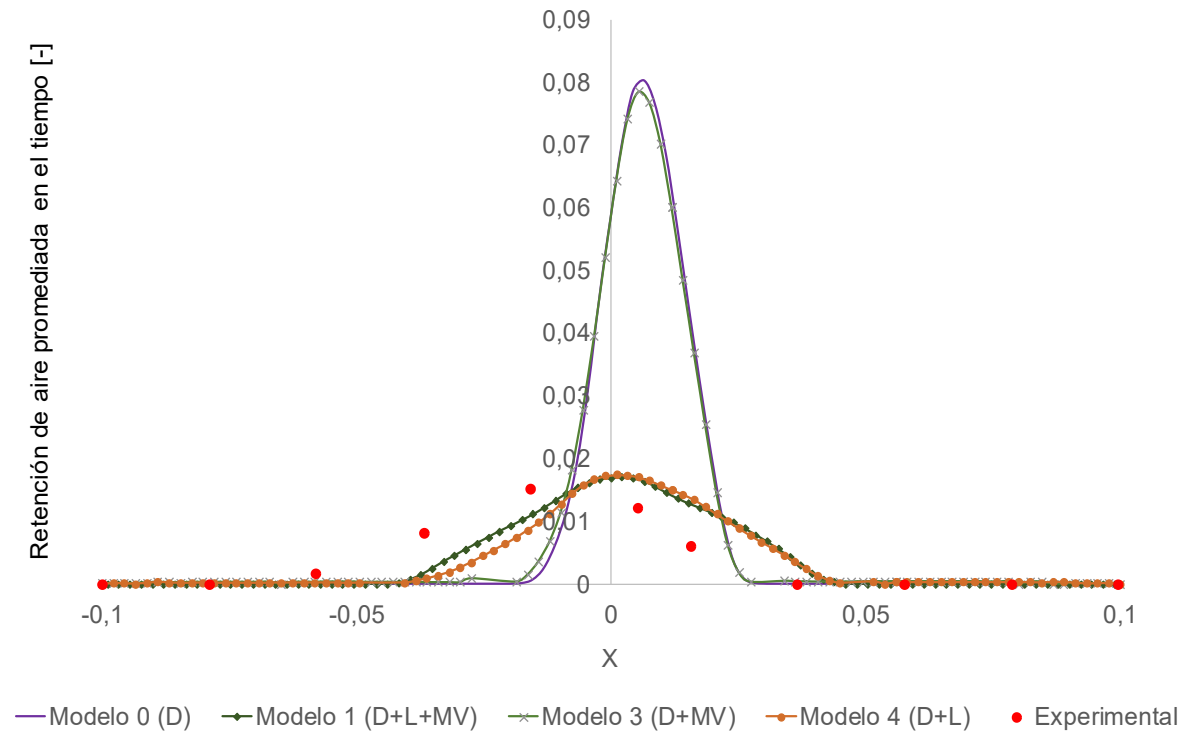
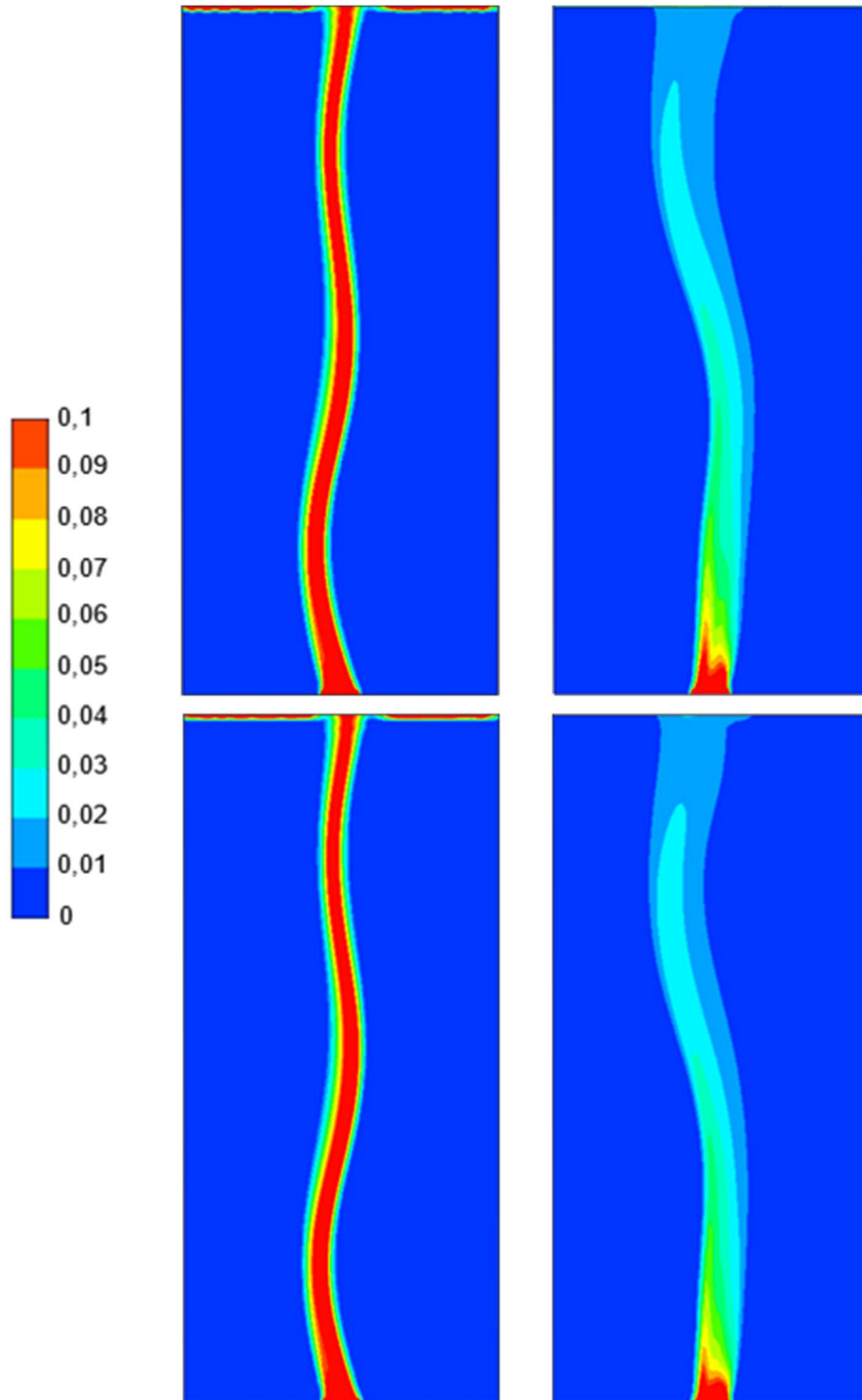


Figura 4-30: Contornos instantáneos de retención de gas obtenidos con la incorporación de diferentes fuerzas interfaciales en los Modelos computacionales 0, 1 (arriba izq. y der. respectivamente), 3 y 4 (abajo izq. y der. respectivamente).



Por otra parte, y debido al efecto que tuvo la inclusión de la fuerza de sustentación en la mejora de los resultados calculados, se evaluó el impacto del cambio en el valor del coeficiente de dicha fuerza mediante el Modelo computacional 5, para el que se estableció una magnitud de 0,14 según lo recomendado en algunas referencias [33], [54], [60], [62]. El perfil de velocidad axial promedio del líquido no se vio significativamente afectado (Figura 4-31); sin embargo, la retención de gas se alejó un poco más de los datos experimentales (Figura 4-32), confirmando la mayor sensibilidad de la retención de gas al modelamiento de la fuerza de sustentación. Por lo anterior, se continuó utilizando el coeficiente de 0,2 para la etapa de balances de población.

Figura 4-31: Comparación de los perfiles de velocidad axial promedio obtenidos con diferentes coeficientes para el cálculo de la fuerza de sustentación (0,14 y 0,2).

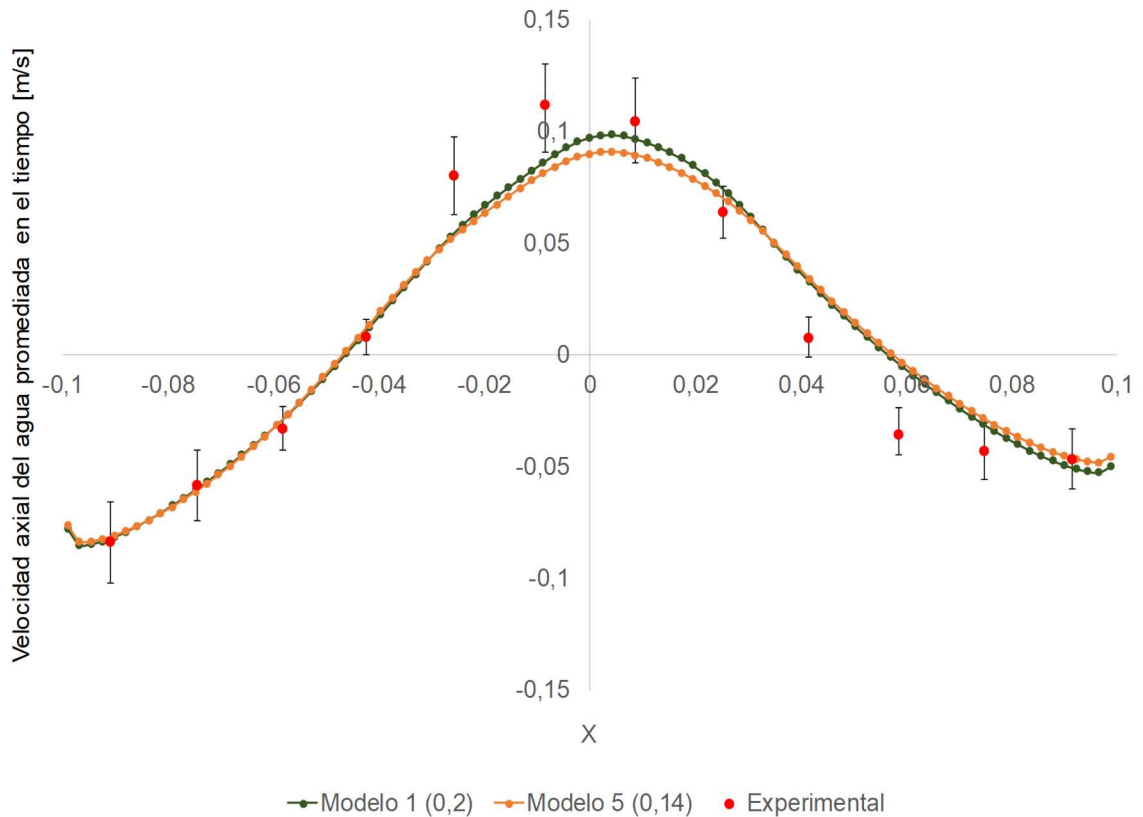
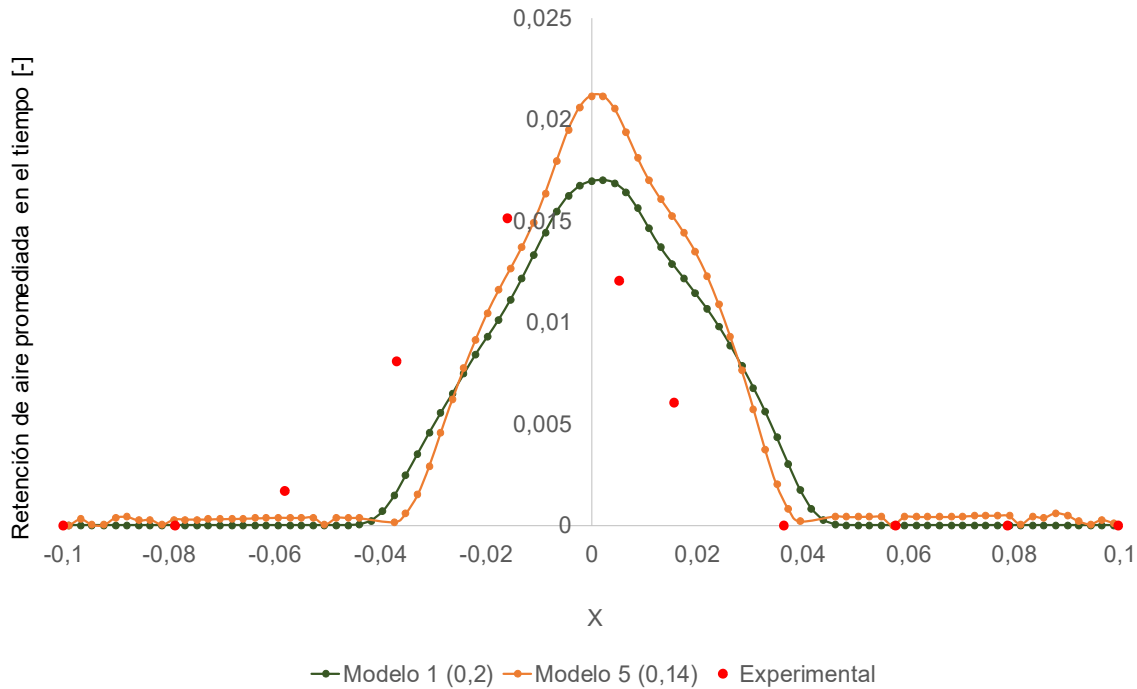


Figura 4-32: Comparación de los perfiles de retención de gas promedio obtenidos con diferentes coeficientes para el cálculo de la fuerza de sustentación (0,14 y 0,2).



Las tres variantes del modelo de clausura de la turbulencia $k - \varepsilon$ fueron consideradas en esta parte de la investigación a través de los Modelos computacionales 1, 6 y 7. El Modelo 1 consideró a la variante Standard (Tabla 4-6) y los Modelos 6 y 7 integraron a RNG y Realizable, respectivamente (Tabla 4-10); el efecto de estas variantes en la calidad de los cálculos en función de la altura de líquido en la columna se observa en la Figura 4-33. En general los tres modelos $k - \varepsilon$ empleados ofrecen predicciones aceptables en las alturas en las que fueron comparados (Figura 4-34 y Tabla 4-11), debido a la velocidad superficial baja del aire; sin embargo, pueden establecerse las siguientes diferencias en estos perfiles:

- i) Para la mayor altura de seguimiento (37 cm), el modelo Standard describe mejor los datos experimentales. Este comportamiento puede atribuirse a una intensidad menor de la turbulencia en esta zona, en comparación con la que se presenta en las otras dos alturas.
- ii) En la altura intermedia evaluada (25 cm), el modelo Standard y el Realizable tienen un mejor comportamiento en la parte central de la columna, pero presentan una desviación mayor que el RNG en las partes cercanas a la pared.

iii) En la parte inferior de la columna (altura 13 cm), RNG describe mejor todo el intervalo de mediciones. Esta mejora en la descripción puede atribuirse a que esta zona registra turbulencias superiores a las otras alturas por encontrarse más cerca a la entrada del gas; RNG fue desarrollado para mejorar la descripción de vórtices y escalas de turbulencia más amplias [56], [60]. Sin embargo, la mejora predictiva ofrecida por RNG en esta investigación acarreó un costo computacional superior al requerido por los modelos Standard y Realizable, además de mayor restricción en los factores de relajación (magnitudes inferiores).

Algunos autores afirman que el modelamiento de la zona cercana al distribuidor requiere de modelos libres de la restricción de flujo isotrópico, tales como el modelo de esfuerzos de Reynolds (RSM) o la simulación de grandes vórtices (LES) [54]; sin embargo, para los campos de flujo aquí predichos, fue suficiente con un modelo $k - \varepsilon$ que requiere menos recursos computacionales.

Para RNG la mayor diferencia con los datos experimentales se localiza en el centro de la columna, en donde la retención alta del gas le otorga relevancia crítica al acople entre las fases; por lo tanto, puede postularse la hipótesis de que un cambio en la clausura de las fuerzas interfaciales puede llevar a resultados más cercanos a los experimentales en esta zona. La mayor desviación a la altura de 37 cm puede deberse a la disminución en las escalas de turbulencia, para lo cual el Modelo RNG no fue adaptado ya que en su proceso de desarrollo se aplicó el método de renormalización de grupos para eliminar este tipo de escalas [14].

Figura 4-33: Comparación de los perfiles de velocidad axial promedio con diferentes modelos de clausura de la turbulencia $k - \varepsilon$ a diferentes alturas de la columna: 37 cm (arriba), 25 cm (medio), 13 cm (abajo).

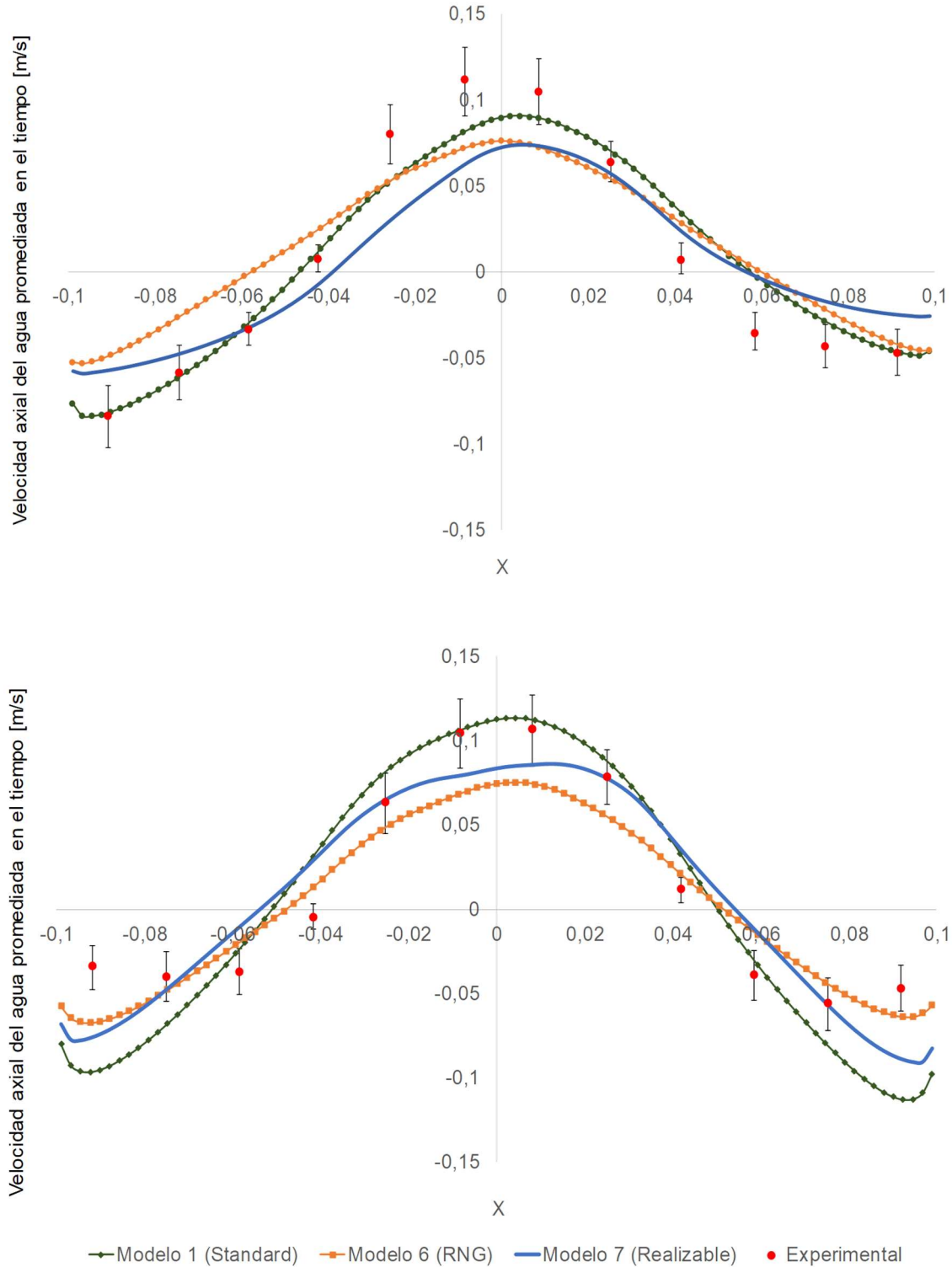


Figura 4-33: (Continuación)

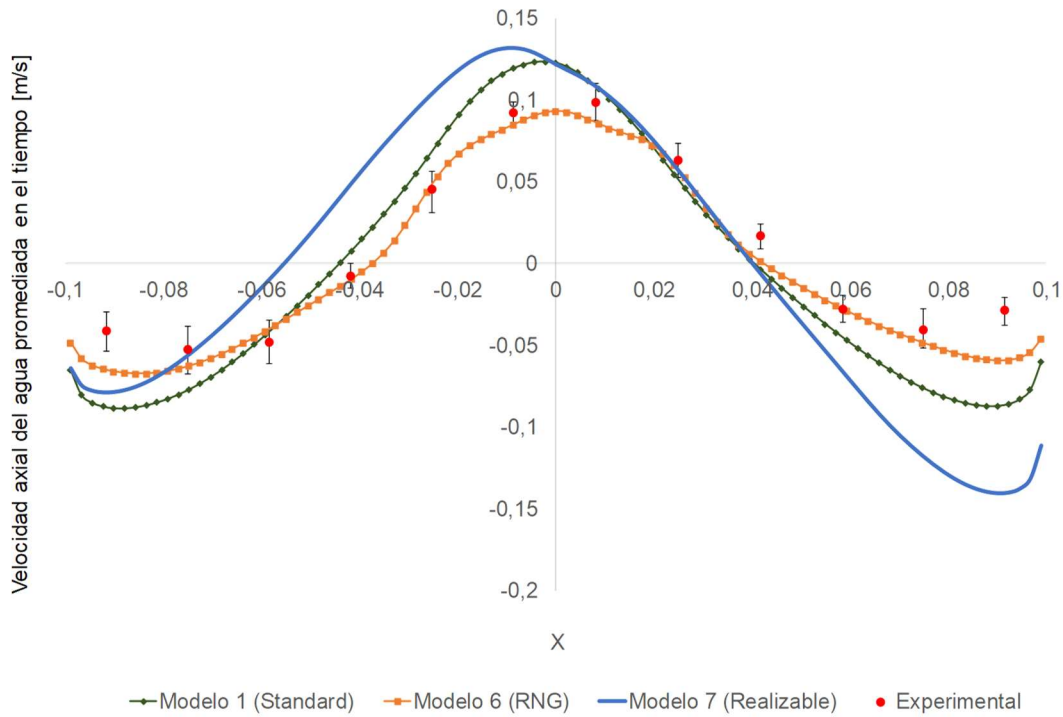


Figura 4-34: Desviación de la velocidad axial promediada en el tiempo predicha por los diferentes modelos de turbulencia de la familia $k - \epsilon$ para diferentes alturas de la columna: 37 cm (arriba), 25 cm (medio), 13 cm (abajo).

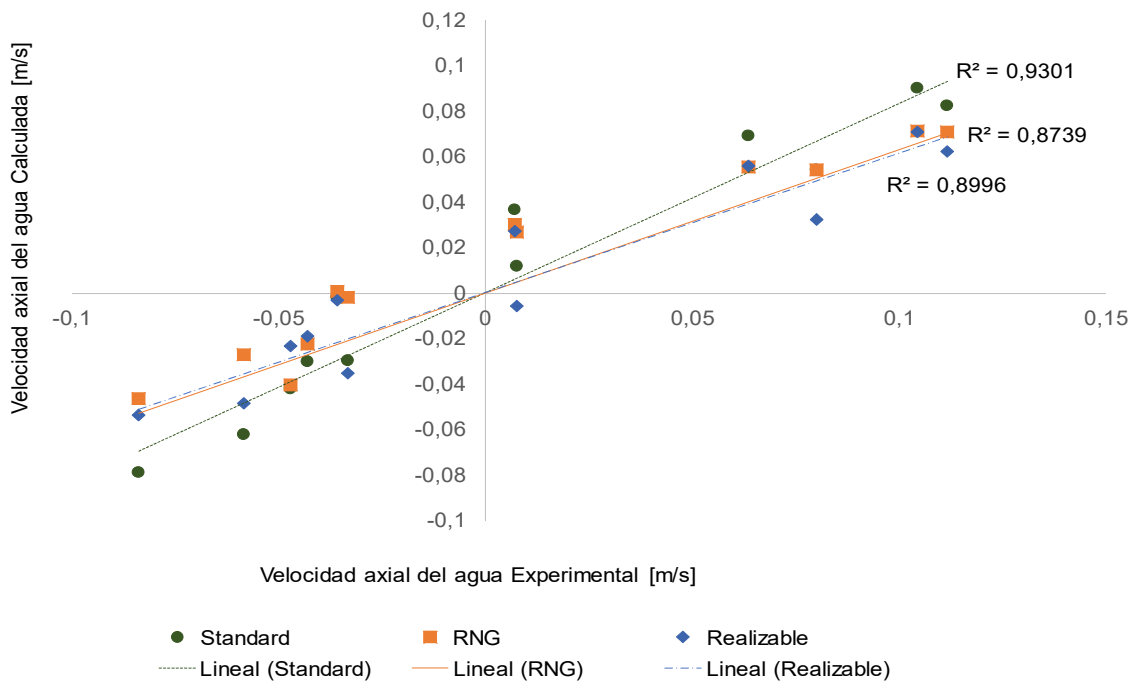
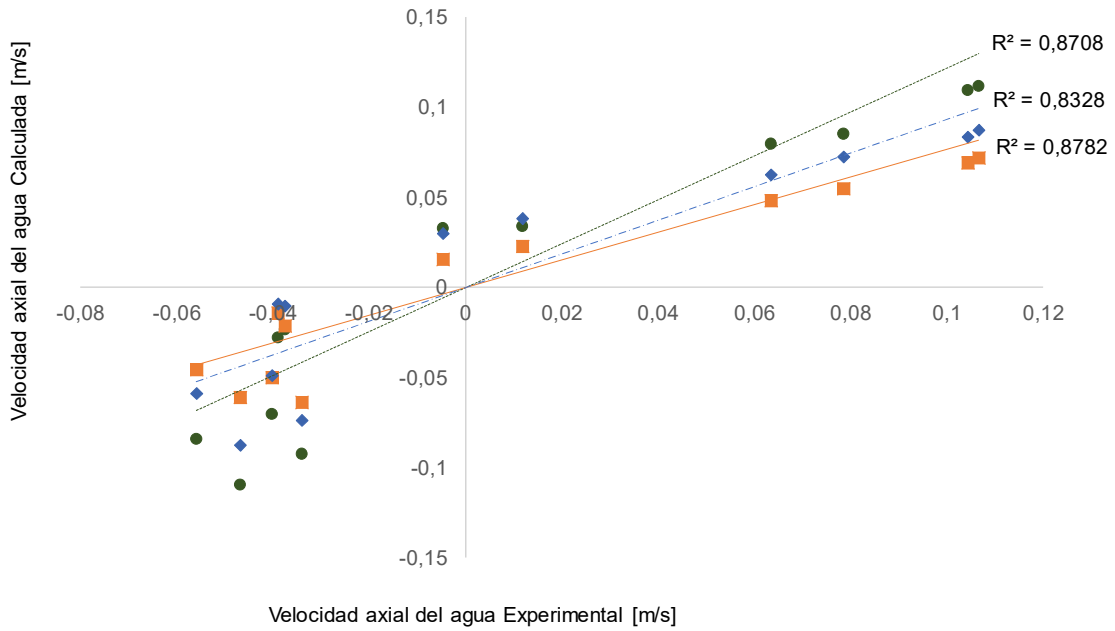
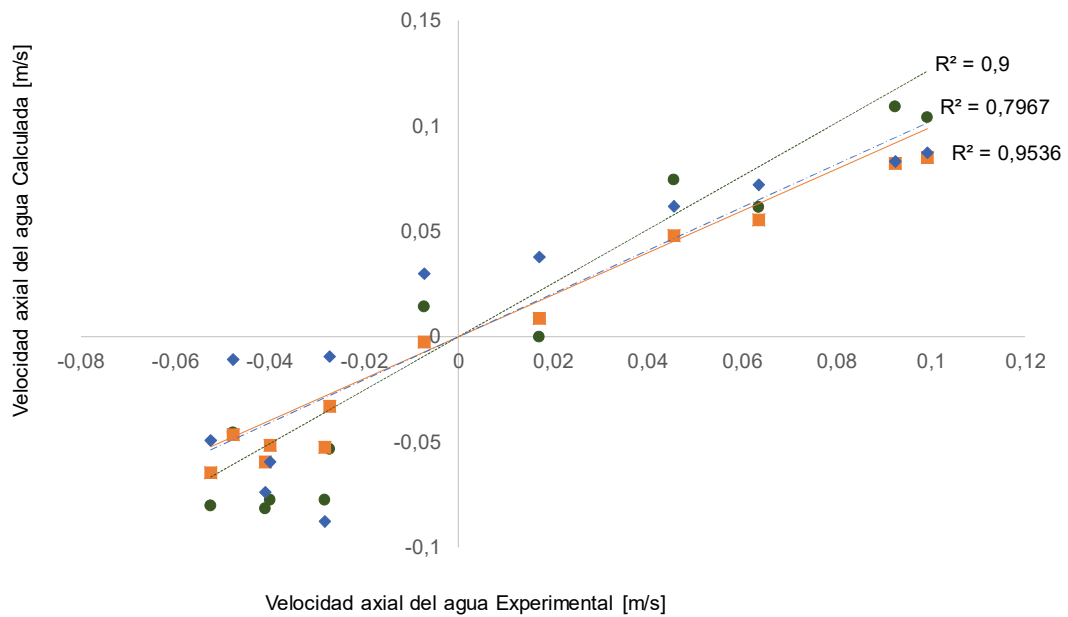


Figura 4-34: (Continuación)



● Standard ■ RNG ◆ Realizable
- - - Lineal (Standard) — Lineal (RNG) - - - Lineal (Realizable)



● Standard ■ RNG ◆ Realizable
- - - Lineal (Standard) — Lineal (RNG) - - - Lineal (Realizable)

Tabla 4-11: Parámetros de correlación para la velocidad axial promedio del líquido con datos experimentales utilizando modelos de clausura de la turbulencia de la familia $k - \varepsilon$ a diferentes alturas de la columna.

Parámetro	Standard	RNG	Realizable
<i>37 cm</i>			
R ²	0,93	0,87	0,89
RMSE	0,018	0,028	0,028
<i>25 cm</i>			
R ²	0,87	0,878	0,83
RMSE	0,031	0,022	0,025
<i>13 cm</i>			
R ²	0,9	0,95	0,79
RMSE	0,027	0,01	0,05

Una validación de la simulación empleando la aproximación Euleriana- Lagrangiana se presenta en el Anexo A.

4.5 Modelado con distribución de tamaño de burbuja. Caudal de aire de 48 L/h.

La incorporación de los balances de población al modelamiento computacional de la columna de burbujeo permitió discriminar el efecto que tiene el uso de una distribución de tamaños de partícula, en lugar de un tamaño único, en la calidad de las predicciones de los campos de flujo efectuadas por la simulación. El modelo que incluyó balances de población se designa como Modelo computacional 8.

4.5.1 Selección de los esquemas de discretización y de los métodos de solución

Las simulaciones que incluyeron los balances de población utilizaron los mismos esquemas de discretización y algoritmo de solución adoptados para los cálculos con

tamaño de burbuja fijo (sección 4.4.1). El esquema de discretización empleado para las propiedades de las clases de la fase gaseosa fue el QUICK.

En las simulaciones con balances de población se especificó un máximo de 100 iteraciones por paso de tiempo debido a que el desempeño de los residuales mostró mayor dificultad en la convergencia de la solución de la ecuación de continuidad; sin embargo, ajustes efectuados a los parámetros de relajación y al paso de tiempo llevaron a un número de iteraciones inferior a 20 para alcanzar la convergencia.

4.5.2 Selección de modelos

La selección del método discreto para la solución de los balances de población se sustentó en la suposición de una distribución del tamaño de burbuja no muy amplia debido a la baja velocidad superficial del gas; esta aproximación conlleva a la reducción en el número de clases y a una exigencia computacional inferior para el método de cálculo. Adicionalmente, la suposición de que todas las burbujas ascienden con la misma velocidad, característica del método discreto, no debe afectar considerablemente los resultados, debido a que en el sistema agua-aire la velocidad de ascenso de las burbujas es prácticamente independiente del diámetro de las mismas en el rango de 1 a 10 mm [11]. Las 9 clases mostradas en la Tabla 4-12 fueron establecidas para las simulaciones.

Tabla 4-12: Clases en las que se dividió la fase dispersa.

	Diámetro de burbuja, mm
Clase 0	13,3
Clase 1	9,6
Clase 2	7
Clase 3	5
Clase 4	3,6
Clase 5	2,6
Clase 6	1,9
Clase 7	1,4
Clase 8	1

El Modelo de Luo es el más utilizado para la clausura de los términos de nacimiento y muerte por coalescencia de las burbujas; para la ruptura los más usados son los modelos de Luo y Lehr [68]. El modelo de Luo se basa en la teoría de turbulencia isotrópica y no contiene parámetros ajustables, por lo que ha sido ampliamente validado [69]. Por lo anterior, en esta tesis se selecciona el modelo de Luo para la clausura del balance de población.

Las condiciones fronteras introducidas asumen que todas las burbujas salen del distribuidor con un diámetro uniforme de 5 mm (clase 3). Los demás modelos utilizados en las simulaciones con balances de población son los mismos que se implementaron en el Modelo computacional 1 para el caso de tamaño de burbuja fijo; éstos se muestran en la Tabla 4-6.

4.5.3 Resultados cuantitativos de predicción de campos de flujo con el Modelo computacional 8

Similar al procedimiento implementado para las simulaciones con tamaño único de burbuja, la adquisición de datos promediados en el tiempo se inició a partir del alcance de la operación cuasiperiódica, alrededor de los 150 segundos calculados.

El paso del tiempo utilizado fue de 0,001 s durante los primeros 40 segundos aproximadamente, posterior a esto, pudo ampliarse a 0,006 s hasta que la pluma de burbujas alcanzó las oscilaciones cuasiperiódicas, después de lo cual se utilizó un paso de tiempo de 0,01 s. El promediado en el tiempo se realizó durante 180 segundos de flujo. Los factores de relajación con los que se logró acelerar los cálculos se muestran en la Tabla 4-13.

En las Figuras 4-35 y 4-36 se observa que los resultados del modelo no mostraron mayor efecto al incluir el balance de población, solo una leve mejoría en el perfil de retención de gas. Esto debido, probablemente, a que la baja velocidad superficial del gas limita la turbulencia y la concentración de burbujas en la columna, lo que conlleva a que la distribución de tamaño de burbuja no sea muy amplia, por lo que una buena estimación del tamaño medio de burbuja arroja buenos resultados cuando se utiliza en simulaciones con tamaño único para toda la población.

Tabla 4-13: Factores de relajación utilizados en la simulación con balances de población (caudal de aire: 48 L/h).

Presión	0,4
Densidad	1
Fuerzas de cuerpo	0,3
Momentum	0,3
Fracción de volumen	0,3
Energía cinética de la turbulencia	0,6
Velocidad de disipación de la energía turbulenta	0,5
Viscosidad turbulenta	0,4
Clases del aire	0,2

Figura 4-35: Comparación de los perfiles de velocidad axial promediados obtenidos con el balance de población (PB, Modelo 8) y con tamaño de burbuja fijo (TBF, Modelo 1).

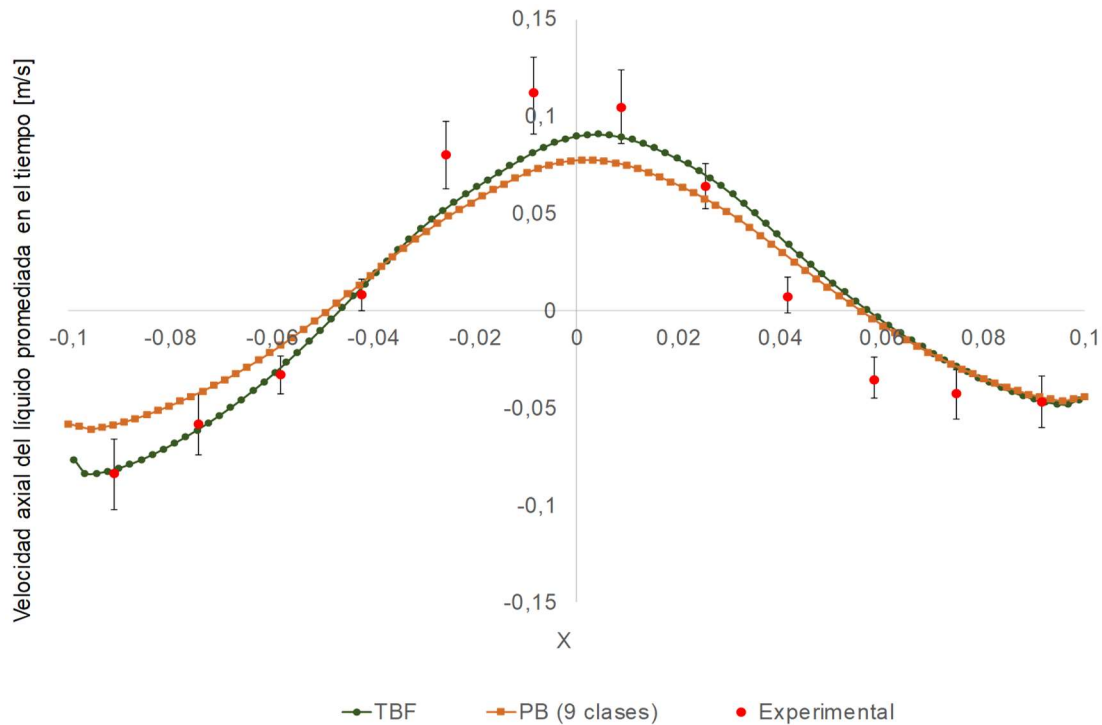
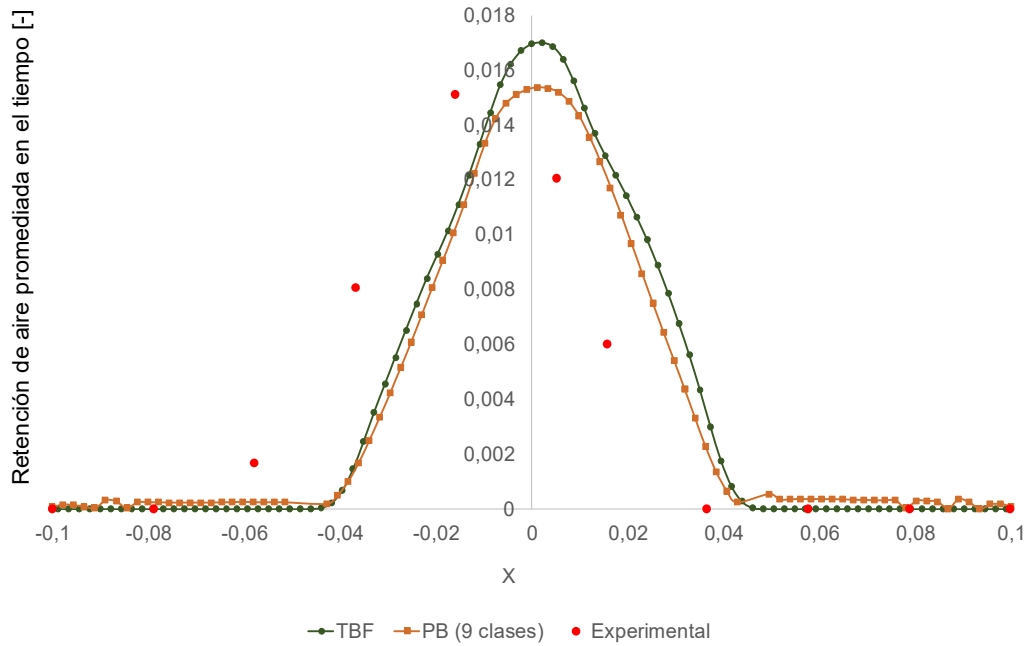


Figura 4-36: Comparación de los perfiles de retención de gas promediados obtenidos con el balance de población (PB, Modelo 8) y con tamaño de burbuja fijo (TBF, Modelo 1).



Aunque los campos de flujo predichos no se afectaron significativamente por la inclusión del balance de población, la distribución de tamaño de burbuja es importante para la determinación del área interfacial y por consiguiente la transferencia de masa y calor en la columna [35].

La Figura 4-37 muestra la distribución del diámetro “medio” de burbuja en la columna de burbujeo; puede apreciarse un incremento del diámetro a medida que estas ascienden a través de la columna. Este resultado del Modelo computacional coincide con las observaciones experimentales para este sistema [11]; la coalescencia de las burbujas es el fenómeno predominante en vez de la ruptura, debido probablemente a que la baja velocidad superficial del gas implica niveles de turbulencia limitados para proporcionar la energía requerida en la creación de área interfacial.

Mientras que en el centro la coalescencia es el fenómeno predominante debido a la mayor concentración de burbujas, hacia las paredes el tamaño de burbuja disminuye (Figura 4-38) debido a que la ruptura de las mismas cobra un poco más de importancia por la turbulencia inducida por el retroflujo del líquido y debido a la fuerza de sustentación que empuja las burbujas de menor diámetro hacia las paredes y a las burbujas más grandes hacia el centro de la columna [54].

Figura 4-37: Variación del tamaño de burbuja medio con la altura sobre una línea vertical en el centro de la columna.

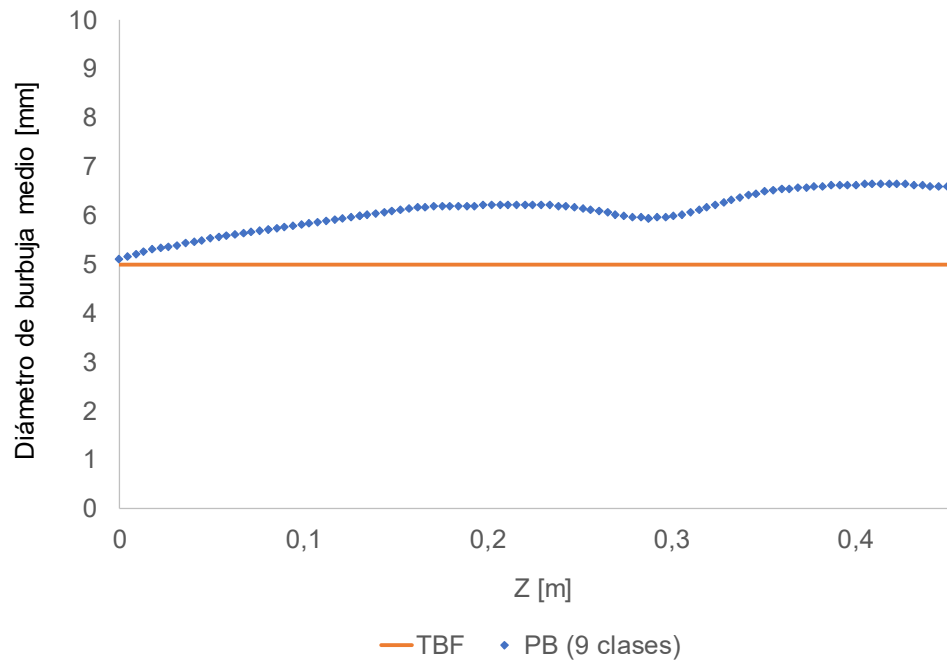
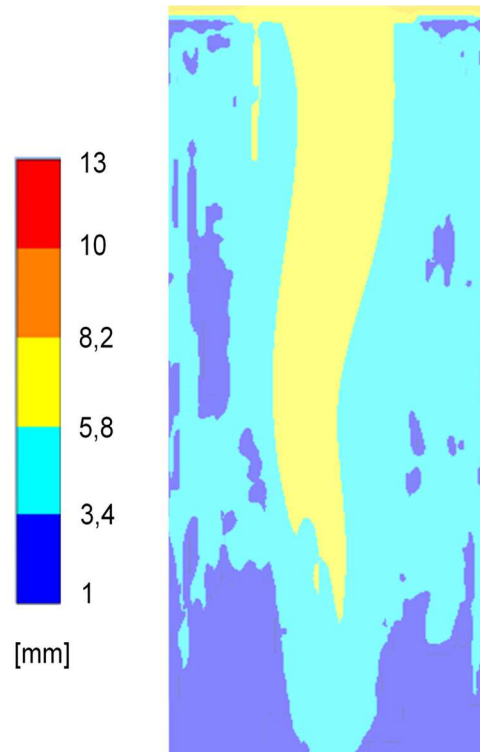


Figura 4-38: Contorno de diámetro de burbuja medio.



4.6 Modelado con tamaño de burbuja fijo. Caudal de aire de 260 L/h.

Las simulaciones con caudal de aire de 260 L/h requirieron de un tiempo de alrededor de 240 s para alcanzar el estado cuasiperiódico; lograda esta condición de operación de la columna se dio inicio al proceso de promediado en el tiempo durante otros 240 segundos. Los factores de relajación utilizados inicialmente aparecen en la columna FR1 de la Tabla 4-14; estos factores se modificaron a los reportados en la columna FR2 cuando comienza el promediado en el tiempo. El paso de tiempo inicial fue de 0,002 s, el cual se incrementó gradualmente hasta 0,005 s.

Tabla 4-14: Factores de relajación utilizados con la simulación para el caudal de aire de 260 L/h.

	FR1	FR2
Presión	0,5	0,4
Densidad	0,9	0,9
Fuerzas de cuerpo	0,5	0,4
Momentum	0,4	0,3
Fracción de volumen	0,4	0,3
Energía cinética de la turbulencia	0,8	0,7
Velocidad de disipación de la energía turbulenta	0,7	0,7
Viscosidad turbulenta	0,9	0,8

El Modelo computacional 1 (Tabla 4-6) fue empleado inicialmente para las simulaciones con el flujo de 260 L/h, atendiendo al desempeño satisfactorio que registró para los cálculos con un caudal de aire de entrada de 48 L/h. Para la condición de frontera de entrada del aire se ajustaron la velocidad de entrada y la fracción de volumen de aire al nuevo caudal; con esta condición el diámetro de burbuja determinado por la ecuación (4.1) siguió siendo de 5 mm. Tal como puede apreciarse para este caso en la Figura 4-39, los datos calculados de retención de gas predicen aceptablemente los datos experimentales, especialmente en los extremos de la columna; las predicciones en el centro son susceptibles de mejora y por lo tanto, se realizan cambios en las especificaciones de la simulación, llevando a nuevos modelos computacionales (Modelos 9 a 14).

Para mejorar el acople entre las fases, en la siguiente simulación efectuada con el Modelo computacional 9 se decidió implementar una UDF³ para cambiar el modelamiento del coeficiente de la fuerza de arrastre, utilizando una correlación empírica encontrada en la literatura [12], producto de observaciones experimentales de burbujas de aire en varios fluidos [70]:

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{(\rho_l - \rho_g) d_b g}{\rho_l u_{slip}} \quad (4.5)$$

En la Figura 4-39 se observa una desviación marcada entre los datos obtenidos con el Modelo 9 y los datos experimentales. La UDF implementada llevó a una sobreestimación del coeficiente de arrastre, lo que generó una mayor retención de gas en el seno de la fase líquida [71]. La variación en los parámetros en los Modelos computacionales utilizados en las simulaciones de esta sección se muestra en la Tabla 4-15.

Tabla 4-15: Variación de parámetros en las simulaciones realizadas con un caudal de aire de 260 L/h.

	Modelo 1	Modelo 9	Modelo 10	Modelo 11	Modelo 12	Modelo 13	Modelo 14
Clausura de la turbulencia	$k - \varepsilon$ Standard	$k - \varepsilon$ Standard	$k - \varepsilon$ RNG	$k - \varepsilon$ RNG	$k - \varepsilon$ RNG	$k - \varepsilon$ RNG	$k - \varepsilon$ RNG
Fuerza de arrastre	Schiller Naumann	UDF	UDF	UDF	UDF	Schiller Naumann	Schiller Naumann
Fuerza de sustentación	Coef. 0,2	Coef. 0,2	Coef. 0,3	Coef. 0,2	Coef. 0,25	Coef. 0,14	Coef. 0,1
Dispersión turbulenta	-	-	-	Burns <i>et al.</i>	-	-	-

La simulación con el Modelo 10 implementó el modelo de clausura RNG y aumentó a 0,3 el coeficiente de la fuerza de sustentación. Los resultados con este modelo no mostraron un comportamiento físico real, ya que la pluma presentó una forma bifurcada, atribuible a la probable sobreestimación de las fuerzas laterales (Figura 4-40). Los resultados de los

³ Una UDF o *función definida por el usuario* es un código programado en C o C++ que se carga en el solucionador de ANSYS Fluent® para modificar sus funciones estándar.

Modelos 11, donde se retomó el coeficiente de 0,2 para la fuerza de sustentación y se incluyó la fuerza de dispersión turbulenta, y 12, donde se utilizó un coeficiente de 0,25 para la fuerza de sustentación, mostraron un comportamiento similar (Figura 4-40).

Finalmente, en los Modelos 13 y 14 se retoma el modelo de Schiller Naumann para la fuerza de arrastre y se modifica el acople de las fases mediante el coeficiente de la fuerza de sustentación, el cual toma los valores de 0,14 y 0,1 respectivamente. Como se observa en la Figura 4-39, las predicciones de los cálculos mejoraron ligeramente en la región central de la columna. Los modelos mostrados en la Figura 4-39 fueron capaces de predecir la oscilación de la pluma, lo cual es consistente con el mapa de regímenes de flujo reportado en [41].

Figura 4-39: Comparación de los perfiles de retención de gas calculados con los Modelos computacionales 1, 9, 13 y 14 y los datos experimentales (caudal de aire: 260 L/h).

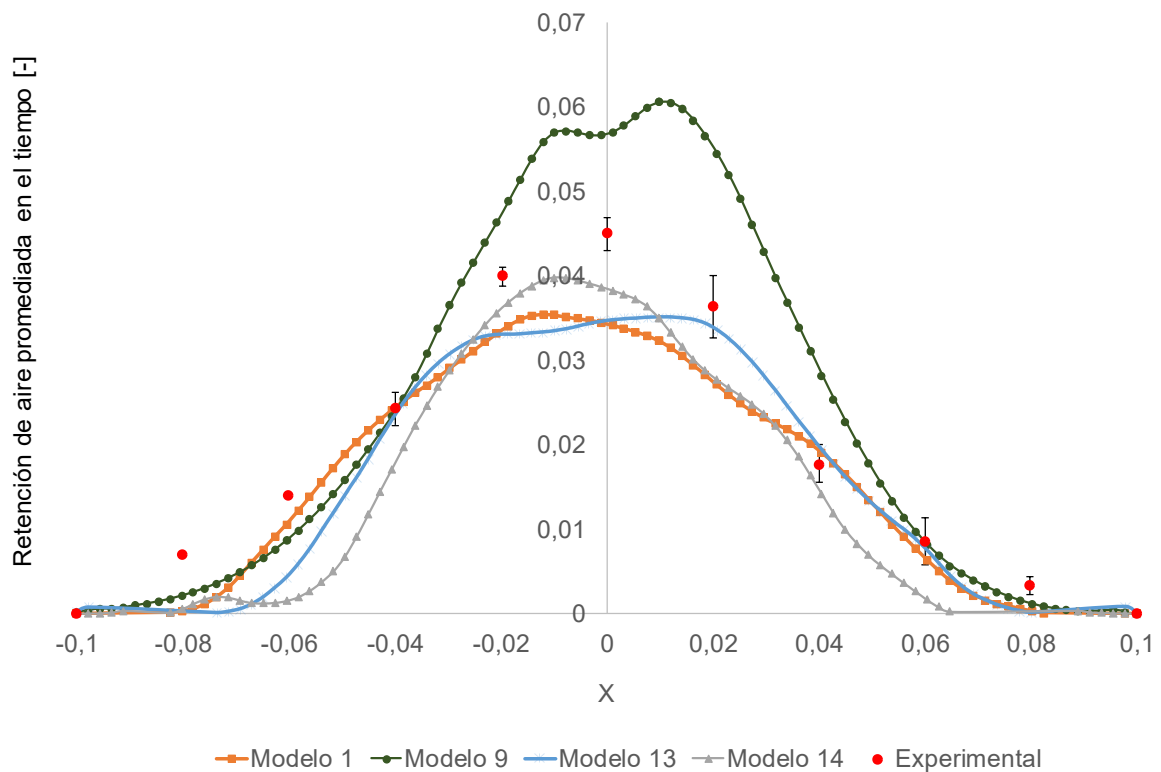
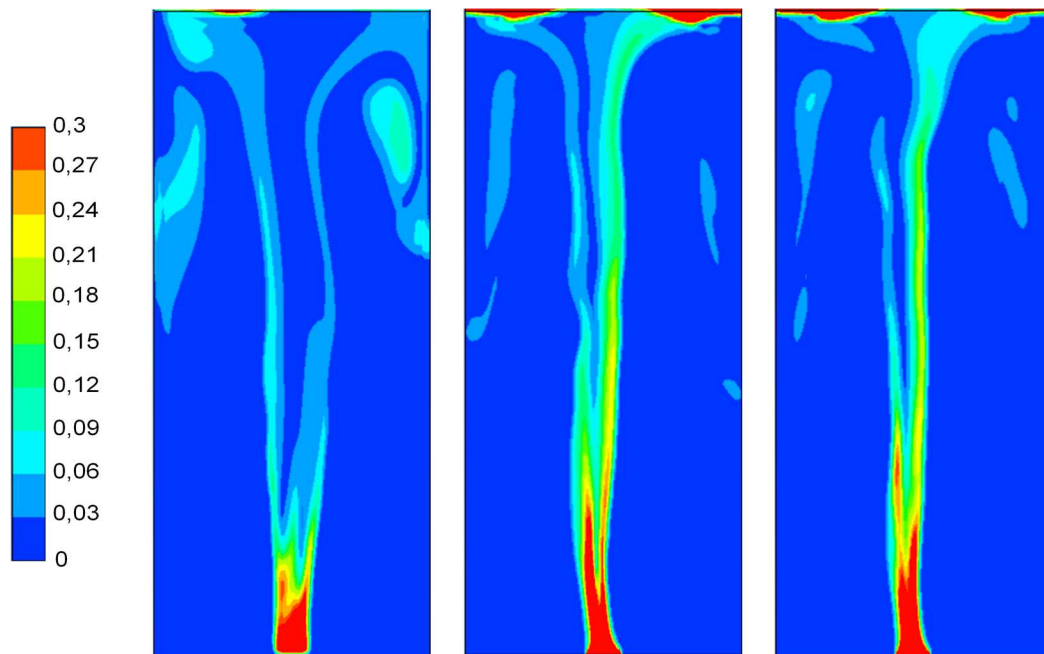


Figura 4-40: Contornos instantáneos de retención de gas obtenidos con los Modelos 10 (izq.), 11 (centro) y 12 (der.) para el caudal de 260 L/h.



Debido al tiempo extenso de computo requerido para la realización de las simulaciones (alrededor de 40 días), no se continuaron efectuando ensayos para mejorar el modelo. Se recomienda para futuras investigaciones modificar el Modelo 14 utilizando el modelo de clausura de la turbulencia $k - \varepsilon$ Standard ya que, por los resultados arrojados en esta sección los datos de retención de gas en los extremos de la columna ajustan mejor con este modelo; también se recomienda realizar ensayos utilizando el modelo de esfuerzos de Reynolds.

4.7 Modelado con tamaño de burbuja fijo. Caudal de aire de 600 L/h.

El modelo computacional 15, descrito en la Tabla 4-16, se empleó inicialmente para las simulaciones con este flujo alto; la introducción de RNG ponderó su capacidad de brindar descripciones más confiables que la de otros modelos de la familia $k - \varepsilon$ (Standard y Realizable) a problemas con mayor nivel de turbulencia, tal como pudo registrarse en los resultados obtenidos en la sección 4.4.6. Los métodos de discretización y de solución utilizados fueron los mismos citados en la sección 4.4.1.

La condición de frontera de entrada del aire no siguió la recomendación establecida en [14], debido a que el caudal alto del gas llevaba a una fracción de volumen del aire superior a 1; por lo tanto, se utilizó una velocidad para el aire que garantizó el caudal especificado en la simulación (600 L/h). La fracción de volumen del gas se determinó con la relación de áreas entre los orificios del distribuidor original y el área del distribuidor representado en la geometría. Finalmente, el modelo de turbulencia multifásico utilizado fue Por Fase en consistencia con la retención alta de aire en la columna causada por su caudal alto, en comparación con la observada con el flujo de 48 L/h.

Tabla 4-16: Modelo computacional 15. Parámetros empleados para la simulación inicial de la columna con un caudal de aire de 600 L/h.

Modelo de clausura de la turbulencia	$k - \varepsilon$ RNG
Modelo de pared	Menter Lechner
Modelo de flujo multifásico	E-E
Diámetro de burbuja	5 mm
Fuerza de arrastre	Modelo de Schiller Naumann
Fuerza de sustentación	Coef. 0,2 (modelo de Tomiyama)
Fuerza de masa virtual	Coef. 0,5
Tensión superficial	0,071 N/m
Interacción turbulenta	Simonin <i>et al.</i> Coef. 1
Modelo de turbulencia de flujo multifásico	Por Fase
Condición de frontera de la turbulencia (entrada de agua y aire)	Intensidad de la turbulencia 5% Escala de la turbulencia 0,02 m
Condición de frontera (entrada de aire)	Velocidad 41,3 m/s Fracción de volumen: 0,014
Condición de frontera (salida de aire)	Salida presión
Condición de frontera (paredes)	No deslizamiento
Formulación	Implícita

Durante la simulación con el Modelo 15 el contenido de agua en la columna disminuyó considerablemente, llevando a la introducción de cambios para el acople de las fuerzas interfaciales en el siguiente ensayo numérico; estos cambios están consignados en el

Modelo computacional 16 (Tabla 4-17), que empleó el modelo de Grace para calcular el coeficiente de arrastre ya que se recomienda para flujos gas-líquido en los que las entidades de la fase discreta pueden presentar geometrías diversas como esféricas, elípticas o de campana [22]. Para la fuerza de sustentación se conservó el modelo de Tomiyama con un coeficiente variable, en respuesta a la probabilidad de encontrar una mayor distribución de tamaño de burbuja producida por el aumento del caudal de aire.

El modelo de Sato se empleó para la fuerza de interacción turbulenta y el modelo de Burns *et al.* para la inclusión de la fuerza de dispersión turbulenta; la fuerza de lubricación de pared se modeló con el modelo de Antal *et al.* de acuerdo con recomendaciones encontradas en la literatura [57], en donde se trabajó con una velocidad superficial del aire similar a la de la columna modelada en esta parte de la tesis. Pese a los cambios introducidos, la simulación con el Modelo 16 también mostró una disminución en el contenido de agua en la columna.

Tabla 4-17. Variación de parámetros en las simulaciones realizadas con un caudal de aire de 600 L/h.

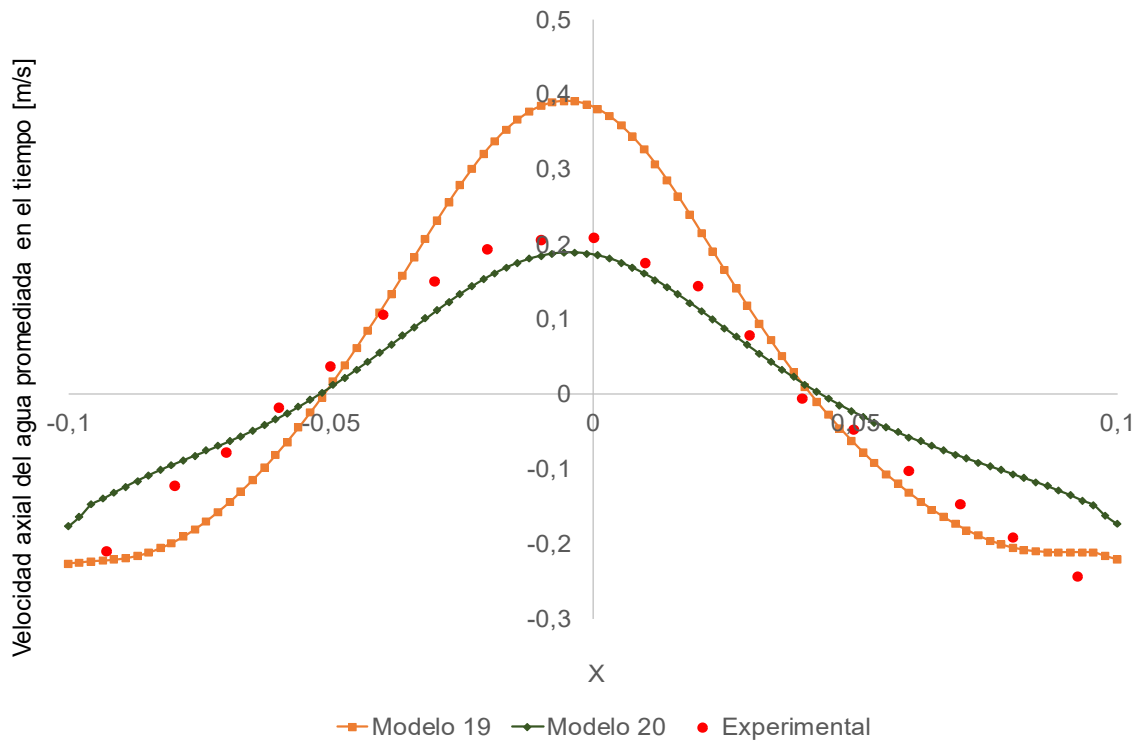
	Modelo 15	Modelo 16	Modelo 17	Modelo 18	Modelo 19	Modelo 20
Fuerza de arrastre	Schiller Naumann	Grace	Grace	UDF	UDF	UDF
Fuerza de sustentación	Coef. 0,2	Tomiyama	Tomiyama	Tomiyama	Coef. 0,2	Coef. 0,2
Interacción turbulenta	Simonin <i>et al.</i>	Sato	Sato	Sato	Simonin <i>et al.</i>	Simonin <i>et al.</i>
Dispersión turbulenta	-	Burns <i>et al.</i>	Burns <i>et al.</i>	Burns <i>et al.</i>	-	Burns <i>et al.</i>
Fuerza de lubricación de pared	-	Antal <i>et al.</i>	Antal <i>et al.</i>	Antal <i>et al.</i>	-	-
Altura de la columna	67,5 cm	67,5 cm	1 m	67,5 cm	67,5 cm	67,5 cm

El arrastre del agua predicho por las simulaciones con los Modelos 15 y 16 promovió un nuevo ensayo considerando la modificación de la altura de la columna simulada a 1 m (Modelo computacional 17) que no ofreció solución alguna al problema de vaciado del líquido. El Modelo computacional 18 fue formulado con base en la UDF utilizada en la sección 4.6 para el cálculo del coeficiente de arrastre y los parámetros restantes del

Modelo 16; la convergencia en este caso fue particularmente difícil y alrededor de los 7 segundos de flujo el residual de la ecuación de continuidad se desbordó.

La UDF para el cálculo del coeficiente de arrastre junto con los parámetros restantes del Modelo 15 se emplearon en el Modelo 19; en este caso, las predicciones presentan desviaciones considerables de los datos experimentales en el centro de la columna, tal como se muestra en la Figura 4-41. Con base en la tendencia registrada por el Modelo 19, se consideró la integración en el Modelo 20 de la fuerza de dispersión turbulenta para “aplanar” el perfil de velocidad; esta modificación llevó a una predicción satisfactoria, teniendo en cuenta el caudal de aire manejado (Figura 4-41). Las mayores desviaciones se obtuvieron en los extremos, debido, probablemente, a que la suposición de turbulencia isotrópica, propia de la familia $k - \varepsilon$, pierde significancia por el aumento de la turbulencia.

Figura 4-41: Perfiles de velocidad axial promedio obtenidos con los Modelos computacionales 19 y 20 para una línea horizontal ubicada a 39 cm del distribuidor.



En los extremos de la columna el Modelo 19 presentó mejor ajuste con los datos experimentales que el Modelo 20; esta diferencia puede explicarse a través de la presencia de la fuerza de dispersión turbulenta en 20, que cuantifica el aporte de vórtices más

grandes que el tamaño de burbuja en la dispersión de las mismas [11], ya que pierde relevancia en los extremos de la columna en donde se presenta retroflujo del líquido. Por lo tanto, es probable que el modelo mejore su ajuste en los extremos si se incluye la fuerza de lubricación de pared, la cual tiende a empujar la fase dispersa lejos de las paredes.

Teniendo en cuenta que las simulaciones con el caudal de aire de 600 L/h tuvieron una duración de alrededor de 50 días de cálculo y que con el Modelo 20 se encontró un ajuste aceptable, se decidió no seguir realizando ensayos numéricos; sin embargo, para mejorar el ajuste del Modelo computacional se sugiere en futuras investigaciones realizar pruebas utilizando otros modelos de turbulencia, como el de esfuerzos de Reynolds, y de acople de fases. Los factores de relajación utilizados en el Modelo 20 se muestran en la Tabla 4-18.

Tabla 4-18: Factores de relajación utilizados en las simulaciones con el Modelo computacional 20 (caudal de aire: 600 L/h).

Presión	0,5
Densidad	0,8
Fuerzas de cuerpo	0,5
Momentum	0,2
Fracción de volumen	0,4
Energía cinética de la turbulencia	0,7
Velocidad de disipación de la energía turbulenta	0,7
Viscosidad turbulenta	0,8

En la literatura no se encontraron resultados publicados de modelos computacionales para este sistema con este caudal de entrada de aire. Respecto al perfil de retención de gas, tampoco se encontraron datos experimentales para realizar la validación de las predicciones con esta variable.

Respecto a la dinámica de flujo, el modelo computacional generado para este caudal de aire predijo la ausencia de oscilaciones de la pluma, tal como lo reportan las observaciones experimentales de [41].

5. Especificación de parámetros para el modelamiento computacional del sistema seleccionado

La ausencia de consenso registrada en la literatura acerca de la formulación apropiada de los modelos computacionales para cuantificar satisfactoriamente los campos de flujo multifásico gas-líquido y predecir los regímenes de flujo observados experimentalmente es uno de los problemas relevantes observados en la aplicación de CFD a las columnas de burbujeo [4]. Este aspecto se constituyó en la motivación principal de la presente investigación, en la que se realizaron múltiples ensayos numéricos con el fin de investigar la capacidad predictiva de campos de flujo en una columna de burbujeo rectangular por parte de modelos computacionales propuestos en estas tesis; tres caudales de gas fueron considerados en las evaluaciones con el fin de abarcar diferentes regímenes de flujo presentes en la columna objeto de estudio: 48, 260 y 600 L/h. En la Tabla 5-1 se muestran los números de Reynolds superficiales característicos de la operación de la columna modelada.

Tabla 5-1: Números de Reynolds superficiales característicos de las condiciones de operación de la columna en esta tesis.

Caudal de gas	Velocidad superficial, m/s	Reynolds superficial
48 L/h	0,14	7,2
260 L/h	0,73	38,8
600 L/h	1,7	89,4

Esta sección se enfocó en la identificación de patrones en los modelos computacionales investigados con el fin de formular propuestas generales para las especificaciones de una simulación que lleve exitosamente a predicciones confiables de los campos de flujo en la columna modelada. La selección de los modelos para el reconocimiento de patrones se

efectuó con base en la calidad de las predicciones ofrecidas por estos, la cual fue medida a través del ajuste de los datos calculados y los datos experimentales.

Durante el desarrollo de la tesis la construcción de nuevos modelos se efectuó con base en la modificación de aquellos evaluados previamente mediante ensayos numéricos; un modelo computacional para esta tesis contiene los elementos descritos en las tablas que se encuentran a lo largo de la sección cuatro del documento, e. g. las Tablas 4-3 y 4-6 de los Modelos computacionales 0 y 1, respectivamente. El Modelo 0 constituyó el punto de partida de todo el proceso y fue estructurado con base en la revisión bibliográfica y en ensayos numéricos preliminares muy simplificados; con este modelo y un análisis de sensibilidad efectuado a través de simulaciones breves con las variaciones descritas en la Tabla 4-5 se reconocieron los factores determinantes en la predicción de campos de flujo, generando el Modelo 1 el cual permitió obtener una predicción satisfactoria de los datos experimentales.

El salto entre el Modelo 0 y 1 permitió reconocer la inclusión de la fuerza de sustentación como uno de los patrones más importantes en la simulación exitosa de los campos de flujo en la columna. La inclusión de las fuerzas interfaciales diferentes a la de arrastre, especialmente la de sustentación, ha sido objeto de debate intenso sobre los beneficios que acarrearán en las predicciones, especialmente por el peso que la incorporación de estos términos introduce en los cálculos. La validación entre los Modelos 1 y 4 permitió, adicionalmente, ponderar el aporte positivo de otras fuerzas interfaciales como la de masa virtual, aunque no revisten el efecto dominante en el flujo del gas que sí despliega la de sustentación tal como puede apreciarse de las tendencias observadas en los Modelos 3 y 4.

Además del beneficio introducido en las predicciones por la inclusión de las fuerzas interfaciales sustentación y masa virtual, los resultados permitieron identificar otras tendencias positivas en la realización de las simulaciones. Estas se describen a continuación.

5.1 Geometría y Mallado

La evaluación de la independencia del tamaño de malla acudió a simulaciones desarrolladas con el Modelo computacional 1 y cuatro niveles de discretización espacial

del arreglo. Los resultados de estas simulaciones permitieron establecer las siguientes tendencias sobre la creación de la geometría y la construcción del mallado que conllevan a cálculos numéricos representativos:

- La descripción del comportamiento dinámico de los patrones de flujo demanda de un modelamiento 3-D de la columna de burbujeo. Simulaciones 2-D pueden presentar tendencias a la sobrepredicción de la turbulencia con pérdida de información sobre estructuras fluctuantes características del flujo [39].
- La selección de un factor de seguridad de la zona seca de la columna de 1,5 veces la altura final estimada del sistema agua-aire. Pese a que esta magnitud es diferente al factor de seguridad típico de 2 recomendado en la literatura [44], ofrece resultados confiables de los modelos computacionales garantizando racionalidad en los tiempos de procesamiento numérico.
- La representación del distribuidor como una placa rectangular facilita el desarrollo del mallado y la convergencia del proceso de solución de las ecuaciones ya que facilita la generación de los elementos y el acople de esta zona al dominio de solución.
- La satisfacción de los criterios de calidad del mallado (deformación (skewness) inferior a 0,8 [44] y ortogonalidad y calidad de los elementos superior a 0,01 y 0 respectivamente [45]) es un factor determinante en la convergencia exitosa de los cálculos.
- La evaluación del mallado debe incluir la difusión numérica en las fronteras, además de la prueba de independencia de malla. Esta prueba consiste en verificar cualitativamente si el mallado conlleva a una predicción adecuada del patrón de recirculación local en la parte superior de la columna; allí el campo vectorial de velocidad del líquido debe mostrar el vórtice y el retroflujo característicos de esta zona.

En la presente investigación, las mallas que registraron deficiencias en la prueba de difusión numérica presentaron periodos de oscilación de la pluma inferiores a la malla exitosa en este aspecto; los periodos calculados con estas mallas gruesas fueron similares a los reportados en algunas investigaciones numéricas anteriores. Sin embargo, la malla que pasó la prueba de difusión numérica predijo resultados experimentales reportados posteriormente por [41]. La tendencia registrada por el periodo de oscilación en función del nivel de discretización es un tema abierto.

- La producción de resultados consistentes con la realidad física del fenómeno modelado lleva a establecer que el tamaño mínimo de los elementos de la malla sea mayor al tamaño de las entidades dispersas; tal como se mencionó anteriormente este es un tema de debate en la literatura.

5.2 Esquemas de discretización y métodos de solución

Los métodos de discretización y el algoritmo de solución resumidos en la Tabla 5-2, fueron establecidos con base en la efectividad ofrecida por estos en la calidad de los resultados de los ensayos numéricos realizados en la presente investigación. El uso de estos esquemas en los modelos computacionales generados para el sistema evaluado, permite la solución de las ecuaciones gobernantes de flujo introduciendo errores numéricos aceptables.

Tabla 5-2: Esquemas de discretización y algoritmo de solución de ecuaciones gobernantes seleccionados para la realización efectiva de las simulaciones.

Algoritmo de solución	PC SIMPLE
Formulación de velocidad	Absoluta
Formulación de fracción de volumen	Implícita
Discretización Presión	PRESTO!
Discretización gradiente de las propiedades escalares	Least Squares Cell Based
Discretización de otras propiedades	QUICK
Discretización de derivadas temporales	Implícito de primer orden

5.3 Factores de Relajación y paso de tiempo

Los cambios en los parámetros de la simulación, los modelos de clausura de la turbulencia y de las fuerzas interfaciales y la aproximación al modelamiento de la turbulencia en el sistema multifásico llevan al ajuste de los factores de relajación y del paso del tiempo con el fin de alcanzar la convergencia en un número de iteraciones razonable. La modificación de los factores de relajación dentro de los intervalos descritos en la Tabla 5-3 permite conseguir la convergencia del cálculo numérico en un número máximo de 10 iteraciones para modelos computacionales que involucran un tamaño de burbuja fijo en la columna descrita en la sección 2.1.

Tabla 5-3: Rango de factores de relajación que aceleraron la convergencia en las simulaciones.

Presión	0,3-0,5
Densidad	0,8-1
Fuerzas de cuerpo	0,3-0,5
Momentum	0,2-0,4
Fracción de volumen	0,3-0,4
Energía cinética de la turbulencia	0,7-0,8
Velocidad de disipación de la energía turbulenta	0,7
Viscosidad turbulenta	0,8-0,9

Las simulaciones realizadas en esta investigación arrojaron un número de Courant apropiado ligeramente mayor a 0,5 para el periodo transitorio inicial, el paso de tiempo se puede incrementar pasada esta etapa.

5.4 Modelos de flujo

Los ensayos numéricos realizados muestran que el uso de los modelos físicos de flujo indicados en la Tabla 5-4 en conjunto con los demás factores mencionados en este capítulo garantizan predicciones aceptables para los diferentes caudales de gas simulados.

El tamaño de burbuja empleado en las simulaciones puede asumirse fijo o presentar una distribución; en este último caso deben incluirse los balances de población para efectuar el seguimiento del cambio de la distribución. La incorporación de los balances de población acarrea costos computacionales elevados con una ganancia muy marginal de calidad en la predicción para las condiciones de flujo empleadas en esta tesis y caracterizados por una velocidad superficial del gas de 0,14 cm/s y un número de Reynolds superficial (estimado con base en la velocidad superficial, la geometría de la columna y las propiedades del gas) de 7,2; por lo tanto, con los resultados de esta investigación puede establecerse que la presencia de fenómenos de coalescencia y de ruptura de las burbujas no presentan un papel preponderante para flujos de gas caracterizados con un Reynolds de superficie inferior o igual al calculado previamente; esto lleva a considerar simulaciones confiables con base en un tamaño único de burbuja calculado a través de correlaciones empíricas.

Tabla 5-4: Modelos de flujo que predijeron resultados aceptables para la columna de burbujeo operando en los tres caudales de gas modelados.

Modelo de clausura de la turbulencia	$k - \varepsilon$ RNG
Modelo de pared	Menter Lechner
Modelo de flujo multifásico	E-E
Diámetro de burbuja	Correlación de Vogelphohl-Gaddis
Fuerza de masa virtual	Coef. 0,5
Tensión superficial	Constante
Interacción turbulenta	Simonin <i>et al.</i> Coef 1
Modelo de turbulencia de flujo multifásico	Por Fase
Condición de frontera de la turbulencia (entrada de agua)	Intensidad de la turbulencia y escala de la turbulencia
Condición de frontera (salida de aire)	Salida presión
Condición de frontera (paredes)	No deslizamiento

A diferencia de los modelos de flujo indicados en la Tabla 5-4, para los coeficientes de arrastre y de elevación, la condición de frontera de entrada de gas y la fuerza de dispersión turbulenta no fue posible encontrar una expresión que describa adecuadamente su comportamiento físico en todo el rango de caudales del gas estudiados, por lo que deben usarse diferentes modelos como los especificados en la Tabla 5-5, donde Re es el número de Reynolds relativo, Re_{sup} es el número de Reynolds superficial, $\mu_{T,l}$ es la viscosidad turbulenta de la fase continua, $E_{O'}$ es el número de Eötvös modificado, F_D es la fuerza de arrastre, estos parámetros se encuentran definidos en [29]. C_{TD} es el coeficiente de dispersión turbulenta, generalmente se utiliza el valor de 1 y para σ_{td} por lo general se utiliza el valor de 0,9.

Tabla 5-5: Modelos de flujo que debieron cambiarse debido al incremento del caudal de gas.

<p>Coefficiente de arrastre</p>	$C_D = \begin{cases} \left(\begin{matrix} (24(1 + 0,15 Re^{0,687})/Re & \text{para } Re \leq 1000 \\ 0,44 & \text{para } Re \leq 1000 \end{matrix} \right) & \text{para } Re_{sup} < 38,8 \\ \frac{4}{3} \frac{(\rho_l - \rho_g) d_b g}{\rho_l u_{slip}} & \text{para } Re_{sup} = 89,4 \end{cases}$
<p>Coefficiente de sustentación</p>	$C_L = \begin{cases} \left(\begin{matrix} \min[0,288 \tanh(0,121 Re), f(E_{O'})] & \text{para } E_{O'} \leq 4 \\ f(E_{O'}) & \text{para } 4 < E_{O'} \leq 10 \\ -0,27 & \text{para } 10 < E_{O'} \end{matrix} \right) & \text{para } Re_{sup} < 38,8 \\ 0,1 & \text{para } Re_{sup} = 89,4 \end{cases}$ <p>Donde</p> $f(E_{O'}) = 0,00105 E_{O'}^3 - 0,0159 E_{O'}^2 - 0,0204 E_{O'} + 0,474$
<p>Cond. frontera (entrada de aire)</p>	<p>Definida según [14] para $Re_{sup} < 38,8$ Definida según [12] para $Re_{sup} = 89,4$</p>
<p>Fuerza de dispersión turbulenta</p>	$F_{td} = \begin{cases} 0 & \text{para } Re_{sup} < 38,8 \\ C_{TD} F_D \frac{\mu_{T,l}}{\rho_g \sigma_{td}} \left(\frac{\nabla \alpha_g}{\alpha_g} - \frac{\nabla \alpha_l}{\alpha_l} \right) & \text{para } Re_{sup} = 89,4 \end{cases}$

El coeficiente de la fuerza de arrastre estimado con base en el modelo de Schiller-Naumann funciona apropiadamente en las simulaciones de 48 y 260 L/h; sin embargo, para el caudal de 600 L/h, se requiere de una ecuación empírica (Ec. 4.5) para evitar la disminución del nivel del líquido en la columna. Este patrón puede correlacionarse adecuadamente a través del Reynolds superficial como se muestra en Tabla 5-5.

La determinación de un coeficiente de la fuerza de sustentación adecuado demanda de un procedimiento iterativo, en el que la estimación inicial es proporcionada por el modelo de Tomiyama; el aumento del coeficiente lleva a una tendencia en el perfil de los campos de flujo caracterizada por su aplanamiento.

Adicionalmente, para caudales de gas menores a 260 L/h la condición de frontera de entrada del aire puede definirse utilizando la velocidad de ascenso de la burbuja y la fracción de gas que garantiza el caudal volumétrico calculadas según [14], ya que el gas abandona el distribuidor en forma de burbujas que se elevan con una velocidad diferente a la velocidad superficial del gas. En caso contrario, para alta velocidad superficial del gas (caso 600 L/h) se debe utilizar la velocidad que garantiza el caudal volumétrico y la fracción

de volumen que relaciona las áreas entre los orificios del distribuidor original y el área del distribuidor representado en la geometría.

Finalmente, las simulaciones con un flujo de gas de 600 L/h muestran que es necesario incluir la fuerza de dispersión turbulenta en las ecuaciones gobernantes del flujo con el fin de mejorar la calidad de las predicciones (ver Tabla 5-5). El mayor caudal de gas incrementa el nivel de turbulencia, otorgándole relevancia al transporte de burbujas por remolinos más grandes que el tamaño de burbuja. Los ensayos numéricos realizados mostraron que el modelo de Burns *et al.* presenta un ajuste aceptable en la simulación de este fenómeno en el sistema modelado.

6. Conclusiones y recomendaciones

6.1 Conclusiones

La presente investigación desarrolló Modelos computacionales de CDF confiables para la simulación de campos de velocidad y de retención del gas en columnas de burbujeo rectangular operando con caudales de gas de 48, 260 y 600 L/h, que introdujeron niveles apreciablemente diferentes de turbulencia en el flujo multifásico. La confiabilidad de las predicciones de los modelos provino de la comparación de estas con resultados experimentales reportados en la literatura. Como resultado de esta investigación, se establecieron los parámetros que deben ser usados para el modelamiento de los campos de flujo del sistema seleccionado utilizando como referencia los resultados predichos de los modelos computacionales generados (ver Capítulo 5).

Evaluaciones realizadas con un arreglo de malla muy fino, llevó a la distorsión de los resultados obtenidos mediante uno de los modelos computacionales, generando predicciones inconsistentes con los datos experimentales, lo cual contrasta con algunos autores que afirman que entre más fino sea el mallado, mejor es la descripción del flujo. La malla finalmente seleccionada arrojó resultados satisfactorios obtenidos a través del método de convergencia de mallado (GCI).

La carencia de consenso en la literatura acerca de la correcta formulación del problema de flujo gas-líquido demandó la implementación modelos computacionales que incluyeron modelos diferentes para la clausura de la turbulencia, el flujo multifásico, el modelamiento de la turbulencia multifásica, las fuerzas interfaciales, etc., que permitieran evaluar su contraste y capacidad descriptiva de la dinámica del flujo en la columna. Se encontró que, a diferencia de lo reportado por muchos autores, debe incluirse la fuerza de sustentación para que los resultados adquieran consistencia física dada en función de las oscilaciones presentadas por la pluma de burbujas durante su ascenso; en el Anexo A se muestra que

las simulaciones realizadas con la aproximación del flujo multifásico Euleriana-Lagrangiana muestran el mismo patrón oscilatorio de la pluma de gas.

La adecuada descripción proporcionada por el Modelo computacional de la realidad física se observa en las predicciones numéricas de la velocidad y de la retención del gas en alturas establecidas de la columna de líquido. La inclusión de la fuerza de masa virtual para la simulación con caudal de 48 L/h mejoró levemente las predicciones obtenidas, aunque en mucha menor magnitud que la inclusión de la fuerza de sustentación. Por otro lado, el modelo de clausura de la turbulencia RNG arrojó mejores resultados que otros modelos de la familia $k - \varepsilon$ a medida que los datos calculados fueron tomados de zonas de la columna con mayor turbulencia.

Adicionar el modelo de balance de población para el caudal de 48 L/h, no mejoró las predicciones del modelo CFD, pero si aumentó considerablemente el requerimiento computacional. Lo anterior, probablemente se debe a que la distribución de tamaño de burbuja no es amplia y a que la estimación media del tamaño de burbuja utilizado para los cálculos con tamaño de burbuja fijo fue buena y esto representó de manera adecuada la distribución de tamaño de burbuja de la población.

Los resultados de las simulaciones de la columna operando con caudal de 600 L/h, arrojaron la importancia de incluir la fuerza de dispersión turbulenta a medida que los efectos turbulentos cobran más relevancia, así como el uso del modelo RNG para la clausura de la turbulencia y la necesidad de implementar un modelo de arrastre que no suponga burbujas esféricas.

6.2 Recomendaciones

La presente investigación demandó la máxima capacidad operativa de los recursos computacionales disponibles, haciendo sensible a través de los tiempos de simulación establecidos el significado de “costo computacional” en CFD. En investigaciones futuras que involucren fenómenos y modelos computacionales más complejos, se recomienda incluir equipos de cómputo más robustos con el fin de reducir los tiempos de cálculo.

Otras recomendaciones para futuras investigaciones para este mismo campo son:

-
- Estudiar la relación entre el diámetro de burbuja y el mallado en el modelamiento CFD de columnas de burbujeo.
 - Evaluar la aplicabilidad de los modelos computacionales desarrollados para diferentes relaciones de altura de llenado y diámetro de la columna.
 - Debido a la importancia que mostró la inclusión de la fuerza de sustentación en los modelos computacionales, se recomienda evaluar el efecto de los principales modelos de clausura para la fuerza de sustentación (Tomiyama, Auton, Magnaudet y Legendre) en las predicciones ofrecidas por los cálculos.
 - Realizar pruebas utilizando otros modelos de turbulencia, como el de esfuerzos de Reynolds o LES y realizar ensayos para mejorar el acople de las fases en las simulaciones con caudal de 600 L/h y 260 L/h, evaluando el impacto de estas variables en la predicción del modelo computacional.
 - Implementar un modelo de balance de población para la columna operando con caudal de 600 L/h con el fin de verificar si bajo estas condiciones la distribución de tamaño de burbuja se modifica apreciablemente y por ende conduce a mejores predicciones.
 - Efectuar un estudio de sensibilidad de la predicción de los modelos computacionales en función del número de clases para la resolución del balance de población.
 - Implementar modelos computacionales con el método de resolución del balance de población QMOM o el DQMOM y comparar los resultados predichos con los obtenidos por el método de clases empleado en esta tesis.
 - Realizar simulaciones utilizando el modelo multifásico Euleriano-Lagrangiano con el fin de evaluar la sensibilidad de las predicciones con diferentes clausuras de fuerzas interfaciales.

A. Anexo: Modelado con la aproximación Euleriana-Lagrangiana para el flujo multifásico

En la presente tesis se realizaron algunas simulaciones utilizando la aproximación Euleriana-Lagrangiana para el modelamiento del flujo multifásico. La Tabla A-1 muestra los parámetros de simulación y la Tabla A-2 muestra las magnitudes de los factores de relajación utilizados. Para el paso del tiempo, se comenzó con un valor de 0,0005 s, el cual se fue incrementando gradualmente hasta 0,004 s, debido a la mejora progresiva en el desempeño de la convergencia durante el transcurso de la simulación.

La convergencia de las simulaciones utilizando el modelo Euleriano-Lagrangiano presentó dificultades para su consecución, especialmente con la implementación de fuerzas de interacción interfacial en el modelo. De las dos simulaciones efectuadas con esta aproximación, una consideró exclusivamente la fuerza de arrastre y otra las fuerzas de arrastre y sustentación.

La obtención de los parámetros de simulación y de los factores de relajación mostrados en las Tablas A-1 y A-2 demandaron múltiples experimentos numéricos, lamentablemente, de duración aproximada de 30 días, ya que en los cálculos los residuales mostraron tendencia al desborde.

Definido el modelo computacional, se dio paso a la simulación con la aproximación Euleriana-Lagrangiana con subsecuente resultado de un alto costo computacional: estimaciones para 3 segundos de flujo, demandaban 1 día de cálculo. Actualmente en esta simulación se han resuelto 150 segundos de flujo, lo cual no representa un intervalo confiable para la adquisición de datos.

Sin embargo, con el tiempo de flujo calculado se ha podido corroborar la importancia de la fuerza de sustentación, debido a que al igual que con lo establecido con las simulaciones con la aproximación Euleriana-Euleriana, esta fuerza es la promotora del comportamiento oscilatorio de la pluma, ayudando a distribuir el gas radialmente en la columna (Figura A-1).

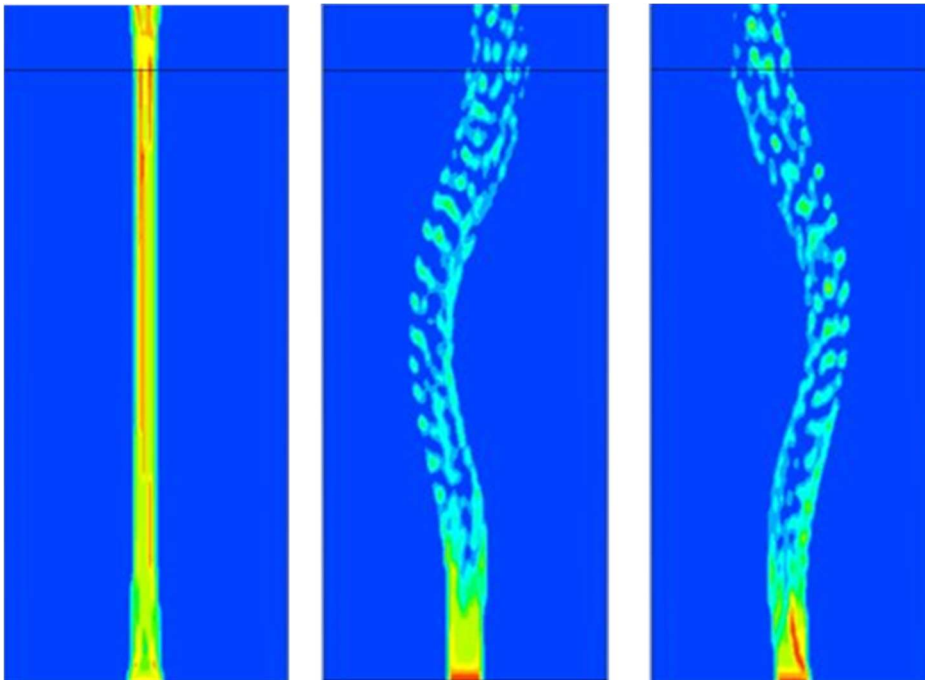
Tabla A-1: Parámetros de simulación del Modelo computacional utilizando la aproximación al flujo multifásico Euleriana-Lagrangiana (caudal de aire: 48 L/h).

Modelo de clausura de la turbulencia	$k - \varepsilon$ Standard
Modelo de pared	Menter Lechner
Modelo de turbulencia de flujo multifásico	Disperso
Modelo de flujo multifásico	E-L
Diámetro de burbuja	5 mm
Fuerzas interfaciales	Arrastre con modelo para partículas esféricas Sustentación con el modelo de Saffman
Número de iteraciones de la fase continua por iteración de la fase discreta	30
Condición de frontera (entrada de agua)	Velocidad 0 m/s Intensidad de la turbulencia 2% Diámetro hidráulico 0,016 m
Condición de frontera (entrada de gas)	Velocidad 0,23 m/s Fracción de volumen: 0,2
Condición de frontera (salida aire)	Presión atmosférica Fracción de volumen flujo reverso: 1
Paso de tiempo	0,0005 s y se subió progresivamente hasta 0,004 s. Formulación implícita

Tabla A-2: Factores de relajación establecidos para acelerar la convergencia (caudal de aire: 48 L/h).

Presión	0,8
Densidad	1
Fuerzas de cuerpo	0,5
Momentum	0,2
Fracción de volumen	0,4
Energía cinética de la turbulencia	0,6
Velocidad de disipación de la energía turbulenta	0,6
Viscosidad turbulenta	0,6
Discrete phase sources	0,6

Figura A-1: Contornos instantáneos de retención de gas obtenidos con la incorporación de diferentes fuerzas interfaciales en los Modelos computacionales: Fuerza de arrastre (izq.), Fuerzas de arrastre y sustentación (centro y der., hemicuasiperiodo de oscilación de la pluma).



Bibliografía

- [1] A. Bakker, A. H. Haidari, and E. M. Marshall, "Design reactors via CFD," *CEP*, 2001.
- [2] Z. Mazhar, *Fully Implicit, Coupled Procedures in Computational Fluid Dynamics*, vol. 115. Springer, 2016.
- [3] T. H. Pulliam and D. W. Zingg, *Fundamental Algorithms in Computational Fluid Dynamics*. Springer, 2014.
- [4] S. M. Monahan, V. S. Vitankar, and R. O. Fox, "CFD Predictions for Flow-Regime Transitions in Bubble Columns," vol. 51, no. 7, 2005.
- [5] M. Inaipil, "Análisis Fluido Dinámico de un Flujo de Burbujas Mediante CFD," Universidad de Chile, 2015.
- [6] W. Bai, *Experimental and numerical investigation of bubble column reactors*. 2010.
- [7] J. M. Van Baten and R. Krishna, "Scale up studies on partitioned bubble column reactors with the aid of CFD simulations," *Catal. Today*, vol. 79–80, pp. 219–227, 2003.
- [8] P. Gupta, "Churn-turbulent Bubble Columns - Experiments and Modeling," WASHINGTON UNIVERSITY, 2002.
- [9] N. Kantarci, F. Borak, and K. O. Ulgen, "Bubble column reactors," *Process Biochem.*, vol. 40, no. 7, pp. 2263–2283, 2005.
- [10] A. Shaikh, "Bubble and slurry bubble column reactors: mixing, flow regime transition and scaleup," Washington Univerty, 2007.
- [11] V. V. Buwa and V. V. Ranade, "Dynamics of gas – liquid flow in a rectangular bubble column: experiments and single/multi-group CFD simulations," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 57, pp. 4715–4736, 2002.
- [12] K. I. Khan, "Fluid dynamic modelling of bubble column reactors," Politecnico di Torino, 2014.
- [13] H. A. Jakobsen, H. Lindborg, and C. A. Dorao, "Modeling of bubble column reactors: Progress and limitations," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 44, no. 14, pp.

- 5107–5151, 2005.
- [14] V. V. Ranade, *COMPUTATIONAL FLOW MODELING FOR CHEMICAL REACTOR ENGINEERING*, vol. 80, no. 2. Academic Press, 2015.
- [15] S. M. Monahan, “Computational fluid dynamics analysis of air-water bubble columns,” Iowa State University, 2007.
- [16] J. Solsvik, V. T. Skjervold, L. Han, H. Luo, and H. A. Jakobsen, “A theoretical study on drop breakup modeling in turbulent flows: The inertial subrange versus the entire spectrum of isotropic turbulence,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 149, pp. 249–265, 2016.
- [17] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*. Wiley, 2001.
- [18] R. O. Fox, *Computational Models for Turbulent Reacting Flows*. Cambridge, 2003.
- [19] J. H. Ferziger and M. Peric, *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, 2002.
- [20] G. Chen, Z. Zhang, Z. Tian, L. Li, X. Dong, and H. Ju, “Design of a CFD scheme using multiple RANS models for PWR,” *Ann. Nucl. Energy*, vol. 102, pp. 349–358, 2017.
- [21] David C. Wilcox, “Turbulence Modeling for CFD.” DCW Industries, 1993.
- [22] Ansys Inc., *ANSYS Fluent User ’ s Guide*, vol. 15. Ansys Inc., 2018.
- [23] J. Piquet, “Turbulent flows: Models and physics.” Springer, 1999.
- [24] A. R. Sarhan, J. Naser, and G. Brooks, “CFD analysis of solid particles properties effect in three-phase flotation column,” *Sep. Purif. Technol.*, vol. 185, pp. 1–9, 2017.
- [25] M. Milelli, “A Numerical Analysis of Confined Turbulent Bubble Plumes,” SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH, 2002.
- [26] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*, Second Edi. PEARSON- Prentice Hall, 2007.
- [27] L. Gemello, “Modelling of the hydrodynamics of bubble columns using a two-fluid model coupled with a population balance approach,” Université de Lyon; Politecnico di Torino, 2018.
- [28] S. Wasserman, “Choosing the Right Turbulence Model for Your CFD Simulation,” *engineering.com*, 2016. .
- [29] Ansys Inc., *ANSYS Fluent Theory Guide*, no. January. 2018.
- [30] M. E. Díaz, A. Iranzo, D. Cuadra, R. Barbero, F. J. Montes, and M. A. Galán, “Numerical simulation of the gas-liquid flow in a laboratory scale bubble column.

- Influence of bubble size distribution and non-drag forces,” *Chem. Eng. J.*, vol. 139, no. 2, pp. 363–379, 2008.
- [31] P. Chen, “Modeling the Fluid Dynamics of Bubble Column Flows,” Washington University, 2004.
- [32] S. Pope, *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [33] M. E. Díaz, F. J. Montes, and M. A. Galán, “Influence of the lift force closures on the numerical simulation of bubble plumes in a rectangular bubble column,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, pp. 930–944, 2009.
- [34] G. Li, X. Yang, and G. Dai, “CFD simulation of effects of the configuration of gas distributors on gas-liquid flow and mixing in a bubble column,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, pp. 5104–5116, 2009.
- [35] A. Gupta and S. Roy, “Euler-Euler simulation of bubbly flow in a rectangular bubble column: Experimental validation with Radioactive Particle Tracking,” *Chem. Eng. J.*, vol. 225, pp. 818–836, 2013.
- [36] T. Wang, “Simulation of bubble column reactors using CFD coupled with a population balance model,” *Front. Chem. Sci. Eng.*, vol. 5, no. 2, pp. 162–172, 2011.
- [37] Y. Liao and D. Lucas, “A literature review of theoretical models for drop and bubble breakup in turbulent dispersions,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, no. 15, pp. 3389–3406, 2009.
- [38] Y. Liao and D. Lucas, “A literature review on mechanisms and models for the coalescence process of fluid particles,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 65, no. 10, pp. 2851–2864, 2010.
- [39] D. Pflieger, S. Gomes, N. Gilbert, and H. G. Wagner, “Hydrodynamic simulations of laboratory scale bubble columns fundamental studies of the Eulerian-Eulerian modelling approach,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, no. 21, pp. 5091–5099, 1999.
- [40] V. V. Buwa, D. S. Deo, and V. V. Ranade, “Eulerian – Lagrangian simulations of unsteady gas – liquid flows in bubble columns,” *Int. J. Multiph. Flow*, vol. 32, pp. 864–885, 2006.
- [41] R. K. Upadhyay, H. J. Pant, and S. Roy, “Liquid flow patterns in rectangular air-water bubble column investigated with Radioactive Particle Tracking,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 96, pp. 152–164, 2013.
- [42] V. V. Buwa and V. V. Ranade, “Characterization of gas-liquid flows in rectangular

- bubble columns using conductivity probes,” *Chem. Eng. Commun.*, vol. 192, no. 7–9, pp. 1129–1150, 2005.
- [43] R. K. Upadhyay, S. Roy, and H. J. Pant, “Benchmarking Radioactive Particle Tracking (RPT) with Laser Doppler Anemometry (LDA),” *Int. J. Chem. React. Eng.*, vol. 10, no. 1, 2012.
- [44] A. Troshko, “Best Practice for Modeling Bubble Column Reactors with FLUENT,” 2006.
- [45] I. ANSYS, *ANSYS Meshing User ’ s Guide*. 2018.
- [46] M. Pourtousi, P. Ganesan, and J. N. Sahu, “Effect of bubble diameter size on prediction of flow pattern in Euler-Euler simulation of homogeneous bubble column regime,” *Meas. J. Int. Meas. Confed.*, vol. 76, pp. 255–270, 2015.
- [47] R. Picardi, “Numerical Analysis of Multiphase Flow in Bubble Columns and Applications for Microbial Fuel Cells,” 2015.
- [48] D. Pflieger and S. Becker, “Modelling and simulation of the dynamic flow behaviour in a rectangular bubble column,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 56, pp. 1737–1747, 2001.
- [49] D. Lakehal, B. L. Smith, and M. Milelli, “Large-Eddy Simulation of Turbulent Shear Flows,” *J. Turbul.*, vol. 3, pp. 1–25, 2002.
- [50] E. Krepper, B. N. Reddy Vanga, A. Zaruba, H.-M. Prasser, and M. A. Lopez de Bertodano, “Experimental and numerical studies of void fraction distribution in rectangular bubble columns,” *Nucl. Eng. Des.*, vol. 237, no. 4, pp. 399–408, 2007.
- [51] A. F. Studley, “Numerical Modeling of Air-Water Flows in Bubble Columns and Airlift Reactors,” Virginia Polytechnic Institute and State University, 2010.
- [52] K. Bech, “Dynamic simulation of a 2D bubble column,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 60, no. 19, pp. 5294–5304, 2005.
- [53] I. B. Celik, U. Ghia, P. J. Roache, C. J. Freitas, H. Coleman, and P. E. Raad, “Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications,” *J. Fluids Eng.*, vol. 130, no. 7, p. 078001, 2008.
- [54] C. B. Vieira, G. Litrico, E. Askari, G. Lemieux, and P. Proulx, “Hydrodynamics of Bubble Columns: Turbulence and Population Balance Model,” *ChemEngineering*, pp. 1–26, 2018.
- [55] ANSYS Inc., *ANSYS FLUENT Getting Started Guide*, vol. 15317, no. Julio. ANSYS, Inc., 2018.
- [56] C. Laborde-Boutet, F. Larachi, N. Dromard, O. Delsart, and D. Schweich, “CFD simulation of bubble column flows: Investigations on turbulence models in RANS

- approach," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, pp. 4399–4413, 2009.
- [57] I. ANSYS, "Lecture 4: Gas-Liquid Flows Advanced Multiphase Course," 2014.
- [58] H. Mahgerefteh, Y. Rykov, and G. Denton, "Courant, Friedrichs and Lewy (CFL) impact on numerical convergence of highly transient flows," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, no. 23, pp. 4969–4975, 2009.
- [59] E. S. Gaddis and A. Vogelpohl, "BUBBLE FORMATION IN QUIESCENT LIQUIDS UNDER CONSTANT FLOW CONDITIONS," vol. 41, no. 1, pp. 97–105, 1986.
- [60] M. Pourtousi, J. N. Sahu, and P. Ganesan, "Effect of interfacial forces and turbulence models on predicting flow pattern inside the bubble column," *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 75, pp. 38–47, 2014.
- [61] R. Clift, J. Grace, and M. Weber, *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978.
- [62] R. Bannari, F. Kerdouss, B. Selma, A. Bannari, and P. Proulx, "Three-dimensional mathematical modeling of dispersed two-phase flow using class method of population balance in bubble columns," *Comput. Chem. Eng.*, vol. 32, pp. 3224–3237, 2008.
- [63] A. C. . Nygren, "SIMULATION OF BUBBLY FLOW IN A FLAT BUBBLE COLUMN. EVALUATION OF INTERFACE AND TURBULENCE CLOSURE MODELS," Lund University, 2012.
- [64] V. V. Ranade and R. P. Utikar, "Dynamics of gas-liquid flows in bubble column reactors," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, no. 21, pp. 5237–5243, 1999.
- [65] R. V. de P. REZENDE, "MODELO DE FECHAMENTO PARA O TENSOR DE INTERFACE NO MODELO DE DOIS FLUIDOS : MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO NUMÉRICA," Universidade Federal de Santa Catarina, 2014.
- [66] V. V. Buwa and V. V. Ranade, "Mixing in Bubble Column Reactors: Role of Unsteady Flow Structures," *Can. J. Chem. Eng.*, vol. 81, no. 3–4, pp. 402–411, 2003.
- [67] G. Hu and I. Celik, "Eulerian-Lagrangian based large-eddy simulation of a partially aerated flat bubble column," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 63, no. 1, pp. 253–271, 2008.
- [68] A. H. Syed, M. Boulet, T. Melchiori, and J.-M. Lavoie, "CFD Simulations of an Air-Water Bubble Column: Effect of Luo Coalescence Parameter and Breakup Kernels," *Front. Chem.*, vol. 5, 2017.
- [69] H. Luo and H. F. Svendsen, "Theoretical model for drop and bubble breakup in

- turbulent dispersions,” *AIChE J.*, vol. 42, no. 5, pp. 1225–1233, 1996.
- [70] V. O’Brien, “Moving bubbles, drops, and other fluid blobs,” *A P L Tech. Dig.*, pp. 2–6, 1962.
- [71] G. Yang, H. Zhang, J. Luo, and T. Wang, “Drag force of bubble swarms and numerical simulations of a bubble column with a CFD-PBM coupled model,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 192, pp. 714–724, 2018.