

## EVOLUCIÓN DE FASES GASEOSAS EN FLUJOS DE ALTA VELOCIDAD EN REACTORES QUÍMICOS INDUSTRIALES RECIRCULANTES

MATEI BADALAN, JONATHAN HERNÁNDEZ-GARCÍA,  
ALEJANDRO RODRÍGUEZ, ARTURO PALACIO  
Y ENRIQUE GUZMÁN

### 1. El problema de los flujos bifásicos rápidos en reactores químicos

Los reactores químicos constituyen una parte integral de procesos de síntesis en la industria de productos y derivados químicos, de alimentos, petroquímica, farmacéutica, de materiales para la construcción, de materiales avanzados para aplicaciones en ingeniería, agroquímica, y metalúrgica, entre otras. También son fundamentales en los laboratorios especializados en el desarrollo de biotecnología, de aplicaciones biomédicas, así como en la investigación fundamental que se lleva a cabo en diversas áreas de la ciencia y la ingeniería. Por ejemplo, la figura 1a muestra un reactor químico en un laboratorio especializado en el desarrollo de tecnología para usos del hidrógeno.

Conceptualmente, la eficiencia de los reactores químicos y bioquímicos puede incrementarse cuando el flujo transcurre por un circuito cerrado (como el que se muestra en la figura 1b). Esta novedosa configuración permite que los agentes químicos y biológicos circulen varias veces a través del dispositivo sin que ocurra separación de fases, incrementando así el tiempo de residencia que favorece la interacción entre los agentes químicos.

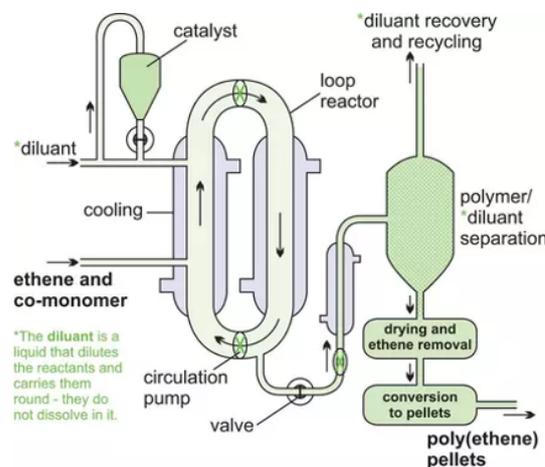


(a)

Según se desprende de la investigación bibliográfica preliminar, este caso de estudio constituye un tema fundamental de investigación con muy pocos antecedentes reportados en la literatura abierta<sup>[1-3]</sup>. La mayoría de los estudios precedentes de bio-reactores con circulación externa (“external loop”) se enfocan en los flujos de tipo bombeo penumático (“airlift”), o en flujos de baja velocidad. En muchos casos, el flujo bifásico tiene las propiedades deseadas únicamente en la parte ascendente por lo que el separador se coloca en la parte superior del reactor<sup>[4-10]</sup>. Esto contrasta con el concepto propuesto, cuyo diseño incorpora una circulación completa para favorecer el desarrollo de las propiedades deseadas en el flujo bifásico en todo el conducto. En este diseño, el proceso continúa en el tramo descendente y culmina en el separador instalado en la base del conjunto.

Cabe notar que la escasez de información relacionada con las características específicas de diseño, los intervalos operativos óptimos, los efectos hidrodinámicos (y su influencia en las propiedades de los productos), y la eficiencia general del proceso, obligan a los investigadores a desarrollar nuevas técnicas para analizar este caso. El II UNAM responde a este reto formulado un plan de investigación, en colaboración con el Instituto Francés del Petróleo y Energías Nuevas (IFP-EN), que conjuga los siguientes elementos:

- Desarrollo conceptual de un sistema análogo para efectos de estudio
- Desarrollo del estudio experimental
- Desarrollo de las simulaciones numéricas



(b)

Fig. 1 Reactores químicos. La imagen (a) muestra un reactor de investigación para baterías nucleares, almacenamiento de hidrógeno, catálisis y celdas de combustible (tomada del Canadian Nuclear Laboratories, Hydrogen Research Facility; <https://www.flickr.com/photos/cnl-inc/28688488086>). La imagen (b) ilustra los principales elementos de un reactor catalítico recirculante para la polimerización del etileno

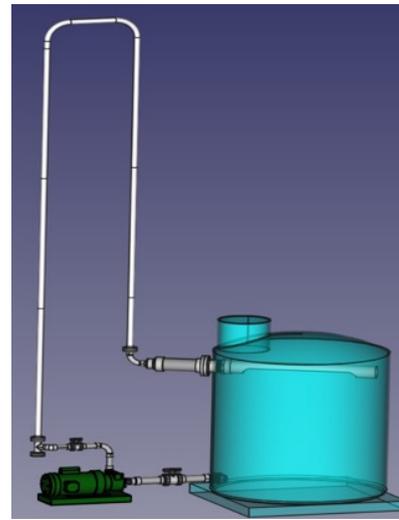
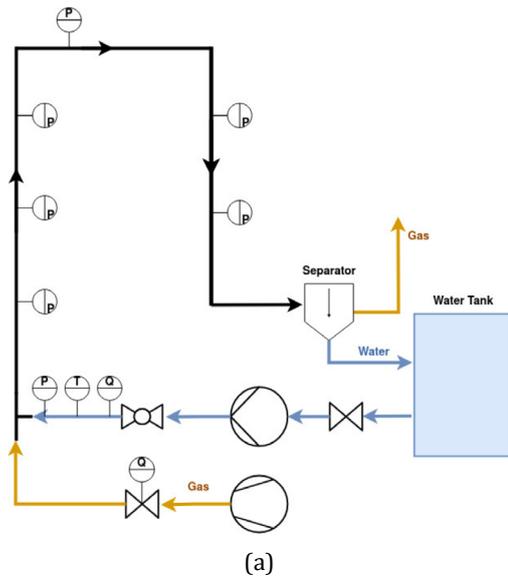


Fig. 2 Esquema del dispositivo experimental. La imagen (a) muestra la localización de la instrumentación y el modo de operación. La imagen (b) muestra la disposición física de los elementos del circuito

## 2. Programa de investigación

Con base en lo anterior, actualmente el proyecto se desarrolla a lo largo de dos vertientes principales: a) la numérica y b) la experimental (en Laboratorio de Flujos Multifásicos del Instituto de Ingeniería UNAM). La figura 2 muestra el esquema operativo (Fig. 2a) y el diseño del dispositivo experimental que integra los elementos principales de los reactores recirculantes (Fig. 2b). Se observa que el flujo transcurre a través de un tubo de diámetro constante (de 0.05 m) que configura un circuito cerrado. La fase líquida es impulsada (desde el tanque de acumulación) por una bomba centrífuga hacia el punto de inyección (I). Simultáneamente, el compresor circula una masa constante de aire a través del regulador (F), para inyectarla en la fase líquida por medio de una “esprea” especialmente diseñada (I). La mezcla de fluidos circula por la tubería de la sección de pruebas (en negro) hasta el separador (A). Tras la separación, el aire puede ser recirculado o ventilado a la atmósfera (C) y el agua retorna al tanque de almacenamiento (B). El circuito se recircula a través del punto (D) que contiene una válvula de control.

Como parte del programa experimental se tiene previsto que los experimentos se realicen con agua y aire en la etapa de calibración y durante las primeras pruebas. Seguirá una segunda etapa en la que se incorporen agua y gases de alto peso molecular (por ejemplo, hexafluoruro de azufre, SF<sub>6</sub>) para estudiar los efectos asociados al peso del gas.

La sección experimental (mostrada en negro) está totalmente instrumentada con una serie de transductores de presión colocados en puntos equidistantes predeterminados. Asimismo, se instalarán termopares en puntos de control específicos. Se hace notar que la sección de pruebas está construida, íntegramente, con tubos transparentes de acrílico de 0.05 m de diámetro, para facilitar la utilización de la técnica de Velocimetría por Seguimiento de Sombras de Partículas (PSTV por sus siglas en inglés). Los intervalos experimentales de interés se resumen a continuación en la Tabla 1.

Tabla 1. Intervalos operativos del dispositivo experimental

Parámetro	Valor mínimo	Valor máximo	Unidades
Presión absoluta	$1 \times 10^5$	$7 \times 10^5$	Pa
Velocidad superficial de líquido	1	10	m/s
Velocidad superficial de gas	1	2	m/s

Con base en los resultados de la técnica de escalamiento, el patrón de flujo dominante dentro de los intervalos operativos previstos es el flujo disperso (Fig. 3).

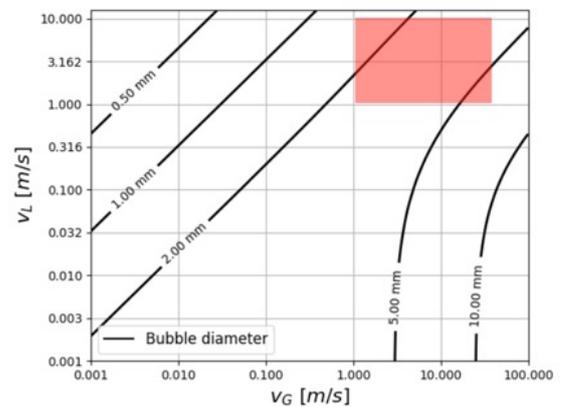


Fig. 3 Patrón de flujo dominante. Los resultados obtenidos con distintas correlaciones se muestran como regiones en color superpuestas sobre el mapa de Griffith y Wallis<sup>[15]</sup>

Por otra parte, la vía numérica del estudio también presenta múltiples retos técnicos. Algunos de ellos son centrales para determinar adecuadamente las propiedades de la fase dispersa y su interacción con la fase continua. Una limitación técnica importante es el tamaño relativo de las burbujas de gas con respecto a la malla. Cuando el tamaño de la malla es inferior al tamaño característico de las burbujas, el cálculo captura adecuadamente el número y configuración de las burbujas (Fig. 4a). En contraste, cuando el tamaño de la retícula es superior al de las burbujas, la resolución numérica es inadecuada y no es posible calcular correctamente las propiedades de la fase dispersa (Fig. 4b). Esto impide calcular: a) las características estructurales del flujo en el interior del tubo y los respectivos procesos de aglomeración, coalescencia, y fragmentación; y b) los efectos dinámicos asociados a dichos procesos, tales como fluctuaciones de las presiones, velocidades, y densidades. En una primera aproximación, se ha optado por desarrollar un modelo Euleriano-Euleriano con el objeto de evitar algunos de los problemas señalados.

### 3. Resultados preliminares

El modelo numérico considera una malla altamente regular, no obstante, cerca de las paredes de la tubería se hace un refinamiento significativo de la malla con el objeto de obtener valores aceptables de los gradientes (Fig. 5a). La figura 5b muestra los resultados del cálculo preliminar. Se puede observar que el flujo tiene comportamientos diferentes en las distintas secciones del circuito. Durante su ascenso a través del primer tramo vertical, existe un alto grado de simetría en el perfil de velocidades y en la correspondiente distribución de la fase dispersa. Por su parte, en el tramo horizontal existe una mayor concentración de la fase gaseosa en la parte superior del conducto. Finalmente, el perfil de velocidad en el tramo descendente sugiere que ambas fases fluyen concurrentemente con velocidades similares. Según las primeras estimaciones de orden de magnitud, los efectos de flotación de la fase dispersa son insignificantes comparadas con las fuerzas de arrastre en casi toda la sección de pruebas.

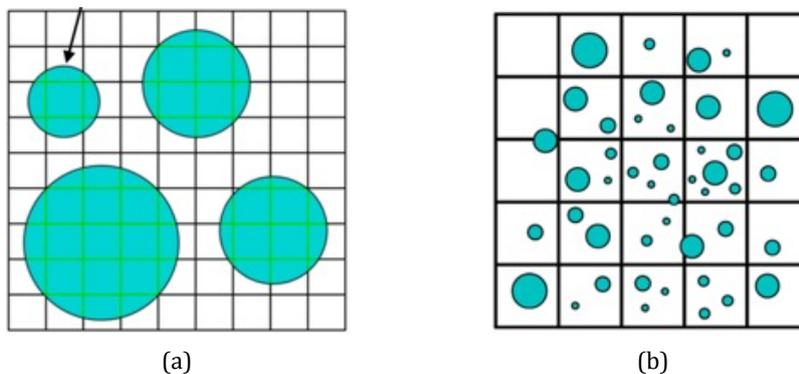


Fig. 4 Limitaciones de modelado. La malla computacional (a) captura correctamente el número y tamaño de las burbujas, mientras que la malla (b) no “registra” estas características

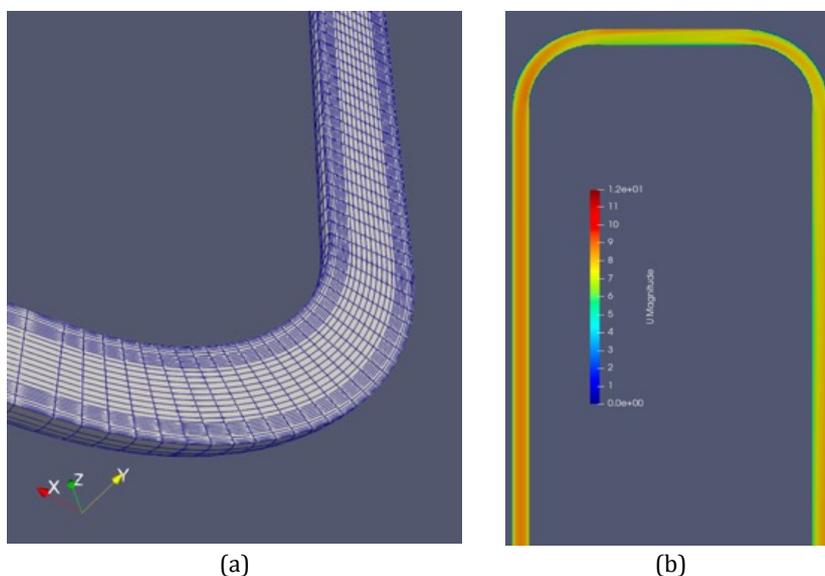


Fig. 5 Simulaciones. La imagen (a) muestra la malla en una sección del dominio. La imagen (b) muestra la magnitud de la velocidad a lo largo del circuito

La figura 6 muestra el promedio temporal de la distribución de la fracción de vacío (es decir, de la cantidad de gas que existe en la sección transversal). Se observa la comparación entre el perfil radial, calculado con el modelo recientemente publicado por el Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), y los resultados experimentales producidos por [ver referencias 11 y 12]. Claramente, en el régimen de alta velocidad el modelo no produce predicciones aceptables de las características del perfil de la distribución en diferentes localidades a lo largo del tubo ascendente.

Esta limitación ha motivado un trabajo de remodelado en el que se corrigen los efectos físicos producidos sobre la fase gaseosa en la región cercana a la pared del conducto. En particular en el modelo base se ha desarrollado sobre la base de los modelos lubricación de Antal y de fuerzas de sustentación de Tomiyama, en lugar de los respectivos modelos de Hosokawa y Hessenkemper [13,14]. El resultado es un “modelo optimizado para altas velocidades” en el que se han revisado las consideraciones sobre los procesos de arrastre, sustentación, coalescencia, y ruptura de las burbujas. También se han revisado los aspectos relativos a la deformación de las burbujas por efectos hidrodinámicos. En conjunto, las nuevas consideraciones introducen cambios en la relación de fuerzas causadas por fluctuaciones en el transporte de momento cerca de la pared y otros efectos. Esta primera etapa de modelado ha conducido a los resultados mostrados en la figura 7.

Como se puede observar, el nuevo modelo “optimizado” para altas velocidades mejora considerablemente la predicción del perfil de la fracción de vacío (Fig. 7a). El código de color para cada curva y serie experimental corresponde a tres planos de medición dispuestos consecutivamente a lo largo del tramo vertical ascendente. Los colores corresponden, respectivamente, a los planos consecutivamente localizados a 30, 66 y 110 diámetros, medidos de la base del tubo vertical.

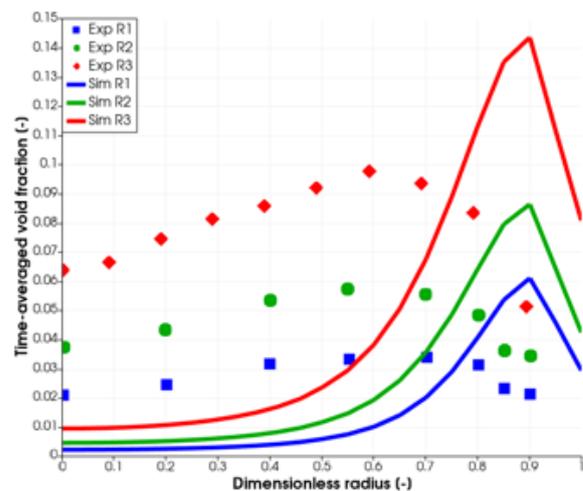
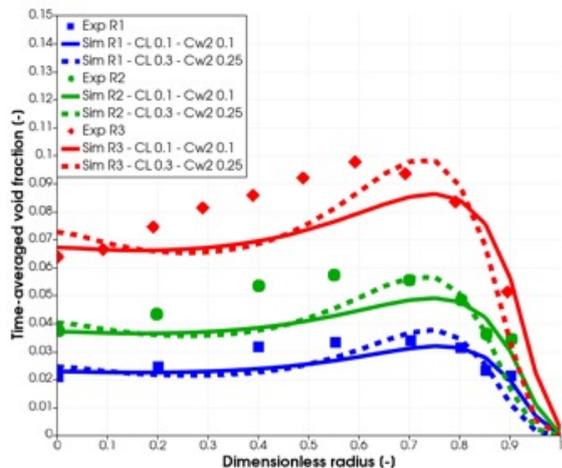


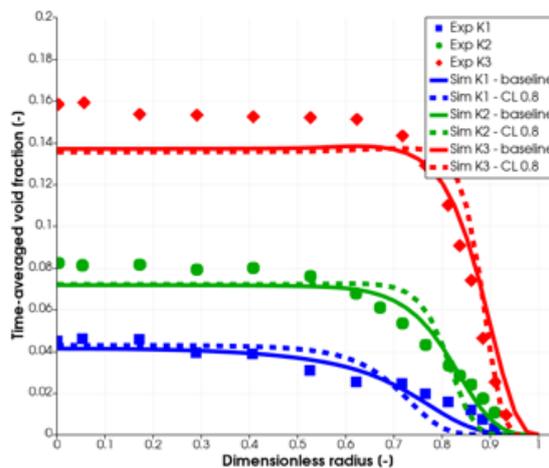
Fig. 6 Distribución de la fracción de vacío. Los datos experimentales se muestran como puntos y la predicción numérica como líneas continuas. Respectivamente, azul, verde y rojo, corresponden a las posiciones  $L/D = \{33, 66, 110\}$

#### 4. Comentarios finales

Aunque hemos descrito una investigación en curso, es posible poner a consideración del lector las siguientes observaciones: 1) Los procesos de aglomeración, ruptura, y coalescencia requieren una profunda revisión y mejoras, porque éstas dependen fuertemente del régimen hidrodinámico que prevalece en cada punto del circuito de flujo. 2) Se debe hacer especial énfasis en el desarrollo del tamaño de las burbujas y de su geometría, porque también dependen del régimen hidrodinámico. 3) Es preciso mejorar los modelos para las interacciones turbulentas y el arrastre sobre las burbujas, sobre todo en los tramos verticales.



(a)



(b)

Fig. 7 Perfiles de la fracción de vacío con el modelo optimizado. Distribución en el tramo vertical ascendente (a), y en tramo vertical descendente (b)

Cabe reconocer que no existen consenso en cuanto a la aplicabilidad de los modelos, por lo que cada caso requiere un análisis específico<sup>[16]</sup>. Varios aspectos físicos aún permanecen como problemas abiertos. En el presente caso, nos referimos principalmente a los procesos de arrastre y turbulencia que afectan considerablemente la dinámica de las burbujas en la proximidad de la pared.

A pesar de las limitaciones descritas, los resultados son alentadores. Los primeros esfuerzos de modelado que han derivado en el modelo optimizado muestran una mejora considerable con respecto al modelo base del HZDR. Próximamente, se llevará a cabo una campaña experimental propia en el Laboratorio de Flujos Multifásicos del IINGEN, en la que se producirán resultados específicos para el caso de interés. Entonces, los contrastes entre las predicciones numéricas y la información experimental indicarán, fidedignamente, aquellos aspectos físicos que requieran mayor consideración. |

## Referencias

---

- Orejas, J. A. Modelling and Simulation of a Bubble-Column Reactor with External Loop: Application to the Direct Chlorination of Ethylene. *Chem. Eng. Sci.* 1999, 54 (21), 5299–5309. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(99\)00254-7](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(99)00254-7).
- Orejas, J. A. Model Evaluation for an Industrial Process of Direct Chlorination of Ethylene in a Bubble-Column Reactor with External Recirculation Loop. *Chem. Eng. Sci.* 2001, 56 (2), 513–522. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(00\)00255-4](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(00)00255-4).
- Kress, T. S.; Keyes, J. J. Liquid Phase Controlled Mass Transfer to Bubbles in Cocurrent Turbulent Pipeline Flow. *Chem. Eng. Sci.* 1973, 28 (10), 1809–1823. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(73\)85063-8](https://doi.org/10.1016/0009-2509(73)85063-8).
- Teli, S. M.; Mathpati, C. S. Experimental and Numerical Study of Gas-Liquid Flow in a Sectionalized External-Loop Airlift Reactor. *Chin. J. Chem. Eng.* 2021, 32, 39–60. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2020.10.023>.
- Mohanty, K.; Das, D.; Biswas, M. N. Mass Transfer Characteristics of a Novel Multi-Stage External Loop Airlift Reactor. *Chem. Eng. J.* 2007, 133 (1–3), 257–264. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2007.02.007>.
- Moudoud, N.; Rihani, R.; Bentahar, F.; Legrand, J. Global Hydrodynamic of Hybrid External Loop Airlift Reactor: Experiments and CFD Modelling. *Chem. Eng. Process. - Process Intensif.* 2018, 129, 118–130. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2018.05.005>.
- Burlutskii, E.; Di Felice, R. Experimental and Numerical Study of Two-Phase Flow Mixing in Gas-Liquid External-Loop Airlift Reactor. *Int. J. Multiph. Flow* 2019, 119, 1–13. <https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2019.07.007>.
- Kojic, P.; Kojic, J.; Pezo, M.; Krulj, J.; Pezo, L.; Mirkov, N. Numerical Study of the Hydrodynamics and Mass Transfer in the External Loop Airlift Reactor. *Chem. Ind. Chem. Eng. Q.* 2022, 28 (3), 225–235. <https://doi.org/10.2298/CICEQ210522034K>.
- Petersen, L. A. H.; Villadsen, J.; Jørgensen, S. B.; Gernaey, K. V. Mixing and Mass Transfer in a Pilot Scale U-loop Bioreactor. *Biotechnol. Bioeng.* 2017, 114 (2), 344–354. <https://doi.org/10.1002/bit.26084>.
- Puiman, L.; Abrahamson, B.; Lans, R. G. J. M. V. D.; Haringa, C.; Noorman, H. J.; Picioreanu, C. Alleviating Mass Transfer Limitations in Industrial External-Loop Syngas-to-Ethanol Fermentation. *Chem. Eng. Sci.* 2022, 259, 117770. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2022.117770>.
- D. Ryan, S. Kim, Characterization of local parameters of inclined upward air-water bubbly two-phase flows in a round pipe, *Nuclear Engineering and Design* 410 (2023) 112378. doi:10.1016/j.nucengdes.2023.112378.
- D. Ryan, R. Kong, D. Kang, A. Dix, S. Kim, J. Bian, Effects of Pipe Inclination on Global Two-Phase Flow Parameters, *Nuclear Technology* Publisher: Taylor & Francis (Oct. 2023).
- S. P. Antal, R. T. Lahey, J. E. Flaherty, Analysis of phase distribution in fully developed laminar bubbly two-phase flow, *International Journal of Multiphase Flow* 17 (5) (1991) 635–652. doi:10.1016/0301-9322(91)90029-3.
- A. Tomiyama, H. Tamai, I. Zun, S. Hosokawa, Transverse migration of single bubbles in simple shear flows, *Chemical Engineering Science* (2002).
- Griffith, P.; Wallis, G. B. Two-Phase Slug Flow. *Journal of Heat Transfer* 1961, 83 (3), 307–318. <https://doi.org/10.1115/1.3682268>.
- I. Khan, M. Wang, Y. Zhang, W. Tian, G. Su, S. Qiu. Two-phase bubbly flow simulation using CFD method: A review of models for interfacial forces, *Progress in Nuclear Energy* 125 (2020) 103360. doi:10.1016/j.pnucene.2020.103360.