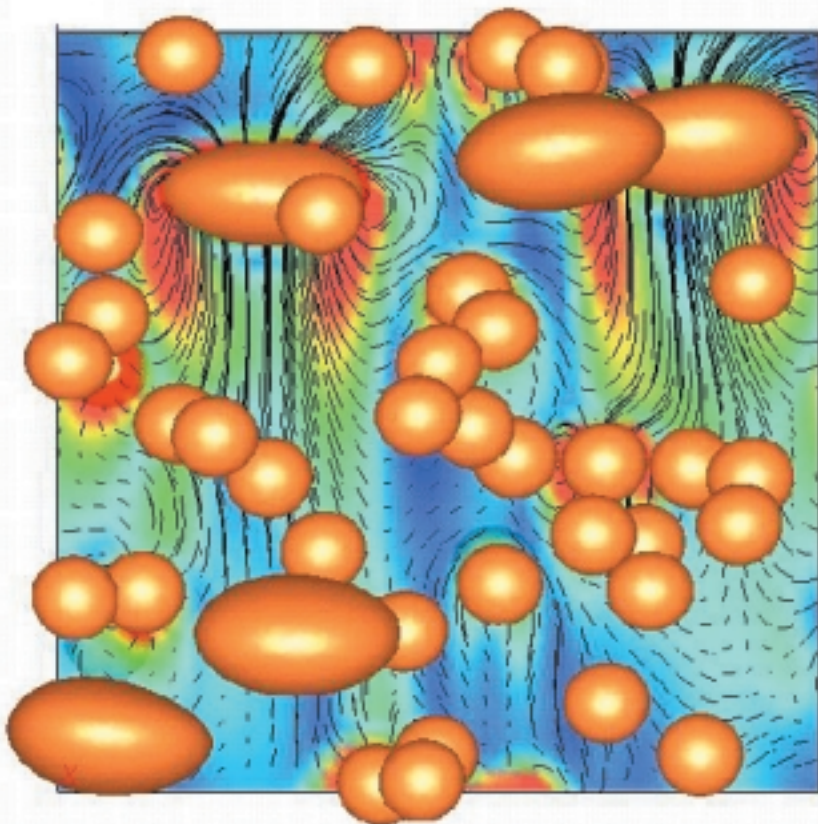


Simulación del flujo en un reactor de columna de burbujas

SANTIAGO LAÍN¹, MARTIN SOMMERFELD²



Simulación numérica directa de una nube de burbujas bidispersa

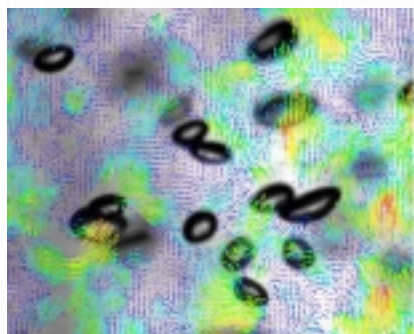
gaseosa (burbujas). La ecuación del movimiento para las burbujas tiene en cuenta todas las fuerzas relevantes, es decir, flotabilidad, presión, resistencia, masa añadida y empuje transversal. De acuerdo con las simulaciones, el empuje transversal es el único mecanismo capaz de dispersar las burbujas a través de la sección transversal de la columna de burbujas. Diferentes expresiones para la fuerza de resistencia de las burbujas (esfera rígida o fluida) han sido investigadas. Igualmente se han considerado distribuciones de tamaño mono-dispersa o polidispersa. Los perfiles de velocidades tanto para el gas como para el líquido se comparan con los datos experimentales y resultados obtenidos previamente con el modelo $k-\epsilon$ en Laín *et al.* (2001). Como resultado, la estructura dinámica del flujo del líquido se reproduce cualitativamente bien pero más trabajo se requiere en los aspectos cuantitativos.

Resumen

Este artículo investiga desde un punto de vista numérico el flujo transitorio que se desarrolla en el interior de una columna de burbujas de laboratorio. El esquema de simulación combina el método de Simulación de Grandes Escalas para el líquido y una aproximación Lagrangiana para la fase

Abstract

In this paper the transient flow developing in a cylindrical laboratory bubble column



Visualización simultánea del campo de flujo líquido y las burbujas

1. Grupo de Investigación en Mecánica de Fluidos, Departamento de Energética y Electrónica, Universidad Autónoma de Occidente, Cali, Colombia, slain@cuao.edu.co

2. Institut für Verfahrenstechnik, FB IW, Martin-Luther University, Halle (Saale), Alemania, martin.sommerfeld@iw.uni-halle.de. Profesor invitado UAO 17-30 de abril de 2004.

is addressed from a numerical point of view. The simulation scheme combines a Large Eddy Simulation (LES) for describing the liquid phase and a Lagrangian approach for the gas (discrete) phase. The bubble equation of motion consider all the relevant forces, i.e., buoyancy, pressure, drag, added mass and transverse lift. From the calculations the transverse lift is identified as the only mechanism allowing the bubbles to spread along the column cross-section. Different drag laws (for rigid or fluid bubble) and monodispersed or polydispersed bubble size distributions have been considered. The liquid and gas velocity profiles obtained are compared with the experimental data and k- ϵ results presented in Laín et al. (2001). As a matter of fact, the dynamic structure of the liquid flow induced by the rising bubbles is qualitatively well reproduced but further work should be performed regarding the quantitative aspects.

1. Introducción

Las columnas de burbujas se encuentran en una amplia gama de industrias, por ejemplo, química, petroquímica y biotecnológica. Sin embargo, si se desea optimizar su diseño para emplearlas en ingeniería de procesos se hace necesario entender los fundamentos de su comportamiento hidrodinámico, el cual viene determinado por el ascenso de las burbujas, interacciones entre burbujas y burbujas-líquido, tamaño de burbuja, su distribución de tamaños y su mecanismo de inyección. Además, el movimiento de tales burbujas en el seno fluido induce fluctuaciones de velocidad en el líquido debido a los esfuerzos cortantes pro-

ducidos en la vecindad de las burbujas, fundamentalmente debido a su movimiento de oscilación. Sin embargo, mientras que el flujo promedio en una columna de burbujas es muy regular y simétrico, el flujo transitorio suele ser muy irregular y asimétrico. Como las burbujas reaccionan a las estructuras locales e instantáneas del flujo, las interacciones dinámicas entre burbujas y entre burbujas y líquido afectan el rendimiento de la columna.

Desde el punto de vista de ingeniería se utilizan dos aproximaciones fundamentales para simular el flujo en flujo multifásico (para una revisión extensa el lector puede acudir a Jakobsen *et al.*, 1997). El modelo de dos fluidos, o Euler-Euler, trata el líquido y el gas como si fuesen dos medios entremezclados, por lo que considera cada fase como un fluido con términos de interacción entre las fases; su principal ventaja es el bajo costo computacional pero presenta dificultades a la hora de cerrar los términos provenientes de las interacciones entre burbujas y requiere ecuaciones adicionales cuando se considera una distribución de tamaños de burbuja. El procedimiento Euler-Lagrange, por otro lado, resuelve la segunda ley de Newton para el movimiento de cada burbuja, siempre y cuando se conozcan las fuerzas que actúan sobre ella; su costo computacional es más elevado que en el modelo de dos fluidos pero presenta la ventaja que las interacciones entre burbujas y distribución de tamaños de burbuja son fácilmente consideradas. En ambas estrategias la fase líquida se describe como un medio continuo, por lo que las fluctuaciones de velocidad inducidas por las burbujas deben ser modeladas de alguna manera.

Durante los últimos años el modelo k- ϵ ha sido aplicado por varios autores [e.g., Sanyal *et al.*

Las columnas de burbujas se encuentran en una amplia gama de industrias, por ejemplo, química, petroquímica y biotecnológica. Sin embargo, si se desea optimizar su diseño para emplearlas en ingeniería de procesos se hace necesario entender los fundamentos de su comportamiento hidrodinámico, el cual viene determinado por el ascenso de las burbujas, interacciones entre burbujas y burbujas-líquido, tamaño de burbuja, su distribución de tamaños y su mecanismo de inyección.

(1999), Laín *et al.* (2002), Bourloutski y Sommerfeld (2002)] para describir la estructura fluctuante del campo de velocidades del líquido, obteniéndose acuerdos cualitativos y cuantitativos muy prometedores con datos experimentales obtenidos con técnicas de PDA, PIV-PTV o CARPT. No obstante, debido al bajo número de Reynolds implicado en el flujo del líquido, una descripción mediante el modelo de Simulación de Grandes Escalas (LES) de la fase líquida es mucho más natural que los tradicionales modelos de turbulencia basados en RANS, los cuales fueron desarrollados para flujos turbulentos con altos números de Reynolds.

De hecho, el uso de LES para flujos gobernados por el movimiento de burbujas ha sido sugerido desde hace unos años (Jakobsen *et al.* (1997). Sin embargo, tan solo muy recientemente han aparecido simulaciones de columnas de burbujas que utilizan LES tanto con el esquema Euler-Euler (Deen *et al.*, 2001; Milelli *et al.*, 2001) como con el Euler-Lagrange (Van den Hengel *et al.*, 2003). No obstante, los experimentos de validación empleados en esos trabajos fueron penachos de burbujas confinados en los cuales la fase gaseosa no se encuentra presente en todo el seno líquido. Deen *et al.* y Van den Hengel *et al.* consideran una columna de burbujas de sección cuadrada mientras que Milelli *et al.* una sección circular. Sus conclusiones más importantes fueron en primer lugar que se podían utilizar mallas computacionales relativamente groseras sin perder ninguna característica fundamental del flujo y, en segundo lugar, que la dispersión transversal de las burbujas se debía a la fuerza de empuje transversal.

Este trabajo presenta los resultados obtenidos en la primera etapa de un proyecto de investigación que se desarrolla en la Universidad

Autónoma de Occidente con una duración de tres años. El artículo se centra en la simulación del flujo transitorio inducido por el movimiento ascendente de burbujas en una columna de burbujas de laboratorio. El flujo del líquido se describe mediante la técnica de Simulación de Grandes Escalas (LES), mientras que una aproximación Lagrangiana se utiliza para el cálculo de la fase gaseosa. Los resultados numéricos se comparan con las medidas experimentales obtenidas con técnicas de imagen PIV-PTV y los cálculos realizados con el modelo de turbulencia k- ϵ presentados en Laín *et al.* (2001). Como resultado el patrón de flujo transitorio es muy similar al observado pero la investigación debe continuar buscando mejores acuerdos cuantitativos.

2. Configuración del flujo

Los experimentos considerados fueron realizados en la cátedra de Ingeniería de Procesos Mecánicos de la Universidad Martin-Lutero Halle-Wittenberg (Alemania). La instalación experimental consiste en una columna de burbujas cilíndrica de laboratorio con un diámetro de 140 mm y una altura de 650 mm (es decir, nivel del agua en la columna). El suministro de aire se realiza mediante una membrana porosa con un diámetro de 100 mm y tamaño de poro de 0.7 μm , pretendiendo establecer una inyección de gas uniforme a través de la sección de la membrana. El flujo másico de gas se controla a través de la presión de abastecimiento.

Con el objeto de analizar el comportamiento de la nube de burbujas y evaluar simultáneamente la estructura del flujo y la turbulencia inducida en él se aplicó la técnica de Velocimetría de Imagen de Partículas (PIV). Para ello se desarrolló un PIV bifásico capaz de eva-

lar campos de flujo instantáneos de ambos, fluido y burbujas (Figura 1). La medida de las velocidades del líquido se realizó añadiendo partículas fluorescentes al flujo (trazadores). Las imágenes de las burbujas y partículas fluorescentes fueron adquiridas por dos cámaras CCD (Charge Couple Device). Las señales provenientes de las burbujas y trazadores se separaron por filtros ópticos de interferencia con bandas de absorción correspondientes a la longitud de onda de emisión de las partículas fluorescentes y la longitud de onda del láser pulsante de Nd-YAG utilizado, respectivamente. Para mejorar el sistema de separación de ambas fases, las cámaras CCD se colocaron no perpendicularmente al plano de iluminación. Detalles más específicos sobre el montaje experimental pueden encontrarse en Bröder y Sommerfeld (2002).

3. Modelización y aproximación numérica

La simulación numérica dinámica y tridimensional del flujo que tiene lugar en el interior de una columna de burbujas se ha realizado por medio del esquema Euler-Lagrange utilizando el código de volúmenes finitos FASTEST y el módulo LAG3D (Decker, 2004). Para hallar el flujo del líquido se resuelven las ecuaciones de evolución de Navier-Stokes filtradas, es decir, utilizando la Simulación de Grandes Escalas. Por consiguiente, las ecuaciones de continuidad y las tres componentes del momento lineal han sido extendidas para incorporar los efectos de la fase gaseosa. Dichas ecuaciones se pueden escribir en notación tensorial (donde la coma seguida de un subíndice significa derivada parcial y se sobreentiende suma sobre los índices repetidos) en la siguiente forma:

$$\hat{\rho}_{,i} + (\hat{\rho}\hat{u}_i)_{,i} = 0 \quad (1)$$

$$(\hat{\rho}\hat{u}_j)_{,i} + (\hat{\rho}\hat{u}_i\hat{u}_j)_{,i} = -\hat{p}_{,j} + \left[\mu_{eff}(\hat{u}_{i,j} + \hat{u}_{j,i}) - \frac{2}{3}\mu_{eff}\hat{u}_{k,k}\delta_{ij} \right]_{,i} + \hat{\rho}g_j + F_{jB} \quad (2)$$

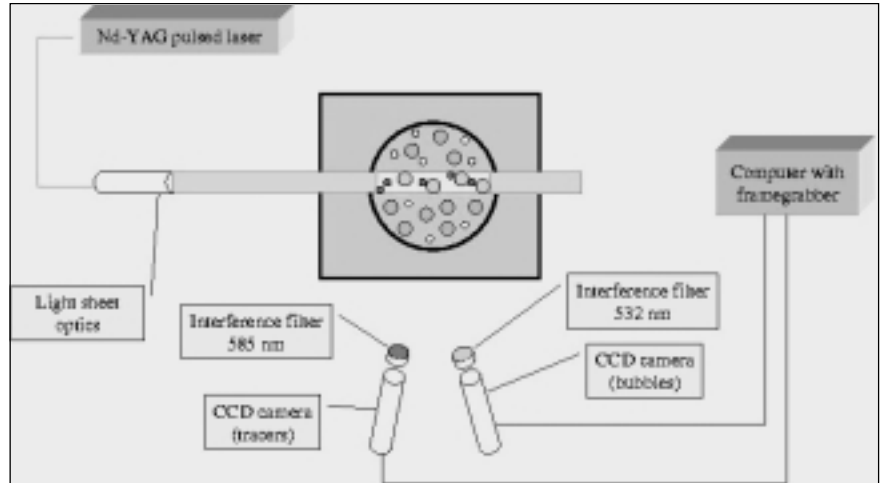


Figura 1: Sistema PIV para flujos bifásicos.

donde el angulito (^) indica variables filtradas, ρ indica la densidad del líquido, u_j su velocidad, la cual se descompone en una parte resuelta \hat{u}_j y la parte de subescala (SGS) u_j^{SGS} , p es la presión del líquido y g_j es la componente respectiva de la aceleración de la gravedad. En la ecuación (2), μ_{eff} es la viscosidad efectiva la cual posee dos contribuciones: la viscosidad molecular μ_l y la viscosidad turbulenta μ_t :

$$\mu_{eff} = \mu_l + \mu_t \quad (3)$$

La viscosidad turbulenta simula los efectos de subescala modelados y, en este trabajo, se describe mediante el modelo de Smagorinsky (Smagorinsky, 1963), que es esencialmente un modelo de viscosidad de torbellinos. Por tanto, dicha viscosidad de subescala se expresa como:

$$\mu_t = \hat{\rho} (C_s \Delta)^2 \sqrt{2 \hat{S}_{ij} \hat{S}_{ij}} \quad (4)$$

donde \hat{S}_{ij} es la parte simétrica del tensor de esfuerzos de las escalas resueltas. Éste se escribe como:

$$\hat{S}_{ij} = \frac{1}{2} (\hat{u}_{i,j} + \hat{u}_{j,i}) \quad (5)$$

En la ecuación (4) C_s es la constante de Smagorinsky cuyo valor varía según los autores entre 0.065 y 0.2, y Δ es la anchura del filtro. El último término en la ecuación (2) F_{iB} , término de interacción de momento, representa la acción de las burbujas sobre el líquido debido a las fuerzas interfaciales y será discutido posteriormente. Como en principio solo se consideran fracciones volumétricas inferiores al 2% la densidad del líquido se supondrá constante y se obviarán los efectos de las burbujas sobre ella. Por tanto, se escribirá $\rho \equiv \hat{\rho}$.

La simulación de la fase discreta mediante el método Lagrangiano requiere la solución de la ecuación del movimiento para cada burbuja computacional (representando un conjunto estadístico de burbujas reales con propiedades idénticas). El movimiento de la burbuja después de su inyección se calcula resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\frac{dx_{Bi}}{dt} = u_{Bi} \quad (6)$$

$$m_B \frac{du_{Bi}}{dt} = \frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_B D_B} m_B C_D (u_i - u_{Bi}) |\vec{u} - \vec{u}_B| + m_B g_i \left[1 - \frac{\rho}{\rho_B} \right] + C_{VM} m_B \frac{\rho}{\rho_B} \left[\frac{Du_i}{Dt} - \frac{du_{Bi}}{dt} \right] + C_{TL} \frac{\rho}{\rho_B} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} (u_j - u_{Bj}) \frac{\partial u_l}{\partial x_m} + m_B \frac{\rho}{\rho_B} \frac{Du_i}{Dt} \quad (7)$$

incluyendo, de izquierda a derecha, las fuerzas de inercia, resistencia, peso-flotabilidad, masa virtual, empuje transversal y gradiente de presiones.

Otras fuerzas como los términos de historia de Basset se supondrán despreciables frente a las contribuciones anteriores. Aquí, x_{Bi} son las coordenadas de la posición de la burbuja, u_{Bi} sus componentes de

velocidad, D_B su diámetro y ρ_B la densidad del gas que se supone constante. El símbolo $D \cdot /Dt$ es la derivada siguiendo al elemento fluido y ε_{ijk} son las componentes del pseudo-tensor de Levi-Civita (igual a 1 cuando ijk es una permutación par de 123, -1 cuando la permutación es impar y cero cuando coinciden dos o más índices), las cuales se usan para expresar el rotacional o el producto vectorial de dos vectores.

El coeficiente de resistencia C_D se calcula utilizando las correlaciones empíricas bien para una esfera rígida:

$$C_D = \begin{cases} 24 \text{Re}_B^{-1} (1 + 0.15 \text{Re}_B^{0.687}) & \text{Re}_B < 500 \\ 9.5 \times 10^{-5} \text{Re}_B^{1.397} & 500 \leq \text{Re}_B < 1500 \\ 2.61 & 1500 \leq \text{Re}_B \end{cases} \quad (8)$$

bien para una esfera fluida:

$$C_D = \begin{cases} 16 \text{Re}_B^{-1} & \text{Re}_B < 1.5 \\ 14.9 \text{Re}_B^{-0.78} & 1.5 \leq \text{Re}_B < 80 \\ 48 \text{Re}_B^{-1} (1 - 2.21 \text{Re}_B^{-0.5}) + 1.86 \times 10^{-15} \text{Re}_B^{4.756} & 80 \leq \text{Re}_B < 1500 \\ 2.61 & 1500 \leq \text{Re}_B \end{cases} \quad (9)$$

donde $\text{Re}_B = \rho D_B |\vec{u} - \vec{u}_B| / \mu_1$ es el número de Reynolds de la burbuja.

El coeficiente de empuje transversal C_{TL} que aparece en la ecuación del movimiento (7) se adopta según Tomiyama (1998):

$$C_{TL} = \begin{cases} \min \{ 0.288 \tanh(0.121 \text{Re}_B), \\ 0.00105 \text{Eo}^3 - 0.0159 \text{Eo}^2 - 0.0204 \text{Eo} + 0.474 \} & \text{Eo} < 4 \\ 0.00105 \text{Eo}^3 - 0.0159 \text{Eo}^2 - 0.0204 \text{Eo} + 0.474 & 4 \leq \text{Eo} < 10 \\ -0.29 & \text{Eo} \geq 10 \end{cases} \quad (10)$$

donde Eo es el número de Eötvös definido como:

$$Eo = \frac{g(\rho - \rho_B) D_B^2}{\sigma}$$

donde σ es el coeficiente de tensión superficial del líquido. La ecuación anterior (10) proporciona valores para C_{TL} entre 0 y 0.288 para burbujas pequeñas que migran hacia la pared y valores negativos para burbujas grandes distorsionadas. Por otro lado, C_{VM} es el coeficiente de masa virtual cuyo valor se toma igual a 0.5 en este artículo.

La ecuación del movimiento de la burbuja (7) se integra analíticamente sobre pequeños intervalos temporales suponiendo que las fuerzas permanecen constantes durante cada paso temporal. La solución numérica requiere que dicho paso temporal (es decir, el intervalo Lagrangiano Δt_L) sea suficientemente menor que todas las escalas de tiempo relevantes para el movimiento de la burbuja. En este tipo de movimientos inducidos por burbujas, la menor escala temporal viene dada por el tiempo de relajación de la burbuja:

$$\tau_B(C_D) = \frac{4(\rho_B + 0.5\rho)D_B^2}{3\mu_l Re_B C_D (Re_B)} \quad (11)$$

Con el objeto de evitar inestabilidades numéricas, el paso temporal se limita al 25% de τ_B (Laín and Göz, 2001). Para optimizar la eficiencia numérica, el paso temporal Lagrangiano puede variar a lo largo de la trayectoria de la burbuja.

4. Efectos de las burbujas sobre el flujo del líquido

Como el flujo del líquido viene gobernado por el movimiento de ascenso de las burbujas, los términos fuente que representan la acción de las burbujas son esenciales para capturar el patrón de flujo. El cálculo de ambas fases es dinámico por lo que la evaluación de los términos fuente y el acoplo entre las fases requiere un tratamiento especial para obtener promedios razonables en cada volu-

men de control en el que las burbujas se hallan presentes.

El intervalo temporal Euleriano, Δt_E , determina la resolución temporal de las fluctuaciones del flujo y viene limitado por la condición de que el máximo número de Courant-Friedrichs-Levy (CFL) sea menor que la unidad. Además, para conseguir un promedio temporal apropiado de los términos fuente, el paso temporal Lagrangiano Δt_L utilizado en la construcción de las trayectorias de las burbujas debe ser mucho menor que el Euleriano (es decir, $\Delta t_E/\Delta t_L > 100$).

El cálculo de los términos de interacción se realiza siguiendo la estrategia conocida como Particle-Source-in-cell (PSI-cell) (Crowe *et al.*, 1977). En el esquema LES estudiado, este modelo considera la fase dispersa como una fuente local de momento. En este contexto la expresión para el término fuente debido a las burbujas en la ecuación de momento se calcula como el promedio temporal y estadístico en la forma (Gouesbet and Berlemont, 1999):

$$F_{iB} = - \frac{1}{V_{cv} \Delta t_E} \sum_k m_k N_k \sum_n \left\{ ([u_{B_i}]_k^{n+1} - [u_{B_i}]_k^n) - g_i \left[1 - \frac{\rho}{\rho_B} \right] \Delta t_L \right\} \quad (12)$$

donde la suma sobre n indica promedio de las contribuciones de momento instantáneas a lo largo de la trayectoria de la burbuja (es decir, promedio temporal) y la suma sobre k se relaciona con el número de burbujas computacionales que cruzan la celda considerada de tamaño V_{cv} . La masa de cada burbuja individual es m_k y N_k es el número de burbujas reales contenidas en una burbuja computacional. En (12) tan solo las fuerzas de contacto deben considerarse, por lo que las fuerzas externas deben sustraerse.

5. Simulación numérica y procedimiento computacional

Este es el momento de resumir algunos resultados y conclusiones obtenidos por otros autores en configuraciones similares utilizando el procedimiento de LES para simular la fase líquida.

En lo que respecta al tamaño de la malla Deen *et al.* (2001) y Van den Hengel *et al.* (2003) concluyen que para flujos verticales inducidos por el movimiento de las burbujas pueden emplearse mallas relativamente gruesas sin perder ninguna característica fundamental del flujo. Por ejemplo, Deen *et al.* (2001) reportan cálculos en una columna de burbujas de sección cuadrada de $0.15 \times 0.15 \times 1 \text{ m}^3$ utilizando mallas con $15 \times 15 \times 100$ y $32 \times 32 \times 100$ celdas sin que se destaquen diferencias significativas entre ellas. El estudio de Milelli *et al.* (2001) sobre un penacho de burbujas confinado en un cilindro circular presenta conclusiones similares.

En el caso del trazado de las burbujas, en general, la velocidad instantánea del líquido vista por las burbujas que aparece en la ecuación (7) viene determinada por la velocidad del líquido resuelta \hat{u}_i interpolada linealmente de la existente en los puntos vecinos de la malla y una contribución de subescala u_j^{SGS} . Sin embargo, Van den Hengel *et al.* (2003) muestra que para el caso de un penacho de burbujas monodisperso desarrollándose en una columna de burbujas de sección cuadrada, el efecto de considerar u_j^{SGS} en la ecuación de movimiento de las burbujas es despreciable. Este hecho se debe al bajo número de Reynolds efectivo del líquido, por lo que casi toda la energía está contenida en las escalas resueltas por LES. Un comportamiento similar ha sido observado por Deen *et al.* (2001) y Milelli *et al.* (2001) utilizando modelos de dos fluidos.

Por tanto, como el movimiento del líquido en la columna de burbujas cilíndrica se debe exclusivamente al momento transferido por las burbujas, el efecto de las velocidades de subescala se obviará en la solución de la ecuación de movimiento de la burbuja (7), y por tanto se tomará $u_j = \hat{u}_j$.

Una conclusión adicional de esos trabajos es que los valores de C_{TL} influyen significativamente en los resultados obtenidos con LES. Si el empuje transversal se desprecia, las burbujas no experimentan ninguna dispersión transversal. Este hecho podría haberse esperado ya que en ausencia de transporte por fluctuaciones de velocidad, la única forma de tener una dispersión de las burbujas es a través de la fuerza de empuje transversal. La dependencia de la dispersión de las burbujas con el valor de C_{TL} también se ha observado en este trabajo y finalmente la correlación propuesta por Tomiyama ha sido adoptada.

La columna de burbujas cilíndrica con un diámetro de 140 mm y altura de 650 mm se ha discretizado empleando dos mallas: una gruesa con $29 \times 29 \times 50$ celdas y una fina con $29 \times 29 \times 150$ celdas, utilizándose esta última para comprobar la influencia del tamaño de la malla sobre los resultados. Las condiciones de frontera usadas para el cálculo de la fase líquida han sido:

- Condición de no deslizamiento en las paredes.
- La superficie libre se especificó como una pared, implicando también una condición de no deslizamiento.

La inyección de las burbujas se realiza en el fondo de la columna sobre una sección de diámetro 100 mm de acuerdo con los experimentos. El flujo másico de aire se mantuvo constante sobre toda la superficie de la membrana de inyección.

El tamaño de burbuja se determina por un proceso estocástico gaussiano con la distribución de tamaños medida. La velocidad inicial de las burbujas también se determina a partir de una distribución gaussiana con media y varianza conocida de la distribución experimental. En la superficie libre las burbujas abandonan el dominio computacional.

El proceso de cálculo se resume brevemente en las siguientes líneas. Primero las burbujas se inyectan aleatoriamente en la zona correspondiente y se trazan en el líquido en reposo durante el lapso correspondiente a un paso temporal Euleriano para evaluar los términos de interacción descritos anteriormente. Durante este primer paso del periodo inicial las burbujas no alcanzan la superficie libre. Los términos fuente se introducen en las ecuaciones de evolución del líquido y se calcula el flujo resultante. En este punto la inyección de nuevas burbujas y su trazado a través del dominio fluido continúa en cada paso temporal. Con los nuevos términos fuente el flujo del líquido en el nuevo instante de tiempo es calculado y así sucesivamente. Es necesario señalar que en este proceso no estacionario no se introduce sobrerrelajación de los términos fuente.

El caso experimental considerado es el número 1 presentado en Laín *et al.* (2001). La velocidad superficial del gas es 0.272 cm/s, el flujo volumétrico 151 l/h, la fracción volumétrica de aire 1.46% y el rango de diámetros de burbuja medidos [0.2,2.6] mm con un diámetro medio de 0.92 mm (Figura 2).

Este caso se seleccionó porque la extensión del modelo k- ϵ presentado en Laín *et al.* (2002) no proporcionó un buen acuerdo simultáneo para la velocidad media y energía cinética turbulenta del líquido, a pesar de que el modelo proporciona resultados correctos para condi-

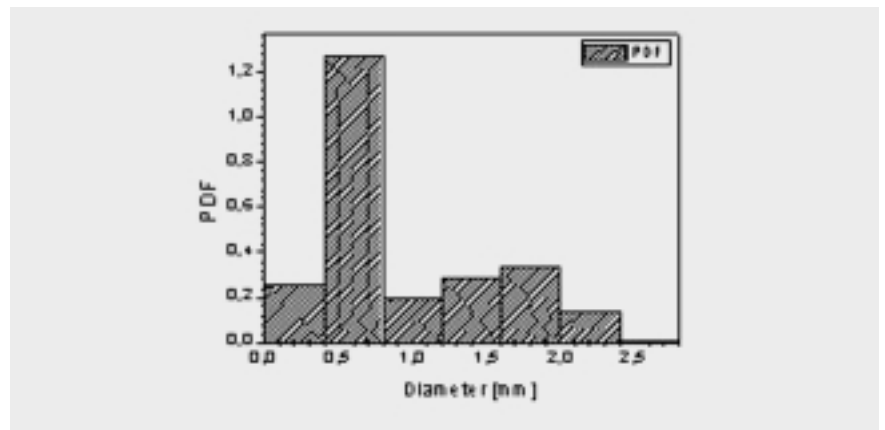


Figura 2: Distribución de tamaños de burbuja considerada en las simulaciones.

ciones de operación que implican burbujas más pequeñas. La idea principal subyacente en el uso de LES para este tipo de flujos con burbujas es la esperanza que los movimientos que tienen lugar en las escalas grandes (los cuales transportan la mayoría de la energía) sean los principales responsables de la influencia macroscópica de las fluctuaciones de velocidad sobre el movimiento de las burbujas, incluyendo la dispersión, mientras que las fluctuaciones de pequeña escala pierden importancia ya que están más relacionadas con las oscilaciones localizadas de las burbujas. Por consiguiente, existe una esperanza de que la estadística de las fluctuaciones de velocidad inducidas en el líquido por el movimiento de las burbujas pueda ser razonablemente reproducido. En lo siguiente se evalúa el procedimiento LES–trazado Lagrangiano para el flujo descrito.

La elección del paso temporal Euleriano, Δt_E , viene determinado por la ligadura de que el máximo número de Courant-Friedrichs-Levy (CFL) debe ser menor que la unidad si se quiere que el error del esquema numérico decrezca con el tiempo. Debido a las bajas velocidades inducidas en el líquido el valor $\Delta t_E = 0.05$ s es suficiente para satisfacer el requerimiento $CFL < 1$. Adicionalmente un valor de 0.025 s para Δt_E fue considerado para comprobar la influencia del paso temporal sobre los resultados fina-

les. La integración temporal de las ecuaciones Eulerianas que describen el líquido se realiza con un método totalmente implícito de segundo orden con el objeto de disminuir el error de truncado en el tiempo, mientras que para la discretización espacial de dichas ecuaciones se utilizan diferencias centradas de segundo orden.

La evolución del flujo cuasi-estacionario en la columna de burbujas comienza cuando las primeras burbujas abandonan el dominio fluido. Normalmente esta situación se presenta en unos 10 s. Después de ello, los datos se promedian en el tiempo hasta el final de la simulación. En este momento en la columna se encuentran unas 60.000 burbujas computacionales. El flujo se simula durante 250 segundos; sin embargo, algunas simulaciones se han alargado hasta 500 s para asegurar que el estado estadísticamente estacionario se ha alcanzado. En este último caso se necesitaron 336 h de tiempo de CPU en un PC Pentium 4 a 1.8 GHz con un procesador.

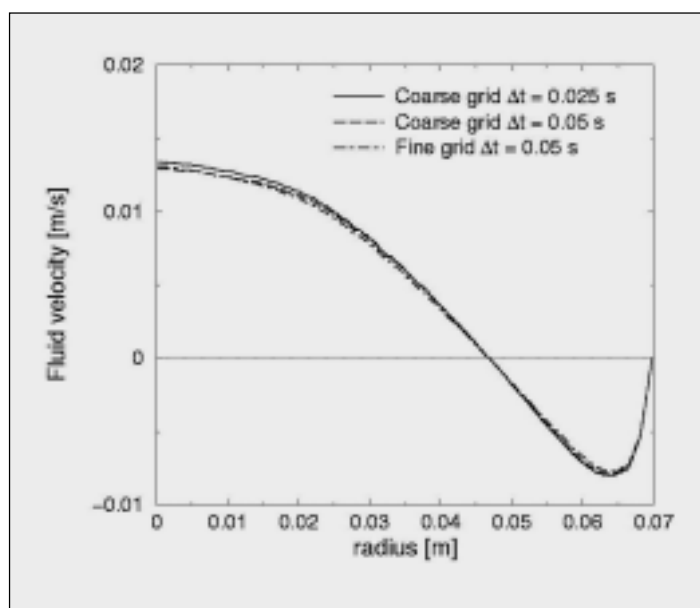


Figura 3: Influencia del paso temporal Euleriano Δt_E y tamaño de la malla sobre el promedio de la velocidad vertical del líquido en una sección situada 495 mm sobre la membrana de inyección.

El efecto del paso temporal Euleriano y el tamaño de la malla sobre el promedio de la velocidad vertical del líquido se ilustra en la Figura 3. El perfil de velocidad corresponde a la sección 495 mm sobre la membrana de inyección y ha sido promediado temporal y acimualmente. El promedio temporal (denotado por la barra) se realiza en cada paso temporal como:

$$\overline{u_i^n} = \frac{n - n_0 - 1}{n - n_0} \overline{u_i^{n-1}} + \frac{1}{n - n_0} u_i^n \quad (13)$$

donde el promedio comienza en el paso temporal n_0 . En una segunda etapa las velocidades en cada sección transversal vertical se promedian en la coordenada angular, proporcionando finalmente un perfil de velocidad frente a la coordenada radial.

Para $\Delta t_E = 0.05$ s, la Figura 3 muestra que los resultados para la velocidad del líquido son muy aproximadamente independientes del tamaño de la malla. Por otro lado, los cambios en el perfil de velocidades cuando se modifica el paso temporal Euleriano, en la malla gruesa, son suficientemente pequeños. En todos los casos se satisface la condición $CFL < 1$. En consecuencia el resto de las simulaciones se ha realizado con la malla gruesa y un paso temporal Euleriano $\Delta t_E = 0.05$ s. En todos estos casos se adoptó el valor de la constante de Smagorinsky $C_s = 0.1$ y el coeficiente de resistencia para esferas fluidas (9).

6. Resultados

La evolución típica del patrón de flujo en la columna de burbujas se muestra en la Figura 4, donde los contornos de la velocidad vertical (resuelta) del líquido se presentan en tres tiempos diferentes equidistantes. El color rojo indica velocidades ascendentes y el azul veloci-

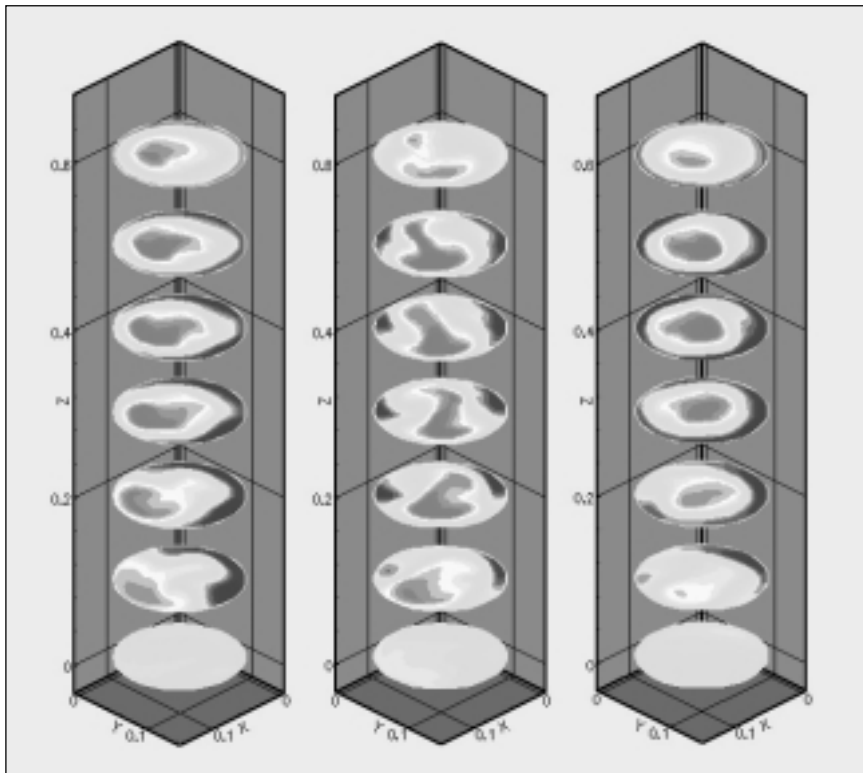


Figura 4: Contornos de velocidad vertical instantánea del líquido para tres tiempos distintos: 125 s (izquierda), 150 s (centro) y 175 s (derecha).

En general, el patrón de flujo consiste en un gran bucle de recirculación donde el flujo asciende en el centro de la columna y desciende en las cercanías de las paredes. Finalmente, el promedio sobre todas las configuraciones proporciona la estructura esperada del flujo, donde el líquido sube en el centro y baja en la proximidad de las paredes

dades descendentes. En general, el patrón de flujo consiste en un gran bucle de recirculación donde el flujo asciende en el centro de la columna y desciende en las cercanías de las paredes. No obstante, es posible encontrar áreas, las cuales evolucionan en el tiempo, donde el líquido asciende cerca de la pared, particularmente en la región cerca de la inyección. Finalmente, el promedio sobre todas las configuraciones proporciona la estructura esperada del flujo, donde el líquido sube en el centro y baja en la proximidad de las paredes (Figura 5).

En lo subsiguiente, los perfiles de velocidad promediados en el tiempo y en la coordenada angular se presentan frente al radio para ambas fases en la sección 495 mm sobre la superficie de inyección del gas.

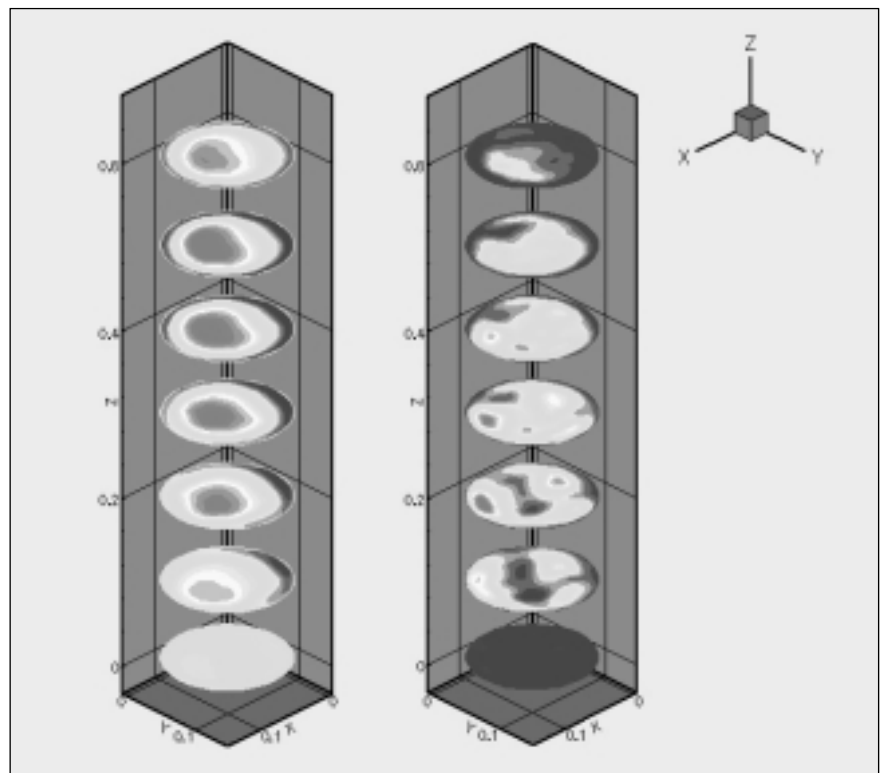


Figura 5: Contornos del promedio de velocidad vertical del líquido (izquierda) y su correspondiente energía fluctuante (derecha).

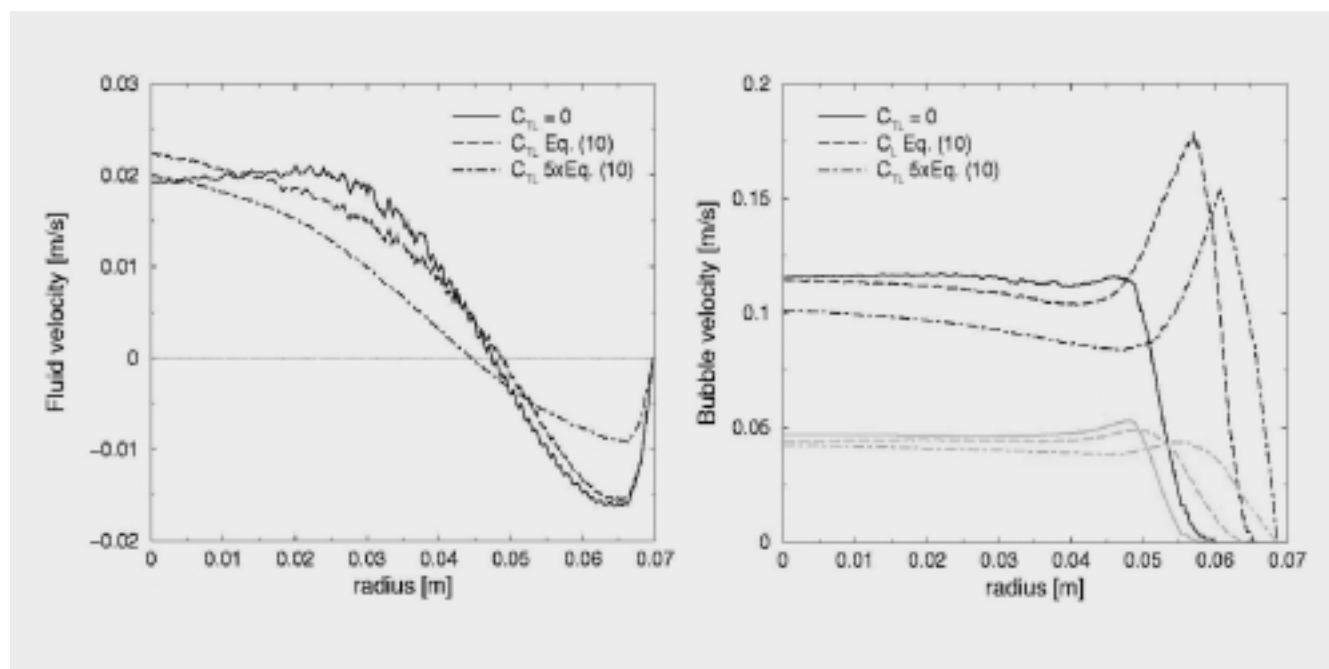


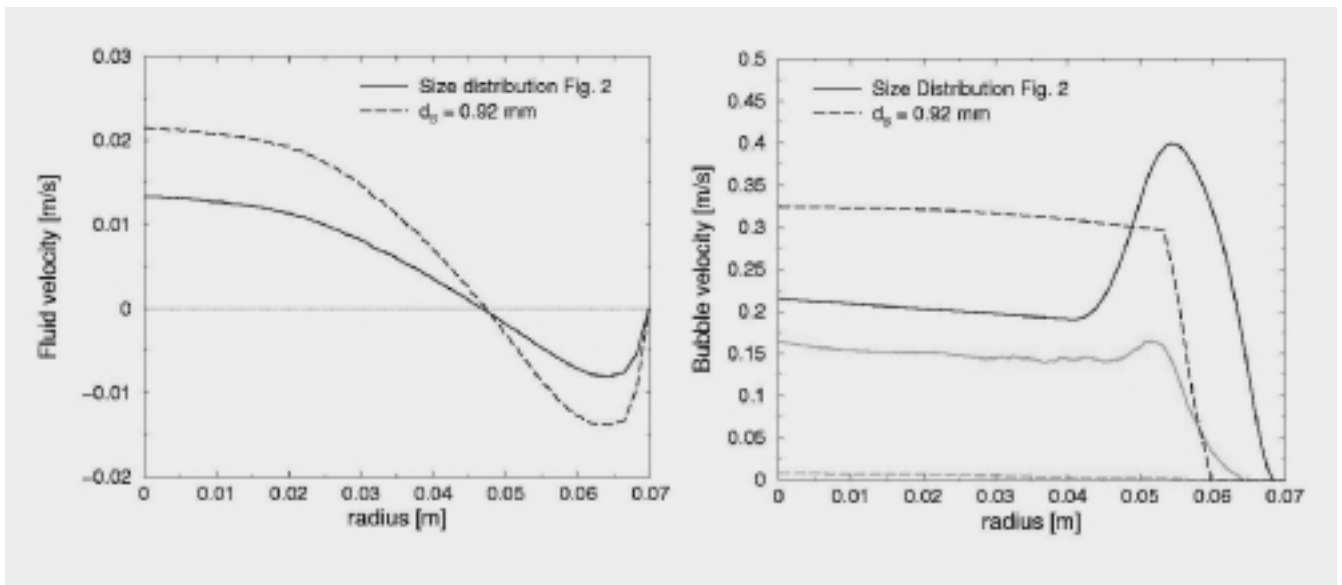
Figura 6: Influencia del valor del coeficiente de empuje transversal C_{TL} para el coeficiente de resistencia de burbuja rígida (8). Promedios de velocidad vertical del líquido (izquierda) y velocidades verticales de las burbujas (derecha). Las líneas negras representan velocidades medias y las grises velocidades fluctuantes. Sección 495 mm sobre la zona de inyección.

La Figura 6 muestra los resultados de la simulación de LES utilizando el coeficiente de resistencia para una esfera rígida (8) y para varios coeficientes C_{TL} . Se muestran tres casos: $C_{TL} = 0$, la expresión de Tomiyama (10) y los valores obtenidos multiplicando (10) por un factor de 5 buscando un valor más alto de C_{TL} . Las velocidades medias para el líquido se sitúan en la parte izquierda de la figura y para las burbujas en la derecha.

Las velocidades medias de las burbujas muestran claramente el efecto de la variación de C_{TL} . Si no se considera empuje transversal, las burbujas ascienden sin experimentar apenas dispersión, algo reportado previamente (Deen *et al.*, 2001). Por tanto, el perfil mantiene un valor constante hasta un radio de 0.05 m y a partir de ahí decrece rápido hasta cero. Algo similar sucede con los valores de la velocidad fluctuante de las burbujas (en verde). Las velocidades inducidas en el líquido muestran un perfil casi plano en la zona central que decrece suavemente hasta alcanzar valores negativos en la zona de flujo descendente alcanzando el valor cero en la pared.

Si C_{TL} es distinto de cero, las burbujas experimentan una dispersión transversal hacia la pared, la cual se incrementa conforme aumenta el valor de C_{TL} . Sin embargo, dado que las componentes de la fuerza de empuje transversal dependen de la velocidad relativa entre las fases en la dirección vertical y que la correlación (10) proporciona mayores valores para C_{TL} para las burbujas mayores, se encuentra que las burbujas más grandes tienden a migrar hacia la pared más eficientemente que las pequeñas. Como consecuencia, ya que la flotabilidad y por tanto la velocidad terminal depende del diámetro de burbuja, aparece un pico de velocidad para la fase gaseosa en las cercanías de la pared. Conforme C_{TL} aumenta el pico se va acercando más a la pared implicando menor transferencia de momento de las burbujas al líquido cerca del eje de simetría con lo que los valores de velocidad para el líquido decrecen.

Este comportamiento se debe a que el único mecanismo de dispersión de las burbujas es el empuje transversal. Si, por ejemplo, se utiliza un modelo de turbulencia k- ϵ ,



el proceso de dispersión es gobernado por el transporte por fluctuaciones de velocidad que es más eficiente que el basado en la fuerza de empuje transversal.

Una opción para mejorar los resultados evitando la aparición del pico en las velocidades de las burbujas es utilizar un único tamaño igual al diámetro medio $D_B = 0.92$ mm.

La Figura 7 presenta, para el coeficiente de resistencia para una esfera fluida (9) y la correlación de Tomiyama (10) para C_{TL} , el efecto

de considerar un único diámetro de burbuja. Como resultado, el pico en las velocidades de las burbujas desaparece (Figura 7 derecha) pero la componente fluctuante es extremadamente baja. Precisamente fue este hecho el que motivó la introducción de la distribución de tamaños de burbuja en la simulación, como fue discutido en Laín *et al.* (2002). Por otro lado, el cálculo con la distribución mostrada en la Figura 2 sigue presentando el pico en el perfil de velocidades de las burbujas. Consistentemente, los

Figura 7: Influencia de la distribución de tamaños de burbuja para el coeficiente de resistencia de burbuja fluida (9). Promedios de velocidad vertical del líquido (izquierda) y velocidades verticales de las burbujas (derecha). Las líneas negras representan velocidades medias y las grises velocidades fluctuantes. Sección 495 mm sobre la zona de inyección.

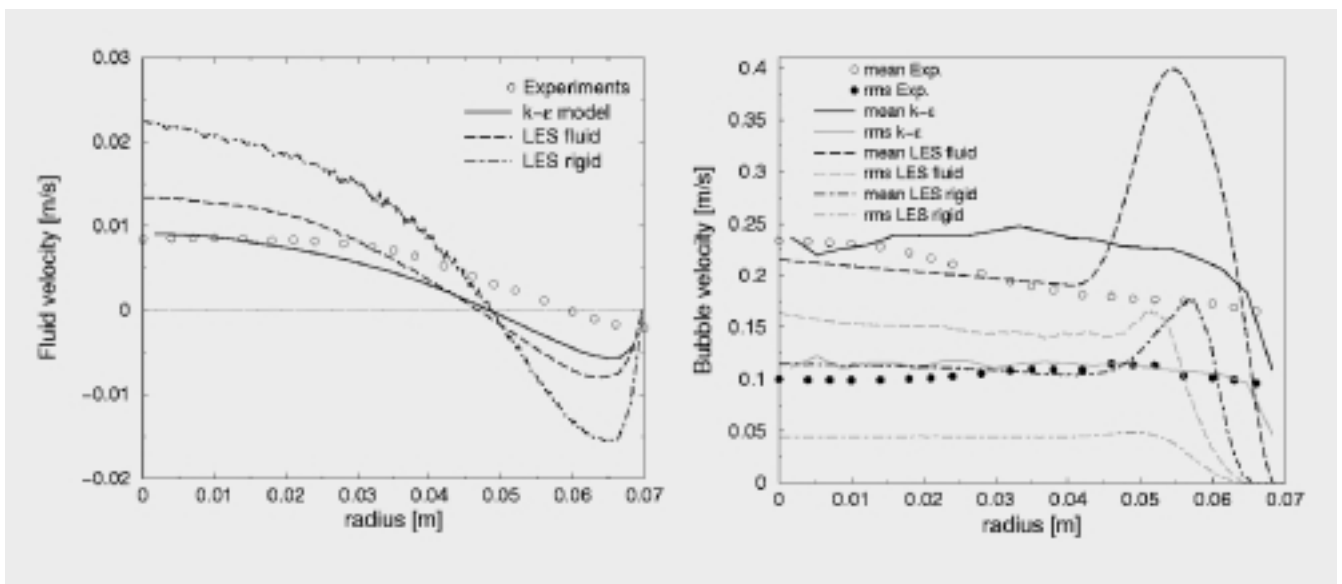


Figura 8: Comparación de resultados obtenidos con el modelo k-ε y LES frente a los datos experimentales en la sección 495 mm sobre el área de inyección. Promedios de velocidad vertical del líquido (izquierda) y velocidades verticales de las burbujas (derecha). Las líneas negras representan velocidades medias y las grises velocidades fluctuantes. Sección 495 mm sobre la zona de inyección.

mayores valores de velocidad media de burbuja en el caso monodisperso inducen mayores valores en la velocidad del líquido en las cercanías del centro de la columna debido al incremento de transferencia de momento de la fase dispersa a la continua.

Finalmente, la Figura 8 presenta la comparación cuantitativa entre las simulaciones bajo LES, medidas experimentales y los resultados obtenidos con el modelo $k-\epsilon$ reportados en Laín *et al.* (2001). En la parte izquierda de esta figura se comprueba cómo las velocidades verticales del líquido se sitúan por encima de los experimentos y cálculos con el modelo $k-\epsilon$. Por otro lado, la velocidad vertical de las burbujas se sitúa por debajo de los valores obtenidos con el modelo $k-\epsilon$ excepto en la zona del pico de velocidades. Este hecho se debe al comentado efecto de dispersión no homogénea de las burbujas en las direcciones transversales. Por tanto, en las simulaciones bajo LES, las burbujas más pequeñas tienden a quedarse en las cercanías del eje del cilindro mientras que las mayores tienden a migrar hacia la pared. En lo concerniente a las velocidades fluctuantes de las burbujas, el caso con coeficiente de resistencia para esferas fluidas proporciona valores sobre los puntos experimentales y el caso con C_D para esferas rígidas arroja valores por debajo de ellos.

Una posibilidad para mejorar los resultados del esquema completo es estimar la energía cinética de subescala, k^{SGS} , y utilizarla para construir un mecanismo de dispersión para las burbujas que se combine con la fuerza de empuje transversal. Una tal estimación podría obtenerse resolviendo una ecuación de evolución para k^{SGS} , por ejemplo utilizando la formulación de Yoshizawa (1982). Esto será objeto de un trabajo futuro.

7. Conclusiones y trabajo futuro

En este artículo se presentan los resultados obtenidos en la primera etapa de desarrollo de un proyecto de investigación centrado en la simulación numérica del flujo transitorio que tiene lugar en el interior de una columna de burbujas cilíndrica. El esquema de cálculo combina una Simulación de Grandes Escalas (LES) para la fase líquida con un módulo de trazado Lagrangiano para las burbujas de gas. En general, la estructura dinámica del patrón del flujo del líquido y el estado estadísticamente estacionario, mostrando un bucle de recirculación muy aproximadamente simétrico, son reproducidos observándose un buen acuerdo cualitativo con las observaciones. Sin embargo, el trabajo debe continuar buscando mejor acuerdo cuantitativo.

Como en trabajos anteriores, la dispersión de las burbujas depende fuertemente del valor del coeficiente de empuje transversal, C_{TL} , ya que en ausencia de transporte por fluctuaciones de velocidad, la fuerza de empuje transversal es el único mecanismo capaz de dispersar las burbujas transversalmente. Además, la consideración de una distribución de tamaño de las burbujas junto con la correlación (10) propuesta por Tomiyama para C_{TL} , induce una zona de altas velocidades de burbujas cerca de las paredes de la columna. Tal pico se debe a la dispersión no homogénea de las burbujas la cual implica que las mayores alcancen posiciones más cercanas a la pared que las más pequeñas.

Un procedimiento para mejorar este comportamiento sería la introducción de una ecuación de evolución para la energía cinética fluctuante de subescala utilizando, por ejemplo, la formulación de Yoshizawa (1982). Esta idea será desarrollada en el futuro cercano.

Agradecimientos

Este proyecto de investigación es financiado por la Universidad Autónoma de Occidente con referencia 03-PIM-9. El primer autor agradece especialmente dicho apoyo financiero. ☀

Referencias

- Bourloutski, E., Sommerfeld, M. Parameter studies on the three-dimensional calculation of bubble columns. Joint US ASME/European Fluids Engineering Summer Conference, Montreal, Paper No. FEDSM 2002-31218 (2002).
- Bröder, D. Sommerfeld, M. An advanced LIF-PLV system for analysing the hydrodynamics in a laboratory bubble column at higher void fraction. *Experiments in Fluids* 33, 826-837 (2002).
- Crowe, C.T., Sharma, M.P., Stock, D.E. The Particle-Source-in-Cell (PSI-Cell) method for gas-droplet flows. *J. Fluids Eng.* 99, 325-332 (1977).
- Decker, S. Zur Berechnung von gerührten Suspensionen mit dem Euler-Lagrange Verfahren (in German, in preparation). Ph.D. Thesis, University Martin-Luther Halle-Wittenberg, Germany (2004).
- Deen, N.G., Solberg, T., Hjertager, B.H. Large eddy simulation of the gas-liquid flow in a square cross-sectioned bubble column. *Chem. Eng. Sci.* 56, 6341-6349 (2001).
- Gouesbet, G., Berlemont, A. Eulerian and Lagrangian approaches for predicting the behaviour of discrete particles in turbulent flows. *Prog. Energy Combust. Sci.* 25, 133-159 (1999).
- V. den Hengel, E.I.V., Darmana, D., Deen, N.G., Kuipers, J.A.M. Large Eddy Simulation of a Bubble Column Reactor using the Euler-Lagrange Approach, *Computational Fluid Dynamics in Chemical Reaction Engineering III*, May 25-30, 2003, Davos, Switzerland (2003).
- Jakobsen, H.A., Sannaes, B.H., Grevskott, S., Svendsen, H.F. Modeling of vertical bubble-driven flows. *Industrial and Eng. Chemistry Res.* 36, 4052-4074 (1997).
- Laín, S., Bröder, D. Sommerfeld, M. Numerical simulations of the hydrodynamics in a bubble column: Quantitative Comparisons with experiments. *Proc. of the 4th Int. Conf. on Multiphase Flow*, May 27 - June 1 2001, New Orleans, USA (2001).
- Laín, S., Göz, M.F. Numerical instabilities in bubble tracking in two-phase flow simulations. *Int. J. Bifurcation and Chaos* 11, 1169-1181 (2001).
- Laín, S., Bröder, D., Sommerfeld, M., Göz, M.F. Modelling hydrodynamics and turbulence in a bubble column using the Euler-Lagrange procedure. *Int. J. Multiphase Flow* 28, 1381-1407 (2002).
- Milelli, M., Smith, B.L., Lakehal, D. Some new approaches to bubble plume modeling using CFD. *Proc. Int. Mechanical Eng. Congress and Exposition*, New York (USA), November 2001.
- Sanyal, J., Vásquez, S., Roy, S., Dudukovic, M.P. Numerical simulations of gas-liquid dynamics in cylindrical bubble column reactors. *Chem. Eng. Sci.* 54, 5071-5083 (1999).
- Smagorinsky, J. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review* 91, 99-165 (1963).
- Tomiya, A. Struggle with computational bubble dynamics. *Proc. of the 3rd Int. Conf. on Multiphase Flow*, June 8-12 1998, Lyon, France (1998).
- Yoshizawa, A. A statistically-derived subgrid-scale kinetic energy model for large eddy simulation of turbulence. *Phys. Fluids* 25, 1532-1537. (1982).