

ANÁLISE DA EFETIVIDADE DE INTERNOS EM UMA COLUNA DE BORBULHAMENTO UTILIZANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

Robson Rodrigues Mororó

Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. Tel: 55-21-25470466, robson@peq.coppe.ufrj.br

Ricardo Carvalho Rodrigues

Programa de Engenharia Química-COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro P.O. Box 68502, 21945-970 Rio de Janeiro, RJ, Brasil. Fax: 55-21-25628300, ricardo@peq.coppe.ufrj.br

Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Programa de Engenharia Química-COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro P.O. Box 68502, 21945-970 Rio de Janeiro, RJ, Brasil. Fax: 55-21-25628300, paulo@peq.coppe.ufrj.br

Resumo: Colunas de borbulhamento com internos se tornam cada vez mais atrativas para aplicações quando se deseja uma mistura mais lenta da fase líquida, que é o caso de esgotamento de voláteis. Neste trabalho, a efetividade de um novo tipo de interno é estudada através da fluidodinâmica computacional. O efeito causado pela colocação de internos em colunas de borbulhamento isotérmicas operando em regime de borbulhamento homogêneo foi analisado por simulações fluidodinâmicas bidimensionais e transientes. Um modelo bifásico Euleriano, utilizando o modelo de turbulência $k-\epsilon$ para a fase líquida, implementado no CFX 10.0 da ANSYS foi utilizado nas simulações. O tempo de mistura da fase líquida foi estudado através do acompanhamento ao longo do tempo da dispersão de um pulso de traçador na entrada de líquido na coluna, para as colunas sem e com internos. Os internos analisados são uma nova proposta que visa uma baixa perda de carga. O tempo de mistura nas colunas foram comparados e foi verificado que colunas sem internos possui um tempo de mistura muito menor que a coluna com o tipo de internos proposto.

Palavras chave: Colunas de borbulhamento, internos, traçador, simulações CFD, esgotamento

1. Introdução

Colunas de borbulhamento fazem parte da classe de contactores gás-líquido usados para desenvolver reações químicas e operações de transferência de massa e calor. Esse tipo de reator, em particular, exibe muitas vantagens sobre os demais, destacando-se a simplicidade de construção e versatilidade de operação (Deckwer e Schumpe, 1993). Nesse tipo de equipamento a fase gasosa é dispersa em uma fase contínua no qual o conjunto das bolhas ascendente influencia todo o campo de escoamento gerando zonas de circulação. A hidrodinâmica é complexa e extremamente dependente das condições operacionais, das propriedades físicas do sistema e de escala (Rodrigues, 2005).

Existem dois principais regimes em colunas de borbulhamento: o homogêneo e o heterogêneo. O homogêneo é caracterizado por baixas velocidades superficiais de gás, pouca variação no tamanho das bolhas que ascendem quase que verticalmente. Neste regime, existe uma fraca recirculação de líquido na coluna que ocorre pelo carreamento de uma certa quantidade de líquido pelas bolhas até o topo da coluna onde elas colapsam e o líquido é obrigado a descer, preferencialmente pela região relativamente livre de bolhas próxima à parede. O regime heterogêneo ocorre para altas velocidades superficiais de gás sendo caracterizado por ampla faixa de tamanhos de bolhas, com grandes bolhas em ascensão rápida no centro da coluna e um padrão caótico de uma forte recirculação de líquido.

A mistura da fase líquida numa coluna é muito intensa, devido à alta circulação de líquido na coluna (Rodrigues, 2005), ou seja, um dado soluto presente na fase líquida demora pouco tempo para se homogeneizar dentro da coluna. Essa característica hidrodinâmica é por vezes, indesejada, como, por exemplo, em colunas de esgotamento operando em contra-corrente, onde se quer desenvolver um gradiente de concentração do volátil na fase líquida ao longo da altura da coluna, para otimizar o processo de transferência de massa entre as fases.

Colunas com internos foram analisadas em estudos experimentais e o tempo para dispersão total de um soluto (traçador) na fase líquida é comparativamente maior que em colunas que não apresentam internos, ou seja, um gradiente de concentração do traçador é gerado dentro da coluna com internos (Wild et al, 2003, Van Baten e Krishna, 2002, Pandit e Doshi, 2005).

Neste trabalho, fez-se uma avaliação de uma nova proposta de internos. Um estudo comparativo, usando a fluidodinâmica computacional (CFD), foi realizado para colunas de borbulhamento, operando com o sistema ar-água, com 0,4 m de altura e 0,073 m de diâmetro com e sem a presença dos internos. As simulações foram realizadas isotermicamente e sob o regime de borbulhamento homogêneo utilizando o modelo bifásico Euleriano-Euleriano com o modelo de turbulência $k-\epsilon$. Este modelo foi desenvolvido por Sokolichin e Eigenberger (1999) e validado por Borchers

et al. (1999). As colunas foram simuladas em uma aproximação bidimensional para reduzir o custo computacional envolvido (Van Baten e Krishna, 2003), a qual não deve afetar os resultados da análise comparativa. Os comportamentos hidrodinâmicos (perfil de velocidade, tempo de misturação na fase líquida e perfil de retenção de gás na coluna) de ambas as colunas foram analisados e comparados.

2. Formulação Matemática

O modelo de dois fluidos utilizado foi o implementado no código comercial CFX 10 da ANSYS, que consiste das equações descritas abaixo.

As equações de conservação de massa total para as fases líquida e gasosa são dadas por:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha) = S_{MS,\alpha} + \sum_{\beta=1}^N \Gamma_{\alpha,\beta} \quad (1)$$

onde r_α é a fração volumétrica da fase α , ρ_α é a densidade da fase α , U_α é a velocidade da fase α , $S_{MS,\alpha}$ representa uma fonte adicional de massa da fase α por unidade de volume da mistura e $\Gamma_{\alpha,\beta}$ é a taxa mássica líquida por unidade de volume da mistura que é transferida da fase β para a fase α . Usando o sistema bifásico ar-água, ou seja, $N=2$ e particularizando para $\Gamma_{\alpha,\beta} = 0$ a equação (1) fica da seguinte forma:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha) = S_{MS,c} \quad (2)$$

As equações de conservação de quantidade de movimento para as fases líquida e gasosa são dadas por:

$$\frac{\partial(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha \otimes U_\alpha) = -r_\alpha \nabla p_\alpha + \nabla \cdot \left\{ r_\alpha \mu_\alpha \left[\nabla U_\alpha + (\nabla U_\alpha)^T \right] \right\} + r_\alpha \rho_\alpha g + M_\alpha + \Gamma_{\alpha,\beta} U_\alpha \quad (3)$$

onde $p_\alpha = p_\beta = p$, ou seja todas as fases compartilham o mesmo campo de pressão sendo o vetor gravidade representado por g e M_α modela a transferência de quantidade de movimento devido às forças interfaciais que atuam na fase α devido a presença da fase β . As forças entre as duas fases são iguais e opostas, isto é, $M_\alpha + M_\beta = 0$ e $\Gamma_{\alpha,\beta}$ é a taxa mássica líquida por unidade de volume da mistura que é transferida da fase β para a fase α , que para esse caso é igual a 0.

As forças entre as fases surgem de diversos fenômenos físicos. Nesse trabalho foi considerada somente a força de arrasto:

$$M_\alpha = M_\alpha^D \quad (4)$$

A força de arrasto entre as fases é calculada pela seguinte equação, considerando α a fase dispersa:

$$M_\alpha^D = \frac{3}{4} \rho_\alpha \frac{r_\beta}{d} r_\beta^p C_d |U_\beta - U_\alpha| (U_\beta - U_\alpha) \quad (5)$$

onde o coeficiente de arrasto para bolha isolada, C_d , foi estimado de acordo com o modelo proposto por Grace et al. (1978), como implementado no CFX 10 da ANSYS, que leva em conta automaticamente os regimes de bolhas esféricas e “caps”. O expoente p no fator que introduz o efeito de população foi considerado igual a -2 com base no procedimento descrito por Ribeiro Jr. e Lage (2004). Para a fase líquida, a turbulência do campo de escoamento foi considerada usando o modelo de turbulência $k-\varepsilon$ (Sokolichin e Eigenberger, 1999).

A equação de transporte do traçador foi implementada através de uma variável adicional escalar e específica, na fase β é dada por:

$$\frac{\partial(r_\beta \rho_\beta \phi_\beta)}{\partial t} + \nabla \cdot (r_\beta \rho_\beta U_\beta \phi_\beta) = \nabla \cdot \left[r_\beta \left(\rho_\beta D_{\phi,\beta} + \frac{\mu_{t,\beta}}{Sc_{t,\beta}} \right) \nabla \phi_\beta \right] + S_{\phi,\beta} + \Gamma_{\phi,\beta} \quad (6)$$

onde ϕ_β é a grandeza conservada por unidade de massa da fase β , $D_{\phi,\beta}$ é a difusividade cinemática para o escalar na fase

α , $S_{\phi,\beta}$ é um termo fonte volumétrico externo na fase α , com unidade da quantidade conservada por unidade de volume por unidade de tempo e $\Gamma_{\phi,\beta}$ representa fonte total para ϕ_β devido a transferência entre as fases através das interfaces das mesmas.

Na entrada de líquido, um pulso de traçador é gerado através do emprego do seguinte valor de ϕ :

$$\phi_\beta = A[H(t) - H(t - t_0)] \quad (7)$$

onde H é a função heaviside e A e t_0 são constantes adequadas.

3. Procedimento numérico, condições de contorno e condições iniciais

As simulações CFD foram realizadas no software comercial CFX 10.0 da ANSYS em colunas de borbulhamento de 0,40 m de altura e 7,3 cm de diâmetro com e sem internos utilizando o sistema ar-água. Os domínios computacionais das simulações bidimensionais são fatias de 10 graus das colunas cilíndricas.

As equações descritas no item anterior foram resolvidas pelo CFX utilizando o método dos volumes finitos formados a partir de subdivisões do domínio computacional, os elementos, cujo o conjunto se chama de malha. O domínio foi discretizado usando malhas não estruturadas baseadas em rotação de malhas bidimensionais gerando elementos prismáticos, com aproximadamente 20 mil elementos. Testes preliminares indicaram que este tamanho de malha é adequado para representar o escoamento na coluna com internos. Detalhes das malhas podem ser observados na Fig. 1.

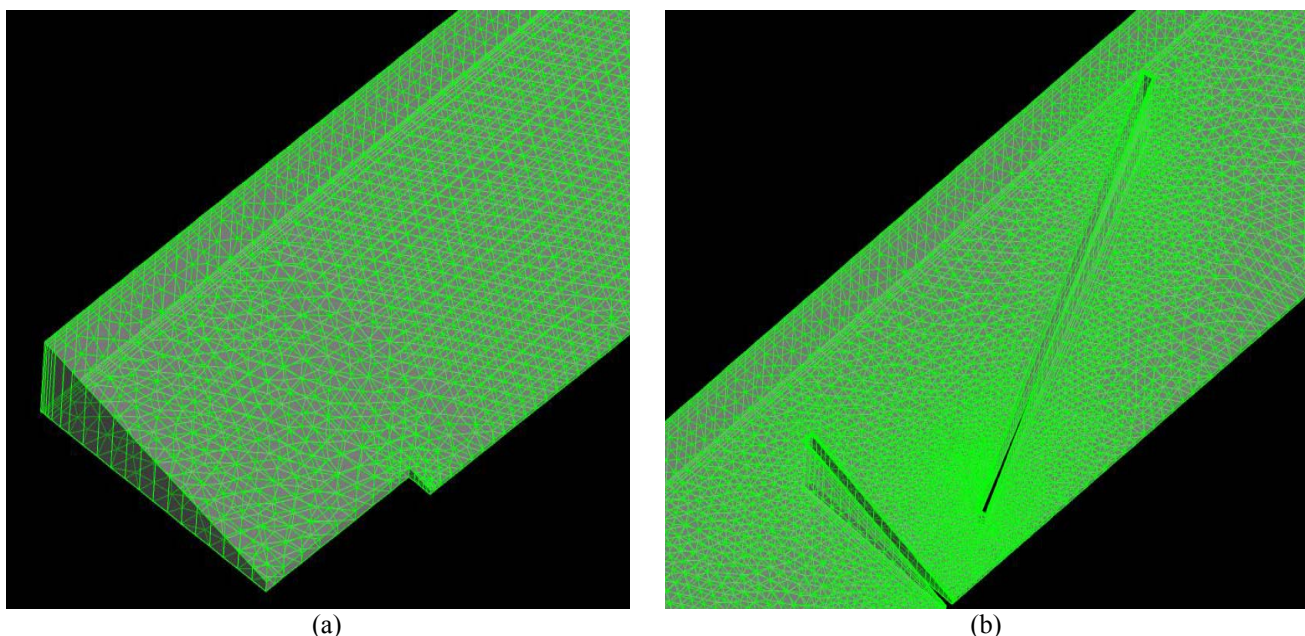


Figura 1. Malha não estruturada de 20 mil nós. Detalhes do (a) refino próximo à parede e do (b) refino em torno dos internos.

O ar entra pela parte inferior da coluna através de uma área correspondente a 76% da área total disponível. A água entra pela parte superior da coluna através de um tubo de 0,2 cm de diâmetro interno e 0,2 cm de espessura acoplado à coluna. No restante da área livre do topo da coluna, foi empregada uma condição de parede semi-permeável, que permite somente a saída da fase gasosa. Nas paredes da coluna, empregou-se a condição de não escorregamento para ambas as fases. Para simular no modelo bidimensional a saída de líquido através de um tubo lateral na base da coluna, adicionou-se às equações de transporte de massa, momento e turbulência um termo fonte negativo associado a um pequeno volume na base da coluna.

As simulações foram transientes com integração usando o método de Euler implícito de primeira ordem e passos de tempo na faixa de 1×10^{-5} a 2×10^{-4} s. Cada passo de integração foi considerado convergido quando os resíduos máximos de todas as equações de conservação fossem inferiores a 10^{-4} , o que foi obtido com menos de 10 iterações no ciclo iterativo no valor dos coeficientes para todos os resultados aqui apresentados. A Tabela 1 resume as condições de operação usadas em todas as simulações realizadas.

Tabela 1 – Condições de simulação para ambas colunas

Fase dispersa (gás)	Ar
Fase continua (líquido)	Água
T (K)	298,15
Vazão mássica de entrada de gás G_{Ar} (kg s^{-1})	$2,8 \times 10^{-6}$
Vazão mássica de entrada de líquido G_{Ag} (kg s^{-1})	$1,4 \times 10^{-5}$
Pressão na coluna, P (kPa)	101,32
Diâmetro da bolha, d_b (m)	$4,0 \times 10^{-3}$

4. Resultados

O escoamento em colunas de borbulhamento é induzido pela ascensão do conjunto de bolhas e é caótico, isto é, não chega a um estado estacionário (Devanathan et al., 1995). Entretanto o escoamento apresenta comportamento quase-periódico, tendendo a atingir um estado pseudoestacionário, no qual uma média temporal de suas variáveis em um dado período de tempo, superior ao período característico das oscilações quase-periódicas, deixa de ter um comportamento transiente.

A Figura 2 mostra as evoluções temporais da retenção gasosa global para as simulações realizadas em coluna sem e com internos, com uma malha não estruturada de aproximadamente 20 mil nós. Após aproximadamente 15 s de simulação na coluna sem internos, o escoamento começa a apresentar oscilações quase periódicas enquanto que, para tempos superiores a 10 s, a coluna com internos atinge um estado pseudo-estacionário no qual as suas variáveis hidrodinâmicas se mantêm praticamente inalteradas. Mais relevante é o fato que a retenção gasosa global foi 25% maior na coluna com internos, indicando que os internos estão aumentando o tempo de residência médio da fase gasosa neste mesmo fator.

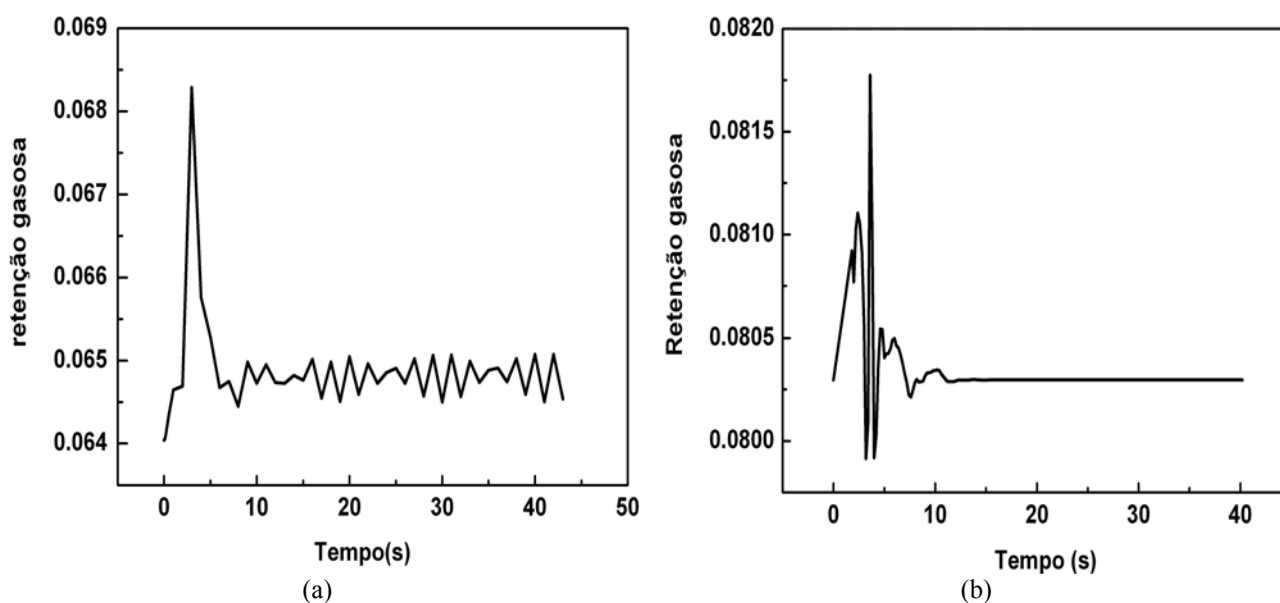


Figura 2. Evoluções temporais da retenção gasosa global em (a) colunas sem internos; (b) colunas com internos

Para o regime de borbulhamento homogêneo, a pluma de bolhas oscila pouco, ascendendo preferencialmente pelo centro da coluna de borbulhamento. A Figura 3 mostra gráficos de contorno da retenção gasosa local instantânea para ambas as colunas nos seus estados pseudo-estacionários. Percebe-se claramente que os internos levam a um grande aprisionamento da pluma de gás, mostrando a origem da maior retenção gasosa total para a coluna com internos. Além disso, os internos conseguem deslocar a pluma de bolhas da região central para a região próxima à parede. Assim, uma seqüência destes internos levará a uma melhor distribuição radial da pluma de bolha.

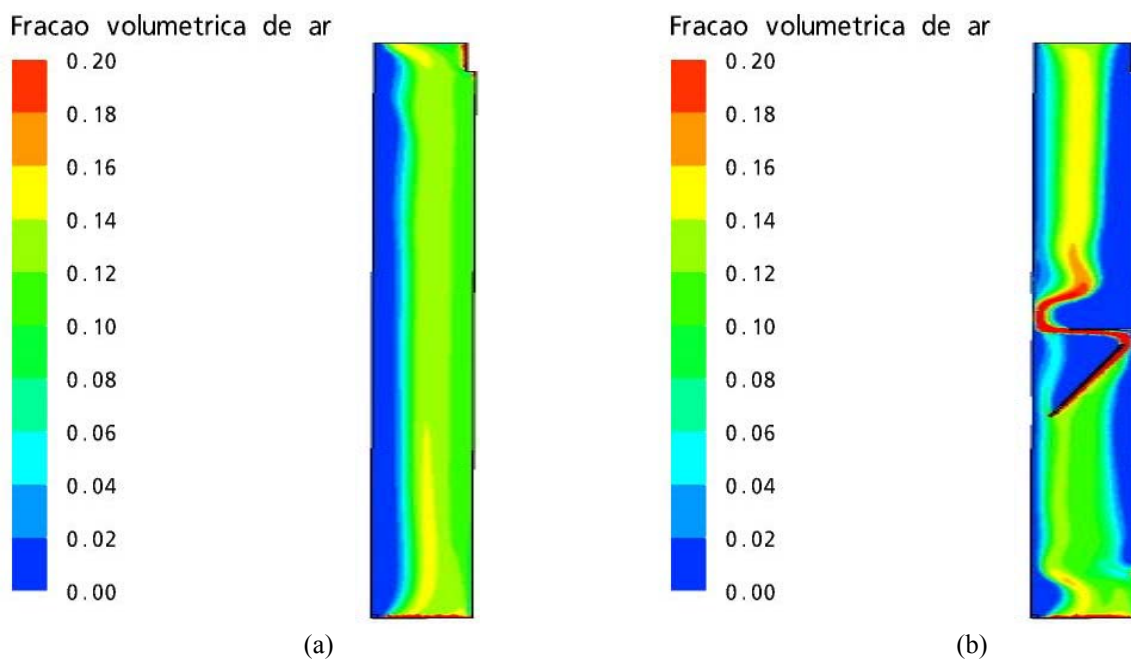


Figura 3. Frações volumétricas médias de ar (a) sem internos (b) com internos

A Figura 4 apresenta gráficos vetoriais do campo de velocidade da fase líquida nas colunas com e sem internos. A simulação bidimensional da coluna sem internos gerou, como esperado, uma única zona de recirculação que se estende por toda a altura da coluna. Em simulações 3D, umas seqüências de vórtices toroidais seriam observadas (Sokolichin e Eigenberger, 1999).

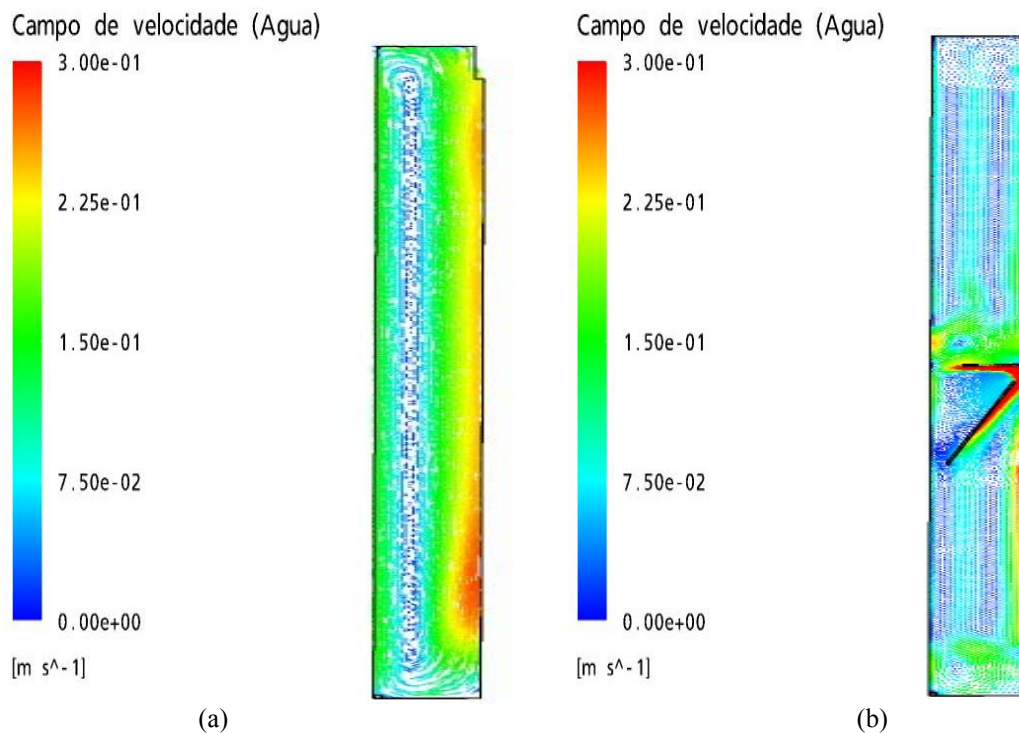


Figura 4. Campo médio de velocidades na fase líquida (a) sem internos; (b) com internos. A magnitude da velocidade local fornece a coloração.

A colocação dos internos na coluna de borbulhamento altera totalmente o campo de velocidade da fase líquida. Foram gerados dois pequenos vórtices, um na base e outro no topo da coluna, quatro outros de maior tamanho sendo que dois acima e dois abaixo da posição dos internos, além de outros pequenos vórtices ao redor dos internos. Verifica-se também um grande aumento da velocidade do líquido associada ao elemento inferior dos internos que provoca um jato sobre o seu elemento superior. Assim, a Figura 3(b) mostra claramente uma segregação do escoamento na coluna causada pela presença dos internos.

O estudo da capacidade de mistura nas duas colunas foi realizado pelo monitoramento de um traçador na fase líquida, implementado no CFX 10.0 como uma variável adicional adimensional. Um pulso deste traçador é imposto na entrada de líquido através da equação (7) com $A = 1 \times 10^5$ e $t_0 = 1$ s, partindo-se as simulações dos estados quase-estacionários de ambas as colunas. As Figuras 5 e 6 mostram os gráficos de contorno do traçador para alguns instantes de tempo durante a simulação do escoamento nas colunas sem e com internos, respectivamente.

A Figura 5 mostra que o traçador se dispersa rapidamente na coluna sem internos, estando uniformemente distribuído em aproximadamente 19 s da sua injeção. Comparativamente a Figura 6 mostra a dispersão do traçador na coluna de borbulhamento com internos, onde se observa que o mesmo se dispersa com muito mais dificuldade. Após 55 s de simulação, a coluna fica dividida em duas regiões, uma acima e outra abaixo dos internos, que tem concentrações do traçador praticamente homogêneas, mas diferentes entre si. Assim, vê-se claramente que os internos provocaram o desejado gradiente de concentração do traçador ao longo da altura da coluna.

5. Conclusões

Simulações fluidodinâmicas transientes usando o modelo de dois fluidos e o modelo de turbulência $k-\epsilon$ foram realizadas para colunas de borbulhamento com pequena altura com e sem uma única unidade de uma nova proposta de internos. As condições de simulação corresponderam à operação em regime de borbulhamento homogêneo, com gás e líquido alimentados continuamente em contra-corrente. Simulações bidimensionais axialmente simétricas foram utilizadas para a redução do custo computacional, sendo necessário modelar a saída de líquido através de um termo fonte na base da coluna.

Dos resultados das simulações pode-se concluir que:

- Ambas as configurações de colunas atingem estados pseudo-estacionários em 10-15 segundos, sendo que para a coluna de borbulhamento com internos as variáveis fluidodinâmicas são praticamente constantes.
- A pluma de gás ascende preferencialmente pelo seio da coluna sem internos enquanto que os internos são capazes de deslocar a pluma para a região próxima à parede. Há um aprisionamento significativo de gás pela presença dos internos com o conseqüente aumento da retenção gasosa global e do tempo de residência médio do gás.
- A presença de internos na coluna de borbulhamento modifica significativamente o campo de velocidade na fase líquida, separando a coluna em duas regiões que tem recirculações de líquido mais intensas do que a da coluna sem internos.
- Os internos são efetivos em gerar gradientes de concentração entre as regiões da coluna que eles separam, conforme mostrado para os resultados de propagação de um traçador, cujo tempo de mistura na coluna com internos é mais de três vezes superior ao da coluna sem internos.

Os resultados obtidos nesse trabalho mostraram-se concordantes com os dados experimentais obtidos por Pandit e Doshi (2005) que também observaram a estratificação de um traçador em uma coluna de borbulhamento com outro tipo de internos.

Assim, conclui-se que o tipo de internos proposto é efetivo para gerar gradientes de concentração ao longo de uma coluna de borbulhamento, o que permitirá o aproveitamento de todo o potencial da mesma como contactor gás-líquido contínuo em aplicações de esgotamento de voláteis.

6. Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer ao CNPq (processo no. 301548/2005-6) pelo suporte financeiro necessário para realização desse trabalho.

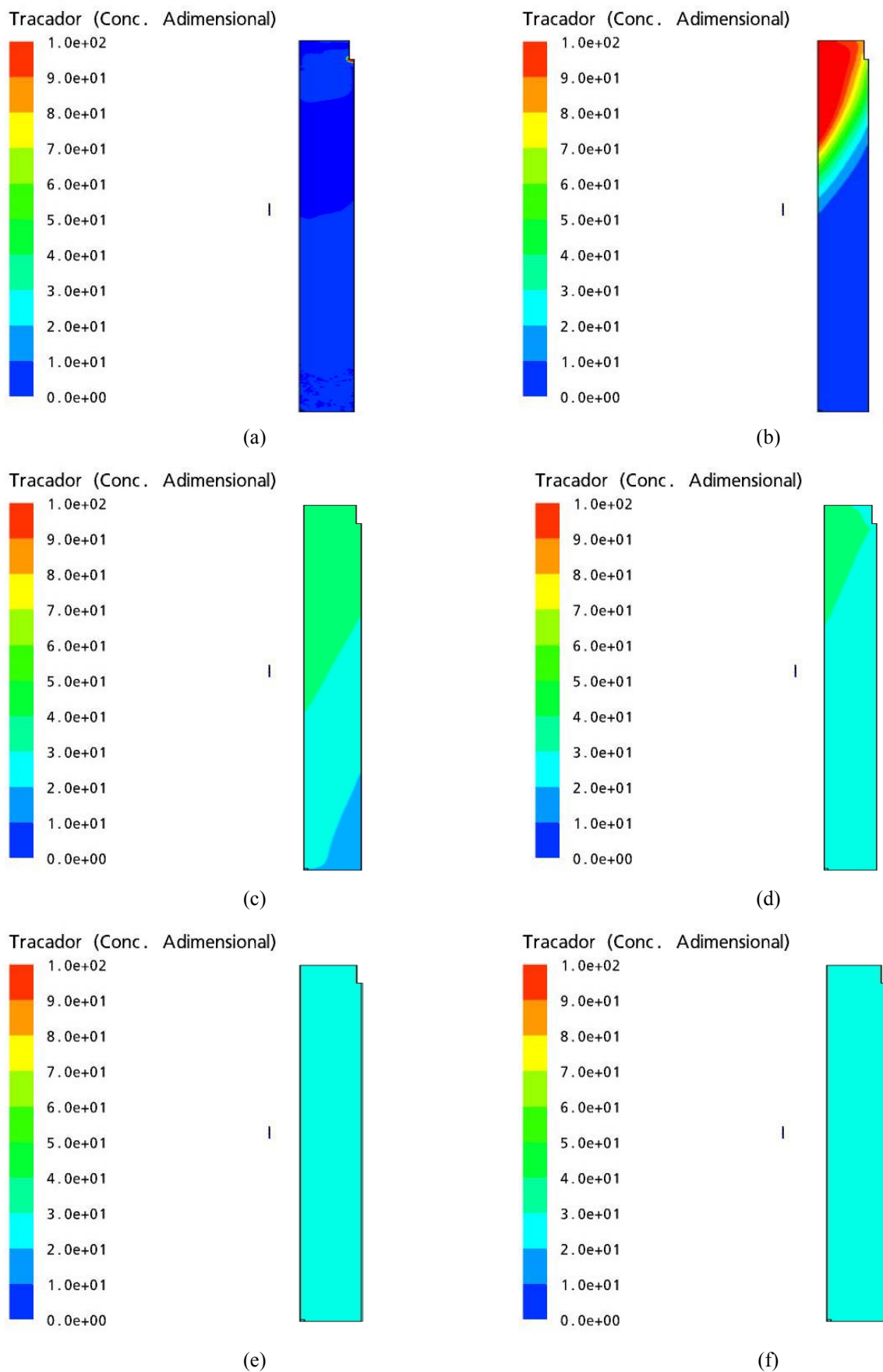


Figura 5. Dispersão do traçador ao longo do tempo na coluna sem internos para os tempos (a) 0,1 s, (b) 2,0 s, (c) 10,0 s, (d) 18,0 s, (e) 19,0 s e (f) 55,0 s

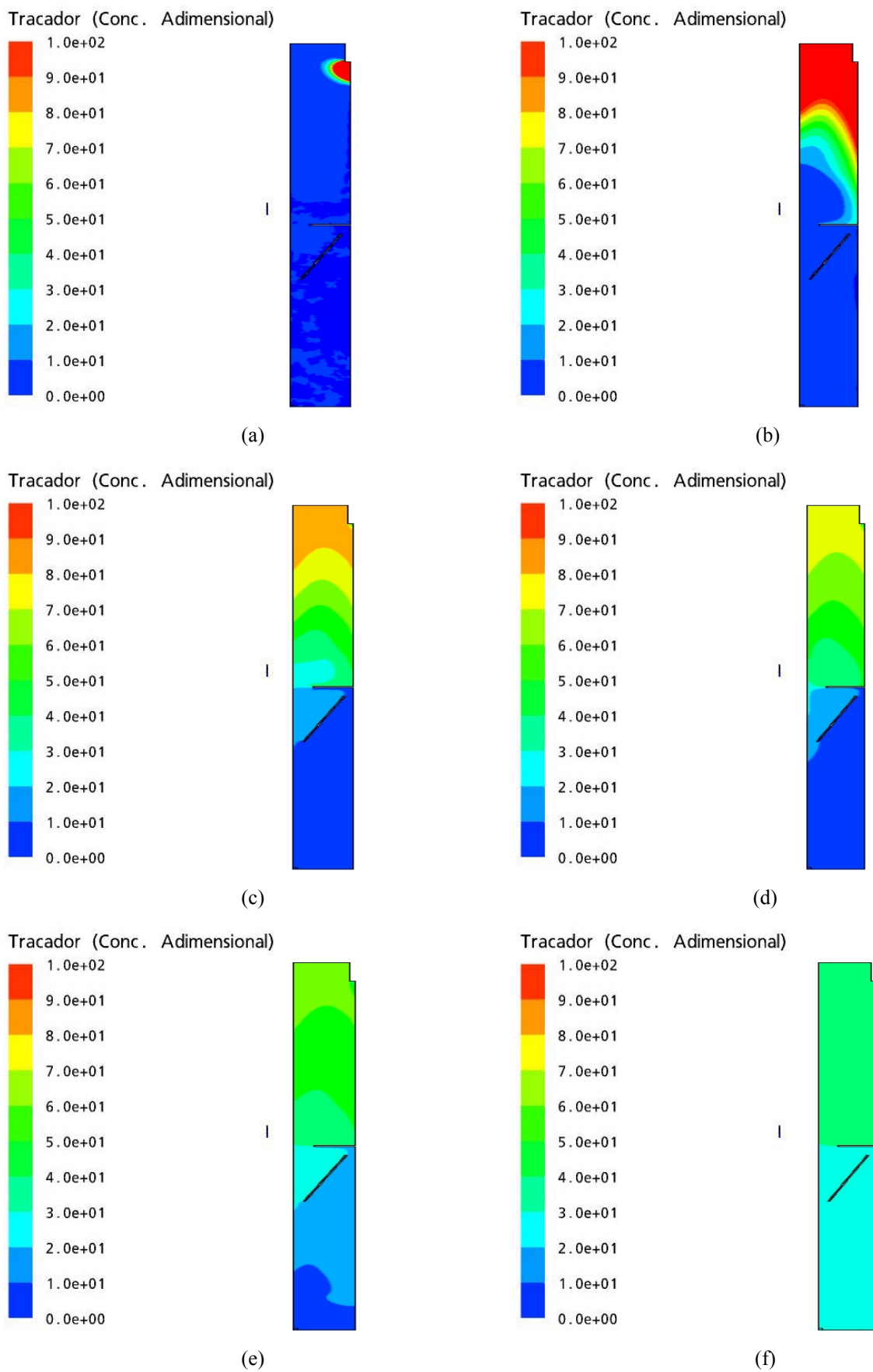


Figura 6. Dispersão do traçador ao longo do tempo para a coluna com internos para (a) 0,1 s, (b) 2,0 s, (c) 10,0 s, (d) 18,0 s, (e) 25,0 s e (f) 55,0 s

7. Referências

- Borchers, O., Busch, C., Sokolichin, A., Eigenberger, G., 1999, "Applicability of the standard k- ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns. Part II: Comparison of detailed experiments and flow simulations, Chemical Engineering Science 54, 5927-5935.
- C. P. Ribeiro Jr. e P. L. C. Lage, 2004, "Estudo experimental da distribuição do tamanho de bolhas em evaporador de contato direto" Braz. J. Chem. Eng. v.21 n.1 São Paulo jan./mar. 2004
- Deckwer, W. D. e Schumpe, A., 1993, "Improved tools for bubble column reactor design and scale-up", Chemical Engineering Science, Vol. 48, pp. 889-911.
- Devanathan, N., Dudukovic, M. P., Lapin, A., Lübbert, A., 1995, Caothic flow in bubble column reactors, Chemical Engineering Science 50(16), 2661-2667.
- Pandit, A.B e Doshi, Y. K., 2005, "Mixing Time Studies in Bubble Column Reactor with and without Internals", International Journal of Chemical Reactor Engineering, Volume 3, Article A22.
- R. Clift, J.R. Grace and M.E. Weber., 1978, "Bubbles, drops and particles", International Journal of Multiphase Flow, Volume 5, Issue 3, June 1979, pp. 229-230
- Rodrigues, Ricardo C., 2005, "Estudo do aumento de escala do processo de esgotamento de aromas em colunas de borbulhamento usando fluidodinâmica computacional", Dissertação de Mestrado, Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ.
- Sokolichin, A., Eigenberger, G., 1999, "Applicability of the standard k- ϵ turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns. Part I. Detailed numerical simulations", Chemical Engineering Science 54, 2273-2284.
- Van Baten, J.M e Krishna, R, 2003, "Scale up studies on partitioned bubble column reactors with the aid of CFD simulations", Catalysis Today, Vol. 79-80, pp. 67-75.
- Van Baten, J.M e Krishna, R, 2002, "Gas and Liquid phase mass transfer within KATAPAK-S structures studies using CFD simulations", Chemical Engineering Science 57, 1531-1536
- Wild, G., Poncin, S., Li, H. Z., Olmos, E., 2003, "Some aspects of the hydrodynamics of bubbles columns", International Journal of Chemical Reactor Engineering, Volume 1, Review R7.

CFD ANALYSIS OF THE EFFICIENCY OF A NEW PACKING FOR BUBBLE COLUMNS

Robson Rodrigues Mororó

Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, Brasil. Tel 55-21-25470466

Robson@peq.coppe.ufrj.br

Ricardo Carvalho de Rodrigues

Programa de Engenharia Química-COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, P.O. Box 68502, 21945-970 Rio de Janeiro, RJ, Brasil. Fax: 55-21-25628300, ricardo@peq.coppe.ufrj.br

Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Programa de Engenharia Química-COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro P.O. Box 68502, 21945-970 Rio de Janeiro, RJ, Brasil. Fax: 55-21-25628300, paulo@peq.coppe.ufrj.br

Abstract

Bubble columns with internals are becoming very attractive for applications for which small back mixing in the liquid phase is desired, as in the case of stripping of organic volatile compounds from aqueous solutions. The effect caused by the placement of internals in an isothermal bubble columns operating in the homogeneous bubbling regime was analysed by transient two-dimensional CFD simulations. The two-fluid model, using the k- ϵ turbulence model for the liquid phase, implemented in ANSYS CFX 10.0 software was used in the simulations. The mixing time in the liquid phase was studied through the transient dispersion of a pulse of a tracer in the liquid phase inlet for columns without and with internals. The mixing time in both columns were compared and it was verified that the column without internals had a mixing time much smaller than that for the columns with the proposed internals.

Keywords: Bubble columns, internals, tracer, CFD, stripping