

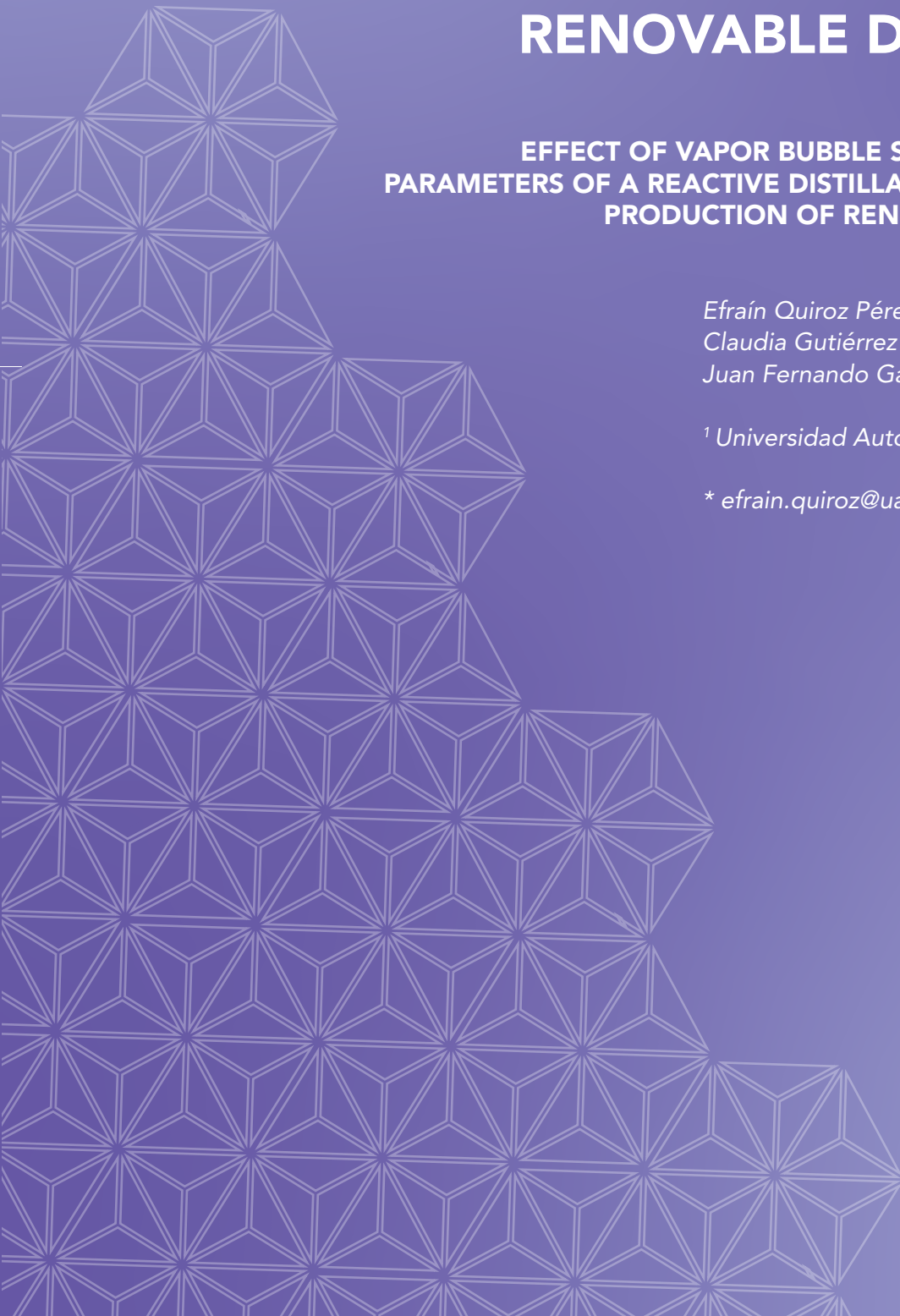
## EFECTO DEL TAMAÑO DE LAS BURBUJAS DE VAPOR EN LOS PARÁMETROS HIDRÁULICOS DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN REACTIVA PARA LA PRODUCCIÓN DE COMBUSTIBLE RENOVABLE DE AVIACIÓN

EFFECT OF VAPOR BUBBLE SIZE ON THE HYDRAULIC PARAMETERS OF A REACTIVE DISTILLATION COLUMN FOR THE PRODUCTION OF RENEWABLE AVIATION FUEL

Efraín Quiroz Pérez<sup>1\*</sup>  
Claudia Gutiérrez Antonio<sup>1</sup>  
Juan Fernando García Trejo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Autónoma de Querétaro, México

\* efrain.quiroz@uaq.mx





## RESUMEN

La destilación reactiva es una tecnología intensificada que ha demostrado ventajas económicas y operacionales en la producción del combustible renovable de aviación. En dicho procedimiento, las reacciones de conversión, así como la separación de los productos, se llevan a cabo en una columna de destilación con catalizador sólido. En una de las configuraciones poco estudiadas de estos sistemas se colocan contenedores de catalizador sobre la base de los platos perforados de la columna; ello ofrece beneficios en cuanto al rendimiento y selectividad de las operaciones de reacción-separación. En este trabajo se presenta un modelo basado en CFD para la simulación de un plato perforado con contenedores de catalizador que funciona bajo las condiciones operativas de una columna de destilación reactiva utilizada en la producción de combustible renovable de aviación. En este caso se consideró el modelado de un flujo líquido-vapor no isotérmico a través de dicho sistema. El modelo desarrollado se utilizó para analizar el efecto del tamaño de las burbujas de vapor sobre

*El presente estudio muestra una serie de observaciones conseguidas tras el diseño experimental de un sistema con el cual se sometieron a prueba distintos parámetros del proceso que permite obtener combustible renovable de aviación.*

dos de los parámetros hidráulicos más importantes en platos perforados: la altura de líquido claro y la velocidad de la espuma. A partir del análisis de los resultados obtenidos, se concluye que el modelo es capaz de representar con un buen grado de precisión el comportamiento experimental reportado para un sistema similar. Además, se observó que los diseños de plato que producen burbujas más grandes promueven una mayor altura de líquido claro y una menor velocidad de la espuma en el plato. Ello im-

plica un mayor tiempo de contacto y una mejor interacción entre las fases, lo cual se traduce en un incremento en las velocidades de las reacciones de conversión y en la eficiencia de separación de los productos.

**Palabras clave:** altura de líquido claro, CFD, combustible renovable de aviación, plato con contenedores de catalizador, velocidad de la espuma.

## ABSTRACT

Reactive distillation is an intensified technology that has demonstrated interesting economical and operational advantages in the production of renewable aviation fuel. In reactive distillation, conversion reactions as well as separation of products take place in a distillation column with solid catalyst. In one of the less-studied configurations of these type of systems, catalyst containers are placed on the floor of the sieve trays of the column; this is advantageous in reaction-separation operations from the point of view of selectivity and conversion. This paper presents a CFD-based model for the simulation of a sieve tray with catalyst containers working under the operating conditions of a column used for the production of renewable aviation fuel through reactive distillation. Modeling of a non-isothermal liquid-vapor flow through the system was considered in this case. The developed model was used to analyze the effect of the vapor bubble size on two of the most important hydraulic parameters in sieve trays: clear liquid height and froth velocity. From the analysis of the obtained results, it can be concluded that the model is capable to provide a fairly good agreement with the observed ex-

perimental behavior reported for a similar system. In addition, it was observed that those tray designs that produce bigger bubbles tend to promote a higher clear liquid height and a lower froth velocity. This implies a higher contact time as well as a better interaction between both phases, which in turn promotes an increase in the conversion reaction rates and the separation efficiency of the products.

**Keywords:** clear liquid height, CFD, renewable aviation fuel, tray with catalyst containers, froth velocity.

## INTRODUCCIÓN

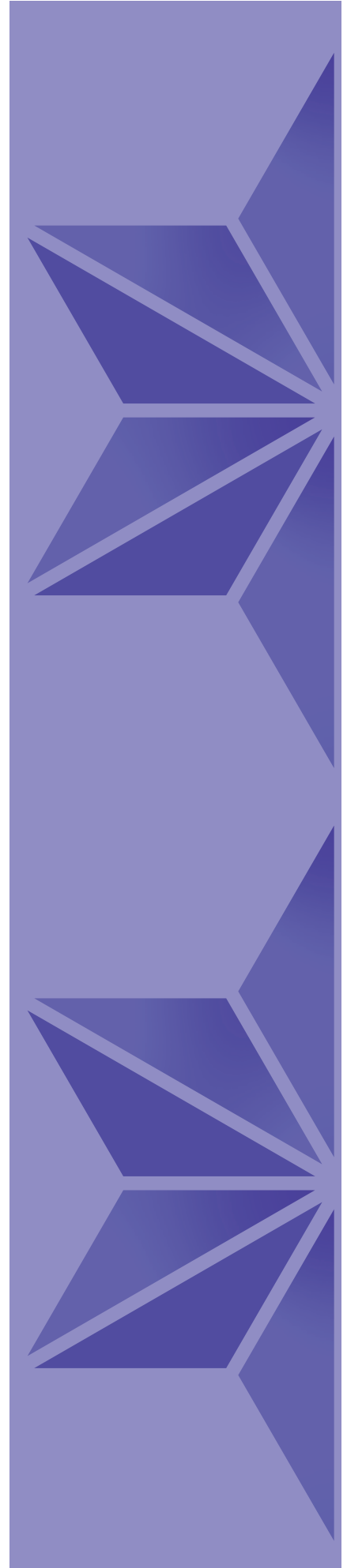
La Asociación Internacional de Transporte Aéreo (IATA, por sus siglas en inglés) ha identificado a la industria del combustible renovable de aviación como la alternativa más promisoría para alcanzar un desarrollo sostenible del sector aéreo mediante la reducción en las emisiones de gases de efecto invernadero, como el  $\text{CO}_2$  [1]. De entre todas las rutas existentes para la obtención de este biocombustible, el hidrotratamiento de triglicéridos es la que ha experimentado un desarrollo más rápido; esta representa alrededor del 2.4 % de la producción mundial [2]. Además, está certificada por la Sociedad Americana de Pruebas y Materiales (ASTM, por sus siglas en inglés) para su uso comercial [3].

En el hidrotratamiento de triglicéridos, una corriente de estas materias primas se alimenta a un reactor que opera a altas presión y temperatura, en el cual se convierte en hidrocarburos de cadena larga en presencia de un catalizador sólido a través de las reacciones de desoxigenación y descarbonización. Los productos resultantes se alimentan a un segundo reactor

para producir hidrocarburos de cadenas más cortas mediante las reacciones catalíticas de craqueo e isomerización, en un rango de C8 y C16, el cual corresponde al combustible renovable de aviación. En esta etapa se producen, también, gases ligeros, naftas y diésel verde, los cuales son usualmente separados por destilación [4].

La destilación reactiva heterogénea es una de las estrategias recientemente propuestas para intensificar el hidrotratamiento de triglicéridos. Tanto las reacciones de craqueo e isomerización, como la separación de los hidrocarburos producidos se llevan a cabo en una columna de destilación con catalizador sólido colocado dentro de la misma. En investigaciones anteriores se ha demostrado que esta estrategia es capaz de promover un incremento en los rendimientos del combustible renovable de aviación y una reducción en la presión de operación y el impacto ambiental del proceso [5, 6].

Con respecto al catalizador sólido, este puede colocarse de dos maneras distintas: como empaques en las columnas de destilación reactiva o en diferentes arreglos en los platos perforados de las mismas [7, 8]. Se ha demostrado en diversos estudios que este último arreglo promueve cargas de líquido y tiempos de residencia más altos en comparación con los empaques; ello ofrece ventajas en las operaciones de reacción-separación desde el punto de vista de conversión y selectividad [8, 9]. Una de las configuraciones más interesantes para este tipo de sistemas es aquella en la que se colocan contenedores de catalizador sobre la base de un plato perforado. Los contenedores se sitúan perpendiculares al flujo de la fase líquida y esta fluye a través de los espacios





entre ellos. Este arreglo produce una caída de presión más baja en comparación con los diseños de platos en los cuales una o ambas fases circulan a través de los empaques de catalizador. A pesar de ello, los platos perforados con empaques de catalizador no se han estudiado a fondo desde la perspectiva de diseño y eficacia.

El desempeño de los platos perforados en las columnas de destilación reactiva puede determinarse a partir del análisis de algunos parámetros hidráulicos, tales como la altura de líquido claro (*clear liquid height*) y la velocidad de la espuma (*froth velocity*) [10, 11]. Dichos factores dependen en gran medida de la forma en que las burbujas de vapor se distribuyen por la zona activa de los platos. En este sentido, el tamaño de las burbujas a su vez depende del diámetro de los orificios localizados en la base de los platos.

La relación entre los parámetros hidráulicos en los platos de las columnas convencionales y el diseño de los mismos puede analizarse desde dos perspectivas distintas: estudios experimentales y modelos teóricos. Los estudios experimentales sobre el diseño y el análisis de equipos ingenieriles por lo general requieren de un número considerable de pruebas para controlar las condiciones operativas relevantes. Con el fin de reducir el consumo de tiempo y el costo de estas pruebas, se ha propuesto el uso de modelos basados en la dinámica computacional de fluidos (CFD, por sus siglas en inglés). La CFD ha demostrado ser una herramienta computacional robusta y eficaz para propósitos de investigación, pues proporciona un mejor entendi-

miento de los complejos fenómenos físicos y químicos y permite obtener una predicción acertada respecto al desempeño de varios diseños en el análisis y la evaluación de nuevos equipos [12-14].

Con base en los puntos anteriores, en este trabajo se presenta un modelo basado en CFD para la simulación de contenedores de catalizador en un plato perforado que trabaja bajo las condiciones operativas de una columna de destilación reactiva utilizada en la producción de combustible renovable de aviación. Se consideró, además, el modelado de un flujo líquido-vapor no isotérmico a través de dicho sistema. El modelo CFD se utilizó para analizar el efecto del tamaño de las burbujas de vapor sobre dos de los parámetros hidráulicos más importantes en platos perforados: altura de líquido claro y la velocidad de la espuma.

## METODOLOGÍA

En esta sección se describen en términos generales las etapas que conlleva el desarrollo del modelo basado en CFD, que representa el flujo líquido-vapor no isotérmico a través de un plato perforado con contenedores de catalizador.

### GENERACIÓN DEL DOMINIO COMPUTACIONAL

La geometría que representa el plato perforado con contenedores de catalizador analizado en este trabajo fue generada en el paquete comercial ANSYS® Design-Modeler™. Para la generación del dominio computacional se consideró un plato representativo con contenedores de catalizador, los

cuales se sostienen a la base del plato por medio de una serie de clips de soporte. Se incluyó un primer plato sin contenedores de catalizador sobre el plato representativo, mientras que el bajante de un segundo plato sin catalizador se colocó debajo del mismo. Estas consideraciones geométricas se hicieron con el fin de proporcionar condiciones de flujo apropiadas para las fronteras (entrada y salida) del plato representativo con contenedores de catalizador. Un diagrama del dominio computacional descrito, incluyendo sus principales componentes individuales, se presenta en la Figura 1.

El diseño del plato representativo se obtuvo a partir de las pautas y la metodología de diseño propuestas en [8, 10, 11]. La información requerida para la aplicación de dicha metodología se obtuvo a partir del trabajo presentado en [5] sobre la producción de combustible renovable de aviación por medio de destilación reactiva. En ese estudio, los autores propusieron el uso de una columna de destilación con un catalizador sólido para llevar a cabo las reacciones de craqueo e isomerización, así como la separación de la mezcla de hidrocarburos producida. El diámetro del plato representativo analizado en este caso se calculó considerando los flujos máxicos más altos de las fases líquida y vapor en la zona reactiva de la columna: 13 320.2 kg/h y 13 364.7 kg/h, respectivamente. En la base de las pautas y las metodologías de diseño utilizadas se considera que, si un plato opera correctamente con los flujos máxicos de líquido y vapor, también lo hará al trabajar con flujos máxicos más bajos.

Las dimensiones geométricas del plato representativo analizado se presentan en la Tabla 1. Para esta investigación se consideraron dos valores diferentes para el diámetro de los orificios de entrada vapor: 0.00635 m (diseño STC1) y 0.0127 m (diseño STC2), con el objetivo de analizar el efecto de diferentes diámetros de burbuja en los parámetros hidrodinámicos de los platos

en la columna. Además, para un mismo diseño de plato se consideraron distintos valores para la altura del rebosadero y, consecuentemente, la longitud debajo del bajante.

#### ECUACIONES GOBERNANTES

Se seleccionó el enfoque euleriano de dos fases para repre-

sentar los efectos térmicos e hidrodinámicos más significativos en el plato representativo con contenedores de catalizador: el flujo simultáneo de las fases líquida y vapor, el mezclado y la energía transferida entre ambas fases. Desde dicha perspectiva, una de las fases es considerada como la continua, y la otra como dispersa.

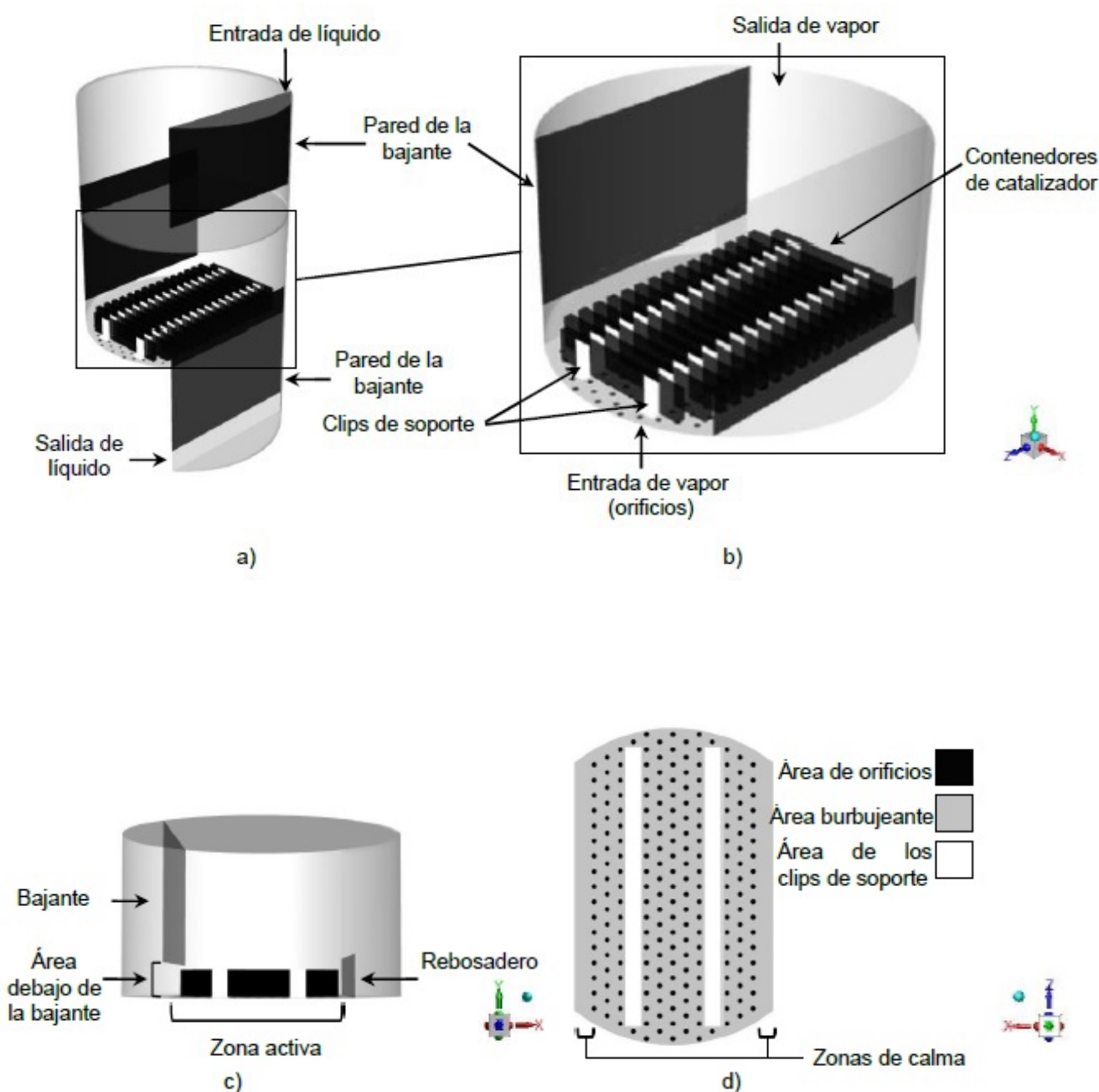


Figura 1. Dominio computacional del plato representativo: a) dominio completo, b) vista ampliada del plato representativo, c) vista lateral del plato representativo, d) vista de la base del plato representativo.



Tabla 1. Dimensiones geométricas para los diseños de plato considerados en este trabajo.

DIMENSIONES GEOMÉTRICAS	DISEÑO STC1	DISEÑO STC2
DIÁMETRO DEL PLATO (M)	0.980	0.980
ESPACIAMIENTO ENTRE PLATOS (M)	0.4572	0.4572
DIÁMETRO DE ORIFICIOS DE VAPOR (M)	0.00635	0.0127
ÁREA NETA (M <sup>2</sup> )	0.6073	0.6073
ÁREA BURBUJEANTE (M <sup>2</sup> )	0.5216	0.4877
ÁREA DE ORIFICIOS DE VAPOR (M <sup>2</sup> )	0.0113	0.0452
ÁREA DEL BAJANTE (M <sup>2</sup> )	0.1470	0.1470
ÁREA DE LOS CLIPS DE SOPORTE (M <sup>2</sup> )	0.0744	0.0744
ALTURA DEL REBOSADERO (M)	0.0889 <sup>a</sup>	0.0889 <sup>a</sup>
	0.1016 <sup>b</sup>	0.1016 <sup>b</sup>
	0.1143 <sup>c</sup>	0.1143 <sup>c</sup>
LONGITUD DEL REBOSADERO (M)	0.7068	0.7068
LONGITUD DEBAJO DEL BAJANTE (M)	0.07112 <sup>a</sup>	0.07112 <sup>a</sup>
	0.08128 <sup>b</sup>	0.08128 <sup>b</sup>
	0.09144 <sup>c</sup>	0.09144 <sup>c</sup>
ESPACIAMIENTO ENTRE LOS ORIFICIOS DE VAPOR (M)	0.0381	0.0381
NÚMERO DE CONTENEDORES DE CATALIZADOR (-)	23	23
ALTURA DE CONTENEDORES DE CATALIZADOR (M)	0.07	0.07
ESPESOR DE CONTENEDORES DE CATALIZADOR (M)	0.02	0.02
LONGITUD DE CONTENEDORES DE CATALIZADOR (M)	0.54 <sup>d</sup>	0.54 <sup>d</sup>
	0.30 <sup>e</sup>	0.30 <sup>e</sup>
	0.40 <sup>f</sup>	0.40 <sup>f</sup>
	0.50 <sup>g</sup>	0.50 <sup>g</sup>

<sup>a, b, c</sup> Dado que para los diseños de plato STC1 y STC2 se consideraron tres diferentes alturas del rebosadero, se muestran los valores correspondientes de la longitud debajo del bajante.

<sup>d, e, f, g</sup> Longitud de los contenedores de catalizador colocados en diferentes posiciones del plato: centro (d), extremos izquierdo y derecho (últimos (e), penúltimos (f) y antepenúltimos (g)).

En general, existen dos regímenes de flujo líquido-vapor en los platos perforados a escala industrial: aspersión (*spray*) y espuma (*froth*). Con base en los valores de los flujos máxicos de líquido y vapor presentados en la sección Generación del dominio computacional, se consideró que el régimen de espuma era el mecanismo de flujo multifásico gobernante; es decir, la corriente líquida se tomó como la fase continua y las burbujas de vapor como la dispersa. A continuación, se presentan las ecuaciones que conforman este modelo.

En primer lugar, se plantea la ecuación de continuidad para cada una de las fases, la cual representa la conservación de la masa en el sistema de estudio:

$$\nabla \cdot (\alpha_L \rho_L \vec{v}_L) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\alpha_V \rho_V \vec{v}_V) = 0 \quad (2)$$

donde los subíndices  $V$  y  $L$  se refieren a las fases vapor y líquida, respectivamente,  $\alpha$  es la fracción volumen,  $\rho$  es la densidad,  $\vec{v}$  es la velocidad y  $t$  es el tiempo.

De manera similar que en la conservación de masa, debe plantearse una ecuación de *momentum* para cada fase, la cual representa un balance entre las fuerzas que actúan sobre un elemento de fluido. De esta forma, las ecuaciones de *momentum* para un sistema euleriano líquido-vapor en un flujo turbulento son:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\alpha_L \rho_L \vec{v}_L \vec{v}_L) &= -\alpha_L \nabla p \\ + \nabla \cdot [\alpha_L \mu_{\text{eff},L} (\nabla \vec{v}_L + (\nabla \vec{v}_L)^T)] \\ + \alpha_L \rho_L \vec{g} + \vec{F}_{L-V} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\alpha_V \rho_V \vec{v}_V \vec{v}_V) &= -\alpha_V \nabla p \\ + \nabla \cdot \left[ \alpha_V \mu_{\text{eff},V} \left( \nabla \vec{v}_V + (\nabla \vec{v}_V)^T \right) \right] \\ + \alpha_V \rho_V \vec{g} + \vec{F}_{V-L} \end{aligned} \quad (4)$$

donde  $\rho$  es la presión del sistema,  $\vec{g}$  es el vector de aceleración gravitacional,  $\vec{F}_{L-V}$  y  $\vec{F}_{V-L}$  representan la transferencia de *momentum* asociada a las fuerzas que actúan sobre una fase debido a su interacción con la otra fase (fuerzas interfaciales) y  $\mu_{\text{eff}}$  es la viscosidad efectiva, que depende de la viscosidad molecular ( $\mu$ ) y la viscosidad turbulenta ( $\mu_t$ ) de acuerdo con la siguiente relación:

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad (5)$$

Las ecuaciones de energía para cada una de las fases en el sistema euleriano líquido-vapor a representar son:

$$\nabla \cdot (\alpha_L \rho_L \vec{v}_L h_L) = -\nabla \cdot (-k_L \nabla T) + \vec{Q}_{L-V} \quad (6)$$

$$\nabla \cdot (\alpha_V \rho_V \vec{v}_V h_V) = -\nabla \cdot (-k_V \nabla T) + \vec{Q}_{V-L} \quad (7)$$

donde  $h$  es la entalpía específica,  $k$  es la conductividad térmica y los términos  $\vec{Q}_{L-V}$  y  $\vec{Q}_{V-L}$  representan la magnitud del calor transferido entre las fases líquida y vapor.

La entalpía específica para una fase  $q$  (ya sea líquido o vapor) se modela de la siguiente manera:

$$h = \int_{T_{\text{ref}}}^T C_{P,q} dT \quad (8)$$

donde  $C_p$  es la capacidad calorífica específica,  $T$  es la temperatura y  $T_{\text{ref}}$  es la temperatura de referencia.

La suma de las fracciones volumen en las ecuaciones de conservación presentadas anteriormente (Ecs. 1-4, 6 y 7) debe ser igual a 1.

Existen términos importantes en las ecuaciones 3 a 7 que

deben modelarse:  $\vec{F}_{L-V}$ ,  $\vec{F}_{V-L}$ ,  $\mu_t$ ,  $\vec{Q}_{L-V}$  y  $\vec{Q}_{V-L}$ . Su modelado se describe a continuación.

### MODELADO DE LA TRANSFERENCIA DE MOMENTUM INTERFACIAL

La transferencia de *momentum* interfacial ocurre debido a las fuerzas interfaciales. Ya que estas fuerzas son iguales en magnitud pero opuestas en dirección entre ambas fases, la suma total de las mismas es igual a cero, es decir:

$$\vec{F}_{V-L} = -\vec{F}_{L-V} = \vec{F}_D \quad (9)$$

donde  $\vec{F}_D$  es la fuerza de arrastre interfacial. La siguiente forma general se utiliza para modelar la fuerza de arrastre entre las fases líquida y vapor [15]:

$$\begin{aligned} \vec{F}_D &= K_{VL} (\vec{v}_V - \vec{v}_L) \\ &= \frac{\rho_V f}{6\tau_V} d_V A_i (\vec{v}_V - \vec{v}_L) \end{aligned} \quad (10)$$

donde  $K_{VL}$  corresponde al coeficiente de intercambio de *momentum* interfacial,  $f$  es la función de arrastre,  $d_V$  es el diámetro de burbuja,  $A_i$  es la concentración de área interfacial y  $\tau_V$  es el tiempo de relajación de las partículas.

Los términos  $A_i$  y  $\tau_V$  son modelados de esta manera:

$$A_i = \frac{6\alpha_V}{d_V} \quad (11)$$

$$\tau_V = \frac{\rho_V d_V^2}{18\mu_L} \quad (12)$$

En este trabajo, se utilizó el modelo de Schiller y Naumann [16] para definir la función de arrastre ( $f$ ).

Este ha sido empleado con éxito en el análisis y modelado de flujos multifásicos en diferentes configuraciones de platos [17-19]. La función de arrastre está dada por:

$$f = \frac{C_D \text{Re}}{24} \quad (13)$$

donde  $C_D$  es el coeficiente de arrastre, el cual, a su vez, está dado por:

$$C_D \begin{cases} 24(1 + 0.15 \text{Re}^{0.687}) / \text{Re} & ; \text{Re} \leq 1000 \\ 0.44 & ; \text{Re} > 1000 \end{cases} \quad (14)$$

y  $\text{Re}$  es el número de Reynolds relativo, que se calcula como se muestra a continuación:

$$\text{Re} = \frac{\rho_L (\vec{v}_V - \vec{v}_L) d_V}{\mu_L} \quad (15)$$

### MODELADO DE LA TRANSFERENCIA DE ENERGÍA INTERFACIAL

La tasa volumétrica de energía transferida entre ambas fases ( $\vec{Q}_{V-L}$ ) se modela como una función dependiente de la diferencia de temperaturas entre las fases y el área interfacial ( $A_i$ ):

$$\vec{Q}_{V-L} = -\vec{Q}_{L-V} = h_{VL} A_i (T_V - T_L) \quad (16)$$

donde  $h_{VL}$  es el coeficiente volumétrico de transferencia de calor entre las fases líquida y vapor.

Este parámetro depende de algunas propiedades de ambas fases, como la conductividad térmica de la fase líquida ( $k_L$ ), el diámetro y el número de Nusselt de la fase vapor ( $\text{Nu}_V$ ), expresado de la siguiente forma:

$$h_{VL} = \frac{k_L \text{Nu}_V}{d_V} \quad (17)$$

En este trabajo, el coeficiente de transferencia de calor interfacial se calcula por medio del modelo de Ranz y Marshall [20], que ha sido utilizado en estudios computacionales sobre platos perforados donde la fase vapor es considerada como la fase dispersa [21, 22]. En este modelo, el número de Nusselt de la fase vapor se calcula por medio de la siguiente expresión:

$$\text{Nu}_V = 2.0 + 0.6 \text{Re}^{1/2} \text{Pr}^{1/3} \quad (18)$$



para:  $0 \leq \text{Re} < 200, 0 \leq \text{Pr} < 250$

donde  $Pr$  es el número de Prandtl de la fase líquida y se calcula de la siguiente forma:

$$\text{Pr} = \frac{C_{P,L}\mu_L}{k_L} \quad (19)$$

### MODELADO DE LA TURBULENCIA

Para que las ecuaciones del enfoque euleriano puedan resolverse, se requiere un modelo de turbulencia apropiado para el cálculo de la viscosidad turbulenta. Los modelos más utilizados en simulaciones ingenieriles a escala industrial ofrecen un adecuado compromiso entre la capacidad descriptiva de las variables turbulentas y el costo computacional requerido para su ejecución [9, 22]. En este trabajo, se utilizó el modelo  $\kappa - \varepsilon$  para modelar la contribución turbulenta de cada fase. La viscosidad turbulenta ( $\mu_t$ ) se calcula como la relación entre la energía cinética turbulenta ( $\kappa$ ) y la tasa de disipación de la misma ( $\varepsilon$ ):

$$\mu_{t,L} = C_\mu \rho_L \left( \frac{\kappa_L^2}{\varepsilon_L} \right) \quad (20)$$

$$\mu_{t,V} = C_\mu \rho_V \left( \frac{\kappa_V^2}{\varepsilon_V} \right) \quad (21)$$

Los valores de  $\kappa$  y  $\varepsilon$  para cada una de las fases se obtienen directamente de la solución de las ecuaciones diferenciales de transporte para la energía cinética turbulenta y su tasa de disipación. La energía cinética turbulenta para las fases líquida y vapor se calcula a partir de las ecuaciones 22 y 23, respectivamente:

$$\nabla \cdot (\alpha_L \rho_L \vec{U}_L \kappa_L) = \nabla \cdot \left[ \alpha_L \left( \mu_L + \frac{\mu_{t,L}}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa_L \right]$$

$$+ (\alpha_L G_{\kappa,L} - \alpha_L \rho_L \varepsilon_L) + K_{LV} (C_{LV} \kappa_L - C_{VL} \kappa_V)$$

$$- K_{LV} (\vec{U}_L - \vec{U}_V) \bullet \frac{\mu_{t,L}}{\alpha_L \sigma_L} \nabla \alpha_L$$

$$+ K_{LV} (\vec{U}_L - \vec{U}_V) \bullet \frac{\mu_{t,V}}{\alpha_V \sigma_V} \nabla \alpha_V \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\alpha_V \rho_V \vec{U}_V \kappa_V) &= \nabla \cdot \left[ \alpha_V \left( \mu_V + \frac{\mu_{t,V}}{\sigma_V} \right) \nabla \kappa_V \right] \\ &+ (\alpha_V G_{\kappa,V} - \alpha_V \rho_V \varepsilon_V) + K_{LV} (C_{LV} \kappa_L - C_{VL} \kappa_V) \\ &- K_{LV} (\vec{U}_L - \vec{U}_V) \bullet \frac{\mu_{t,L}}{\alpha_L \sigma_L} \nabla \alpha_L \\ &+ K_{LV} (\vec{U}_L - \vec{U}_V) \bullet \frac{\mu_{t,V}}{\alpha_V \sigma_V} \nabla \alpha_V \quad (23) \end{aligned}$$

Por otro lado, la tasa de disipación de energía turbulenta para las fases líquida y vapor se calcula con ayuda de las ecuaciones 24 y 25:

$$\nabla \cdot (\alpha_L \rho_L \vec{U}_L \varepsilon_L) = \nabla \cdot \left[ \alpha_L \left( \mu_L + \frac{\mu_{t,L}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_L \right]$$

$$+ \alpha_L \rho_L C_1 S \varepsilon_L - C_2 \alpha_L \rho_L \frac{\varepsilon_L^2}{\kappa_L + \sqrt{v_{t,L} \varepsilon_L}}$$

$$c_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon_L}{\kappa_L} [K_{LV} (C_{LV} \kappa_L - C_{VL} \kappa_V)$$

$$- K_{LV} (\vec{U}_L - \vec{U}_V) \bullet \frac{\mu_{t,L}}{\alpha_L \sigma_L} \nabla \alpha_L$$

$$+ K_{LV} (\vec{U}_L - \vec{U}_V) \bullet \frac{\mu_{t,V}}{\alpha_V \sigma_V} \nabla \alpha_V] \quad (24)$$

$$\nabla \cdot (\alpha_V \rho_V \vec{U}_V \varepsilon_V) = \nabla \cdot \left[ \alpha_V \left( \mu_V + \frac{\mu_{t,V}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_V \right]$$

$$+ \alpha_V \rho_V C_1 S \varepsilon_V - C_2 \alpha_V \rho_V \frac{\varepsilon_V^2}{\kappa_V + \sqrt{v_{t,V} \varepsilon_V}}$$

$$c_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon_V}{\kappa_V} [K_{LV} (C_{LV} \kappa_L - C_{VL} \kappa_V)$$

$$- K_{LV} (\vec{U}_L - \vec{U}_V) \bullet \frac{\mu_{t,L}}{\alpha_L \sigma_L} \nabla \alpha_L$$

$$+ K_{LV} (\vec{U}_L - \vec{U}_V) \bullet \frac{\mu_{t,V}}{\alpha_V \sigma_V} \nabla \alpha_V] \quad (25)$$

$\vec{U}$  es la velocidad ponderada para cada fase y  $G_\kappa$  es la producción turbulenta debido a esfuerzos viscosos, la cual está dada por:

$$G_{\kappa,L} = \mu_{t,L} (\nabla \vec{v}_L + (\nabla \vec{v}_L)^T) : \nabla \vec{v}_L \quad (26)$$

$$G_{\kappa,V} = \mu_{t,V} (\nabla \vec{v}_V + (\nabla \vec{v}_V)^T) : \nabla \vec{v}_V \quad (27)$$

$C_\mu$  se calcula como sigue:

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_S \frac{\kappa_{V^*}}{\varepsilon}} \quad (28)$$

donde:

$$U^* = \sqrt{S_{ij} S_{ij} + \tilde{\Omega}_{ij} \tilde{\Omega}_{ij}} \quad (29)$$

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \Omega_{ij} \quad (30)$$

$$\Omega_{ij} = \bar{\Omega}_{ij} - \varepsilon_{ijk} \omega_k \quad (31)$$

$\Omega_{ij}$  es la velocidad media del tensor de rotación en un marco de referencia rotacional con una velocidad angular  $\omega_k$ .  $A_0$  posee un valor constante de 4.04 y  $A_S$  está dada por:

$$A_S = \sqrt{6} \cos \varphi \quad (32)$$

donde:

$$\varphi = \frac{1}{3} \cos^{-1} (\sqrt{6} W) \quad (33)$$

$$W = \frac{S_{ij} S_{jk} S_{ki}}{\tilde{S}^3} \quad (34)$$

$$\tilde{S} = \sqrt{S_{ij} S_{ij}} \quad (35)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (36)$$

El término  $C_{VL}$  posee un valor constante de 2.0, mientras que el término  $C_{LV}$  puede aproximarse de la siguiente forma:

$$C_{LV} = 2 \left( \frac{\eta_{VL}}{1 + \eta_{VL}} \right) \quad (37)$$

donde el término  $\eta_{VL}$  se define matemáticamente como sigue:

$$\eta_{VL} = \frac{\tau_{t,V,L}}{\tau_{F,V,L}} \quad (38)$$

Por su parte, el tiempo característico de relajación de las partículas relacionado con los efectos inerciales que actúan sobre la fase dispersa ( $\tau_{FVL}$ ) se define como:

$$\tau_{F,V,L} = \alpha_V \rho_L K_{VL}^{-1} \left( \frac{\rho_V}{\rho_L} + C_V \right) \quad (39)$$

donde  $C_V$  es el coeficiente de masa añadida, el cual tiene un valor de 0.5. La escala integral de tiempo lagrangiana calculada a través de la trayectoria de las partículas ( $\tau_{FVL}$ ) se define como:

$$\tau_{t,V,L} = \frac{\tau_{t,L}}{\sqrt{1 + C_\beta \xi^2}} \quad (40)$$

donde:

$$\tau_{t,L} = \frac{3}{2} C_\mu \frac{\kappa_L}{\varepsilon_L} \quad (41)$$

$$\xi = \frac{|\vec{v}_{VL}| \tau_{t,L}}{L_{t,L}} \quad (42)$$



$$L_{t,L} = \sqrt{\frac{3}{2}} C_{\mu} \frac{\kappa_L \frac{3}{2}}{\epsilon_L} \quad (43)$$

$$C_{\beta} = 1.8 - 1.35 \cos^2 \theta \quad (44)$$

$\theta$  es el ángulo entre la velocidad media de las partículas y la velocidad media relativa.

Las constantes  $\sigma_{\kappa}$ ,  $\sigma_{\epsilon}$ ,  $C_{1\epsilon}$ ,  $C_{2\epsilon}$  y  $C_{3\epsilon}$  en las ecuaciones 22 a 25 poseen los siguientes valores estándar: 1.0, 1.3, 1.44, 1.92 y 1.2, respectivamente. Estos fueron establecidos con

la finalidad de que el modelo se desempeñe apropiadamente para una gran variedad de flujos [15].

### MALLADO DEL DOMINIO COMPUTACIONAL

El dominio computacional considerado en este trabajo se discretizó en el paquete comercial para la generación de mallas ANSYS® Meshing™. Se aplicó un refinamiento especial en las zonas con altos gradientes

geométricos con el fin de obtener una estimación apropiada de las variables de flujo en dichas regiones (la zona de los orificios de entrada del vapor y la zona en donde se ubican los contenedores de catalizador). Mediante este procedimiento se generaron mallas no estructuradas conformadas por elementos tetraédricos y hexaédricos, las cuales se muestran en la Figura 2. El número de elementos en las mallas resultantes para los diseños STC1 y STC2 son, en orden: 1 334 124 y 1 302 606.

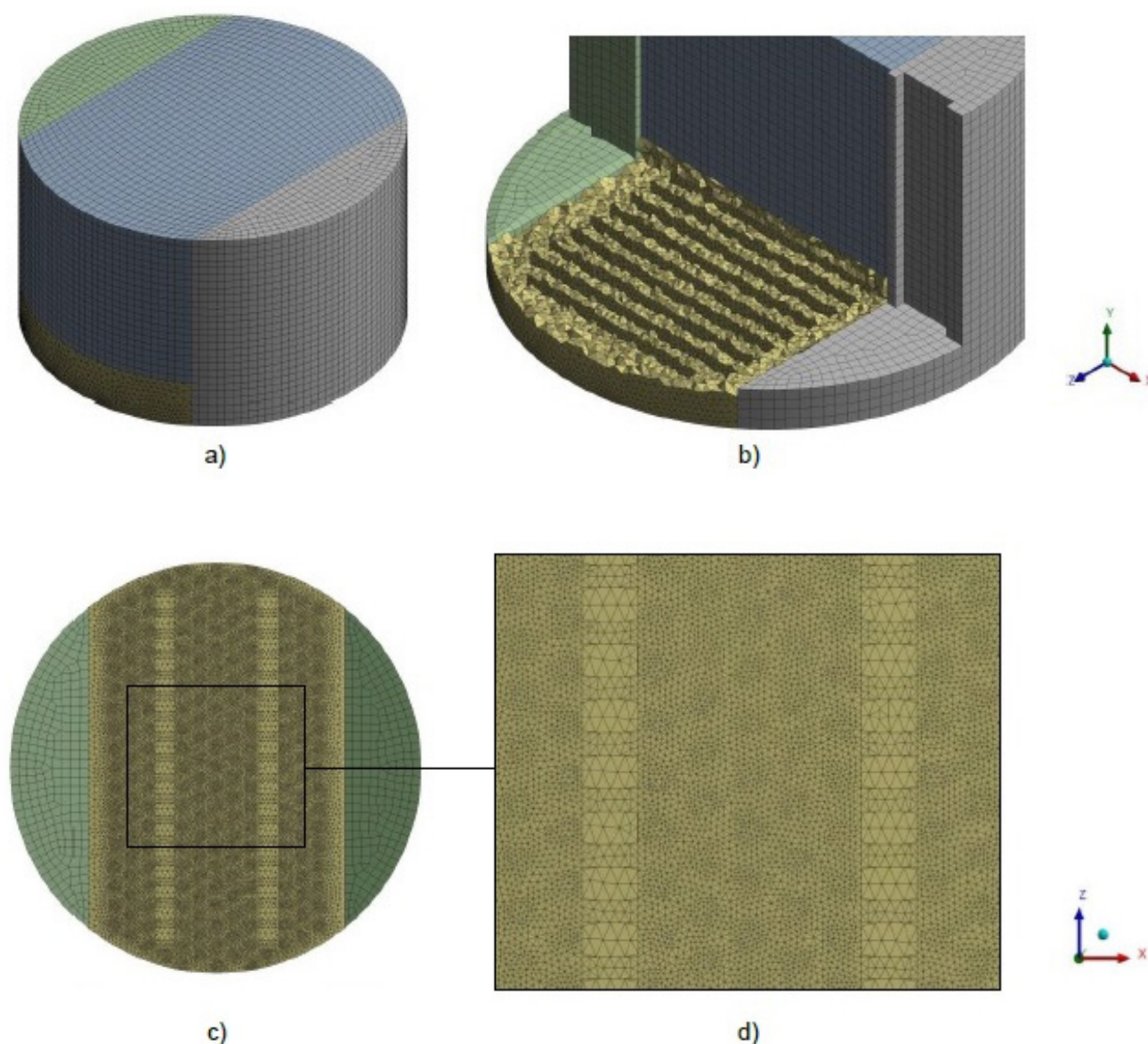


Figura 2. Malla del dominio computacional: a) plato representativo, b) detalle de la malla interna para la sección con contenedores de catalizador, c) base del plato, d) vista ampliada de los orificios de entrada del vapor.



## CONDICIONES FRONTERA Y PROPIEDADES DE LOS FLUIDOS

70

El plato analizado en este trabajo está ubicado en una columna de destilación reactiva en la cual los hidrocarburos de cadena larga producidos en un reactor de hidroxigenación se convierten en hidrocarburos de cadenas más cortas, en el rango de C<sub>8</sub> y C<sub>16</sub>, por medio de las reacciones de craqueo e isomerización. En este sentido, los componentes en las corrientes de líquido y vapor que fluyen a través del plato represen-

tativo son, en su mayoría, hidrocarburos en el rango de C<sub>9</sub> y C<sub>15</sub>. Las propiedades de transporte de las fases utilizadas en la simulación del modelo fueron estimadas en el módulo Aspen Properties® para las condiciones de operación establecidas; se seleccionó el método PENG-ROB [23, 24] para este propósito. Dichas propiedades son presentadas en la Tabla 2.

Para que las ecuaciones gobernantes puedan resolverse numéricamente es necesario especificar condiciones apropiadas para las

variables de flujo en las fronteras de las geometrías que representan los diseños de platos analizados en este trabajo (entradas, salidas y paredes). Estos valores fueron especificados a partir de las condiciones operativas reportadas en el trabajo de Gutiérrez Antonio *et al.* [5] y se presentan en la Tabla 3. Para la salida de cada una de las fases se especificó el valor de la presión en dichos puntos: 1 036 402 Pa para la fase líquida y 1 040 219 Pa para la fase vapor. Se estableció una condición de no-deslizamiento para todas las paredes del dominio computacional.

Tabla 2. Propiedades de transporte para las fases líquida y vapor.

PROPIEDAD	FASE LÍQUIDA	FASE VAPOR
VISCOSIDAD, KG/M·S	$8.9042 \times 10^{-5}$	$1.0611 \times 10^{-5}$
DENSIDAD, KG/M <sup>3</sup>	470.798	44.511
CAPACIDAD CALORÍFICA ESPECÍFICA, J/KG·K	3582.102	2802.774
CONDUCTIVIDAD TÉRMICA, W/M·K	0.0682	0.0415

Tabla 3. Condiciones frontera para el dominio computacional.

FRONTERA/VARIABLE	DISEÑO STC1	DISEÑO STC2
<b>ENTRADA DE LÍQUIDO</b>		
VELOCIDAD (M/S)	0.1073	0.1073
TEMPERATURA (K)	589.17	589.17
FRACCIÓN VOLUMEN DE VAPOR (-)	0	0
DIÁMETRO HIDRÁULICO (M)	0.1964	0.1964
INTENSIDAD DE LA TURBULENCIA (%)	5	5
<b>ENTRADA DE VAPOR</b>		
VELOCIDAD (M/S)	7.3523	1.8381
TEMPERATURA (K)	607.17	607.17
FRACCIÓN VOLUMEN DE VAPOR (-)	1	1
DIÁMETRO HIDRÁULICO (M)	0.00635	0.0127
INTENSIDAD DE LA TURBULENCIA (%)	5	5

## MÉTODO NUMÉRICO DE SOLUCIÓN

Se utilizó el software comercial ANSYS® Fluent® 2019 R2 para resolver las ecuaciones del modelo desarrollado y con ello efectuar las simulaciones del mismo en estado transitorio. Se estableció un paso de tiempo de 0.025 s, considerando 20 iteraciones por cada paso de tiempo; estos ajustes proporcionaron una solución numérica sin problemas de convergencia. El algoritmo Phase-Couple SIMPLE se utilizó para efectuar el acoplamiento presión-velocidad durante la solución numérica de las ecuaciones gobernantes. Se seleccionó un esquema de discretización de segundo orden para las variables de flujo y energía. Finalmente, se estableció que el criterio de convergencia numérica se consiguiera cuando los residuales alcanzaran un valor de  $10^{-4}$  para las variables de *momentum* y de turbulencia, y de  $10^{-6}$  para las variables de energía.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### ALTURA DE LÍQUIDO CLARO EN FUNCIÓN DEL TAMAÑO DE LAS BURBUJAS DE VAPOR

La altura de líquido claro se define como la altura de líquido que se tendría en un plato asumiendo que no hay vapor fluyendo en forma simultánea. Esta proporciona una medida del nivel de líquido en el plato y se relaciona directamente con la eficiencia del mismo, pues los valores altos de este parámetro hidráulico conllevan a un aumento en el tiempo de contacto entre las fases líquida y vapor [11].

De manera similar que en algunos estudios computacionales pre-

vios [25, 26], la altura de líquido claro se calculó multiplicando el espaciamiento entre platos (Tabla 1) por la fracción volumen promedio de la fase líquida en la zona activa del plato representativo; este último valor se obtuvo de las simulaciones del modelo computacional desarrollado.

Los valores de la altura de líquido claro estimados para el plato representativo, operando con diferentes tamaños de burbujas de vapor, se presentan en la Figura 3: 0.00635 m (diseño STC1) y 0.0127 m (diseño STC2). Además, se consideraron tres valores diferentes para la altura del rebosadero con el fin de obtener suficientes datos que permitieran una comparación con los resultados experimentales. Como puede verse, los perfiles de la altura de líquido claro obtenidos para los dos tamaños de burbuja poseen una tendencia que coincide con los

datos experimentales reportados por Van Baten *et al.* en su estudio sobre un sistema similar [9].

Representado en la Figura 3, el tamaño de las burbujas de vapor tiene una influencia más pronunciada en los valores de la altura de líquido claro para los diseños de plato con una mayor altura del rebosadero en comparación con aquellos que poseen bajas alturas de este parámetro geométrico. Ello puede explicarse tomando en cuenta que la altura del rebosadero determina directamente el nivel de la fase líquida en el plato; por lo tanto, es de esperarse que cuando se tienen niveles bajos de líquido en el plato existe una mayor penetración de esta fase por parte de la fase vapor dada la cercanía con los orificios de vapor en la base del plato, independientemente de los tamaños de burbuja que se tengan.

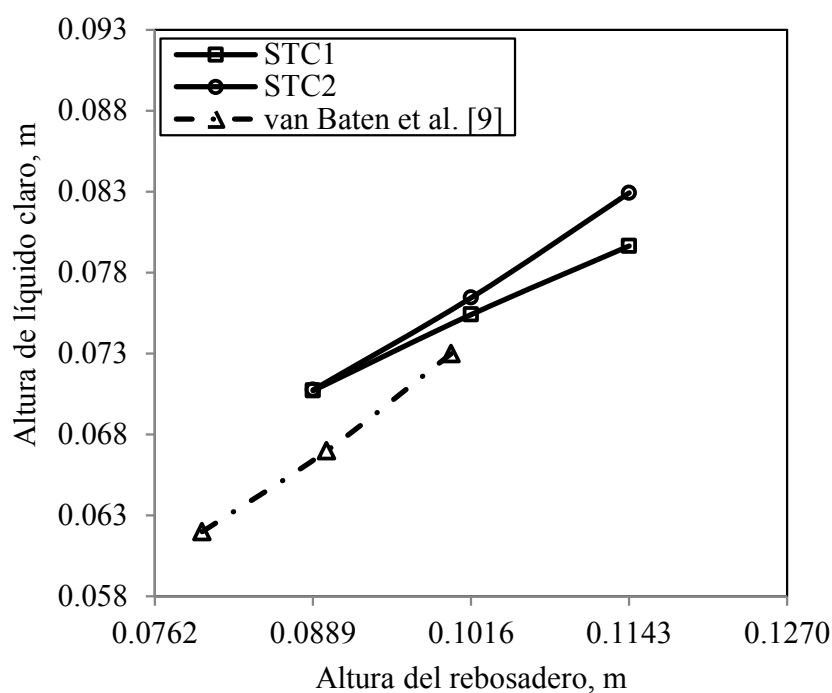


Figura 3. Variación de la altura de líquido claro con respecto a la altura del rebosadero para dos platos representativos con diferentes tamaños de burbuja: 0.00635 m (diseño STC1) y 0.0127 m (diseño STC2).



Por otro lado, a medida que se incrementa la altura del rebosadero, también aumenta el nivel de líquido en el plato. En estos casos, el tamaño de las burbujas de vapor tiene una mayor influencia en la distribución de ambas fases en la espuma resultante. Lo anterior proporciona una explicación para la diferencia entre los perfiles de la altura de líquido claro para diferentes tamaños de burbuja. En este sentido, las burbujas pequeñas poseen una mayor velocidad en comparación con las burbujas grandes, pues las primeras provienen de orificios con un área menor. Las altas velocidades de las burbujas pequeñas (y de la fase vapor en general) ocasionan un mayor desplazamiento de la fase líquida y un menor tiempo de contacto con la misma en comparación con las burbujas más grandes (que fluyen a una menor velocidad).

Debido a que los valores altos de la fracción volumen de la fase líquida se traducen en una mayor altura de líquido claro; el desplazamiento excesivo de esta fase por las burbujas pequeñas ocasiona que se tengan valores bajos de este parámetro hidráulico (STC1) en comparación con aquellos valores que se tienen para las burbujas más grandes (STC2).

Con base en estos puntos, el diseño STC2 exhibe un mejor desempeño en comparación con el STC1; el primero promueve la formación de burbujas más grandes que a su vez permiten valores más altos de la altura de líquido claro.

### VELOCIDAD DE LA ESPUMA EN FUNCIÓN DEL TAMAÑO DE LAS BURBUJAS

La velocidad de la espuma es otro de los parámetros hidráulicos más importantes en la evaluación del desempeño de los platos perforados. Esta se define como la velocidad a la cual fluye la mezcla líquido-vapor en la misma dirección de la fase líquida a través de la zona activa del plato [11]. Este parámetro se calculó dividiendo el flujo volumétrico de la fase líquida entre el producto de la longitud del rebosadero y la altura de líquido claro obtenida previamente. Los valores estimados de la velocidad de la espuma, considerando diferentes tamaños de burbujas de vapor, son presentados en la Figura 4.

De manera similar que para la altura de líquido claro, estos datos se presentan para tres valores diferentes de la altura del rebosa-

dero. Como puede verse, aquel diseño que promueve la formación de burbujas más pequeñas (STC1) también ocasiona velocidades de espuma más altas que el diseño que fomenta la formación de burbujas más grandes (STC2). Lo anterior está directamente relacionado con el fenómeno descrito en la sección anterior, ya que las burbujas pequeñas poseen una mayor velocidad que las grandes; las primeras causan un mayor desplazamiento de la fase líquida, haciendo que esta fluya con una mayor velocidad. Del mismo modo que para la altura de líquido claro, estas diferencias son más significativas para los diseños con una mayor altura del rebosadero, tomando en cuenta que el desplazamiento de la fase líquida es más pronunciado en niveles de líquido bajos y que tienen una mayor cercanía con los orificios localizados en la base del plato.

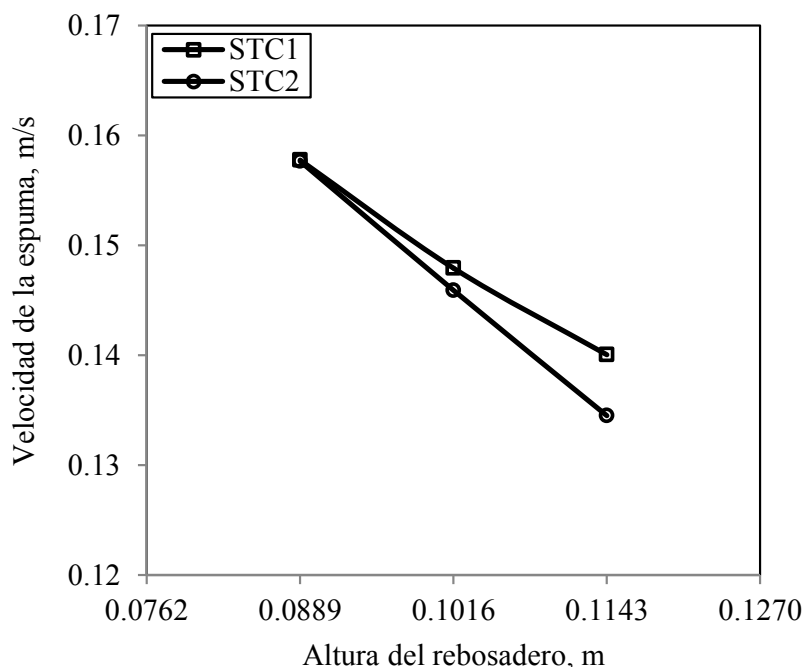


Figura 4. Variación de la velocidad de la espuma con respecto a la altura del rebosadero para dos platos representativos con diferentes tamaños de burbuja: 0.00635 m (diseño STC1) y 0.0127 m (diseño STC2).

Puesto que los valores altos de la velocidad de la espuma implican un menor tiempo de contacto entre las fases líquida y vapor, ello se traduce en una menor eficiencia en el desempeño de los diseños de plato que exhiben esta característica. Por lo tanto, a partir de la comparación de este parámetro hidráulico, nuevamente puede establecerse que el diseño *STC2* presenta un mejor desempeño que el diseño *STC1*.

## CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó un modelo basado en CFD para la simulación de un plato perforado con contenedores de catalizador que trabaja bajo las condiciones operativas de una columna de destilación reactiva utilizada en la producción de combustible renovable de aviación. Este modelo se utilizó para analizar el efecto del tamaño de las burbujas de vapor sobre la altura de líquido claro y la velocidad de la espuma en la zona activa del plato. A partir del análisis de los resultados, puede concluirse que el modelo desarrollado es capaz de representar con un buen grado de precisión el comportamiento experimental reportado para un sistema similar.

Con respecto a la comparación de los parámetros hidráulicos en el plato considerando diferentes tamaños de las burbujas de vapor, puede concluirse que el diseño *STC2* exhibe un mejor desempeño que el diseño *STC1*, tomando en cuenta que el primero, al producir burbujas más grandes y lentas, promueve una mayor altura de líquido claro y una menor velocidad de la espuma en la zona activa del plato. Esta combinación en el comportamiento de los parámetros hidráulicos

analizados implica un mayor tiempo de contacto y una mejor interacción entre las fases líquida y vapor, lo cual se traduce en un incremento en las velocidades de las reacciones de conversión y en la eficiencia de separación de los productos generados.

## FUENTES DE FINANCIAMIENTO

Los autores agradecen al programa "Conacyt - Secretaría de Energía - Sustentabilidad Energética: Estancias Posdoctorales en México" el apoyo financiero otorgado para el desarrollo de este proyecto.

## REFERENCIAS

- [1] G. Bisignani, "A global approach to reducing aviation emissions", *International Air Transport Association (IATA), Switzerland*, 2009.
- [2] M. C. Vasquez, E. E. Silva, y E. F. Castillo, "Hydrotreatment of vegetable oils: A review of the technologies and its developments for jet biofuel production", *Biomass and Bioenergy*, vol. 105, pp. 197-206, 2017.
- [3] C. Gutiérrez Antonio, F. Gómez Castro, J. de Lira Flores, y S. Hernández, "A review on the production processes of renewable jet fuel", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 79, pp. 709-729, 2017.
- [4] S. K. Maity, "Opportunities, recent trends and challenges of integrated biorefinery: Part I", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 43, pp. 1427-1445, 2015.
- [5] C. Gutiérrez Antonio, M. L. S. Ornelas, F. I. Gómez Castro, y S. Hernández, "Intensification

of the hydrotreating process to produce renewable aviation fuel through reactive distillation" *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, vol. 124, pp. 122-130, 2018.

- [6] M. L. Soria Ornelas, C. Gutiérrez Antonio, F. I. Gómez Castro, y S. Hernández, "Feasibility study of using reactive distillation for the production of renewable aviation fuel", in *Computer Aided Chemical Engineering*. vol. 43, ed: Elsevier, 2018, pp. 639-644.
- [7] K. Sundmacher y A. Kienle, *Reactive distillation: status and future directions*: John Wiley & Sons, 2003.
- [8] A. Górak y Z. Olujic, *Distillation: Equipment and Processes*: Academic Press, 2014.
- [9] J. Van Baten, J. Ellenberger, y R. Krishna, "Hydrodynamics of reactive distillation tray column with catalyst containing envelopes: experiments vs. CFD simulations", *Catalysis Today*, vol. 66, pp. 233-240, 2001.
- [10] H. Z. Kister, *Distillation Operation*: McGraw-Hill, 1990.
- [11] H. Z. Kister, J. R. Haas, D. R. Hart, y D. R. Gill, *Distillation Design vol. 1*: McGraw-Hill New York, 1992.
- [12] X. G. Li, S. M. Xu, y H. Li, "CFD simulation of hydrodynamics of valve tray", *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 48, pp. 145-151, 2009.
- [13] S. Jiang, H. Gao, J. Sun, Y. Wang, y L. Zhang, "Modeling fixed triangular valve tray hydraulics using computational fluid dynamics", *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, vol. 52, pp. 74-84, 2012.
- [14] M. S. Lavasani, R. Rahimi, y M. Zivdar, "Hydrodynamic study of different configurations of sieve



- trays for a dividing wall column by using experimental and CFD methods", *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, vol. 129, pp. 162-170, 2018.
- [15] ANSYS *Fluent Theory Guide, Release 2019 R2*. Canonsburg, PA, USA: ANSYS, Inc, 2019.
- [16] L. Schiller y Z. Naumann, "A drag coefficient correlation", *Zeit. Ver. Deutsch. Ing.*, vol. 77, pp. 318-320, 1933.
- [17] G. Bangga, F. J. Novita, y H. Y. Lee, "Evolutional computational fluid dynamics analyses of reactive distillation columns for methyl acetate production process", *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, vol. 135, pp. 42-52, 2019.
- [18] R. L. Yadav y A. W. Patwardhan, "CFD modeling of sieve and pulsed-sieve plate extraction columns", *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 87, pp. 25-35, 2009.
- [19] G. U. Din, I. R. Chughtai, M. H. Inayat, I. H. Khan, y N. K. Qazi, "Modeling of a two-phase countercurrent pulsed sieve plate extraction column—a hybrid CFD and radiotracer RTD analysis approach", *Separation and Purification Technology*, vol. 73, pp. 302-309, 2010.
- [20] W. Ranz y W. Marshall, "Evaporation from droplets", *Chemical Engineering Progress*, vol. 48, pp. 141-146, 1952.
- [21] D. Noriler, H. Meier, A. Barros, y M. W. Maciel, "Thermal fluid dynamics analysis of gas-liquid flow on a distillation sieve tray", *Chemical Engineering Journal*, vol. 136, pp. 133-143, 2008.
- [22] D. Noriler, A. A. Barros, M. R. W. Maciel, y H. F. Meier, "Simultaneous momentum, mass, and energy transfer analysis of a distillation sieve tray using CFD techniques: prediction of efficiencies", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 49, pp. 6599-6611, 2010.
- [23] D. Y. Peng y D. B. Robinson, "A new two-constant equation of state", *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, vol. 15, pp. 59-64, 1976.
- [24] T. Daubert y R. Danner, API *Technical Data Book Petroleum Refining* Washington, DC: American Petroleum Institute (API), 1997.
- [25] J. Van Baten y R. Krishna, "Modelling sieve tray hydraulics using computational fluid dynamics", *Chemical Engineering Journal*, vol. 77, pp. 143-151, 2000.
- [26] G. Gesit, K. Nandakumar, y K. T. Chuang, "CFD modeling of flow patterns and hydraulics of commercial-scale sieve trays", *AIChE Journal*, vol. 49, pp. 910-924, 2003.