

Simulación numérica de un reactor sonoquímico operado a 500 kHz

Rivadeneira Romero Gabriela^{1*}, Gutiérrez Torres Claudia del Carmen², González Neria Israel³,
Yáñez Varela J. Antonio³, Alonzo García Alejandro⁴, Martínez Delgadillo Sergio A.⁵

¹Departamento de Ingeniería de Petróleos, Universidad del Istmo, Ciudad Universitaria S/N, Tehuantepec, Oax., 70760, Méx.

²LABINTHAP, Instituto Politécnico Nacional, SEPI-ESIME Zacatenco, U.P., Col. Lindavista, 07738 CDMX. Mex.

³Posgrado en Ingeniería de Procesos. Universidad Autónoma Metropolitana, San Pablo No. 180, Azc., CDMX. 02200. Méx.

⁴CONACyT-Centro de Ingeniería y Desarrollo Industrial, Carr. Champotón -Cd Carmen 408, Camp., Mex.

⁵Universidad Autónoma Metropolitana, Ciencias Básicas, Av. San Pablo 180, Azcapotzalco. CDMX, 02200.Mex.

*Autor de correspondencia: gabriela.rivadeneira@gmail.com

Recibido:

16/julio/2019

Aceptado:

20/octubre/2019

Palabras clave:

Ultrasonido,
sonoquímico,
simulación

Keywords:

Ultrasound,
sonochemical,
simulation

RESUMEN

El ultrasonido se presenta como un método potencial para ser aplicado en la remoción de contaminantes de medios acuosos. Por tal razón, es importante su estudio para su aplicación a nivel industrial, de tal manera que se pueda optimizar su diseño, con la finalidad de encontrar las condiciones donde los procesos de micro-mezclado permitan que las reacciones de remoción de contaminantes sean más rápidas con la finalidad de reducir los tiempos de tratamiento y consumos de potencia. En este sentido, en el presente trabajo se simula el comportamiento de un sonoreactor industrial con varios piezoeléctricos de alta frecuencia (500kHz), donde existe interacción entre los campos de velocidad que producen, a diferencia de los estudios con reactores a nivel laboratorio con un solo piezoeléctrico (sonoelectrodo) donde no existe interacción, además de que se utilizan bajas frecuencias (24kHz). Los resultados de la simulación se comparan con estudios experimentales de velocimetría de imagen de partículas (PIV)

ABSTRACT

Ultrasound is presented as a potential method to be applied in the removal of pollutants from aqueous media. For this reason, it is important to study it for industrial application, in such a way that its design can be optimized, in order to find the conditions where micro-mixing processes allow faster removal reactions of contaminants to reduce treatment times and power consumption. In this sense, the present work simulates the behavior of an industrial sonoreactor with several piezoelectric high frequency (500kHz), where there is interaction between the fields of speed that produce, unlike the studies with reactors at laboratory level with only one piezoelectric (sonotrode) where there is no interaction and use low frequencies (24kHz). The results obtained from the simulation were compared with the ones obtained with PIV.

Introducción

El ultrasonido es una nueva tecnología avanzada y se emplea para intensificar varios procesos físicos y químicos mediante la generación de cavitación y corrientes acústicas en medio líquido. La aplicación de ondas de ultrasonido en reactores conduce a una calidad de mezclado más eficiente y mejora el transporte debido a la habilidad de inducir varios efectos favorables (Monnier et al., 1999).

Algunos de estos efectos resultan de la creación de micro corrientes acústicas, cavitación y movimiento oscilante de fluido bajo campos ultrasónicos (Monnier et al., 2012). A pesar de que hay muchas aplicaciones prometedoras del ultrasonido para incrementar la eficiencia del micromezclado en sonorretores, ha habido mayores problemas en el diseño de reactores sonoquímicos, especialmente para el concepto de reactores industriales.

Una de las razones de este problema se relaciona a la falta del entendimiento de los patrones de flujo y condiciones de distribución de las ondas ultrasónicas entre varios piezoeléctricos ya que, se han reportado principalmente reactores a nivel laboratorio con un solo piezoeléctrico (sonotrodo), además de que se utilizan bajas frecuencias (Sajjadi et al., 2015), por lo cual en esta investigación se empleó simulación para estudiar el comportamiento del fluido en un reactor industrial ultrasónico con varios electrodos que interactúan en el dominio y con alta frecuencia.

Metodología

Determinación de los campos de velocidad

Para la determinación de las velocidades del fluido en una región en función del espacio y el tiempo, se utilizó velocimetría de imágenes de partícula (PIV) con un láser Quantel EverGreen®, con una tasa máxima de repetición de 15 Hz, y un ancho de pulso láser menor o igual a 10 nanosegundos a energía nominal. Se empleó a su vez, una cámara 4MP-LS, Modelo 630090 PowerView™, con una resolución de 2360 x 1776 pixeles, diseñada para ser usada para velocimetría de imágenes de partícula (PIV).

Se emplearon, como partículas trazadoras, esferas de vidrio recubiertas con plata, con un diámetro de 8 μm a 12 μm en promedio y con una densidad entre 1015 Kg/m³ a 1050 Kg/m³. Respecto al PIV, en los experimentos la cámara se encontraba aproximadamente a 65 cm del plano de análisis.

El ultrasonido se activó después de unos disparos de laser; los parámetros utilizados fueron Pulse Rep Rate=14.5 Hz y ΔT=100 μs. La zona de análisis se observa en la figura 1.

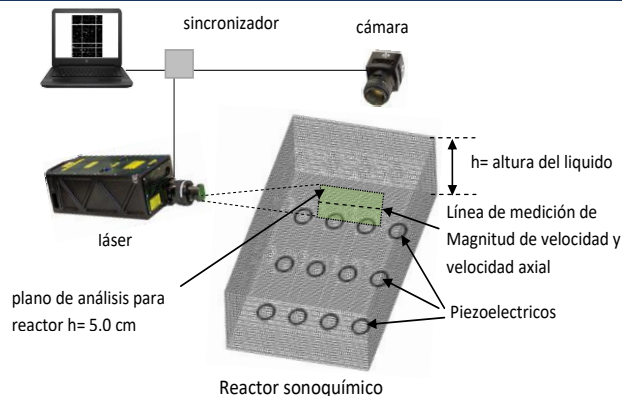


Figura 1. Sistema de medición PIV.

Reactor sonoquímico

El reactor sonoquímico empleado consistió en una estructura de acrílico rectangular, de 250 x 180 x 50 mm, colocada sobre la base con doce piezoeléctricos distribuidos en el fondo del reactor. Se utilizó una fuente de 500 kHz y se conectó a una fuente de potencia de 500 W. Se emplearon 5 cm de altura de agua. Se considera el sistema descrito como de uso industrial. La geometría del reactor sonoquímico así como también el mallado, se realizaron en el Workbench de ANSYS®. En la Figura 2 se observa el reactor y la malla empleados.

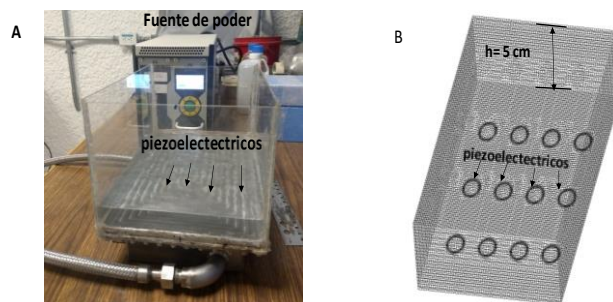


Figura 2. A) Reactor sonoquímico y B) malla hexaédrica.

Simulación

Para la simulación se dispuso de una computadora de 24 núcleos a 2.1 GHz, con una capacidad de 16 Gb de RAM. Para simular en CFD, se utilizaron las siguientes condiciones frontera: en las paredes del reactor se utilizó la condición de pared, no deslizamiento; en la parte superior del fluido se utilizó la condición simetría, y los piezoeléctricos se modelaron como una entrada de velocidad; se creó una UDF, utilizando la siguiente ecuación (Mahdih et al., 2012):

$$v_0(t) = \omega A_0 \sin(\omega t)$$

A su vez, se tiene que:

$$\omega = 2\pi f$$

Donde f es la frecuencia empleada para la determinación, que fue de 500 kHz, t es el tiempo, ω la frecuencia angular y A_0 el desplazamiento máximo del piezoeléctrico, el cual se estimó experimentalmente, mediante los resultados de PIV, en 7×10^{-9} m, que es de misma magnitud que en otros trabajos, tal como 1.35×10^{-9} m (Mahdih et al., 2012).

Así mismo se simuló empleando el modelo LES, con Smagorinsky-Lily. Como algoritmo de acoplamiento para presión-velocidad, se utilizó el esquema SIMPLE. Para la discretización espacial se utilizó, para gradiente, el método basado en nodos Green-Gauss; para presión, PRESTO; y para momento, diferencia central acotada. Para la formulación transitoria, se empleó Segundo Orden Implícito. Se establecieron los residuales para todos los parámetros en 1×10^{-5} . Se utilizó un espacio temporal de 5×10^{-7} y se calcularon 60 iteraciones por cada paso temporal.

Resultados y discusión

Estudio de independencia de malla

Se generaron tres mallas, cuya diferencia en el número de elementos fue de aproximadamente 100 % entre ellas. En todas se empleó el método de refinamiento con base en resultados, en la tabla 1 se muestran las características de las mismas antes del refinamiento. Se consideró la una velocidad máxima (V_{max}) de 0.0219912 m/s, y un límite de refinamiento evaluado dividiendo ésta sobre 4, 5 y 6. En la tabla 2 se muestran los detalles del refinamiento.

Tabla 1. Malla 1, 2 y 3 antes del refinamiento.

Malla	No. de elementos	Ortogonalidad min.	Iteraciones	Tiempo de convergencia (minutos)
1	94112	0.68	907	10
2	267288	0.77	2175	46
3	536300	0.81	2847	102

Tabla 2. Refinamiento de mallas 1, 2 y 3 en base a resultados.

Malla	Límite de refinamiento	Celdas marcadas	Elementos posteriores al refinamiento	Ortogonalidad min.
1	0.0054978	1438	104178	0.545
	0.00439824	5252	141719	0.47
	0.0036652	2960	164637	0.47
2	0.0054978	1970	281078	0.58
	0.00439824	7263	332738	0.47
	0.0036652	4710	368095	0.53
3	0.0054978	2323	552561	0.606
	0.00439824	8398	612103	0.569

En la tabla 3 se aprecian las características de las mallas posteriores al refinamiento. El estudio de independencia de malla se realizó empleando estado estacionario y el modelo de turbulencia k- ϵ realizable.

Tabla 3. Malla 1, 2 y 3 posteriores a refinamiento.

Malla	No. elementos posteriora ref.	Ortogonalidad mínima	Iteración	Tiempo de convergencia (minutos)
1	164637	0.47	620	12
2	368095	0.53	1056	32
3	612103	0.569	1737	120

La Figura 3 muestra un plano a 0.055 cm sobre el eje z, con los detalles de refinamiento con base en resultados.

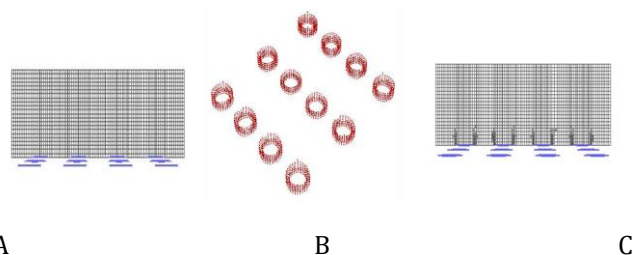


Figura 3. **A)** Celdas anteriores al refinamiento, **B)** Celdas marcadas para refinamiento, **C)** Celdas posteriores a refinamiento.

Se seleccionó la magnitud de velocidad como variable para evaluar la independencia de malla, la cual se evaluó en una posición a 0.02 cm sobre los piezoeléctricos. La variable se evaluó como promedio en el volumen e integral volumétrica, para cada una de las tres mallas. Así mismo, se evaluó el tiempo de convergencia de cada una de las mallas, empleando residuales de 10^{-6} en los parámetros de continuidad y flujo, los resultados se observan en la Tabla 4.

Tabla 4. Magnitud de velocidad con promedio de volumen e integral de volumen.

Malla	Elementos	Tiempo de cómputo (minutos)	Magnitud de velocidad (Promedio de volumen)	Magnitud de velocidad (Integral de volumen)
1	164637	12	0.01278064	2.381620×10^{-06}
2	368095	32	0.01342403	2.514102×10^{-06}
3	612103	120	0.01379673	2.589915×10^{-06}

En la figura 4 se observan los perfiles de velocidad de las mallas 1, 2 y 3, cuyos datos fueron tomados a 0.02 m sobre la base del reactor para los tres casos. En la gráfica se observa que los perfiles de magnitud de velocidad de las mallas 2 y 3 son más parecidos entre sí que el perfil de la malla 1, sin embargo, dado que existe una diferencia en el tiempo de cómputo para convergencia de 73 % entre la malla 2 y 3, se prefirió utilizar la malla 2 (Figura 3B).

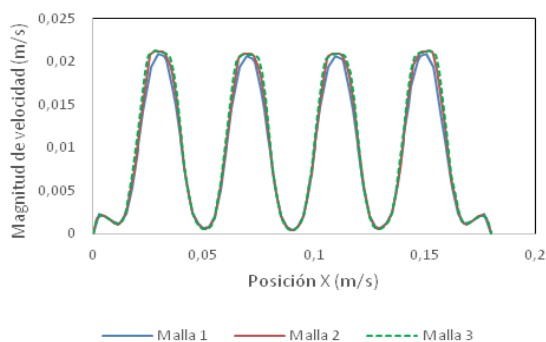


Figura 4. Perfiles de magnitud velocidad de las mallas 1, 2 y 3 a 0.02 m sobre la base del reactor.

Comparación entre los datos experimentales mediante PIV y la simulación

La simulación se efectuó en estado no estacionario empleando un tamaño de paso de $1/8$ de la frecuencia, es decir, 3×10^{-7} s. Así mismo, se empleó Large Eddy Simulation (LES) y la zona estudiada es plano de análisis para reactor $h = 5.0$ cm (Figura 5). Los resultados presentados se obtuvieron a un tiempo de simulación de 0.11 s. Se observa similitud en los patrones de líneas de corriente.

La figura 6 muestra los resultados de la magnitud de velocidad y en la Figura 7, la velocidad axial, en dos líneas posicionadas a diferentes alturas del piezoeléctrico. Se observan estructuras (remolinos) del fluido similares que se forman en el mismo lugar, sin embargo, el orden de magnitud de la velocidad es mayor en el caso de los resultados del CFD. Esto se puede explicar por el efecto que tiene la potencia, la cual afecta el desplazamiento del piezoeléctrico (A_0). En el caso del CFD se tendrá que calibrar este desplazamiento disminuyéndolo para reducir la velocidad.

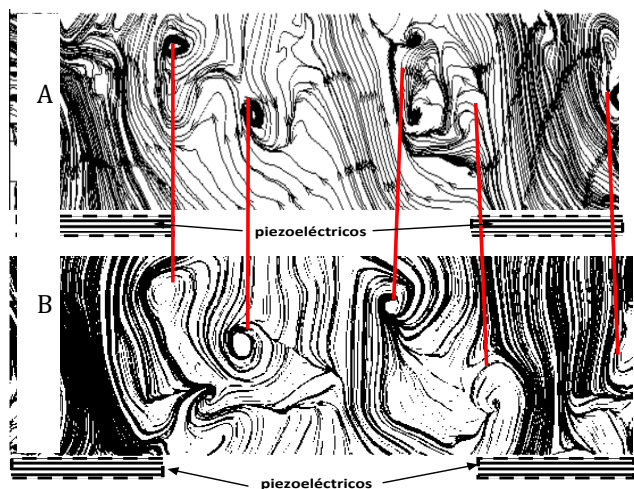


Figura 5. Líneas de corriente obtenidas a 0.11s.

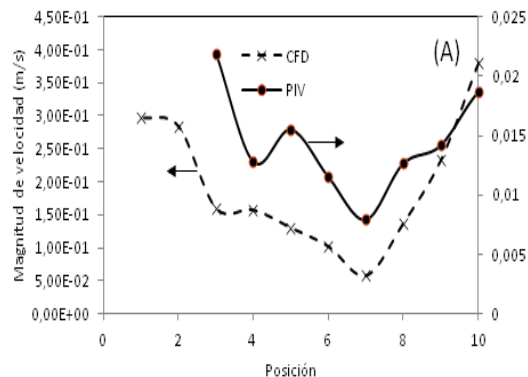


Figura 6. Magnitud de velocidad.

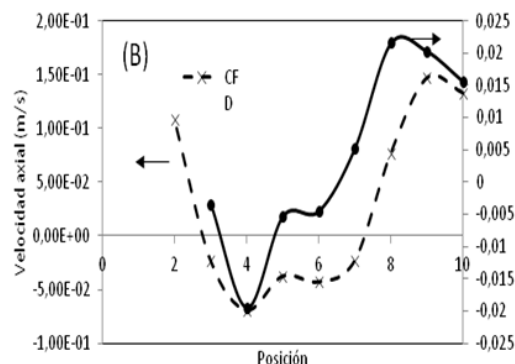


Figura 7. Velocidad axial.

Conclusiones

Con base en los resultados, se muestra que es posible simular el comportamiento del sonoreactor. En la simulación, se obtienen estructuras similares a las experimentales obtenidas mediante PIV, sin embargo, el orden de la magnitud de la velocidad es menor que en el caso de los resultados en CFD, por lo que, es necesario calibrar el modelo con la finalidad de obtener resultados más cercanos a lo experimental.

Referencias

Mahdih A., Masoud R., Maryam D., Ammar A. (2012). CFD Modeling of Heat Transfer by 1.7 MHz Ultrasound Waves. *J. Num. Heat Transfer, Part A: Appl.*, 62: 822-841.

Monnier H., Wilhelm A. M., Delmas H. (1999). The influence of ultrasound on micromixing in a semi-batch reactor. *Chem. Eng. Sci.* 54 (13-14), 2953-2961.

Monnier F., Rahimi M., Faryadi M., Alsairafi A. A. (2012). Comparison between mixing in novel high frequency sonoreactor and stirred tank reactor. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics.* 6(2): 295-306.

Sajjadi B., Aziz A., Raman A., Ibrahim S. (2015). Influence of ultrasound power on acoustic streaming and micro-bubbles formations in a low frequency sono-reactor: Mathematical and 3D computational simulation. *Ultrasonics Sonochemistry*, 24:193-203