



# UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

---

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS  
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO  
POSGRADO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

**“ESTUDIO NUMÉRICO DEL PROCESO DE DESULFURACIÓN  
ALCALINA EN UNA COLUMNA DE BURBUJEO; EFECTO DEL  
TRANSPORTE DE MASA, REACCIÓN QUÍMICA E HIDRODINÁMICA”**

TESIS PARA OBTENER AL GRADO DE  
**MAESTRA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**PRESENTA:**  
CORTÉS MARTÍNEZ ROXANA

**DIRECTOR DE TESIS:**  
DR. ERIK CÉSAR HERRERA HERNÁNDEZ

**CODIRECTOR DE TESIS:**  
DR. CARLOS GILBERTO AGUILAR MADERA



SAN LUIS POTOSÍ, S.L.P.

ENERO, 2024

El Programa de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí pertenece al Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) del CONAHCYT, registro 000896, en el Nivel Consolidado.

Número de registro de la beca otorgada por CONAHCYT: 812385.

No. CVU 1188233



Estudio numérico del proceso de desulfuración alcalina en una columna de burbujeo; efecto del transporte de masa, reacción química e hidrodinámica © 2024 by Cortés Martínez Roxana is licensed under [Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/)

Mis documentos Documentos Compartir Parámetros página 1 de 1

<input type="checkbox"/>	Título	Informe	Autor	Procesados	Acciones
<input type="checkbox"/>	ESTUDIO NUMÉRICO DEL PROCESO DE DESULFURACIÓN ALCALINA EN UNA COLUMNA DE BURBUJEO; EFECTO DEL TRANSPORTE DE MASA, REACCIÓN QUÍMICA E HIDRODINÁMICA <small>1 part - 29,484 words</small>	33%	Roxana Cortés Martínez	5 ene 2024 9:48:17	 



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ  
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS  
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DE POSGRADO  
POSGRADO EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA



**“ESTUDIO NUMÉRICO DEL PROCESO DE DESULFURACIÓN  
ALCALINA EN UNA COLUMNA DE BURBUJEO; EFECTO DEL  
TRANSPORTE DE MASA, REACCIÓN QUÍMICA E  
HIDRODINÁMICA”**

TESIS PARA OBTENER AL GRADO DE  
**MAESTRA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**PRESENTA:**  
CORTÉS MARTÍNEZ ROXANA  
**DIRECTOR DE TESIS:**  
DR. ERIK CÉSAR HERRERA HERNÁNDEZ  
**CODIRECTOR DE TESIS:**  
DR. CARLOS GILBERTO AGUILAR MADERA

**SINODALES**

**Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera**

Presidente

---

**Dr. Raúl González García**

Secretario

---

**Dr. Erik César Herrera Hernández**

Vocal

---

**Dr. Raúl Ocampo Pérez**

Vocal

---

San Luis Potosí, S. L. P.

10 de enero de 2024



San Luis Potosí, S. L. P, México

8 de enero de 2024

**Comité Académico del Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química**  
**Facultad de Ciencias Químicas de UASLP**  
**PRESENTE**

Por medio de la presente comunicamos que la tesis llevada a cabo por la alumna de Maestría **IQ. Roxana Cortés Martínez** titulada “**Estudio numérico del proceso de desulfuración alcalina en una columna de burbujeo; efecto del transporte de masa, reacción química e hidrodinámica**”, ha sido concluida y aprobada por el comité tutorial para dar inicio a los trámites correspondientes para su titulación. El examen tendrá lugar el próximo miércoles 10 de enero del año 2024 a las 10:30 h en la sala 1 de exámenes profesionales de la Facultad de Ciencias Químicas.

Atentamente,

**Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera**

Presidente (UANL/FCT)

---

**Dr. Raúl González García**

Secretario (FCQ/UASLP)

---

**Dr. Erik César Herrera Hernández**

Vocal (FCQ/UASLP)

---

**Dr. Raúl Ocampo Pérez**

Vocal (FCQ/UASLP)

---

## **DEDICATORIA**

A mi amado Mario Javier

Esta tesis es un tributo a la inspiración que eres en mi vida. Tu amor y paciencia han sido mi guía en este viaje académico. A ti, mi querido hijo, dedico con profundo cariño esta tesis. Cada página escrita refleja nuestro vínculo único.

Mamá te ama

## **AGRADECIMIENTO**

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento a quienes han sido pilares fundamentales en el desarrollo de esta tesis.

A mis asesores, Dr. Erik César Herrera Hernández y Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera, le agradezco enormemente por su guía experta, sus valiosas sugerencias y su dedicación incansable. Su conocimiento y apoyo han sido esenciales para dar forma a esta investigación.

A mi familia, sobre todo mi madre, mi esposo y mi hermano, agradezco su amor incondicional y constante respaldo. Cada palabra de aliento y gesto de paciencia ha sido un motor para seguir adelante. A mi hijo Mario Javier, mi fuente de inspiración, a quien dedico con cariño este logro.

A mis amigos y seres queridos, gracias por su comprensión, ánimo y compañía a lo largo de este desafío académico.

A la Universidad Autónoma de San Luis Potosí y al CONAHCYT, por brindar los recursos necesarios para llevar a cabo esta investigación, mi reconocimiento por hacer posible este proyecto.

Este logro representa una culminación de esfuerzos y colaboración, y cada uno de ustedes ha dejado una huella significativa en este camino académico. Agradezco sinceramente su contribución a este proyecto.

A todos, muchas gracias

## RESUMEN

Este proyecto de investigación tiene como objetivo realizar un estudio numérico del proceso de desulfuración alcalina en una columna de burbujeo, centrándose en el transporte de masa y las reacciones químicas. Se comenzó con una revisión bibliográfica detallada sobre las características esenciales de las columnas de burbujeo y las reacciones fluido-fluido involucradas. Posteriormente, se describieron modelos matemáticos para permitir un estudio exhaustivo de este proceso. La simulación realizada mediante el software Comsol Multiphysics arrojó varios hallazgos importantes. La viscosidad dinámica turbulenta generalmente aumenta hacia la superficie de la columna, con algunas excepciones influenciadas por el diámetro de burbuja y la presión. Conforme avanza el tiempo la turbulencia se reduce hasta volverse insignificante. La energía cinética turbulenta presenta una distribución variable, siendo más alta en la entrada de la columna y dependiente del diámetro de burbuja, con cambios mínimos relacionados con la presión. La velocidad del líquido varía en diferentes puntos de la columna, siendo más elevada en la entrada y disminuye a medida que aumenta el diámetro de burbuja. La concentración de la solución alcalina tiende a disminuir con el tiempo, aunque se observan zonas de acumulación de burbujas que dependen del diámetro de burbuja y la presión. La transferencia de masa exhibe variaciones significativas en diferentes secciones de la columna y de acuerdo con las condiciones de operación, siendo más alta en la entrada de la columna. Este proyecto resalta la complejidad de la dinámica en una columna de burbujeo y enfatiza la necesidad de considerar múltiples factores para la simulación y una eventual operación óptima del proceso de desulfuración alcalina.

**Palabras claves:** desulfuración alcalina, dinámica de fluidos computacional, columna de burbujeo, transporte de masa

## **ABSTRACT**

This research project aims to conduct a numerical study of the alkaline desulfurization process in a bubble column, focusing on mass transport and chemical reactions. It began with a detailed literature review of the essential characteristics of bubble columns and the involved fluid-fluid chemical reactions. Then, mathematical models were described to enable a comprehensive study of this process. The simulation performed with the Comsol Multiphysics software yielded several important findings. The turbulent dynamic viscosity increases towards the surface of the column, with some exceptions influenced by bubble diameter and pressure. Over time, the turbulence decreases to become insignificant. The turbulent kinetic energy exhibits a variable distribution, being larger at the column's inlet and dependent on bubble diameter, with minimal changes with the pressure. The liquid velocity varies at various locations inside the column, being larger at the inlet and decreasing as the bubble diameter increases. The concentration of the alkaline solution tends to decrease over time, although some zones with bubble accumulation are observed, depending on the bubble diameter and pressure. The mass transfer exhibits significant variations at different zones in the column, being larger at the column's inlet. This research project highlights the complexity of dynamics in a bubble column and emphasizes the need to consider multiple factors to achieve optimal operation in the alkaline desulfurization process. These findings contribute to a fundamental understanding of this process and may have important implications for practical applications.

**Keywords:** alkaline desulfurization, computational fluid dynamics, bubble column

<b>ÍNDICE GENERAL</b>	<b>PAG.</b>
INTRODUCCIÓN .....	1
Antecedentes .....	2
Justificación del proyecto .....	4
Problema científico.....	4
Hipótesis.....	5
Objetivo General .....	5
Objetivos Específicos .....	5
<b>CAPITULO 1. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA.....</b>	<b>6</b>
1.1. Proceso de refinación del petróleo crudo .....	6
1.2. Productos de la refinación del petróleo .....	8
1.2.1. Gas licuado del petróleo .....	10
1.3. Contenido de azufre en el crudo.....	11
1.4. Los combustibles y sus constituyentes sulfurados .....	12
1.4.1. Importancia de la desulfuración de los combustibles.....	13
1.5. Procesos de depuración de azufre en derivados del petróleo.....	14
1.5.1. Depuración alcalina .....	15
1.6. Dinámica de fluidos computacional .....	17
1.7. Columnas de burbujeo .....	18
1.7.1. Dinámica del movimiento de una burbuja .....	20
1.7.2. Tipo de burbujas. ....	20
1.7.3. Tamaño de la burbuja .....	23
1.8. Velocidad de reacción en sistemas fluido-fluido .....	26
<b>CAPITULO 2. MATERIALES Y MÉTODOS .....</b>	<b>32</b>

2.1.	Transferencia de Momentum.....	32
2.2.	Transferencia de Masa.....	33
2.2.1.	Disolución del gas.....	36
2.3.	Modelos de turbulencia .....	37
2.3.1.	Spalart-Allmaras .....	38
2.3.2.	Modelo $\kappa - \varepsilon$ .....	40
2.3.3.	Modelo $\kappa - \omega$ .....	42
2.3.4.	Modelo $\kappa-\varepsilon$ para número de Reynolds bajo.....	42
2.3.5.	Transporte de esfuerzo cortante.....	43
2.4.	Estimación de la viscosidad.....	44
2.4.1.	Viscosidad de los gases. Teoría cinética de Chapman-Enskog.....	45
2.5.	Estimación de la difusividad .....	46
2.5.1.	Difusividad en fase líquida .....	47
2.5.2.	Modelo de Wilke-Chang.....	47
2.6.	Expresión cinética de las reacciones de depuración alcalina.....	48
CAPITULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....		51
3.1.	Construcción del modelo de simulación .....	52
3.2.	Módulos de simulación .....	54
3.3.	Prueba de sensibilidad de la malla .....	56
3.4.	Resultados de la simulación CFD: análisis de variables clave.....	61
3.4.1.	Evaluación de números adimensionales.....	62
3.4.2.	Dinámica de la concentración de NaOH .....	63
3.4.3.	Energía cinética turbulenta ( $\kappa$ ).....	71
3.4.4.	Tasa de disipación de la energía cinética ( $\varepsilon$ ) .....	78

3.4.5. Viscosidad dinámica turbulenta ( $\mu T$ ) .....	81
3.4.6. Magnitud de la velocidad del líquido ( $U_l$ ).....	88
3.4.7. Transferencia de masa del gas a líquido ( $m_{gl}$ ) .....	95
3.5. Tamaño y forma de la burbuja.....	104
3.6. Selección de condiciones de operación .....	105
3.7. Trabajos futuros .....	108
CONCLUSIONES.....	110
BIBLIOGRAFÍA .....	113

## ÍNDICE DE TABLAS

PAG.

<b>Tabla 1.1.</b> Correlaciones de tamaño de burbuja de un grupo existentes para el sistema gas - líquido.....	25
<b>Tabla 1.2.</b> Valores de $M_H$ y $E_i$ para diferentes regímenes cinéticos .....	31
<b>Tabla 2.1.</b> Correlaciones para el coeficiente de arrastre.....	35
<b>Tabla 2.2.</b> Valores utilizados por diversos autores para las constantes del modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ .....	41
<b>Tabla 2.3.</b> Estimación de diámetro de colisión y energía característica.....	46
<b>Tabla 2.4.</b> Valores típicos de difusividades a temperatura ambiente. ....	46
<b>Tabla 2.5.</b> Proporciones de las mezclas crudos utilizados en la simulación.....	49
<b>Tabla 2.6.</b> Composición de compuestos sulfurados en la NVLI.....	49
<b>Tabla 3.1.</b> Parámetros de operación y dimensiones físicas del proceso. ....	53
<b>Tabla 3.2.</b> Variables adimensionales. ....	53
<b>Tabla 3.3.</b> Propiedades físico-químicas de las sustancias.....	54
<b>Tabla 3.4.</b> Análisis de sensibilidad de malla.....	57
<b>Tabla 3.5.</b> Grupos adimensionales. ....	62
<b>Tabla 3.6.</b> Número de Eötvös y Weber para los diferentes diámetros de burbujas.	105

## ÍNDICE DE FIGURAS

PAG.

<b>Figura 1.1</b> Esquema general de refinación.....	9
<b>Figura 1.2.</b> Reacción simultánea y equilibrio liquido-vapor con H <sub>2</sub> S y MeSH.....	16
<b>Figura 1.3.</b> Disciplinas que involucran CFD.....	18
<b>Figura 1.4.</b> Varios tipos de burbujas a partir del número de Weber: $We=db\rho u_{lip}^2/\sigma$ .....	20
<b>Figura 1.5.</b> Mapa del régimen de forma para burbujas ascendiendo en un líquido Newtoniano. ....	22
<b>Figura 1.6.</b> Absorción de A en líquido con reacción química basándose en la teoría de transferencia de masa con reacción química. ....	27
<b>Figura 1.7.</b> Comportamiento en la interfase para la reacción en fase líquida para el intervalo completo de velocidades de reacción y transferencia de masa. Editado de	29
<b>Figura 1.8.</b> El factor de mejoramiento para reacciones fluido – fluido en función de $E_i$ y MH, modificado a partir de la solución numérica dada por Van Krevelen & Hoftijzer, (1947).....	31
<b>Figura 2.1.</b> Curva del potencial de Lennard-Jones adimensionalizado.....	45
<b>Figura 2.2.</b> Esquema tecnológico de la depuración alcalina en la obtención de GLP. ....	48
<b>Figura 3.1.</b> Columna de burbujeo .....	51
<b>Figura 3.2.</b> Geometría del tambor en Comsol y puntos de evaluación. ....	52
<b>Figura 3.3.</b> Construcción de las mallas en la columna de burbujeo: (a) MGMF, (b) GMF, (c) NMF, (d) FMF, (e) MFMF, (f) EMF, (g) MGEF, (h) GEF, (i) NEF, (j) FEF, (k) MFEF y (l) EEF. ....	58
<b>Figura 3.4.</b> Tasa de disipación de la energía y errores relativos respecto a la malla EEF. ....	59
<b>Figura 3.5.</b> Energía cinética turbulenta y errores relativos respecto a la malla EEF. ....	60
<b>Figura 3.6.</b> Magnitud de la velocidad del líquido y errores relativos respecto a la malla EEF. ....	60
<b>Figura 3.7.</b> Comportamiento de la concentración de NaOH en función del tiempo para diferentes valores de diámetros de entrada del gas.....	63

<b>Figura 3.8.</b> Concentración de NaOH en el fluido para diferentes diámetros de burbuja a P = 0 atm, en distintos tiempos de simulación (50, 2500 y 5000 s), con representación de la concentración molar (mol/m <sup>3</sup> ) y líneas de flujo del campo de velocidad de la fase líquida.....	66
<b>Figura 3.9.</b> Concentración de NaOH en el fluido para diferentes diámetros de burbuja a P = 1 atm, en distintos tiempos de simulación (50, 2500 y 5000 s), con representación de la concentración molar (mol/m <sup>3</sup> ) y líneas de flujo del campo de velocidad de la fase líquida.....	68
<b>Figura 3.10.</b> Concentración de NaOH en el fluido para diferentes diámetros de burbuja a P = 26.33 atm, en distintos tiempos de simulación (50, 2500 y 5000 s), con representación de la concentración molar (mol/m <sup>3</sup> ) y líneas de flujo del campo de velocidad de la fase líquida. ....	70
<b>Figura 3.11.</b> Energía cinética turbulenta para diferentes diámetros de burbuja en una columna de 1 agujero de entrada.....	74
<b>Figura 3.12.</b> Energía cinética turbulenta para diferentes presiones en los tres puntos de evaluación. ....	76
<b>Figura 3.13.</b> Energía cinética turbulenta para diferentes presiones en el punto de evaluación 2 .....	77
<b>Figura 3.14.</b> Tasa de disipación de la energía ( $\varepsilon$ ) para diferentes diámetros de burbuja y presión de trabajo.....	80
<b>Figura 3.15.</b> Viscosidad dinámica turbulenta para diferentes diámetros de burbuja en una columna.....	84
<b>Figura 3.16.</b> Viscosidad dinámica turbulenta en los tres puntos de evaluación para diferentes presiones de operación. ....	86
<b>Figura 3.17.</b> Viscosidad dinámica turbulenta para diferentes presiones en el punto de evaluación 2. ....	87
<b>Figura 3.18.</b> Magnitud de la velocidad de la fase líquida para diferentes diámetros de burbuja. ....	91
<b>Figura 3.19.</b> Magnitud de la velocidad del líquido en los tres puntos de evaluación para diferentes presiones. ....	93

<b>Figura 3.20.</b> Magnitud de la velocidad del líquido en el punto de evaluación 2 para diferentes presiones. ....	94
<b>Figura 3.21.</b> Transferencia de masa del gas al líquido para diferentes diámetros de burbuja y presiones en una columna.....	98
<b>Figura 3.22.</b> Transferencia de masa del gas al líquido en los tres puntos de evaluación para diferentes presiones de operación. ....	100
<b>Figura 3.23.</b> Transferencia de masa del gas al líquido en el puntos de evaluación 2 para diferentes presiones. ....	101
<b>Figura 3.24.</b> Coeficiente de transferencia de masa y módulo de Hatta en función del diámetro de burbuja. ....	103
<b>Figura 3.25.</b> Concentración de H <sub>2</sub> S en la fase líquida para diferentes diámetros de burbuja. ....	104

## INTRODUCCIÓN

El petróleo ha servido por muchos años para satisfacer las demandas energéticas del mundo actual. Más de la mitad de las fracciones de petróleo producidas mundialmente son utilizadas para fines energéticos (IEA, 2019). Ya sea como combustibles para autos, camiones, maquinaria, aviones, barcos, entre otros, o como materia prima para proveer calefacción, electricidad o generar el funcionamiento de fuentes estacionarias. Sin embargo, el uso excesivo del petróleo como fuente de energía ha generado problemas importantes. El azufre contenido en el petróleo es uno de los elementos más contaminantes cuando es liberado a la atmósfera (Álvarez-Amparán et al., 2021). El azufre también es un elemento indeseado en los procesos industriales y en el diseño de procesos y equipos más amigables con el medio ambiente.

Los compuestos sulfurosos del petróleo son muy variados. Entre ellos pueden encontrarse el azufre elemental tanto en estado disuelto como en estado coloidal, el sulfuro de hidrógeno, los mercaptanos (tioalcoholes, tioles), sulfuros (tioéteres) y polisulfuros, sulfuros cíclicos (del tipo tetrahidrotiofeno), etc. Además de compuestos mixtos que contienen azufre y oxígeno o compuestos más complejos que contienen simultáneamente átomos de azufre, nitrógeno y oxígeno (Speight, 2006).

El azufre elemental, el sulfuro de hidrógeno y los mercaptanos son sustancias muy agresivas y son los compuestos sulfurados más indeseados del petróleo, estas sustancias se deben eliminar totalmente en los procesos de depuración y controlar estrictamente su existencia en los productos comerciales (Sullivan et al., 2015).

Para eliminar los compuestos sulfurosos presentes en el combustible se utilizan diferentes métodos: por ácido sulfúrico, depuración alcalina, por adsorción, por absorción y depuración catalítica. En la industria del petróleo, uno de los métodos utilizados es la depuración alcalina con una solución de hidróxido de sodio (NaOH) (Youns et al., 2022; Álvarez-Amparán et al., 2021; Castellanos, 2019).

Uno de los productos que se obtienen de la refinación del petróleo es el gas licuado del petróleo (GLP). El GLP es un hidrocarburo compuesto por propano ( $C_3H_8$ ), butano ( $C_4H_{10}$ ), o una mezcla de ambos. El GLP se comercializa ampliamente debido a sus propiedades (Descalzi, 2008):

- ✓ Concentrado (por su propiedad de licuarse fácilmente).
- ✓ Fácil de transportar.
- ✓ Fácil de almacenar.
- ✓ Combustión limpia (no deja cenizas).
- ✓ Bajo contenido de azufre, no es corrosivo.
- ✓ Alto calor específico.
- ✓ Eficiencia (se quema el 100%).
- ✓ Versatilidad.
- ✓ Se puede utilizar solo, o mezclado con aire u otros gases (ejemplo: agregar contenido de propano al butano comercial para evitar en invierno su tendencia a congelarse).

Este combustible tiene diferentes aplicaciones: doméstico, agrícola, transporte, industrial, refinería, petroquímica, etc. En todo el mundo el mayor uso del GLP corresponde al doméstico. Debido a su propiedad de licuable se comercializa de diversas formas como, buques de GLP, camiones tanques, redes de distribución, poliductos, cilindros y garrafas.

### **Antecedentes**

Según la Secretaría de Energía SENER, (2023), en México existen ocho complejos petroquímicos, seis refinерías de petróleo y nueve centros procesadores de GLP. Estas refinерías están ubicadas en Salina Cruz, Tula, Minatitlán, Cadereyta, Salamanca y Ciudad Madero con una capacidad de procesamiento de crudo de 1615 Mbd en total, y se cuenta además con una refinерía (Deer Park) en Estados Unidos a través de una alianza con la empresa Shell. El GLP se produce en todas y cada una de las refinерías administradas por Pemex Refinación y en los centros procesadores de gas de Cactus, Nuevo Pemex, Morelos, Cangrejera, Poza Rica, Reynosa y Matapionche. Además, se cuenta con una capacidad de almacenamiento de GLP de 6.03 MMb.

A pesar de tener las condiciones para producir el GLP, en México en enero de 2023 la producción nacional descendía a 92 Mbd mientras que las importaciones de este producto ascendían a 190 Mbd (SENER, 2023). Desde hace décadas, PEMEX

Transformación Industrial ha incurrido en pérdidas del orden de 100 mil millones de pesos al año debido a deficiencias operativas, falta de inversión y mantenimiento que se reflejan en un alto índice de paros no programados, baja utilización y rendimientos decrecientes. Según la propia empresa, el reto en materia de refinación es reducir las pérdidas operativas, los paros no programados y lograr convertirse en una empresa de refinación con márgenes estables. De acuerdo con un estudio efectuado por el Centro de Investigación Económica y Presupuestaria (CIEP), las causas por las que la refinación en México ha caído en los últimos años son tres principalmente (Granados-Hernández et al., 2013):

- ✓ La producción de petróleo es baja, y se compone principalmente de crudo pesado.
- ✓ Ineficiencias de operación en las refinerías.
- ✓ Presupuesto precario a PEMEX Transformación Industrial, que es la unidad encargada de la refinación.

Para el CIEP, el sistema de refinación en México se encuentra relativamente incapacitado para producir petrolíferos a partir del tipo de crudo que se extrae en el país; aunque eso no fue siempre así, ya que hasta 1996 las refinerías nacionales lograron satisfacer el total de la demanda interna. Se ha argumentado que el Sistema Nacional de Refinación (SNR) fue diseñado para procesar crudos ligeros y con bajo contenido de azufre. Sin embargo, la mayoría del petróleo extraído en México es catalogado como pesado (Granados-Hernández et al., 2013). Por consiguiente, los procesos de desulfuración deben ser más intensivos y con la mayor eficiencia posible.

Para la desulfuración del corte de destilación que se utiliza en la obtención del GLP, se pone en contacto la materia prima con una solución de NaOH en unos eyectores mezcladores que se encuentran antes de la entrada de unos tambores que trabajan macizados con 50% de hidrocarburo y otro 50% con NaOH. Cuando la concentración de la solución de NaOH alcanza el 1% se considera agotada y debe ser cambiada por solución fresca (Cortés Martínez et al., 2020).

## **Justificación del proyecto**

Existen estudios donde eliminan compuestos sulfurados utilizando una columna de burbujeo como los realizados por Tari et al., (2020) y Campuzano Calderón, (2017) y otros donde utilizan el NaOH como sustancia absorbente dentro de la columna como el estudio realizado por Seoane et al., (2009). Las columnas de burbujeo de dos fases y de suspensión se utilizan ampliamente en la industria química y bioquímica para llevar a cabo reacciones gas-líquido y gas-líquido-sólido (catalíticas); en particular, se utilizan para el crecimiento de microalgas, procesos de fermentaciones aeróbicas, tratamiento aeróbico de pequeñas cantidades de efluentes altamente contaminados, así como oxidación, hidrogenación, cloración, limpieza química de gases y, también, diversas aplicaciones biotecnológicas. Los reactores de columna de burbujeo consisten básicamente en un cilindro vertical lleno de una fase líquida en la que una fase gaseosa se distribuye en el líquido en el fondo de la columna mediante un sistema de distribución apropiado y se mueve a lo largo de la columna en forma de burbujas (Crescenzo et al., 2021). Las diversas aplicaciones de estos equipos se deben a las numerosas ventajas que proporcionan tanto en diseño como en operación comparados con otros reactores, debido a que tienen excelentes características tales como su fácil construcción y mantenimiento, sus altos coeficientes de transferencia de masa y calor, la ausencia de partes móviles y compactas y la durabilidad del catalizador y el material de empaque (Sánchez-Forero et al., 2013; Youns et al., 2022).

Para el análisis de la columna de burbujeo se hace necesario el uso de modelos matemáticos, pues solo a través de ellos es posible comprender y optimizar las complejas operaciones de refinación en general (MathPro, 2011). Teniendo en cuenta lo explicado anteriormente se plantea lo siguiente:

## **Problema científico**

¿Cuál es el efecto del transporte de masa y la reacción química en el proceso de desulfuración alcalina en una columna de burbujeo, y cómo se pueden caracterizar las condiciones de operación para lograr una remoción eficiente de azufre de un efluente gaseoso?

## **Hipótesis**

Mediante un estudio numérico del proceso de desulfuración alcalina en una columna de burbujeo, que considere el efecto de la transferencia de masa y reacción química, es posible identificar parámetros relevantes de los fenómenos, lo cual permitirá caracterizar el proceso para lograr una remoción eficiente del azufre en un efluente gaseoso.

## **Objetivo General**

Evaluar numéricamente una columna de burbujeo para la desulfuración alcalina en la obtención de GLP, considerando los efectos del transporte de masa, reacción química e hidrodinámicos.

## **Objetivos Específicos**

1. Analizar los fundamentos teóricos de la desulfuración alcalina considerando los efectos de la transferencia de masa, reacción química y la hidrodinámica en una columna de burbujeo.
2. Plantear los modelos matemáticos que describen los procesos de desulfuración alcalina en una columna de burbujeo en la obtención de GLP.
3. Resolver numéricamente los modelos matemáticos mediante un software de modelación multifísica.
4. Caracterizar la hidrodinámica de la columna de burbujeo en función del diámetro de entrada de la burbuja.
5. Identificar el efecto de la presión de operación en la eficiencia de remoción de compuestos sulfurados.

## **CAPITULO 1. REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA**

Este capítulo aborda una revisión bibliográfica clave para comprender el proceso de refinación del petróleo crudo. Explora la variedad de productos derivados, con énfasis en el gas licuado del petróleo. Además, examina la importancia de la desulfuración en los combustibles, detallando los procesos de depuración y su relación con la dinámica de fluidos computacional. Se destacan aspectos cruciales, como la dinámica de movimiento de burbujas en columnas de burbujeo y la velocidad de reacción en sistemas fluido-fluido. Este análisis sienta las bases para comprender la complejidad de la desulfuración alcalina en el contexto de la refinación de productos petrolíferos.

### **1.1. Proceso de refinación del petróleo crudo**

El petróleo crudo no tiene uso, es por eso por lo que se somete a un proceso de conversión de energía primaria a secundaria denominado refinación. Se conoce como refinación al conjunto de procesos que se aplican al petróleo crudo con la finalidad de separar sus componentes útiles y, además adecuar sus características a las necesidades de la sociedad, en cuanto a productos terminados (Arellano, 2012).

Una refinería transforma el petróleo crudo en productos derivados para satisfacer las necesidades de la sociedad. (Wauquier, 1995). Esta transformación se logra mediante los procesos de:

- 1. Destilación atmosférica.** Consiste en la separación de la mezcla de hidrocarburos líquidos en componentes más específicos, mediante la aplicación de calor hasta lograr vaporizar cada componente, aprovechando que cada uno de ellos posee diferente punto de ebullición.
- 2. Destilación al vacío.** Proceso intermedio para extraer, del residuo de la destilación atmosférica, el gasóleo usado como carga a las plantas de desintegración catalítica (FCC, por sus siglas en inglés), así como las fracciones para elaboración de aceites lubricantes.
- 3. Desintegración catalítica.** Proceso que consiste en descomponer las moléculas de hidrocarburos más grandes, pesadas y/o complejas, en moléculas más ligeras y simples. Se lleva a cabo mediante la aplicación de calor y presión

y, mediante el uso de catalizadores. La utilización de este proceso permite incrementar el rendimiento de gasolina y de otros productos importantes que tienen aplicaciones diversas en la industria del petróleo.

- 4. Hidrotratamiento.** Proceso cuyo objetivo es estabilizar catalíticamente los petrolíferos, además de eliminar los componentes contaminantes que contienen, haciéndolos reaccionar con hidrógeno a temperaturas comprendidas entre 315 y 430 °C a presiones que varían de 7 a 210 kg/cm<sup>2</sup>, en presencia de catalizadores diversos.
- 5. Reducción de viscosidad.** Proceso empleado en la refinación de petróleo para obtener hidrocarburos de bajo peso molecular tales como gases, gasolina, gasóleos y residuo de baja viscosidad, a partir de residuos de la destilación al vacío de alta viscosidad.
- 6. Coquización.** Proceso de craqueo térmico mediante el cual se consigue convertir la fracción más pesada del petróleo en coque y otros productos de alto valor añadido.
- 7. Alquilación.** Los procesos de alquilación comprenden la combinación de una olefina con un hidrocarburo parafínico o aromático en presencia de un catalizador. El proceso involucra la unión de propileno o butilenos con isobutano, en presencia de ácido fluorhídrico o sulfúrico como catalizador, para formar una isoparafina denominada alquilado ligero.
- 8. Reformación.** La mejora de la calidad antidetonante de fracciones de la gasolina se logra mediante la modificación de su estructura molecular. Este proceso, conocido como reformación, puede realizarse térmicamente mediante calor o catalíticamente con la asistencia de un catalizador.
- 9. Isomerización.** Proceso mediante el cual se altera el arreglo fundamental de los átomos de una molécula sin adherir o sustraer nada de la molécula original.
- 10. TAME y MTBE.** Oxigenantes que se utilizan como aditivo para incrementar el octanaje en la gasolina, y su utilización depende de la legislación (ambiental) con relación a la composición y calidad de las gasolinas.

La industria de refinación de petróleo encierra una serie de procesos físicos y químicos a los que se somete el petróleo crudo para obtener de él por destilación y transformación química, los diversos hidrocarburos o las familias de hidrocarburos (ver Figura 1.1). Las fracciones obtenidas se dirigen a procesos adicionales como los de hidrodesulfuración, reformación de naftas, desintegración catalítica y térmica y reducción de viscosidad que dan origen a los productos petrolíferos que se comercializan en el mercado: gasolina automotriz, diésel, combustóleo, turbosina y coque de petróleo (Speight & Ozum, 2001).

## **1.2. Productos de la refinación del petróleo**

La refinación agrega valor mediante la conversión del petróleo crudo (que, en sí mismo, tiene escaso valor como producto de consumo final) en una variedad de productos refinados, incluidos los combustibles para transporte. El principal objetivo económico de la refinación consiste en maximizar el valor agregado en la conversión del petróleo crudo en productos terminados. Las refinerías son grandes plantas de producción de gran densidad de capital, con sistemas de procesamiento extremadamente complejos (Meyers, 2016). En ellas se convierte el petróleo crudo y otros flujos de entrada en docenas de subproductos refinados, por ejemplo:

- Gas licuado de petróleo.
- Gasolina.
- Combustible pesado.
- Queroseno (para iluminación y calefacción).
- Combustible diésel.
- Materias primas de petroquímicos.
- Aceites lubricantes y ceras.
- Gasóleo de calefacción.
- Aceite combustible (para generación de energía eléctrica, combustible marino, calefacción industrial y urbana).
- Asfalto (para pavimentación y techado).

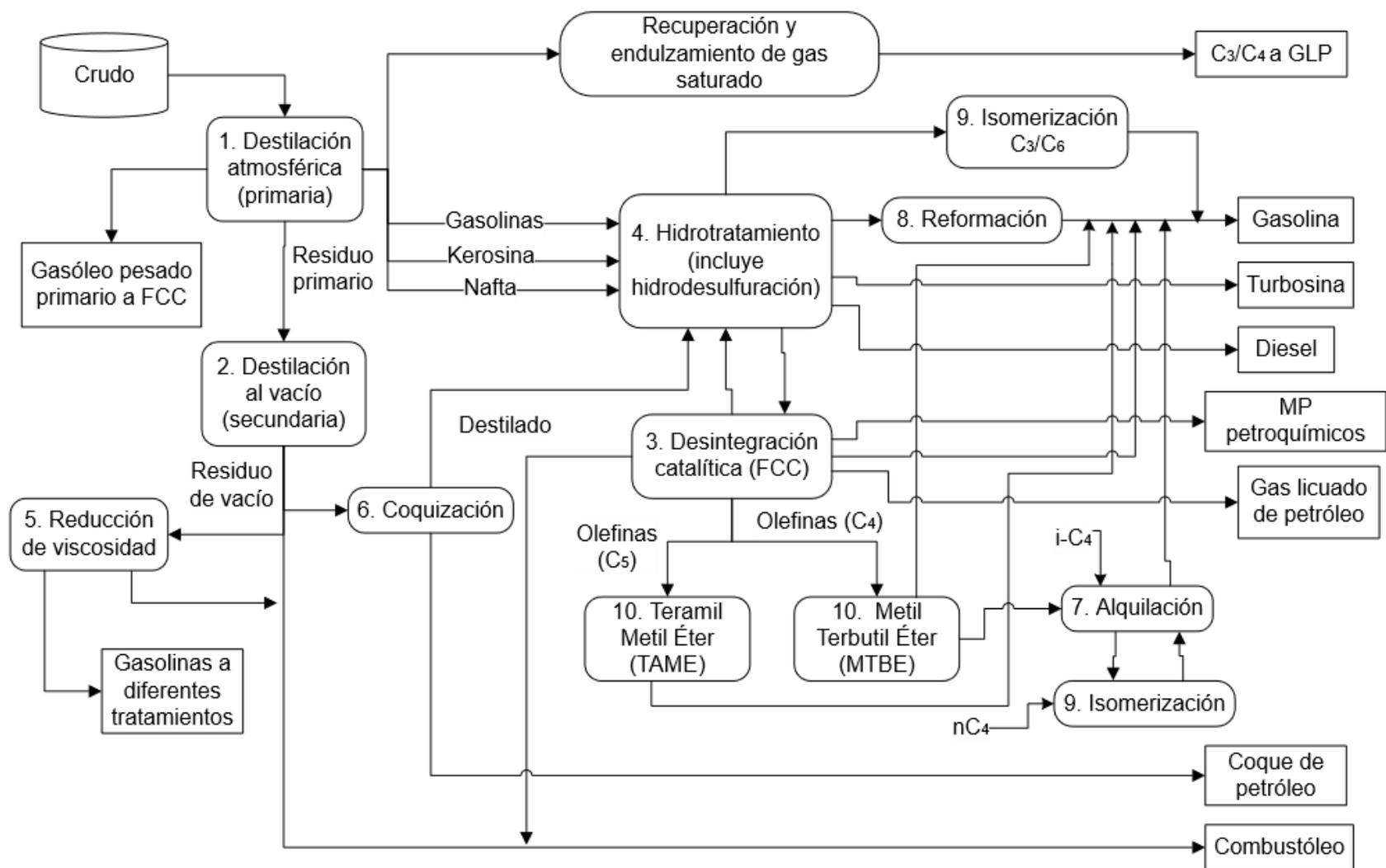


Figura 1.1 Esquema general de refinación.

Entre los subproductos mencionados, los combustibles para transporte son los de mayor valor, mientras que los aceites combustibles y el asfalto son los de menor valor. Muchos productos refinados, como la gasolina, se producen en diferentes grados, para cumplir con diferentes especificaciones y estándares (por ejemplo, índices de octano o contenido de azufre). Otro de los productos obtenidos de gran importancia es el GLP debido a que es el combustible de mayor empleo en el sector residencial de las ciudades, por la gran versatilidad de sus diversas formas de aplicación (Meyers, 2016).

### **1.2.1. Gas licuado del petróleo**

El GLP es uno de los productos de la destilación del petróleo o del gas natural. La composición del GLP puede ser marcadamente diferente dependiendo de donde provenga, generalmente está constituido por la mezcla de hidrocarburos parafínicos y olefínicos, principalmente propano y butano comercial (propano normal, butano normal, isobutano, propileno y butileno). Puede tener como impurezas etano, etileno e hidrocarburos con cinco o seis átomos de carbono (Al-Qadri et al., 2022).

El GLP muy inflamable, incoloro, muy limpio, de fácil manipulación, no corrosivo, es más pesado que el aire y no tóxico. En su estado líquido produce quemaduras a la piel por enfriamiento debido a la caída de presión. Tiene la propiedad especial de licuarse a la temperatura atmosférica si es ligeramente comprimido y se revierte a gases cuando la presión está suficientemente reducida. La ventaja de esta propiedad sirve para transportar y guardar estos productos en el estado líquido donde son aproximadamente 250 veces más densos que en el estado gaseoso y permite hacerlo llegar allí donde otras energías no llegan. Es transportado y almacenado en cilindros portátiles y tanques estacionarios. Es usado en forma líquida y gaseosa para diversas aplicaciones como combustible. El GLP en estado líquido pesa la mitad del peso del agua y en forma gaseosa es dos veces más pesado que el aire (Wang et al., 2021).

El GLP de la serie parafinas (butano y propano) son químicamente estables e inodoras y para su reglamentación requieren de una odorización artificial, excepto en los usos técnicos donde el odorante dañaría los procesos y en los casos donde la presencia del odorante no es importante. Cuando se emplea como combustible necesariamente

debe contener un agente odorizante que permita detectarlo en concentraciones menores de 1.55 % de gas en aire. Generalmente se usa como odorizante el etilmercaptano pues tiene un fuerte olor a huevo descompuesto que es muy fácil de percibir. El propileno y el butileno tienen por sí solos un olor característico desagradable (Meyers, 2016).

### **1.3. Contenido de azufre en el crudo**

Entre los heteroelementos presentes en el petróleo crudo, el azufre es el que más afecta el proceso de refinación. Los niveles suficientemente altos de azufre en el flujo de refinación pueden (1) desactivar (“contaminar”) los catalizadores que aceleran las reacciones químicas deseadas en ciertos procesos de refinación, (2) provocar la corrosión en los equipos, y (3) generar la emisión a la atmósfera de compuestos de azufre, que no son agradables y pueden estar sujetos a estrictos controles reglamentarios (Al-Jamimi et al., 2021).

El azufre presente en los combustibles utilizados en vehículos automotores provoca la emisión de compuestos de azufre no deseados, lo cual afecta negativamente a los sistemas de control de emisiones en los vehículos diseñados para regular sustancias perjudiciales como compuestos orgánicos volátiles, óxidos de nitrógeno y partículas. Consecuentemente, las refinerías deben tener la capacidad de extraer el azufre del crudo y de los flujos de refinación en la medida que sea necesario para atenuar estos efectos no deseados (Al-Qadri et al., 2022).

Cuánto más alto sea el contenido de azufre del crudo, más alto es el grado de control que se necesita y el costo del procesamiento. El contenido de azufre del crudo y los flujos de refinación se mide generalmente en tanto por ciento (%) en peso o en partes por millón por peso (ppmw). En la industria de la refinación, el petróleo crudo se denomina con poco azufre (bajo nivel de azufre), si su nivel de azufre es inferior al valor umbral (0.42 % o 4200 ppmw) y sulfuroso (alto nivel de azufre), si el nivel de azufre supera el umbral más alto (0.5 % o 5000 ppmw). La mayoría de los crudos sulfurosos registran niveles de azufre de entre 1 y 2 %, pero en algunos casos se registran niveles de azufre > 4 % (Wauquier, 1995).

En ciertos tipos de crudo, se nota un incremento gradual en la concentración de azufre a medida que se eleva la cantidad de carbono presente en la composición. Por lo tanto, las fracciones de crudo en el aceite combustible y el punto de ebullición del asfalto tienen mayor contenido de azufre en comparación con el que se registra en el punto de ebullición del combustible pesado y el diésel, que, a su vez, tienen más contenido de azufre que el que se registra en el punto de ebullición de la gasolina. Del mismo modo, los componentes más pesados presentes en, por ejemplo, el punto de ebullición de la gasolina tiene más contenido de azufre que los componentes más livianos en dicho punto de ebullición (Speight & Ozum, 2001).

#### **1.4. Los combustibles y sus constituyentes sulfurosos**

Los compuestos sulfurosos del petróleo son muy variados. Entre ellos pueden encontrarse el azufre elemental tanto en estado disuelto como en estado coloidal, el sulfuro de hidrógeno, los mercaptanos (tioalcoholes, tioles), sulfuros (tioéteres) y polisulfuros, sulfuros cíclicos (del tipo tetrahidrotiofeno), etc. Además de compuestos mixtos que contienen azufre y oxígeno o compuestos más complejos que contienen simultáneamente átomos de azufre, nitrógeno y oxígeno (Shi & Wu, 2021).

La tecnología para reducir el azufre a niveles ultra bajos se utiliza actualmente en muchos lugares en todo el mundo, permitiendo cumplir con los estándares de emisiones más estrictos y garantizando una mayor eficiencia en los procesos de refinación de petróleo. Este enfoque avanzado no solo contribuye a mejorar la calidad de los combustibles, sino que también minimiza la emisión de compuestos de azufre perjudiciales para el medio ambiente y los sistemas de control de emisiones. Los costos actuales son razonables y la industria de refinación continúa desarrollando catalizadores más activos y nuevos procesos para la remoción del azufre y reducir aún más los costos. La cantidad de sulfuro de hidrógeno en los petróleos crudos no calentados puede llegar hasta 0.02 % (en masa) y no está relacionada con el contenido total de azufre en el petróleo, no es directamente un compuesto del petróleo y reviste un carácter secundario. A pesar de esto, su acción agresiva lo convierte en un factor para tener en cuenta incluso en concentraciones reducidas (Sikkander, 2022).

El azufre elemental, el sulfuro de hidrógeno y los mercaptanos son sustancias muy agresivas y son los compuestos sulfurados más indeseados del petróleo. Estas sustancias se deben eliminar totalmente en los procesos de depuración y controlar estrictamente su existencia en los productos comerciales (Agarwal & Sudharsan, 2021).

#### **1.4.1. Importancia de la desulfuración de los combustibles**

Según Álvarez-Amparán et al., (2021), las principales razones por la cual se realizan los procesos de desulfuración en las fracciones del petróleo son las siguientes:

1. En el ámbito ambiental y de salubridad, la desulfuración es fundamental para cumplir con normas en donde se limitan las emisiones de SO<sub>x</sub> a la atmósfera, que en contacto con el vapor de agua producen la lluvia ácida.
2. Dentro de la refinación del petróleo, los procesos de isomerización, *cracking* catalítico, etc., los catalizadores son sensibles al azufre, el cual genera una disminución en su actividad catalítica.
3. Los compuestos organoazufrados en las fracciones del petróleo tienen la propiedad de corroer a todos los equipos en el proceso de refinación.

Los estudios demuestran que los beneficios obtenidos al reducir el contenido de azufre son considerablemente mayores que los costos involucrados. Aunque la inversión necesaria en el proceso de refinación sigue siendo significativa, los resultados indican que la relación costo-beneficio es favorable para implementar dicha reducción. La Agencia de Protección Ambiental (EPA, por sus siglas en inglés) de los Estados Unidos determinó que los beneficios ambientales y para la salud humana derivados de la reducción de azufre fueron diez veces superiores a los costos económicos asociados con la implementación de medidas para lograr dicha reducción. Este estudio consideró normas de emisión contingentes más estrictas para combustibles de bajo azufre. Estos compuestos orgánicos se encuentran entre las formas más comunes de contaminantes en las aguas residuales del petróleo. Muchos de ellos muestran propiedades cancerígenas, teratogénicas o mutagénicas y fueron considerados por la EPA como contaminantes prioritarios. Por lo tanto, se plantea una gran preocupación

a nivel mundial para eliminar estos contaminantes de las aguas residuales industriales y sus efluentes antes de su descarga a los cuerpos de agua, lo que también representa una grave amenaza para la vida acuática, lo que obliga a las industrias a tratarlos antes de liberarlos al medio ambiente (Agarwal & Sudharsan, 2021).

Un estudio europeo ha confirmado que la implementación de combustibles de ultra bajo azufre conlleva una marcada reducción de los costos operativos asociados a la gestión de emisiones y mantenimiento de equipos, repercutiendo directamente en un mayor rendimiento del combustible (Valderrama et al., 2009). El considerable potencial para reducir emisiones de gases de efecto invernadero es un beneficio adicional a los impactos positivos sobre la salud, sobre el ambiente y otros, derivados de la reducción del azufre (Salinas, 2021).

### **1.5. Procesos de depuración de azufre en derivados del petróleo**

En la mayoría de los casos las fracciones obtenidas por destilación primaria y por procesos secundarios de refinación no son productos comerciales acabados puesto que contienen componentes que empeoran sus propiedades de explotación, son perjudiciales en los posteriores procesos a que son sometidos o a la salud humana y el medio ambiente en general. Para eliminar estos componentes de las fracciones se realizan los procesos de depuración. Los objetivos específicos y el método que emplear dependen de la naturaleza del derivado del petróleo (Álvarez-Amparán et al., 2021). Dentro de los principales métodos de depuración utilizados en los tratamientos a los productos destilados claros se puede encontrar:

- 1- Depuración por ácido sulfúrico.
- 2- Depuración alcalina.
- 3- Depuración por adsorción.
- 4- Depuración por absorción.
- 5- Depuración catalítica.
  - a) Hidrodepuración sobre catalizadores de aluminio-cobalto-molibdeno (Al-Co-Mo).

b) Proceso Merox. En muchas ocasiones es necesaria la combinación de estos métodos para lograr buenos resultados en el producto final.

En las refinerías de petróleo, la depuración alcalina emerge como el método preponderante para eliminar compuestos sulfurosos durante la obtención de GLP. Esta elección destaca por su rentabilidad económica, eficiencia probada y practicidad en la implementación. La depuración alcalina se ha consolidado como una opción preferida en la industria, siendo económicamente viable y altamente eficaz en la remoción de sulfuros, lo que contribuye a la producción eficiente y de alta calidad del GLP. Su practicidad en términos de implementación y mantenimiento la convierte en la elección preferida en muchos casos, respaldada por su capacidad para optimizar de manera efectiva los procesos de refinación. Este método será analizado con más detalle a continuación.

### 1.5.1. Depuración alcalina

La depuración alcalina tiene por objetivo eliminar de los destilados los compuestos ácidos y sulfuros, tales como:

- a) Los ácidos nafténicos, grasos y fenoles.
- b) Compuestos ácidos en los destilados después de la depuración con ácido sulfúrico, dentro de estos se puede encontrar el ácido sulfúrico libre, ésteres ácidos del ácido sulfúrico, ácidos sulfónicos, etc.
- c) Sulfuro de hidrógeno y mercaptanos inferiores.

Con otros componentes presentes en los destilados claros los álcalis no reaccionan. Los sulfuros (tioéteres) presentan marcadas características básicas ( $\text{pH} > 7$ ) por lo que no reaccionan con la sosa (Czajczyńska et al., 2022; Sadeghi et al., 2021).

Cuando el sulfuro de hidrógeno ( $\text{H}_2\text{S}$ ) se absorbe en una solución acuosa de hidróxido de sodio ( $\text{NaOH}$ ), se considera que ocurren dos reacciones que tienen lugar en la fase líquida como se muestra en las Ecuaciones 1.1 y 1.2.



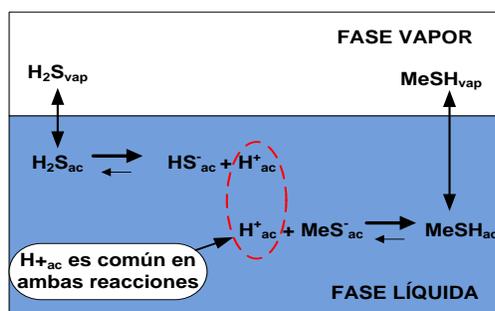
Bajo condiciones normales de operación esta reacción es considerada irreversible. El uso del NaOH para un prelavado es usualmente mantenido entre 5° y 15° Bé.

Esta situación se debe a que, dentro de este intervalo, la solución cáustica presenta una menor propensión al arrastre en comparación con las soluciones de mayor densidad. El tiempo total de eficacia de esta solución queda determinado por la gravedad y el volumen empleado (Camizán Vigo, 2 015).

Los mercaptanos reaccionan con el álcali formando los mercaptidos de acuerdo con la siguiente fórmula:



Esta reacción se ve limitada con el aumento de la cadena de carbonos debido a la disminución de la solubilidad en el agua y a la división de los mercaptanos entre la fase hidrocarbonada y el agua. Además, las bajas temperaturas favorecen la extracción de mercaptanos (Pino et al., 2020). Los mercaptanos son débilmente ácidos por lo que la reacción es fácilmente reversible. La relevancia de la acidez radica en su influencia significativa en el comportamiento de equilibrio entre las fases líquida y de vapor de los gases disueltos. Este impacto se visualiza en la Figura 1.2, la cual representa el equilibrio de vapor-líquido para H<sub>2</sub>S y metil mercaptano (MeSH) en agua (Jones et al., 2021).



**Figura 1.2** Reacción simultánea y equilibrio liquido-vapor con H<sub>2</sub>S y MeSH. Tomado de (Jones et al., 2021).

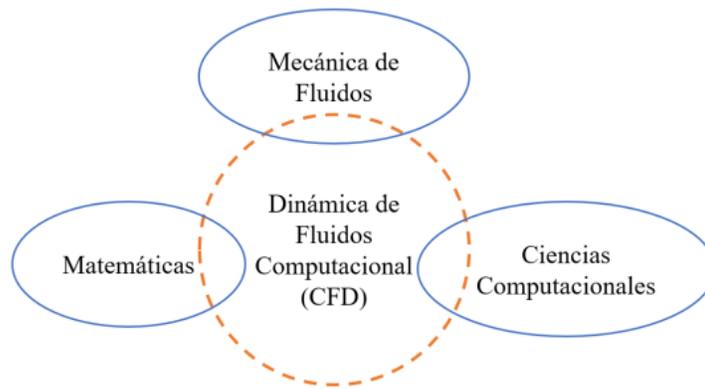
La forma molecular del H<sub>2</sub>S alcanza el equilibrio a través de la interfaz vapor-líquido, pero parte del H<sub>2</sub>S molecular acuoso se disocia en especies iónicas en un grado

controlado por el equilibrio de la reacción. El metil-mercaptano participa en equilibrios análogos. Hay que tener en cuenta que tanto la reacción de disociación de  $\text{H}_2\text{S}$  como la reacción de disociación de metil-mercaptano producen un ion  $\text{H}^+_{\text{ac}}$ . El  $\text{H}_2\text{S}$  es un ácido más fuerte, por lo que se disocia en mayor medida que el metil-mercaptano, produciendo un exceso de iones  $\text{H}^+_{\text{ac}}$ . La elevada concentración de iones  $\text{H}^+$  favorece el desplazamiento del equilibrio de disociación del metil-mercaptano hacia su forma molecular. Tener una fracción más grande del metil-mercaptano acuoso en forma molecular cambia el equilibrio líquido – vapor. Como resultado, el ácido más fuerte ( $\text{H}_2\text{S}$ ) genera una concentración considerable del ion común  $\text{H}^+_{\text{ac}}$ , lo cual desplaza al ácido más débil ( $\text{R-SH}$ ) de la fase líquida (Jones et al., 2021).

### **1.6. Dinámica de fluidos computacional**

La dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés), es el análisis de sistemas que involucran flujo de fluidos, transferencia de calor y fenómenos asociados como reacciones químicas por medio de simulaciones numéricas y el desarrollo de algoritmos de simulación adecuados basados en computadora (Luna-Luna, 2021). Esta técnica es muy poderosa por lo que puede abarcar una amplia gama de áreas de aplicación (Kajishima & Taira, 2017; Versteeg & Malalasekera, 2007).

Su historia comenzó en la década de 1960 en la industria aeroespacial y posteriormente, en la década de 1970, se convirtió en un acrónimo de una combinación de física, matemáticas y, ciencias de la computación (ver Figura 1.3) empleadas para simular flujos de fluidos (Blazek, 2015). El CFD se utiliza a menudo como una herramienta para apoyar la investigación y el desarrollo en ciencia e ingeniería (Kajishima & Taira, 2017). Se ha vuelto tan fuerte que hoy en día puede verse como una "tercera dimensión" en la dinámica de fluidos, siendo las otras dos dimensiones los casos clásicos de experimento y teoría puros (Wendt, 2009). Esto se debe a que la física del flujo en CFD se analiza y predice resolviendo numéricamente las ecuaciones que gobiernan y reproduciendo el campo de flujo con el uso de computadoras (Kajishima & Taira, 2017).



**Figura 1.3.** Disciplinas que involucran CFD. Tomado de (Xamán, 2016).

Las simulaciones también se han convertido en una herramienta valiosa en la investigación fundamental debido a su capacidad para analizar fenómenos complejos que pueden ser difíciles de estudiar con medidas experimentales o análisis teóricos (Kajishima & Taira, 2017). En lo que respecta a la solución de un problema, la secuencia y estructura para usuarios de CFD están estructurados en torno a algoritmos numéricos (Xamán, 2016). Sin embargo, con el fin de proporcionar un fácil acceso a su poder de resolución, todos los paquetes CFD comerciales incluyen sofisticadas interfaces de usuario para ingresar los parámetros de problemas y examinar los resultados (Luna-Luna, 2021).

### **1.7. Columnas de burbujeo**

Los reactores de columna de burbujeo (BCR) son sistemas verticales multifásicos que incorporan gas, líquido o lodo, y partículas finas. En este diseño, el gas se introduce mediante un rociador, generando burbujas dentro del líquido o lodo. Los BCR's son ventajosos ya que pueden usarse en una variedad de aplicaciones en las industrias química, bioquímica, petroquímica y metalúrgica (Lemoine et al., 2008). Además, el líquido en la reacción de tres fases es beneficioso ya que permite un control de temperatura más preciso debido a la alta capacidad calorífica del líquido (Nigam & Schumpe, 1996). Ampliar, modelar y diseñar reactores de columna de burbujeo es un proceso complejo, ya que requiere un conocimiento detallado en relación con la cinética, la hidrodinámica, la transferencia de calor y masa, las velocidades de reacción

química, la retención de fase, los regímenes de flujo, el cambio de presión y la distribución de sólidos. Las simulaciones CFD se pueden utilizar para ayudar a modelar las reacciones y diseñar este tipo de reactores (Abdulrahman & Nassar, 2022).

Las reacciones en tales reactores son a menudo clasificados en regímenes lentos y rápidos, donde cada régimen requiere condiciones específicas para asegurar el funcionamiento adecuado del reactor (Lemoine et al., 2008). En un régimen de reacción lenta, es necesario asegurar que la concentración de gas en la masa (por ejemplo, en un líquido) se mantenga cercana al punto de saturación, es decir, al límite máximo de disolución del gas en el líquido. Mantener la concentración de gas próxima a la saturación es crucial para optimizar las condiciones de reacción en procesos donde la velocidad de reacción es un factor determinante. Por otro lado, en un régimen de reacción rápida, se necesitan una alta retención de gas y un tamaño de burbuja reducido, ya que la concentración de gas en el volumen líquido es prácticamente nula y la tasa de absorción de gas está controlada principalmente por el área interfacial gas-líquido. Charpentier, (1981) informó que los reactores de columna de burbujeo para pulpa (SBCR, por sus siglas en inglés), columnas de burbujas empacadas y reactores agitados (AR, por sus siglas en inglés) con alta retención de líquido son adecuados para procesos de reacción lenta, como la mayoría de las oxidaciones en fase líquida, hidrogenaciones, cloración y algunas fermentaciones. También informó que los reactores de placas, columnas empacadas y tipo venturi son más adecuados para procesos de reacción rápida debido a las altas áreas interfaciales gas-líquido que caracterizan a dichos reactores (Lemoine et al., 2008).

Deckwer y Schumpe, (1993), sin embargo, mencionaron que, bajo condiciones específicas, como una importante eliminación de calor, los BCR y SBCR podrían usarse para procesos de reacción rápida. Por lo tanto, los BCR y SBCR también parecen ser adecuados para realizar procesos de reacción rápida altamente exotérmicos, que se utilizan ampliamente en aplicaciones químicas, bioquímicas, petroquímicas y metalúrgicas (Lemoine et al., 2008).

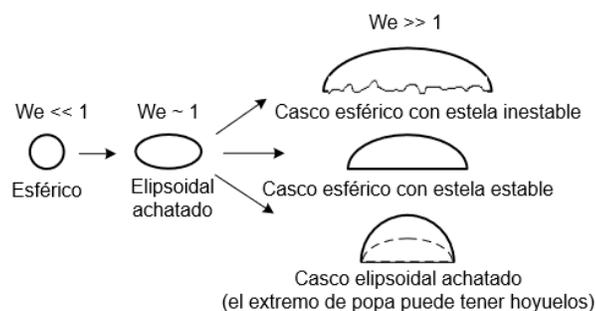
### 1.7.1. Dinámica del movimiento de una burbuja

Intuitivamente se sabe que las burbujas producidas por la inyección de gas en el fondo de un recipiente que contiene un líquido tenderán a elevarse hasta la superficie del líquido donde el gas contenido en la burbuja escapará en la interfase líquido-gas hacia la atmósfera circundante. La inyección continua de gas, por su parte, provocará un movimiento del fluido (Solís-Herrera, 2015).

Las características de ascenso de una burbuja han sido descritas en términos de la forma, la velocidad de ascenso y el movimiento de la burbuja. Estas características de ascenso están estrechamente asociadas con el régimen de flujo, las propiedades físicas del fluido (principalmente la viscosidad y presencia o ausencia de partículas sólidas), así como las propiedades interfaciales (es decir, la presencia o ausencia de agentes tensoactivos) en la superficie de la burbuja (Fan & Tsuchiya, 1990).

### 1.7.2. Tipo de burbujas.

La interacción entre las burbujas de gas y el medio líquido que las rodea determina la forma de la burbuja y la magnitud de la perturbación en el campo de flujo circundante. Las burbujas en movimiento son generalmente clasificadas con forma esférica, elipsoidal achatada y gorro elipsoidal/esférico como se muestra en la Figura 1.4. La forma está basada en las magnitudes relevantes de las fuerzas que actúan sobre la burbuja como la tensión superficial y fuerzas inerciales.



**Figura 1.4.** Varios tipos de burbujas a partir del número de Weber:  $We = \frac{d_b \rho u_{slip}^2}{\sigma}$ .

Tomado de (Shu et al., 2019)

En general, la forma de burbuja no puede ser completamente predicha a menos que se tenga en cuenta todas las variables físicas relacionadas con la elevación de la

burbuja. Haberman et al., (1953) sugirieron un análisis dimensional basado en ocho variables: aceleración de la gravedad ( $g$ ), diámetro de la esfera de volumen equivalente ( $d_b$ ), densidad ( $\rho_l$ ) y viscosidad ( $\mu_l$ ) del líquido circundante, tensión superficial del líquido ( $\sigma$ ), y la densidad ( $\rho_g$ ) y viscosidad ( $\mu_g$ ) del gas dentro de la burbuja. Con estas variables, pueden ser formados cinco grupos adimensionales independientes. Si las variables  $\rho_g$  y  $\mu_g$  se consideran despreciables pueden ser eliminados dos grupos adimensionales. Esto es válido cuando se compara la densidad y viscosidad del aire con la del agua, por ejemplo (Inaipil Leal, 2015). Los tres grupos adimensionales serían:

**Número de Reynolds para burbujas:** es la relación de fuerzas inerciales y viscosas entre la burbuja y líquido.

$$Re_b = \frac{\rho_l d_b \mathbf{u}_{slip}}{\mu_l} \quad (1.4)$$

Donde  $\mathbf{u}_{slip}$  es la velocidad de deslizamiento de la burbuja a través del líquido (m/s).

**Número de Eötvös:** es la relación entre la fuerza de gravedad o boyante de la burbuja y la fuerzas por tensión superficial del líquido, se puede encontrar en la literatura también bajo el nombre de número de Bond de la burbuja.

$$Eo = \frac{g \rho_l d_b^2}{\sigma} \quad (1.5)$$

**Número de Morton:** es la relación de fuerzas viscosas y fuerzas por tensión superficial del líquido, es invariable aun cuando cambie el régimen de la burbuja; y como es sensiblemente dependiente de la viscosidad del medio líquido, en la literatura a veces se encuentra usado como la raíz cuarta de su valor.

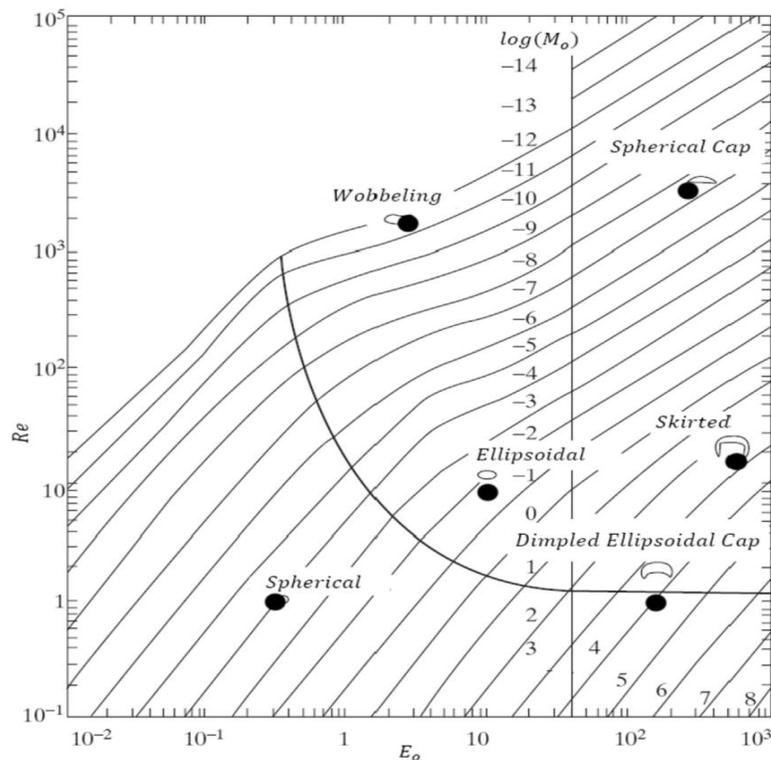
$$Mo = \frac{g \mu_l^4}{\rho_l \sigma^3} \quad (1.6)$$

Bajo circunstancias especiales, son posibles mayores simplificaciones. Por ejemplo, para líquidos con alta viscosidad (alto número de Morton) la forma de la burbuja es

función solo del número de Reynolds. Para líquidos de baja viscosidad, la forma de la burbuja depende del número de Morton y el Número de Reynolds. La relación entre  $Re_b$ ,  $Mo$  y  $Eo$  se presenta en la Figura 1.5, donde  $Eo$  se ubica en el eje de las abscisas,  $Re_b$  en el eje de las ordenadas y se observan que la curva son los valores de  $Mo$  expresado en el logaritmo en base decimal.

A partir de este diagrama se pueden distinguir cuatro grandes familias, cuya clasificación depende de sus correspondientes valores adimensionales:

Burbujas esféricas	$0.01 \leq Eo \leq 1$	$0.1 \leq Re_b \leq 10$
Burbujas elipsoidales	$0.2 \leq Eo \leq 30$	$1 \leq Re_b \leq 10\,000$
Burbujas tapa esférica	$30 \leq Eo \leq 1\,000$	$100 \leq Re_b \leq 100\,000$
Burbujas con falda	$30 \leq Eo \leq 1\,000$	$1 \leq Re_b \leq 100$



**Figura 1.5.** Mapa del régimen de forma para burbujas ascendiendo en un líquido Newtoniano. Tomado de (Fan & Tsuchiya, 1990)

### 1.7.3. Tamaño de la burbuja

El tamaño de la burbuja es un parámetro común en el modelo de fuerzas interfaciales y afecta significativamente la precisión de la predicción del comportamiento de las burbujas multidimensionales en flujos de dos fases porque determina la transferencia de masa, cantidad de movimiento y energía entre fases. En particular, los términos de transferencia interfacial de masa son proporcionales a las fuerzas motrices multiplicadas por la concentración del área interfacial (IAC, por sus siglas en inglés), que tiene la siguiente relación para la burbuja esférica esperada en un flujo de burbujas (Bak et al., 2020).

$$a = \frac{6\alpha}{d_b} \quad (1.7)$$

Donde  $a$  es el IAC,  $\alpha$  es la fracción vacía y  $d_b$  el diámetro de la burbuja.

Hay muchos modelos mecánicos de tamaño de burbuja para predecir el tamaño de burbuja (o IAC) en un canal de flujo. Ishii et al., (2002) desarrollaron una ecuación de transporte de área interfacial unidimensional que incluye términos de sumidero y fuente que predice dinámicamente las variaciones axiales de la concentración del área interfacial. Wu et al., (1997), Hibiki & Ishii, (2009), así como Yao & Morel, (2004) propusieron modelos constitutivos para los términos fuente y sumidero que componen la ecuación de transporte del área interfacial (ETAI). Posteriormente, Yeoh & Tu, (2005) evaluaron el desempeño de la ecuación de transporte de densidad del número de burbujas con los modelos constitutivos en la simulación de flujos adiabáticos de aire – agua. Lo & Zhang, (2009) y Yun et al., (2012) intentaron aplicar el modelo  $S_\gamma$  volumétrico conservado que se basa en una distribución de tamaño de burbuja logarítmica normal supuesta previamente. El modelo  $S_\gamma$  es un enfoque utilizado en simulaciones numéricas de flujos bifásicos gas-líquido con alta velocidad superficial en una tubería vertical. Relacionado con la ecuación de balance de población, se emplea para prever la evolución de la distribución del tamaño de las burbujas debido a coalescencia y ruptura. Con  $\gamma$  para representar diferentes momentos de la distribución, los investigadores tienen más opciones para resolver: densidad del número de

burbujas ( $\gamma = 0$ ), densidad del área interfacial ( $\gamma = 2$ ) y/o fracción de volumen ( $\gamma = 3$ ). Este parámetro de momento generalizado es aplicable a flujos de aire – agua y ebullición subenfriada. Además, Duan et al., (2011) evaluaron dos tipos de modelos de equilibrio de población, a saber, el grupo no homogéneo de varios tamaños y los modelos de densidad de número de burbujas promedio, para flujos de aire y agua. Sin embargo, estos modelos mecánicos requieren varios modelos adicionales y complicados para los términos fuente y sumidero en las ecuaciones de transporte y una gran cantidad de tiempo de cálculo en la aplicación CFD.

Algunos investigadores han presentado modelos de tamaño de burbuja de tipo correlación que asumen el tamaño de burbuja como un grupo (Akita & Yoshida, 1974; Hibiki & Ishii, 2001, 2002; Kocamustafaogullari et al., 1994). Además, se ha propuesto un modelo de dos grupos que consta de burbujas esféricas y elipsoidales (Fu & Ishii, 2003; Ozar et al., 2012; Schlegel & Hibiki, 2015; Shen & Hibiki, 2015). Debido a que estos modelos se han desarrollado sobre la base de los parámetros y propiedades promedio de dos fases en la sección transversal del canal de flujo, solo son aplicables al análisis unidimensional.

Akita & Yoshida, (1974) presentaron una correlación experimental del tamaño de las burbujas utilizando datos de 58 columnas de burbujas bajo flujo de aire y agua. Sin embargo, esta correlación no predice adecuadamente el tamaño de la burbuja si se desvía del tamaño de la burbuja utilizado para desarrollar la correlación (Hibiki & Ishii, 2001). El mecanismo de ruptura de la burbuja se puede expresar como un equilibrio entre el estrés externo y la tensión superficial, que se puede definir como el número de Weber.

Kocamustafaogullari et al., (1994) desarrollaron una correlación teórica del tamaño de la burbuja sobre la base del número crítico de Weber. Debido a que el error aumenta a medida que disminuye la tasa de disipación de energía (Hibiki & Ishii, 2002), es difícil aplicar la correlación a condiciones de flujo con una tasa de disipación de energía baja. Hibiki & Ishii, (2001) derivaron la correlación del tamaño de burbuja aplicable al flujo burbujeante de la ETAI y la validaron con 204 conjuntos de datos medidos bajo el flujo

de aire – agua de alta convección. Posteriormente, Hibiki & Ishii, (2002) desarrollaron otra correlación de tamaño de burbuja basada en 459 datos de varias propiedades de fluidos.

Esta correlación se validó para una amplia gama de flujos burbujeantes adiabáticos, incluidos varios tamaños de canales, un flujo de convección forzada y un sistema de flujo de dos fases en el tanque. Todas las correlaciones para el sistema gas-líquido descritas anteriormente se desarrollaron utilizando las propiedades promediadas de la sección transversal y los parámetros de dos fases del canal de flujo en condiciones de presión atmosférica. Sin embargo, cuando los modelos se aplicaron a los códigos CFD para su evaluación en este estudio, los cálculos se realizaron considerando propiedades y parámetros locales. Las correlaciones con sus condiciones de aplicación se resumen en la Tabla 1.1.

**Tabla 1.1.** Correlaciones de tamaño de burbuja de un grupo existentes para el sistema gas - líquido.

Investigador	Correlación	Condiciones de aplicación			
		Condición de flujo	Geometría del canal	$j_g$ (m/s)	$j_l$ (m/s)
Akita & Yoshida, (1974)	$d_b = 18 \frac{v_f^{0.2}}{\alpha^{0.13} g^{0.6} D_H^{0.3}} \left( \frac{\sigma}{\rho_f} \right)^{0.5}$	Columnas de burbujas ascendentes	Canal cuadrado vertical	0.0007-0.073	0
Kocamustafao gullari et al., (1994)	$d_b = 0.707 \frac{D_H^{0.44} \alpha^{0.22}}{\varepsilon^{0.22}} \left( \frac{\sigma}{\rho_f} \right)^{0.33}$	Flujo burbujeante concurrente	Tubería horizontal	0.21-1.34	3.74-6.59
Hibiki & Ishii, (2001)	$d_b = 12 \frac{\alpha^{0.153} v_f^{0.212}}{\varepsilon^{0.0707} D_H^{0.283}} \left( \frac{\sigma}{g\Delta\rho} \right)^{0.5}$	Flujo burbujeante adiabático	Tubo vertical, tubo horizontal, anillo, empaque	0.0029-4.87	0.261-6.55
Hibiki & Ishii, (2002)	$d_b = 1.99 \frac{D_H^{0.335} v_f^{0.239}}{\varepsilon^{0.797}} \left( \frac{g\Delta\rho}{\sigma} \right)^{0.346}$	Flujo burbujeante adiabático, columnas de burbujas	Tubo vertical, tubo horizontal, anillo, empaque	0.0007-4.87	0-6.55
Bak et al., (2020)	$d_b = 258.4 \alpha^{0.383} Re_b^{-0.562} We_r^{-0.443}$	Flujos burbujeantes convectivos forzados	Tubo vertical	0.05-0.624	0.5-5

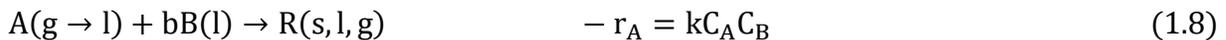
Continuación Tabla 1.1

Nomenclatura para las correlaciones	
$\nu_f$ → viscosidad cinemática del líquido	Número de Reynolds turbulento
$\alpha$ → fracción vacía	$Re_b = \frac{\varepsilon^{1/3} L_o^{4/3}}{\nu_f}$
$g$ → aceleración de la gravedad	Longitud de Laplace
$D_H$ → diámetro equivalente hidráulico del canal de flujo	$L_o = \sqrt{\sigma/g\Delta\rho}$
$\sigma$ → tensión superficial	Número de Weber
$\rho_f$ → densidad del líquido	$We_r = 2\rho_f U_r L_o / \sigma$
$\varepsilon$ → tasa de disipación de la energía	$U_r$ → velocidad relativa de las fases
$j_i$ → velocidad superficial	

### 1.8. Velocidad de reacción en sistemas fluido-fluido

La expresión de velocidad global para la reacción deberá tener en cuenta la resistencia a la transferencia de masa (para que los reactivos entren en contacto) y la resistencia en las etapas de reacción química. Como la magnitud relativa de estas resistencias puede variar ampliamente, se tiene una gran cantidad de posibilidades a considerar (Levenspiel, 2004).

Considerando la siguiente reacción de segundo orden:



El reactivo A debe moverse del gas al líquido para que la reacción ocurra, por lo que en la velocidad se incluyen resistencias difusionales. La reacción transcurrirá en una fase u otra dependiendo fundamentalmente de la solubilidad de los componentes reactivos en una fase o en otra, ya que la solubilidad es quien determina el desplazamiento de los reactivos entre ambas fases. La solubilidad del reactivo A en la fase líquida viene dada por la Ley de Henry (Ecuación 1.9):

$$p_{Ai} = H_A * C_{Ai} \quad (1.9)$$

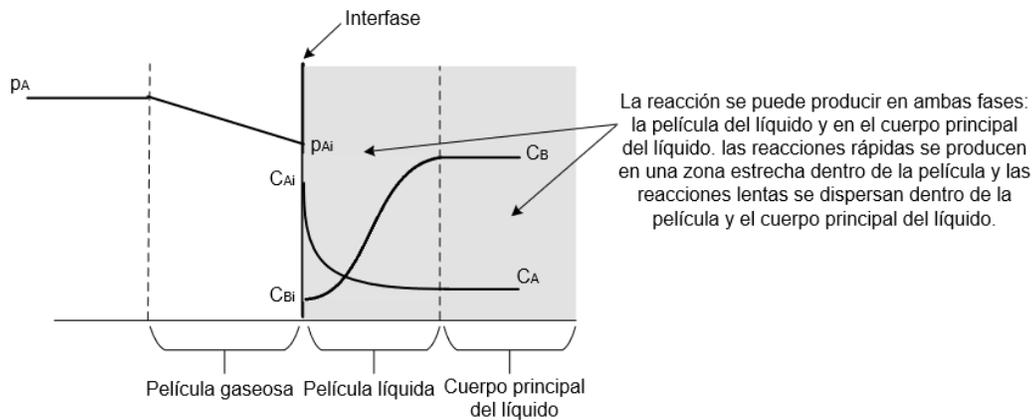
Donde  $p_{Ai}$  es la presión parcial del componente A en la fase gaseosa,  $C_{Ai}$  es la concentración molar de A ( $\text{kg}/\text{m}^3$  o  $\text{kmol}/\text{m}^3$ ) en la fase líquida y  $H_A$  es la constante de Henry y sus unidades dependerán de las unidades de concentración.

Se han propuesto varios modelos para describir el fenómeno que se produce cuando las dos fases se ponen en contacto. El modelo más utilizado es la teoría de la doble

capa propuesta por Lewis-Whitman. Esta propone la existencia de distintas zonas a lo largo del volumen total de reacción que actúan como un conjunto de resistencias en serie frente al movimiento de los reactivos (Izquierdo & Torres, 2004). Estas zonas son:

- Resistencia a la transferencia del reactivo A a través de la fase gaseosa, equivalente a la resistencia que opondría por difusión molecular la de una capa adherida a la interfase.
- Resistencia a través de la interfase (muchas veces despreciable).
- Resistencia a la transferencia del reactivo A desde la interfase hasta la zona de reacción, equivalente a lo que opondría la película donde el régimen de transporte es de difusión molecular en la fase líquida.
- Resistencia del reactivo B a través de la fase líquida hasta la zona de reacción.

En la Figura 1.6 se muestra un esquema de la absorción de A en líquido con reacción química basándose en la teoría de doble capa.



**Figura 1.6.** Absorción de A en líquido con reacción química basándose en la teoría de transferencia de masa con reacción química. Tomado de (Levenspiel, 2004)

Cuando se trata de transferencia de masa con reacción química hay que considerar tres factores: lo que ocurre en la película gaseosa, en la película líquida y en el cuerpo principal del líquido. Existen diferentes formas especiales de la ecuación de velocidad dependiendo de los valores relativos de las constantes cinéticas, de la relación de las concentraciones de los reactivos y de la constante de la ley de Henry (Brito Ponce,

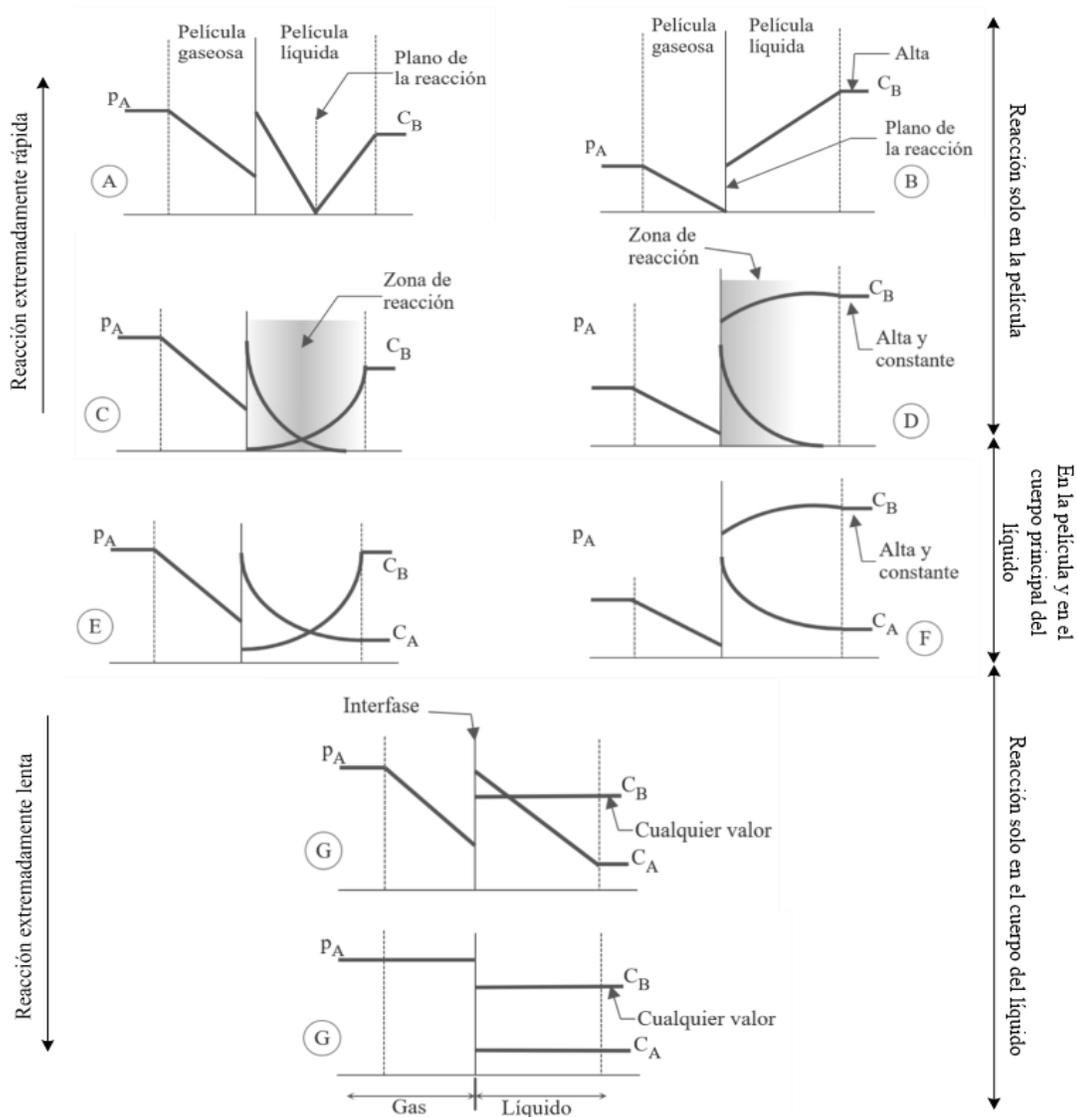
2008). Estas formas especiales van desde el extremo de una reacción infinitamente rápida (control por transferencia de masa) al otro extremo de una reacción muy lenta (donde no se necesita tener en cuenta la resistencia a la transferencia de masa) (Levenspiel, 2004). Las ocho formas especiales son (ver Figura 1.7):

- A.** Reacción instantánea con  $C_B$  bajo.
- B.** Reacción instantánea con  $C_B$  alto.
- C.** Reacción rápida en la película líquida, con  $C_B$  bajo.
- D.** Reacción rápida en la película líquida, con  $C_B$  alto.
- E y F.** Reacción con velocidad intermedia en la película líquida y en el cuerpo principal del líquido.
- G.** Reacción lenta en el cuerpo principal del líquido, pero con resistencia en la película.
- H.** Reacción lenta, sin resistencia a la transferencia de masa.

La expresión general para la velocidad de reacción que tiene en cuenta todos los factores explicados anteriormente es la Ecuación 1.10:

$$-r''_A = \frac{1}{\frac{1}{k_{Ag}a} + \frac{H_A}{k_{Al}aE} + \frac{H_A}{kC_Bf_l}} p_A \quad (1.10)$$

Donde  $k_{Ag}$  es el coeficiente individual de transferencia de masa del reactivo A en la fase gaseosa (m/s),  $a$  es el área interfacial ( $m^2/m^3$ ),  $k_{Al}$  es el coeficiente individual de transferencia de masa del reactivo A en la fase líquida (m/s),  $k$  es la constante de velocidad cinética (sus unidades dependen del orden de la reacción),  $C_B$  es la concentración del reactivo B en el líquido y  $f_l$  es la relación entre el volumen del líquido y el volumen del aparato de contacto.



**Figura 1.7.** Comportamiento en la interfase para la reacción en fase líquida para el intervalo completo de velocidades de reacción y transferencia de masa. Editado de (Levenspiel, 2004)

Según Takamatsu et al., (1964), la absorción de A es mayor cuando hay reacción química, por lo que para las mismas concentraciones en las dos fronteras de la película se define el factor de mejoramiento de la película líquida, E (Ecuación 1.11):

$$E = \left( \frac{\text{velocidad de absorción real de A}}{\text{velocidad de absorción de A sin reacción}} \right)_{\text{las mismas } C_{A1}, C_{A2}, C_{B1}, C_{B2} \text{ en los dos casos}} \quad (1.11)$$

Este factor es siempre mayor o igual que 1. El único problema es evaluarlo, por lo que se han definido dos parámetros: el factor de incremento para reacción infinitamente rápida ( $E_i$ ) (Ecuación 1.12) y el módulo de Hatta ( $M_H$ ) (Ecuación 1.13).

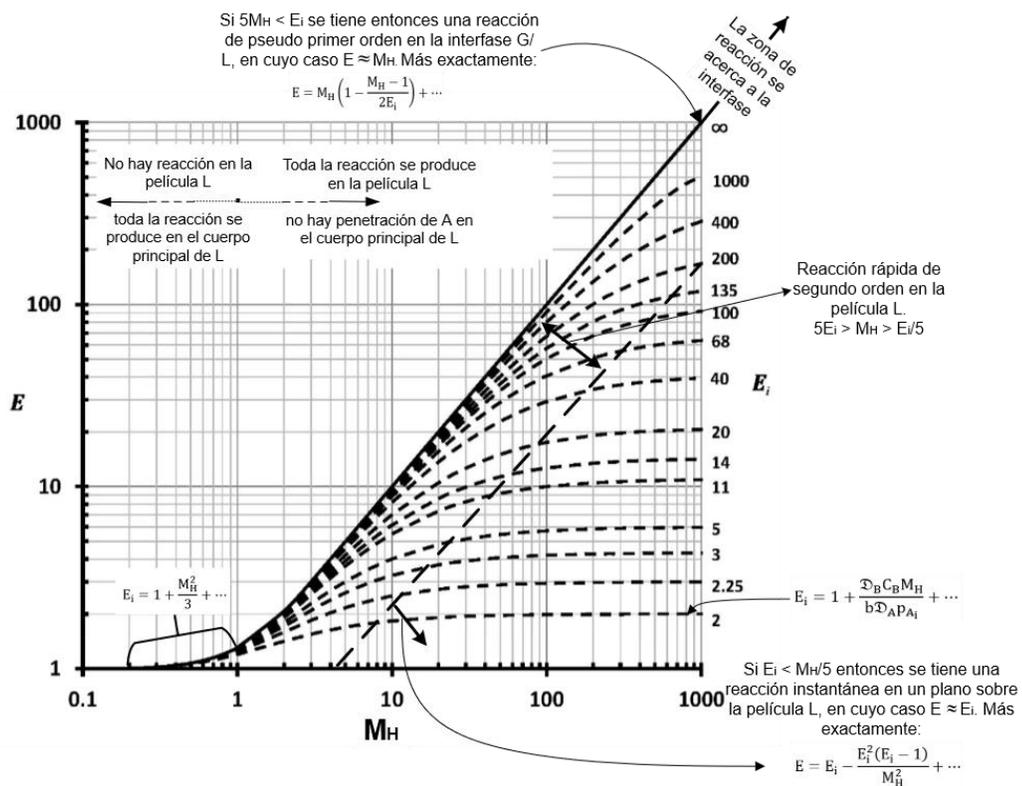
$$E_i = 1 + \frac{\mathcal{D}_{B1}C_B}{b\mathcal{D}_{A1}C_{A1}} \quad (1.12)$$

$$M_H = \frac{\sqrt{kC_B\mathcal{D}_{A1}}}{k_{A1}} \quad (1.13)$$

Donde  $\mathcal{D}_{A1}$  y  $\mathcal{D}_{B1}$  son las difusividades moleculares de los reactivos A y B respectivamente en la fase líquida ( $m^2/s$ ), b es el coeficiente estequiométrico del reactivo B. Van Krevelen & Hoftijzer, (1947) dedujeron de forma numérica una correlación para el coeficiente E en función de  $E_i$  y  $M_H$  (Ecuación 1.14) y en la Figura 1.8 se muestra de forma gráfica.

$$E = \frac{\sqrt{M_H^2 \frac{E_i - E}{E_i - 1}}}{\tanh \sqrt{M_H^2 \frac{E_i - E}{E_i - 1}}} \quad (1.14)$$

De forma general el parámetro  $M_H$  se utiliza para determinar cuándo una reacción es lenta o rápida. Para esto se considerará la interfase gas – líquido y se supondrá que la resistencia de la fase gaseosa es despreciable. Se ha observado que si  $M_H^2$  es mucho mayor que la unidad significa que la transferencia de masa es muy rápida, lo que a su vez significa que la reacción química es muy alta y que la velocidad global solo dependerá de la difusión. Por el contrario, si  $M_H^2$  es muy pequeño significa que la reacción química es muy lenta y que la difusión no es el factor limitante (Izquierdo & Torres, 2004; Levenspiel, 2004). Se pueden distinguir varios casos posibles, estos se muestran en la Tabla 1.2.



**Figura 1.8.** El factor de mejoramiento para reacciones fluido – fluido en función de  $E_i$  y  $M_H$ , modificado a partir de la solución numérica dada por Van Krevelen & Hoftijzer, (1947). Tomado de (Levenspiel, 2004)

**Tabla 1.2.** Valores de  $M_H$  y  $E_i$  para diferentes regímenes cinéticos

Caso	Condición	Expresión/Relación
A	$M_H > 3$ $M_H^2 \geq (4E_i - 3)^2$ $M_H^2 > 4$	$E \approx E_i$ $M_H > 5E_i$
B	$\frac{k_{BI}C_B}{b} \geq k_{Ag}p_A$	$E = E_i \rightarrow \infty$
C	$M_H > 1$	$E \approx M_H$ $5M_H < E_i$
D	$M_H < \frac{E_i}{2}$	
E y F	$0.3 < M_H < 3$	$E = 1 + \frac{M_H^2}{3}$ $0.0004 < M_H^2 < 4$
G	$0.02 < M_H < 0.3$ $0.0004 < M_H^2 < 4$	$E \cong 1$
H	$M_H < 0.02$	$M_H^2 \ll 0.0004$

## CAPITULO 2. MATERIALES Y MÉTODOS

Este capítulo detalla los materiales y métodos esenciales para el estudio, centrándose en la transferencia de momentum y masa. Examina la disolución del gas y diversos modelos de turbulencia, como Spalart-Allmaras y  $\kappa - \epsilon$ . Además, aborda la estimación de la viscosidad y difusividad, aplicando la teoría cinética de Chapman-Enskog y el modelo de Wilke-Chang. La expresión cinética para las reacciones de depuración alcalina se presenta como un componente fundamental en la comprensión de este proceso complejo. Estos métodos y herramientas son cruciales para la simulación detallada del fenómeno estudiado.

### 2.1. Transferencia de Momentum

El balance del momentum para un fluido en movimiento parte del siguiente planteamiento general:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{incremento del} \\ \text{momentum} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{entrada del} \\ \text{momentum} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{salida del} \\ \text{momentum} \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{Fuerza externa} \\ \text{sobre el fluido} \end{array} \right] \quad (2.1)$$

La siguiente expresión representa el transporte de momentum para un fluido incompresible. En el caso específico de un fluido incompresible, la densidad ( $\rho$ ) se considera constante y no varía con la presión. Esta ecuación describe la variación temporal de la velocidad del fluido y cómo esta variación está relacionada con la presión, la viscosidad, las fuerzas externas y la gravedad.

$$\rho_l \frac{\partial \mathbf{u}_l}{\partial t} + \rho_l (\mathbf{u}_l \cdot \nabla) \mathbf{u}_l = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] + \phi_l \rho_l \mathbf{g} + \mathbf{F} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{K} = (\mu_l + \mu_T)(\nabla \mathbf{u}_l + (\nabla \mathbf{u}_l)^T) \quad (2.3)$$

Donde  $\phi_l$  es la fracción volumen de la fase líquida ( $\text{m}^3/\text{m}^3$ ),  $\rho_l$  es la densidad del líquido ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ),  $\mathbf{u}_l$  es la velocidad de la fase líquida ( $\text{m}/\text{s}$ ),  $p$  es la presión (Pa),  $\mathbf{K}$  es el tensor de esfuerzo viscoso,  $\mathbf{I}$  es el tensor identidad y  $\mathbf{g}$  es el vector de la gravedad ( $\text{m}/\text{s}^2$ ). En términos físicos, el primer término,  $\left( \rho_l \frac{\partial \mathbf{u}_l}{\partial t} \right)$ , representa el término inercial, ya que está asociado con la variación temporal de la velocidad multiplicada por la densidad del

líquido. El segundo término,  $(\rho_l(\mathbf{u}_l \cdot \nabla)\mathbf{u}_l)$ , representa el término convectivo o advectivo, ya que está relacionado con la convección del fluido a través del operador  $(\mathbf{u}_l \cdot \nabla)\mathbf{u}_l$ . El tercer término,  $(\nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}])$ , representa el término viscoso, ya que está asociado con el gradiente de la presión ( $\nabla p$ ) y el tensor de esfuerzo viscoso. (Crha et al., 2021; Nimmagadda et al., 2020; W. Shi et al., 2019).

Para un fluido incompresible se tiene entonces la Ecuación 2.4

$$\rho_l \nabla \cdot \mathbf{u}_l = 0 \quad (2.4)$$

## 2.2. Transferencia de Masa

La transferencia de masa se refiere al movimiento de una sustancia de un lugar a otro como resultado del movimiento aleatorio de las partículas por un gradiente de concentración, ya sea entre fases distintas de un sistema o entre un sistema y su entorno. Este proceso puede ocurrir a través de varios mecanismos, siendo los más comunes la difusión y la convección. Para bajas concentraciones de gas se aproxima a la ecuación de conservación de la masa a partir del siguiente planteamiento (Ecuación 2.5):

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Incremento de} \\ \text{materia en el} \\ \text{sistema} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{entrada de} \\ \text{materia} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Velocidad de} \\ \text{salida de} \\ \text{materia} \end{array} \right] \quad (2.5)$$

Para la fase gaseosa el transporte de materia se resuelve mediante la Ecuación 2.6:

$$\frac{\partial \phi_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_{\rho_g \phi_g} = -m_{gl} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{N}_{\rho_g \phi_g} = \phi_g \rho_g \mathbf{u}_g \quad (2.7)$$

Donde  $\mathbf{u}_g$  es la velocidad de la fase gaseosa (m/s),  $\rho_g$  es la densidad del gas ( $\text{kg/m}^3$ ),  $\phi_g$  es la fracción volumen del gas ( $\text{m}^3/\text{m}^3$ ) y  $m_{gl}$  es la tasa de transferencia de masa del gas al líquido ( $\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}$ ). En la Ecuación 2.6, el término  $\frac{\partial \phi_g \rho_g}{\partial t}$  representa la variación temporal de la concentración de gas multiplicada por la densidad del gas. Es el término de cambio de la concentración de gas con respecto al tiempo. El término  $\nabla \cdot \mathbf{N}_{\rho_g \phi_g}$

representa el flujo neto de gas a través de la superficie. Es la divergencia del producto de la densidad del gas y la concentración de gas. Este término está asociado con la tasa de transferencia de gas hacia el líquido. La presencia del término  $-m_{gl}$  indica que hay una fuente o sumidero de gas líquido en la ecuación. (Ham et al., 2021). La densidad del gas se calcula a partir de la ley de los gases ideales:

$$\rho_g = \frac{(p + p_{ref})M}{RT} \quad (2.8)$$

Donde  $M$  es la masa molar del gas (kg/mol),  $R$  es la constante del gas ideal (8.31 J/mol·K),  $p_{ref}$  es una presión de referencia (1 atm) y  $T$  es la temperatura (K) (Moradi et al., 2019). La velocidad del gas se calcula mediante la Ecuación 2.9:

$$\mathbf{u}_g = \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_{slip} - \frac{D_{gc}}{\phi_g} \nabla \phi_g \quad (2.9)$$

Donde  $\mathbf{u}_{slip}$  es el vector de la velocidad relativa entre el gas y el líquido (velocidad de deslizamiento) (Shu et al., 2019) y  $D_{gc}$  es el coeficiente de dispersión de la fase gaseosa (m<sup>2</sup>/s) y se determina mediante la Ecuación 2.10:

$$D_{gc} = \frac{\mu_T}{\rho_l} \quad (2.10)$$

Donde  $\mu_T$  es la viscosidad dinámica turbulenta (Pa·s). Para las burbujas subiendo a través de un líquido, debido a la flotabilidad, se asume que las fuerzas de presión equilibran aproximadamente a la fuerzas entre las dos fases (Guan & Yang, 2021). Esta se puede determinar a partir de la Ecuación 2.11:

$$\phi_l \nabla p = \mathbf{f}_D \quad (2.11)$$

$$\mathbf{f}_D = -C_D \frac{3\rho_l}{4d_b} |\mathbf{u}_{slip}| \mathbf{u}_{slip} \quad (2.12)$$

Donde  $C_D$  es el coeficiente de arrastre (adimensional) y  $d_b$  es el diámetro equivalente de la burbuja (m). Para grandes burbujas de gas ( $d_b > 2\text{mm}$ ), una aproximación

empírica para el coeficiente de arrastre está dada por la siguiente ecuación (Shu et al., 2019):

$$C_D = \frac{0.622}{\frac{1}{Eo} + 0.235} \quad (2.13)$$

Para el coeficiente de arrastre existe una gran cantidad de correlaciones que se pudieran utilizar, estas se relacionan en la Tabla 2.1.

**Tabla 2.1.** Correlaciones para el coeficiente de arrastre

Autores	Expresión
Schiller & Naumann, (1935)	Una partícula esférica rígida en un fluido infinito estancado $C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15Re_b^{0.687}), & Re \leq 1000 \\ 0.44, & Re > 1000 \end{cases}$
Grace et al., (1976)	Burbuja no esférica $C_D = \max [C_{D,sph}, \min [C_{D,ell}, C_{D,cap}]]$ $C_{D,sph} = \begin{cases} \frac{24}{Re} & Re < 0.01 \\ \frac{24(1 + 0.15Re^{0.687})}{Re} & 0.01 \leq Re \end{cases}$ $C_{D,ell} = \frac{4gd_b(\rho_l - \rho_g)}{3U_T^2 \rho_l}; \quad C_{D,cap} = \frac{8}{3}$ $U_T = \frac{\mu_l}{\rho_l d_b} Mo^{-0.149} (J - 0.857);$ $J = \begin{cases} 0.94\beta^{0.757} & 2 < \beta < 59.3 \\ 3.42\beta^{0.441} & \beta > 59.3 \end{cases}; \quad \beta = \frac{4}{3} Eo Mo^{-0.149} \left( \frac{\mu_l}{0.0009 \text{ kg/m} \cdot \text{s}} \right)^{-0.14}$
Ishii & Zuber, (1979)	Burbujas y gotas $C_D = \max \left\{ \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15Re_b^{0.687}), \min \left( \frac{2}{3} \sqrt{Eo}, \frac{8}{3} \right) \right\}$
Fan & Tsuchiya, (1990)	Burbujas en diferentes líquidos $C_D = \frac{4gd_b(\rho_l - \rho_g)}{3U_T^2 \rho_l}$ $U_T = \left( \frac{\sigma g}{\rho_l} \right)^{0.25} \left[ \left( \frac{Eo}{K_b Mo^{0.25}} \right)^{-n_0} + \left( \frac{2c_1}{Eo^{0.5}} + \frac{Eo^{0.5}}{2} \right)^{-\frac{n_0}{2}} \right]^{-1/n_0};$ $K_b = \begin{cases} 12 & K_b < 12 \\ K_{b0} Mo^{-0.038} & K_b > 12 \end{cases}; \quad n_0 = 1.6 \text{ y } K_{b0} = 14.7 \text{ (sistema agua - aire)}$

Continuación de la Tabla 2.1

Autores	Expresión
Tomiyama, (1998)	<p>Una sola burbuja en varias condiciones (<math>10^{-2} &lt; Eo &lt; 10^3</math>, <math>10^{-14} &lt; Mo &lt; 10^7</math> y <math>10^{-3} &lt; Re_b &lt; 10^5</math>)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Para agua purificada           <math display="block">C_D = \max \left\{ \min \left[ \frac{16}{Re_b} (1 + 0.15 Re_b^{0.687}), \frac{48}{Re_b} \right], \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4} \right\}</math> </li> <li>• Para agua levemente contaminada           <math display="block">C_D = \max \left\{ \min \left[ \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15 Re_b^{0.687}), \frac{72}{Re_b} \right], \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4} \right\}</math> </li> <li>• Para agua contaminada           <math display="block">C_D = \max \left\{ \frac{24}{Re_b} (1 + 0.15 Re_b^{0.687}), \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4} \right\}</math> </li> </ul>
Laín et al., (2002)	$C_D = \begin{cases} \frac{16}{Re} & Re < 1.5 \\ 14.9 Re^{-0.78} & 1.5 < Re < 80 \\ \frac{48}{Re} (1 - 2.21 Re^{-0.5}) + 1.86 \times 10^{-15} Re^{4.756} & 80 < Re < 1500 \\ 2.61 & 1500 < Re \end{cases}$

### 2.2.1. Disolución del gas

La disolución de un gas en un líquido es el resultado de la interacción entre las moléculas del gas y las moléculas del líquido. Este proceso sigue las leyes de Henry, la difusión y la solubilidad, y es fundamental para entender fenómenos como la absorción de gases en líquidos, como en la respiración de los organismos acuáticos y en procesos industriales. La ley de Henry se deriva bajo la suposición de que la solución es diluida, lo que significa que la concentración del gas en el líquido es baja, y la interacción entre las moléculas del gas y las moléculas del líquido se considera despreciable. La transferencia de masa del gas se calcula con la ecuación:

$$m_{gl} = k_1 a (c^* - c) M \quad (2.14)$$

Donde  $c^*$  es la concentración en equilibrio ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ),  $a$  es el área interfacial ( $\text{m}^2/\text{m}^3$ ) y  $k_1$  es el coeficiente de transferencia de masa ( $\text{m}/\text{s}$ ), y se determinan, respectivamente, como (Ali, 2014):

$$c^* = \frac{p + p_{\text{ref}}}{H_A} \quad (2.15)$$

$$a = (4n\pi)^{\frac{1}{3}} (3\phi_g)^{2/3} \quad (2.16)$$

$$k_l = \frac{Sh D_{gl}}{d_b} \quad (2.17)$$

donde  $H_A$  es la constante de Henry ( $\text{Pa}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$ ),  $c$  es la concentración de gas disuelto en el líquido ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ),  $M$  es la masa molar,  $n$  es la densidad numérica ( $1/\text{m}^3$ ) y  $Sh$  es el número de Sherwood (adimensional) el cual se calcula con la Ecuación 2.18 con el número de Reynolds de la burbuja, y el número de Schmidt ( $Sc$ ) de la Ecuación 2.19 (Mühlbauer et al., 2019):

$$Sh = 1.13Sc^{1/2}Re_b^{1/2} \quad (2.18)$$

$$Sc = \frac{\mu_l}{\rho_l D_{gl}} \quad (2.19)$$

El área interfacial por unidad de volumen depende de la fracción volumen del gas pero también del número de burbujas por unidad de volumen, es decir, la densidad numérica (Ali, 2014). La densidad numérica se obtiene de resolver el siguiente modelo:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{N}_n = 0 \quad (2.20)$$

Donde:

$$\mathbf{N}_n = n(\mathbf{u}_l + \mathbf{u}_{slip}) - D_{gc} \nabla n \quad (2.21)$$

### 2.3. Modelos de turbulencia

Con el objetivo de incorporar y comprender adecuadamente el impacto de la turbulencia en un campo de flujo, se recurre a la modificación y corrección de las ecuaciones de movimiento mediante modelos de turbulencia. Esta necesidad surge debido a la complejidad inherente de los flujos turbulentos, donde los vórtices y la variabilidad espacio – temporal exigen una representación más precisa. Dos enfoques comunes para reformular las ecuaciones de Navier-Stokes son las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds (RANS) y las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Favre (FANS) (Hoffmann & Chiang, 2000). En esta investigación, se optará por el modelo RANS.

La elección del modelo RANS se justifica por su capacidad para proporcionar una descripción efectiva de la turbulencia a través de la aplicación de promedios

temporales. Este enfoque es particularmente útil en situaciones donde la escala de tiempo de la turbulencia es significativamente menor que otras escalas de interés en el problema. Además, al utilizar el modelo RANS, se logra un equilibrio entre la precisión de la representación de la turbulencia y la eficiencia computacional, siendo fundamental para abordar de manera realista una amplia gama de problemas de ingeniería y fluidodinámica. Existen diversos modelos RANS para la turbulencia, todos los cuales se basan en las ecuaciones de Navier-Stokes y evalúan la viscosidad turbulenta mediante ecuaciones de cerradura. Sin embargo, estas alternativas difieren en la metodología específica empleada para su cálculo. Cada modelo presenta una formulación única para estimar la viscosidad turbulenta, incorporando consideraciones distintas, como la longitud de escala y la interacción de los vórtices turbulentos. La elección del modelo RANS más adecuado dependerá de la naturaleza específica del flujo y los fenómenos turbulentos que se buscan representar con mayor precisión (Prócel Vivar, 2022).

### 2.3.1. Spalart-Allmaras

El modelo Spalart-Allmaras añade una variable adicional para una viscosidad de Spalart-Allmaras (viscosidad de remolinos), no utiliza funciones de pared y resuelve el campo de flujo entero. El modelo fue inicialmente concebido para aplicaciones aerodinámicas y presenta la ventaja de resolver para una única variable adicional. Esto provee un menor costo computacional que otros modelos que resuelven el campo de flujo en la zona de amortiguamiento. Su ventaja es que es muy estable y muestra una buena convergencia. La experiencia demuestra que este modelo no calcula con precisión campos que exhiben esfuerzos cortantes, flujos separados o turbulencia en decaimiento (Cifuentes Rodríguez, 2021).

La variable de este modelo se representa como  $\tilde{\nu}$ , se caracteriza por ser igual a la viscosidad turbulenta cinemática ( $\nu_T$ ) excepto en las zonas cercanas a la pared o regiones afectadas por la viscosidad. La expresión del transporte se calcula como:

$$\rho_1 \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial t} + (\mathbf{u}_1 \cdot \nabla) \tilde{\nu} = \frac{1}{\sigma_{\tilde{\nu}}} \nabla \cdot [(\mu + \tilde{\nu}) \nabla \tilde{\nu}] + \frac{C_{b2}}{\sigma_{\tilde{\nu}}} \nabla \tilde{\nu} \cdot \nabla \tilde{\nu} + S_{\tilde{\nu}} - Y_{\tilde{\nu}} + G_{\tilde{\nu}} \quad (2.22)$$

Donde  $G_{\tilde{\nu}}$  hace referencia a la producción de viscosidad turbulenta  $\mu_T$ , desarrollada en las zonas de mayor viscosidad, el término  $Y_{\tilde{\nu}}$  corresponde a la destrucción de la viscosidad turbulenta que ocurre en las paredes estáticas. La viscosidad turbulenta  $\mu_T$  se define a partir de la función de amortiguación viscosa ( $f_{v1}$ ) y la variable de transporte del modelo como sigue:

$$\mu_T = \rho_1 \tilde{\nu} f_{v1} \quad (2.23)$$

Siendo  $f_{v1} = \frac{\chi^3}{\chi^3 + C_{v1}^3}$  donde  $\chi = \frac{\tilde{\nu}}{\nu}$ . Por otro lado, la producción viscosa  $G_{\tilde{\nu}}$  se modela a través de la siguiente expresión:

$$G_{\tilde{\nu}} = C_{b1} \rho_1 \tilde{S} \tilde{\nu} \quad (2.24)$$

Donde  $C_{b1}$  es una constante del modelo y  $\tilde{S}$  es una variable que depende de la constante de Karman (K) de la siguiente manera:

$$\tilde{S} = S + \frac{\tilde{\nu}}{K^2 d^2} f_{v2} \quad (2.25)$$

Siendo  $d$  la distancia a la pared y  $S$  la medida escalar del tensor de deformación. A su vez, la variable  $f_{v2}$  se calcula como:

$$f_{v2} = 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}} \quad (2.26)$$

La variable  $S$ , que se basa en la magnitud de la vorticidad, está definida por defecto en Comsol Multiphysics como:

$$S = \sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}} \quad (2.27)$$

Donde  $\Omega_{ij}$  es el tensor de tasa de vorticidad promedio  $\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$ . Para flujos cortantes, la vorticidad y la tasa de deformación son iguales. Con el fin de no causar sobreestimación en la producción de viscosidad turbulenta se presenta una variación de la variable  $S$ , que combina las mediciones de la vorticidad y la tasa de deformación (Cifuentes Rodríguez, 2021):

$$S = |\Omega_{ij}| + C_{prom} \min(0, |S_{ij}| - |\Omega_{ij}|) \quad (2.28)$$

Siendo  $C_{prom} = 2.0$ ,  $|\Omega_{ij}| = \sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}}$  y  $S_{ij}$  la tasa de deformación media  $S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$ .

La inclusión de los tensores de vorticidad y deformación reduce la producción de viscosidad turbulenta y, en consecuencia, reduce la viscosidad de los remolinos en las regiones donde la medida de la vorticidad excede la tasa de tensión. Este modelo incorpora un término de destrucción de la viscosidad turbulenta, cuyos valores están determinados por constantes específicas. La Ecuación 2.29 muestra el modelo de destrucción  $Y_{\tilde{\nu}}$ :

$$Y_{\tilde{\nu}} = C_{w1} \rho_1 f_w \left( \frac{\tilde{\nu}}{d} \right)^2 \quad (2.29)$$

Donde  $f_w = g \left[ \frac{1+C_{w3}^6}{g^6+C_{w3}^6} \right]^{1/6}$ ,  $g = r + C_{w2}(r^6 - r)$ ,  $r = \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{\omega} d^2}$ , siendo  $f_w$  la función de amortiguación,  $g$  una variable auxiliar y los valores de las constantes del modelo son:  $C_{b1} = 0.1355$ ,  $C_{b2} = 0.622$ ,  $\sigma_{\tilde{\nu}} = \frac{2}{3}$ ,  $C_{v1} = 7.1$ ,  $C_{w1} = \frac{C_{b1}}{K^2} + \frac{1+C_{b2}}{\sigma_{\tilde{\nu}}}$ ,  $C_{w2} = 0.3$ ,  $C_{w3} = 2.0$  y  $K = 0.4187$ .

### 2.3.2. Modelo $\kappa - \varepsilon$

El modelo  $\kappa - \varepsilon$  resuelve dos variables: kappa ( $\kappa$ ); o energía cinética turbulenta, y épsilon ( $\varepsilon$ ); o tasa de disipación de la energía cinética (Hoffmann & Chiang, 2000). Precisamente  $\kappa$  es una entidad de turbulencia que es función de la posición y el tiempo, esto es  $\kappa(x, t)$  (Ecuación 2.30). Por otro lado,  $\varepsilon$  también puede ser vista como una cantidad que representa la tasa de flujo de energía que se disipa en cascada desde los remolinos grandes (macro escala) hasta remolinos pequeños (microescala) (Ecuación 2.31) (Bak et al., 2020; Ekambara & Dhotre, 2010; Tabib et al., 2008).

$$\rho_1 \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho_1 (\mathbf{u}_1 \cdot \nabla) \kappa = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_1 + \frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa \right] + P_\kappa - \rho_1 \varepsilon + S_\kappa \quad (2.30)$$

$$\rho_1 \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho_1 (\mathbf{u}_1 \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_1 + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - C_{\varepsilon 1} \rho_1 \frac{\varepsilon^2}{\kappa} + C_\varepsilon S_\kappa \frac{\varepsilon}{\kappa} \quad (2.31)$$

Donde la viscosidad turbulenta ( $\mu_T$ ) se define como:

$$\mu_T = \rho_l C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (2.32)$$

Donde  $C_\mu$  es una constante del modelo. Algunos valores de la constante utilizados por algunos autores se muestran en la Tabla 2.2. El término  $S_\kappa$  representa la turbulencia inducida por la burbuja ( $W/m^3$ ) y viene dada por la siguiente ecuación:

$$S_\kappa = -C_\kappa \phi_g \nabla p \cdot \mathbf{u}_{slip} \quad (2.33)$$

El término  $P_\kappa$  representa la energía cinética de turbulencia ( $W/m^3$ ):

$$P_\kappa = \mu_T [\nabla \mathbf{u}_1 : (\nabla \mathbf{u}_1 + (\nabla \mathbf{u}_1)^T)] \quad (2.34)$$

El modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  es muy popular para aplicaciones industriales debido a su buena velocidad de convergencia y los requisitos relativamente bajos de memoria. No es muy exacto al calcular los campos de flujo que presentan gradientes grandes de presión, la pronunciada curvatura del flujo, o un flujo de chorro. Tampoco funciona bien para los problemas de flujo externos alrededor de geometrías complejas (Mendoza et al., 2019; Toapanta-Ramos et al., 2019).

**Tabla 2.2.** Valores utilizados por diversos autores para las constantes del modelo de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$

Parámetro	Descripción	COMSOL	Hoffmann & Chiang, (2000)	Van Baten et al., (2003)	Roy et al., (2006)	Launder & Sharma, (1974)
$C_\mu$	Constante de viscosidad-turbulencia	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09
$C_{\varepsilon_1}$	Constante para el modelo $\varepsilon$	1.44	1.81	1.44	1.44	1.44
$C_{\varepsilon_2}$	Constante para el modelo $\varepsilon$	1.92	2.0	1.92	1.92	1.92
$\sigma_\kappa$	Número turbulento de Prandtl	1.0	2.0	1.0	1.0	1.0
$\sigma_\varepsilon$	Número turbulento de Prandtl para disipación	1.3	3.0	1.3	1.0	1.3

### 2.3.3. Modelo $\kappa - \omega$

El modelo  $\kappa$ - $\omega$  resuelve  $\omega$  que es la tasa específica de disipación de la energía cinética. Utiliza funciones de pared y por lo tanto tiene requisitos de memoria comparables con otros modelos de turbulencia. Tiene más dificultad de converger y es muy sensible a la suposición inicial de la solución. Por lo tanto, el modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  se utiliza a menudo para encontrar primero una condición inicial para resolver el modelo  $\kappa$ - $\omega$ . El modelo  $\kappa$ - $\omega$  es útil en muchos casos en los que el modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  no es exacto, como flujos internos, las corrientes que presentan curvatura fuerte, flujos separados, y chorros. Un buen ejemplo de flujo interno es el flujo a través de un codo en una tubería (Richmond, 2019; Toapanta-Ramos et al., 2019).

En este modelo la viscosidad turbulenta se calcula mediante la ecuación:

$$\mu_T = \rho_l \frac{\kappa}{\omega} \quad (2.35)$$

La ecuación de transporte para  $\kappa$  se muestra en la Ecuación 2.36, mientras que la ecuación de transporte para  $\omega$  se muestra en la Ecuación 2.37:

$$\rho_l \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho_l (\mathbf{u}_l \cdot \nabla) \kappa = \nabla \cdot [(\mu_l + \mu_T \sigma^*) \nabla \kappa] + P_\kappa - \rho_l \beta^* \kappa \omega \quad (2.36)$$

$$\rho_l \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho_l (\mathbf{u}_l \cdot \nabla) \omega = \nabla \cdot [(\mu_l + \mu_T \sigma) \nabla \omega] + \alpha \frac{\omega}{\kappa} P_\kappa - \rho_l \beta \omega^2 \quad (2.37)$$

En este modelo las constantes y parámetros son:  $\alpha = \frac{13}{25}$ ;  $\beta = \beta_0 f_\beta$ ;  $\beta^* = \beta_0^* f_{\beta^*}$ ;  $\sigma = \frac{1}{2}$ ;

$$\beta_0 = \frac{13}{125}; f_\beta = \frac{1+70\chi_\omega}{1+80\chi_\omega}; \chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij}\Omega_{ik}S_{ij}}{(\beta_0^*\omega)^3} \right|; \beta_0^* = 0.09;$$

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1 & \text{si } \chi_\kappa \leq 0 \\ \frac{1+680\chi_\kappa^2}{1+400\chi_\kappa^2} & \text{si } \chi_\kappa > 0 \end{cases} \quad \chi_\kappa = \frac{1}{\omega^3} (\nabla \kappa \cdot \nabla \omega)$$

### 2.3.4. Modelo $\kappa$ - $\varepsilon$ para número de Reynolds bajo

El modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  para número Reynolds pequeños es similar al modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  pero no usa las funciones de pared que resuelva el flujo en todas partes. Es una extensión lógica a  $\kappa$ - $\varepsilon$  y comparte muchas de sus ventajas, pero utiliza más memoria. A menudo es

aconsejable utilizar el  $\kappa$ - $\varepsilon$  para calcular primero una buena condición inicial para resolver el modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  para Reynolds bajo. Puesto que no utiliza funciones de pared, las fuerzas de elevación y arrastre y flujo de calor se puede modelar con mayor precisión (Mendoza et al., 2019). El modelo matemático es el siguiente:

$$\rho_l \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho_l (\mathbf{u}_1 \cdot \nabla) \kappa = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa \right] - \rho_l \varepsilon + \rho_l P_\kappa \quad (2.38)$$

$$\rho_l \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho_l (\mathbf{u}_1 \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \cdot \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + C_{\varepsilon_1} \frac{\varepsilon}{\kappa} P_\kappa - C_{\varepsilon_2} \rho_l \frac{\varepsilon^2}{\kappa} f_\varepsilon(\rho_l, \mu_l \kappa, \varepsilon, I_W) + C_\varepsilon S_\kappa \frac{\varepsilon}{\kappa} \quad (2.39)$$

En este modelo, la viscosidad turbulenta se calcula como sigue:

$$\mu_T = \rho_l C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} f_\varepsilon(\rho_l, \mu_l \kappa, \varepsilon, \ell_W) \quad (2.40)$$

Donde  $\ell_W = \frac{1}{G} - \frac{\ell_{ref}}{2}$  es la distancia más cercana a la pared, y la variable G se calcula como:

$$\nabla G \cdot \nabla G + \sigma_w G (\nabla \cdot \nabla G) = (1 + 2\sigma_w) G^4 \quad (2.41)$$

Las constantes de este modelo son:  $C_{\varepsilon_1} = 1.5$ ,  $C_{\varepsilon_2} = 1.9$ ,  $C_\mu = 0.09$ ,  $\sigma_\kappa = 1.4$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1.5$ ,  $C_\kappa = 0.505$ ,  $C_\varepsilon = 1.46$  y  $\sigma_w = 0.2$ .

### 2.3.5. Transporte de esfuerzo cortante

Finalmente, el modelo de transporte de esfuerzo cortante (SST por sus siglas en inglés) es una combinación del modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  en la corriente libre y el modelo  $\kappa$ - $\omega$  cerca de las paredes. No utiliza las funciones de pared, sino que resuelve el flujo en las regiones cercanas a la pared (Richmond, 2019). El modelo de transporte de esfuerzo cortante no siempre converge a la solución rápidamente, por lo que los modelos  $\kappa$ - $\varepsilon$  o  $\kappa$ - $\omega$  suelen resolverse primero para darle buenas condiciones iniciales (Solís-Herrera, 2015).

En este modelo la viscosidad turbulenta se calcula como sigue:

$$\mu_T = \rho_l \frac{a_1 \kappa}{\max(a_1 \omega, S f_{v1})} \quad (2.42)$$

Donde S es la magnitud característica del promedio de gradiente de velocidad y se calcula con:

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (2.43)$$

Este modelo también es conocido como SST  $\kappa - \omega$  pues los modelos están en términos de  $\kappa$  y  $\omega$  como se muestra enseguida:

$$\rho_l \frac{\partial \kappa}{\partial t} + \rho_l \mathbf{u}_l \cdot \nabla \kappa = \nabla \cdot [(\mu_l + \mu_T \sigma_\kappa) \nabla \kappa] + P - \rho_l \beta_0^* \kappa \omega \quad (2.44)$$

$$\rho_l \frac{\partial \omega}{\partial t} + \rho_l \mathbf{u}_l \cdot \nabla \omega = \nabla \cdot [(\mu_l + \mu_T \sigma_\omega) \nabla \omega] + \frac{\rho_l \gamma}{\mu_T} P - \rho_l \beta \omega^2 + 2(1 - f_{v1}) \frac{\rho_l \sigma_\omega^2}{\omega} \nabla \omega \cdot \nabla \kappa \quad (2.45)$$

Donde  $P = \min(P_\kappa, 10\rho_l \beta_0^* \kappa \omega)$ . Las constantes  $(\beta, \gamma, \sigma_\kappa, \sigma_\omega)$  se definen mediante interpolación, las expresiones para esto incluyen  $\ell_w$ .

#### 2.4. Estimación de la viscosidad

La viscosidad es la constante de proporcionalidad que aparece en la ley de Newton de la viscosidad, relacionando el esfuerzo cortante (o densidad de flujo de momentum) con el gradiente de velocidad (o rapidez de deformación). En su forma más simple, la ley de Newton de la viscosidad se puede expresar mediante:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] + \left(\frac{2}{3}\mu - B\right)(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \quad (2.46)$$

Aquí, el primer término  $\mu[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]$  representa el componente viscoso del tensor de esfuerzo asociado con la deformación del fluido, y el segundo término  $\left(\frac{2}{3}\mu - B\right)(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}$  está relacionado con la presión hidrodinámica. Es importante notar que  $B$  en el segundo término es una constante relacionada con la compresibilidad del fluido.

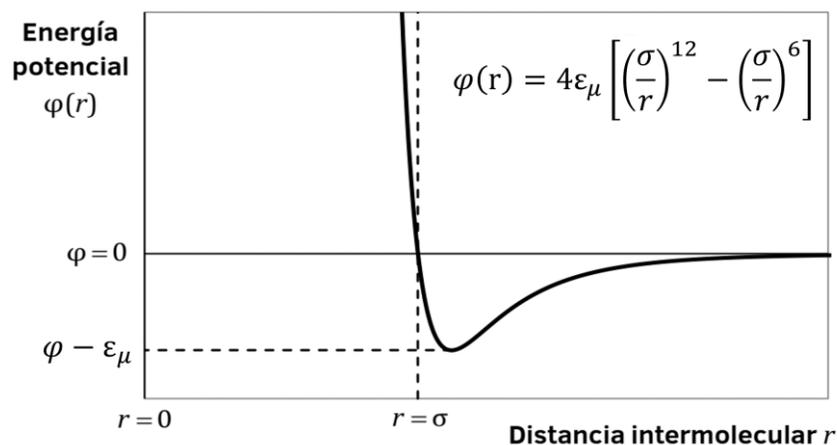
Los fluidos que se comportan de acuerdo con esta ley se denominan “fluidos newtonianos”, e incluyen a la mayoría de los fluidos simples. La viscosidad es una propiedad del fluido que depende de la temperatura y, en algunos casos, también depende de la presión. La viscosidad de un gas a baja presión aumenta con la temperatura, y se considera independiente de la presión. La viscosidad de un líquido disminuye con la temperatura y es poco afectada por la presión excepto a presiones muy elevadas.

### 2.4.1. Viscosidad de los gases. Teoría cinética de Chapman-Enskog

La teoría cinética de los gases fue desarrollada de forma independiente por Sydney Chapman y David Enskog entre 1910 y 1920. A partir de esta teoría, es posible obtener predicciones para la viscosidad, la conductividad térmica y la difusividad en un gas. El modelo de gas ideal es adecuado para describir un gas a temperaturas suficientemente altas o presiones suficientemente bajas. Una suposición de este modelo es que el gas está formado por partículas que no ejercen ninguna fuerza entre sí. Sin embargo, las moléculas en un gas real experimentan fuerzas que son de atracción o de repulsión, según la distancia entre ellas. Se han desarrollado diversos modelos para describir esta interacción, siendo uno de los más populares el potencial de Lennard-Jones  $\varphi(r)$  (González Barramuño, 2022), que se muestra en la Figura 2.1. En el caso de la viscosidad, la teoría cinética de los gases predice la Ecuación 2.47 para la viscosidad de un gas a baja presión.

$$\mu = 2.6693 \times \frac{10^{-6}(MT)^{0.5}}{\sigma^2 \Omega_{\mu}} \quad (2.47)$$

donde  $\sigma$  es el diámetro de colisión y  $\Omega_{\mu}$  es la integral de colisión, estos son parámetros específicos del gas. La  $\Omega_{\mu}$  se puede determinar a partir de  $\varepsilon_{\mu}$  (energía característica, que se suele emplear dividida entre la constante de Boltzmann  $k_B$ ).



**Figura 2.41.** Curva del potencial de Lennard-Jones adimensionalizado. Tomado de (González Barramuño, 2022).

Cuando se desconoce  $\sigma$  y  $\varepsilon_{\mu}/\kappa_B$ , se puede estimar con base en el punto crítico, el punto de ebullición o fusión normales (Carvalho, 2022) como se muestra en la Tabla 2.3.

**Tabla 2.3.** Estimación de diámetro de colisión y energía característica.

Parámetro	Punto crítico (preferible)	Punto crítico (alternativa)	Punto de ebullición	Punto de fusión
$\sigma$	$0.841\tilde{V}_c^{1/3}$	$2.44\left(\frac{T_c}{P_c}\right)^{1/3}$	$1.166\tilde{V}_b^{1/3}$	$1.222\tilde{V}_m^{1/3}$
$\varepsilon_{\mu}/\kappa_B$	$0.77T_c$	$0.77T_c$	$1.15T_b$	$1.92T_m$

En el trabajo de (Welty et al., 2014) se pueden consultar los valores de  $\Omega_{\mu}$  en función de la temperatura adimensional  $T^*$ :

$$T^* = \frac{\kappa_B T}{\varepsilon_{\mu}} \quad \text{o bien} \quad T^* = \frac{T}{\varepsilon_{\mu}/\kappa_B} \quad (2.48)$$

## 2.5. Estimación de la difusividad

La difusividad (también llamado coeficiente de difusión:  $\mathcal{D}_{AB}$ ) es la constante de proporcionalidad que aparece en la ley de Fick de la difusión, relacionando la densidad de flujo molar  $j_A$  con el gradiente de concentración  $\nabla C_A$  (Bird et al., 1982):

$$j_A = -\mathcal{D}_{AB}\nabla C_A \quad (2.49)$$

La difusividad no es una propiedad de una sustancia, ya que no se puede hablar de transferencia de masa en sustancias puras. Es una propiedad de una mezcla, por lo que  $\mathcal{D}_{AB}$  se refiere a la difusividad de la sustancia A en la sustancia B. Los rangos típicos de valores para la difusividad varían ampliamente dependiendo del estado físico de los componentes (Bird et al., 1982; Hines & Maddox, 1985), como se ilustra en la Tabla 2.4.

**Tabla 2.4.** Valores típicos de difusividades a temperatura ambiente.

Gases	$\sim 0.1 \text{ cm}^2/\text{s}$ (el más alto es $1.7 \text{ cm}^2/\text{s}$ para $\text{H}_2\text{-He}$ )
Líquidos	La mayoría $\sim 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ (excepto solutos de alto peso molecular que pueden ser hasta $10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ )
Sólidos	$\leq 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ (hasta $10^{-30} \text{ cm}^2/\text{s}$ para Al en Cu)

### 2.5.1. Difusividad en fase líquida

Los modelos para estimar coeficientes de difusión en líquidos no son tan exactos como para gases. En un líquido, la difusividad aumenta cuando aumenta la temperatura, disminuye cuando aumenta el peso molecular de los componentes o sustancias presentes en el líquido, y casi no es afectada por la presión.

La difusividad depende fuertemente de la concentración, por lo que en muchos casos sólo puede estimarse para concentraciones muy bajas, es decir a dilución infinita (indicado con un superíndice cero). Por lo tanto,  $\mathcal{D}_{AB}^0$  representa la difusividad de A a dilución infinita en B; es decir, que cada molécula de A está rodeada prácticamente de B puro.

Ya que pocas veces se puede estimar el efecto de la concentración, desde el punto de vista práctico se asume que la difusividad a dilución infinita aplica para mayores concentraciones, a veces tan altas como 5 o 10 % mol de A en B (Hines & Maddox, 1985).

### 2.5.2. Modelo de Wilke-Chang

Este modelo define que la difusividad se puede determinar con la expresión:

$$\mathcal{D}_{AB}^0 = 7.4 \times 10^{-11} \frac{(\phi M_B)^{0.5} T}{\mu_B \tilde{V}_{b,A}^{0.6}} \quad (2.50)$$

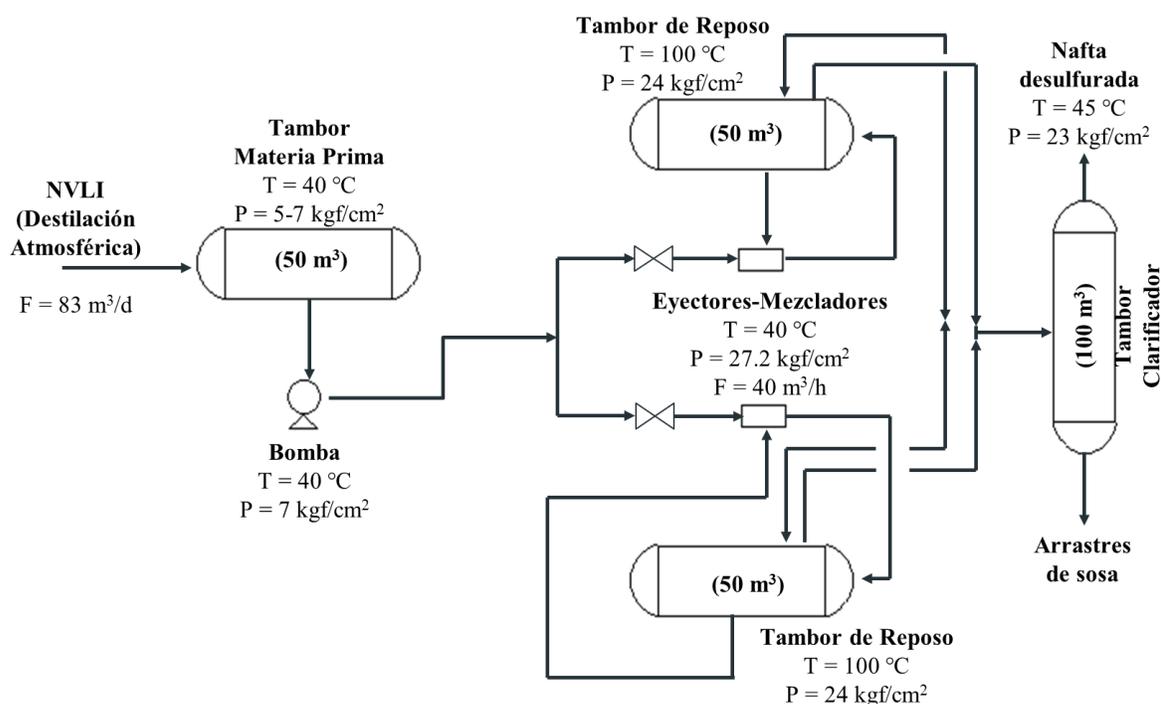
Donde  $\phi$  es un factor adimensional de asociación del solvente (2.6 para agua, 1.9 para metanol, 1.5 para etanol y 1 si no es un solvente asociado),  $M_B$  es el peso molecular del solvente (g/mol),  $T$  es la temperatura (K),  $\mu_B$  es la viscosidad dinámica del solvente (Pa·s) y  $\tilde{V}_{b,A}$  es el volumen molar del líquido saturado en el punto de ebullición normal (cm<sup>3</sup>/mol). El modelo de Wilke-Chang es bastante usado pero en algunos casos se puede llegar a tener errores elevados. Este método no debe emplearse cuando el soluto es agua (Bird et al., 1982).

## 2.6. Expresión cinética de las reacciones de depuración alcalina

El esquema tecnológico que se analizó para el proceso de depuración alcalina para obtener GLP se muestra en la Figura 2.2. Las expresiones cinéticas definidas para las reacciones que ocurren en este proceso fueron obtenidas por Cortés Martínez et al., (2020). La Ecuación 2.51 representa la cinética de la reacción del NaOH con H<sub>2</sub>S mientras que la Ecuación 2.52 es de la reacción del NaOH con los mercaptanos.

$$(-r_{\text{NaOH}})_1 = 1.093e^{(-0.099/T)} C_{\text{H}_2\text{S}}^{0.345} C_{\text{NaOH}}^{0.085} \quad (2.51)$$

$$(-r_{\text{NaOH}})_2 = 4.397e^{(-0.32/T)} C_{\text{R-SH}}^{0.37} C_{\text{NaOH}}^{0.23} \quad (2.52)$$



**Figura 2.2.** Esquema tecnológico de la depuración alcalina en la obtención de GLP.

Para la obtención de las expresiones cinéticas se analizaron diez mezclas de cinco crudos diferentes. Las proporciones en que se mezclaron los crudos se muestran en la Tabla 2.5. Estas mezclas se utilizaron como materia prima en la simulación de una unidad de destilación atmosférica para obtener la cantidad de compuestos sulfurados que presenta la nafta virgen ligera inestable (NVLI) utilizada para obtener GLP. El

software utilizado en la simulación de la destilación atmosférica fue Petro-SIM, el cual es ampliamente utilizado en la simulación de procesos de refinerías de petróleo. En la Tabla 2.6 se muestra los resultados obtenidos en la simulación.

**Tabla 2.5.** Proporciones de las mezclas crudos utilizados en la simulación.

Crudo	Mezclas (%vol.)									
	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7	M8	M9	M10
Crud.1	100		54.65	25.25	43.71	19.13		57.28		73.21
Crud.2								12.78	30.04	
Crud.3		100	45.35		12.58	25.57	16.37			
Crud.4				74.75	43.71	10.9	5.56	29.94	69.96	
Crud.5						44.40	78.07			26.79

**Tabla 2.6.** Composición de compuestos sulfurados en la NVLI.

Compuesto	Mezclas				
	M1	M2	M3	M4	M5
Mercaptanos [% peso]	0	0.0036	0.0016	0	0.0003
Azufre [% peso]	0.002	0.0055	0.0036	0.0019	0.0023
	M6	M7	M8	M9	M10
Mercaptanos [% peso]	0	0	0	0.001	0
Azufre [% peso]	0.0023	0.0017	0.0029	0.0038	0.0017

Para obtener la velocidad de reacción experimental se utilizaron los datos del control operacional respecto a la concentración de NaOH en la solución alcalina utilizada en la desulfuración. Las concentraciones iniciales y finales de la solución de sosa cáustica utilizada en el proceso de desulfuración se tomaron de los análisis de control del laboratorio central de la refinería. El análisis realizado por los especialistas del laboratorio para obtener la concentración de sosa es "Alcalinidad libre y total". Este procedimiento fue propuesto por Castellanos (2019) y es el que se utiliza en la actualidad. Las expresiones cinéticas se obtuvieron utilizando el método diferencial con un ajuste polinomial. Presentaron un porcentaje de desviación relativa respecto a la velocidad de reacción experimental de 4.47 y 4.55 %, respectivamente. La

desviación relativa es un indicador de la precisión de las expresiones cinéticas en relación con los datos experimentales. Un valor por debajo del 5 % sugiere una buena concordancia entre las predicciones teóricas y los resultados prácticos. Esta baja desviación indica que las expresiones cinéticas obtenidas son apropiadas y proporcionan una representación precisa del comportamiento del sistema. Esta precisión es esencial en el análisis de procesos químicos, ya que garantiza que las predicciones basadas en las expresiones cinéticas sean confiables y puedan utilizarse para optimizar y controlar eficientemente el proceso en cuestión.

### CAPITULO 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo, se abordó la fase central del estudio al discutir y analizar los resultados obtenidos mediante la simulación del proceso de desulfuración alcalina en una columna de burbujeo. La construcción del modelo de simulación comenzó destacando módulos esenciales implementados para abordar la transferencia de masa, la dinámica de fluidos y las reacciones químicas. Posteriormente, se realizó una prueba de sensibilidad de la malla para evaluar la robustez del enfoque. La sección principal del capítulo se centró en los resultados de la simulación, incluyendo números adimensionales, concentración de NaOH, energía cinética turbulenta ( $\kappa$ ), viscosidad dinámica turbulenta ( $\mu_T$ ), magnitud de la velocidad del líquido ( $U_l$ ), transferencia de masa del gas a líquido ( $m_{gl}$ ), así como el tamaño y la forma de las burbujas. Cada aspecto se analizó críticamente para extraer conclusiones fundamentales que contribuyeron a la comprensión profunda de este proceso complejo.

Para el desarrollo de este estudio se utilizaron las mismas mezclas de crudo a partir de las cuales se obtuvieron las expresiones cinéticas de la neutralización de la nafta inestable. De todas las mezclas analizadas por Cortés Martínez et al., (2020) se escogió, para el primer estudio, una de las que solo presentó  $H_2S$  en la composición de la NVLI. Esta mezcla tenía una concentración de  $4.07 \times 10^{-7} \text{ mol/m}^3$  de  $H_2S$  en un flujo de  $329.5 \text{ m}^3/\text{d}$  de NVLI. La configuración que se analizó fue una columna de burbujeo con un agujero en el centro de la base de ésta como se muestra en la Figura 3.1.

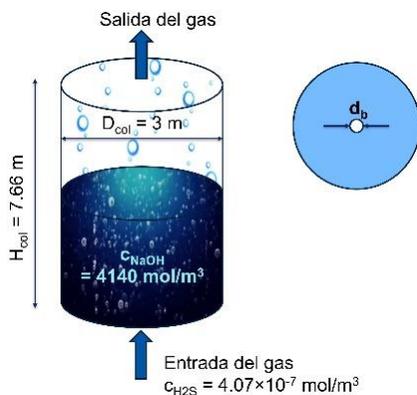
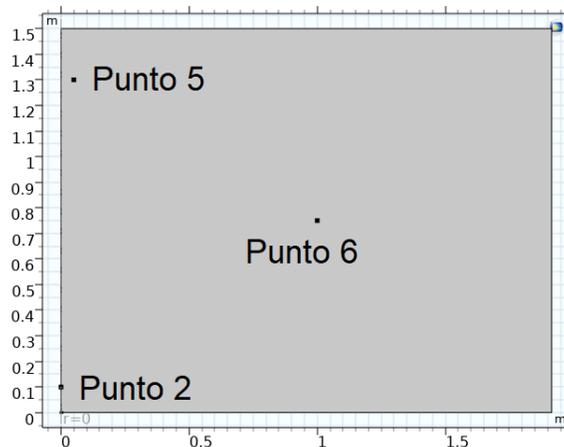


Figura 3.1. Columna de burbujeo

### 3.1. Construcción del modelo de simulación

Las simulaciones se realizaron en un equipo ASUS con un procesador Intel 64 Core i7 con cuatro núcleos, con una memoria RAM de 16.0 GB, utilizando el programa para CFD, Comsol Multiphysics 6.0. Este permite seleccionar un asistente de modelo o modelo en blanco, en ambos casos se requiere un componente (dibujo) en 2D o 3D para realizar el estudio. La construcción de la geometría se realizó en un modelo 2D axisimétrico y se utilizaron las dimensiones del tambor que se utiliza en el proceso original (Figura 2.2). La elección de construir la geometría en un modelo 2D axisimétrico se justifica por la simetría inherente del sistema. Como el sistema en estudio exhibe simetría alrededor de un eje es eficiente y computacionalmente menos costoso utilizar un modelo axisimétrico en lugar de un modelo tridimensional completo. En un modelo 2D axisimétrico, se simula solo una sección transversal del sistema y se aprovecha la simetría rotacional para extrapolar los resultados alrededor del eje de simetría.

También se definieron tres puntos de evaluación para analizar el comportamiento de diferentes variables. En la Figura 3.2 se muestra la geometría obtenida y los puntos de evaluación seleccionados.



**Figura 3.2.** Geometría del tambor en Comsol y puntos de evaluación.

Para el desarrollo de la simulación se definió un grupo de parámetros y variables que se muestran en las Tablas 3.1 y 3.2 respectivamente. Los parámetros definen las

dimensiones del equipo y las variables operacionales del proceso. Las variables son los números adimensionales que se calculan durante la evaluación del modelo y están especificadas en la Tabla 3.2 de la manera que se introducen en COMSOL: Sherwood, Schmidt y Reynolds de la burbuja, definidos en las Ecuaciones 2.18, 2.19 y 1.4, respectivamente.

**Tabla 3.1.** Parámetros de operación y dimensiones físicas del proceso.

Nombre	Expresión	Valor	Descripción
L	3.83[m]	3.83 m	Diámetro de la columna
Hcol	1.5[m]	1.5 m	Altura de la columna
db	0.003[m]	0.003 m	Diámetro de la burbuja
f1	329.5[m <sup>3</sup> /d]	0.0038137 m <sup>3</sup> /s	Flujo entrada del gas
A	$\pi \cdot db^2$	1.131E-4 m <sup>2</sup>	Área de entrada
vin	f1/A	33.72 m/s	Velocidad entrada del gas
T	338[K]	338 K	Temperatura
phiG1	0.00001	1E-5	Fracción volumen gas H <sub>2</sub> S
phiL	1 - phiG1	0.99999	Fracción volumen liquido
cin_1	4.07e-10[mol/L]	4.07E-7 mol/m <sup>3</sup>	Concentración inicial H <sub>2</sub> S
cnaoh	4.14[mol/L]	4140 mol/m <sup>3</sup>	Concentración inicial del NaOH
fi	1	1	Parámetro de asociación del disolvente
V_A1	0.0329[m <sup>3</sup> /kmol]	3.29E-5 m <sup>3</sup> /mol	Volumen molar del H <sub>2</sub> S
P	26.33[atm]	2.6679E6 Pa	Presión de operación
rad	L/2	1.915 m	Radio de la columna

**Tabla 3.2.** Variables adimensionales.

Nombre	Expresión	Descripción
Sh1	$1.13 \cdot Sc1^{0.5} \cdot Re1^{0.5}$	Sherwood
Sc1	mat1.def.mu/(mat1.def.rho*mat2.def.D_iso)	Schmidt
Re1	db*mat1.def.rho*bf.Uslip/mat1.def.mu	Reynold

También se definieron las propiedades de las sustancias involucradas en la simulación a partir de los materiales de la biblioteca de Comsol. Este programa tiene definidas muchas de las propiedades de las sustancias a partir de correlaciones que ya están programadas dentro del mismo software, como son la densidad y algunas viscosidades. Algunas propiedades, como la viscosidad del H<sub>2</sub>S y el coeficiente de

difusión, se calcularon a partir de las correlaciones definidas en las Secciones 2.4 y 2.5, respectivamente. En la Tabla 3.3 se relacionan estas propiedades físico-químicas.

**Tabla 3.3.** Propiedades físico-químicas de las sustancias.

Sustancia	Descripción	Nombre	Expresión/Valor	Unidad
NaOH	Densidad	rho(T)	$2101.73333-0.5251 \cdot T^1$ para $598 < T(K) < 823$	kg/m <sup>3</sup>
	Viscosidad dinámica	eta(T)	$\exp(2.48443640E+03/T - 9.53731783)$ para $623 < T(K) < 823$	Pa·s
	Masa molar media	Mn	0.04	kg/mol
H <sub>2</sub> S	Viscosidad dinámica	eta(T)	$-5.819112E-7+4.4611E-8 \cdot T^1+8.382331E-12 \cdot T^2-2.904353E-14 \cdot T^3+1.372261E-17 \cdot T^4$ para $200 < T(K) < 1000$	Pa·s
	Densidad	rho	1.36	kg/m <sup>3</sup>
	Coefficiente de difusión	D_iso	$7.4e-8 \cdot \sqrt{(f_i \cdot \text{mat1.def.Mn}[\text{kmol/kg}]) \cdot T[1/K] / (\text{mat1.def.mu}[1/(\text{Pa} \cdot \text{s})] \cdot V_{A1}[\text{kmol/m}^3])} [\text{s/m}^2]$	m <sup>2</sup> /s
	Masa molar media	Mn	0.0341	kg/mol

### 3.2. Módulos de simulación

En el estudio de la columna de burbujeo se utilizaron tres físicas en estado no estacionario:

- Flujo de burbujas,  $\kappa$ - $\epsilon$

Este módulo, diseñado para analizar la hidrodinámica del proceso, incorpora el efecto de transferencia de masa mediante la teoría de doble capa (descrita en la sección 1.8). El modelo de turbulencia adoptado es el RANS, específicamente el  $\kappa$ - $\epsilon$ , utilizando los parámetros predeterminados. Además, se integra la turbulencia inducida por la burbuja, esencial para capturar perturbaciones turbulentas generadas por el desplazamiento de las burbujas en el líquido. Este componente mejora la representación de la dinámica del fluido en presencia de burbujas, impactando la distribución de velocidad y la transferencia de masa en la columna de burbujeo. En el

modelo, se aplicó el balance de resistencia de presión con el coeficiente de resistencia para burbujas grandes, definiendo una tensión superficial de  $\sigma = 43.5 \text{ dyn/cm}$ . Este módulo resuelve ecuaciones para la transferencia de momentum (Ecuaciones 2.2 y 2.3), la ecuación de continuidad (Ecuación 2.5), transferencia de masa (Ecuación 2.6 – 2.12) y el modelo de turbulencia (Ecuaciones 2.30 – 2.34). La inclusión de la turbulencia inducida por la burbuja mejora la capacidad del modelo para anticipar y comprender los fenómenos hidrodinámicos en condiciones reales del proceso de desulfuración alcalina.

- Transporte de especies diluidas

Este módulo se integra de manera sinérgica con el modelo de flujo de burbujas, ampliando la capacidad del sistema para abordar el transporte de masa del  $\text{H}_2\text{S}$  en la fase gaseosa. A través de las Ecuaciones 2.14 – 2.20, se realiza un detallado balance de masa que permite cuantificar la concentración de  $\text{H}_2\text{S}$  en la fase gaseosa. En este contexto, el mecanismo de transporte predominante es la convección, aprovechando el campo de velocidad de la fase líquida calculado por el módulo de flujo de burbuja. Esta interconexión entre los módulos garantiza una representación más precisa y completa del comportamiento del  $\text{H}_2\text{S}$  a lo largo de la columna de burbujeo, incorporando los efectos del transporte de masa y la dinámica del flujo de burbujas.

- Transporte de especies concentradas

Este módulo, en su interacción con el primer módulo de flujo de burbujas, se focaliza en el análisis del balance de materiales en la fase líquida, permitiendo la cuantificación precisa de la concentración de  $\text{NaOH}$  en esta fase crítica del proceso. La modelización de la difusión se basa en la Ley de Fick, y para determinar el campo de velocidad de la fase líquida, se recurre al cálculo previamente realizado en el módulo de flujo de burbujas.

La utilización específica de la Ley de Fick como modelo de difusión se justifica por su capacidad para describir con precisión el proceso de transporte molecular en la fase líquida, considerando la concentración de  $\text{NaOH}$ . Este enfoque se alinea con la

necesidad de abordar detalladamente la transferencia de masa en la columna de burbujeo.

Además, tanto en este módulo como en el del transporte de especies diluidas, se emplea la expresión cinética de la reacción definida en la Sección 2.6 (Ecuación 2.50). Esta elección se fundamenta en la capacidad de dicha expresión para modelar de manera coherente la dinámica de las reacciones químicas asociadas con la desulfuración alcalina, asegurando una representación robusta y consistente de los fenómenos involucrados en el proceso. La integración coherente de estos modelos y parámetros fortalece la capacidad del sistema para simular y comprender el comportamiento detallado de la desulfuración alcalina en la columna de burbujeo.

Las soluciones fueron evaluadas utilizando el resolvidor PARDISO incorporado, y el acoplamiento presión-velocidad se discretizó mediante un esquema P1 + P1. Se adoptó un enfoque completamente acoplado para resolver tanto las ecuaciones de Navier-Stokes como las ecuaciones de transporte de especies. Este método proporciona una integración más precisa y detallada de las interacciones entre la presión y la velocidad, contribuyendo a una representación más fiel de los fenómenos hidrodinámicos y de transporte de masa en el sistema estudiado. La elección del resolvidor y el enfoque acoplado refleja un compromiso con la precisión y la robustez en la simulación de la complejidad del proceso de desulfuración alcalina en la columna de burbujeo, garantizando resultados confiables y significativos.

### **3.3. Prueba de sensibilidad de la malla**

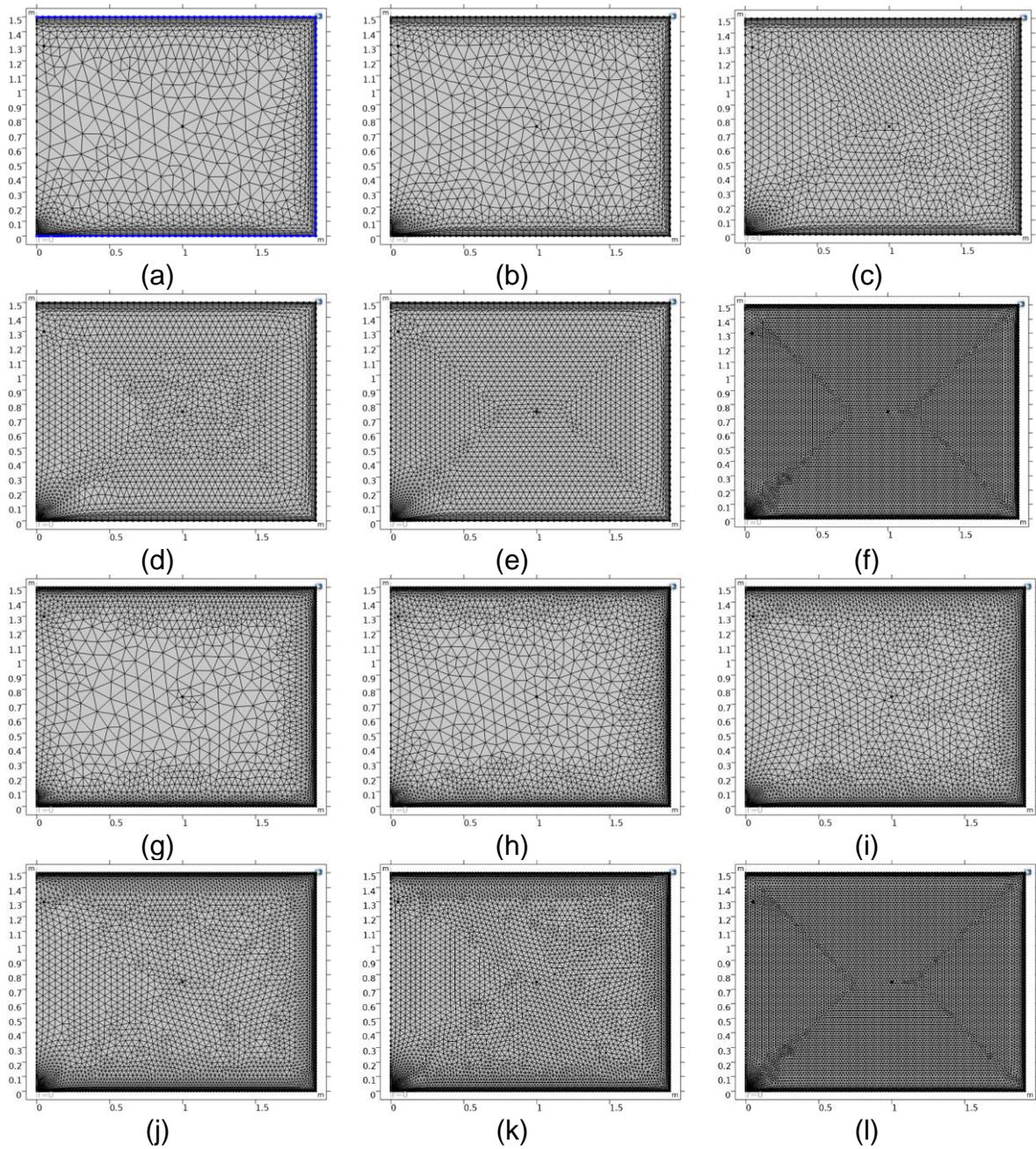
La prueba de sensibilidad de la malla en Comsol evalúa cómo la calidad y densidad de la malla afectan la precisión y estabilidad de la simulación. Ajustando parámetros, como el tamaño de los elementos, se analiza su impacto en los resultados numéricos para asegurar la robustez del modelo y garantizar resultados confiables y representativos.

Una de las debilidades del modelo de turbulencia utilizado en este estudio es que no tiene buenas aproximaciones en las paredes del dominio por lo que se realizaron

pruebas utilizando un mallado extrafino en las paredes. En la Tabla 3.4 se muestran las combinaciones de mallas utilizadas en cada simulación, el número de elementos en el dominio y las paredes obtenidas en cada tipo de malla utilizada, así como el tiempo de cómputo de cada simulación. En la Figura 3.3 se muestran todas las mallas construidas para esta prueba de sensibilidad. La prueba de sensibilidad se realizó utilizando un diámetro de burbuja de 6 mm y una presión de operación de 26.33 atm para un tiempo de simulación 5000 s. Todas las simulaciones se realizaron con los valores iniciales de las variables consistentes con el sistema de estudio. En el caso de la malla gruesa en el dominio y extrafina en el contorno (GEF) y la malla normal en el dominio y extrafina en el contorno (NEF) el modelo no convergió por lo que se realizó una segunda simulación tomando como valores iniciales los resultados obtenidos en la malla FEF y aun así el modelo no convergió. Debido a esto, tales mallas no fueron incluidas finalmente en el análisis de sensibilidad.

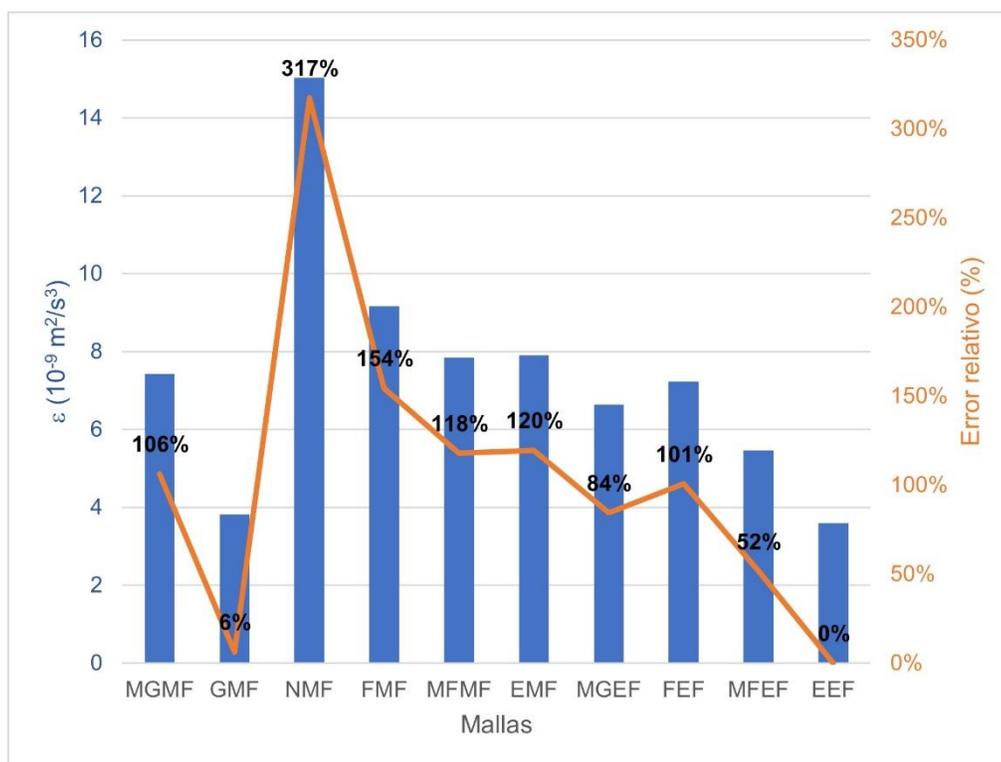
**Tabla 3.4.** Análisis de sensibilidad de malla.

Simulación	Código	Malla dominio	Malla contorno	No. de elementos de dominio	No. de elementos de contorno	Tiempo de cómputo
Corrida 1	MGMF	Más gruesa	Más Fina	2639	193	1h 49min 35s
Corrida 2	GMF	Gruesa	Más Fina	2940	194	1h 49min 47s
Corrida 3	NMF	Normal	Más Fina	3755	199	4h 15min 48s
Corrida 4	FMF	Fina	Más Fina	4771	203	2h 26min 5s
Corrida 5	MFMF	Más Fina	Más Fina	5498	210	2h 28min 46s
Corrida 6	EMF	Extrafina	Más Fina	20949	389	15h 47min 52s
Corrida 7	MGEF	Más gruesa	Extrafina	5642	348	4h 15min 47s
Corrida 8	GEF	Gruesa	Extrafina	6208	348	No converge
Corrida 9	NEF	Normal	Extrafina	7356	350	No converge
Corrida 10	FEF	Fina	Extrafina	8242	352	6h 54min 55s
Corrida 11	MFEF	Más Fina	Extrafina	9974	358	7h 38min 9s
Corrida 12	EEF	Extrafina	Extrafina	20949	389	15h 25min 57s

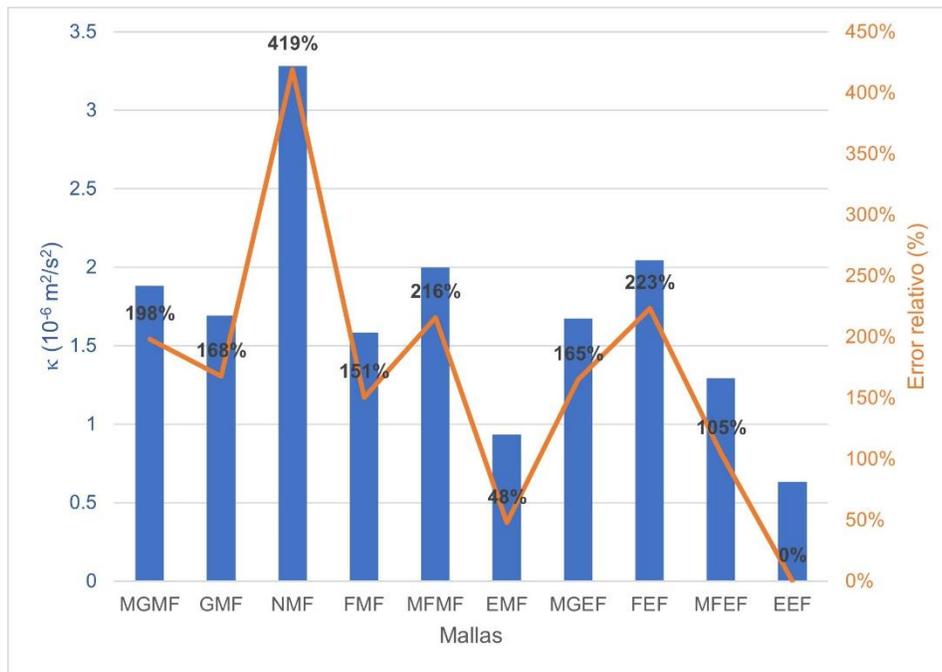


**Figura 3.3.** Construcción de las mallas en la columna de burbujeo: (a) MGMF, (b) GMF, (c) NMF, (d) FMF, (e) MFMF, (f) EMF, (g) MGEF, (h) GEF, (i) NEF, (j) FEF, (k) MFEF y (l) EEF.

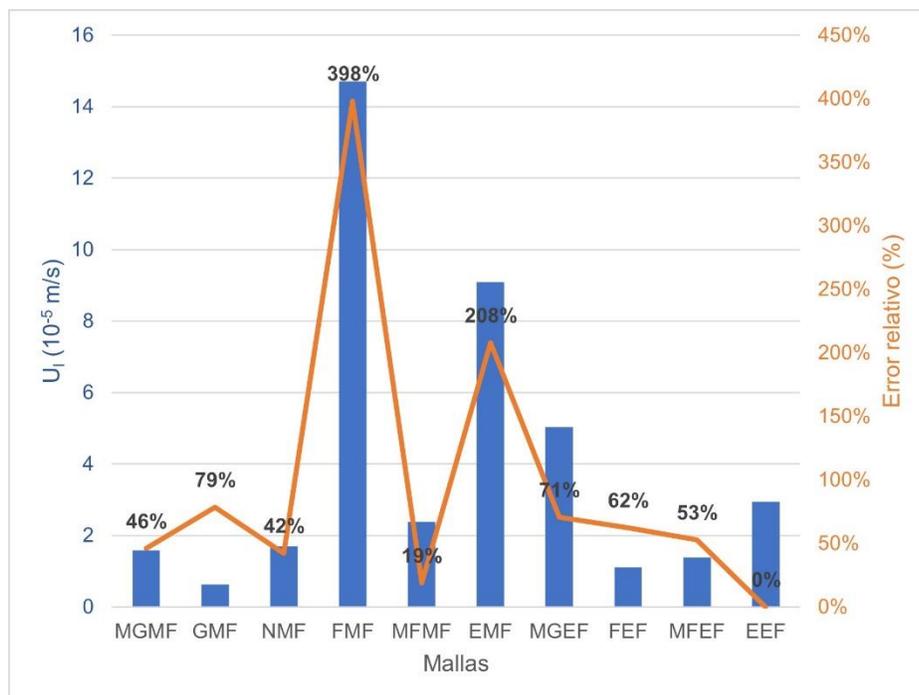
Se evaluaron cuatro parámetros clave en este proceso: la tasa de disipación de energía ( $\varepsilon$ ), la energía cinética turbulenta ( $\kappa$ ), la magnitud de la velocidad del líquido ( $U_i$ ) y la concentración de NaOH en el líquido. En la Figura 3.4 se presenta la tasa de disipación de energía y los errores relativos en comparación con la malla EEF. La Figura 3.5 detalla la energía cinética turbulenta y los errores relativos en relación con la malla EEF. La Figura 3.6 muestra la magnitud de la velocidad del líquido y los errores relativos en función de la malla EEF. Cada figura ofrece una visión detallada de la variación de estos parámetros en relación con la densidad de la malla, proporcionando una comprensión exhaustiva de su comportamiento y la influencia de la resolución de la malla en los resultados.



**Figura 3.4.** Tasa de disipación de la energía y errores relativos respecto a la malla EEF.



**Figura 3.5.** Energía cinética turbulenta y errores relativos respecto a la malla EEF.



**Figura 3.6.** Magnitud de la velocidad del líquido y errores relativos respecto a la malla EEF.

Para el parámetro de energía cinética turbulenta ( $\kappa$ ), los porcentajes de error relativo oscilan entre el 48 % y el 420 %, como se observa en la Figura 3.4. En el caso de la tasa de disipación de energía ( $\varepsilon$ ), los errores relativos se sitúan en el rango de 6 % a 317 %, según se visualiza en la Figura 3.5. En relación con la magnitud de la velocidad del líquido, los porcentajes de error varían entre el 19 % y el 319 %, según se evidencia en la Figura 3.6. Es importante destacar que la concentración de NaOH en el líquido permanece constante en todos los casos, manteniendo un valor de 4058 mol/m<sup>3</sup>. Respecto al tiempo de cómputo se comprobó que mientras mayor era el número de elementos en el dominio mayor era el tiempo requerido para realizar los cálculos. Finalmente, se observa que no hay una regularidad en cuanto a los porcentajes de error relativo pues a pesar de que aumentan los elementos del dominio no es constante el aumento o disminución del porcentaje. Estos resultados pueden deberse a múltiples factores, incluyendo la complejidad del modelo de turbulencia  $\kappa$ - $\varepsilon$ , la discretización del dominio y la malla utilizada en la simulación. En consecuencia, se considerarán exclusivamente las variables centrales ( $U_i$  y concentración de NaOH en el líquido) para la elección de la malla, excluyendo las variables de cerradura ( $\kappa$  y  $\varepsilon$ ). En este contexto, se elige la malla más fina tanto en el dominio como en el contorno para la simulación CFD, ya que exhibe el menor porcentaje de error relativo (19 %) con respecto a la magnitud de la velocidad del líquido.

### 3.4. Resultados de la simulación CFD: análisis de variables clave

En esta sección se muestra el comportamiento de una columna de burbujeo con un orificio en el centro de su base. Se consideraron cinco diámetros de burbuja diferentes ( $d_b = 0.003, 0.0045, 0.006, 0.008, \text{ y } 0.01 \text{ m}$ ) y tres niveles de presión operativa ( $P = 0, 1, \text{ y } 26.33 \text{ atm}$ ). En el caso de una presión de 0 atm, se consideró exclusivamente el efecto de la presión piezométrica, que toma en cuenta las variaciones de presión causadas por los cambios en la altura a medida que el gas avanza a través del líquido. Esta presión se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$p = g(\phi_l \rho_l + \phi_g \rho_g)(H_{col} - z) \quad (3.1)$$

donde  $H_{col}$  es la altura de la columna y  $z$  es la coordenada del eje  $z$  fijada en la dirección del flujo de gas. La coordenada del eje  $z = 0$  en el inferior de la columna y  $z = H_{col}$  en la parte superior de la columna. Para los otros dos valores de presión, a esta presión piezométrica se le sumará la presión de operación. La  $P = 26.33$  atm es la presión de trabajo del eyector – mezclador en el proceso original.

### 3.4.1. Evaluación de números adimensionales

Para todas las combinaciones de presión y diámetro de burbujas se calcularon los grupos adimensionales  $Re$ ,  $Re_b$ ,  $Sc$  y  $Sh$  en función de los valores promedio de la velocidad de la burbuja, en la Tabla 3.5 se muestran los resultados.

En cada caso, las variables no se ven afectadas por las variaciones de presión, pero la situación difiere cuando se trata de cambios en el diámetro de la burbuja. Como se esperaba, el número de Reynolds a nivel macroscópico disminuyó a medida que aumentó el diámetro de la burbuja. Esto se debe a que con el aumento del diámetro de la burbuja, es decir, el agujero de entrada del gas, la velocidad del gas disminuye pues el flujo de entrada es igual para todos los casos  $f_1 = 329.5 \frac{m^3}{d}$ .

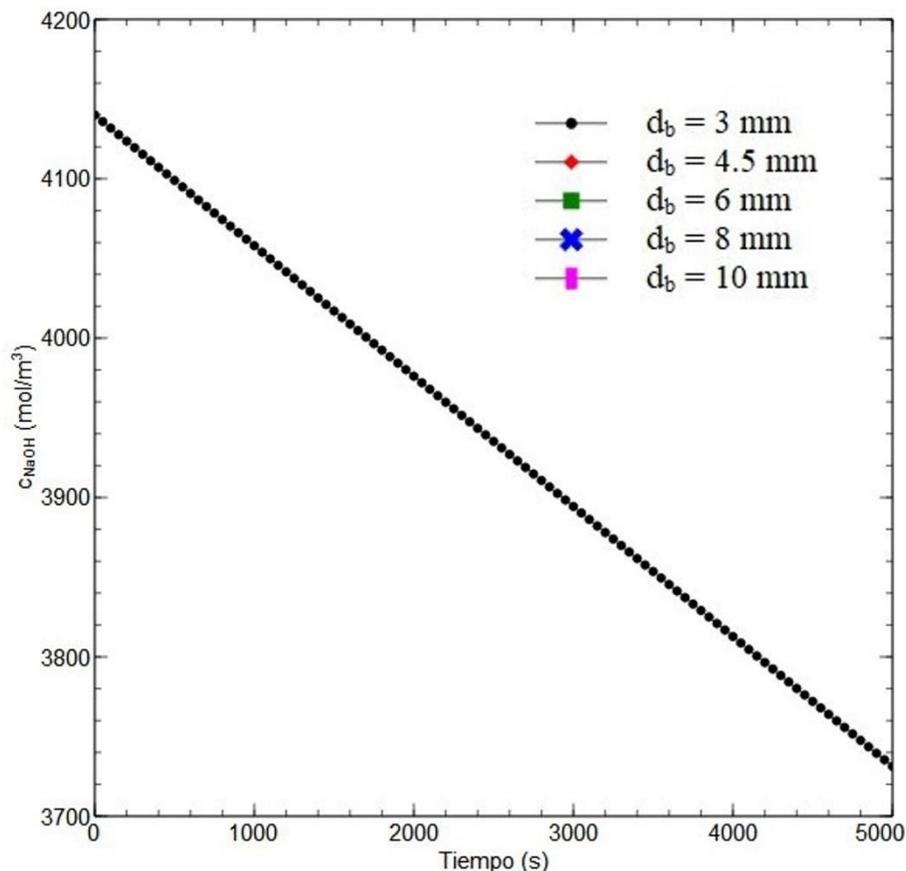
**Tabla 3.5.** Grupos adimensionales.

Diámetro de burbuja (m)	Presión operacional (atm)	Re	$Re_b$	$Sc \times 10^6$	$Sh \times 10^2$
0.003	0	18084.89	247.45	2.03	2.53
	1				
	26.33				
0.0045	0	12056.59	380.37	2.03	3.14
	1				
	26.33				
0.006	0	9042.44	539.94	2.03	3.74
	1				
	26.33				
0.008	0	6781.83	788.97	2.03	4.52
	1				
	26.33				
0.01	0	5425.47	1074.10	2.03	5.28
	1				
	26.33				

Con el número de Reynolds de la burbuja ocurre lo contrario, pues este depende de la velocidad de deslizamiento de la burbuja que aumenta con el aumento del diámetro de la burbuja. El número de Sh también aumenta con el diámetro de la burbuja pues depende de  $Re_b$  y de  $Sc$ , este último se mantiene constante pues solo depende de las propiedades físicas del líquido y estas no varían.

### 3.4.2. Dinámica de la concentración de NaOH

Se determinó el cambio de concentración de NaOH, promediada en el volumen del líquido, en el tiempo, como se muestra en la Figura 3.7. En todos los casos sin importar el cambio de diámetro de la burbuja ni el cambio de presión de operación, el comportamiento es igual. Es decir, la disminución de la concentración de NaOH en la solución alcalina ocurre en la misma proporción.



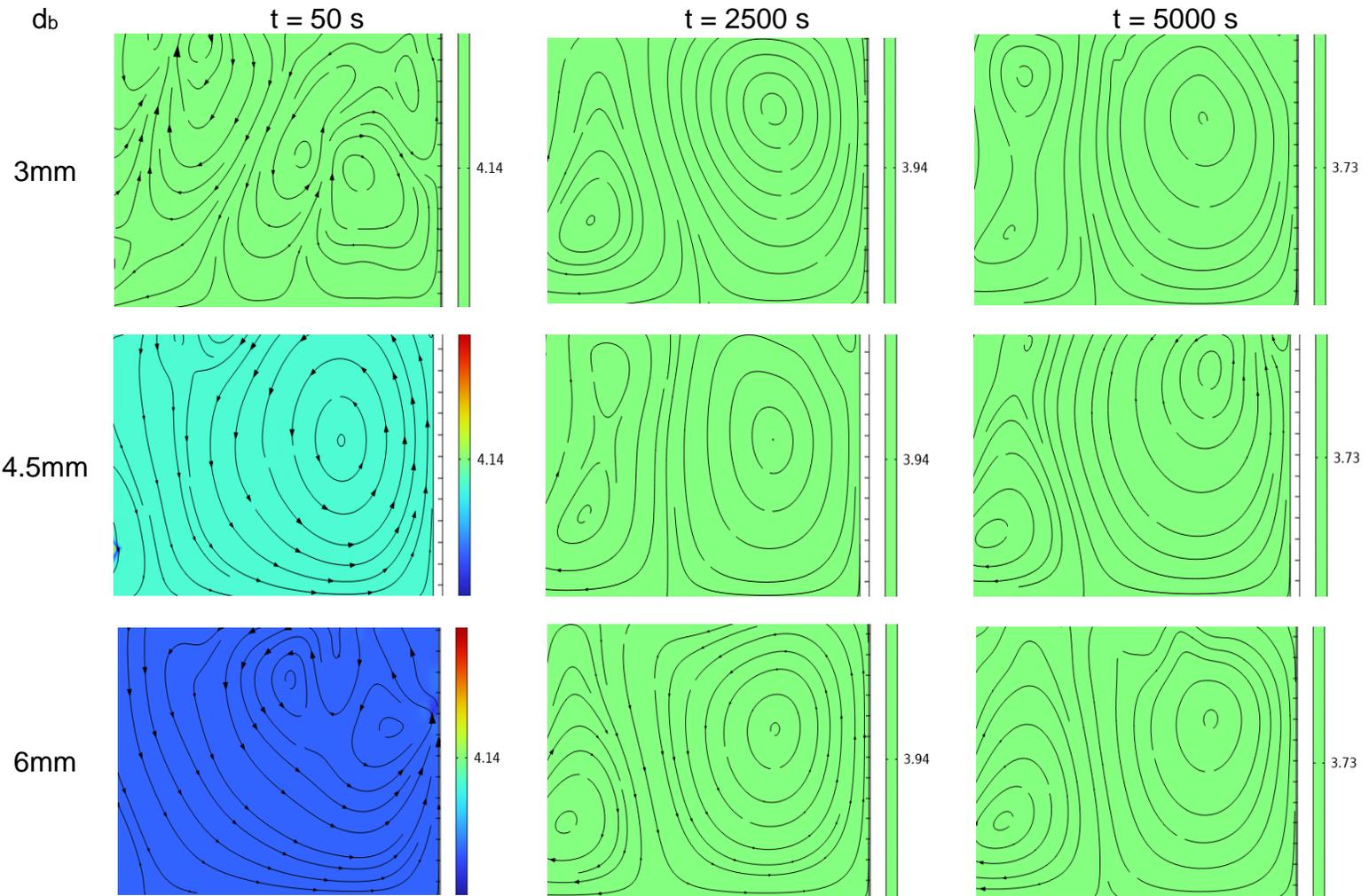
**Figura 3.7.** Comportamiento de la concentración de NaOH en función del tiempo para diferentes valores de diámetros de entrada del gas.

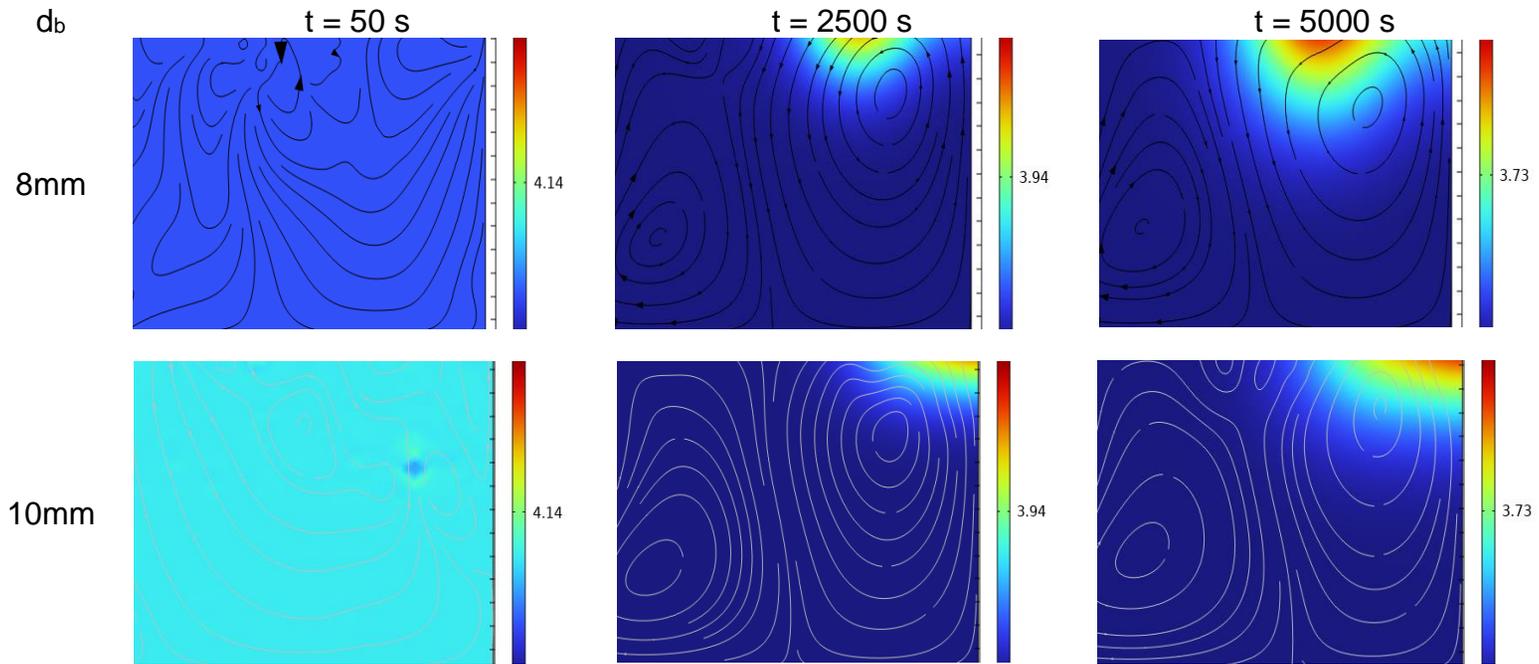
En las Figuras 3.8–3.10 se exploran las variaciones en la concentración de NaOH en el fluido para diferentes diámetros de burbuja bajo distintas presiones. En la Figura 3.8, a una presión de 0 atm, los contornos detallan la distribución de NaOH en la solución, acompañados de líneas de flujo que ilustran el campo de velocidad de la fase líquida. La Figura 3.9 muestra la concentración de NaOH para diversos diámetros de burbuja a una presión de 1 atm, destacando la variación mediante contornos y líneas de flujo. En la Figura 3.10, a una presión de 26.33 atm, se observa cómo la concentración varía con diferentes diámetros de burbuja, proporcionando una representación visual completa de los cambios en el sistema.

Se observa que en todos los casos la concentración de NaOH disminuye con el tiempo, lo cual es consistente con lo que sucede en el proceso físico. Se observan zonas con un cambio brusco de coloración en las Figuras 3.8 – 3.10, esto podrían indicar regiones donde ocurren cambios significativos en la cantidad de sustancia líquida. Estas áreas podrían estar relacionadas con la interacción entre las burbujas de gas y el líquido en la columna de burbujas. Las burbujas de gas que atraviesan el líquido pueden influir en la distribución de la sustancia líquida al arrastrarla consigo. Cuando una burbuja asciende, puede provocar un cambio brusco en la concentración del líquido en su entorno inmediato.

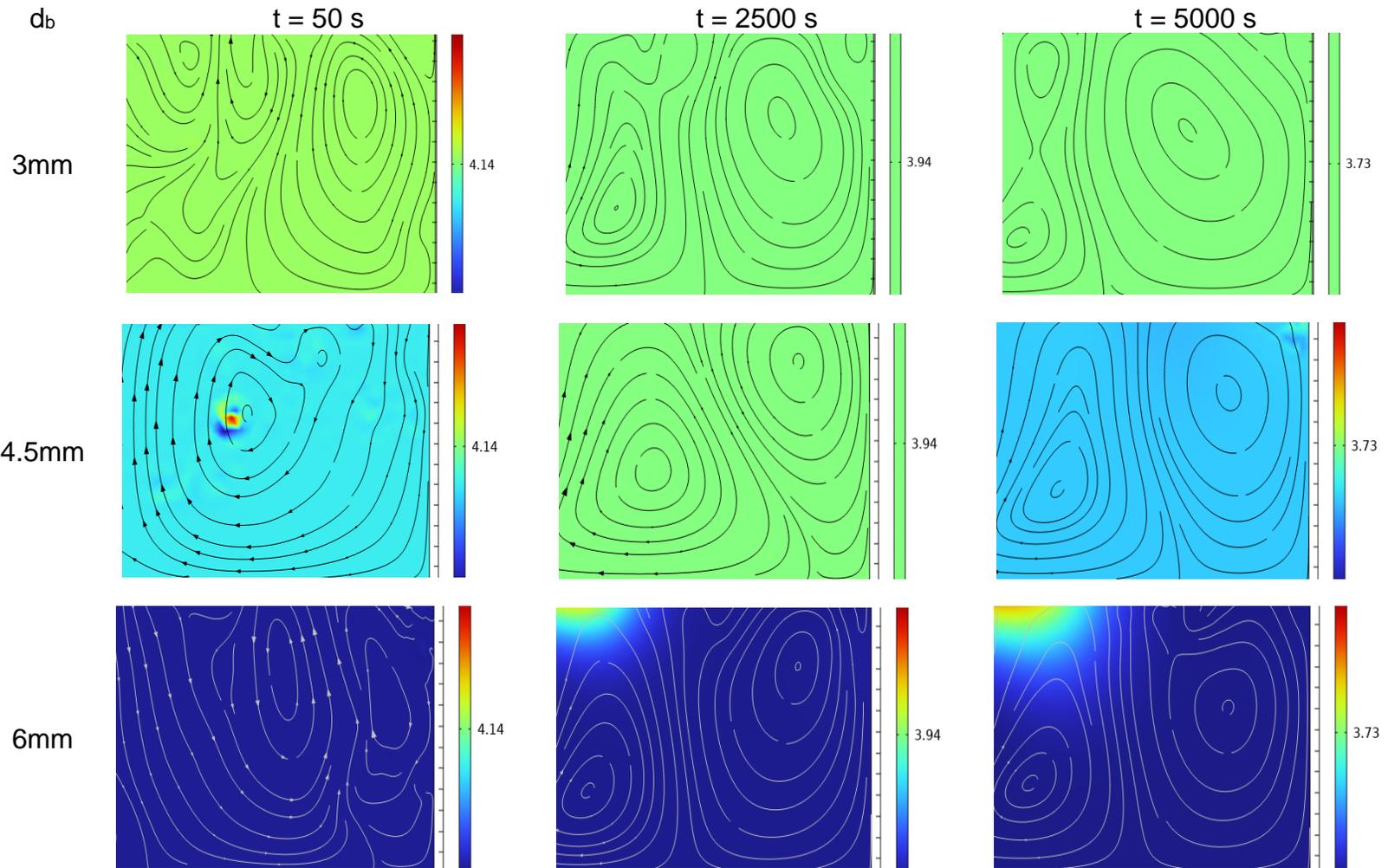
Para  $P = 0$  atm (Figura 3.8) y  $d_b = 3$  y 4.5 mm no hay zonas con cambio de coloración lo que sugiere una distribución relativamente homogénea de la concentración de NaOH en el líquido en la columna. Para  $d_b = 6$  mm solo se presentan estas zonas en los primeros instantes de tiempo. Para  $d_b = 8$  y 10 mm si se observan cambios de coloración en las zonas del extremo superior derecho, haciéndose más grande con el tiempo. Esto indica una mayor interacción y arrastre de líquido por burbujas de mayor tamaño.

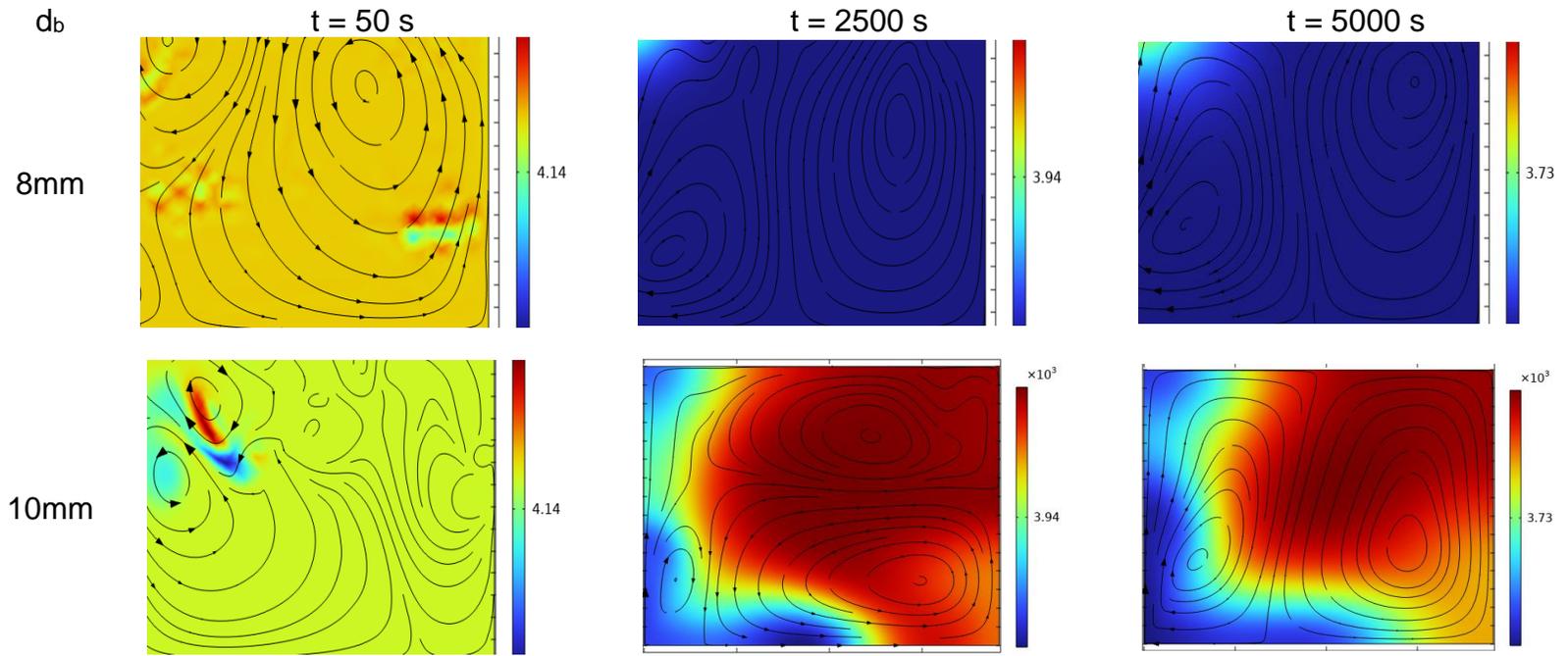
Para  $P = 1$  atm (Figura 3.9) solo se observan estas zonas a partir de  $d_b = 6$  mm hacia el centro superior de la columna, siendo mucho mayor para  $d_b = 10$  mm. Esto sugiere que la presión tiene un impacto en la distribución de la sustancia líquida, particularmente para burbujas de mayor tamaño.



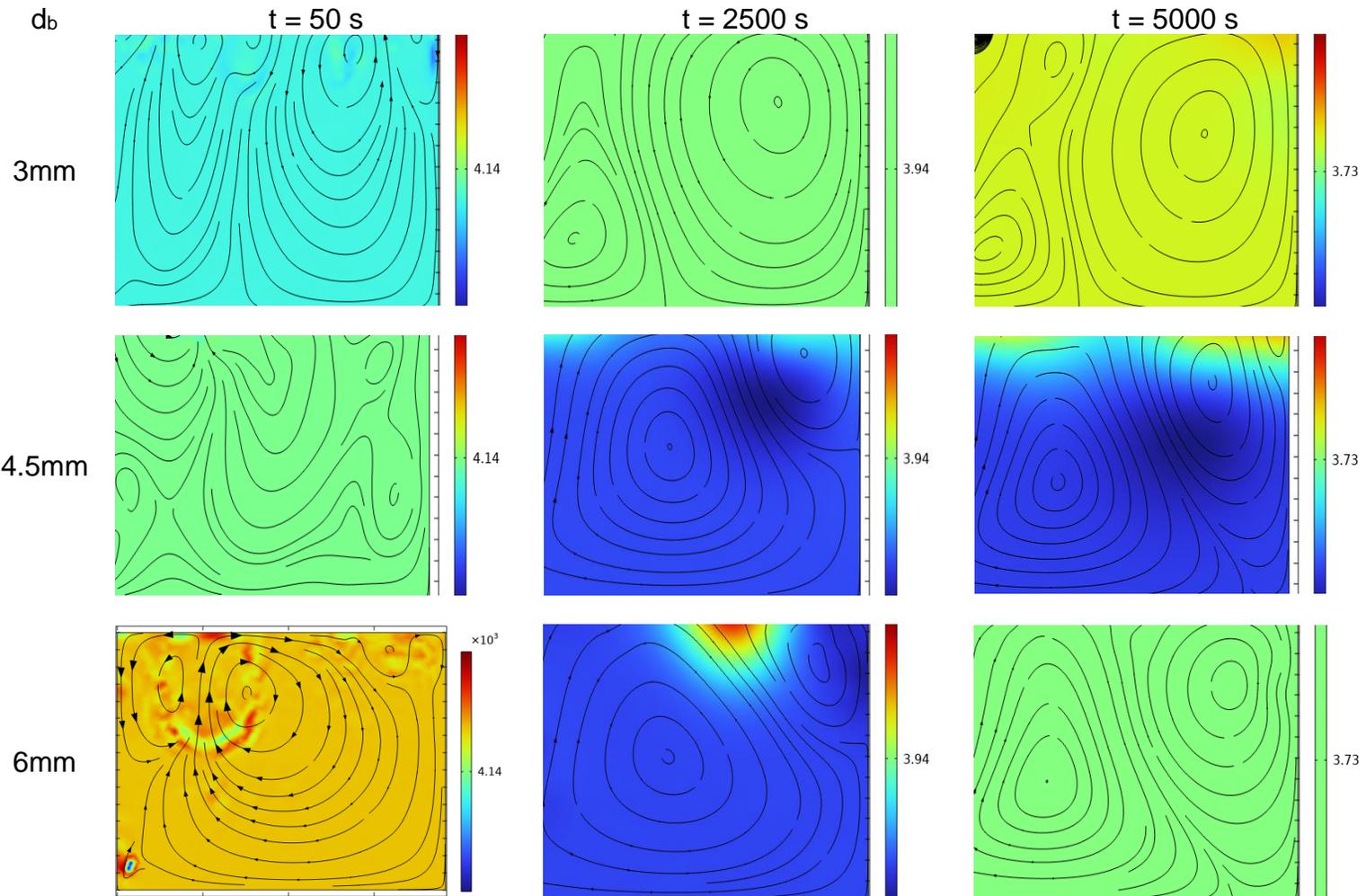


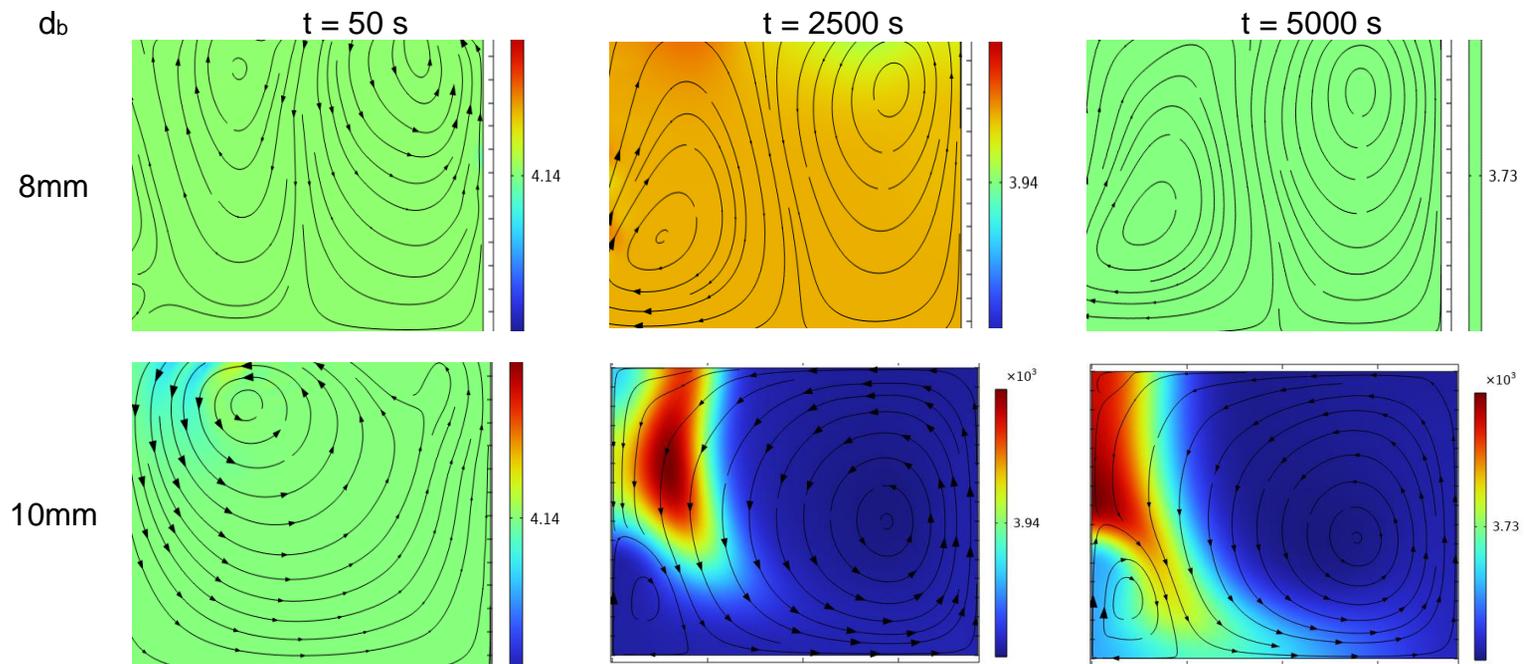
**Figura 3.8.** Concentración de NaOH en el fluido para diferentes diámetros de burbuja a  $P = 0$  atm, en distintos tiempos de simulación (50, 2500 y 5000 s), con representación de la concentración molar ( $\text{mol/m}^3$ ) y líneas de flujo del campo de velocidad de la fase líquida.





**Figura 3.9.** Concentración de NaOH en el fluido para diferentes diámetros de burbuja a  $P = 1$  atm, en distintos tiempos de simulación (50, 2500 y 5000 s), con representación de la concentración molar ( $\text{mol}/\text{m}^3$ ) y líneas de flujo del campo de velocidad de la fase líquida.





**Figura 3.10.** Concentración de NaOH en el fluido para diferentes diámetros de burbuja a  $P = 26.33$  atm, en distintos tiempos de simulación (50, 2500 y 5000 s), con representación de la concentración molar ( $\text{mol/m}^3$ ) y líneas de flujo del campo de velocidad de la fase líquida.

Para  $P = 26.33 \text{ atm}$  (Figura 3.10) la acumulación de burbujas es diferente para todos los diámetros de burbujas. En los  $d_b = 3$  y  $8 \text{ mm}$  no se observan estas zonas, indicando una distribución más uniforme. En  $d_b = 4.5 \text{ mm}$  el cambio de coloración se observa en la parte superior de la columna, en  $d_b = 6 \text{ mm}$  estas zonas están en el centro superior de la columna y luego desaparecen con el tiempo y en  $d_b = 10 \text{ mm}$  esta zona se concentra en todo el centro de la columna. Este comportamiento que se observa a medida que aumenta el diámetro de la burbuja podría indicar una mayor interacción y acumulación de líquido alrededor de burbujas de mayor tamaño.

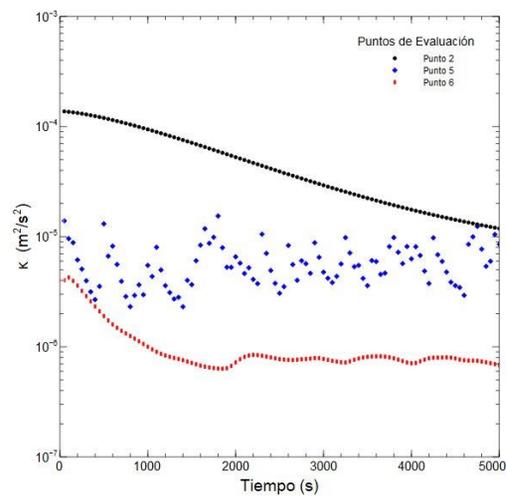
Al observar las líneas del campo de velocidad se puede ver la formación de vórtices lo que indica el estado de turbulencia de la fase líquida a nivel macroscópico. La presencia de vórtices implica que hay regiones de alta agitación en la columna, lo que puede influir en la mezcla eficaz de los componentes químicos. En estas áreas, los componentes se mezclarán y reaccionarán más intensamente. También se observa que el número de vórtices incrementa con el aumento del diámetro de la burbuja y la presión de operación, lo que indica una mayor turbulencia y agitación en el sistema.

### **3.4.3. Energía cinética turbulenta ( $\kappa$ )**

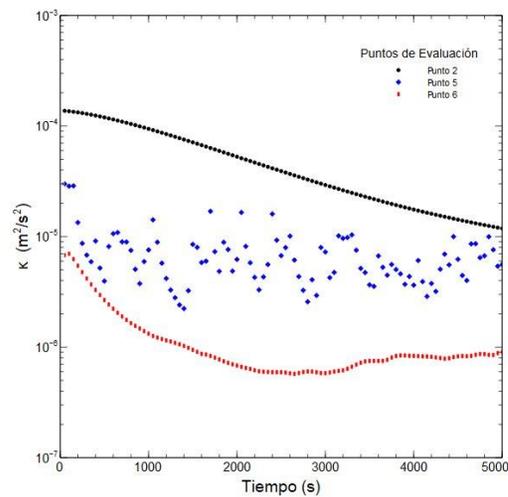
La energía cinética turbulenta es una medida de las fluctuaciones de la energía cinética general como consecuencias de las variaciones locales de velocidad. En una columna de burbujeo, la energía cinética turbulenta tiene varios efectos importantes en el comportamiento del fluido y en el rendimiento del proceso. Estos efectos pueden ser: una mezcla mejorada, transferencia de masa más efectiva entre las burbujas y el líquido, disipación de energía en forma de calor debido a la fricción en el fluido y un efecto erosivo en las superficies de contacto dentro de la columna (Liu et al., 2023). En las Figuras 3.11 – 3.13 se analiza el comportamiento de la energía cinética turbulenta para los diferentes diámetros de burbujas y presiones de operación analizados.

db

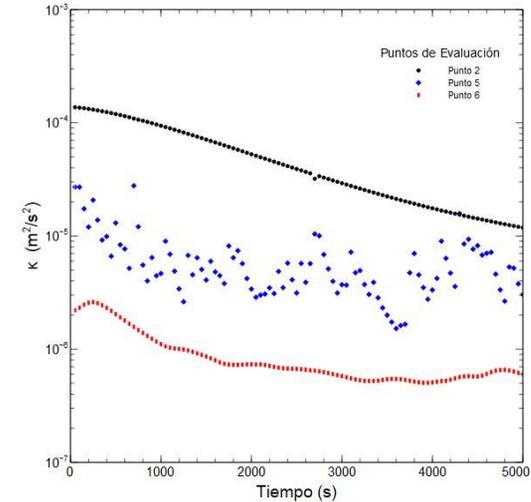
P = 0 atm



P = 1 atm

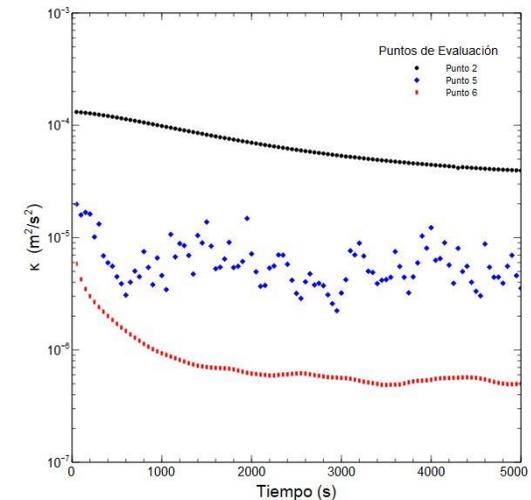
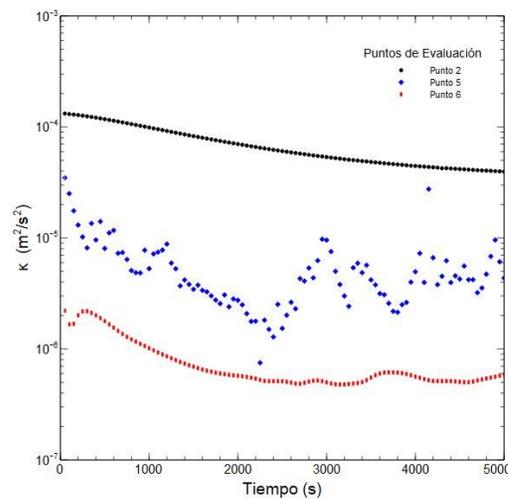
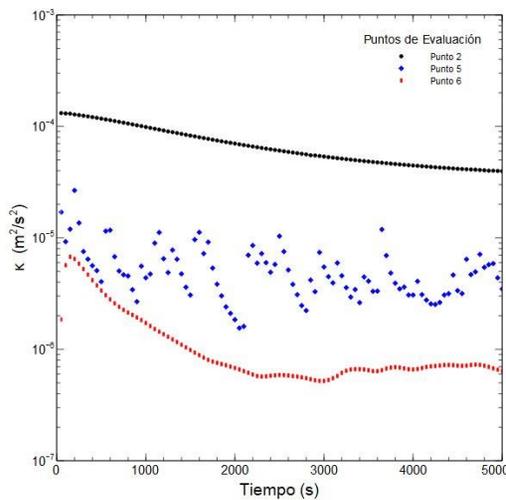


P = 26.33 atm

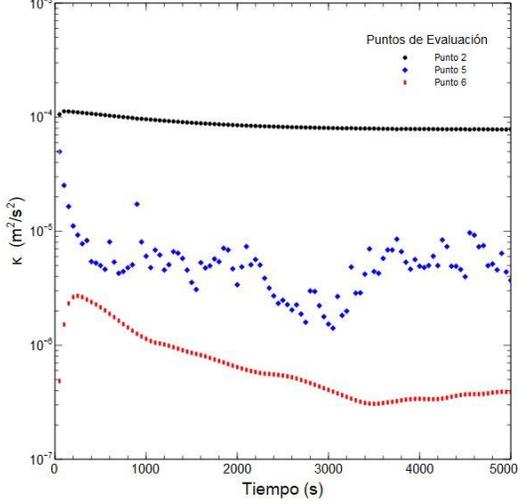
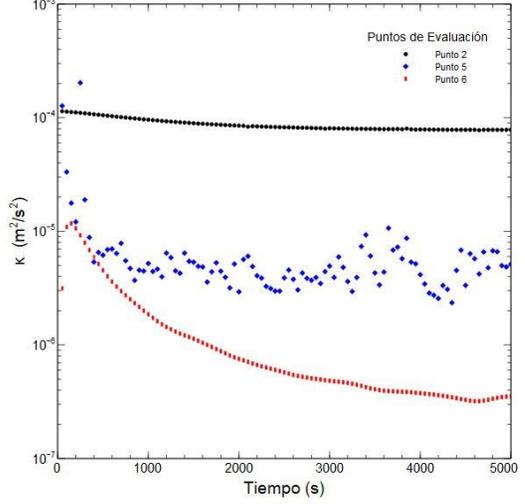
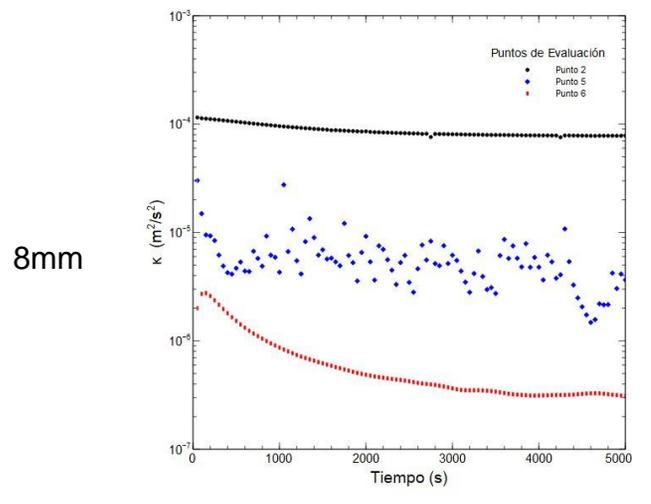
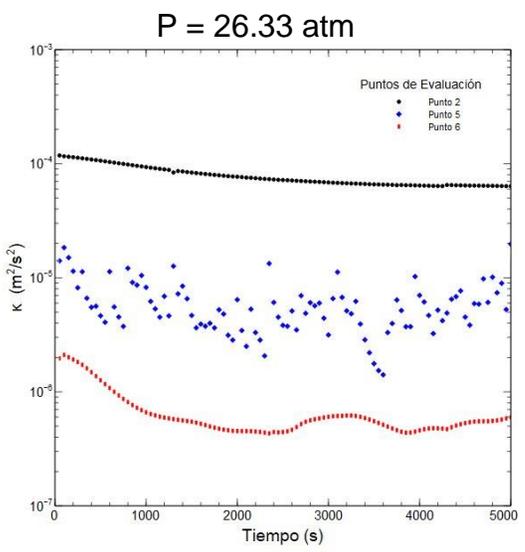
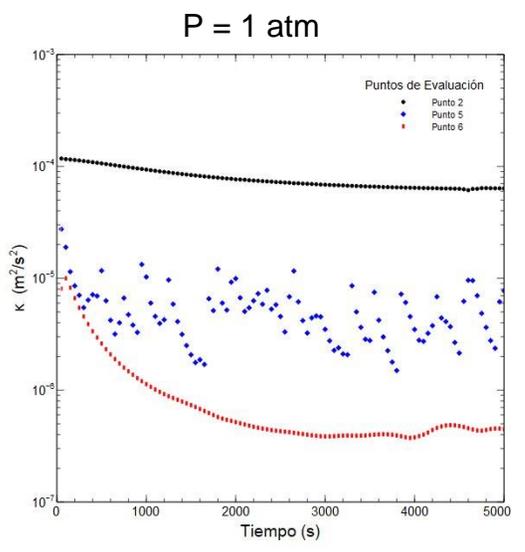
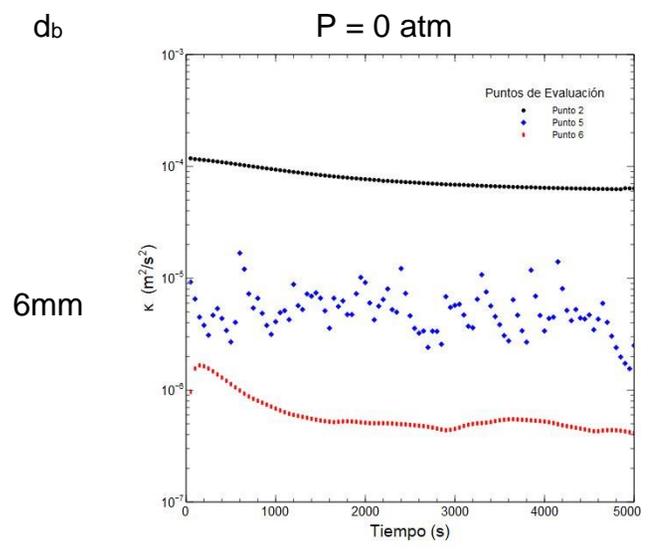


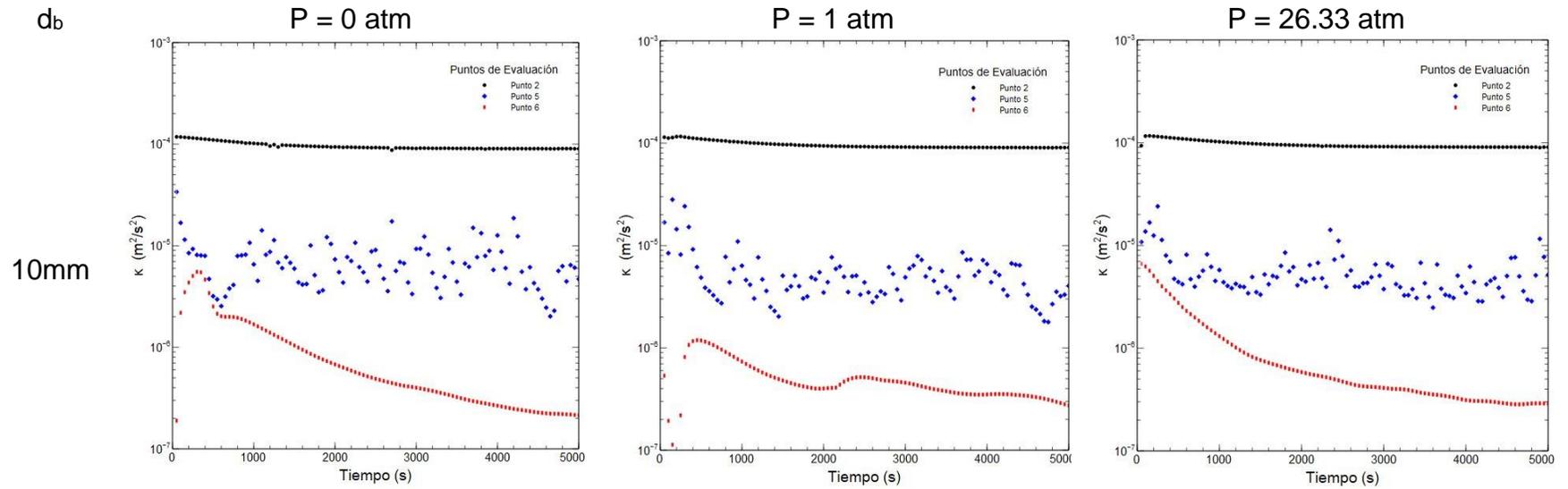
3mm

4.5mm



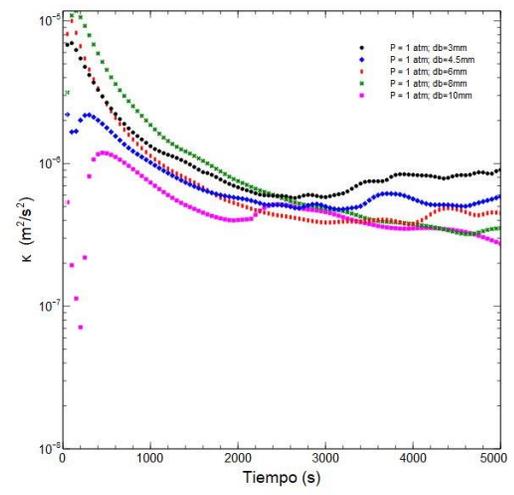
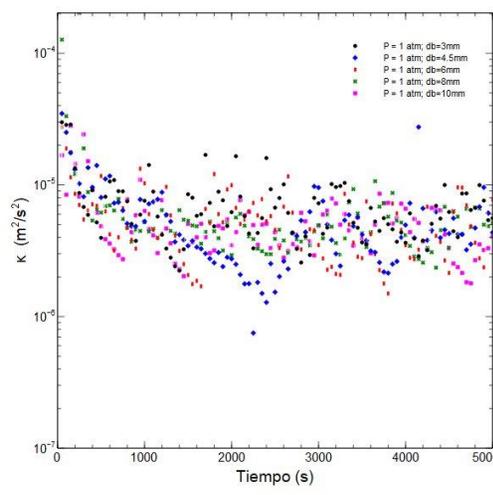
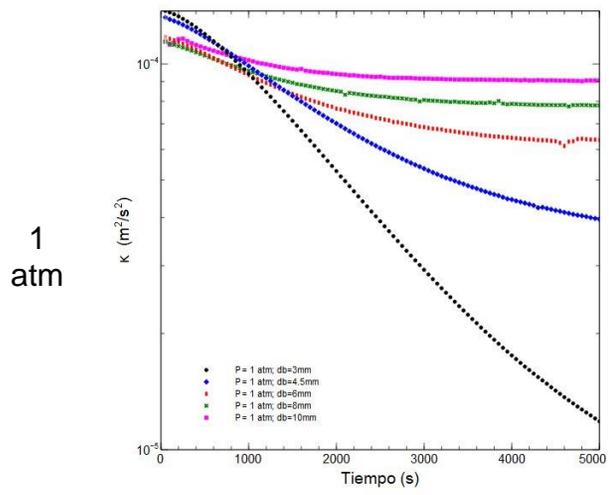
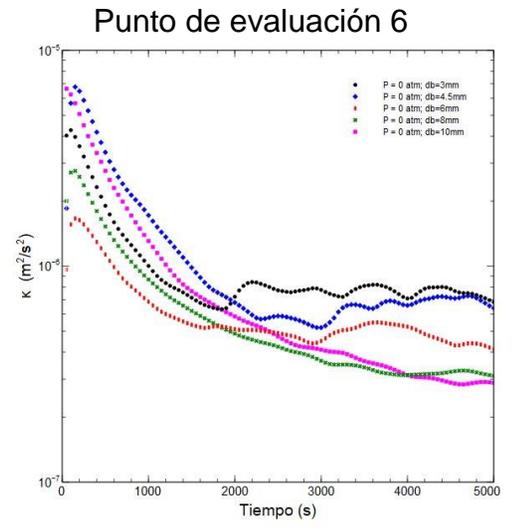
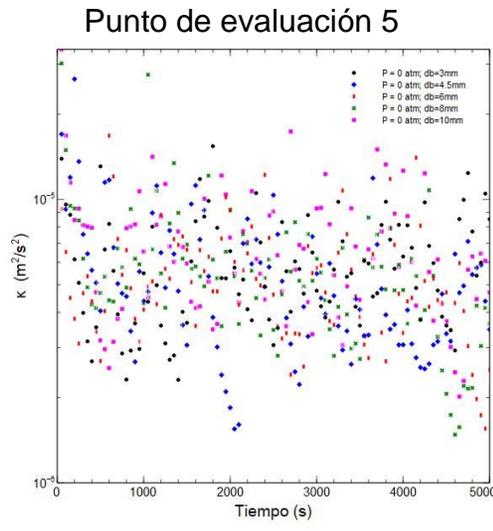
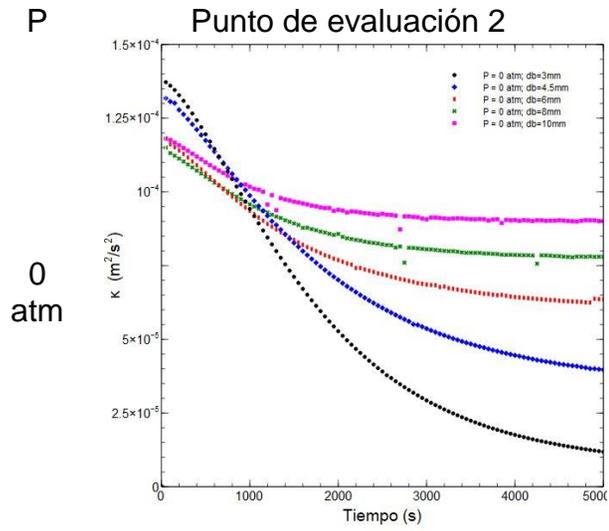
db

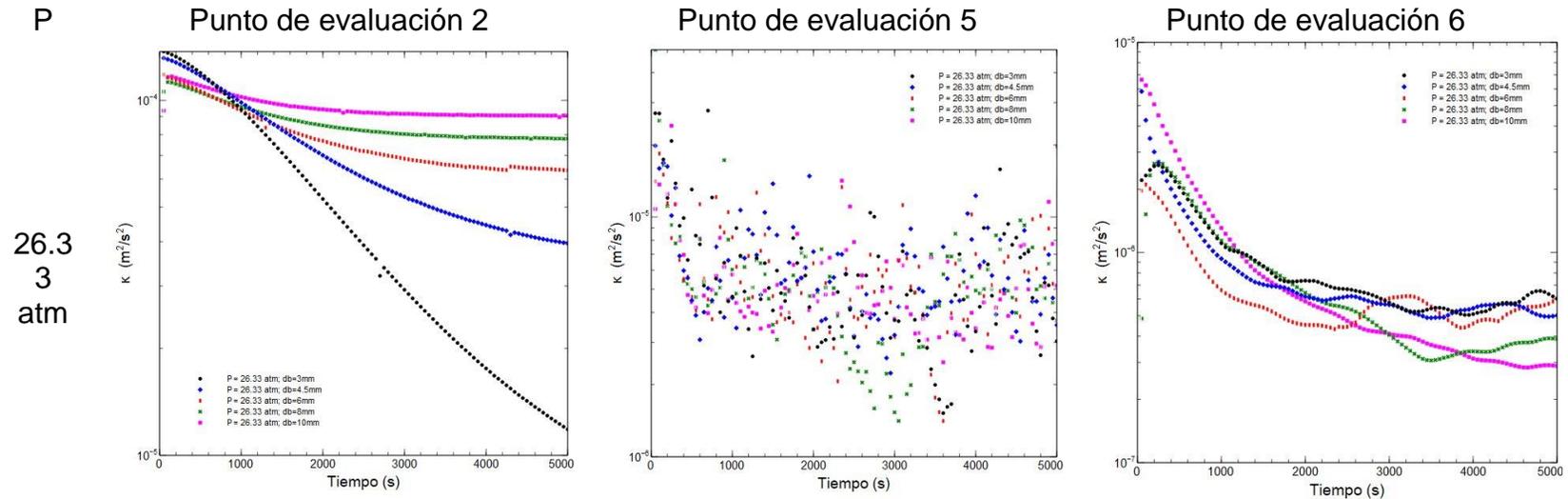




**Figura 3.11.** Energía cinética turbulenta para diferentes diámetros de burbuja en una columna de 1 agujero de entrada.

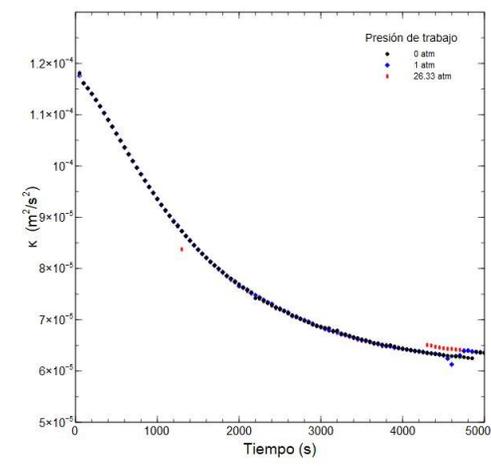
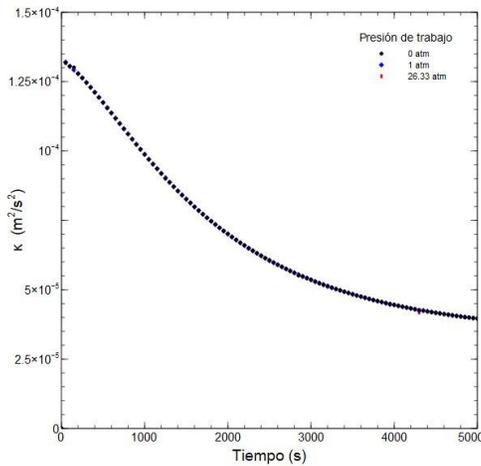
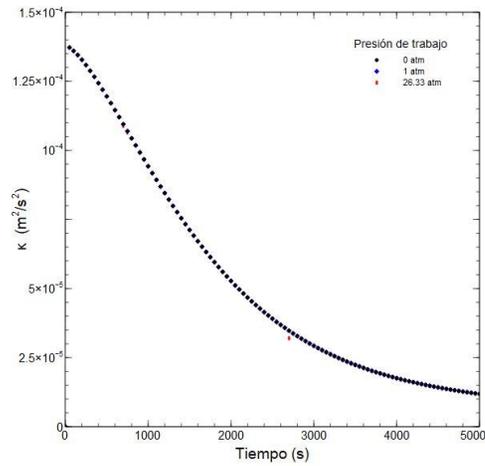
En la Figura 3.11 se muestra el comportamiento de  $\kappa$  para los diferentes diámetros de burbuja analizados y a diferentes presiones. En todos los casos la mayor energía cinética turbulenta se presenta a la entrada de la columna disminuyendo hacia las paredes de esta. Esto es una característica típica en flujos turbulentos, donde la turbulencia es más intensa en las regiones cercanas a las zonas de mayor perturbación, como la entrada de la columna.





**Figura 3.12.** Energía cinética turbulenta para diferentes presiones en los tres puntos de evaluación.

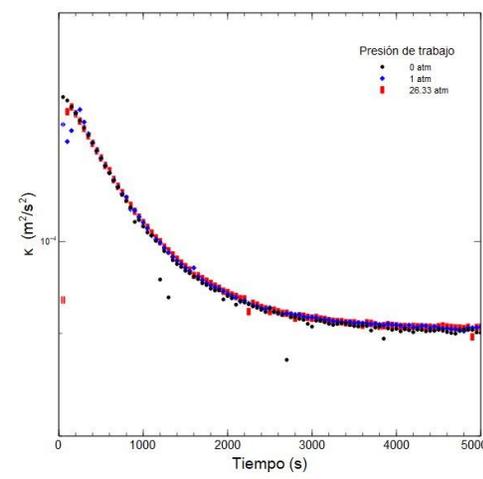
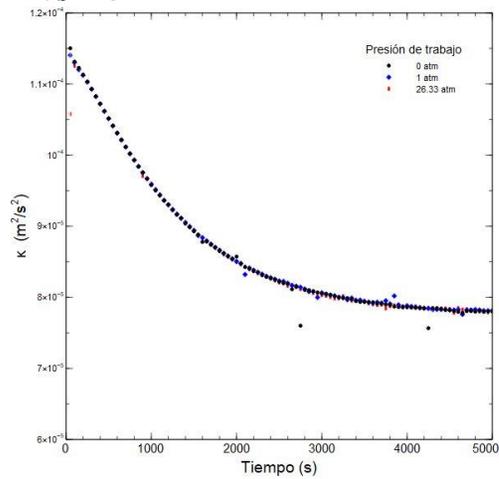
Al analizar la Figura 3.12 se observa que, en todas las presiones analizadas, a la entrada de la columna la mayor energía cinética se presenta en  $d_b = 3$  y  $4.5$  mm hasta los 1000 s. A partir de este tiempo el comportamiento de  $k$  respecto a  $d_b$  es directamente proporcional ocurriendo una disminución brusca en los menores diámetros de burbuja. Esto sugiere que las burbujas más pequeñas pueden tener un efecto diferente en la turbulencia a medida que evoluciona el proceso.



$d_b = 3 \text{ mm}$

$d_b = 4.5 \text{ mm}$

$d_b = 6 \text{ mm}$



$d_b = 8 \text{ mm}$

$d_b = 10 \text{ mm}$

**Figura 3.13.** Energía cinética turbulenta para diferentes presiones en el punto de evaluación 2

En la Figura 3.13 se puede observar que la presión no afecta a la energía cinética en ningún diámetro de burbuja, ya que se obtienen resultados similares para todas las presiones analizadas. Por tanto, en las condiciones y rangos de presión estudiados,  $\kappa$  se mantiene constante independientemente de la presión del sistema. Sin embargo, es importante mencionar que en todos los casos la energía cinética calculada en el punto 2 es mayor que la obtenida en el punto 5 y, a su vez, esta es mayor que la del punto 6. Al incrementar el diámetro del orificio de entrada a la columna, la energía cinética turbulenta tiende a un valor constante, aunque diferente en cada valor de diámetro, con excepción de la evaluación de esta variable en el punto cercano a la pared que muestra oscilaciones que se mantienen acotadas.

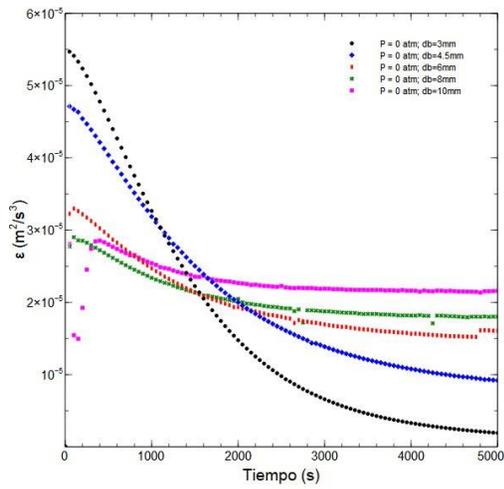
#### **3.4.4. Tasa de disipación de la energía cinética ( $\varepsilon$ )**

La tasa de disipación ( $\varepsilon$ ) se asocia a la velocidad a la cual se disipa la energía en forma de calor como resultado de los efectos viscosos del fluido. La formación de las zonas de vórtices está asociado a la disminución de la tasa de disipación como se puede observar en la Figura 3.14. En todos los casos esta formación de vórtices disminuye con el tiempo lo que indica que hay una disminución de la tasa de disipación de energía turbulenta, lo que podría estar relacionado con cambios en la velocidad del flujo o la interacción entre las burbujas y el líquido. En el caso de  $d_b = 10$  mm se puede ver que la formación de vórtices es menor para las presiones 1 y 26.33 atm debido a que la tasa de disipación es más alta en estos casos.

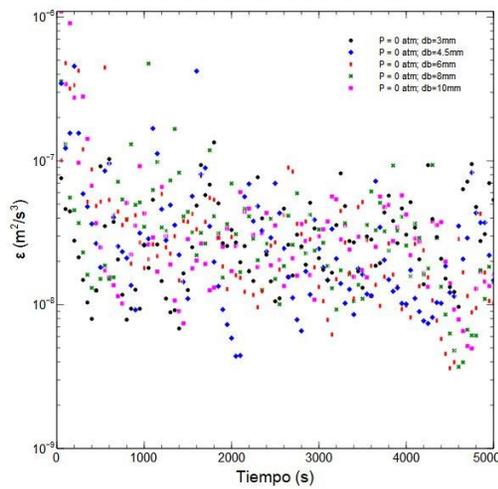
La variabilidad en el comportamiento de  $\varepsilon$  en el punto de evaluación 5, según lo observado en la Figura 3.14, se atribuye a las limitaciones inherentes al modelo de turbulencia  $\kappa - \varepsilon$ . Este modelo muestra inexactitudes al calcular las variables de turbulencia en áreas cercanas a las paredes, y el punto de evaluación 5 puede estar influenciado por estas discrepancias.

P

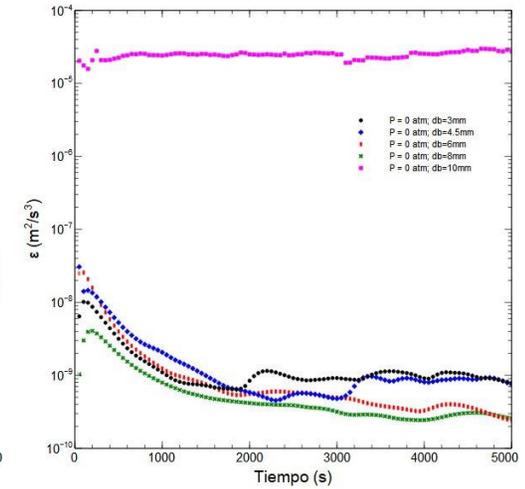
Punto de evaluación 2



Punto de evaluación 5

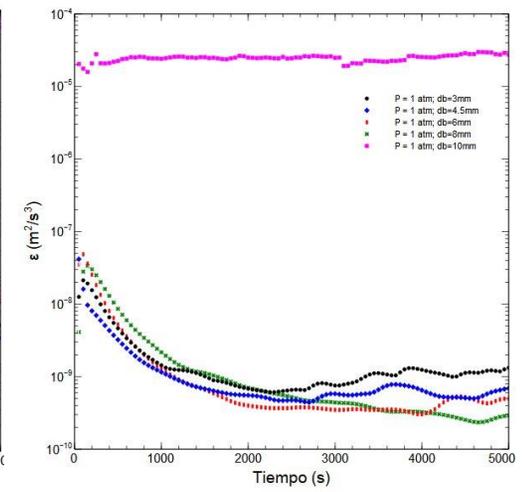
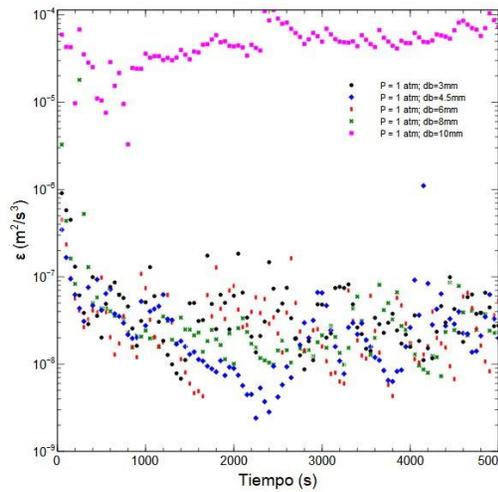
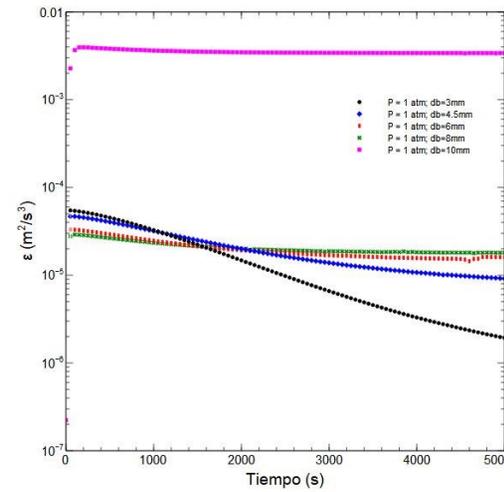


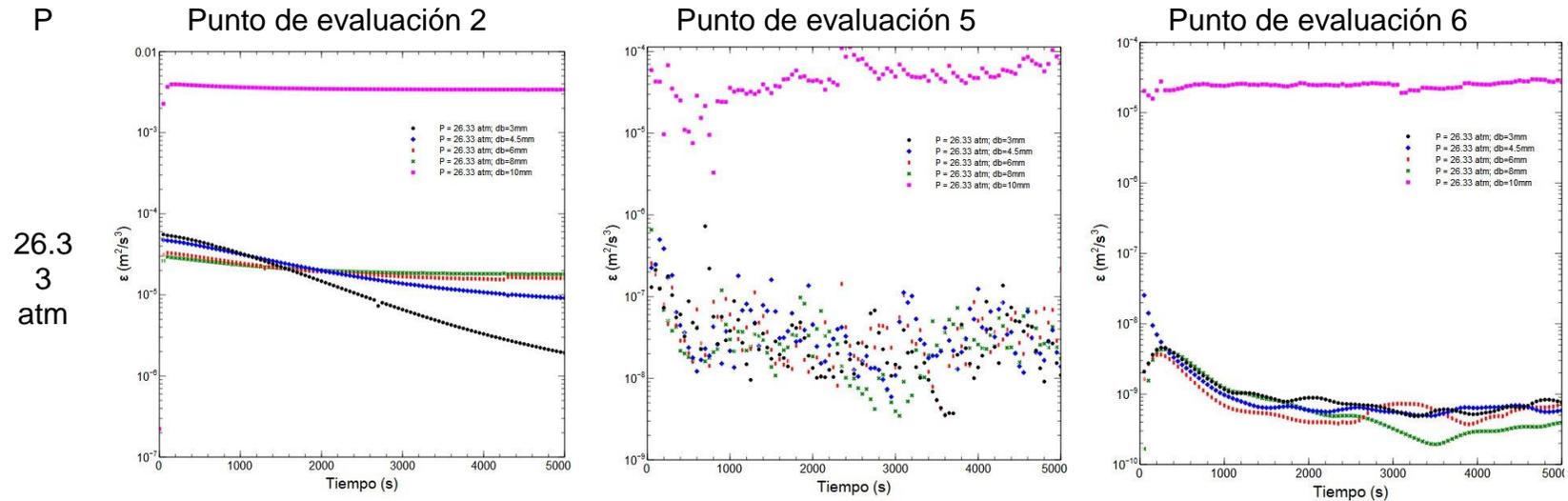
Punto de evaluación 6



0  
atm

1  
atm





**Figura 3.14.** Tasa de disipación de la energía ( $\epsilon$ ) para diferentes diámetros de burbuja y presión de trabajo.

Las fluctuaciones en la velocidad en el punto de evaluación 5 pueden no ser capturadas de manera precisa debido a las limitaciones del modelo, generando así un comportamiento fluctuante en la tasa de disipación de energía ( $\epsilon$ ). Además, en  $d_b = 3$  mm hay una disminución rápida de  $\epsilon$  comparado con el resto de los diámetros que presentan una disminución más lenta llegando a mantenerse constante en algunos casos, principalmente en el punto de evaluación 2.

Este comportamiento puede ser beneficioso en términos de mantener una mezcla constante y una transferencia de masa predecible en la columna. En el punto de evaluación 6 mantiene el mismo comportamiento en todos los casos, teniendo la mayor tasa de disipación en  $d_b = 10$  mm.

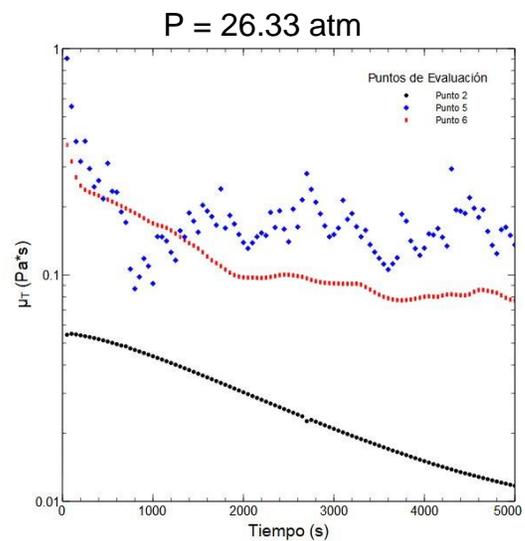
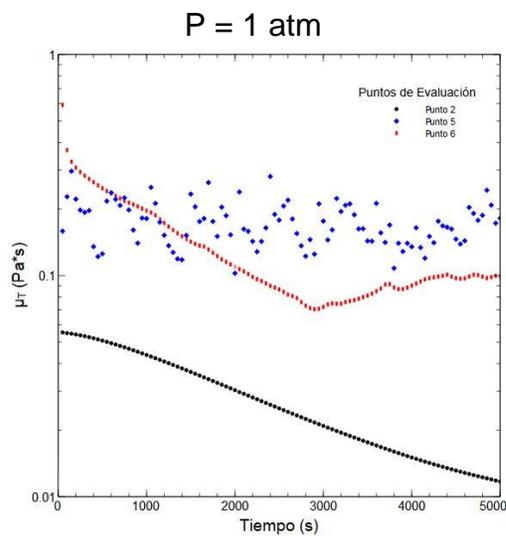
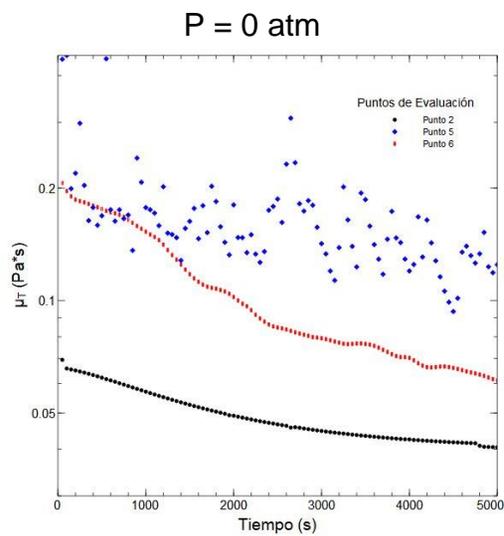
### 3.4.5. Viscosidad dinámica turbulenta ( $\mu_T$ )

La viscosidad turbulenta o viscosidad de remolino ( $\mu_T$ ), en contraste con la viscosidad molecular ( $\mu$ ), no es una propiedad del fluido, pero depende fuertemente del estado local de la turbulencia y puede variar significativamente desde un punto a otro en el fluido. En la Figura 3.15 se muestra la viscosidad turbulenta para diferentes diámetros de burbuja y diferentes presiones. En todos los casos analizados, excepto para  $d_b = 6$  mm ;  $P = 1$  atm y  $d_b = 8$  mm ;  $P = 0$  atm, la viscosidad turbulenta aumenta hacia la superficie de la columna. En el caso de  $d_b = 6$  mm y  $P = 1$  atm la viscosidad va de  $3.32 \times 10^{-5}$  a  $4.47 \times 10^{-7}$  Pa.s y en el caso de  $d_b = 8$  mm y  $P = 0$  atm la viscosidad va de  $2.95 \times 10^{-5}$  a  $6.56 \times 10^{-7}$  Pa.s. Esto significa que el fluido se vuelve más viscoso o resistente al movimiento en la parte superior de la columna en comparación con la parte inferior. Esta variación puede deberse a factores como la concentración de burbujas o la interacción entre las burbujas y el líquido a lo largo de la columna.

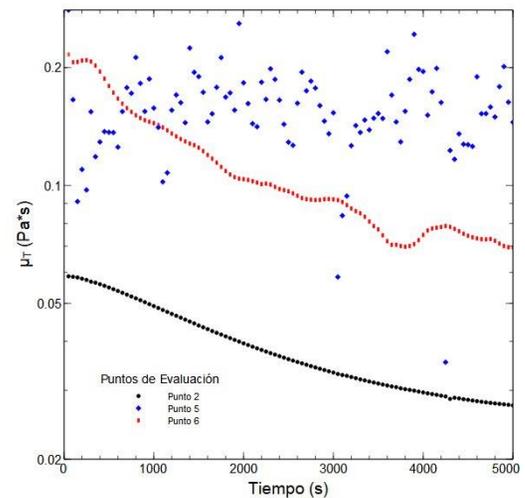
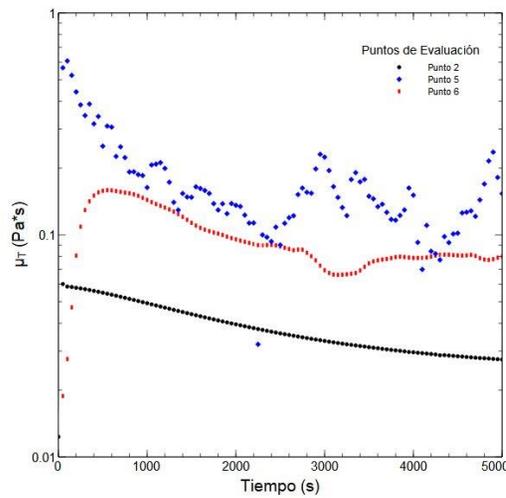
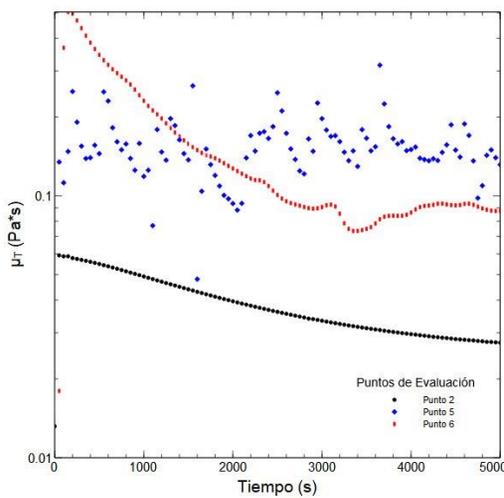
En la Figura 3.16, se aprecia que la viscosidad turbulenta disminuye a medida que el diámetro de burbuja disminuye, con excepción de los casos mencionados anteriormente. Para  $P = 0$  atm, la viscosidad turbulenta más baja ( $1.83 \times 10^{-15}$  Pa.s) se registra para  $d_b = 8$  mm, mientras que la más alta ( $3.47 \times 10^{-3}$  Pa.s) se observa para  $d_b = 10$  mm. En el caso de  $P = 1$  atm, la viscosidad turbulenta más baja ( $1.83 \times 10^{-15}$  Pa.s) se presenta para  $d_b = 6$  mm, mientras que la más alta ( $1.94 \times 10^{-3}$  Pa.s) se observa para  $d_b = 10$  mm. Esto sugiere que las burbujas más pequeñas tienden a reducir la viscosidad turbulenta del sistema. Además, en ambas figuras, los resultados obtenidos para el punto de evaluación 5 muestran un comportamiento inestable, siendo característico de las variables de turbulencia en las zonas cercanas a la pared determinadas por el modelo  $\kappa - \epsilon$ .

db

3mm

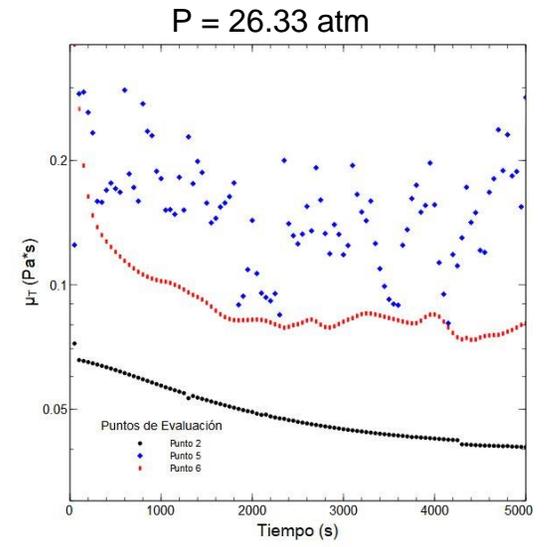
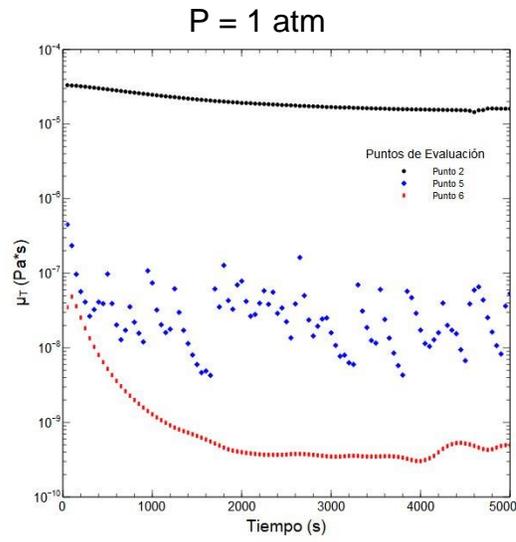
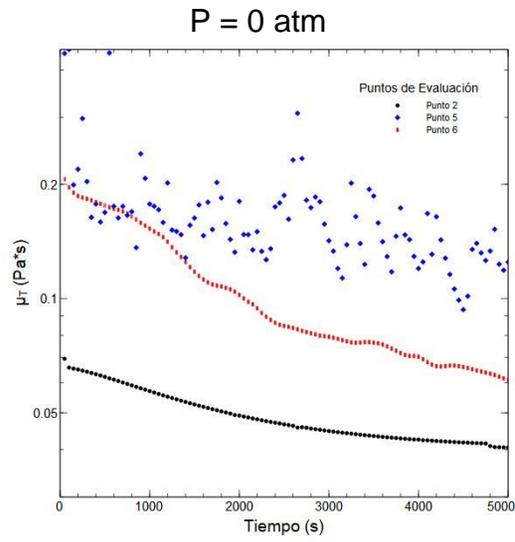


4.5mm

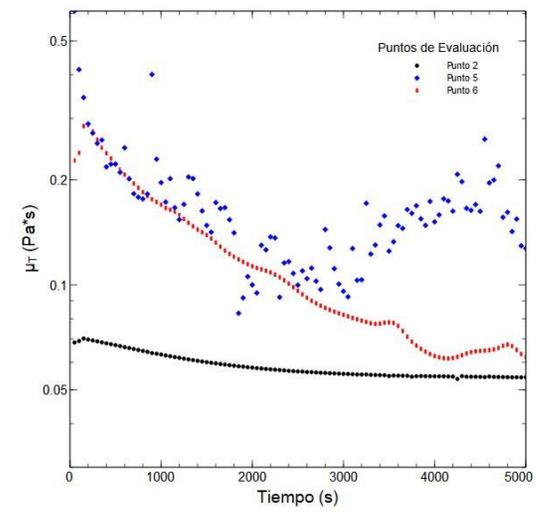
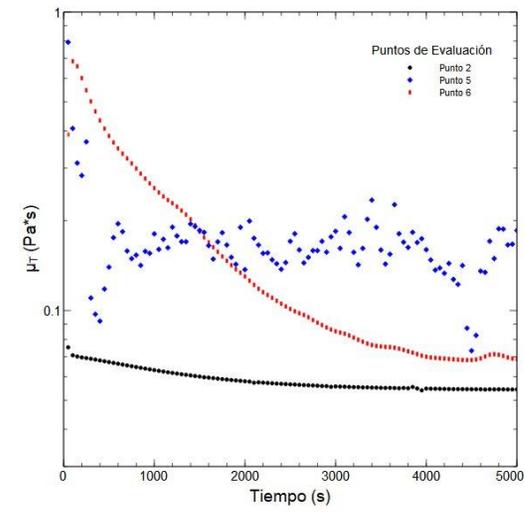
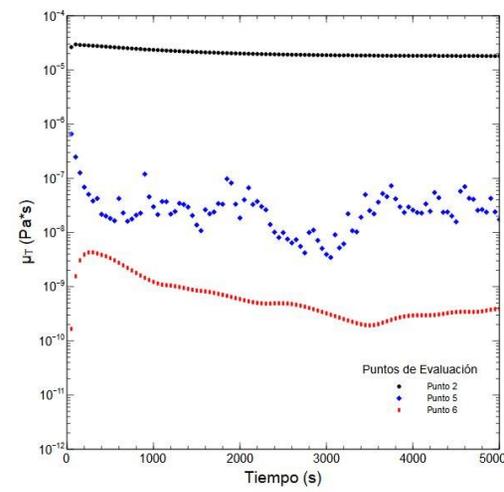


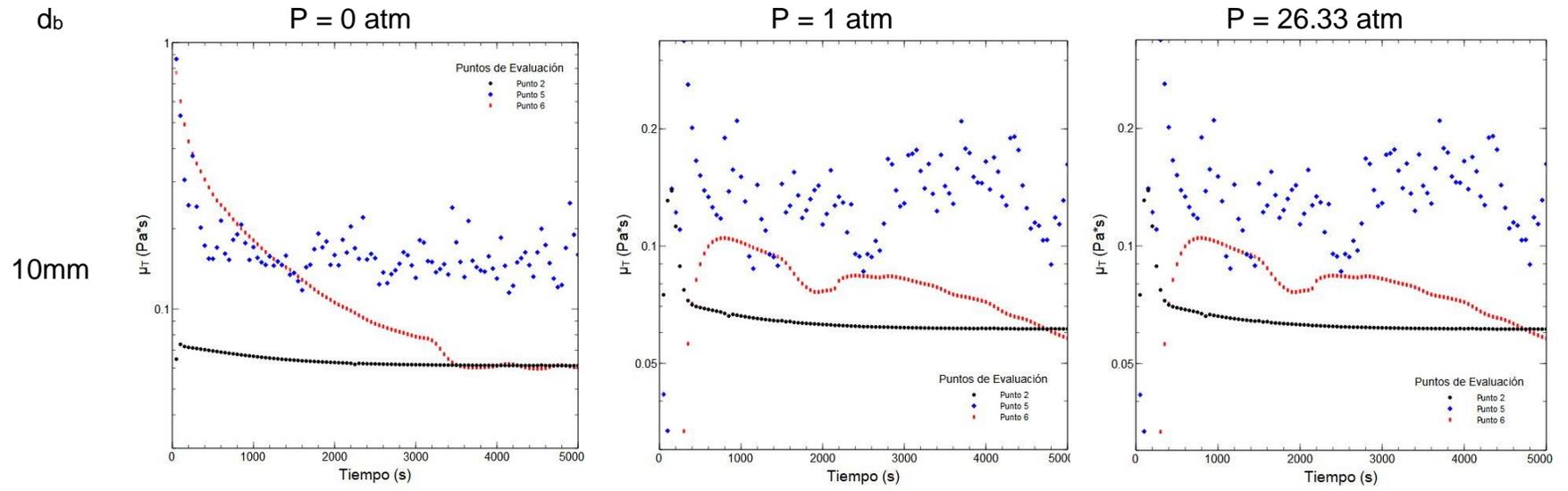
db

6mm



8mm

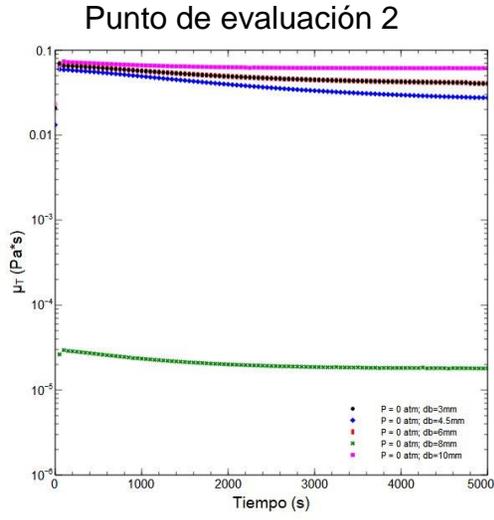




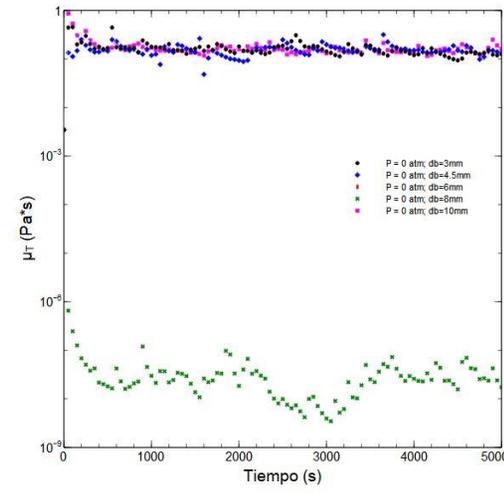
**Figura 3.15.** Viscosidad dinámica turbulenta para diferentes diámetros de burbuja en una columna.

P

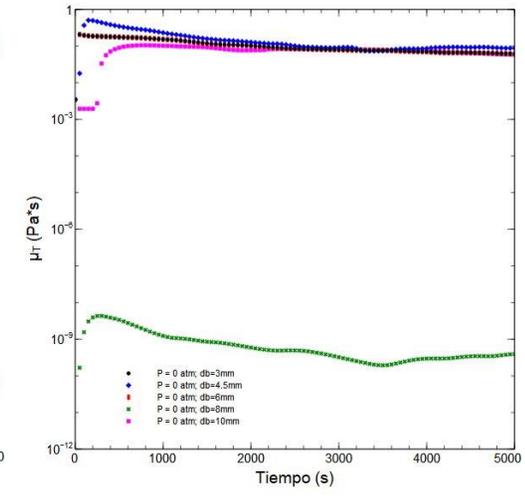
0 atm



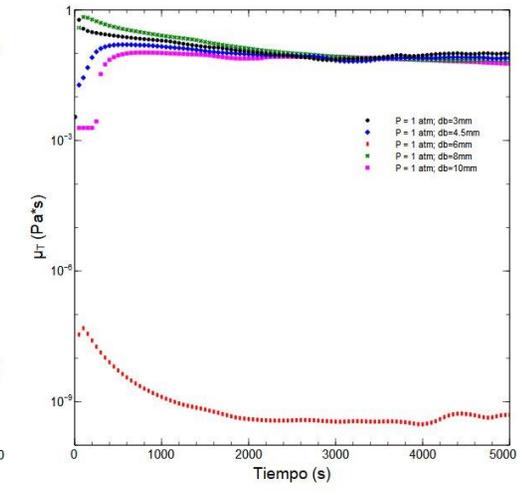
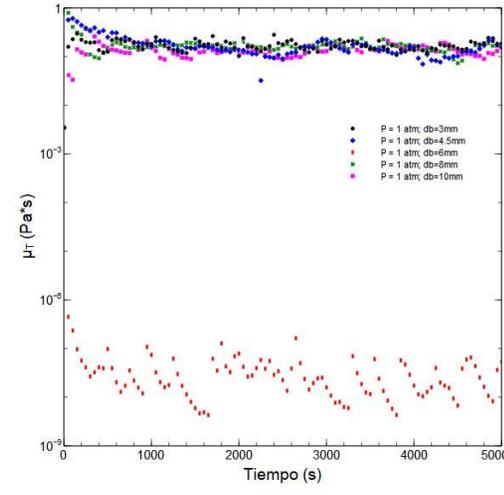
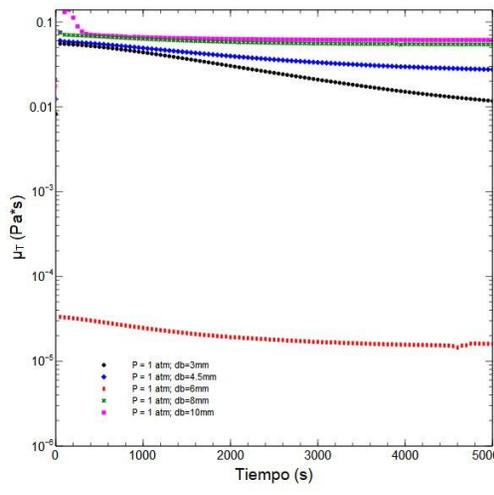
### Punto de evaluación 5

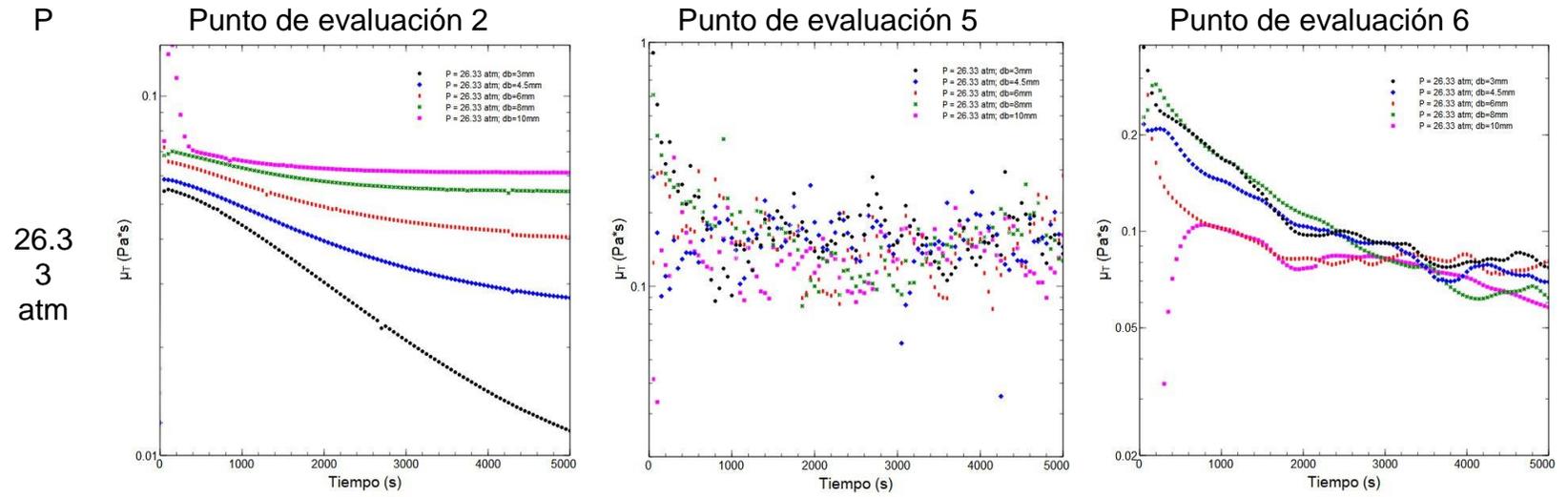


### Punto de evaluación 6

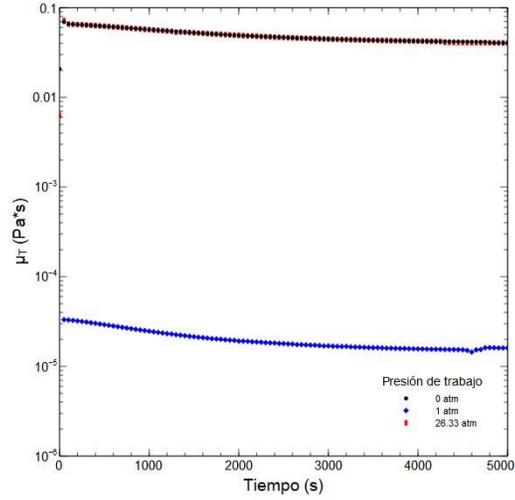
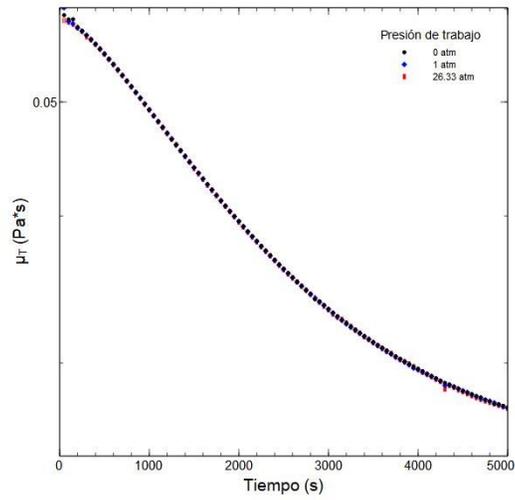
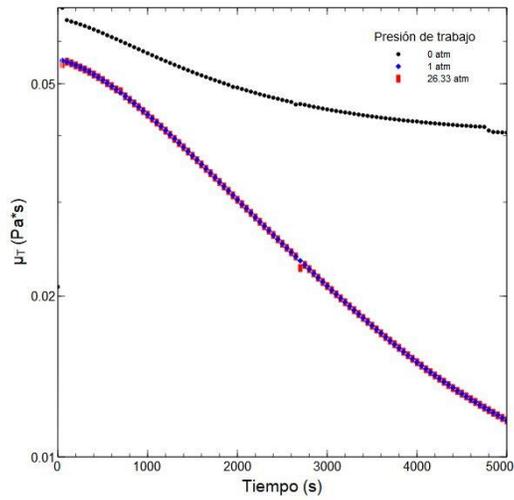


1 atm





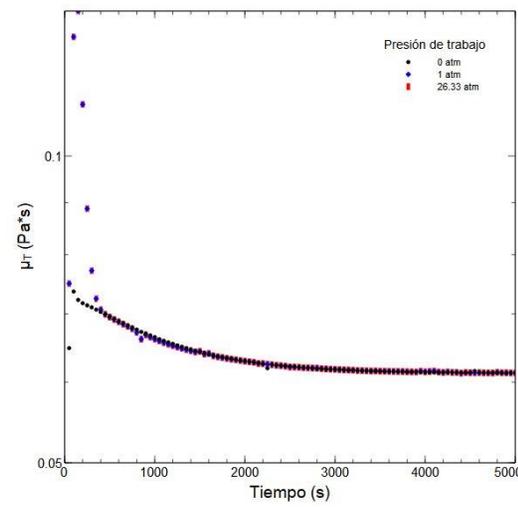
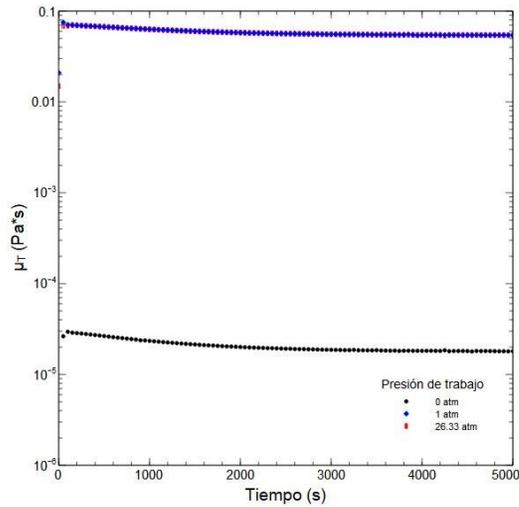
**Figura 3.16.** Viscosidad dinámica turbulenta en los tres puntos de evaluación para diferentes presiones de operación.



$d_b = 3 \text{ mm}$

$d_b = 4.5 \text{ mm}$

$d_b = 6 \text{ mm}$



$d_b = 8 \text{ mm}$

$d_b = 10 \text{ mm}$

**Figura 3.17.** Viscosidad dinámica turbulenta para diferentes presiones en el punto de evaluación 2.

En la Figura 3.17, se analiza cómo la presión afecta la viscosidad turbulenta ( $\mu_T$ ) para distintos diámetros de burbuja. Se evidencia que, para  $d_b = 4.5$  mm y 10 mm, la presión no incide en  $\mu_T$ , ya que se obtienen valores constantes para todas las presiones evaluadas ( $\mu_T(P=0\text{atm}) = \mu_T(P=1\text{atm}) = \mu_T(P=26.33\text{atm})$ ). No obstante, esta tendencia no se observa de la misma manera para los otros diámetros de burbuja. En el caso de  $d_b = 3$  mm,  $\mu_T$  disminuye con el aumento de la presión, manteniéndose constante para  $P = 1$  y  $26.33$  atm ( $\mu_T(d_b=3\text{mm}, P=0\text{atm}) > \mu_T(d_b=3\text{mm}, P=1\text{atm}) = \mu_T(d_b=3\text{mm}, P=26.33\text{atm})$ ). Para  $d_b = 6$  mm, los resultados no siguen un patrón claro, ya que son iguales para  $P = 0$  y  $26.33$  atm, siendo ambos superiores a los obtenidos con  $P = 1$  atm ( $\mu_T(d_b=6\text{mm}, P=0\text{atm}) = \mu_T(d_b=6\text{mm}, P=26.33\text{atm}) > \mu_T(d_b=6\text{mm}, P=1\text{atm})$ ). Finalmente, para  $d_b = 8$  mm,  $\mu_T$  aumenta a medida que se incrementa la presión ( $\mu_T(d_b=8\text{mm}, P=0) < \mu_T(d_b=8\text{mm}, P=1) < \mu_T(d_b=8\text{mm}, P=26.33)$ ). Los valores específicos de  $\mu_T$  para cada caso se detallan en la Figura 3.16.

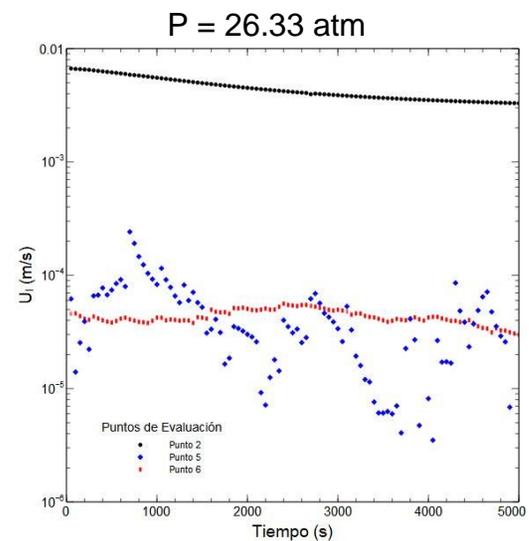
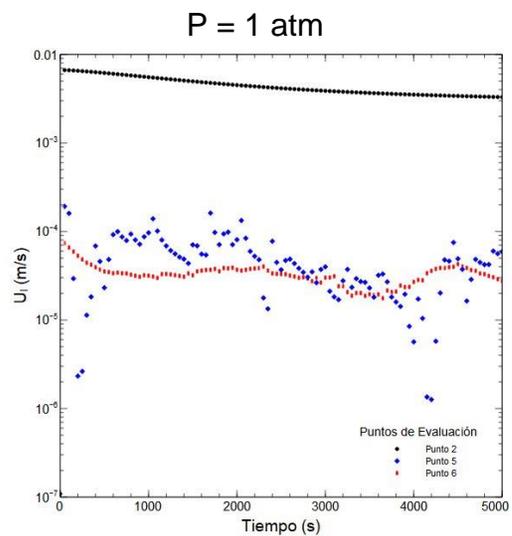
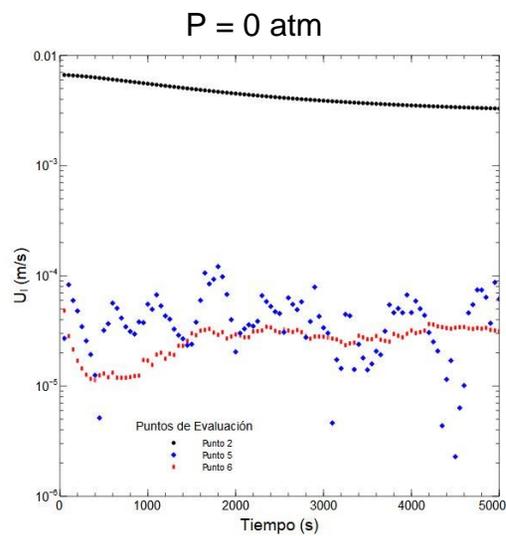
De manera general, en todos los casos analizados, a medida que pasa el tiempo  $\mu_T \rightarrow 0$ . Esto sugiere que, a lo largo del tiempo, el efecto de la turbulencia en el sistema se vuelve cada vez menos significativo, lo que puede indicar una tendencia hacia una mayor estabilidad en el flujo.

#### **3.4.6. Magnitud de la velocidad del líquido ( $U_i$ )**

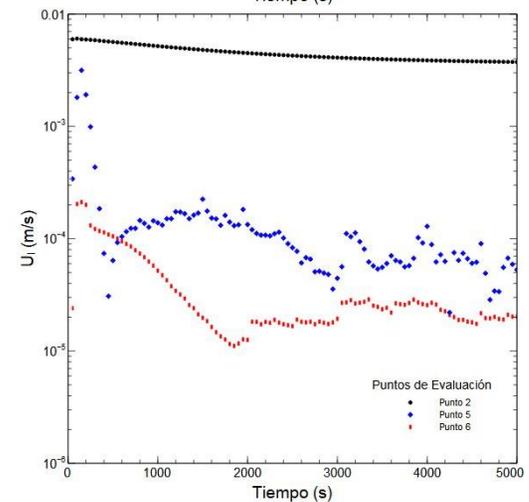
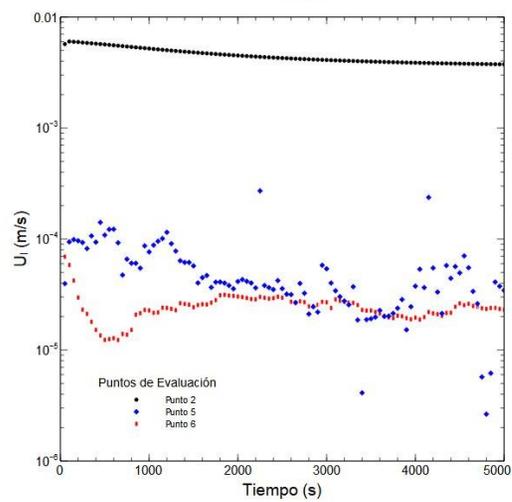
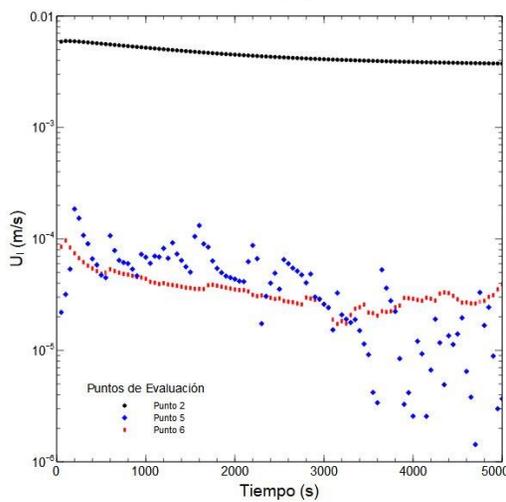
La magnitud de la velocidad del líquido representa la velocidad total del fluido en una determinada región del dominio de simulación. En Comsol, este valor se calcula como la norma (o módulo) del vector de velocidad en cada punto del dominio. Es decir, si tienes las componentes de velocidad  $u$ ,  $v$ , y  $w$  en las direcciones  $x$ ,  $y$ , y  $z$ , respectivamente. Esto proporciona una medida única que representa la velocidad total del líquido, considerando sus componentes en todas las direcciones. Este cálculo se realiza en cada punto de la malla del dominio de simulación, lo que permite visualizar la distribución de la velocidad en todo el sistema y analizar su comportamiento en diferentes condiciones y geometrías. En la Figura 3.18 se muestran los perfiles de velocidades de la fase líquida para todos los diámetros de burbujas en los diferentes puntos de evaluación.

db

3mm



4.5mm



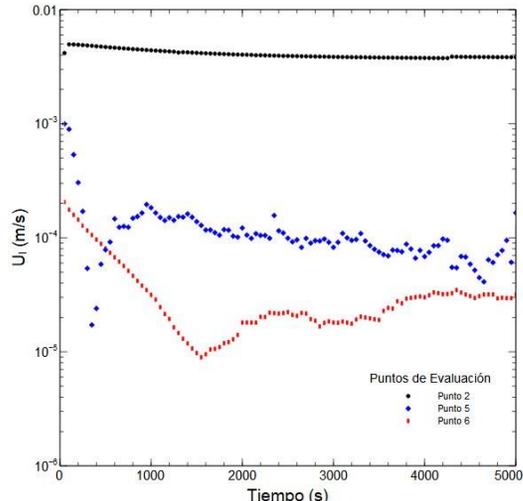
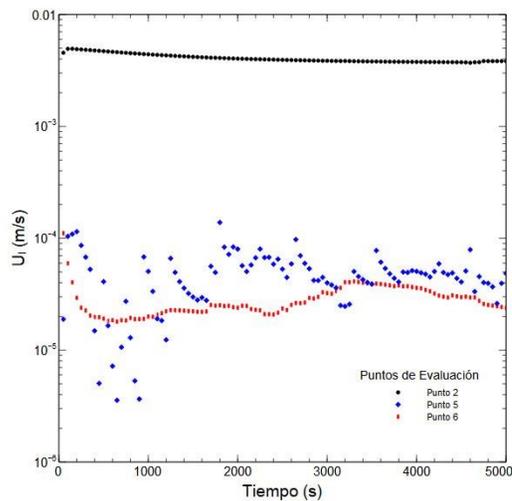
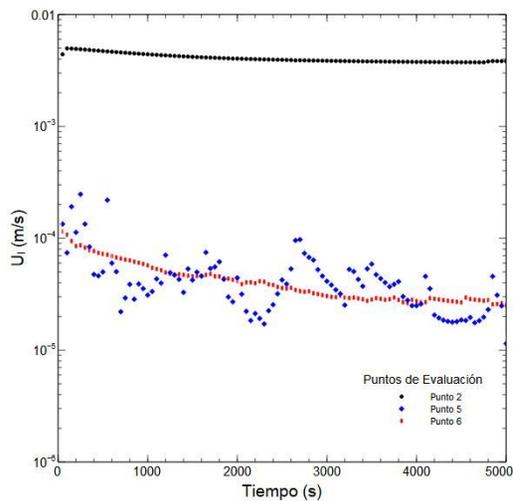
db

P = 0 atm

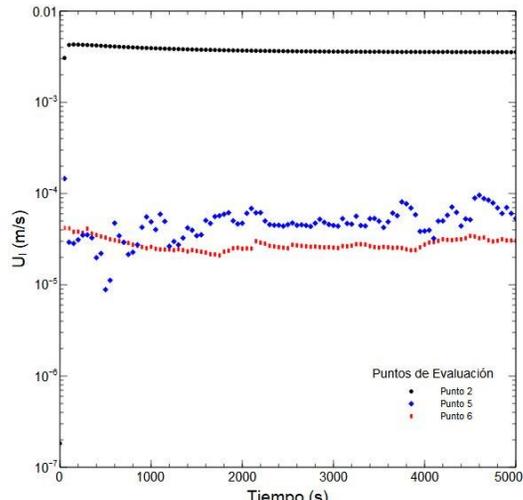
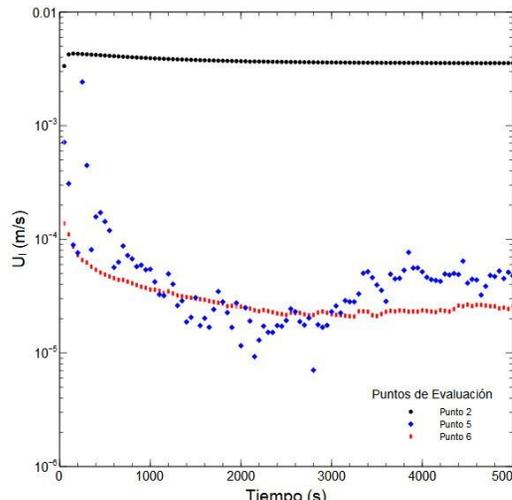
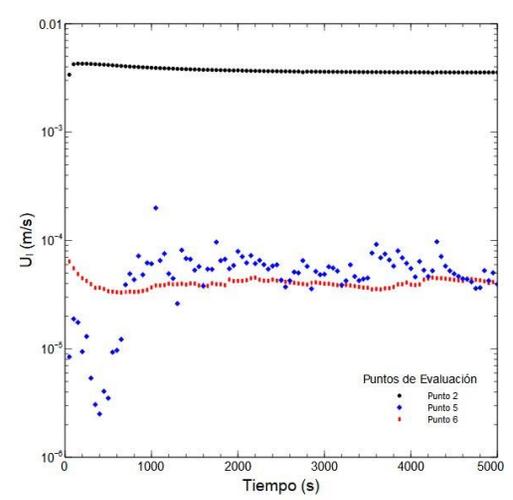
P = 1 atm

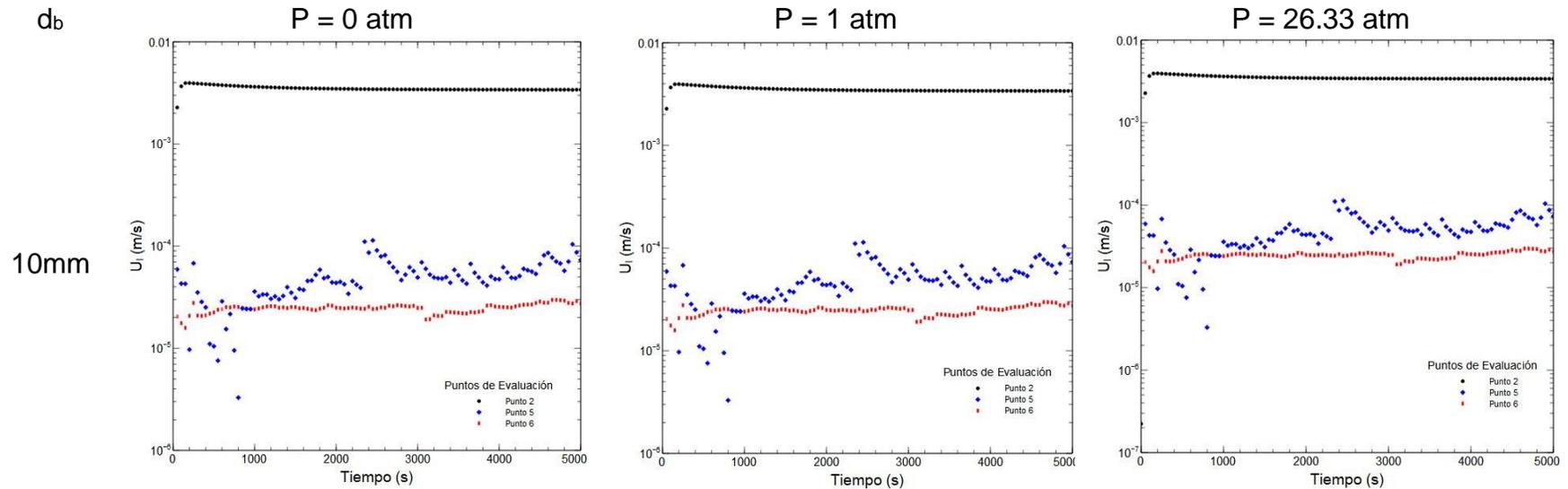
P = 26.33 atm

6mm



8mm



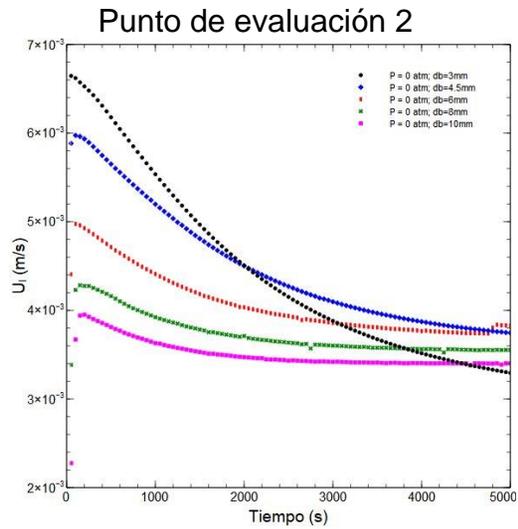


**Figura 3.18.** Magnitud de la velocidad de la fase líquida para diferentes diámetros de burbuja.

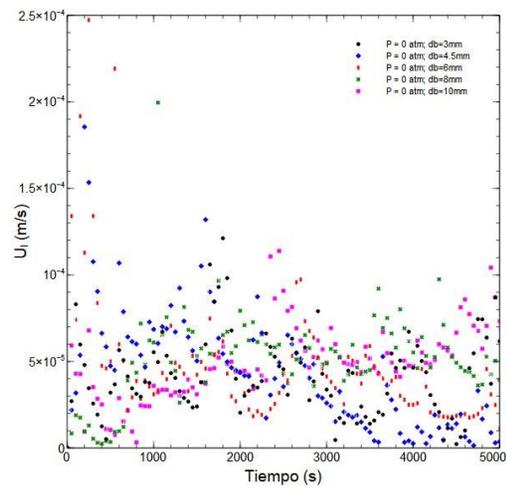
En todos los casos se observa que a la entrada de la columna la velocidad del líquido es significativamente mayor que en el resto de los puntos. En el caso de  $d_b = 3\text{mm}$  la velocidad del líquido va de 0.0066 a  $2.71 \times 10^{-5}$  m/s, para  $d_b = 4.5\text{mm}$  va de 0.0059 a  $2.19 \times 10^{-5}$  m/s, para  $d_b = 6\text{mm}$  va de 0.0044 a  $1.34 \times 10^{-4}$  m/s, para  $d_b = 8\text{mm}$  va de 0.0034 a  $8.45 \times 10^{-6}$  m/s y para  $d_b = 10\text{mm}$  va de 0.0023 a  $5.92 \times 10^{-5}$  m/s. Esto significa que a medida que la burbuja avanza en el líquido la acumulación de esfuerzos cortantes en la dirección de ascenso de las burbujas de gas provoca la pérdida de energía. Esto es coherente con lo que se espera, ya que la velocidad suele ser mayor en las regiones donde se inyecta el fluido o donde se generan las burbujas. Esta alta velocidad inicial se debe a la entrada de las burbujas y la agitación en esta zona. También se observa que en el resto de los puntos de evaluación la velocidad del líquido es prácticamente igual y que solo hay unos picos de máxima velocidad en los primeros instantes de tiempo. En la Figura 3.19 se presenta la magnitud de la velocidad del líquido en función del diámetro de entrada del gas para diferentes valores de la presión de operación.

P

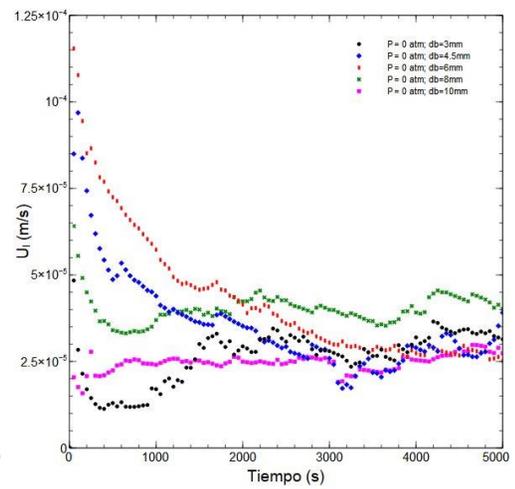
0 atm



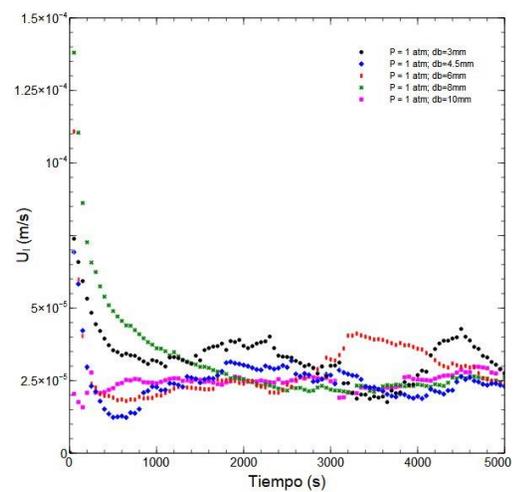
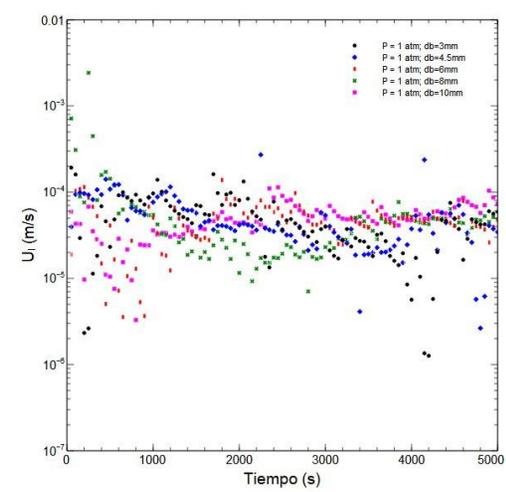
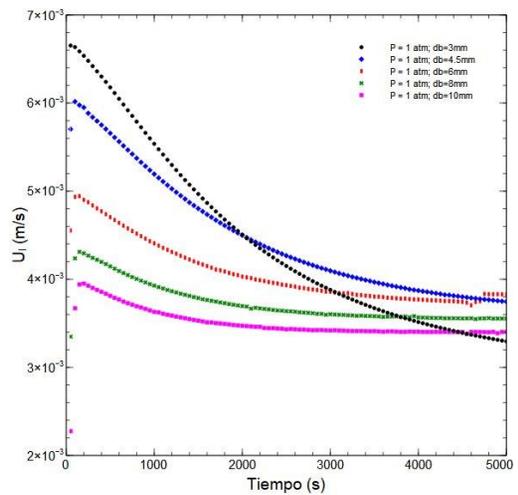
### Punto de evaluación 5

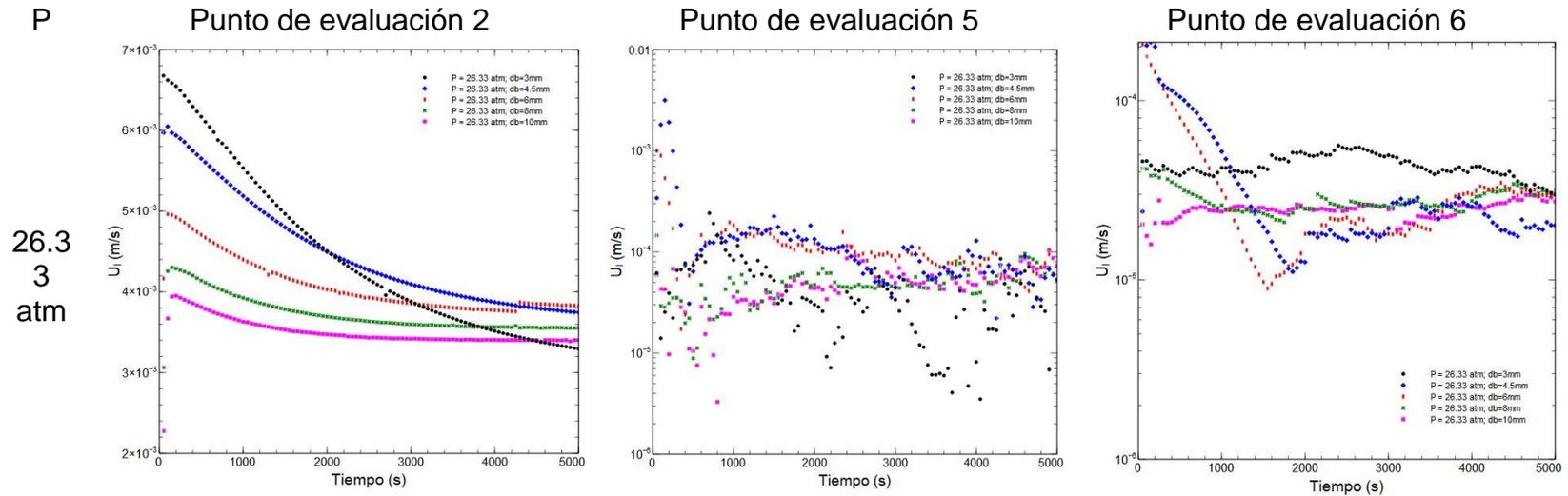


### Punto de evaluación 6



1 atm

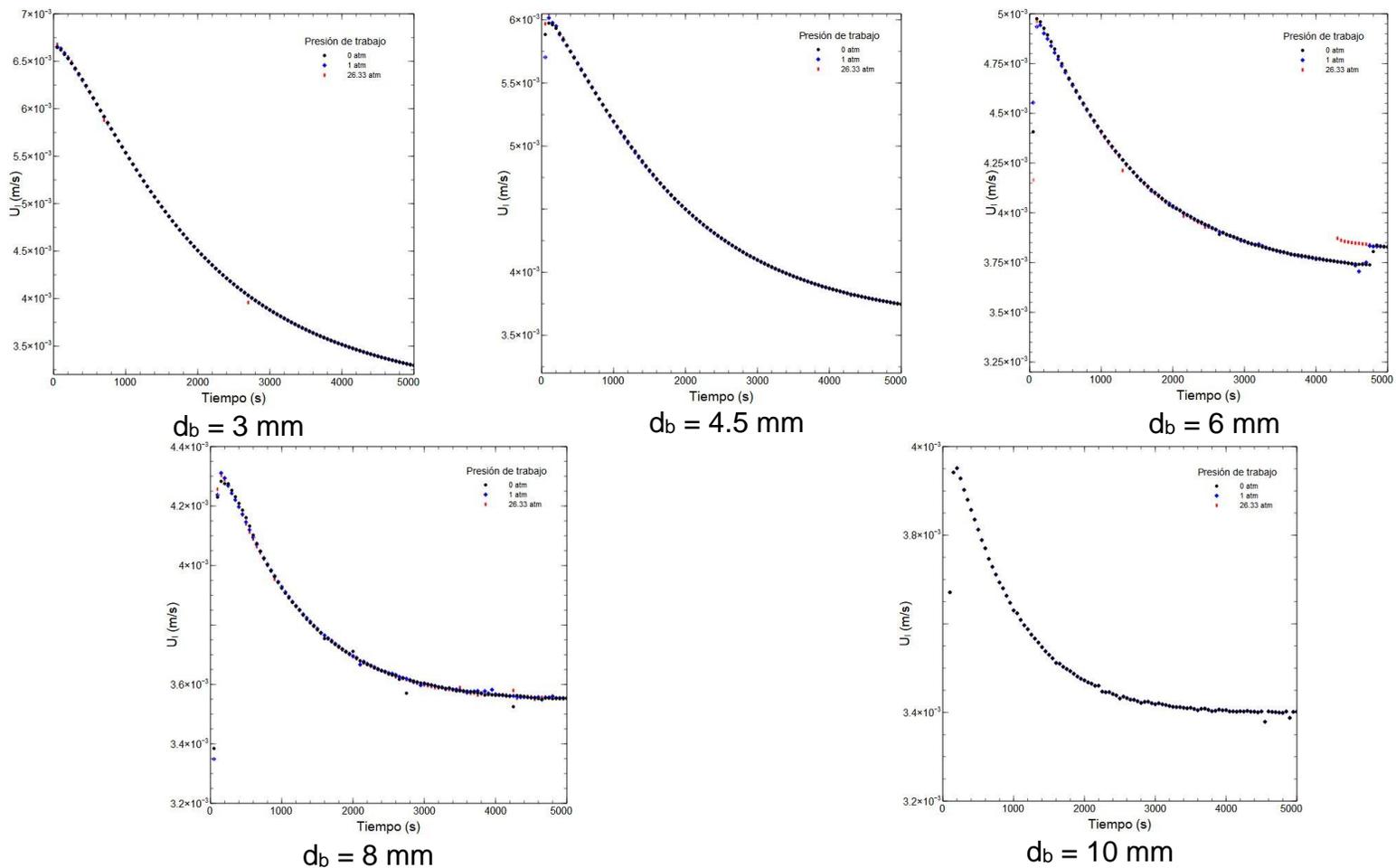




**Figura 3.19.** Magnitud de la velocidad del líquido en los tres puntos de evaluación para diferentes presiones.

En todos los casos se observa que a medida que aumenta el diámetro de la burbuja disminuye la velocidad del líquido,  $U_l(d_b=3\text{mm}) = 0.0066 > U_l(d_b=4.5\text{mm}) = 0.0059 > U_l(d_b=6\text{mm}) = 0.0044 > U_l(d_b=8\text{mm}) = 0.0034 > U_l(d_b=10\text{mm}) = 0.0023 \text{ m/s}$ . Esto es consistente con las ecuaciones que gobiernan el proceso, pues los esfuerzos cortantes tienen un efecto mayor en las burbujas más pequeñas, que hacen que asciendan más lento o cambien de dirección debido a pérdidas de energía. Sin embargo, tienden a fragmentar a las burbujas más grandes generando una distribución más dispersa de tamaños de burbujas en el sistema. En el caso del  $d_b = 3 \text{ mm}$  se observa una disminución más rápida de la velocidad del líquido que en el resto de los diámetros de burbuja, llegando incluso a valores menores que para  $d_b = 10 \text{ mm}$ . También se observa que en todos los casos los valores de la velocidad del líquido en el punto de evaluación 5 presentan un comportamiento desordenado al igual que en el punto de evaluación 6, aunque este último es menos desordenado. Teniendo en cuenta esto, se realizó una comparación de la velocidad del líquido en el punto de

evaluación 2 que se muestra en la Figura 3.20. Los resultados muestran que, en todos los casos, la velocidad del líquido es prácticamente la misma en ese punto, independientemente del diámetro de burbuja o la presión analizada.



**Figura 3.20.** Magnitud de la velocidad del líquido en el punto de evaluación 2 para diferentes presiones.

### 3.4.7. Transferencia de masa del gas a líquido ( $m_{gl}$ )

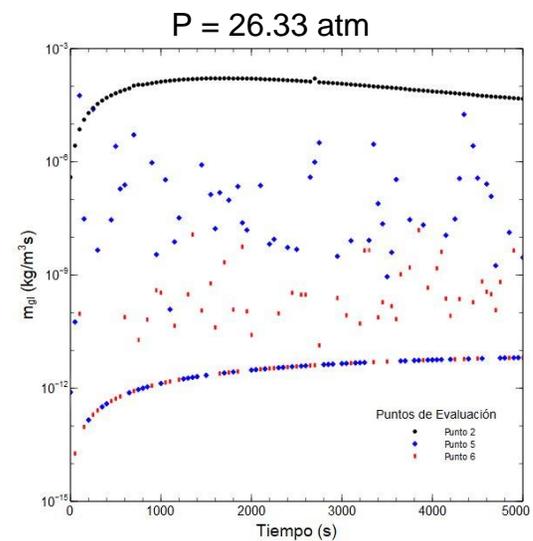
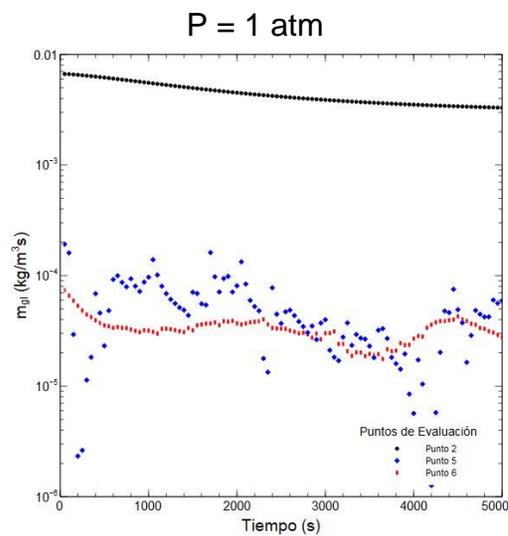
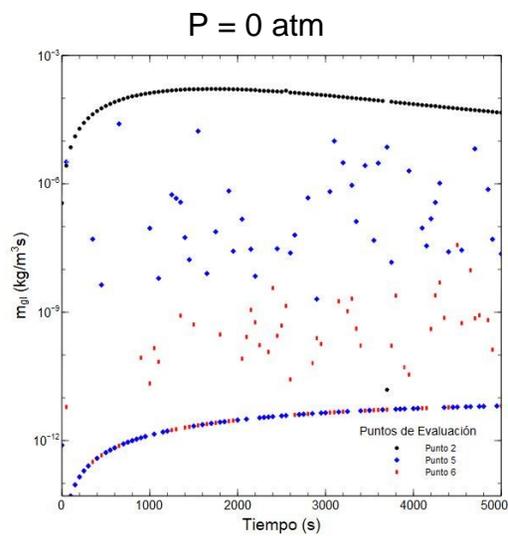
El comportamiento de la transferencia de masa en una columna de burbujeo con reacción química puede ser bastante complejo y dependerá de varios factores, incluyendo la cinética de la reacción, las propiedades de los fluidos involucrados y el diseño de la columna. Sin embargo, en términos generales, hay algunos patrones de comportamiento que son deseables o se buscan en este tipo de sistemas: implica una mezcla eficiente, una alta tasa de difusión, una transferencia de calor adecuada y la minimización de las resistencias al transporte. Lograr estos objetivos depende del diseño adecuado de la columna, la selección de condiciones de operación apropiadas y la comprensión de la cinética de la reacción química involucrada

En la Figura 3.21 se muestra la transferencia de masa del gas al líquido para los diferentes diámetros de burbujas y diferentes presiones. En todos los casos la mayor transferencia de masa ocurre en el punto 2 de evaluación, es decir, a la entrada de la columna,  $m_{gl}(d_b = 3\text{mm})=2.65 \times 10^{-6} \text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$ ,  $m_{gl}(d_b = 4.5\text{mm})=1.9 \times 10^{-6} \text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$ ,  $m_{gl}(d_b = 6\text{mm})=0.0044 \text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$ ,  $m_{gl}(d_b = 8\text{mm})=8.99 \times 10^{-7} \text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$  y  $m_{gl}(d_b = 10\text{mm})=8.28 \times 10^{-5} \text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$ . Esto es coherente con lo esperado, ya que a la entrada de la columna es donde se inyectan las burbujas y donde hay una mayor interacción entre las burbujas de gas y el líquido, lo que promueve una mayor transferencia de masa inicial.

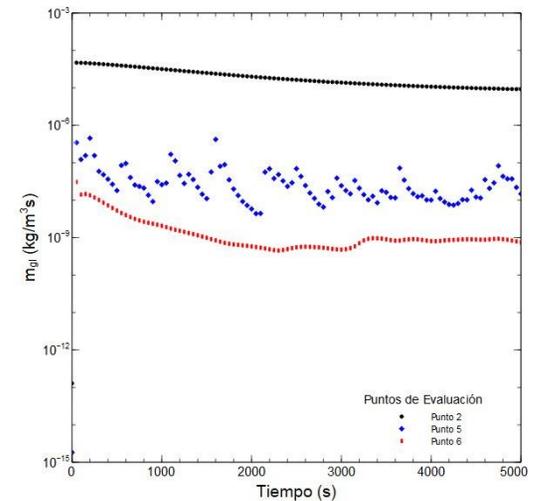
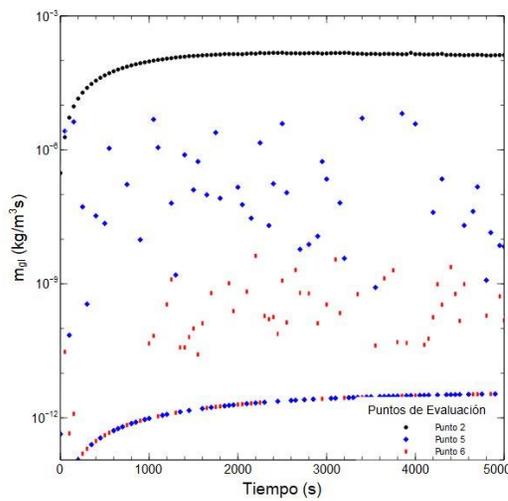
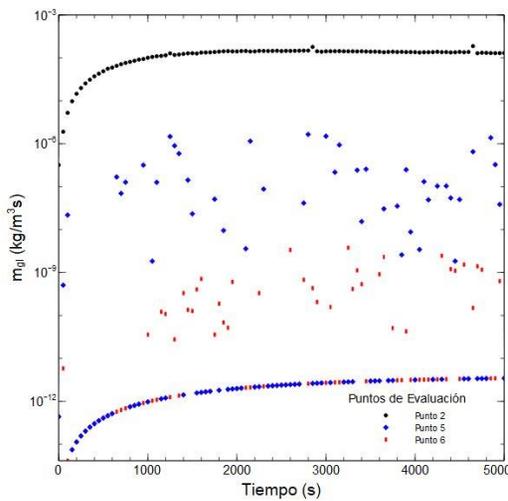
También se observa que en algunos casos como son:  $d_b = 3 \text{ mm}$  y  $P = 1 \text{ atm}$ ,  $d_b = 4.5 \text{ mm}$  y  $P = 26.33 \text{ atm}$ ,  $d_b = 6 \text{ mm}$  y  $P = 0$  y  $26.33 \text{ atm}$ ,  $d_b = 8 \text{ mm}$  y  $P = 1 \text{ atm}$  y  $d_b = 10 \text{ mm}$  y  $P = 26.33 \text{ atm}$ , la transferencia de masa en el punto 5 (salida de la columna) presenta un comportamiento errático. En estas condiciones específicas, la transferencia de masa en la salida de la columna es menos regular y puede estar sujeta a fluctuaciones impredecibles. No siendo así en el resto de los casos en los que la transferencia de masa tanto en el punto 5 como el 6 es prácticamente igual, llegando a solaparse entre ellos. En todos los casos en los que la transferencia de masa tiene un comportamiento regular se observa que en los primeros 50 s hay un aumento y luego se mantiene constante en el tiempo.

db

3mm

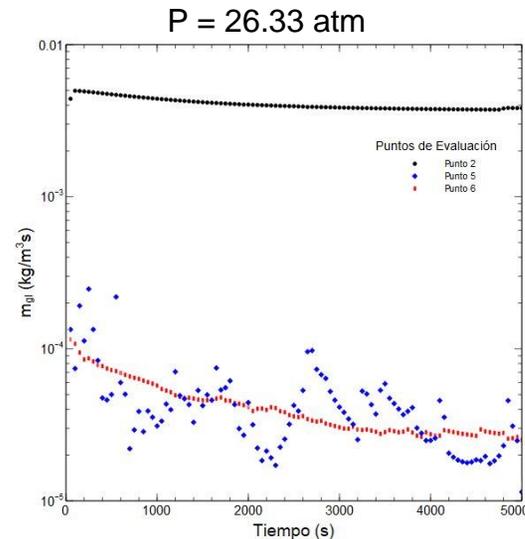
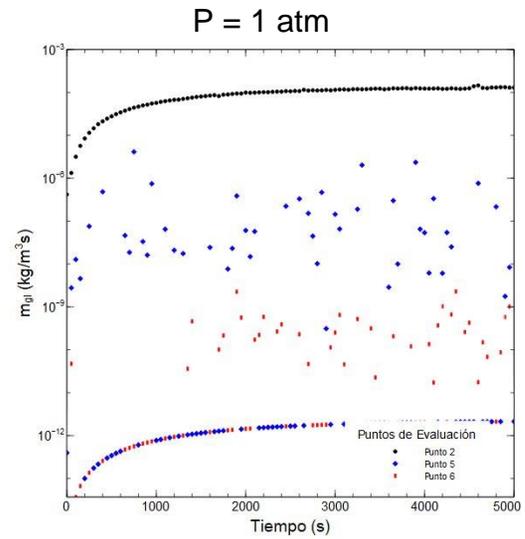
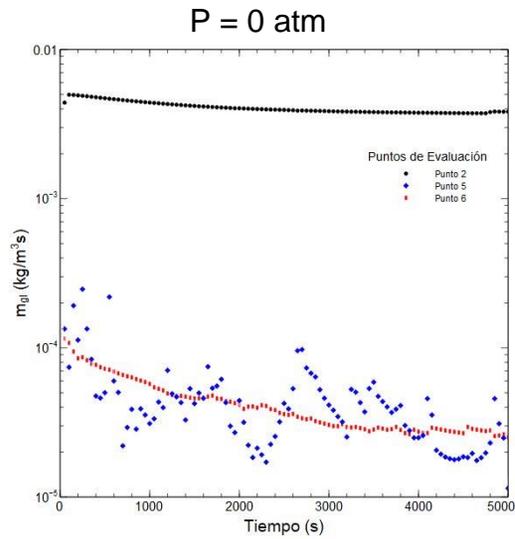


4.5mm

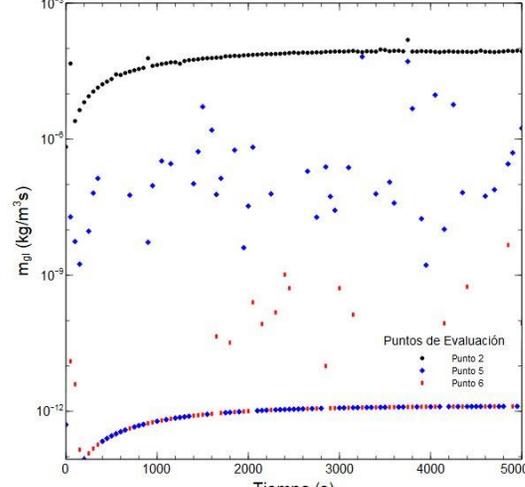
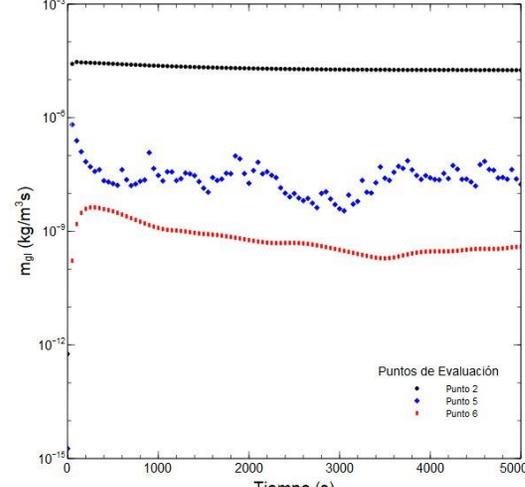
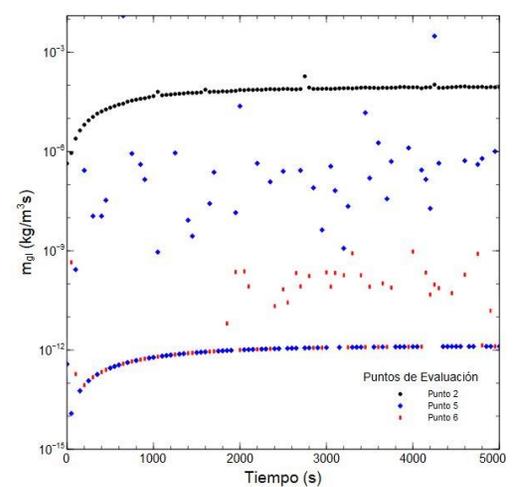


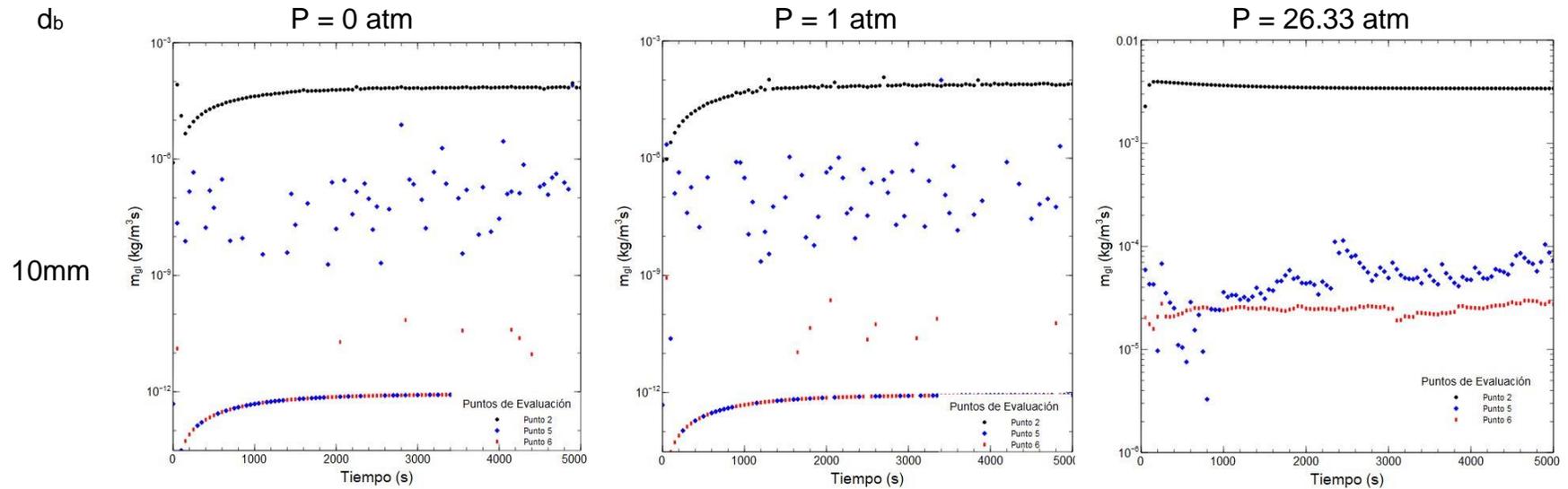
db

6mm



8mm



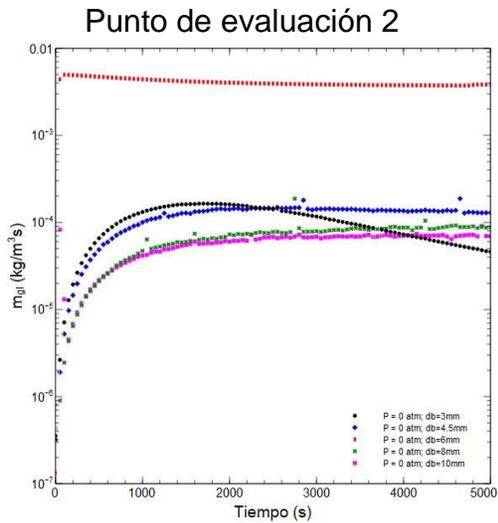


**Figura 3.21.** Transferencia de masa del gas al líquido para diferentes diámetros de burbuja y presiones en una columna.

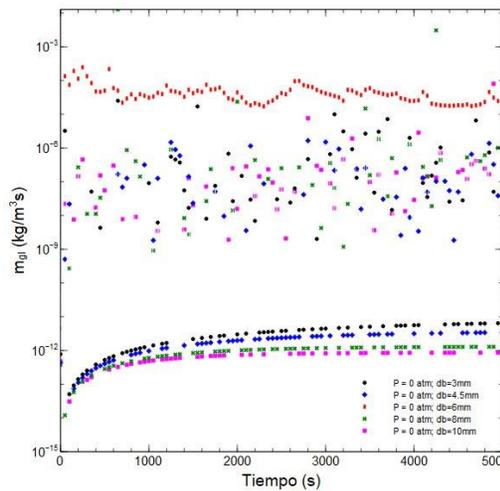
En la Figura 3.22 se muestra una comparación del efecto de la presión de operación de la columna para cada diámetro de burbuja analizado. En el caso de  $P = 0$  atm la mayor transferencia de masa se presenta para el  $d_b = 6$  mm seguido de 3 mm, 4.5 mm, 8 mm y 10 mm, tanto en el punto 2 de evaluación como en el punto 5 de evaluación. No siendo así para el punto 6 de evaluación (centro de la columna) donde la transferencia de masa en el diámetro de 10 mm es la segunda mayor. Para la  $P = 1$  atm, la mayor transferencia de masa se presenta en el  $d_b = 3$  mm en todos los puntos de evaluación. En la entrada de la columna el que menor transferencia de masa presenta es el  $d_b = 8$  mm, mientras que este diámetro es el segundo con mayor transferencia de masa en los otros puntos de evaluación.

P

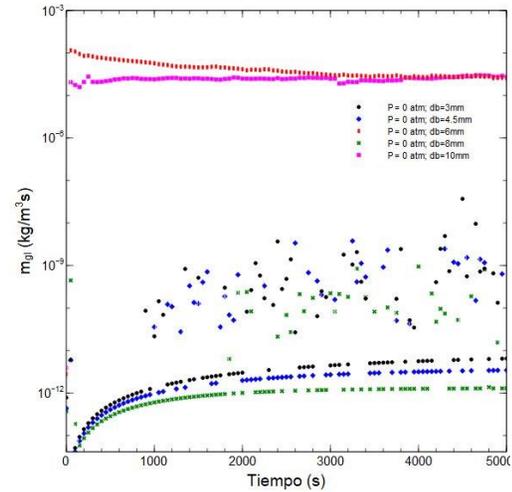
0 atm



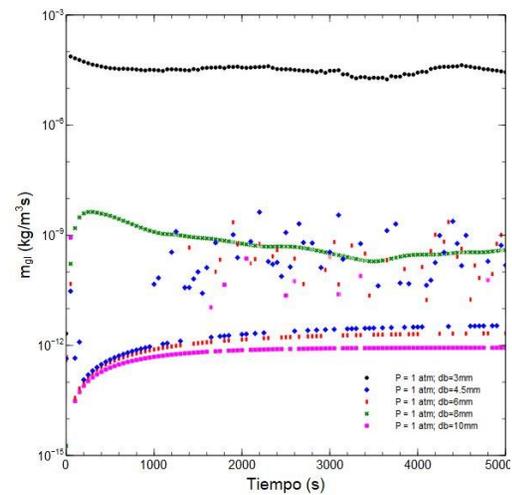
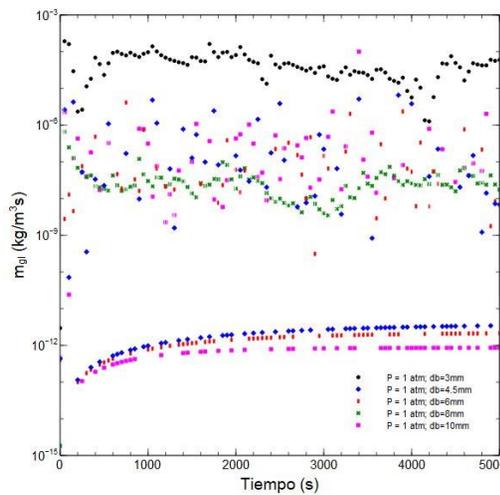
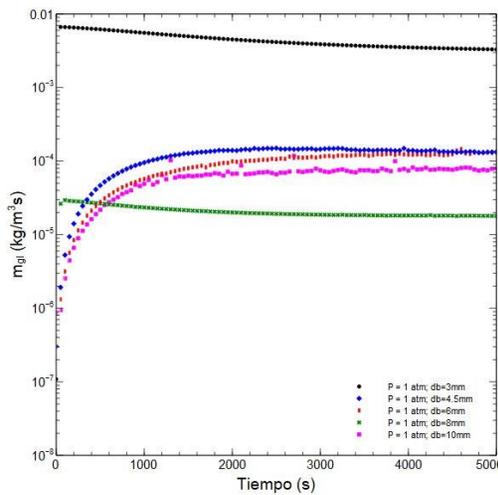
### Punto de evaluación 5

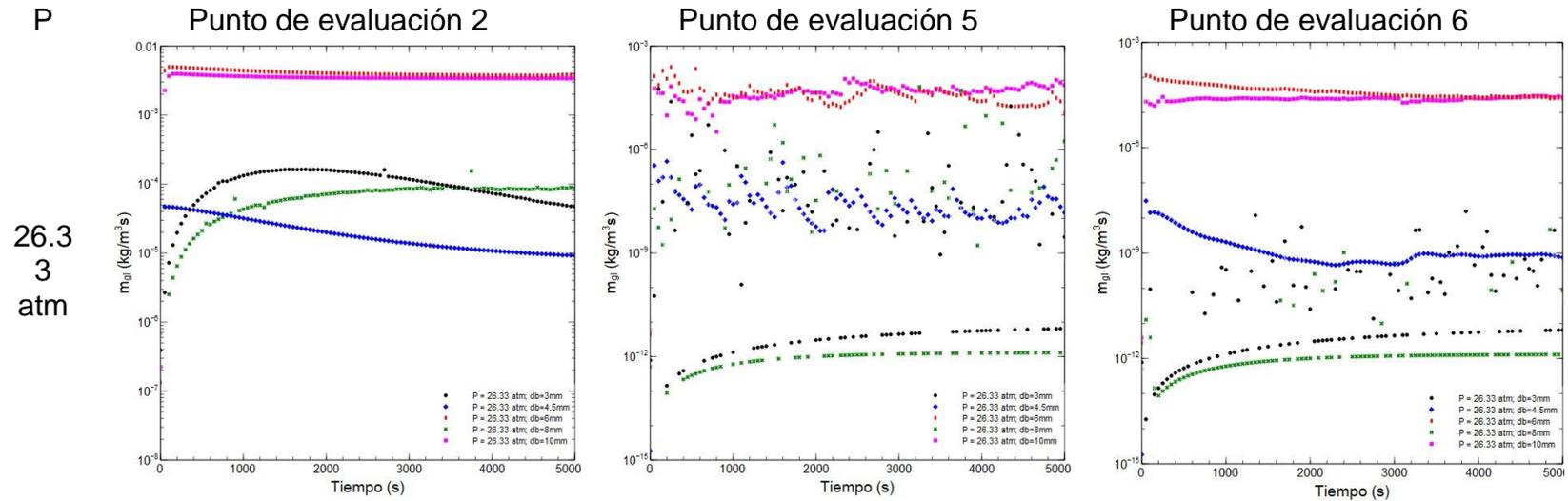


### Punto de evaluación 6



1 atm





**Figura 3.22.** Transferencia de masa del gas al líquido en los tres puntos de evaluación para diferentes presiones de operación.

En el caso de  $P = 26.33$  atm en los puntos de evaluación 5 y 6 la transferencia de masa disminuye según el siguiente orden de diámetros de burbujas: 6 mm, 10 mm, 4.5 mm, 3 mm y 8 mm. En la entrada de la columna la mayor transferencia es para el  $d_b = 6$  mm siguiendo el mismo orden que en los puntos anteriores con la diferencia de que la menor transferencia de masa es en el  $d_b = 4.5$  mm. En todas las presiones utilizadas se observa un comportamiento irregular en la transferencia de masa en el punto evaluación 5. Este comportamiento es más evidente en algunos diámetros para las diferentes presiones: para  $P = 0$  atm es en  $d_b = 6$  mm, para  $P = 1$  atm es en  $d_b = 3$  y 8 mm y para  $P = 26.33$  atm es en  $d_b = 4.5$  mm. En la figura anterior se pudo observar que en el punto 2 todos los valores de transferencia de masa para todos los diámetros de burbuja tenían un comportamiento regular. En tal sentido, se realiza una comparación del efecto de la presión en cada diámetro de burbuja y se muestra en la Figura 3.23.

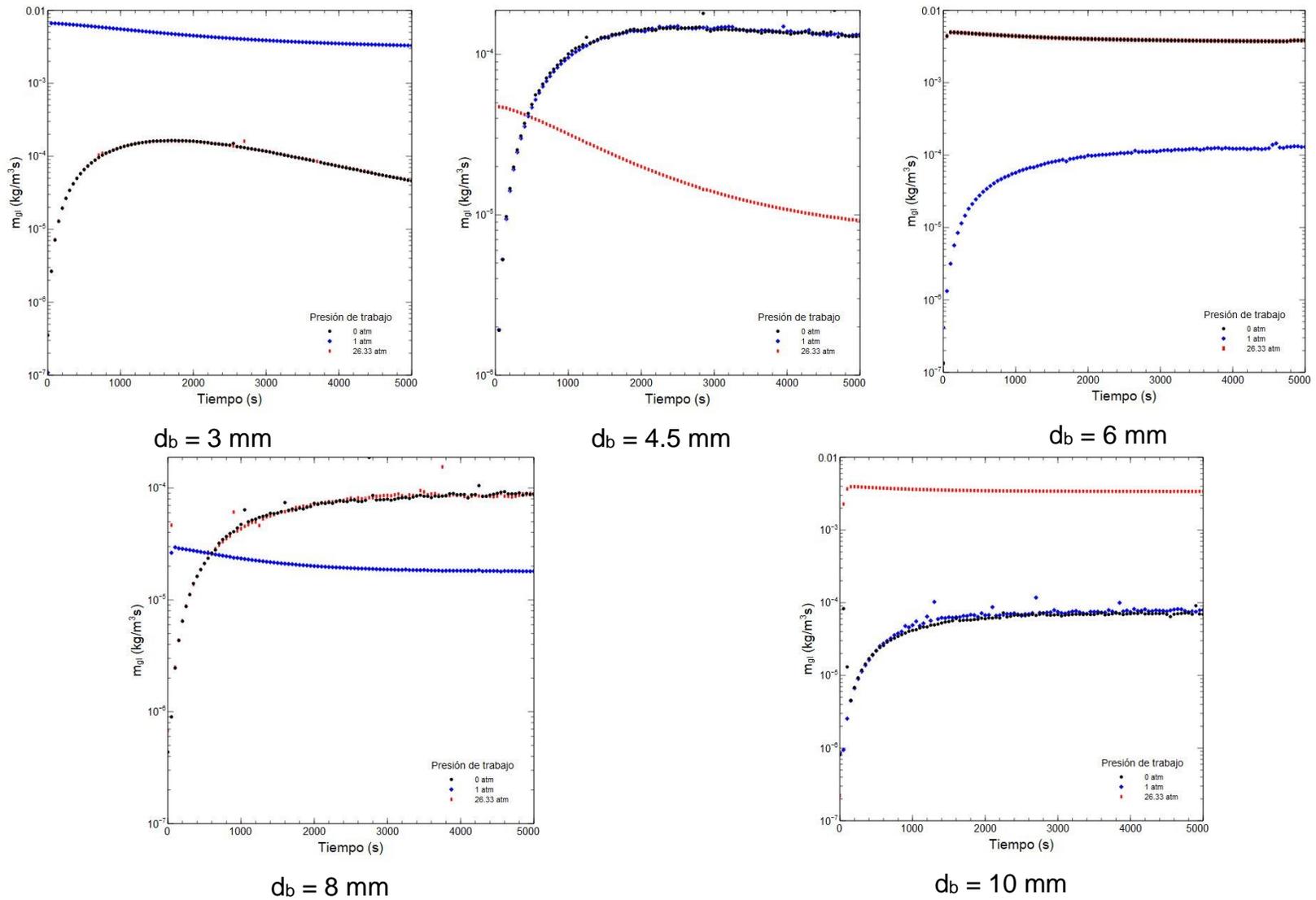


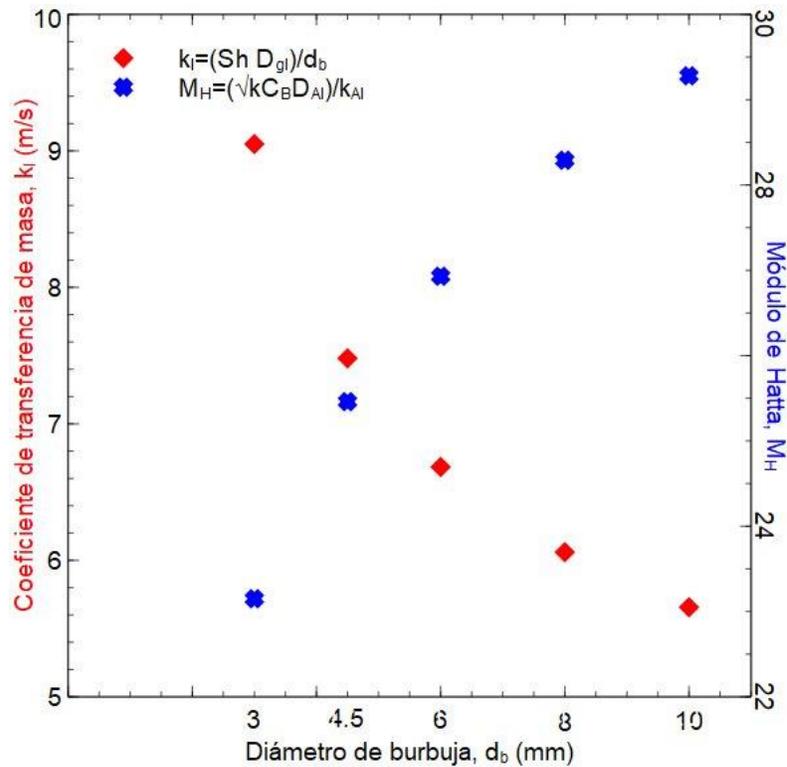
Figura 3.23. Transferencia de masa del gas al líquido en el puntos de evaluación 2 para diferentes presiones.

En todos los diámetros analizados hay dos presiones que presentan el mismo comportamiento en la transferencia de masa. Para  $d_b = 3 \text{ mm}$   $m_{gl}(P=0\text{atm}) = m_{gl}(P=26.33\text{atm})$ , para  $d_b = 4.5 \text{ mm}$   $m_{gl}(P=1\text{atm}) = m_{gl}(P=26.33\text{atm})$ , para  $d_b = 6 \text{ mm}$   $m_{gl}(P=0\text{atm}) = m_{gl}(P=26.33\text{atm})$ , para  $d_b = 8 \text{ mm}$   $m_{gl}(P=0\text{atm}) = m_{gl}(P=26.33\text{atm})$  y para  $d_b = 10 \text{ mm}$   $m_{gl}(P=0\text{atm}) = m_{gl}(P=1\text{atm})$ . Solo en el caso de  $d_b = 3 \text{ mm}$  a las presiones de 0 y 26.33 atm la transferencia de masa aumenta en los primeros segundos hasta los 1500 s y luego va disminuyendo lentamente en el tiempo. En la Figura 3.23 se observan valores de  $m_{gl}$  entre  $1 \text{ y } 10^{-6} \text{ kg/m}^3 \cdot \text{s}$  y se obtuvieron valores del coeficiente de transferencia de masa de  $k_l = 9.05, 7.48, 6.68, 6.06 \text{ y } 5.65 \text{ m/s}$ , respectivamente. Mientras mayor es el diámetro de la burbuja menores son los valores de  $m_{gl}$  y la mayor transferencia de masa se observa en el punto de evaluación 2. Esta variación sugiere una relación inversa entre el diámetro de la burbuja y la velocidad de transferencia de masa del gas al líquido. En otras palabras, las burbujas más grandes tienden a tener una velocidad de transferencia de masa más baja en comparación con las burbujas más pequeñas. Esto se debe a que a medida que aumenta el área de la burbuja disminuye el área interfacial neta porque hay una menor cantidad de burbujas. Además, en la mayoría de los puntos de evaluación la transferencia de masa aumenta con el paso del tiempo. Este patrón de aumento gradual de la transferencia de masa indica que el proceso que ocurre en la columna de burbujeo es controlado principalmente por la transferencia de masa.

Esto significa que la velocidad de la reacción química depende en gran medida de la velocidad a la que ocurre la transferencia de masa desde el gas a la fase líquida. Los altos valores del coeficiente de transferencia de masa ( $k_l$ ) indican que la transferencia de masa ocurre a una tasa significativamente rápida lo que sugiere una eficiencia óptima en este proceso.

Para comprobar el hecho de que el proceso esté gobernado por la transferencia de masa se calcularon los valores de  $E_i$  y  $M_H$  a partir de las Ecuaciones 1.12 y 1.13, respectivamente. Como resultado se obtuvo que  $E_i = 5.09 \times 10^9$  y  $M_H$  varía según

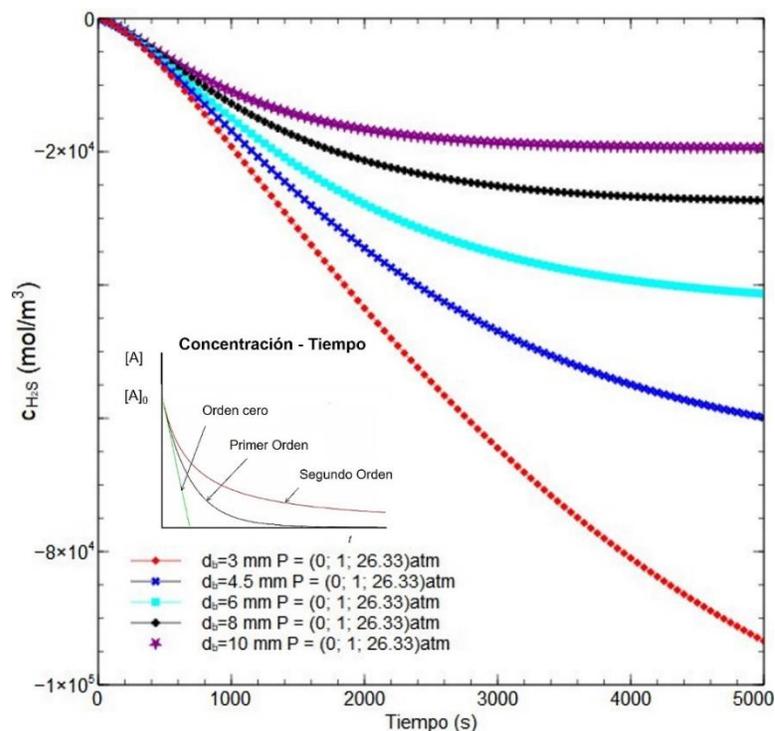
aumenta el diámetro de la burbuja, siendo inversamente proporcional a  $k_i$ , como se muestra en la Figura 3.24.



**Figura 3.24.** Coeficiente de transferencia de masa y módulo de Hatta en función del diámetro de burbuja.

Teniendo en cuenta estos resultados y lo reportado en la Tabla 1.2 se puede decir que se está en presencia del caso D, es decir, reacción rápida en la película líquida con alta concentración de B y que  $E \approx M_H$ . Estos resultados confirman que el proceso está gobernado por la transferencia de masa. Además, si se comparan estos resultados con lo reportado en la Figura 1.9 se observa que estamos en presencia de una reacción de pseudo primer orden. En la Figura 3.25 se muestra el comportamiento de la concentración de  $H_2S$  en la fase acuosa y se puede observar que en los primeros 1000 s las curvas muestran un comportamiento lineal indicando orden 0 y luego hay un cambio de orden a orden 1 confirmado que la reacción es de pseudo primer orden como se observa en la figura interna de la Figura 3.25. También se observa que el consumo de  $H_2S$  es más lento en la columna con mayor diámetro de burbuja. Los

valores negativos de la concentración de H<sub>2</sub>S están asociados con la eliminación o consumo rápido de esta sustancia en la corriente de gas, es posible que la concentración disminuya a niveles prácticamente indetectables, dando la apariencia de valores negativos.



**Figura 3.25.** Concentración de H<sub>2</sub>S en la fase líquida para diferentes diámetros de burbuja.

### 3.5. Tamaño y forma de la burbuja

Para determinar la forma de la burbuja, se calcularon los valores de Eötvös, Morton, Weber y Reynolds. En la Tabla 3.6 se presentan los valores de Eötvös (Eo) y Weber (We), donde se observa que  $Mo = 1.52 \times 10^{-8}$ , y los valores de Reynolds ( $Re_b$ ) se encuentran detallados en la Tabla 3.5. Además, en la Tabla 3.6 se proporciona la descripción de la forma de las burbujas basada en estos resultados y la Figura 1.6.

**Tabla 3.6.** Número de Eötvös y Weber para los diferentes diámetros de burbujas.

<b>Diámetro de burbuja</b>	<b>Número de Eötvös</b>	<b>Número de Weber</b>	<b>Forma de burbuja</b>
3 mm	3.63	3.97	Elipsoidales
4.5 mm	8.16	6.26	Elipsoidales
6 mm	14.51	9.45	Elipsoidales
8 mm	25.79	15.14	Con tapa esférica
10 mm	40.30	22.45	Con tapa esférica

### **3.6. Selección de condiciones de operación**

La elección de la mejor combinación de diámetro de burbuja y presión para operar una columna de burbujeo depende de los objetivos específicos del proceso y de las consideraciones de diseño y rendimiento. Los resultados y la información obtenida hasta el momento sugieren que diferentes combinaciones pueden ser más adecuadas para diferentes situaciones. Aquí se presentan algunas consideraciones generales:

- 1. Transferencia de masa eficiente:** El comportamiento de la transferencia de masa en una columna de burbujeo con reacción química se analiza considerando factores como la cinética de la reacción, propiedades de los fluidos y diseño de la columna. Se busca una mezcla eficiente, alta tasa de difusión y transferencia de calor, minimizando resistencias al transporte. La Figura 3.21 destaca la mayor transferencia en el punto de entrada de la columna para diversos diámetros de burbuja y presiones, mostrando un comportamiento errático en la salida en casos específicos. La Figura 3.22 compara la transferencia de masa para diferentes presiones y diámetros, mientras que la Figura 3.23 sugiere que diámetros de burbuja más pequeños podrían maximizar la transferencia de masa debido a su mayor área de interfaz gas-líquido.
- 2. Mezcla y turbulencia controlada:** Si la mezcla adecuada y la turbulencia controlada son esenciales para el proceso, se puede seleccionar combinaciones que mantengan una turbulencia constante o controlada en la columna. Esto podría requerir un equilibrio entre diámetros de burbuja más grandes que generen turbulencia y presiones que regulen esta turbulencia.

3. **Eficiencia energética:** La eficiencia energética es una consideración importante, por lo que las combinaciones que minimicen el consumo de energía se deben tener en cuenta. Esto podría implicar operar a presiones más bajas o utilizando diámetros de burbuja que requieran menos energía para su generación.
4. **Costos y recursos:** Se debe tener en cuenta los costos asociados con la generación de burbujas de diferentes tamaños y las presiones de operación. Las combinaciones seleccionadas deben ser económicamente viables y que utilicen los recursos de manera eficiente.
5. **Optimización continua:** Es importante destacar que la elección de la mejor combinación puede requerir un proceso de optimización continua y ajustes en función de la evolución del proceso y los resultados experimentales. Las simulaciones y experimentos a escala piloto pueden ser útiles para refinar las combinaciones seleccionadas.

Teniendo en cuenta estas situaciones se proponen las siguientes combinaciones de diámetro de burbuja y presión, junto con argumentos basados en los resultados analizados previamente en relación con la velocidad del líquido, la energía cinética turbulenta, la viscosidad dinámica turbulenta y la tasa de disipación de la energía cinética.

➤ **Situación 1: Transferencia de masa eficiente prioritaria**

**Propuesta:** Diámetro de burbuja pequeño de entre 3 y 4.5 mm a presión moderada de 1 atm.

**Argumento:**

- **Velocidad del líquido:** Los diámetros de burbuja más pequeños tienden a estar asociados con velocidades del líquido más altas en la entrada de la columna, lo que favorece la transferencia de masa.
- **Energía cinética turbulenta:** Los diámetros de burbuja más pequeños generan una turbulencia más intensa en el líquido, lo que promueve una mezcla eficiente y una mayor transferencia de masa.

- **Viscosidad dinámica turbulenta:** La presión moderada de 1 atm no afecta significativamente la viscosidad dinámica turbulenta, lo que mantiene el comportamiento regular.
- **Tasa de disipación de la energía cinética:** Los diámetros de burbuja pequeños contribuyen a una tasa de disipación de energía más constante y alta.

➤ **Situación 2: Eficiencia energética prioritaria**

**Propuesta:** Diámetro de burbuja pequeño de entre 3 y 4.5 mm a presión más baja, cercana a 0 atm.

**Argumento:**

- **Velocidad del líquido:** Los diámetros de burbuja más pequeños pueden generar velocidades del líquido más altas, lo que puede compensar la menor presión desde una perspectiva energética.
- **Energía cinética turbulenta:** Los diámetros de burbuja pequeños generan una turbulencia más intensa, lo que puede ser suficiente incluso a presiones más bajas desde una perspectiva de eficiencia energética.
- **Viscosidad dinámica turbulenta:** La presión más baja de 0 atm puede no afectar significativamente la viscosidad dinámica turbulenta en condiciones favorables para la eficiencia energética.
- **Tasa de disipación de la energía cinética:** La tasa de disipación de energía se mantiene estable, lo que es beneficioso para la estabilidad.

➤ **Situación 3: Optimización continua**

**Propuesta:** Realizar experimentos a escala piloto o simulaciones detalladas para determinar la combinación óptima de diámetro de burbuja y presión en función de los objetivos específicos y las restricciones cambiantes del proceso.

**Argumento:** Dado que la optimización continua es esencial, se recomienda un enfoque experimental para determinar la combinación más adecuada en función de la evolución del proceso y los resultados experimentales.

En resumen, no hay una combinación única que sea la mejor para todas las situaciones. La elección de la combinación óptima de diámetro de burbuja y presión dependerá de los objetivos y las restricciones específicas del proceso. Es aconsejable realizar experimentos a escala de laboratorio o piloto para confirmar la idoneidad de las combinaciones. Además, se debe considerar aspectos económicos y de sostenibilidad al tomar una decisión final.

### **3.7. Trabajos futuros**

1. Realizar simulaciones del sistema utilizando un eyector y contrastar los resultados con aquellos obtenidos a través de la columna de burbujeo, buscando identificar posibles diferencias y similitudes en el comportamiento del proceso.

La incorporación de la simulación con eyector permitirá explorar diferentes configuraciones del sistema, evaluar su eficiencia y validar la robustez del modelo. Comparar los resultados con la columna de burbujeo proporcionará una comprensión más profunda sobre la aplicabilidad y limitaciones del modelo, además de ofrecer una perspectiva más completa del comportamiento del proceso en diferentes condiciones.

2. Integrar el efecto de la reacción con mercaptanos en el contexto global del proceso, explorando cómo esta variable impacta las características y eficiencia del sistema, con el objetivo de comprender mejor la dinámica de la reacción en presencia de mercaptanos.

Los mercaptanos son compuestos químicos relevantes en diversos procesos industriales, y su reacción puede tener un impacto significativo en la eficacia y selectividad del proceso. Integrar este efecto permitirá entender cómo la presencia de mercaptanos influye en la cinética de la reacción y en las variables clave del sistema, proporcionando información crucial para optimizar el proceso en entornos prácticos.

3. Llevar a cabo la implementación experimental de la columna de burbujeo para la identificación precisa de parámetros fundamentales, tales como el coeficiente de

transferencia de masa ( $k_l$ ) y el coeficiente de difusión binaria ( $D_{AB}$ ), con el propósito de profundizar en la comprensión y optimización del proceso.

La implementación experimental es esencial para validar y ajustar los modelos teóricos utilizados en simulaciones. La identificación precisa de parámetros como  $k_l$  y  $D_{AB}$  brindará información valiosa para mejorar la precisión del modelo y, por ende, la capacidad predictiva del mismo. Además, este enfoque experimental respalda la aplicabilidad del modelo teórico en condiciones reales, consolidando así la base científica del estudio.

## CONCLUSIONES

1. Se resolvió numéricamente el proceso de desulfuración alcalina en una columna de burbujeo en el software Comsol Multiphysics utilizando tres módulos de simulación acoplados que incorporan los efectos del transporte de masa de la fase gaseosa a la fase líquida, los de reacción química en la fase líquida y los efectos hidrodinámicos resultado de la interacción de las fases gaseosa y acuosa. El tiempo de simulación fue de aproximadamente 2 h.
2. La evaluación de los parámetros de energía cinética turbulenta ( $\kappa$ ) y tasa de disipación de energía ( $\varepsilon$ ) reveló porcentajes de error relativo que varían significativamente, oscilando entre el 48 % y el 420 % y entre el 6 % y el 317 %, respectivamente. En vista de la variabilidad en los porcentajes de error, se tomó la decisión de centrarse exclusivamente en las variables centrales, como la magnitud de la velocidad del líquido ( $U_l$ ) y la concentración de NaOH en el líquido. Esto condujo a la elección de una malla más fina tanto en el dominio como en el contorno para la simulación CFD, ya que exhibió el menor porcentaje de error relativo, alcanzando un valor del 19 %.
3. La concentración de NaOH en la simulación evidencia una disminución consistente en todas las condiciones evaluadas, validando la eficacia del proceso físico modelado. Se destaca una distribución homogénea de la concentración para diámetros menores (3 y 4.5 mm) y presiones bajas ( $P = 0$  atm), señalando estabilidad en esas condiciones. Con el aumento del diámetro de la burbuja y la presión, se observa mayor interacción y acumulación de líquido alrededor de burbujas más grandes. La presencia de vórtices, indicativos de turbulencia, es más pronunciada con burbujas de mayor diámetro y presiones más altas, sugiriendo una influencia positiva en la mezcla eficaz de los componentes químicos.
4. El análisis de la energía cinética turbulenta en la columna de burbujeo revela patrones distintivos: la mayor turbulencia se encuentra en la entrada de la columna, disminuyendo hacia las paredes, y existe una relación proporcional entre la energía cinética y el diámetro de la burbuja. La presión tiene un impacto

limitado en la energía cinética, que se mantiene constante para todas las presiones. La variación entre puntos de evaluación muestra que la energía cinética sigue una relación específica al incrementar el diámetro del orificio, con oscilaciones cerca de la pared.

5. El análisis de la viscosidad turbulenta ( $\mu_T$ ) revela comportamientos distintivos en la columna de burbujeo, destacando su dependencia del diámetro de burbuja, la presión y la ubicación en la columna. La variación significativa de  $\mu_T$ , por ejemplo, de  $3.32 \times 10^{-5}$  a  $4.47 \times 10^{-7}$  Pa.s para  $d_b = 6$  mm y  $P = 1$  atm, sugiere una mayor viscosidad en la parte superior de la columna, posiblemente influenciada por la concentración de burbujas y sus interacciones. Se evidencia la influencia variable de la presión en  $\mu_T$ , siendo constante para ciertos diámetros ( $d_b = 4.5$  mm y 10 mm) y mostrando tendencias específicas para otros.
6. El análisis de la velocidad en una columna de burbujeo destaca una velocidad inicial marcada en la entrada, decreciendo debido a esfuerzos cortantes. La velocidad es inversamente proporcional al diámetro de la burbuja, siendo menor para burbujas pequeñas. Las burbujas grandes tienden a fragmentarse, generando dispersión. Se observa una rápida disminución de la velocidad para burbujas de 3 mm, inferior a las de 10 mm. Los puntos de evaluación 5 y 6 son desordenados, mientras que en el punto 2, la velocidad se mantiene constante, independiente del diámetro o la presión.
7. La evaluación de la transferencia de masa en una columna de burbujeo revela que la máxima transferencia ocurre a la entrada de la columna, siendo coherente con la inyección inicial de burbujas. En algunos casos específicos, como  $d_b = 3$  mm y  $P = 1$  atm, la transferencia en el punto 5 muestra un comportamiento errático, mientras que en otros casos permanece constante. La comparación entre diferentes presiones revela variaciones en la transferencia de masa, siendo más pronunciadas en el punto 5 y evidenciando irregularidades. A pesar de estas fluctuaciones, la transferencia de masa en el

punto 2 se mantiene regular a lo largo del tiempo para todos los diámetros de burbuja, indicando una mayor consistencia en la entrada de la columna.

8. Altos valores de  $k_i$  sugieren eficiencia óptima, respaldando que el proceso está gobernado por la transferencia de masa. Los cálculos de  $E_i$  y  $M_H$  confirman una reacción rápida en la película líquida con alta concentración de NaOH.
9. El análisis de la concentración de  $H_2S$  en la fase acuosa indica un comportamiento pseudo primer orden, con curvas iniciales lineales que cambian a orden 1 después de 1000 s. Se destaca una menor velocidad de consumo de  $H_2S$  en la columna con mayor diámetro de burbuja. Los valores negativos de concentración sugieren una eliminación rápida de  $H_2S$  en la corriente de gas, alcanzando niveles prácticamente indetectables.

## BIBLIOGRAFÍA

- Abdulrahman, M. W., & Nassar, N. (2022). *Eulerian Approach to CFD Analysis of a Bubble Column Reactor – A Review*. The 8th World Congress on Mechanical, Chemical, and Material Engineering. <https://doi.org/10.11159/htff22.188>
- Agarwal, M., & Sudharsan, J. (2021). A comprehensive review on scavenging H<sub>2</sub>S compounds in oil and gas industry by using nanomaterials. *Materials Today: Proceedings*, 44, 1504-1510. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.693>
- Akita, K., & Yoshida, F. (1974). Bubble Size, Interfacial Area, and Liquid-Phase Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 13(1), 84-91. <https://doi.org/10.1021/i260049a016>
- Ali, A. (2014). *CFD Simulation of Bubbly Flow Through a Bubble Column*. 5(4), 7.
- Al-Jamimi, H. A., BinMakhashen, G. M., Deb, K., & Saleh, T. A. (2021). Multiobjective optimization and analysis of petroleum refinery catalytic processes: A review. *Fuel*, 288, 119-678. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119678>
- Al-Qadri, Ali. A., Nasser, G. A., Galadima, A., & Muraza, O. (2022). A Review on the Conversion of Synthetic Gas to LPG over Hybrid Nanostructure Zeolites Catalysts. *ChemistrySelect*, 7(14), e202200042. <https://doi.org/10.1002/slct.202200042>
- Álvarez-Amparán, M. A., Cedeño-Caero, L., (2021). Análisis y relevancia de los procesos catalíticos para la remoción de azufre en los combustibles fósiles. *Mundo nano. Revista interdisciplinaria en nanociencias y nanotecnología*, 14(26). <https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2021.26.69633>

- Arellano, C. (2012). *Tecnología de la refinación de petróleo*. (IMIQ.). Tecnología. p. 68.
- Bak, J., Kim, H., Jeong, J. J., Euh, D., & Yun, B. (2020). Development of Bubble Size Correlation for Adiabatic Forced Convective Bubbly Flow in Low Pressure Condition Using CFD Code. *Applied Sciences*, 10(16), 5443. <https://doi.org/10.3390/app10165443>
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (1982). *Fenómenos de transporte: Un estudio sistemático de los fundamentos del transporte de materia, energía y cantidad de movimiento*. Reverté.
- Blazek, J. (2015). *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications* (3rd ed.). Elsevier Science.
- Brito Ponce, E. D. (2008). *Modelo mecánico de transferencia de masa para empaques estructurados* [Tesis de Maestría, Instituto Politécnico Nacional, México]. <http://tesis.ipn.mx/xmlui/handle/123456789/833>
- Camizán Vigo, A. J. (2015). *Estudio del tratamiento de emisiones gaseosas de sulfuro de hidrógeno a nivel piloto e industria* [Tesis de Grado, Universidad Nacional de San Marco, Perú]. E.A.P. de Ingeniería Química, Facultad de Química e Ingeniería Química, Universidad Nacional Mayor de San Marcos.
- Campuzano Calderón, O. (2017). *Estudio de la remoción de sulfuro de hidrógeno y de dióxido de carbono presente en el biogás, por medio de un reactor de columna de burbujeo operado a baja presión*. [http://bibliotecavirtual.dgb.umich.mx:8083/xmlui/handle/DGB\\_UMICH/4879](http://bibliotecavirtual.dgb.umich.mx:8083/xmlui/handle/DGB_UMICH/4879)
- Carvalho, F. S. (2022). *Termodinâmica estatística e redes neurais aplicadas ao estudo de fluidos atômicos*. <https://repositorio.ufmg.br/handle/1843/45976>

- Castellanos, R. (2019). *Estrategia de producción más limpia para reducir azufre en el GLP de la Refinería de Cienfuegos S.A.* [Tesis de Maestría, Universidad de Cienfuegos «Carlos Rafael Rodríguez», Cuba].
- Charpentier, J.-C. (1981). Mass-Transfer Rates in Gas-Liquid Absorbers and Reactors. En *Advances in Chemical Engineering* (Vol. 11, pp. 1-133). Elsevier.  
[https://doi.org/10.1016/S0065-2377\(08\)60025-3](https://doi.org/10.1016/S0065-2377(08)60025-3)
- Cifuentes Rodríguez, D. A. (2021). *Modelamiento de la turbulencia para la simulación aerodinámica del kart de competencia del grupo bta racing* [Tesis de Grado, Universidad de los Andes, Colombia].  
<https://repositorio.uniandes.edu.co/handle/1992/55661>
- Cortés Martínez, R., González Suárez, E., & Ramos Miranda, F. (2020). Neutralización de compuestos sulfurosos con sosa cáustica en la obtención de gas licuado del petróleo. En E. González Suárez, J. E. Miño Valdés, & R. Cortés Martínez (Eds.), *Métodos matemáticos en la estrategia de procesos para la solución de problemas en la industria química* (Especial, pp. 130-154). Universidad Nacional de Misiones.
- Crescenzo, C. D., Sabbarese, S., Ciampa, R., Capece, G., Migliaccio, A., Karatza, D., Chianese, S., & Musmarra, D. (2021). Simulation of Methane Mass Transfer in a Bubble Column Incipient Turbulent Regime Using Comsol Multiphysics®. *Chemical Engineering Transactions*, 86, 1183-1188.  
<https://doi.org/10.3303/CET2186198>

- Crha, J., Basařová, P., Ruzicka, M. C., Kašpar, O., & Zednikova, M. (2021). Comparison of Two Solvers for Simulation of Single Bubble Rising Dynamics: COMSOL vs. Fluent. *Minerals*, 11(5). <https://doi.org/10.3390/min11050452>
- Czajczyńska, D., Krzyżyńska, R., & Jouhara, H. (2022). Hydrogen sulfide removal from waste tyre pyrolysis gas by inorganics. *International Journal of Hydrogen Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.03.082>
- Deckwer, W.-D., & Schumpe, A. (1993). Improved tools for bubble column reactor design and scale-up. *Chemical Engineering Science*, 48(5), 889-911. [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(93\)80328-N](https://doi.org/10.1016/0009-2509(93)80328-N)
- Descalzi, G. (2008). *Planta GLP-Camuzi Gas* [Tesis de Grado, Instituto tecnológico de Buenos Aires].
- Duan, X. Y., Cheung, S. C. P., Yeoh, G. H., Tu, J. Y., Krepper, E., & Lucas, D. (2011). Gas-liquid flows in medium and large vertical pipes. *Chemical Engineering Science*, 66(5), 872-883. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2010.11.031>
- Ekambara, K., & Dhotre, M. T. (2010). CFD simulation of bubble column. *Nuclear Engineering and Design*, 240(5), 963-969. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2010.01.016>
- Fan, L.-S., & Tsuchiya, K. (1990). *Bubble Wake Dynamics in Liquids and Liquid-solid Suspensions*. Elsevier Science & Technology Books.
- Fu, X. Y., & Ishii, M. (2003). Two-group interfacial area transport in vertical air-water flow. *Nuclear Engineering and Design*, 219(2), 143-168. [https://doi.org/10.1016/S0029-5493\(02\)00285-6](https://doi.org/10.1016/S0029-5493(02)00285-6)

- González-Barramuño, B. (2022). *Analogías entre azeotropía y aneutropía desde la teoría molecular*. <http://repositorio.udec.cl/jspui/handle/11594/9931>
- Grace, J., Wairegi, T., & Nguyen, T. H. (1976). Shapes and Velocities of Single Drops and Bubbles Moving Freely Through Immiscible Liquids. *Trans Inst Chem Eng*, 54, 167-173.
- Granados-Hernández, E., López-Andrade, X., Bravo-Álvarez, H., & Sosa-Echeverría, R. (2013). Refinación de petróleo y su impacto económico-tecnológico para la producción de gasolinas en México al 2030. *Ingeniería, investigación y tecnología*, 14(4), 475-487.
- Guan, X., & Yang, N. (2021). CFD simulation of bubble column hydrodynamics with a novel drag model based on EMMS approach. *Chemical Engineering Science*, 243, 116758. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.116758>
- Haberman, W. L., Morton, R. K., & Basin, D. W. T. M. (1953). *An experimental investigation of the drag and shape of air bubbles rising in various liquids* (pp. 1-68). [David W. Taylor Model Basin]. <https://www.biodiversitylibrary.org/item/102131>
- Ham, P., Bun, S., Painmanakul, P., & Wongwailikhit, K. (2021). Effective Analysis of Different Gas Diffusers on Bubble Hydrodynamics in Bubble Column and Airlift Reactors towards Mass Transfer Enhancement. *Processes*, 9(10). <https://doi.org/10.3390/pr9101765>
- Hibiki, T., & Ishii, M. (2001). Interfacial area concentration in steady fully developed bubbly flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(18), 3443-3461. [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(00\)00365-3](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(00)00365-3)

- Hibiki, T., & Ishii, M. (2002). Interfacial area concentration of bubbly flow systems. *Chemical Engineering Science*, 57(18), 3967-3977. [https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(02\)00263-4](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(02)00263-4)
- Hibiki, T., & Ishii, M. (2009). Interfacial Area Transport Equations for Gas-Liquid Flow. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 1(1), 1-22. <https://doi.org/10.1260/175748209787387089>
- Hines, A. L., & Maddox, R. N. (1985). *Mass Transfer: Fundamentals and Applications*. Prentice-Hall.
- Hoffmann, K. A., & Chiang, S. T. (2000). *Computational Fluid Dynamics* (4th ed., Vol. 3). Engineering Education System Books.
- IEA. (2019). *World Energy Outlook 2019 – Analysis*. IEA. <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2019>
- Inaipil Leal, M. I. (2015). *Análisis fluido dinámico de un flujo de burbujas mediante CFD* [Tesis de Grado, Universidad de Chile]. <https://repositorio.uchile.cl/handle/2250/137857>
- Ishii, M., Kim, S., & Uhle, J. (2002). Interfacial area transport equation: Model development and benchmark experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(15), 3111-3123. [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(02\)00041-8](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(02)00041-8)
- Ishii, M., & Zuber, N. (1979). Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows. *AIChE Journal*, 25(5), 843-855. <https://doi.org/10.1002/aic.690250513>

- Izquierdo, J. F., & Torres, J. F. I. (2004). *Cinética de las Reacciones Químicas*. Edicions Universitat Barcelona.
- Jones, C. E., Hatcher, N. A., & Weiland, R. H. (2021). *Mercaptans removal from gases by absorption into amines and caustic*.
- Kajishima, T., & Taira, K. (2017). *Computational Fluid Dynamics*. Springer International Publishing. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-45304-0>
- Kocamustafaogullari, G., Huang, W. D., & Razi, J. (1994). Measurement and modeling of average void fraction, bubble size and interfacial area. *Nuclear Engineering and Design*, 148(2-3), 437-453. [https://doi.org/10.1016/0029-5493\(94\)90124-4](https://doi.org/10.1016/0029-5493(94)90124-4)
- Laín, S., Bröder, D., Sommerfeld, M., & Göz, M. F. (2002). Modelling hydrodynamics and turbulence in a bubble column using the Euler–Lagrange procedure. *International Journal of Multiphase Flow*, 28(8), 1381-1407. [https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(02\)00028-9](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(02)00028-9)
- Lauder, B. E., & Sharma, B. I. (1974). Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1(2), 131-137. [https://doi.org/10.1016/0094-4548\(74\)90150-7](https://doi.org/10.1016/0094-4548(74)90150-7)
- Lemoine, R., Behkish, A., Sehabiague, L., Heintz, Y. J., Oukaci, R., & Morsi, B. I. (2008). An algorithm for predicting the hydrodynamic and mass transfer parameters in bubble column and slurry bubble column reactors. *Fuel Processing Technology*, 89(4), 322-343. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2007.11.016>

- Levenspiel, O. (2004). *Ingeniería de las Reacciones Químicas* (3ra ed.). Limusa Wiley.  
[https://www.academia.edu/35258199/Ingenier%C3%ADa\\_de\\_las\\_Reacciones\\_Qu%C3%ADmicas\\_3ra\\_Edici%C3%B3n\\_Octave\\_Levenspiel](https://www.academia.edu/35258199/Ingenier%C3%ADa_de_las_Reacciones_Qu%C3%ADmicas_3ra_Edici%C3%B3n_Octave_Levenspiel)
- Liu, J., Guan, X., & Yang, N. (2023). Bubble-induced turbulence in CFD simulation of bubble columns. Part I: Coupling of SIT and BIT. *Chemical Engineering Science*, 270, 118528. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.118528>
- Lo, S., & Zhang, D. (2009). Modelling of Break-Up and Coalescence in Bubbly Two-Phase Flows. *The Journal of Computational Multiphase Flows*, 1, 23-38.  
<https://doi.org/10.1260/175748209787387106>
- Luna-Luna, G. (2021). *Modelación y simulación de los fenómenos hidrodinámicos en un sistema de electrólisis alcalina usando CFD* [Tesis de Grado, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla].  
<https://repositorioinstitucional.buap.mx/handle/20.500.12371/15452>
- MathPro. (2011). *Introducción a la refinación del petróleo y producción de gasolina y diésel con contenido ultrabajo de azufre*. VirtualPro.co.  
<https://www.virtualpro.co/biblioteca/introduccion-a-la-refinacion-del-petroleo-y-produccion-de-gasolina-y-diesel-con-contenido-ultrabajo-de-azufre>
- Mendoza, L. D., Vera, L. E., & Vera, L. E. (2019). Study of different turbulence models to obtain the curves characteristics of a naca profile 2415 through the three-dimensional simulation of fluid flows. *Bistua Revista de la Facultad de Ciencias Básicas*, 17(3), 43. <https://doi.org/10.24054/01204211.v3.n3.2019.3563>
- Meyers, R. A. (2016). *Handbook of Petroleum Refining Processes* [Book]. Access Engineering, McGraw-Hill Education - Access Engineering; McGraw-Hill

Education.

<https://www.accessengineeringlibrary.com/content/book/9780071850490>

Moradi, M., Rashedi, H., Mofradnia, S. R., Khosravi-Darani, K., Ashouri, R., & Yazdian, F. (2019). Polyhydroxybutyrate Production from Natural Gas in A Bubble Column Bioreactor: Simulation Using COMSOL. *Bioengineering*, 6(3), Article 3.

<https://doi.org/10.3390/bioengineering6030084>

Mühlbauer, A., Hlawitschka, M. W., & Bart, H. (2019). Models for the Numerical Simulation of Bubble Columns: A Review. *Chemie Ingenieur Technik*, 91(12), 1747-1765. <https://doi.org/10.1002/cite.201900109>

Nigam K. D. P., & Schumpe A. (1996). *Three-phase sparged reactors*. Gordon & Breach.

Nimmagadda, R., Asirvatham, L. G., & Reddy, S. R. (2020). Dynamics of rising bubbles in gradually mixing fluids due to the effect of Rayleigh–Taylor instability. *International Journal of Multiphase Flow*, 129, 103288.

<https://doi.org/10.1016/j.ijmultiphaseflow.2020.103288>

Ozar, B., Dixit, A., Chen, S. W., Hibiki, T., & Ishii, M. (2012). Interfacial area concentration in gas–liquid bubbly to churn-turbulent flow regime. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 38, 168-179.

<https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2012.08.006>

Pino, E., Montalvo, S., Huiliñir, C., Cubillos, F., & Gacitúa, J. (2020). Characteristics and Treatment of Wastewater from the Mercaptan Oxidation Process: A Comprehensive Review. *Processes*, 8(425), 1-23.

<https://doi.org/10.3390/pr8040425>

- Prócel Vivar, M. T. (2022). *Estudio del flujo bifásico líquido-sólido y la erosión por partículas sólidas en una turbina francis, en base al análisis de la influencia de los modelos de turbulencia rans convencionales (k-omega y k-epsilon)*. [Tesis de Grado, Escuela Politécnica Nacional, Quito]. <http://bibdigital.epn.edu.ec/handle/15000/22381>
- Richmond, G. (2019). *Modelos de turbulencia introductorio*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.21060.17289>
- Roy, S., Dhotre, M. T., & Joshi, J. B. (2006). CFD Simulation of Flow and Axial Dispersion in External Loop Airlift Reactor. *Chemical Engineering Research and Design*, 84(8), 677-690. <https://doi.org/10.1205/cherd.05178>
- Sadeghi, A., Delnavaz, M., Ghasemipanah, K., & Hosseini Aliabadi, M. (2021). Treatment of oil refinery wastewater containing spent caustic soda using electrocoagulation method. *Modares Civil Engineering Journal*, 21(6), 113-124. <https://doi.org/10.22034/21.6.8>
- Salinas, L. (2021). Importancia del estudio de catalizadores para la reducción de compuestos organoazufrados en gasolinas y diésel. *Pädi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías del ICBI*, 8(16). <https://doi.org/10.29057/icbi.v8i16.5773>
- Sánchez-Forero, D. I., Jr, J. L. S., Silva, M. K., Bastos, J. C. S. C., & Mori, M. (2013). Experimental and Numerical Investigation of Gas-Liquid Flow in a Rectangular Bubble Column with Centralized Aeration Flow Pattern. *Chemical Engineering Transactions*, 32, 1561-1566. <https://doi.org/10.3303/CET1332261>

- Schiller, L., & Naumann, A. (1935). A drag coefficient correlation. *Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure*, 77, 318-320.
- Schlegel, J. P., & Hibiki, T. (2015). A correlation for interfacial area concentration in high void fraction flows in large diameter channels. *Chemical Engineering Science*, 131, 172-186. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2015.04.004>
- SENER. (2023). *Prontuario De Gas Natural y Petroquímicos. - Prontuario estadístico de gas natural y petroquímicos.* datos.gob.mex. [https://datos.gob.mx/busca/dataset/prontuario-de-gas-natural-y-petroquimicos/resource/8e06fba3-519f-4a69-b8b0-4f8c672668e5?inner\\_span=True](https://datos.gob.mx/busca/dataset/prontuario-de-gas-natural-y-petroquimicos/resource/8e06fba3-519f-4a69-b8b0-4f8c672668e5?inner_span=True)
- Seoane, A. B., Abuín, A. G., Díaz, D. G., Dafonte, J. M. N., Sanjurjo, B., Tato, I. V., Seoane, A. B., Abuín, A. G., Díaz, D. G., Dafonte, J. M. N., Sanjurjo, B., & Tato, I. V. (2009). Absorción de CO<sub>2</sub> en columna de burbujeo por reacción con álcalis. *Afinidad: Revista de química teórica y aplicada*, 66(544).
- Shen, X., & Hibiki, T. (2015). Interfacial area concentration in gas–liquid bubbly to churn flow regimes in large diameter pipes. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 54, 107-118. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2015.05.002>
- Shi, Q., & Wu, J. (2021). Review on Sulfur Compounds in Petroleum and Its Products: State-of-the-Art and Perspectives. *Energy & Fuels*, 35(18), 14445-14461. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c02229>
- Shi, W., Yang, X., Sommerfeld, M., Yang, J., Cai, X., Li, G., & Zong, Y. (2019). Modelling of mass transfer for gas-liquid two-phase flow in bubble column reactor with a bubble breakage model considering bubble-induced turbulence.

*Chemical Engineering Journal*, 371, 470-485.

<https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.04.047>

Shu, S., Vidal, D., Bertrand, F., & Chaouki, J. (2019). Multiscale multiphase phenomena in bubble column reactors: A review. *Renewable Energy*, 141, 613-631.

<https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.04.020>

Sikkander, A. M. (2022). Oxidative Desulfurization of Petroleum. *International Journal of Thermodynamics and Chemical Kinetics*, 8(2), 1-4.

Solis-Herrera, J. A. (2015). *Modelado y simulación de un reactor airlift para su aplicación en la separación de sílice del agua* [Maestría, Universidad Autónoma Metropolitana].

<http://zaloamati.azc.uam.mx/handle/11191/6060>

Speight, G. (2006). *The Chemistry and technology of petroleum*. McGraw-Hill. p.542.

Speight, G., & Ozum, B. (2001). *Petroleum Refining Processes*. CRC Press.

[https://books.google.com/books/about/Petroleum\\_Refining\\_Processes.html?hl=es&id=KVNubwAAQBAJ](https://books.google.com/books/about/Petroleum_Refining_Processes.html?hl=es&id=KVNubwAAQBAJ)

Sullivan, D., Metro, S., & Pujadó, P. R. (2015). Isomerization in Petroleum Processing. En *Handbook of Petroleum Processing* (pp. 479-497). Springer International Publishing Switzerland.

Tabib, M. V., Roy, S. A., & Joshi, J. B. (2008). CFD simulation of bubble column—An analysis of interphase forces and turbulence models. *Chemical Engineering Journal*, 139(3), 589-614. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2007.09.015>

Takamatsu, T., Nakanishi, E., & Naito, M. (1964). Dynamics of Mass Transfer in the Double Film Resistance. *Memoirs of the Faculty of Engineering, Kyoto University*, 26(3), 145-154.

- Tari, F., Zarrinpashne, S., Shekarriz, M., & Ruzbehani, A. (2020). Modeling of mass transfer and hydrodynamic investigation of H<sub>2</sub>S removal from molten sulfur using porous Sparger. *Heat and Mass Transfer*, 56(5), 1641-1648. <https://doi.org/10.1007/s00231-019-02763-2>
- Toapanta-Ramos, L. F., Zapata-Cautillo, J. A., Cholango-Gavilanes, A. I., Quitiaquez M. Sc., W., Nieto-Londoño Ph. D., C., Zapata-Benabithé Ph. D., Z., Toapanta-Ramos M. Sc., L. F., Zapata-Cautillo, J. A., Cholango-Gavilanes, A. I., Quitiaquez M. Sc., W., Nieto-Londoño Ph. D., C., & Zapata-Benabithé Ph. D., Z. (2019). Estudio numérico y comparativo del efecto de turbulencia en codos y dobleces para distribución de agua sanitaria. *Revista Facultad de Ingeniería*, 28(53), 101-118. <https://doi.org/10.19053/01211129.v28.n53.2019.10156>
- Tomiyama, A. (1998). Struggle with computational bubble dynamics. *Multiphase Science and Technology*, 10(4), 369-405. <https://doi.org/10.1615/MultScienTechn.v10.i4.40>
- Valderrama, A., Flores, J., Bejar, M., & Quispe, C. (2009). Desgaste en los sistemas de inyección diesel por efecto del elevado contenido de azufre en el petróleo diesel 2. *Revista de Investigación de Física*, 12(02), Article 02. <https://doi.org/10.15381/rif.v12i02.8712>
- Van Baten, J. M., Ellenberger, J., & Krishna, R. (2003). Hydrodynamics of internal air-lift reactors: Experiments versus CFD simulations. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 42(10), 733-742. [https://doi.org/10.1016/S0255-2701\(02\)00076-4](https://doi.org/10.1016/S0255-2701(02)00076-4)

- van Krevelen, D. W., & Hoftijzer, P. J. (1947). Studies of gas absorption. I. Liquid film resistance to gas absorption in scrubbers. *Recueil Des Travaux Chimiques Des Pays-Bas*, 66(1), 49-65. <https://doi.org/10.1002/recl.19470660106>
- Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (2nd ed.). Pearson Education Limited.
- Wang, B., He, R., Chen, M., Pi, S., Zhang, F., Zhou, A., & Zhang, Z. (2021). Intensification on mass transfer between gas and liquid in fine bubble jet reactor. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(1), 104718. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104718>
- Wauquier, J.-P. (1995). *Petroleum Refining: Crude oil, petroleum products, process flowsheets* (Vol. 1). Technip. [https://books.google.com/books/about/Petroleum\\_Refining\\_Crude\\_oil\\_petroleum\\_p.html?hl=es&id=eZSZCgAAQBAJ](https://books.google.com/books/about/Petroleum_Refining_Crude_oil_petroleum_p.html?hl=es&id=eZSZCgAAQBAJ)
- Welty, J., Rorrer, G. L., & Foster, D. G. (2014). *Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer*. John Wiley & Sons.
- Wendt, J. F. (Ed.). (2009). *Computational Fluid Dynamics*. Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-85056-4>
- Wu, Q., Kim, S., Ishii, M., & Beus, S. G. (1997). *One-group interfacial area transport in vertical air-water bubbly flow* (Article WAPD-T--3145). AIChE/ASME National Heat Transfer Conference: Current Developments in Numerical Simulation of Heat and Mass Transfer, Baltimore, MD (United States), 10-12 Aug 1997; Bettis Atomic Power Laboratory. <https://digital.library.unt.edu/ark:/67531/metadc693714/>

- Xamán, J. (2016). *Dinámica De Fluidos Computacional Para Ingenieros*. Palibrio.
- Yao, W., & Morel, C. (2004). Volumetric interfacial area prediction in upward bubbly two-phase flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(2), 307-328. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2003.06.004>
- Yeoh, G. H., & Tu, J. Y. (2005). A unified model considering force balances for departing vapour bubbles and population balance in subcooled boiling flow. *Nuclear Engineering and Design*, 235(10-12), 1251-1265. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2005.02.015>
- Youns, M., Al-Bayati, T. M., & Ali, A. M. (2022). Experimental study and evaluation of heavy crude oil desulfurization process using combination of Alkalines Solutions and Catalytic Oxidative. *Iraqi Journal of Oil and Gas Research*, 2(1). <https://www.iasj.net/iasj/article/248963>
- Yun, B.-J., Splawski, A., Lo, S., & Song, C.-H. (2012). Prediction of a subcooled boiling flow with advanced two-phase flow models. *Nuclear Engineering and Design*, 253, 351-359. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2011.08.067>