

Simulación de un Reactor Anaerobio Discontinuo utilizado para la Producción de Hidrógeno mediante Dinámica de Fluidos Computacional

Guilherme Z. Maurina, Leonardo M. da Rosa, Lademir L. Beal y Saulo V. Della Giustina

Laboratório de Tecnologias Ambientais, Universidade de Caxias do Sul, Rua Francisco Getúlio Vargas nº 1130, Caxias do Sul-Brasil (e-mail: gzmaurin@ucs.br, lmrosa1@ucs.br, llbeal@ucs.br, svdgiust@ucs.br)

Recibido Dic. 16, 2013; Aceptado Mar. 17, 2014; Versión final recibida Mar. 26, 2014

Resumen

Se ha evaluado el comportamiento hidrodinámico de un reactor de fermentación anaerobia a través de simulaciones numéricas tridimensionales, usando Dinámica de Fluidos Computacional con el software OpenFOAM®. Se evaluaron dos condiciones de funcionamiento: una con régimen de circulación hacia abajo y otra en la dirección opuesta. Se consideró un modelo bifásico, transitorio y turbulento. Los resultados obtenidos con flujo de recirculación hacia arriba indican una optimización del proceso con este régimen. Esto implica una mayor porción turbulenta en el interior del biorreactor y una mejor mezcla sin comprometer la integridad de los gránulos.

Palabras clave: dinámica de fluidos computacional (CFD), reactor anaerobio discontinuo (ASBR), hidrógeno, comportamiento hidrodinámico

Simulation of an Anaerobic Sequencing batch Reactor for Hydrogen Production using Computational Fluid Dynamics

Abstract

The fluid dynamic behavior of an anaerobic fermentation bioreactor through three-dimensional numerical simulations using Computational Fluid Dynamics with the software OpenFOAM® has been studied. Two operating conditions were evaluated: one with a downward recirculating regime and another in the opposite direction. Results obtained with upward recirculating flow indicate an optimization of the process in this regime. This implies a larger turbulent region in the bioreactor and a better mixing without compromising the integrity of the flocs

Keywords: computational fluid dynamics (CFD), anaerobic sequencing batch reactor (ASBR), hydrogen, fluid dynamic behavior

INTRODUCCIÓN

Debido a la creciente emisión de gases que aumentan el efecto invernadero y los problemas asociados con la quema de combustibles fósiles, el hidrógeno aparece como una fuente de energía alternativa capaz de promover el desarrollo sostenible. El hidrógeno se señaló como el combustible del futuro, ya que propicia una combustión no contaminante y una ruta más eficiente para la generación de electricidad (Show et al., 2011). Los sistemas multifásicos, en donde una fase (gaseosa, líquida o sólida) se encuentra dispersa en forma de partículas en una fase fluida continua son comúnmente utilizados en un gran número de dispositivos de la industria de procesos químicos, petroquímicos, biológicos, ambientales, metalúrgicos, farmacéuticos, etc. (Ramírez et al., 2007). En estos sistemas, hay muchas variables que afectan el rendimiento, como la agitación, la relación inicial entre concentración de sustrato y biomasa (F/M), las características geométricas, la temperatura y la estrategia de alimentación (Novaes et al., 2010). Sin embargo, las investigaciones actuales han dedicado especial atención a las características químicas y biológicas. Muchos reactores en escala industrial y de laboratorio todavía son dimensionados utilizando correlaciones empíricas (Wang et al., 2010).

Debido al aumento de rendimiento de las computadoras en las últimas décadas, es posible predecir el flujo de fluido y mejorar el rendimiento de digestores anaerobios. Ding et al. (2010) presentaron simulaciones tridimensionales en CFD de un flujo gas-líquido y agitado por un impulsor mecánico en un Reactor Continuo de Tanque Agitado (CSTR) utilizado para la producción de hidrógeno. Wang et al. (2010) utilizaron la metodología CFD desarrollada por Ding et al. (2010) en la investigación de los mecanismos para ampliación de tamaño de los CSTRs, e indicaron que parámetros como el campo de velocidad y zonas de estancamiento necesitan ser mejorados para lograr la escala industrial. Yu et al. (2013) asociaron el modelo de fluidos múltiples con la Teoría Cinética del Flujo Granular (KTGF) y el Modelo de Digestión Anaeróbica N° 1 (ADM1) para mejorar el rendimiento de un digestor anaerobio, para el cual la sedimentación es un fenómeno muy importante para retener la biomasa. En este contexto, el objetivo de este trabajo es estudiar el comportamiento hidrodinámico de un Reactor Anaerobio Discontinuo (ASBR), mediante el empleo de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). Se analizan dos condiciones de funcionamiento para verificar aquel que proporciona una mejor mezcla dentro de este biorreactor, y por lo tanto la producción de hidrógeno.

MÉTODOS

El ASBR estudiado tiene un diámetro interno de 0,604 m, altura de 3,8 m y una capacidad total de 1.000 L. Este reactor está actualmente situado en una planta industrial en la ciudad de Campinas, Brasil. Un diagrama con su geometría es presentado en la Fig. 1.

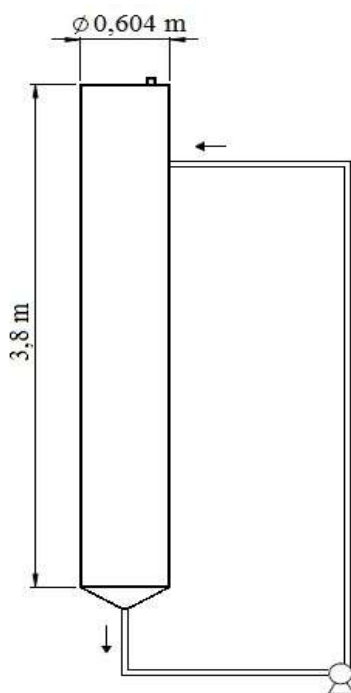


Fig. 1: Diagrama esquemático del reactor estudiado.

Una evaluación de mallas se realizó en un trabajo anterior, y se llegó a la conclusión que la malla que contiene 130.000 volúmenes es suficientes para determinar correctamente el flujo en este reactor (Maurina et al., 2013). Esta malla se ilustra en la Fig. 2. Los valores de $y+$ (una medida adimensional del espesor del volumen de control cerca de las paredes del reactor) son aproximadamente iguales a 32,5, lo cual es adecuado para simulación de casos turbulentos (Wilcox, 1998).

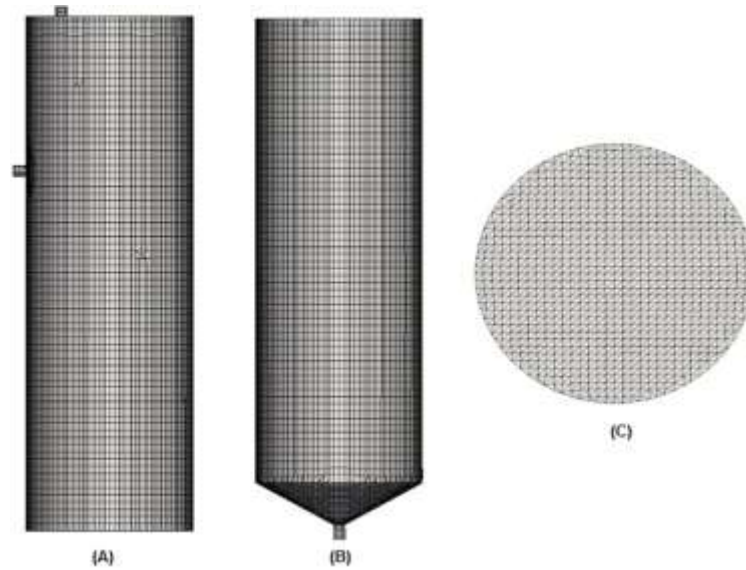


Fig. 2: Detalles de la malla utilizada: (A) sección superior y (B) sección inferior y (C) corte transversal.

El modelo adoptado consta de ecuaciones tridimensionales y transitorias para predecir la dinámica de fluidos de los casos propuestos. Se aplicó el método de dos fluidos para resolver el flujo de dos fases Eulerianas, que se interpenetran. Las fases consideradas fueron (1) una mezcla líquida continua y (2) las burbujas de gas. Fue adoptada la formulación descrita por Rusche (2002) para ecuaciones incompresibles de flujo bifásicos. Las ecuaciones de continuidad y de momentum son definidas por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g) + \nabla(\alpha_g U) + \nabla(U_r \alpha_g (1 - \alpha_g)) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(U_i) + U_i \cdot \nabla(U_i) + \nabla \cdot (R_i^{eff}) + \frac{\nabla \alpha_i R_i^{eff}}{\alpha_i} = \frac{-\nabla p}{\rho_i} + g + \frac{M_i}{\alpha_i \rho_i} \tag{2}$$

donde el índice i representa la fase ("g" para gas, "l" para líquido), U representa la velocidad de la fase, U_r es la velocidad relativa entre las fases, α es la fracción volumétrica, g la aceleración de la gravedad, p la presión, y M_i representa la transferencia de momentum entre las fases debido a las fuerzas interfaciales, R_i^{eff} representa el tensor de tensiones viscosas definido por:

$$R_i^{eff} = -\nu_i^{eff} \left(\nabla U_i + \nabla U_i^T - \frac{2}{3} |\nabla \cdot U_i| \right) + \frac{2}{3} I k_i = 0 \tag{3}$$

donde ν_i^{eff} es la viscosidad efectiva de la fase i , I es un tensor unitario, y k_i es la energía cinética turbulenta de la fase i .

La fuerza de arrastre es la fuerza interfacial dominante en flujos gas-líquido dentro de columnas de burbujas (Laborde-Boutet et al., 2009). Si se modela correctamente, la fuerza de arrastre puede establecer el patrón de flujo sin la adición de otras fuerzas interfaciales. Este enfoque se utilizó para las simulaciones del presente estudio, en el que la interacción entre las burbujas de gas y el líquido ocurre sólo en la interface de las fases, a una altura de aproximadamente 3,60 m. Se utilizó la correlación Schiller y Naumann (Rusche, 2002) para estimar el coeficiente de arrastre entre las fases. Esta correlación es adecuada para los casos con burbujas esféricas como en el reactor estudiado. Esta se expresa en las siguientes ecuaciones:

$$M_i = \frac{3}{4} \frac{\alpha_g \rho_l}{d_g} C_D |U_r| U_r. \tag{4}$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_b} (1 + 0,15 Re_b^{0,687}) & Re_b \leq 1000 \\ 0,44 & Re_b > 1000 \end{cases} \quad (5)$$

donde d_g es el diámetro de las burbujas, y Re_b representa el número de Reynolds da burbuja, definido por:

$$Re_b = \frac{|U_r| d_g}{\nu_l} \quad (6)$$

El modelo de turbulencia k-ε fue adoptado para determinar los efectos de la turbulencia en la fase líquida. Este modelo utiliza dos ecuaciones de transporte para el cálculo de la energía cinética turbulenta (k) y de su disipación (ε) e se asume la hipótesis de Boussinesq, donde la viscosidad efectiva de la fase continua está dada por la suma de la viscosidad molecular ν_l con la viscosidad turbulenta ν^t , definida por:

$$\nu^t = C_\mu \left(k_l^2 / \epsilon_l \right) \quad (7)$$

donde C_μ es una constante del modelo k-ε disponible en OpenFOAM. Las ecuaciones conservativas para k y ε se expresan a través de las ecuaciones:

$$\frac{\partial k_l}{\partial t} + (U_l \cdot \nabla) k_l - \nabla \cdot \left(\frac{\nu_l^{eff}}{\sigma_k} \nabla k_l \right) = P_k - \epsilon_l \quad (8)$$

$$\frac{\partial \epsilon_l}{\partial t} + (U_l \cdot \nabla) \epsilon_l - \nabla \cdot \left(\frac{\nu_l^{eff}}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_l \right) = \frac{\epsilon_l}{k_l} (C_1 P_k - C_2 \epsilon_l) \quad (9)$$

Donde σ_k , σ_ϵ , C_1 y C_2 son constantes del modelo. P representa la producción de turbulencia, expresada por:

$$P_k = 2\nu_l^{eff} \left(\nabla U_l \cdot \text{dev} \left(\nabla U_l + (\nabla U_l)^T \right) \right) \quad (10)$$

Las simulaciones realizadas en este trabajo utilizaron el solver "twoPhaseEulerFoam", disponible en la versión 2.2.1 do código de cálculo OpenFOAM. El acoplamiento entre los campos de velocidad y presión se realizó utilizando una mezcla entre los algoritmos SIMPLE y PISO (OpenFOAM®, 2013). Cada simulación fue calculada hasta 200 s para el establecimiento del flujo, y 100 s más para obtener valores medios. Como criterio de convergencia, el residuo total fue mantenido debajo de 10^{-5} y, como criterio de estabilidad, el número de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) se limitó por debajo de 1 durante las simulaciones. El número CFL es una relación entre la velocidad característica, el paso de tiempo y el tamaño del volumen de control:

$$CFL = U \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (11)$$

Dos casos fueron estudiados en el presente trabajo: en el primero (Caso 1) la recirculación dentro del reactor fluye hacia abajo y, en el segundo (Caso 2), hacia arriba. En los dos casos la velocidad de recirculación es de 90 L/min. La fase fluida adoptada, compuesta por vinaza y glicerina, presenta un comportamiento reológico similar a una mezcla entre la cultura microbiológica y el substrato. La Tabla 1 muestra las condiciones de contorno y las propiedades físicas que se utilizaron en los casos propuestos.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Los resultados obtenidos en la simulación del Caso 1 se muestran en la Fig. 3. Se puede observar en la Fig. 3A que la velocidad de mezcla de la fase líquida es máxima (1,33 m/s) cerca de la entrada, en la parte superior del reactor. Los valores altos de velocidad también se observan cerca de la salida, en la parte inferior. En las regiones restantes del reactor, la mayor parte del flujo se mantiene con valores de velocidad abajo de 0,3 m/s. En el reactor propiamente dicho, el movimiento del líquido no sigue un camino preferido, con regiones de bajas velocidades y grandes vórtices, con la excepción de la región de entrada donde se observa e flujo producido por la alimentación de la fase líquida (Fig. 3B).

Tabla 1: Condiciones de contorno y propiedades físicas usadas en las simulaciones numéricas.

Condiciones de contorno		
Entrada	Velocidad uniforme normal de 1,19 m/s	
Salida	101.325 Pa	
Paredes	Paredes lisas, condición antideslizante para ambas fases	
Propiedades Físicas		
	Densidad	Viscosidad
Dispersa (gas)	0,089 kg/m ³	8,4 x10 ⁻⁶ m ² /s
Continua (líquido)	1.009,7 kg/m ³	1,0 x10 ⁻⁶ m ² /s
Diámetro de las burbujas	0,001 m	

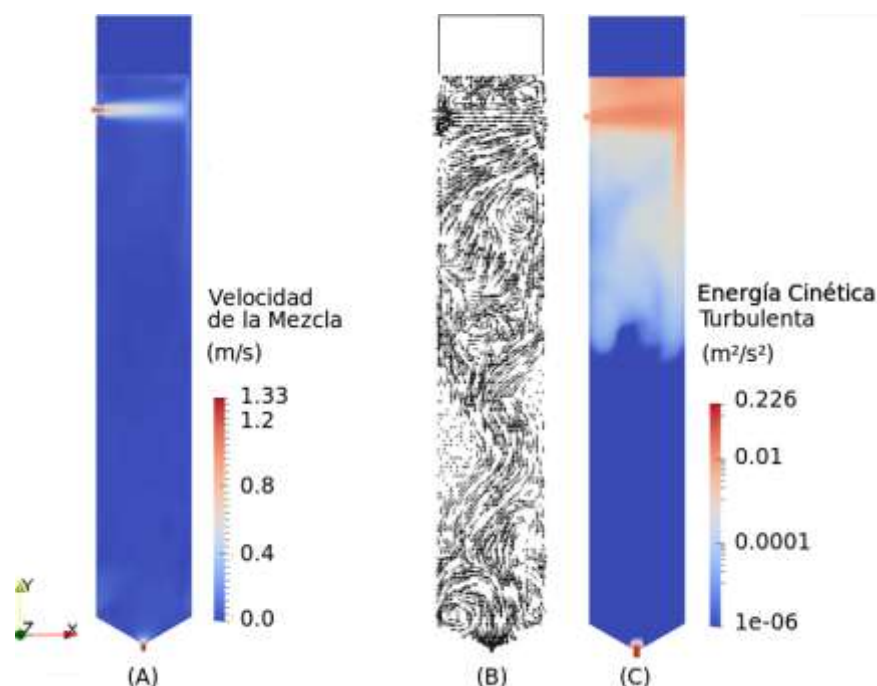


Fig. 3: Resultados de la fase líquida en el caso 1: (A) velocidad de la mezcla; (B) campo vectorial medio; (C) energía cinética turbulenta.

La energía cinética turbulenta también es mayor en la zona de entrada. En la Fig. 3C, se puede observar que la mayoría de esta energía se disipa en la pared opuesta a la entrada. Esto resulta en una menor turbulencia que se transporta a través del resto del reactor. Las bajas velocidades en el interior del reactor, asociadas a la disipación de energía cinética turbulenta indican una baja eficiencia de mezcla en la parte inferior del reactor.

En la Fig. 4 se puede observar los resultados obtenidos para el caso en que el flujo se da en el sentido contrario al de la gravedad (Caso 2). La mayor parte de la velocidad de mezcla de la fase líquida también se mantiene por debajo de 0,3 m/s, y es máxima (1,5 m/s) cerca de la entrada, en la parte inferior del reactor. El cambio en la dirección del flujo resulta en un aumento de la energía cinética turbulenta en la parte inferior del reactor, que se mantiene alta en su parte superior (Fig. 4C). La dirección de entrada permite el transporte de la turbulencia a lo largo de todo el reactor, en lugar de disiparse rápidamente en las paredes. Esto indica una mejora de la mezcla en comparación con la condición anterior (Caso 1).

Otro aspecto importante a considerar es la tensión de corte en el interior del reactor. Velocidades más altas pueden reducir la actividad microbiana, debido a la fricción excesiva que daña la biomasa (Michelan et al., 2009) y causa la ruptura de los gránulos, lo que resulta en una baja separación de los sólidos (Bannari et al., 2011). Nurtono et al. (2012) sugirieron el valor máximo de 0,66808 N/m² para la tensión de corte. En la Fig. 5 se puede ver que la tensión de corte en las paredes (donde se encuentran los más altos valores) permanece por debajo de este límite, excepto en los tubos de recirculación. En estas regiones, se obtienen los valores máximos de 0,452 y 0,531 N/m² para los Casos 1 y 2, respectivamente. En ambos casos, la tensión de corte está por debajo del valor máximo sugerido. Por lo tanto, es posible afirmar que las condiciones evaluadas en el Caso 2 proporcionan un mejor rendimiento del reactor, sin comprometer la actividad microbiana.

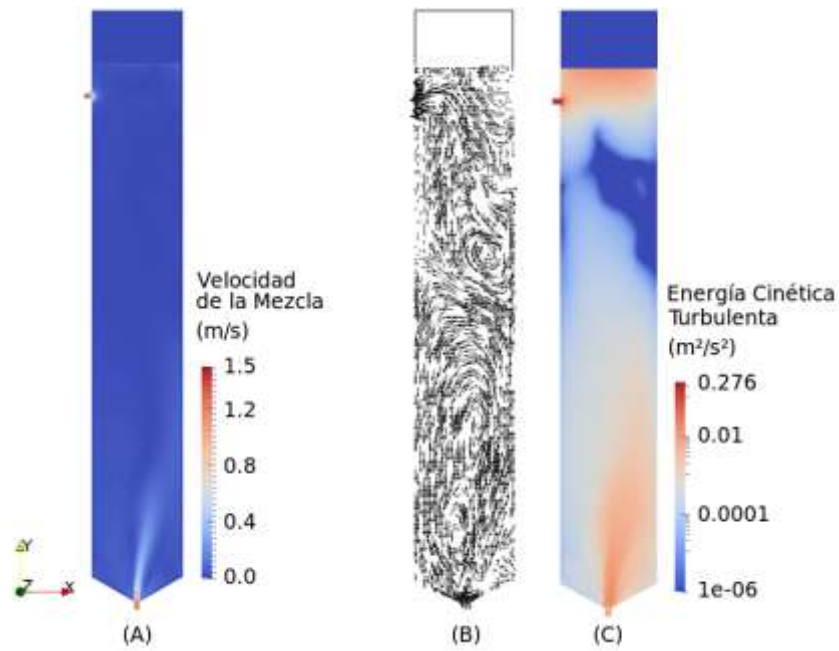


Fig. 4: Resultados de la fase líquida en el caso 2: (A) velocidad de la mezcla; (B) campo vectorial medio; (C) energía cinética turbulenta.

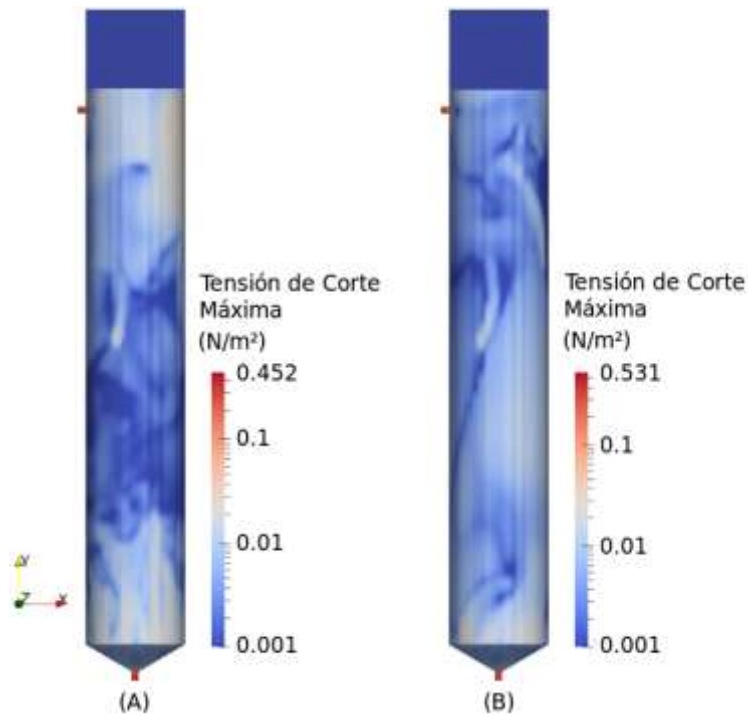


Fig. 5: Comparación entre la tensión de corte próxima a las paredes para (A) Caso 1 y (B) Caso 2.

CONCLUSIONES

Los resultados indican que el cambio en la dirección del flujo puede mejorar la mezcla dentro del reactor, con bajo riesgo de comprometer la actividad bacteriana. El análisis de la simulación con flujo de recirculación hacia arriba mostró una mayor energía cinética turbulenta en el reactor, lo que resulta en una mejor mezcla y permite una mayor producción de hidrógeno. También se observó un campo vectorial sin la presencia de caminos preferenciales para ambos casos, lo que es característico en flujos turbulentos. Finalmente, se encontró que la tensión de cizallamiento máxima se mantuvo por debajo del límite superior sugerido en ambos casos. Comparando las dos condiciones simuladas, se puede concluir que el reactor, que opera con un flujo de recirculación hacia arriba, proporciona una operación más eficiente del reactor, mejorando la mezcla sin comprometer la integridad de los gránulos.

NOTACIÓN

C_{μ}	constante del modelo k- ϵ	0,09
C_1	constante del modelo k- ϵ	1,44
C_2	constante del modelo k- ϵ	1,92
C_D	coeficiente de arrastre	(-)
d_g	diámetro de la burbuja	m
g	aceleración de la gravedad	$m\ s^{-2}$
I	tensor unitario	(-)
k	energía cinética turbulenta	$m^2\ s^{-2}$
L	escala de longitud	m
M	fuerza de cantidad de movimiento de la fase	$N\ m^{-3}$
p	presión	Pa
P	producción de energía cinética turbulenta	$Pa\ s^{-1}$
R	tensor de tensión	$m\ s^{-1}$
Re_b	número de Reynolds de burbuja	(-)
t	tiempo	s
U	velocidad media	$m\ s^{-1}$
U_r	velocidad relativa media	$m\ s^{-1}$
x	tamaño del volumen de control	m
<i>Letras griegas</i>		
α	fracción del volumen	(-)
ρ	densidad	$kg\ m^{-3}$
ν	viscosidad cinemática	$m^2\ s^{-1}$
ϵ	disipación de energía turbulenta	$m^2\ s^{-3}$
σ_k	constante del modelo k- ϵ	1,0
σ_ϵ	constante del modelo k- ϵ	0,76923

Índices

eff	efectivo
g	fase gaseosa
i	fase
l	fase líquida
T	vector transpuesto

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la PETROBRAS y a la FAPERGS por el apoyo financiero recibido.

REFERENCIAS

- Bannari, R., Bannari, A., Selma, B. y P. Proulx, *Mass transfer and shear in an airlift bioreactor: Using a mathematical model to improve reactor design and performance*, Chem. Eng. Sci.: 66, 2057-2067 (2011).
- Ding, J., Wang, X., Zhou, X.F., Ren, N.Q. y W.Q. Guo, *CFD optimization of continuous stirred-tank (CSTR) reactor for biohydrogen production*, Bioresour. Technol.: 101, 7005-7013 (2010).
- Laborde-Boutet, C., Larachi, F., Dromard, N., Delsart, O. y D. Schweich, *CFD simulation of bubble column flows: Investigations on turbulence models in RANS approach*, Chem. Eng. Sci.: 64, 4399-4413 (2009).
- Maurina, G.Z.; Rosa, L.M., Beal, L.L., Baldasso, C., Pederiva, L. y A.P. Torres, *Optimization of a hydrogen production bioreactor using computational fluid dynamic (CFD) techniques*, Proceedings of the 13th World Congress on Anaerobic Digestion, Santiago de Compostela, Spain, 25-28 June (2013).
- Michelan, R. y otros seis autores, *Effect of impeller type and mechanical agitation on the mass transfer and power consumption aspects of ASBR operation treating synthetic wastewater*, J. Environ. Manage.: 90, 1357-1364 (2009).
- Novaes, L.F. y otros siete autores, *Effect of impeller type and agitation on the performance of pilot scale ASBR and AnSBR applied to sanitary wastewater treatment*, J. Environ. Manage.: 91, 1647-1656 (2010).

Nurtono, T. y otros seis autores, *A computational fluid dynamics (CFD) study into a hydrodynamic factor that affects a bio-hydrogen production process in a stirred tank reactor*, *Procedia Engineering*: 50, 232-245 (2012).

OpenFOAM®, *OpenFOAM® user guide* (2013), <http://openfoam.org/docs/user/index.php>. Acceso: 3 de febrero (2013).

Ramírez, J.M., Soria, A. y E.R. Salinas, *Modelo hidrodinámico para la velocidad de un par de burbujas ascendiendo en línea*, *Información Tecnológica*: 18(4), 63-74 (2007).

Rusche, H, *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fraction*, Ph.D. Thesis, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London, London, UK (2002).

Show, K.Y., Lee, D.J. y J.S. Chang, *Bioreactor and process design for biohydrogen production*, *Bioresour. Technol.*: 102, 18, 8524-8533 (2011).

Wang, X., Ding, J., Guo, W.Q., N.Q. Ren, *Scale-up and optimization of biohydrogen production reactor from laboratory-scale to industrial-scale on the basis of computational fluid dynamics simulation*, *Int. J. Hydrogen Energy*: 35, 10960-10966 (2010).

Wang, X., Ding, J., Ren, N.Q., Liu, B.F. y W.Q. Guo, *CFD simulation of an expanded granular sludge bed (EGSB) reactor for biohydrogen production*, *Int. J. Hydrogen Energy*: 34, 9686-0695 (2009).

Wilcox, D.C, *Turbulence model for CFD*, 2ª edición, DCW Industries, La Cañada, California, USA (1998).

Yu, L. y otros seis autores, *Multiphase modeling of settling and suspension in anaerobic digester*, *Applied Energy*: 111, 28-39 (2013).