

## DISOLUCIÓN DE CO<sub>2</sub> CON DISPOSITIVOS DE FLUJO CRUZADO PARA REMINERALIZACIÓN

**Autores/Authors:** Javier Dávila Martín (Profesor Titular, Universidad de Sevilla, davila@us.es), Alonso Fernández Morales (Director I+D, Drops&Bubbles Tecnología SL, alonsofdez@dbtech.es)

### Resumen:

En este estudio se han utilizado dos herramientas habituales en nuestro trabajo, que pueden ayudar en el proceso de disolución de CO<sub>2</sub>, mejorando su eficiencia y reduciendo las pérdidas del gas inyectado:

- La Simulación Numérica CFD (Computational Fluid Dynamics). El comportamiento de los fluidos es a menudo poco intuitivo, haciendo difícil, sino imposible, predecir el impacto o efecto de los flujos sobre elementos en fase de diseño o de mejora operativa. Esta herramienta permite simular con éxito el comportamiento de los fluidos en movimiento, incluso con complejas interacciones entre múltiples tipos de estados físicos (flujos multifásicos). Los resultados son estudiados y analizados para su aprovechamiento en cada aplicación concreta.
- La aplicación de la tecnología de flujo cruzado a los difusores de generación de microburbujas para la disolución de gases en línea. D&BTech explota en exclusiva una patente de la Universidad de Sevilla de las que su personal y promotores son inventores, la cual se adapta a este caso a la transferencia de CO<sub>2</sub> en plantas de desalación.

La tecnología se basa en generar burbujas de tamaño reducido, gracias al paso de una corriente de líquido por encima de los orificios de inyección de gas, al mismo tiempo que se cuida extremadamente la geometría para reducir al máximo la probabilidad de los fenómenos de coalescencia.

La reducción del tamaño de burbuja y el aumento del tiempo de difusión tiene como consecuencia el aumento de la tasa de transferencia y en por tanto, la reducción de los costes asociados al proceso. Las simulaciones realizadas, que incorporan la cinética química de los compuestos en disolución, indican que dependiendo de la geometría y las condiciones de operación de la planta de desalación el ahorro de CO<sub>2</sub> puede ser superior al 50%.

### Abstract:

In this study, two usual tools in Fluid Mechanics Engineering have been used in order to analyze the process of dissolving CO<sub>2</sub>, improving its efficiency and reducing the losses of the injected gas.

These two tools are:

- The CFD (Computational Fluid Dynamics) Numerical Simulation. Fluids behavior is often counterintuitive, making it difficult, if not impossible, to predict the impact of fluid flows on elements in the design or operational improvement phase. This tool facilitates to simulate successfully the behavior of the fluids in movement, even with complex interactions between multiple types of physical states (multiphase flows). The results are studied and analyzed for their use in each specific application.
- The application of cross-flow technology to microbubble generation diffusers for in-line gas dissolution. D&BTech exclusively exploits a patent of the University of Seville of which its staff and promoters are inventors, which has been adapted in this case to the transfer of CO<sub>2</sub> in desalination plants.

The technology is based on generating bubbles of small size, thanks to the passage of a stream of liquid above the gas injection holes, while an extremely studied geometry is designed to minimize the likelihood of the phenomena of coalescence.

The reduction of the bubble size and the increase of the diffusion time have as consequence the increase of the transfer rate and in this way, the reduction of the costs associated to the process. The simulations carried out, which incorporate the chemical kinetics of the compounds in solution, indicate that, depending on the geometry and operating conditions of the desalination plant, CO<sub>2</sub> savings may be greater than 50%.

## 1 ANTECEDENTES

El trabajo que se presenta en este documento tuvo como punto de partida el análisis del proceso de remineralización mediante disolución de CO<sub>2</sub> en plantas desaladoras. Una vez caracterizada la eficiencia de los sistemas más habitualmente empleados, se pasó a diseñar un nuevo sistema de fácil aplicación y mantenimiento que mejorara la tasa de transferencia y por tanto, disminuyera los costes asociados a la adquisición del gas.

### 1.1 Disolución de gases en líquidos

En las últimas décadas se han diseñado diferentes sistemas para disolver grandes caudales de aire en líquidos o para mejorar la transferencia másica gas-líquido. Los más ampliamente usados actualmente en la industria son los dispositivos de tipo Venturi y los de membrana. Los difusores cerámicos han sido también empleados en plantas industriales pero su uso se restringe cada vez más a líquidos limpios debido a sus problemas de oclusión y necesidades de mantenimiento.

Los dispositivos de tipo Venturi son robustos y pueden producir burbujas pequeñas. Sin embargo, para generar estas burbujas necesitan operar con grandes flujos y altas velocidades, presentando una eficiencia bastante reducida en comparación con otros sistemas. Los mejores resultados conocidos del índice SAE (Standard Aeration Efficiency) para sistemas basados en venturis o en agitadores son menores de 2,5 kgO<sub>2</sub> / kWh. Los difusores de membrana tienen mejor eficiencia de aireación (alrededor de 5 kgO<sub>2</sub> / kWh), razón por la que se han convertido en la solución más común para la aireación (inyección de aire atmosférico). Sin embargo, el tamaño de las burbujas producidas por los difusores de membrana es bastante grande (varios milímetros de diámetro) y por tanto no es una opción válida para gases industriales.

La transferencia de masa depende sustancialmente del tamaño de la burbuja, no solo debido a la relación superficie/volumen sino también porque la velocidad terminal de las burbujas aumenta aproximadamente con el cuadrado del diámetro de la burbuja. Siguiendo esta idea, muchos sistemas se han diseñado para generar burbujas muy pequeñas, incluyendo los que han seguido la configuración denominada de coflujo en la que el gas es inyectado a través de una aguja inmersa en un flujo de líquido paralelo. Estos dispositivos pueden generar burbujas diminutas (incluso de menos de 10 micras), pero si no se incorporan filtros restrictivos para eliminar las partículas en suspensión tienen muchos problemas de obstrucciones. Además el coste de fabricación de estos dispositivos es demasiado alto, ya que están basados en insertar miles de agujas o microcanales de menos de 200 micras, con el objeto de alcanzar los niveles de flujo requeridos en la mayoría de aplicaciones industriales. Por tanto, los sistemas basados en el coflujo se restringen a aplicaciones con bajos requerimientos de caudal de gas en líquidos limpios.

Durante los últimos años, D&BTech en colaboración con la Universidad de Sevilla ha centrado buena parte de sus esfuerzos en la mejora de la disolución de gases, desarrollando y aplicando los sistemas más adecuados a cada situación operativa pero siempre con el denominador común de generar de manera eficiente burbujas pequeñas mediante dispositivos que en la mayoría de los casos fueran eficientes en medios líquidos con partículas sólidas en suspensión.

### 1.2 Remineralización en plantas desaladoras

Todos los procesos de desalinización sean térmicos o de tipo membrana producen agua que debe ser posteriormente tratada para alcanzar la necesaria calidad para el consumo humano.

La calidad del agua después de la remineralización debe asegurar una concentración iónica bien equilibrada y un nivel de contaminantes por debajo de los marcados por Organización Mundial de la Salud (OMS). Igualmente debe garantizarse que la calidad del agua no se degrada durante el proceso de distribución ni sea corrosiva para la red de tuberías.

En este contexto aparece el uso de CO<sub>2</sub> como paso previo para la disolución de sales, generalmente carbonatos.

## 2 GENERACIÓN DE BURBUJAS MEDIANTE FLUJO CRUZADO A ELEVADOS NÚMEROS DE REYNOLDS

La formación de burbujas mediante flujo cruzado tiene como principal característica la inyección de gas en un conducto de sección rectangular. En el laboratorio de Mecánica de Fluidos de la Universidad de Sevilla se han realizado medidas para un amplio número de combinaciones geométricas (variando la altura y anchura del canal, así como el diámetro del orificio en la pared del conducto por el que se inyecta el gas). La corriente de gas se introduce perpendicularmente al canal a través de uno o varios pequeños orificios que se alinean perpendicularmente a la dirección del flujo de líquido.

Los parámetros de control fueron el caudal de agua y el caudal de aire. Además, el diámetro de las burbujas formadas también depende de la geometría de los elementos de generación, principalmente del diámetro de los orificios de inyección de aire,  $d_o$ , y de la altura del conducto,  $h$ . En todos los casos estudiados, el número de Froude y el número de Reynolds fueron mucho mayores de uno. Así, la influencia de la gravedad y viscosidad pudieron obviarse. Los efectos de tensión superficial fueron cuantificados por el número de Webber ( $We$ ) basado en la densidad y velocidad del agua, el diámetro de los orificios de inyección y la tensión superficial.

Una cámara de vídeo de alta velocidad (hasta 600 imágenes por segundo) se empleó para el estudio de formación de burbujas y medir la frecuencia de la generación de burbujas,  $f$  (ver figura 1). Se encontró que debido a los débiles efectos de tensión superficial ( $We > 4$ ), el número de Strouhal,  $f d_o / u_l$  es prácticamente independiente de los parámetros de control y geométricos. En consecuencia, las dimensiones del diámetro de burbuja pueden ser expresados en términos del ratio de velocidad del gas frente a la velocidad del líquido ( $u_g / u_l$ ). Como consecuencia de que el rango de valores del número de Strouhal encontrado es muy estrecho se ha llegado a la relación adimensional  $d_b / d_o = k (u_g / u_l)^{(1/3)}$ , donde la constante  $k$  puede ser obtenida experimentalmente. Esta dependencia se ha verificado para una relación entre la altura del canal y el diámetro de los orificios,  $h / d_o > 0,5$  (figura 2).

Sin embargo, las dimensiones de la constante  $k$  dependen ligeramente de las características del conducto de inyección de gas debido a la influencia de la pérdida de presión en esta línea. Diferentes frecuencias de formación de burbujas son posibles para los mismos caudales de aire y agua si el diámetro de las burbujas se ajusta adecuadamente para cumplir las restricciones de continuidad.

Este estudio nos sirve de fundamento para el análisis y posterior diseño del sistema a emplear para la disolución en los conductos de inyección de  $CO_2$  en el proceso de remineralización. El objetivo es que el dispositivo permita la generación de pequeñas burbujas con elevados caudales de gas. Para bajos ratios de caudal de líquido frente a caudal de aire, el fenómeno de coalescencia es muy frecuente, lo cual reduce la superficie para la transferencia másica entre las fases, así como el tiempo de residencia de las burbujas en el líquido.

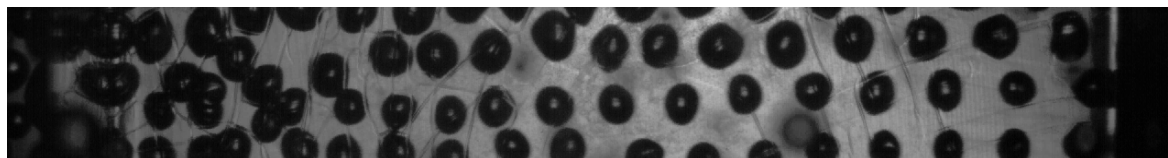


Figura 1. Imagen de las burbujas de aire generadas mediante flujo cruzado, tomadas con una cámara de alta velocidad.

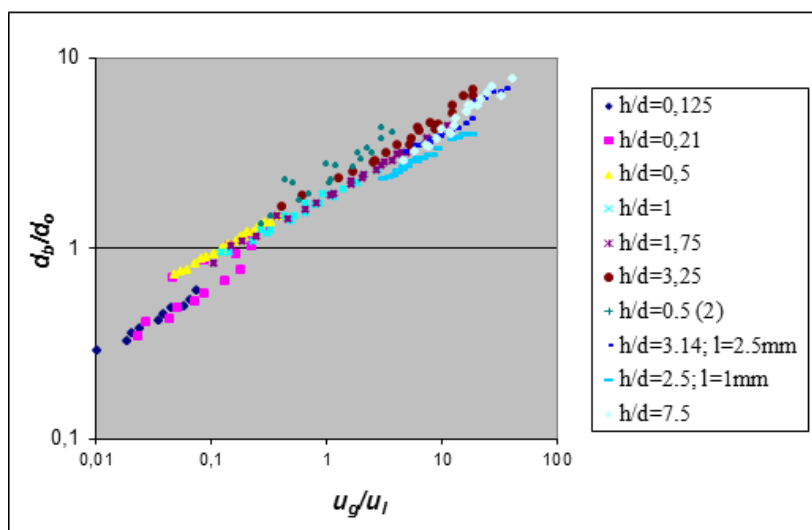


Figura 2: Diámetro de burbuja adimensional frente al cociente velocidad de gas/velocidad de líquido para diferentes configuraciones geométricas.

### 3 ADAPTACIÓN DEL SISTEMA DE FLUJO CRUZADO AL DISEÑO DE UN SISTEMA EFICIENTE PARA DISOLUCIÓN DE CO<sub>2</sub> EN EL PROCESO DE REMINERALIZACIÓN

Una vez presentados los fundamentos de la generación eficiente de burbujas en flujos de líquido, se describe la metodología empleada para la preparación de un difusor adaptado a los conductos y características operativas del proceso de remineralización del agua en las plantas desaladoras.

#### 3.1 Análisis previo

El equipo técnico de D&BTech realizó unos cálculos preliminares para disponer de datos que permitieran evaluar la conveniencia o no de realizar el proyecto de mejora del sistema de disolución de CO<sub>2</sub>.

Para simplificar los cálculos se supuso temperatura constante ( $T = 17^{\circ}\text{C}$ ) y que todo el caudal de CO<sub>2</sub> inyectado se transforma en una corriente uniforme de burbujas de un cierto tamaño impuesto. Se analizó por tanto el fenómeno de disolución de una corriente de burbujas de CO<sub>2</sub> que en el punto de inyección serían de 1, 2 ó 3 mm de diámetro como valores previstos inicialmente (en base a la experiencia previa de D&BTech) para el tipo de difusores que se emplea habitualmente en las plantas desalinizadoras, teniendo en cuenta el diámetro de los orificios y la coalescencia que se produce aguas abajo de la inyección. Se supuso además que las burbujas se movían en un conducto vertical y que los perfiles de velocidad del líquido y del gas eran uniformes. Finalmente, dado que la concentración de CO<sub>2</sub> en el medio en ningún caso se iba a aproximar a la de saturación (en el caso de que se disolviera todo el CO<sub>2</sub> la concentración sería del orden de la centésima parte de la de saturación) también se supuso para simplificar los cálculos que la variación de pH era despreciable y que por lo tanto se podía suponer que los coeficientes de transferencia gas-líquido eran constantes. Esta última suposición podía aportar unos datos diferentes a los del comportamiento real del sistema, en el que la tasa de transferencia de CO<sub>2</sub> al agua sería más reducida.

Con las consideraciones anteriores el modelo para el cálculo de la disolución queda conformado por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\frac{dC}{dz} = \frac{S}{L} \cdot k_1 a \cdot (C^* - C)$$

$$\frac{dG}{dz} = \rho_l S \cdot k_l a \cdot (C - C^*)$$

Donde:

- $C$  (kg/kg) es la concentración de  $\text{CO}_2$  en el medio.
- $G$  (kg/s) es el caudal másico de gas no disuelto en el medio.
- $C^*$  (kg/kg) es la concentración de  $\text{CO}_2$  en la interfase.
- $L$  ( $\text{m}^3/\text{s}$ ) es el caudal de operación de líquido.
- $k_l$  (m/s) es el coeficiente de transferencia de masa característico del proceso.
- $a$  ( $1/\text{m}$ ) es la superficie específica de intercambio de masa.
- $\rho_l$  ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) es la densidad del líquido.
- $S$  ( $\text{m}^2$ ) es la sección de paso de la tubería.

El modelo anterior, de dos ecuaciones para el cálculo de la concentración en el medio y del caudal másico no disuelto, debe completarse con las correspondientes ecuaciones asociadas a la termodinámica y a la fenomenología de la transferencia de masa convectivo-difusiva que rigen el proceso analizado. Las relaciones introducidas son las siguientes:

- Ley de Henry para la concentración en la interfase:  $C^* = P_{op} H$
- Correlación de Franz-Marshall:  $Sh = 2 + 0,6 Re_t^{1/2} Sc^{1/3}$
- Número de Sherwood:  $Sh = \frac{k_l d_b}{D}$
- Número de Schmidt:  $Sc = \frac{\nu}{D}$
- Número Reynolds referido a la velocidad terminal:  $Re_t = \frac{v_t d_b}{\nu}$
- Superficie específica de intercambio:  $a = \frac{6\alpha(1-\alpha)}{d_b}$

En las relaciones anteriores se han utilizado los parámetros siguientes:

- $P_{op}$  (Pa) es la presión de operación.
- $H$  (1/Pa) es la constante de Henry de la mezcla líquido gas.
- $d_b$  (m) es el diámetro instantáneo de las burbujas de gas.
- $D$  ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) es la difusividad másica de la mezcla líquido - gas.
- $\nu$  ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) es la viscosidad cinemática del líquido.
- $\alpha$  (-) es la fracción volumétrica de gas.
- $v_t$  (m/s) es la velocidad terminal de las burbujas de gas en el seno del líquido.

Se ha optado por introducir la velocidad terminal como la característica del intercambio por la conjunción de los hechos siguientes:

- La transferencia de masa es dada por la velocidad relativa entre las fases.
- Dado el pequeño tamaño de las burbujas, la velocidad característica de las mismas será la velocidad terminal durante la mayor parte de su movimiento. Esto sólo se incumple durante los instantes iniciales, cuando la burbuja sufre una aceleración que la lleva desde su velocidad inicial hasta su velocidad terminal. Como se mostrará a continuación, para el rango de tamaños considerado el número de Stokes es tan pequeño que resulta lícito suponer que la escala de tiempos mecánica es mucho menor que la escala de tiempos de la transferencia de masa. Por tanto, podemos suponer sin mayor inconveniente que la velocidad característica durante todo el proceso es la velocidad terminal.

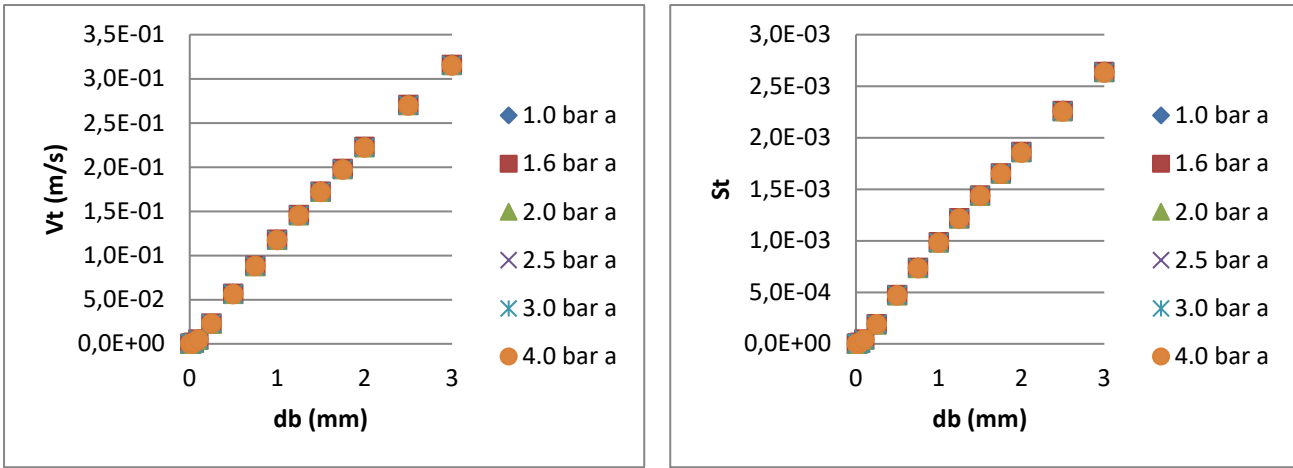


Figura 3: Velocidad terminal y número de Stokes para distintos tamaños y presiones de operación.

Tras los apuntes anteriores se exponen los parámetros de operación y los resultados del modelo:

- Presión de operación: 1.6 bar
- Caudal de líquido: 315 m<sup>3</sup>/h
- Normal caudal de gas: 4.20 Nm<sup>3</sup>/h
- Gasto másico de gas: 8.23 kg/h
- Máxima concentración posible en el medio (disolución completa): 26.12 mg/kg
- Concentración de saturación: 3086.56 mg/kg
- Diámetro de la tubería: 30 cm

A partir de los parámetros mostrados, se analizan los casos correspondientes a tamaño inicial de burbuja igual a 1, 2 y 3 mm. En las siguientes figuras se observa la evolución de la concentración de CO<sub>2</sub> en función de la distancia recorrida en el conducto para los tres diámetros iniciales de burbuja supuestos:

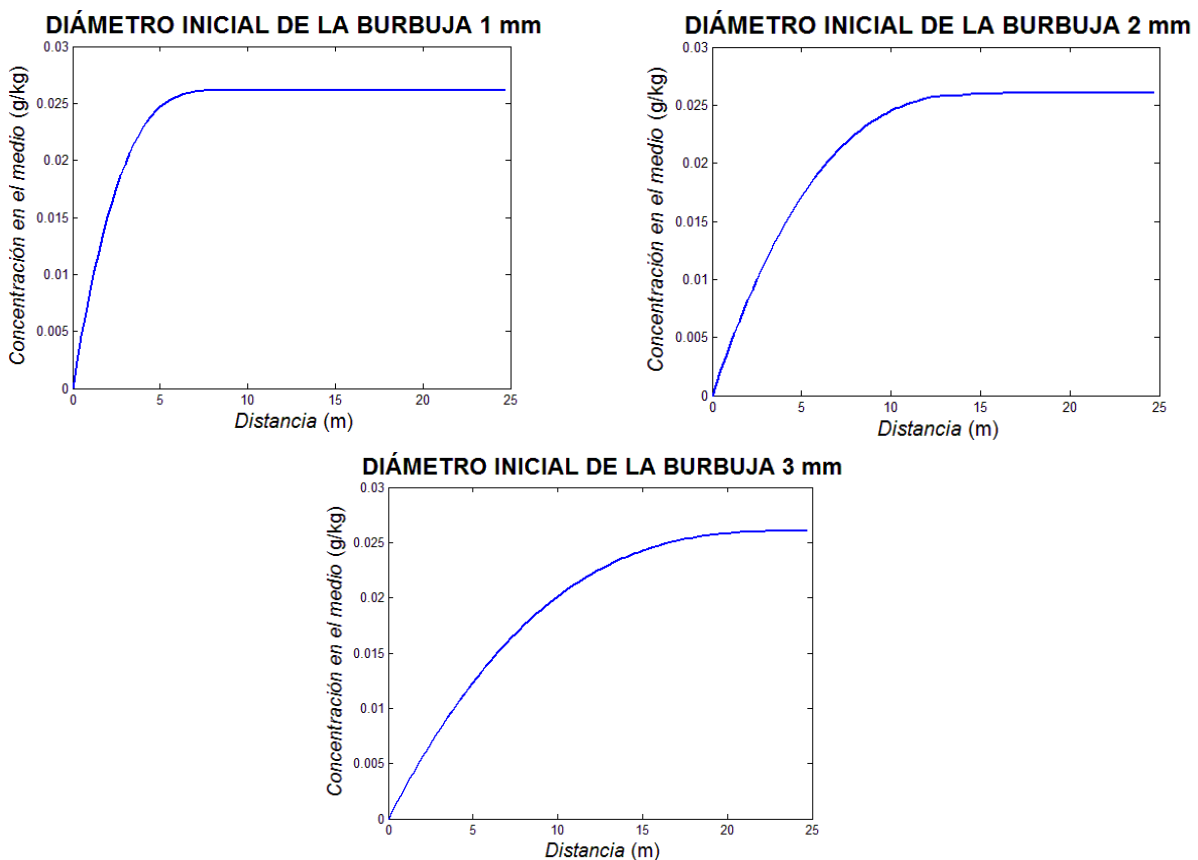


Figura 4. Evolución de la concentración de CO<sub>2</sub> en función de la distancia recorrida en el conducto.

Como se puede observar, la concentración de CO<sub>2</sub> aumenta hasta llegar a un valor que en el que todo el gas contenido en las burbujas se ha disuelto, ya que en esta evolución el volumen de las burbujas se va reduciendo hasta que finalmente desaparecen.

La evolución del gasto másico de gas no disuelto se puede visualizar en las gráficas siguientes:

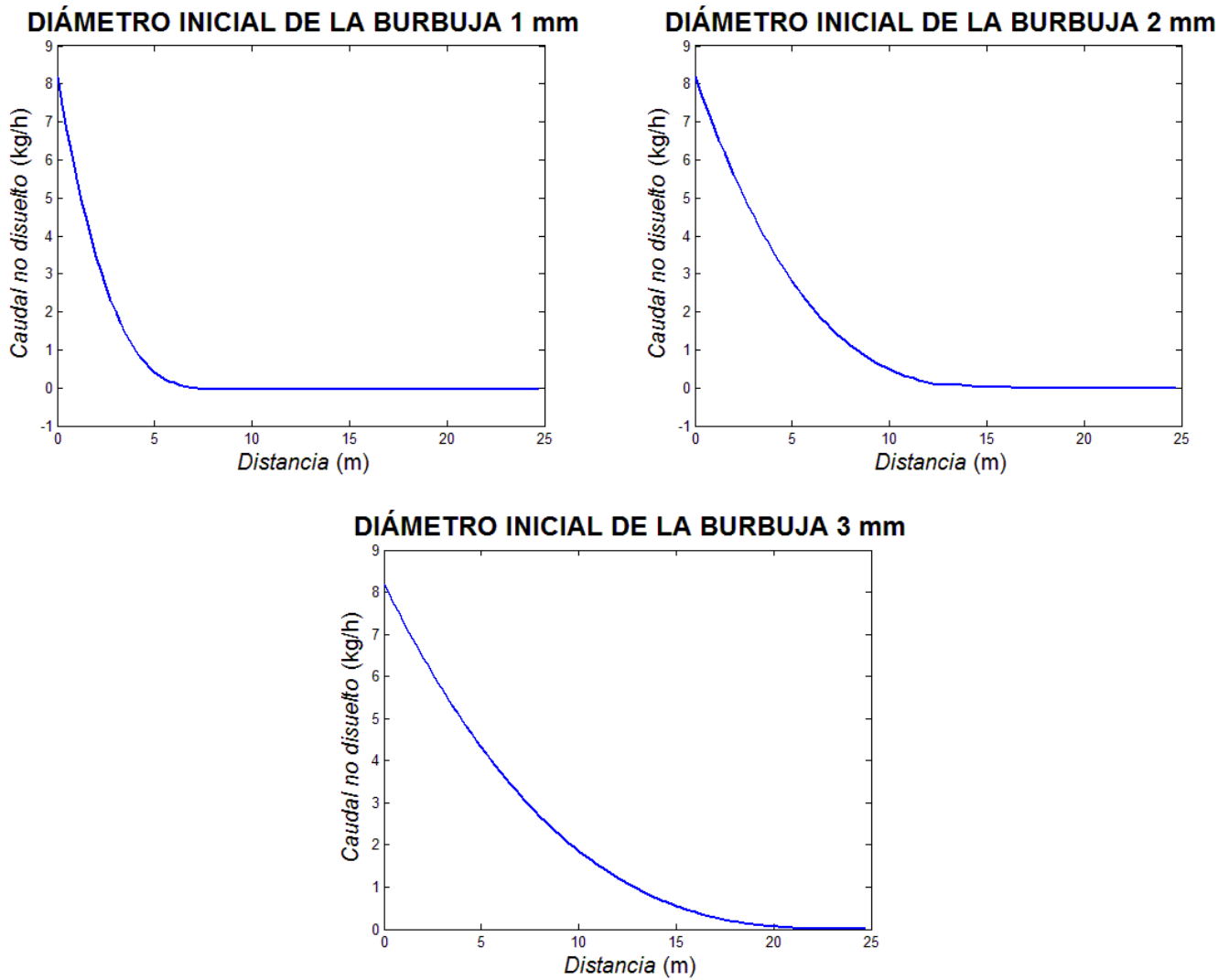


Figura 5. Evolución del gasto másico no disuelto de CO<sub>2</sub> en función de la distancia recorrida en el conducto.

De la simple inspección de las gráficas de evolución de la concentración se puede deducir que la disolución del gas sigue, como sistema físico, una dinámica de primer orden regida por una ecuación del tipo:

$$C(t) = C_{m\acute{a}x} \left( 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right)$$

El cambio de variable independiente de distancia a tiempo se realiza mediante la velocidad media del flujo de líquido:

$$V_l = \frac{L}{S} = 1,24 \text{ m/s}$$



La constante de tiempo en cada caso se obtuvo mediante la minimización del error del ajuste usando el algoritmo SIMPLEX, obteniéndose los siguientes valores:

Tamaño inicial de la burbuja	Constante de tiempo
1 mm	1,71 s
2 mm	3,56 s
3 mm	5,52 s

Para el rango de tamaños de interés vemos que la constante de tiempo depende muy aproximadamente ( $R^2 = 0,999$ ) de forma lineal con el tamaño inicial de las burbujas:

$$\tau = 1,906d_{b0} - 0,215$$

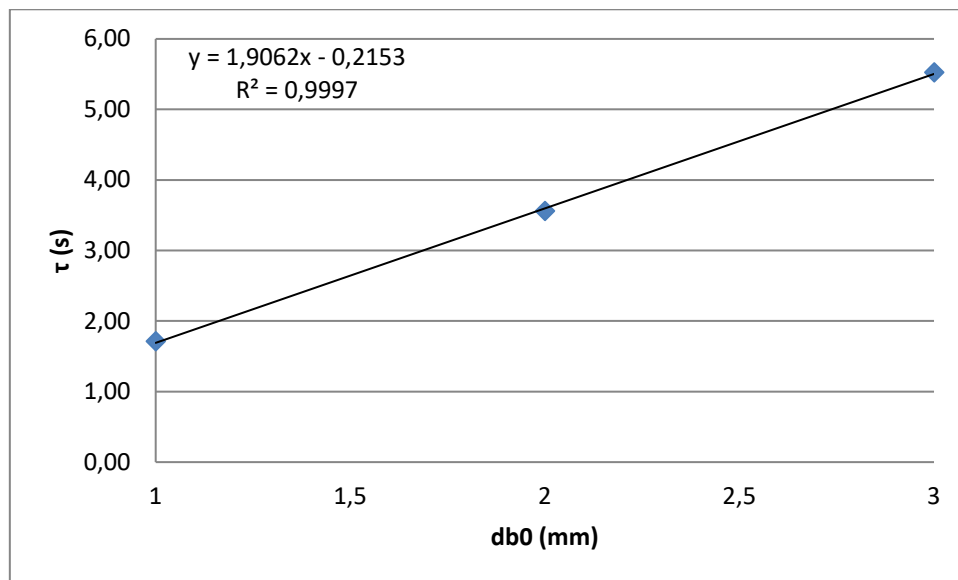


Figura 6. Ajuste de la constante de tiempo en función del tamaño inicial de burbuja.

Con el objetivo de evaluar la distancia requerida para la disolución con un cierto margen de seguridad, se evaluará, haciendo uso de la dinámica de primer orden, la distancia necesaria para alcanzar una disolución del 90% del caudal inicial. Este resultado se obtiene de la expresión siguiente:

$$t_{90\%} = -\tau \ln(0.1)$$

$$\Delta Z_{90\%} = 1.24 t_{90\%}$$

Combinándolas, se encuentra la distancia para la disolución del 90% del caudal másico en función del tamaño inicial de las burbujas de gas:

$$\Delta Z_{90\%} = 5.44 d_{b0} - 0.613$$

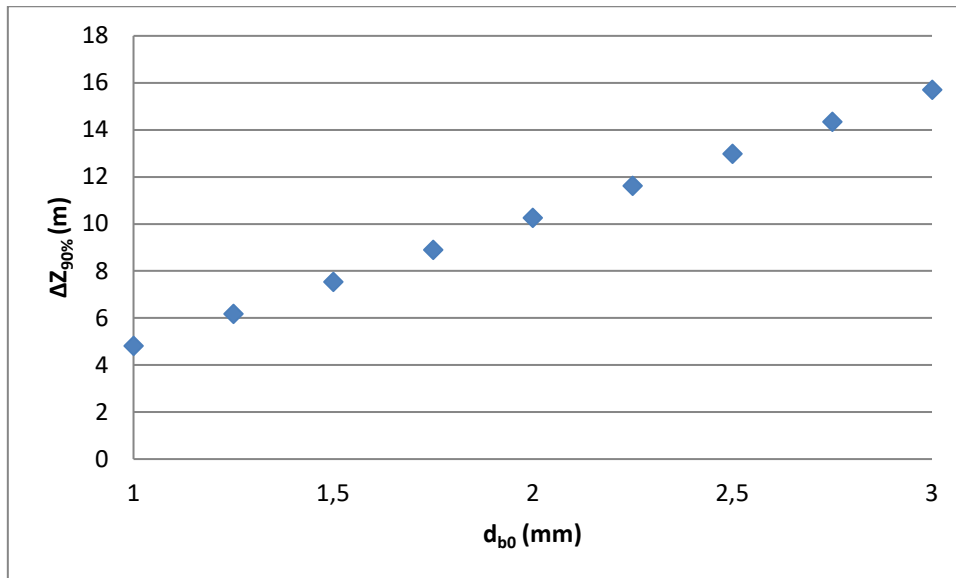


Figura 7. Distancia requerida para la disolución del 90% del caudal de gas en función del tamaño inicial.

Los resultados muestran que las distancias típicas para la disolución del  $\text{CO}_2$  en el caso estudiado son del orden de los 10 metros, incluso para el caso más favorable de diámetro de burbujas del orden de 1 mm. Probablemente el diámetro medio será superior por el efecto de la coalescencia entre burbujas y además el efecto de la reducción del pH aumentará más la longitud necesaria para la disolución completa.

Por tanto, cuando el recorrido desde el punto de inyección hasta la descarga en un depósito en contacto con la atmósfera sea inferior a la requerida en función de los parámetros operativos, no se disolvería el 100% del  $\text{CO}_2$  inyectado y por tanto habría margen para reducir el consumo de este gas. En el caso de que la caída de pH sea notable el margen de mejora que se podría conseguir sería aún mayor.

### 3.2 Simulaciones Numéricas CFD (Computational Fluid Dynamics)

El análisis del proceso de transferencia de  $\text{CO}_2$  mediante Simulación Numérica CFD se realizó empleando el software Fluent® (Ansys Corp.) aplicado a las geometría y parámetros operativos de un caso concreto. Igualmente se empleó esta herramienta en el diseño del dispositivo que se presenta en el siguiente punto de este epígrafe.

- Configuración actual con los caudales de líquido y gas con los que se opera habitualmente en plantas desalinizadoras, utilizando valores de las propiedades físicas de los fluidos y de las constantes químicas a una temperatura de referencia. Generación de geometría en modelo 3D, mallado y simulación del flujo bifásico  $\text{CO}_2$  – agua. Determinación de la concentración de  $\text{CO}_2$  desde el punto de inyección hasta el final del conducto de disolución (descarga en depósito).
- Análisis y planteamiento de configuraciones alternativas viables. Generación de la geometría en modelo 3D, mallado y simulación de las alternativas.
- Determinación de la configuración óptima y obtención de los nuevos parámetros de operación con los que podría trabajar la planta para varios caudales de líquido. En particular se obtendrían los datos de la tasa de disolución alcanzada.

En las siguientes figuras se muestran algunas capturas de las que proporciona esta herramienta de Simulación CFD.

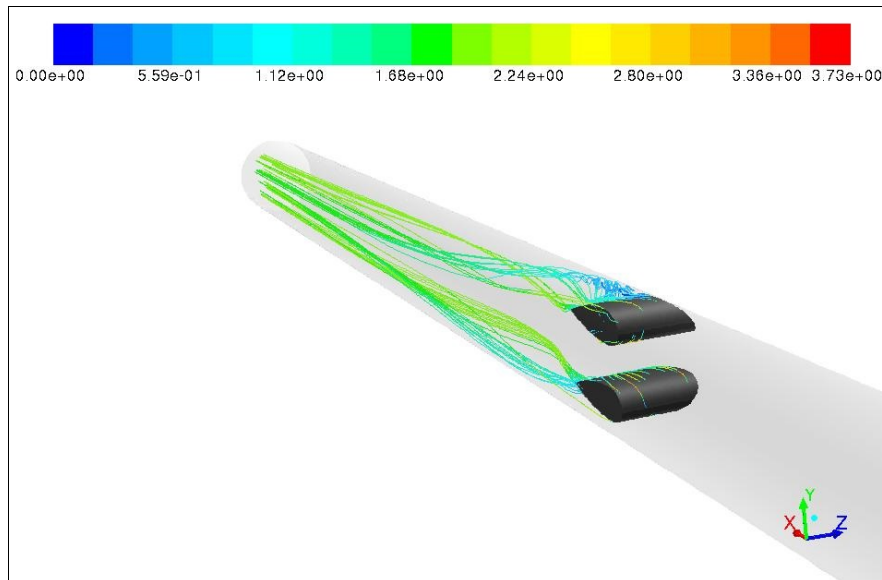


Figura 8. Líneas de corriente en el interior del conducto a través de los álabes-inyectores diseñados.

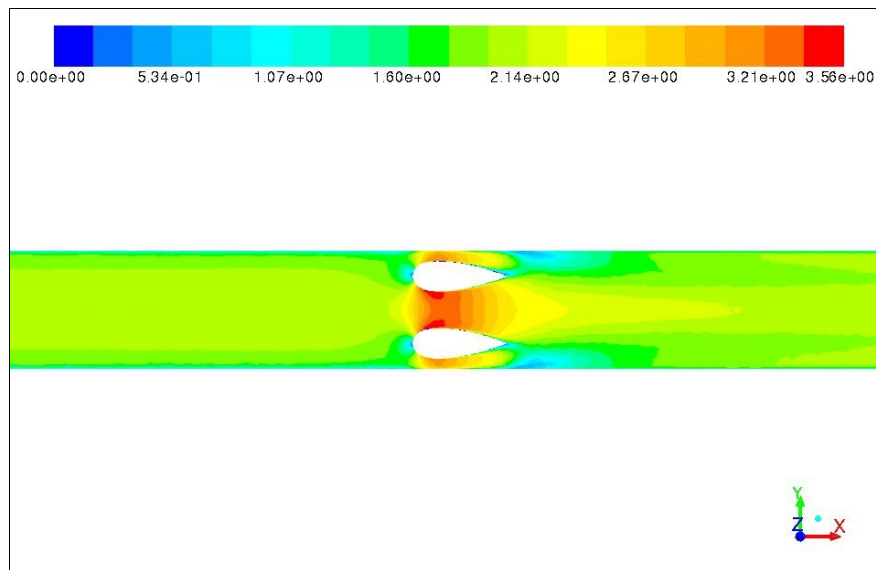


Figura 9. Distribución de velocidades en el interior del conducto de disolución (tras inserción del nuevo dispositivo generador de burbujas).

### 3.3 Elemento final. Características

El último paso del trabajo realizado consistió en el diseño del dispositivo de difusión adaptado específicamente al proceso estudiado. Tras una prospección de los equipos que se comercializan actualmente, se propuso el uso de un difusor de flujo cruzado, basado en patentes de la Universidad de Sevilla de las que el personal de D&BTech y sus promotores son inventores. Es una tecnología que se basa en generar burbujas de tamaño reducido gracias al paso de una corriente de líquido por encima de los orificios de inyección, al mismo tiempo que se cuida extremadamente la geometría para reducir al máximo la probabilidad de los fenómenos de coalescencia.

Las siguientes figuras muestran unas vistas de este sistema para disolución de CO<sub>2</sub> en línea, a la izquierda la pieza que se introduce en el lateral de una T y a la derecha una sección de dicha T con la pieza ya insertada.

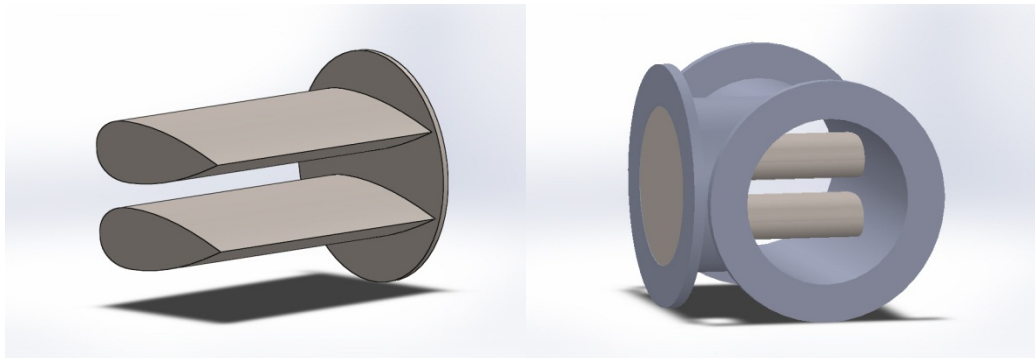


Figura 10. Vistas del difusor concebido para la optimización de la transferencia de CO<sub>2</sub> en procesos de remineralización

Como puede observarse el sistema está pensado para ser fácilmente desmontable para operaciones de mantenimiento. Los orificios de inyección quedan dispuestos por encima y debajo de los cuerpos fuselados, de forma optimizada para evitar la coalescencia entre burbujas y al mismo tiempo reducir las pérdidas de carga del dispositivo.