

---

## Simulación CFD de reactor a escala piloto para la eliminación de compuestos orgánicos volátiles (COVs)

Colman Lerner, J.E.<sup>1,\*</sup>, Del Sole, M.B<sup>2</sup>, Dubois, F.I<sup>1</sup>, Sambeth J.E<sup>1</sup>, Porta A.A<sup>2</sup>, Sanchez E.Y<sup>2</sup>

*1 Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas "DR. JORGE J. RONCO "CINDECA" (CONICET-UNLP-CICPBA), Calle 47 N° 257 (CP 1900) La Plata - Buenos Aires - Argentina*

*2 Centro de Investigación del Medio Ambiente "CIM" (CONICET-UNLP-CICPBA), Blvd. 120 1476 (CP 1900), La Plata-Buenos Aires-Argentina.*

*\*jecolman@quimica.unlp.edu.ar*

**Palabras Claves:** COVs, Monolitos, CFD

---

### Resumen

Este trabajo reporta resultados preliminares en la simulación fluidodinámica mediante el uso del software ANSYS CFD, de un reactor a escala piloto probado experimentalmente para la eliminación de COVs (tolueno, etilbenceno, metiletilcetona y xilenos). El reactor está construido a partir de la modificación de un extractor de aire comercial y se ha evaluado satisfactoriamente para la eliminación de COVs utilizando catalizadores a base de Mn, Ce y Pt sobre monolitos cerámicos (bentonita). Mediante la simulación con ANSYS CFD se pudo representar el flujo en el reactor (validando con datos experimentales) y simular el flujo en los canales de los monolitos. Esta información permitirá tener a futuro un mejor entendimiento de la fluidodinámica en los catalizadores y poder simular las reacciones con diferentes COVs mediante ANSYS CFD acoplado a ChemKin-PRO.

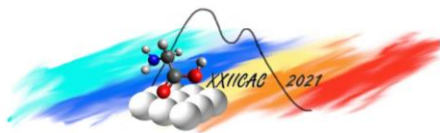
---

### Abstract

This work reports preliminary results on the fluid dynamic simulation using ANSYS CFD software of a pilot scale reactor experimentally tested for the removal of VOCs (toluene, ethylbenzene, methyl ethyl ketone and xylenes). The reactor is constructed from the modification of a commercial air stripper and has been successfully evaluated for the removal of VOCs using Mn, Ce and Pt based catalysts on ceramic monoliths (bentonite). By means of ANSYS CFD simulation it was possible to represent the flow in the reactor (validating with experimental data) and to simulate the flow in the monolith channels. This information will allow us to have a better understanding of the fluid dynamics in the catalysts and to simulate the reactions with different VOCs by combining ANSYS CFD with ChemKin-PRO.

---

*La primera página del trabajo (título, autores, filiación, palabras claves, resumen y abstract) no deberá extenderse más de una carilla. La introducción deberá comenzar en la primera línea de la segunda página.*



## Introducción

Los compuestos orgánicos volátiles (COVs) son importantes agentes contaminantes antropogénicos que suelen tener altos niveles en zonas urbanas e industriales. Asimismo, cobran importancia en lugares cerrados debido a que los seres humanos estamos alrededor de un 80% de nuestro tiempo en espacios interiores, y algunos autores [1-4] señalan que la concentración de los mismos puede ser varias veces superior a los niveles exteriores. Las fuentes internas de COVs son, entre otros, pegamentos, productos de limpieza y farmacéuticos, perfumes, cigarrillos, la cocción de alimentos, pinturas y solventes [2].

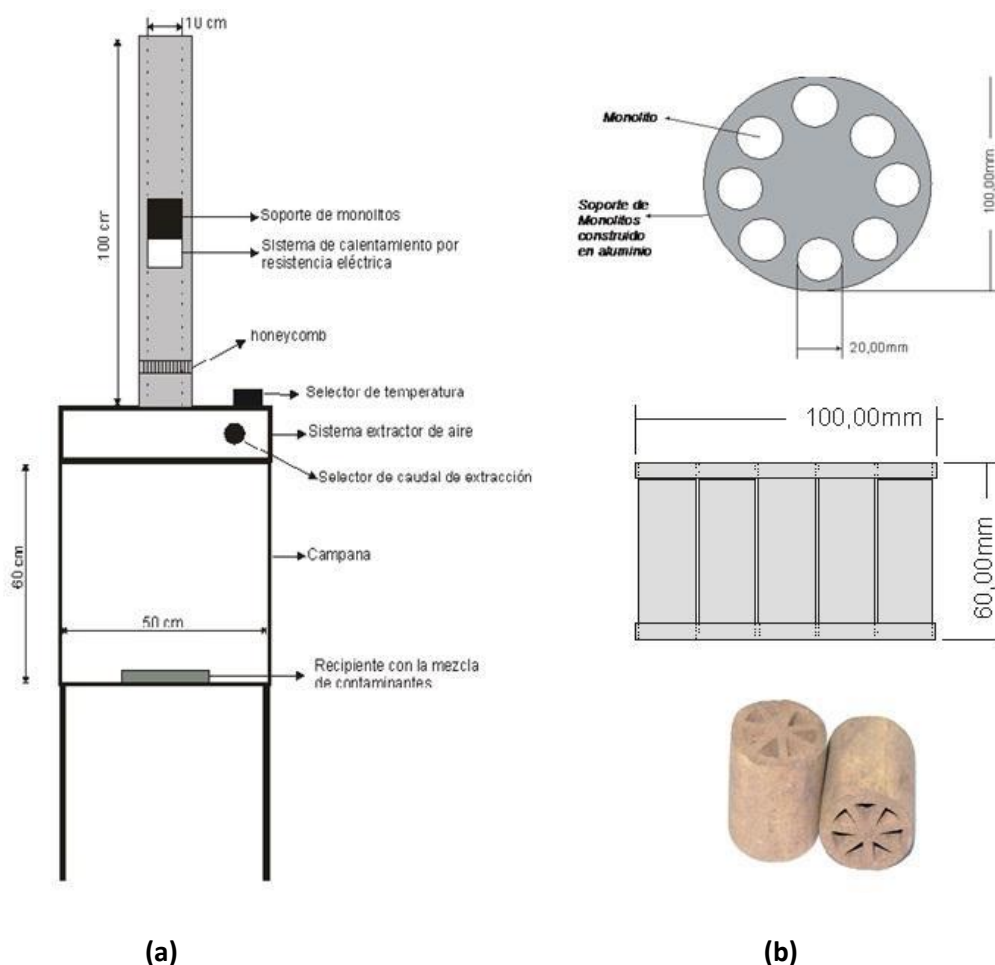
La dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) aporta flexibilidad, precisión y amplitud de aplicación sorprendente. ANSYS CFD si bien es un software comercial, posee importantes capacidades de análisis de flujo, con interfaz de nivel superior, que une todos los módulos de cálculo (geometría- mallado- solver- postprocesamiento). ANSYS contiene un conjunto de herramientas poderosas y confiables que complementa a las prácticas convencionales de ingeniería de reactores. Posee capacidades que abarcan a la mecánica de fluidos, mecánica estructural, análisis de impacto y seguridad, herramientas de mezcla personalizadas, análisis de recipientes a presión, sistemas electromagnéticos y de control, y análisis de transferencia de calor y de masa. ANSYS puede modelar una amplia gama de reacciones, incluidas las gaseosas y líquidas, monofásicas y multifásicas, homogéneas y heterogéneas. El módulo ANSYS Fluent es el software de simulación de fluidos que se utiliza para predecir el movimiento de fluidos, la transferencia de calor y masa, las reacciones químicas y otros fenómenos relacionados. Conocido por ofrecer las soluciones más precisas de la industria sin compromiso, las capacidades de modelado físico avanzado de Fluent incluyen modelos de turbulencia de vanguardia, flujos multifásicos, transferencia de calor, combustión, optimización de formas, multifísica y mucho más. ANSYS CFD, se puede usar para una gran variedad de problemas monofásicos y multifásicos, que incluyen flujo a través de lechos compactos, papeles de filtro, placas perforadas, distribuidores de flujo y bancos de tubos [5-8].

Este trabajo presenta los resultados preliminares de la simulación fluidodinámica mediante ANSYS CFD de un reactor a escala piloto, probado experimentalmente para la eliminación de COVs (tolueno, etilbenceno, metiletilcetona y xilenos). El reactor está construido a partir de la modificación de un extractor de aire comercial y se ha evaluado satisfactoriamente para la eliminación de COVs utilizando catalizadores a base de Mn, Ce y Pt sobre monolitos cerámicos (bentonita) [9].

## Experimental

### *Reactor a escala piloto*

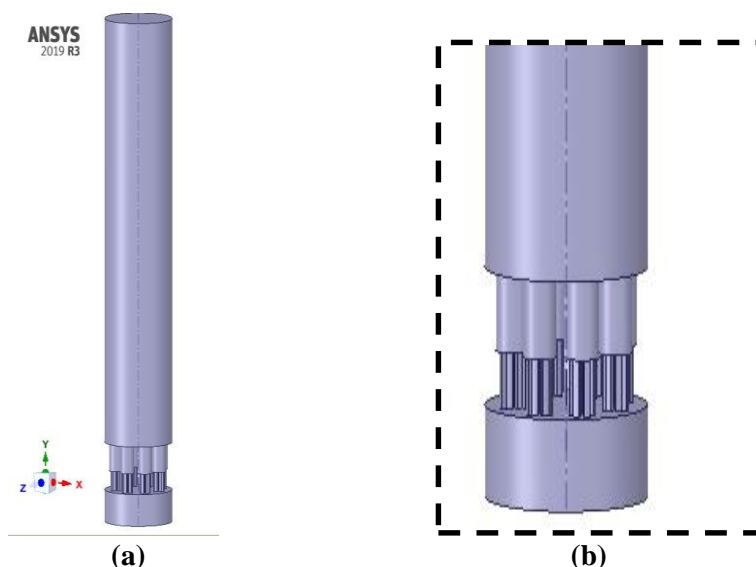
El reactor simulado es un sistema purificador de aire (marca Spar), al cual se le adaptó una chimenea con un sistema catalítico calefaccionado mediante un sistema de resistencias eléctricas, en el ducto de salida del extractor (Figura 1a). La construcción del sistema (ducto de hierro con cámara aislante envolvente para evitar pérdidas de calor) fue realizada para lograr aproximadamente un 10% del caudal mínimo en industrias PyMES que se estima en  $0,33 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$  [6], siendo caudal volumétrico de los gases de  $1,3 \text{ m}^3 \text{ min}^{-1}$ , calculado con las normas ASTM D3154 [9]. Los monolitos cerámicos (Figura 1b) utilizados en este trabajo se prepararon a partir de  $\text{Al}(\text{OH})_3$ , Gibbsita de Alcan y una bentonita patagónica en una relación 1:0.7:0.1. Los monolitos se realizaron de forma cilíndrica (1,8 cm de diámetro y 2 cm altura) con canales triangulares (densidad de la celda de 3,1 celdas  $\text{cm}^2$ ), impregnados con Pt, Mn, Ce, colocados en soporte de aluminio. Los mismos al ser evaluados en la combustión de tolueno, etilbenceno, metiletilcetona y xilenos se lograron conversiones (combustión a  $\text{CO}_2$ ) mayores al 90% por debajo de los  $300^\circ\text{C}$ . [9].



**Figura 1: (a) reactor a escala piloto; (b) monolito y vistas del soporte de los monolitos**

#### *Simulación con ANSYS CFD*

La simulación fluidodinámica del reactor (desacoplada de la reacción de combustión) en condiciones experimentales operativas se llevó a cabo mediante el software ANSYS CFD 19.3 (licencia académica) en un cluster de 1 servidor y 2 nodos (HP ProDesk 400 G3, Intel® Core™ i5-6500, 8 GB SDRAM, 1Tb). La geometría se diseñó en SpaceClaim (Figura 2). El mallado se construyó utilizando ANSYS Meshing, aplicando una malla tetraédrica de 79389 elementos, de buena calidad acorde a los estadísticos Skewness y Orthogonal Quality. La malla se levantó con ANSYS Fluent, ejecutando una modelización en estado estacionario con un modelo de turbulencia RANS  $k-\epsilon$  realizable con la opción de tratamiento de pared mejorado. Para resolver las ecuaciones se utilizó un método de acoplamiento de presión velocidad con algoritmo COUPLED, con discretización espacial de segundo orden para todas las variables. El perfil de velocidad de entrada al ducto (previo al pasaje de los monolitos) fue representado parabólico acorde a los datos experimentales. Las condiciones termodinámicas fueron representadas con modelos de convección. Los resultados obtenidos se validaron con mediciones experimentales de velocidad y temperatura (antes y después del soporte de los monolitos) durante los ensayos de reacción catalítica. Las propiedades físicas de los diferentes materiales y las condiciones iniciales de simulación se muestran en la Tabla 1.



**Figura 2. Geometría del dominio computacional fluidodinámico (a) vista completa, (b) zoom a los monolitos.**

**Tabla 1:** Propiedades físicas de los materiales que componen el reactor utilizadas para simular.

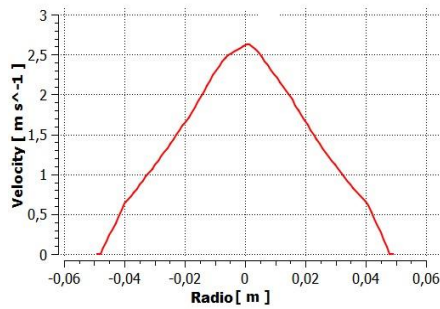
	Monolitos	Ducto	Soporte monolitos
Material	bentonita	hierro	Aluminio
Densidad (kg/m <sup>3</sup> )	2600	7874	2700
Calor específico "Cp" (J/kg K)	859	450	897
Conductividad térmica (w/m K)	1.0	80.2	237

## Resultados y discusión

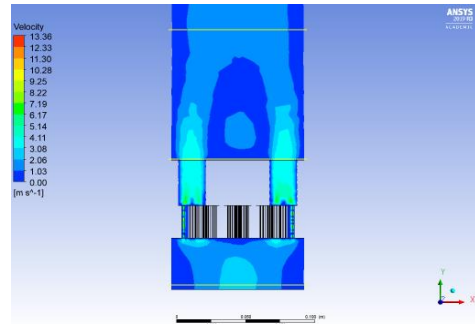
La simulación se llevó a cabo para dos escenarios, (1) con temperatura de entrada al reactor ( $T_{in}$ ) de 100 °C y, (2) con  $T_{in}$  de 300 °C, ambos con perfiles de velocidad parabólico de entrada (máx. 2.61 m/s), medido experimentalmente, (Figura 3a). En las figuras 3b a 3d se muestran los resultados obtenidos para la distribución de velocidades en ambos escenarios. En las figuras 4 y 5 se muestran los resultados para la distribución de temperaturas en los escenarios 1 y 2, respectivamente. Los resultados obtenidos con la simulación se compararon con valores experimentales de velocidad y temperatura medidos en el reactor, obteniendo resultados similares que han sido validados con el FB (Fractional Bias) =  $(Co - Ce) / [0.5 * (Co + Ce)]$ , donde Co representa a los valores observados y Ce a los valores estimados, valores de FB=0 representan simulaciones acordes a la realidad. Los mismos se presentan en la Tabla 2.

$V_{out}$  representa la velocidad observada en el eje central del ducto, a 10 cm de la salida del tambor.  $T_{out}$  fue observada en el eje central del ducto, a la salida del tambor (soporte de monolitos).  $V_{in}$  y  $T_{in}$ , se observaron al ingreso del ducto, antes de atravesar los canales del monolito.

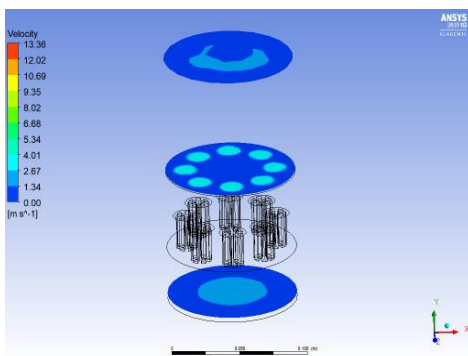
Dentro de los canales la velocidad media obtenida en la simulación es de 1.54 m/s, con un valor máximo de 4.11 m/s, y temperatura de 277 °C. Estos resultados sirven como valores de entrada para poder simular, en una próxima etapa, reacciones de combustión catalítica utilizando el módulo ChemKin PRO del paquete ANSYS.



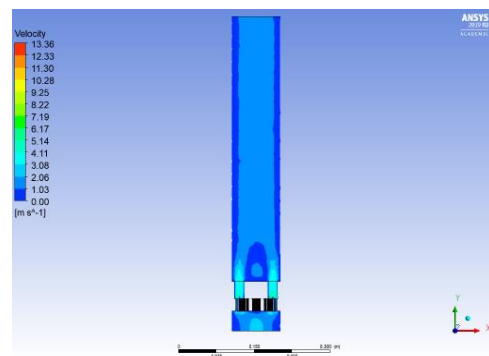
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 3. (a) Perfil de velocidades de entrada; (b)-(d) resultados de la distribución de velocidades obtenidas mediante la simulación con ANSYS CFD.

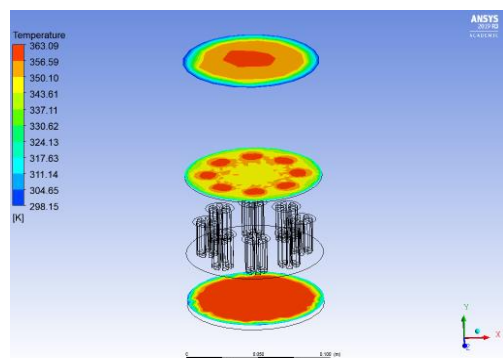
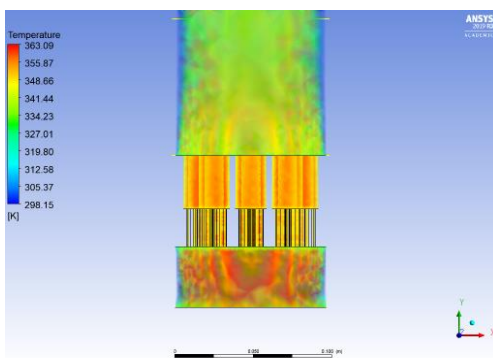
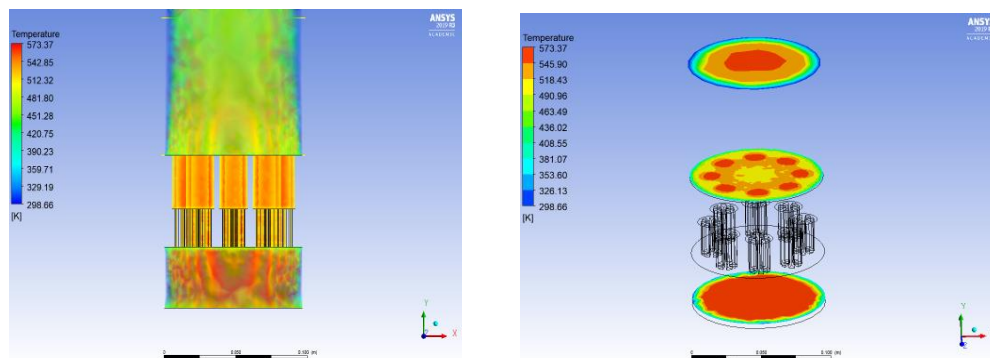


Figura 4. Distribución de temperaturas obtenidas mediante la simulación con ANSYS CFD, para el escenario 1



**Figura 5. Distribución de temperaturas obtenidas mediante la simulación con ANSYS CFD, para el escenario 2.**

**Tabla 2:** Resultados experimentales y obtenidos en la simulación.

	Experimental_1	Simulado_1	Experimental_2	Simulado_2
$T_{in}$ (°C)	100	100	300	300
$T_{out}$ (°C)	75	77	230	242
$FB$		-0,03		-0,05
$V_{in}$ (m/s)	2,7	2,61	2,7	2,61
$V_{out}$ (m/s)	1,2	1,24	1,2	1,24
$FB$		-0,03		-0,03

### Conclusiones

Los resultados preliminares de la simulación CFD mostraron una excelente correspondencia con los resultados experimentales para la simulación fluidodinámica y térmica del reactor en condiciones de operación, con valores absolutos de  $FB$  comprendidos entre 0,03 y 0,05. Dichos avances, permitirán realizar simulaciones de reacciones de combustión catalítica mediante el módulo ChemKin PRO y también estudiar diferentes geometrías de soportes para mejorar la performance del reactor a escala piloto.

### Referencias

- [1] Z. Guo, Environm. Pollution 533, (2002) 120.
- [2] M. Sun Kou, M. Montes M., G. Picasso, J. Sambeth ““Eliminación de emisiones atmosféricas de COVs por catálisis y adsorción” Ed. CYTED Cap.4, 2008 p.18.
- [3] US-EPA “Consumer and Comercial Solvent Use”. 1996 <http://www.epa.gov/ttn/chieftechreport/volume3/iii05.pdf>
- [4] A. Borbon, H. Fontaine, N. Locoge, M. Veillort, J. Galloo Atmosp.Environm. 4051–4064, (2003) 37.
- [5] Atmakidis, T., & Kenig, E. Y. Chemical Engineering Journal, 155(1-2) (2009), 404-410.
- [6] Augier, F., Idoux, F., & Delenne, J. Y. Chemical Engineering Science, 65(3) (2010), 1055-1064.
- [7] Pavlišič, A., Pohar, A., & Likozar, B. Powder Technology, 328 (2018), 130-139.
- [8] Wehinger, G. D., Klippel, F., & Kraume, M. Computers & Chemical Engineering, 101(2017), 11-22.
- [9] Colman Lerner J.E (2013). Tesis Doctoral, Facultad de Ciencias exactas, UNLP. [http://sedici.unlp.edu.ar/bitstream/handle/10915/27002/Documento\\_completo.pdf?sequence=1&isAllowed=y](http://sedici.unlp.edu.ar/bitstream/handle/10915/27002/Documento_completo.pdf?sequence=1&isAllowed=y)