

AVALIAÇÃO DE MODELOS DE TURBULÊNCIA RANS NA PREVISÃO DA PERDA DE CARGA EM REATORES DE LEITO POROSO PREENCHIDO COM ESPUMA ESTRUTURADA UTILIZANDO A FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD).

D. V. R. FONTOURA¹, S. M. CARDENAS¹ e J. R. NUNHEZ¹

¹ Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Faculdade de Engenharia Química
E-mail para contato: nunhez@feq.unicamp.br

RESUMO – A utilização de espumas estruturadas de células abertas de elevada área superficial ganha importância em aplicações industriais como, por exemplo, no recheio de reatores de leito poroso. A espuma fornece maior eficiência energética e menor perda de carga ao se comparar com outros recheios. Este trabalho consiste em simular através da fluidodinâmica computacional (CFD) o escoamento através de um volume da espuma aplicando diferentes modelos de turbulência baseados nas equações médias de Reynolds (RANS) a fim de obter uma previsão para a perda de carga ao longo do reator. Ao simular detalhadamente as características do recheio, pretende-se em uma etapa futura incorporar a influência do escoamento externo ao recheio ao reator completo proporcionando, desta forma, uma descrição muito mais pormenorizada do que acontece no recheio deste tipo de reator. Os resultados numéricos obtidos através da simulação com CFD são comparados com a queda de pressão prevista por correlações empíricas.

1. INTRODUÇÃO

No campo da engenharia de reatores, meios porosos são amplamente aplicados para reações catalíticas. Reatores empacotados tais como monólitos, encamisados, espumas e outros recheios estruturados são testados e utilizados em sistemas com fluxos multifásicos devido à sua melhoria no desempenho hidrodinâmico em comparação por exemplo a utilização de partículas esféricas mais convencionais ou anéis de Raschig. As principais vantagens do reator empacotado estruturado são: uma grande área de superfície externa; uma elevada resistência mecânica; uma elevada porosidade e uma baixa perda de carga resultante. A melhor compreensão da fluidodinâmica nos recheios de espuma estruturada é importante para o projeto e investigação de novas configurações com objetivo de se obter a mínima perda de carga no leito catalítico, enquanto se alcança uma alta eficiência em conversão (Said *et al.*, 2011). A determinação da perda de carga através de um leito empacotado é uma função da vazão, restrições geométricas e das propriedades físicas do material do leito. A perda de carga é um parâmetro muito importante na seleção e utilização de sistemas de escoamento (Ozahi *et al.*, 2008).

2. METODOLOGIA

2.1. Correlações empíricas para previsão da perda de carga ao longo da espuma estruturada de células abertas.

No passado, muitas experiências para a determinação da perda de carga de sistemas monofásicos em leitos de espumas cerâmicas e metálicas foram realizadas por vários pesquisadores. Alguns destes autores desenvolveram correlações para calcular a perda de carga. Uma revisão da literatura sobre o assunto foi publicada no trabalho de Edouard *et al.* (2008). Na maioria das vezes, estes autores trabalharam com fluidos conhecidos, como a água ou o ar em um intervalo limitado de Reynolds com base nos valores experimentais em alguns tipos de espumas estruturadas. Dietrich *et al.* (2009) apresentaram resultados experimentais das medições de perda de carga para diferentes espumas cerâmicas e obtiveram uma correlação matemática com base na equação de Ergun. Em um artigo posterior, compararam sua correlação com mais de 2500 pontos experimentais encontrados na literatura, incluindo diversos fluidos e também testado adicionalmente para espuma cerâmica e metálica. De acordo com os autores, a perda de carga pode ser estimada através da correlação proposta com alto grau de satisfação. Comparando com dados da literatura obteve-se uma margem de erro de +/- 40% na faixa de Reynolds de $10^1 < Re < 10^5$. Assim foi desenvolvida a correlação do tipo Ergun para perda de carga conforme Equação (1). Para se obter informações detalhadas, consulte o trabalho de Dietrich *et al.* (2009).

$$H_g = 110 Re + 1,45 Re^2 \quad (1)$$

2.2. Simulação CFD em leitos empacotados estruturados

Os recentes avanços na computação fazem da simulação computacional uma importante ferramenta no estudo da engenharia de reatores. A fluidodinâmica computacional é frequentemente utilizada para analisar o fenômeno fluidodinâmico em meios porosos e fornecer informações no interior do reator, tais como: temperatura; velocidade; concentração; etc. Uma das etapas mais importantes na aplicação da técnica de CFD é a escolha do modelo de turbulência apropriado. Adicionalmente, é necessário construir uma malha computacional adequada que cubra todo o espaço computacional do fluido para garantir cálculos precisos (Nikou e Ehsani, 2008). As simulações em leitos empacotados estruturados sugerem que o modelo k- ω SST é o mais adequado para prever o comportamento fluidodinâmico e da perda de carga em leitos empacotados estruturados dentre os diferentes modelos de turbulência RANS (Said *et al.*, 2011). A fim de entender o comportamento fluidodinâmico ao longo das células da espuma estrutura, um modelo tetradecaédrico (também conhecido como o modelo de célula Kelvin) foi utilizado para representar a estrutura das espumas na geração do domínio computacional. Para simular o escoamento através desta geometria de leito empacotado, um exemplo visual é proposto como mostrado na Figura 1. Boomsma *et al.* (2003) foram os primeiros a apresentar este tipo de modelo geométrico comparando as simulações numéricas com dados experimentais observando uma boa concordância. Anos mais tarde, Horneber *et al.* (2012) usaram essa abordagem para investigar numericamente uma espuma metálica de células abertas. Os resultados mostraram que a rugosidade da superfície influenciou o comportamento do escoamento próximo à parede e também a perda de carga do leito empacotado.

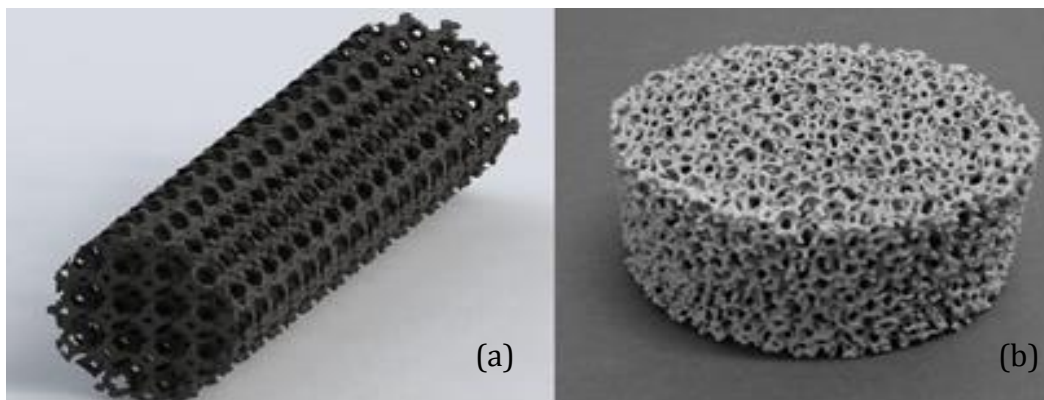


Figura 1 - Comparação entre a geometria computacional (a) e a espuma cerâmica real (b).

O objetivo deste trabalho consiste em desenvolver uma malha computacional para realizar simulações CFD do fluxo de ar através de uma amostra de espuma estruturada de células abertas utilizando os modelos de turbulência $k-\epsilon$ e $k-\omega$ SST e comparar os resultados destas simulações com as correlações experimentais para perda de carga. Além disso, os testes de independência de malha devem ser realizados para determinar a melhor malha para modelos RANS e calcular camada limite com maior precisão.

2.3. Geometria

De acordo com Horneber *et al.* (2012) e Boomsma *et al.* (2003), a simulação numérica 3D de espumas estruturadas de células abertas, mais precisamente a geometria tetradecahédrica (geometria da célula Kevin) é considerada uma boa representação de uma espuma de célula aberta real. É uma forma periódica ideal numericamente otimizada de uma espuma que foi modelada em um programa de CAD, como SolidWorks e posteriormente a malha foi gerada no ANSYS ICEM. A malha foi importada para o ANSYS CFX. Dois domínios para simulações foram utilizados neste trabalho, um com três partículas para o estudo de independência de malha e outro sendo uma seção de espuma de células abertas para o cálculo da perda de carga, tal como ilustrado na Figura 2. O procedimento de construção do modelo geométrico ou célula de Kelvin é descrito com maiores detalhes por Horneber *et al.* (2012), os quais comentam que apenas dois parâmetros são necessários para definir a célula: o diâmetro de janelas (d_{window}) e o diâmetro da estrutura (d_{struct}). Para os parâmetros geométricos ver Tabela 1.

Tabela 1 - Parâmetros geométricos e dimensões da célula de Kelvin.

Propriedade	Símbolo	Valor
Comprimento da estrutura	l_s	2,21 mm
Diâmetro da estrutura	d_{struct}	1,10 mm
Diâmetro da abertura	d_{window}	3,09 mm
Porosidade	Φ	0,89

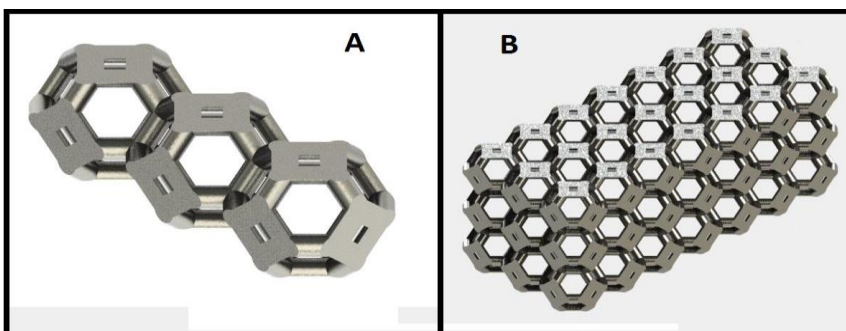


Figura 2 - O modelo de teste com duas configurações: (A) de três células para avaliação da malha e (B) parte do leito empacotado com espuma estruturada para calcular a perda de carga.

Na construção das duas geometrias, uma única célula foi gerada e replicada várias vezes. Para o teste de malha a célula foi copiada três vezes no mesmo sentido como mostrado na Figura 2(A). Para se construir a secção do leito, uma única célula foi copiada 3 vezes na direção vertical formando uma estrutura com 3 células. A estrutura gerada com 3 células foi copiada 3 vezes na direção horizontal formando uma estrutura com 9 células, a qual foi replicada por 7 vezes na direção normal ao fluxo, como apresentado na Figura 2(B).

2.4. Geração da malha

A geração da malha foi uma etapa importante deste estudo, devido à dependência da precisão do resultado com suas características. Além disso, é importante comparar os diferentes modelos de turbulência RANS nas diferentes malhas. Isto implica na utilização de uma malha com refino suficiente com objetivo de se obter uma independência nos resultados. Infelizmente em alguns casos de simulações detalhadas, a capacidade computacional é um limitante e às vezes, as malhas geradas possuem uma contagem de células muito alta, tornando-se impraticáveis para simulações de leitos estruturados. Para se ter uma estimativa inicial da espessura da camada limite, pode-se construir as células prismáticas nas faces próximas as paredes da estrutura seguindo a correlação descrita pela Equação 2.

$$\Delta y = 0,035d_h Re^{-\frac{1}{7}} \quad (2)$$

Testes utilizando malhas com diferentes refinamentos na parede e no domínio foram realizados calculando a perda de carga ao longo da estrutura geométrica considerando dois modelos RANS k- ϵ e k- ω SST. Uma das questões mais essenciais para o melhor desempenho de modelos de turbulência RANS é a resolução adequada da camada limite. O estudo de independência de malha foi realizado para o caso com maior número de Reynolds ($Re = 5000$).

2.5. Modelagem matemática

O escoamento incompressível foi adotado para representar o fluxo dentro do leito poroso preenchido com espuma. A equação da continuidade é dada pela Equação 3.

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (3)$$

e a equação de conservação de quantidade de movimento para fluido incompressível pode ser descrita pela Equação 4.

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot (UU) - \nabla \cdot (\nu^{eff} \nabla U) = -\nabla P + g \quad (4)$$

em que U é o vetor velocidade, g é a aceleração da gravidade, ν^{eff} é a viscosidade cinemática efetiva, e P é a pressão. Os modelos de turbulência RANS k- ϵ e k- ω SST implementadas no CFX foram utilizado para descrever os efeitos da turbulência. Os resultados da perda de carga através das simulações com CFD foram comparados com a perda de carga determinada pela correlação descrita no trabalho de Dietrich (2012). Esta correlação é dada pela Equação 5.

$$Hg = \frac{\Delta P}{\Delta L} \frac{d_h^3}{\rho \nu^2} \quad (5)$$

onde, Hg é calculado de acordo com a Equação 1. O parâmetro L representa o comprimento do leito e d_h é o diâmetro hidráulico que pode ser calculado usando a Equação 6.

$$d_h = 4 \frac{\Phi}{S_v} \quad (6)$$

Na Equação 6, Φ é a porosidade da espuma e S_v é a área superficial específica por unidade de volume e pode ser calculada pela correlação com base nos experimentos (Dietrich *et al.*, 2009) mostrado pela Equação 7.

$$S_v = 2,87 \frac{1}{d_{struct} + d_{window}} (1 - \Phi)^{0,25} \quad (7)$$

em que d_{struct} e d_{window} correspondem ao diâmetro da estrutura e ao diâmetro dos espaços (janelas), respectivamente. O número de Reynolds é dada pela Equação 8.

$$Re = \frac{U d_h}{\Phi \nu} \quad (8)$$

O número de Reynolds é uma função da velocidade do fluido, do diâmetro hidráulico (d_h), da viscosidade cinemática (ν) e da porosidade do leito (Φ).

2.6. Condições de contorno

A Figura 3 apresenta as condições de contorno utilizadas na simulação. As paredes da estrutura são paredes não deslizantes e assim a velocidade é zero, igual a da superfície sólida. As

paredes laterais do domínio são definidas como superfícies livres, o programa realiza o cálculo das velocidades nestas superfícies.

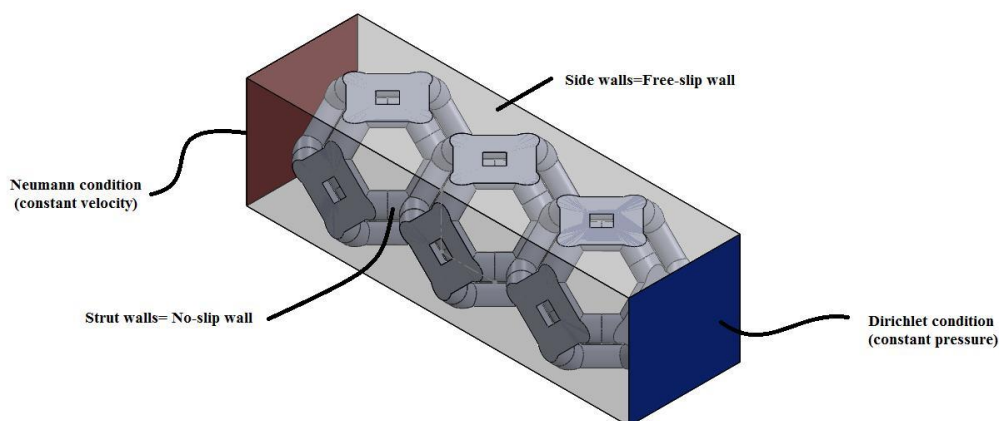


Figura 3 - Condições de contorno para a geometria contendo três partículas.

Na entrada, foi definida a com condição de contorno de Neumann com velocidade constante e na saída definida como condição de contorno de Dirichlet com pressão constante. Além disso, a perda de carga foi utilizada para monitorar os resultados das simulações. As mesmas condições de contorno foram utilizadas nas simulações da geometria que representa uma secção do leito.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção, a discussão dos resultados começa com o estudo de refinamento de malha para se obter a independência para o modelo formado por três partículas. Além disso, avaliou-se o modelo de turbulência $k-\epsilon$ através dos dados de perda de carga. Posteriormente, foi realizado um estudo com CFD para calcular a perda de carga ao longo de uma pequena região do leito. Em todas as simulações foi utilizado ar com densidade igual a $1,185 \text{ kg.m}^{-3}$ e viscosidade dinâmica igual a $1,831.10^{-5} \text{ kg.m.s}^{-1}$.

3.1. Estudo de independência de malha para o modelo com três partículas.

Devido à complexidade da geométrica da estrutura da espuma, apenas três células do leito foram utilizadas para realizar o teste de independência de malha. Para se obter simulações com resultados confiáveis, é essencial demonstrar resultados com independência na malha (Dixon *et al.*, 2013). O estudo de independência de malha foi realizado para o caso como maior número de Reynolds ($Re = 5000$). Um teste de malha avaliando o refinamento próximo a parede também foi realizado para estabelecer a influência da espessura da camada limite prismática e do número de divisões sobre a perda de carga. Foi estabelecido que o desempenho da malha era fortemente influenciado pela espessura da camada prismática e do modelo de turbulência utilizado. As condições utilizadas são mostradas nas Tabelas 2 e 3, onde as configurações para nove malhas são dadas

comparando 5 parâmetros importantes.

Tabela 2 - Estudo de refino de malha para modelo k- ω SST para geometria de três células

Parâmetro	Mesh 1	Mesh 2	Mesh 3	Mesh 4	Mesh 5
<i>Modelo de turbulência</i>	SST	SST	SST	SST	SST
<i>Tamanho da camada limite</i>	0,0005	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
<i>Elementos na camada limite</i>	5	5	10	15	15
<i>Número de elementos</i>	600000	600000	700000	800000	300000
<i>Perda de Carga [Pa]</i>	300	480,9	482	490	488
<i>Número de Reynolds</i>	5000	5000	5000	5000	5000

Tabela 3 - Estudo de refino de malha para modelo k- ϵ para geometria de três células

Parâmetro	Mesh 6	Mesh 7	Mesh 8	Mesh 9
<i>Modelo de turbulência</i>	k- ϵ	k- ϵ	k- ϵ	k- ϵ
<i>Tamanho da camada limite</i>	0,0005	0,0001	0,0001	0,0001
<i>Elementos na camada limite</i>	5	5	10	15
<i>Número de elementos</i>	600000	600000	700000	800000
<i>Perda de Carga [Pa]</i>	309	440	445	435
<i>Número de Reynolds</i>	5000	5000	5000	5000

A Tabela 4 apresenta a máxima diferença entre os valores da porcentagem de variação na perda de carga para os 4 parâmetros de malha, onde cada aspecto varia individualmente. Em todos os casos, foi claro que o tamanho da malha nas regiões mais distantes da parede tem muito menos efeito do que os tamanhos de malha próximos à superfícies da estrutura. A partir da Equação 2 a espessura da camada limite é de aproximadamente 0,0001m. Além disso, existe uma diferença associada à utilização dos diferentes modelos de turbulência. Segundo Said et al. (2011) o modelo k- ω SST é o mais adequado para prever a perda de carga e o comportamento aerodinâmico da estrutura do leito. Como conclusão do teste de independência de malha, as definições dos casos referentes a malha 4 e 8 são apropriados para se obter uma malha para o cálculo da perda de carga ao longo de uma parte do leito estruturado.

Tabela 4 - Porcentagem da variação da perda de carga (% ΔP)

Parâmetro	% ΔP
<i>Modelo de turbulência</i>	7,68
<i>Tamanho da camada limite</i>	60,30
<i>Elementos na camada limite</i>	0,23
<i>Número de elementos</i>	0,41

A Figura 4 mostra o perfil de velocidade axial para o caso da malha 4. Percebe-se uma boa transição da região prismática próxima a parede até os elementos tetraédricos na região de fluxo livre. O tamanho da camada de prisma, calculado utilizando a Equação 2, mostra um bom desempenho ao calcular a transição da malha entre a camada limite e o seio do fluido.

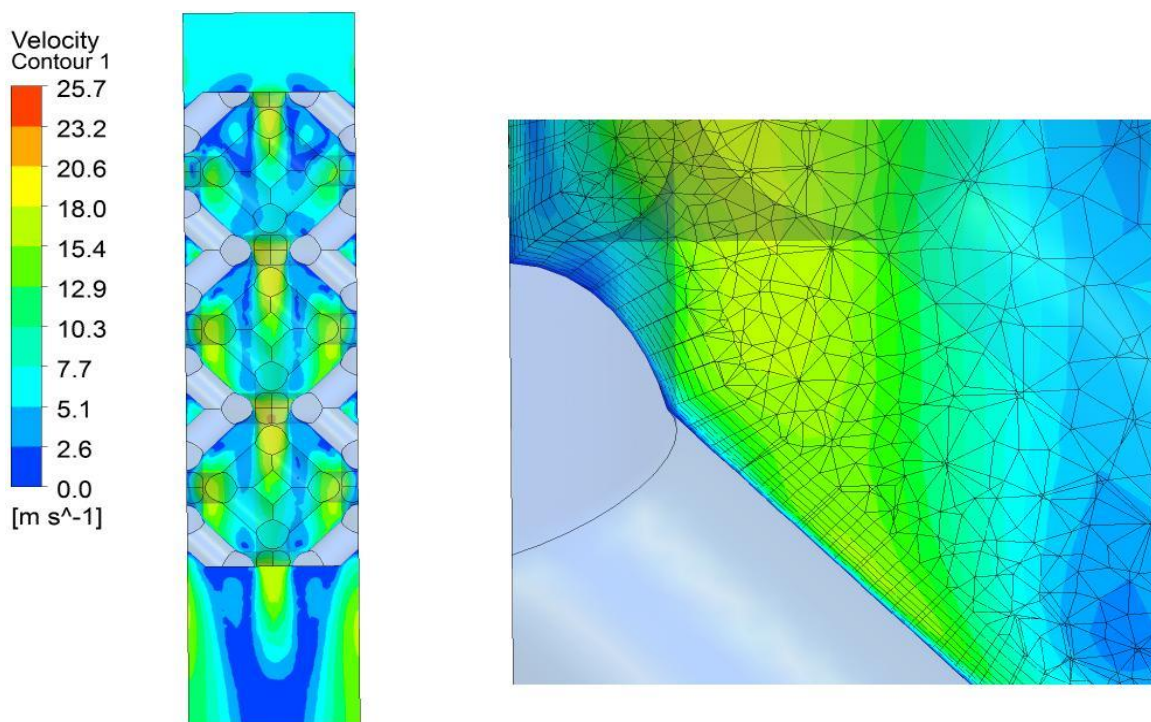


Figura 4: Perfil de velocidade junto à parede para o caso da malha 4.

A Figura 5 mostra o y^+ calculado pelo CFX para os casos das malhas 4 e 8.

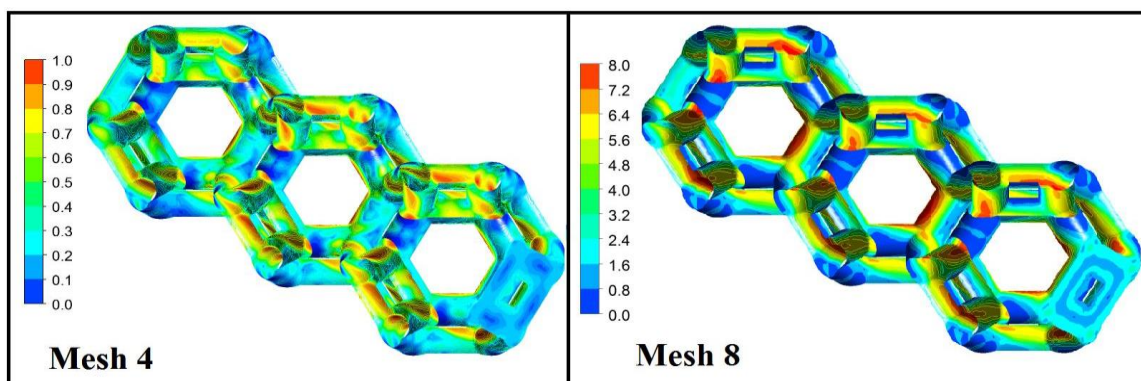


Figura 5 - y^+ calculado pelo CFX para os casos das malhas 4 e 8.

Os dados da Figura 5 confirmam que o tamanho da primeira célula junto à superfície da geometria foi apropriada para cálculos da camada limite. Os y^+ recomendados devem ser 1 e 30 para os modelos de turbulência $k-\omega$ SST e $k-\epsilon$, respectivamente.

3.2. Comparação entre a perda de carga calculada pelo CFD com os dados experimentais.

A Figura 6 apresenta o intervalo dos números de Re utilizados para estabelecer a comparação do desvio médio entre a queda de pressão prevista a partir da correlação empírica de Dietrich *et al.* (2009) e os valores correspondentes calculados a partir dos resultados simulados com CFD.

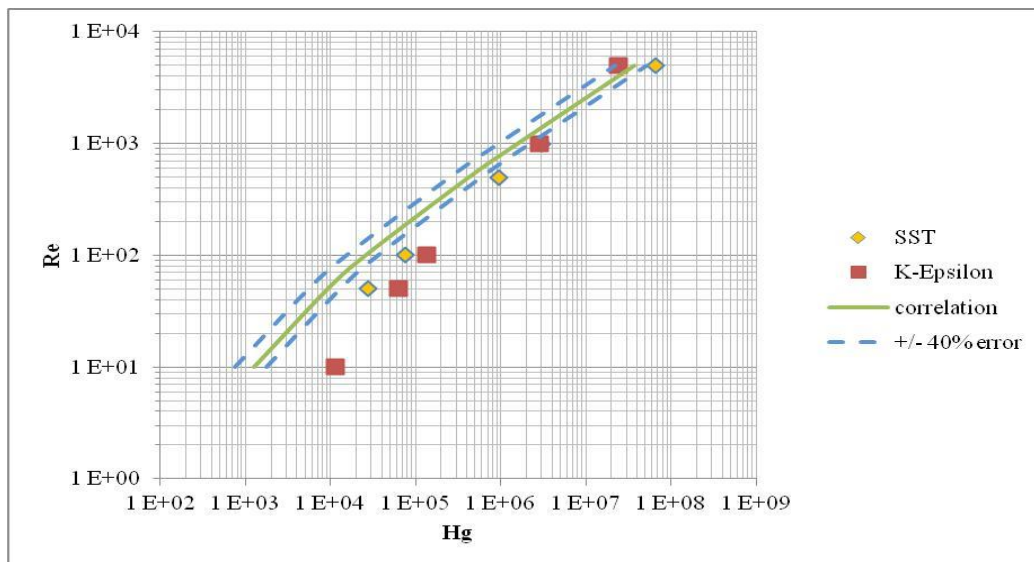


Figura 6 - Comparação entre a perda de carga calculada pelo CFD e a correlação empírica retirada de Dietrich *et al.* (2009).

- Os perfis de velocidades intersticiais do fluido obtidos via simulações com a equação de Navier-Stokes (RANS), não são plenamente desenvolvidos ao longo do meio poroso. Esta observação também pode ser verificada no trabalho de Horneber *et al.* (2012). Entretanto os dados experimentais do trabalho de Dietrich *et al.* (2009) foram obtidos para perfis plenamente desenvolvidos, isto é, em ausência de efeitos de entrada e saída e torna-se um dos fatores dos desvios entre as perdas de cargas obtidas pelas simulações e as experimentais.
- Para valores elevados de números de Reynolds ($> 10^3$), os dois modelos de turbulência avaliados predizem satisfatoriamente a perda de carga dentro de um erro relativo menor que 40%. Para baixos valores de Reynolds, o modelo de turbulência k- ϵ apresenta um erro relativo maior do que 100%. Este erro poderá ser diminuído ao se desprezar os efeitos das bordas.
- O modelo de turbulência k- ω SST representou satisfatoriamente o comportamento dos fenômenos, embora apresente um erro relativo constante de 50%. De acordo com Said *et al.* (2011) a rugosidade da superfície da parede desempenha um papel importante no comportamento escoamento próximo a parede e um aumento da velocidade ou da rugosidade promove um aumento na perda de carga. Assim como para o modelo k- ϵ , maiores investigações devem ser realizadas considerando somente o escoamento plenamente desenvolvido ao analisar a perda de carga.
- Neste trabalho, a rugosidade da parede não foi considerada, e pode ser um fator que contribuiu para a diferença observada entre a correlação e a simulação.

4. CONCLUSÕES

Uma simulação CFD para o cálculo direto da perda de carga para o escoamento de ar ao longo de uma espuma estruturada de células abertas foi realizada. Primeiramente um teste de independência malha foi realizado em uma geometria de três partículas para determinar os parâmetros de malha e se ter resultados da perda de carga sem interferência da malha. Posteriormente uma simulação CFD foi realizada considerando uma parte da estrutura do leito empacotado para se determinar a perda de carga e em seguida comparar com os dados obtidos por uma correlação empírica retirada da literatura. O domínio computacional proposto foi uma estrutura de elementos periódica, estabelecendo um fluxo gasoso desenvolvido dentro do leito. Como resultado do teste de independência de malha, observou-se uma elevada dependência da espessura da camada de prisma próximas a superfície da estrutura geometria para o cálculo da perda de carga, com um erro relativo de 60,30%. Um resumo das recomendações é apresentado a seguir:

- A fim de realizar um teste rápido de independência malha para o leito empacotado estruturado, é uma boa escolha utilizar uma pequena quantidade representativa de células. É mais rápido do que fazê-lo no leito todo.
- É importante determinar a espessura da camada limite. De acordo com o

correlações apresentadas para $Re = 5000$ a espessura da camada limite foi de 0,0001m.

- Um total de 10 prismas na camada limite foram o suficiente para se ter uma boa representação do escoamento nessa região.

A aplicabilidade da simulação com CFD do escoamento de ar ao longo de uma espuma estruturada com células abertas com geometria tetradecahédrica ideal foi investigada e discutida. Para esta finalidade, a correlação empírica apresentada em Dietrich *et al.* (2009) para o cálculo da perda de carga foi usado para comparar o modelo CFD. Como mostra a Figura 6 a perda de carga para o escoamento monofásico incompressível pode ser estimado com satisfação para um intervalo de $1000 < Re < 10000$ usando o modelo de turbulência k- ϵ . Simulações usando o modelo de turbulência k- ω SST representa qualitativamente o comportamento dos fenômenos para escoamentos no intervalo de $10 < Re < 10000$, embora seja necessário maiores investigações sobre os efeitos da rugosidade da parede na previsão da perda de carga. Os desvios nos valores da perda de carga também podem ser atribuídos ao motivo das simulações não levarem em consideração os efeitos das bordas no escoamento em comparação a correlação que foi obtida considerando o escoamento plenamente desenvolvido.

5. NOMENCLATURA

d_h	diâmetro hidráulico	[m]
d_{struct}	diâmetro da estrutura	[m]
d_{window}	diâmetro dos espaços (janelas)	[m]
g	aceleração da gravidade	[m.s ⁻²]
H_g	perda de carga	[m/m]
k	energia cinética turbulenta	[m ² s ⁻²]
L	comprimento do leito	[m]
l_s	comprimento de uma célula	[m]
P	pressão	[Pa]
Re	número de Reynolds	[-]
S_v	área superficial específica por unidade de volume	[m ⁻¹]
t	tempo	[s]
U	velocidade	[m.s ⁻¹]
y	distância da camada limite	[m]
ϵ	taxa dissipação turbulenta da energia cinética turbulenta do modelo k- ϵ	[m ² s ⁻³]
ρ	massa específica	[kg.m ⁻³]
Φ	porosidade do leito	[-]
ω	frequência de dissipação turbulenta do modelo k- ω	[s ⁻¹]

6. REFERÊNCIAS

- BOOMSMA, K.; POULIKAKOS, D.; VENTIKOS, Y. Simulations of flow through open cell metal foams using an idealized periodic cell structure. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 24(6), p. 825-834, 2003.
- DIETRICH, B. Pressure drop correlation for ceramic and metal sponges. *Chemical Engineering Science*, v. 74(0), p. 192-199, 2012.
- DIETRICH, B.; SCHABEL, W.; KIND, M.; MARTIN, H. Pressure drop measurements of ceramic sponges-determining the hydraulic diameter. *Chemical Engineering Science*, v. 64(16), p. 3633-3640, 2009.
- DIXON, A. G.; NIJEMEISLAND, M.; STITT, E. H. Systematic mesh development for 3d cfd simulation of fixed beds: Contact points study. *Computers & Chemical Engineering*, v. 48(0), p. 135-153, 2013.
- EDOUARD, D.; LACROIXA, M.; HUUA, C. P.; LUCKB, F. Pressure drop modeling on solid foam::State-of-the art correlation. *Chemical Engineering Journal*, v. 144(2), p. 299-311, 2008.
- HORNEBER, T.; RAUH, C.; DELGADO, A. Fluid dynamic characterisation of porous solids in catalytic fixed-bed reactors. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 154(0), p.170-174, 2012.
- KHOSRAVI NIKOU, M. R.; EHSANI M.R. Turbulence models application on cfd simulation of hydrodynamics, heat and mass transfer in a structured packing. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, v. 35(9), p. 1211-1219, 2008.
- OZAH, E.; GUNDOGDU, M. Y.; CARPINLIOGLU, M. Ö. A modication on Ergun's correlation for use in cylindrical packed beds with non-spherical particles. *Advanced Powder Technology*, v. 19(4), p. 369-381, 2008.
- SAID, W.; NEMER, M.; CLODIC, D. Modeling of dry pressure drop for fully developed gas flow in structured packing using cfd simulations. *Chemical Engineering Science*, v. 66(10), p. 2107-2117, 2011.