

VALIDAÇÃO DO CÓDIGO NUMÉRICO OPENFOAM PARA MODELOS DE FLUXO BIFÁSICO GÁS-LÍQUIDO

D. M. L. de PAULA¹, E. MAS DE LES VALLS², A. M. O. SIQUEIRA¹ e L. BATET³

¹ Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Química

² Universitat Politècnica de Catalunya, Departamento de Màquines e Motors Tèrmics

³ Universitat Politècnica de Catalunya, Departamento de Física e Enginyeria Nuclear

E-mail para contato: dayanamlouzada@gmail.com

RESUMO – Este trabalho tem como objetivo a validação de um código numérico para o estudo do fluxos bifásicos gás-líquido. Os resultados obtidos mostram que: 1) para reproduzir regimes turbulentos por meio de modelos laminares, é necessária uma malha demasiado fina, o que muitas vezes pode ser inviável; 2) aplicar um modelo de turbulência a uma geometria 2D, tampouco é interessante, pois a turbulência pode provocar significativa dispersão numérica, amortizando os vórtices; 3) reproduzir um modelo de turbulência em 3D produz resultados satisfatórios, mesmo por meio de uma malha mais grosseira. Com base nestas observações, é possível afirmar que o código numérico do OpenFOAM para modelo de fluxos bifásicos gás-líquido, twoPhaseEulerFoam, é viável para representar quali e quantitativamente casos reais de modelos bifásicos, inclusive o sistema “hélio-metal líquido” dos breeding blankets de HCLL da Tecnologia de Fusão Nuclear.

1. INTRODUÇÃO

Estudos estão sendo desenvolvidos a cerca dos componentes críticos da Tecnologia de Fusão Nuclear a fim de demonstrar sua viabilidade tecnológica e comercial como fonte de energia elétrica. Um destes componentes críticos em estudo é chamado de camada fértil (breeding blanket) do tipo HCLL (Helium-Cooled Lithium-Lead), cujos canais são preenchidos com metal líquido (Pb–15,7Li).

Neste modelo de breeding blanket, o metal líquido reage com os nêutrons acelerados provenientes da fusão, produzindo o trítio, que é posteriormente extraído e utilizado como combustível do reator de fusão. Durante esta reação de geração de trítio, o subproduto hélio é produzido na mesma proporção, o que possivelmente leva à nucleação de bolhas de hélio nos canais. A provável presença dessas bolhas no sistema HCLL levaria a um sistema bifásico gás-líquido que afetaria muito a hidrodinâmica destes canais, podendo ter consequências significativas na permeação de trítio pelas paredes do canal, na eficiência térmica do sistema e no aumento da queda de pressão nos reservatórios. Dentro deste contexto, a fim de estudar os efeitos dessa problemática, o objetivo deste trabalho foi validar um código numérico para modelos de fluxos bifásicos, do tipo gás-líquido, a partir da reprodução de um caso experimental de coluna de bolhas obtido da literatura.

2. EQUAÇÕES GERAIS DO MODELO

Para a modelagem numérica do sistema bifásico, foi selecionado o solver twoPhaseEulerFoam da ferramenta aberta OpenFOAM. Este solver utiliza o modelo de discretização Euler-Euler baseado no conceito de interpenetração contínua. Trata-se de um método simples e de fácil manipulação, onde ambas as fases são tratadas matematicamente como fases contínuas. Por outro lado, para modelar a turbulência se seguiu a estratégia RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*), isto é, se trabalhou com as variáveis médias no tempo e se adicionou um novo termo de tensões viscosas à equação de momento.

A fração de volume (*void fraction*), representada por α nas equações governantes, é um dos parâmetros mais importantes para caracterizar os fluxos bifásicos. Para sistemas gás-líquido, este termo pode ser definido como a fração de volume ocupada pela fase gasosa ou fase dispersa.

De acordo com Yeoh e Tu (2010), para a modelagem de fluxos bifásicos, as equações de Navier-Stokes são dadas pela equação da continuidade para cada fase ϕ (Equação 1) e pela equação de conservação de momento linear (Equação 2):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_\phi \rho_\phi) + \nabla \cdot (\alpha_\phi \rho_\phi \mathbf{U}_\phi) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_\phi \rho_\phi \mathbf{U}_\phi) + \nabla \cdot (\alpha_\phi \rho_\phi \mathbf{U}_\phi \mathbf{U}_\phi) + \nabla \cdot (\alpha_\phi \mathbf{Re}_{\phi,eff}) = -\alpha_\phi \nabla p + \alpha_\phi \rho_\phi \mathbf{g} + \mathbf{M}_\phi \quad (2)$$

Onde o termo \mathbf{M}_ϕ da equação de momento (Equação 2) pode ser decomposto em diferentes forças referentes à contribuição de arraste (*drag*), à contribuição de empuxo (*lift*) e à contribuição de massa virtual (*virtual mass*):

$$\mathbf{M}_\phi = \mathbf{M}_{\phi,drag} + \mathbf{M}_{\phi,lift} + \mathbf{M}_{\phi,vm} \quad (3)$$

Utilizando a e b como sub-índices para identificar as duas fases do sistema, onde a representa a fase dispersa (gás) e b a fase contínua (líquido), é possível definir de forma detalhada os termos da equação anterior. Sendo assim, o termo de arraste é descrito por:

$$\mathbf{M}_{\phi,drag} = \frac{3}{4} \alpha_a \alpha_b \left(\frac{\alpha_b \rho_b C_{D,a}}{d_a} - \frac{\alpha_a \rho_a C_{D,b}}{d_b} \right) |\mathbf{U}_r| \mathbf{U}_r \quad (4)$$

Onde, $\mathbf{U}_r = \mathbf{U}_a - \mathbf{U}_b$ é o vetor de velocidade relativa e $C_{D,a}$ e $C_{D,b}$ são os coeficientes de arraste para cada fase. Quando o número de Reynolds assume um valor inferior a 1.000, o coeficiente de arraste é considerado como igual a 0,44. Caso contrário, quando Re é maior ou igual a 1.000, os coeficientes $C_{D,a}$ e $C_{D,b}$ são obtidos de acordo com as seguintes equações:

$$C_{D,\phi} = \frac{24}{Re_\phi} (1 + 0.15 Re_\phi^{0.687}) \quad (5)$$

Da mesma forma, o termo referente à contribuição de empuxo é descrito pela equação:

$$\mathbf{M}_{\varphi, \text{lift}} = \alpha_a \alpha_b (\alpha_b C_{l,a} \rho_b - \alpha_a C_{l,b} \rho_a) \mathbf{U}_r \times \nabla \times \mathbf{U}_b \quad (6)$$

E a força de virtual mass, que é a inércia adicionada a um sistema quando um corpo em aceleração ou desaceleração move (ou desvia) algum volume do fluido envolvente à medida que esse corpo o atravessa, é representada de acordo com a seguinte equação:

$$\mathbf{M}_{\varphi, \text{vm}} = \alpha_a \alpha_b C_{\text{vm}} \rho_b \left(\frac{D\mathbf{b}}{Dt} \mathbf{U}_b - \frac{D\mathbf{a}}{Dt} \mathbf{U}_a \right) \quad (7)$$

Para adicionar o efeito de turbulência ao sistema bifásico disperso, se utiliza um modelo κ - ϵ de equações para a fase contínua e se adota a viscosidade de turbulência para os cálculos da fase dispersa. Dessa maneira, a equação de energia cinética de turbulência (k_b) da fase contínua é representada por:

$$\frac{\partial(\alpha_b k_b)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_b \mathbf{U}_b k_b) - \nabla^2 (\sigma_{k_b, \text{eff}} k_b) = \alpha_b G - \alpha_b \epsilon_b \quad (8)$$

Enquanto que a taxa de dissipação de turbulência (ϵ_b) é calculada com a equação de transporte:

$$\frac{\partial(\alpha_b \epsilon_b)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_b \mathbf{U}_b \epsilon_b) - \nabla^2 (\sigma_{\epsilon_b, \text{eff}} \epsilon_b) = C_1 \alpha_b G \frac{\epsilon_b}{\kappa_b} - C_2 \alpha_b \frac{\epsilon_b^2}{\kappa_b} \quad (9)$$

3. CONDIÇÕES DO EXPERIMENTO E DA SIMULAÇÃO

A fim de comprovar que o twoPhaseEulerFoam pode ser aplicado para a modelagem numérica de fluxos bifásicos em geral, o experimento de Becker *et al.* (1994) foi selecionado e utilizado para ser reproduzido com o modelo apresentado. Este experimento foi realizado em uma coluna de 2 m de altura, 0,5 m de comprimento e 0,08 m de profundidade, onde a fase contínua (água) ocupava um nível de 1,5 m na coluna e a fase dispersa (ar) era injetada por meio de um aerador de 0,04 m de diâmetro (Figura 1). Esse distribuidor de ar estava localizado na base da coluna, centrado no eixo z e situado a 0,15 m da parede esquerda no eixo x.

Os testes foram realizados para duas vazões volumétricas diferentes para a entrada de ar: uma de 8 L/min ($w = 3,3$ mm/s) e outra de 1,6 L/min ($w = 0,66$ mm/s). Para a velocidade de entrada maior (vazão volumétrica maior), foi observada a formação de uma pluma de bolhas de ar ascendente rente à parede esquerda da coluna, devido à assimetria na localização do aerador. Isto provocou a geração de um vórtice dextrogiro que ocupou toda a altura da coluna. O fluxo chegou a condições praticamente estacionárias (Figura 3.b).

Em seguida, a vazão volumétrica foi reduzida para 1,6 L/min e o comportamento do fluxo bifásico foi alterado drasticamente. Com a velocidade baixa (vazão volumétrica menor) se formaram mais vórtices ao longo da coluna e a parte inferior da pluma de bolhas se manteve bastante estável e

próxima da parede esquerda, enquanto a parte superior da pluma adquiriu uma forma mais serpenteante, que se movia de acordo com o movimento dos vórtices da fase líquida (Figura 4.b).

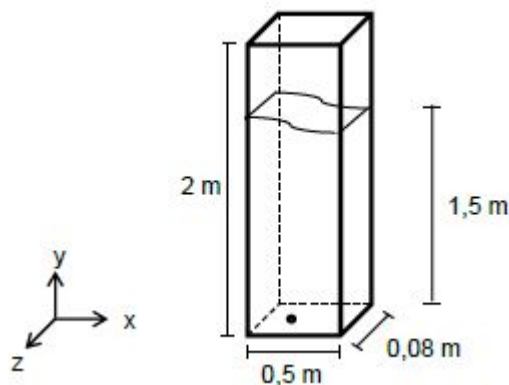


Figura 1 - Dimensões da coluna utilizada no experimento.

Baseado na coluna de Becker *et al.* (1994), para a simulação numérica foram utilizadas 3 malhas em 2D: M1 (50x100x1), M2 (75x150x1) e M3(100x225x1) e uma malha em 3D: M4 (28x80x4).

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir dos resultados e do comportamento do experimento de Becker *et al.* (1994), seja para velocidade alta ou baixa, pode-se inferir que se tratam de regimes turbulentos. Desta maneira, para realizar os testes com o twoPhaseEulerFoam foi levado em consideração que para representar bem um regime que possa ser de fluxo turbulento existem duas opções: a primeira é por meio do que se chama, neste trabalho, como um “modelo laminar”, onde se utilizam as equações básicas de fluxo bifásico e uma malha suficientemente refinada; e a segunda opção é por meio de um modelo com turbulência, chamado neste trabalho de “modelo de turbulência”, onde se emprega uma malha grossa e as equações básicas acopladas às equações do modelo de turbulência k- ϵ . A partir destas considerações, as simulações foram realizadas da seguinte maneira: o modelo laminar foi aplicado a 3 malhas diferentes em 2D e o modelo turbulento foi aplicado a malhas grosseiras em 2D e em 3D, de acordo com o esquema da Figura 2.

As geometrias em 2D foram utilizadas inicialmente, pois normalmente para colunas de pouca profundidade se supõe que o fluxo é basicamente bidimensional. Porém, com a presença do regime turbulento, a representação em 2D fica mais difícil, o que torna a geometria 3D mais interessante, pois aproxima a malha da geometria real.

Quanto aos resultados obtidos, as simulações geradas com o modelo laminar em 2D não obtiveram boa reprodutibilidade entre as malhas M1, M2 e M3, o que garante que a malha suficientemente refinada necessária para reproduzir adequadamente o sistema com o modelo laminar, tanto para a velocidade baixa como a alta, ainda estaria distante da malha M3. Como refinar ainda

mais essa malha seria inviável devido ao tempo de processamento da simulação, tornou-se necessário adicionar às malhas em geometria 2D as equações de turbulência.

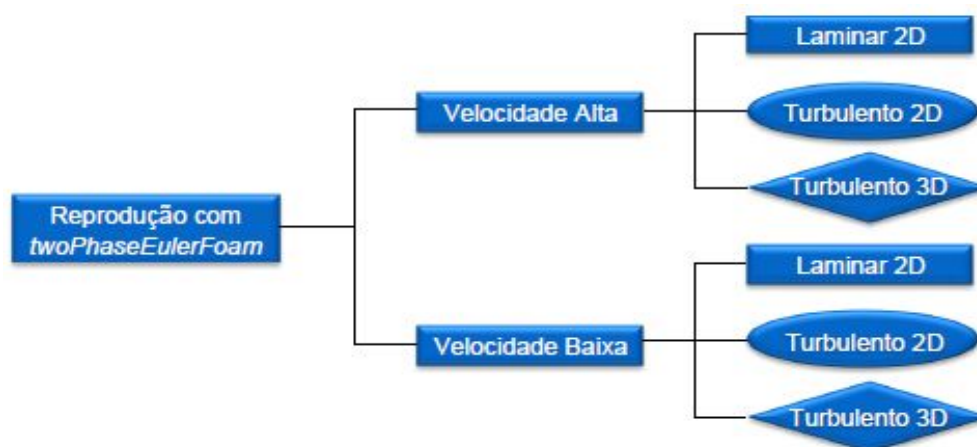


Figura 2 -Sequência de simulações realizadas.

Dessa maneira, adicionando-se as equações do modelo de turbulência $k-\epsilon$ e repetindo a simulação para a geometria 2D, o que se obteve foi um sistema extremamente estabilizado para as malhas M1, M2 e M3. Para ambas as velocidades, a simulação alcançou o regime estacionário dentro de poucos segundos.

Comparando este resultado com o obtido por outros autores, como Sokolichin e Eigenberger (1999) e Mudde e Simonin (1999), pôde-se concluir que as equações de turbulência sobrestimam a viscosidade efetiva da fase contínua, resultando em um sistema muito simplificado devido às limitações de profundidade e às simplificações da geometria 2D. Em contrapartida, como na geometria do tipo 3D não existem tais simplificações, os resultados deveriam ser mais reais e consistentes com o experimento.

Desta forma, para os últimos testes, retomou-se a ideia inicial de que um modelo mais complexo, englobando equações básicas e equações de turbulência em uma geometria mais completa, como a geometria 3D, pode representar muito bem um experimento em regime turbulento utilizando-se apenas uma malha mais grosseira, como M4. Tendo isto em vista, testes diversos foram realizados e os resultados obtidos foram satisfatórios.

Para a velocidade alta (vazão de 8 L/min), as simulações convergiram para um resultado quase estacionário, obtendo comportamento e velocidades muito próximos ao obtido experimentalmente (Figura 3). A pluma de bolhas se manteve próxima da parede esquerda, promovendo a formação de um grande vórtice ao longo de toda a coluna e de um fluxo descendente de bolhas à direita.

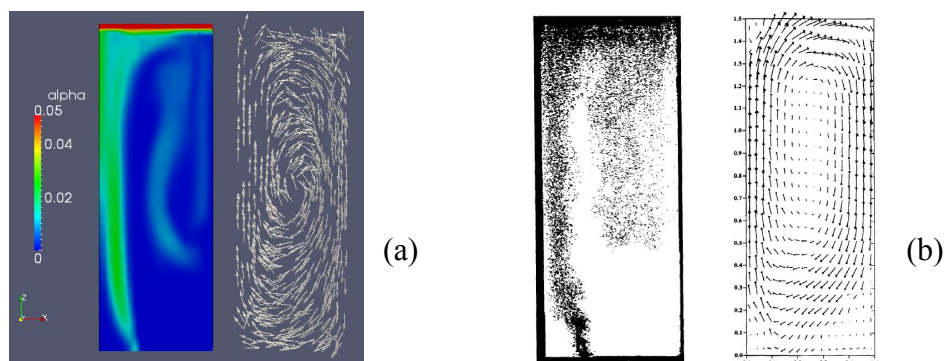


Figura 3 - Comportamento da fração de volume do ar e da velocidade do líquido:
(a) twoPhaseEulerFoam e (b) experimento.

Igualmente, os resultados obtidos para a velocidade baixa (vazão de 1,6 L/min) foram próximos do que se obteve no caso de Becker *et al.* (1994). Isto é, o comportamento do fluxo foi de acordo com o que se esperava, pois a pluma obtida foi sinuosa e os vórtices formados pelo movimento da fase contínua ficaram em constante oscilação de cima para baixo e de baixo para cima (Figura 4).

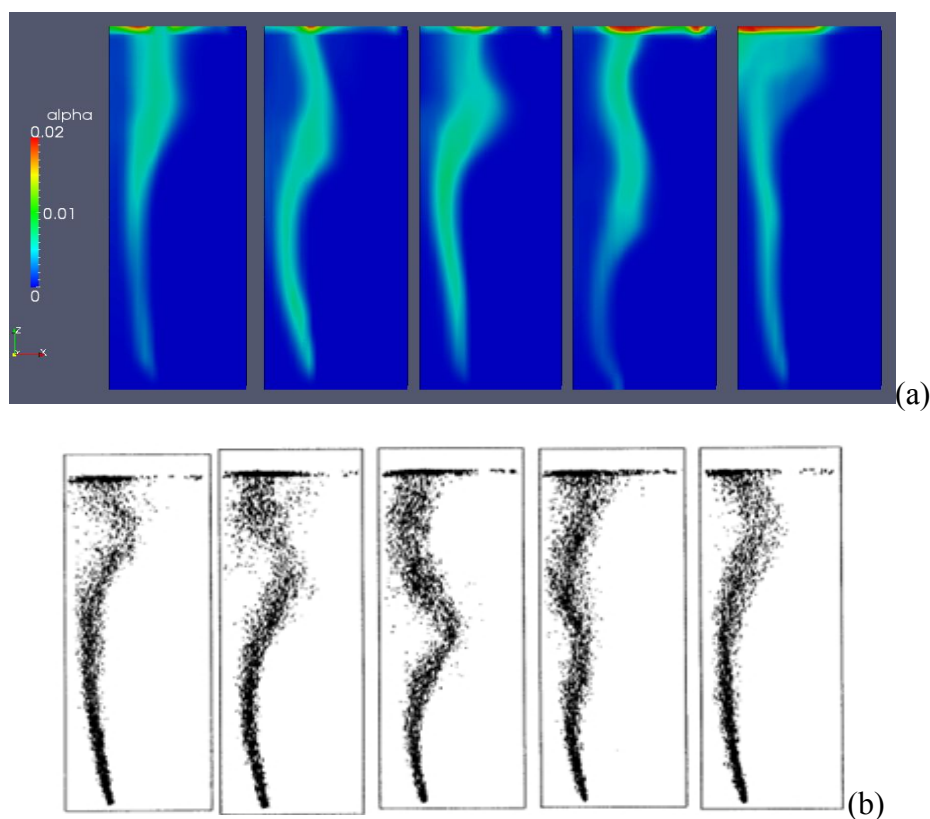


Figura 4 - Comportamento da fração de volume da fase dispersa no meio contínuo.
(a) twoPhaseEulerFoam e (b) experimento.

Além disso, ainda para a velocidade baixa, comparando os valores estimados da velocidade vertical do líquido, ao longo do tempo, com os medidos durante o experimento para dois pontos distintos da coluna (ponto A e ponto B), é possível confirmar que o comportamento da fase contínua obtido com a simulação foi similar ao do caso real (Figura 5).

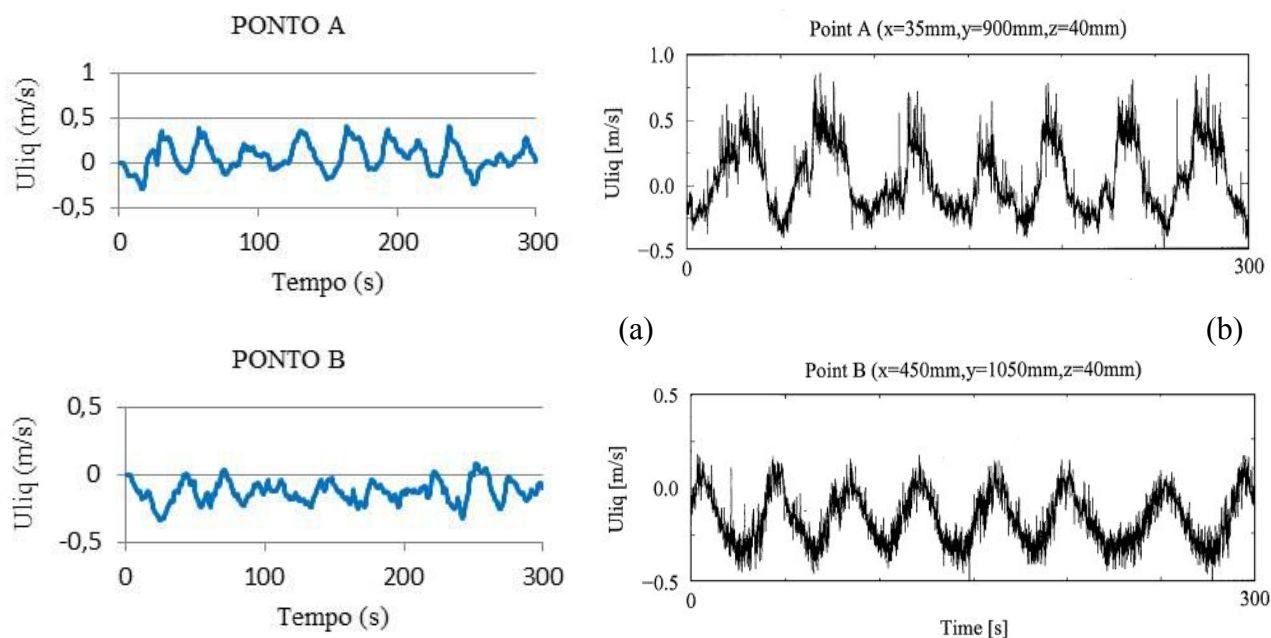


Figura 5 - Comportamento da velocidade vertical do líquido (m/s) nos pontos A e B.
(a) twoPhaseEulerFoam e (b) experimento.

5. CONCLUSÃO

Com base nos resultados obtidos com as simulações do OpenFOAM, é possível listar alguns aspectos relevantes a respeito do twoPhaseEulerFoam, como: 1) Para reproduzir regimes turbulentos com modelos laminares, isto é, apenas equações básicas de conservação da massa e troca de momento sem levar em consideração os parâmetros de turbulência, é necessária uma malha demasiado fina para um bom resultado, o que pode ser inviável; 2) Para o mesmo caso, aplicar um modelo de turbulência $k-\epsilon$ a uma geometria 2D, tampouco é interessante, pois a turbulência provoca uma dispersão numérica muito grande, amortizando quase todos os vórtices e movimentos dos fluidos, resultando em um sistema muito estável e estacionário; 3) Já a reprodução de um modelo com equações de turbulência em geometria 3D produz resultados mais semelhantes aos casos experimentais de regime turbulento, pois o modelo é mais completo e a geometria é mais próxima da real. Dessa forma, é possível chegar a resultados quantitativos e qualitativos satisfatórios, mesmo que utilizando uma malha grosseira.

Desta forma, é possível afirmar que o código numérico para modelos de fluxos bifásicos gás-líquido (twoPhaseEulerFoam), é viável para representar adequadamente casos reais de modelos

bifásicos, inclusive para estudar a influência da formação de bolhas de hélio na hidrodinâmica do metal líquido dos canais do breeding blanket.

6. NOMENCLATURA

C_D	Coef. de arraste (<i>drag</i>) [-]	α	Fração de volume da fase dispersa [-]
C_{lift}	Coef. de empuxo (<i>lift</i>) [-]	β	Fração de volume da fase contínua [-]
C_{vm}	Coef. de massa virtual (<i>virtual mass</i>) [-]	ε	Taxa de dissipação turbulenta [m^2/s^3]
C_M	Coef. do modelo de turbulência k- ε [-]	κ	Energia cinética de turbulência [m^2/s^2]
C_t	Coef. de resposta de turbulência [-]	ν	Viscosidade cinemática [m^2/s]
C_1	Const. do modelo de turbulência k- ε [-]	ν_{eff}	Viscosidade cinemática efetiva [m^2/s]
C_2	Const. do modelo de turbulência k- ε [-]	ρ	Densidade [kg/m^3]
D	Diâmetro das partículas [m]	τ	Tensor de tensões laminares [N/m^2]
g	Aceleração da gravidade [m/s^2]	σ_k	Numero de Schmidt para turb. [-]
G	Produção de energia cinética de turb. [-]	ϕ	Fase dispersa o contínua [-]
M	Transf. de momento na interface [$kg.m^2/s^2$]		
M_{drag}	Momento de arraste [$kg.m^2/s^2$]		
M_{lift}	Momento de empuxo [$kg.m^2/s^2$]		
M_{vm}	Momento de massa virtual [$kg.m^2/s^2$]		
P	Pressão [Pa]		
Re	Tensor de tensões de Reynolds [-]		
T	Tempo [s]		
U	Vetor de velocidade [m/s]		
W	Velocidade superficial [m/s]		

7. REFERÊNCIAS

BECKER, S.; SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G. Gas-liquid flow in bubble columns and loop reactors: Part II. Comparison of detailed experiments and flow simulations. *Chem. Eng. Science*, v. 49, n. 24, p. 5747-5762, 1994.

MUDDE, R. F.; SIMONIN, O. Two- and three-dimensional simulations of a bubble plume using a two fluid model. *Chem. Eng. Science*, v. 54, n. 21, p. 5061-5069, 1999.

SOKOLICHIN, A.; EIGENBERGER, G. Applicability of the standard k- ε turbulence model to the dynamic simulation of bubble columns: Part I. Detailed numerical simulations. *Chem. Eng. Science*, v. 54, n. 13-14, p. 2273-2284, 1999.

YEOH, G. H.; TU, J. Computational Techniques for Multi-Phase Flows. 3rd ed. Oxford, UK: Elsevier Ltd, 2010.