

GERAÇÃO E ANÁLISE CFD DE LEITOS EMPACOTADOS COM BLENDER E OPENFOAM

Nicholas Samuel Gushiken Perez

Ana Carolina Borges Silva

Pedro Miguel Vidinha Gomes

Universidade de São Paulo

nicholasgushiken@usp.br

Objetivos

Reatores de leito fixo são amplamente utilizados na indústria química e de processos, especialmente na catálise heterogênea, devido a diversos de fatores desejáveis (Eigenberger, 1992). Métodos numéricos desempenham um papel fundamental no desenvolvimento de projetos mais eficientes e econômicos, com a dinâmica de fluidos computacional (CFD) sendo cada vez mais utilizada por diversos autores, com o objetivo de melhorar os processos com os efeitos de diferentes escalas de pellets. O empacotamento aleatório de cilindros tem aplicações importantes como o fluxo multifásico em leitos catalíticos, sendo comuns em aplicações de engenharia química (Flaischlen e Wehinger, 2019). O formato e o tamanho dos pellets influenciam o escoamento de fluidos à escala de partículas, que, por sua vez, regula o transporte local de calor e massa e, conseqüentemente, o desempenho global do reator. Portanto, é importante compreender o impacto do fluxo à escala das partículas no desempenho do reator (Jrtz et al, 2021).

O presente trabalho tem como objetivo criar um fluxo de trabalho para a geração de reatores empacotados de sólidos e subsequente geração de malhas e análise CFD, utilizando os programas de código aberto Blender e OpenFOAM.

Métodos e Procedimentos

Geração de empacotamento com Blender:

Um reator de leito fixo com 30 mm de altura total, 12,7 mm de diâmetro, com uma altura de leito empacotado de 10 mm, foi considerado para a geração de empacotamento de pellets cilíndricos. O método utilizado para a geração do leito foi a abordagem de corpo rígido, no software open-source Blender, uma ferramenta normalmente utilizada para animação e modelação, mas que mostra resultados promissores na geração de leitos sintéticos para aplicações de engenharia.

Geração de malhas e simulações CFD com OpenFOAM:

Para a geração da malha, foi utilizada a ferramenta cartesianMesh, incluída no pacote padrão do openfoam.com v2312. Após setup do case, a análise CFD resolvida por partículas foi realizada utilizando o solver chtMultiRegionFoam, um solver transiente também incluído no pacote. As condições de simulação foram escolhidas para representar a fase de pré-redução com um pellet único, utilizando gás H₂ a 800K. Para a simulação, foram utilizadas propriedades tabeladas de titânia (TiO₂) a 300K, alumínio a 300K e H₂ a 800K, para o pellet, a parede do reator e o fluido, respectivamente. A pressão e a velocidade de entrada de 1 bar e 10 cm/s foram também utilizadas como parâmetros iniciais.

Resultados

As simulações de empacotamento mostraram que não foram detectadas sobreposições na geração do leito, e que os cilindros tendem a se acomodar uns sobre os outros de forma natural através da gravidade. As partículas geradas com o Blender tendem a se organizar com as partículas vizinhas perto das paredes do reator, resultando em mais partículas encostando na parede do leito.

As simulações CFD demonstraram uma boa e realística troca de calor entre o pellet e o fluido. Nesta etapa, os resultados das simulações mostraram uma boa concordância entre os dados experimentais e computacionais obtidos.

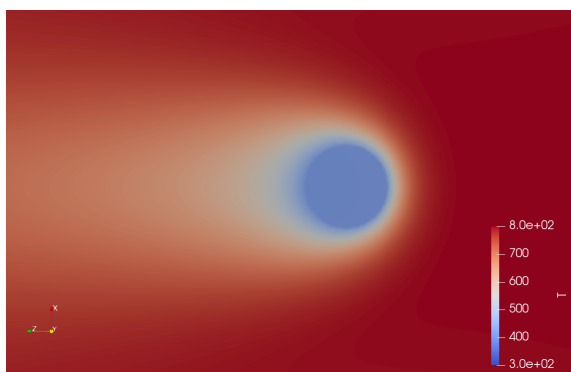


Figura 1: Temperatura do pellet e fluido em $t = 10$ s.

Conclusões

Neste trabalho, a fluidodinâmica computacional (CFD) foi utilizada para avaliar as trocas térmicas em um leito catalítico de 1 cm, durante uma etapa de pré-redução com H_2 . O empacotamento do leito utilizando o software Blender demonstrou bons resultados, com a acomodação natural das partículas, enquanto as simulações de CFD apresentaram resultados alinhados aos resultados experimentais. Outras simulações com leitos mais complexos e eventualmente reações químicas entre fluido e partículas estão planejadas para serem implementadas no futuro.

Agradecimentos

Agradecemos à FUSP/Shell pela bolsa de iniciação científica número 392802. Os autores agradecem o apoio do RCGI - Centro de Pesquisa para Inovação em Gases de Efeito Estufa (23.1.8493.1.9), sediado na Universidade de São Paulo (USP) e patrocinado pela FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (2020/15230-5) e Shell Brasil, bem como a importância estratégica do apoio dado pela ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis) por meio do P&DI.

Referências

Eigenberger, G. Principles of chemical reaction engineering and plant design. In Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, Principles of Chemical Reaction Engineering and Plant Design, 5th ed.; Chapter B4: Fixed; Elvers, B., Ed.; Wiley VCH: Weinheim, Germany, 1992; pp. 199–238.

Flaischlen, Steffen., Wehinger, Gregor D. Synthetic Packed-Bed Generation for CFD Simulations: Blender vs. STAR-CCM+, Chem. Engineering, 2019.

Jurtz, N.; Srivastava, U.; Moghaddam, A.A.; Kraume, M. Particle-Resolved Computational Fluid Dynamics as the Basis for Thermal Process Intensification of Fixed-Bed Reactors on Multiple Scales. Energies - MDPI, 14, 2913, 2021.

Partopour, B.; Dixon, A.G. An integrated workflow for resolved-particle packed bed models with complex particle shapes. Powder Technol. 2017, 322, 258–272.