

ESTUDIO COMPARATIVO ENTRE ANSYS FLUENT Y OPENFOAM EN LECHOS FLUIDIZADOS CON PARTÍCULAS GELDART A, B Y D

COMPARATIVE STUDY BETWEEN ANSYS FLUENT AND OPENFOAM IN FLUIDIZED BEDS WITH GELDART A, B AND D PARTICLES

César M. Venier^{a,b}, Andrés R. Urrutia^c, Juan Capossio^c, Jan Baeyens^d y Germán Mazza^c

^a*Escuela de Ingeniería Mecánica, FCEIA, UNR, Rosario, Argentina*

^b*Centro de Investigación de Métodos Computacionales, UNL, CONICET, FICH, Santa Fe, Argentina*

^c*Instituto de Investigación y Desarrollo en Ingeniería de Procesos, Biotecnología y Energías
Alternativas, CONICET-UNCo, Neuquén, Argentina*

^d*Beijing University of Chemical Technology, Beijing, China*

Palabras clave: Lecho Fluidizado, CFD, ANSYS Fluent(R), OpenFOAM(R).

Resumen. Este trabajo investiga el desempeño de los programas ANSYS Fluent(R) y OpenFOAM(R), en su estado actual de desarrollo, para estudiar las características relevantes de lechos fluidizados burbujeantes (BFB) con partículas Geldart A, B y D, para lo cual se desarrollaron dispositivos experimentales 3D y pseudo-2D para medir la caída de presión del lecho y la fracción de volumen de sólidos. La comparación entre los resultados experimentales y simulados mostró que tanto ANSYS Fluent(R) como OpenFOAM(R) proporcionan una predicción cualitativa adecuada de los tamaños de burbuja y la fracción de sólidos para las partículas Geldart B y D que burbujean libremente. Para las partículas Geldart A, operadas en un modo slugging, las predicciones cualitativas son nuevamente correctas, pero los valores numéricos de los patrones en condiciones de slugging (longitud, velocidad, frecuencia) favorecen ligeramente el uso de OpenFOAM(R), a pesar de algunas desviaciones respecto a los resultados experimentales.

Keywords: Fluidized Bed, CFD, ANSYS Fluent(R), OpenFOAM(R).

Abstract. This work investigates the performance of the software ANSYS Fluent(R) and OpenFOAM(R), at their current state of development, to study the relevant characteristics of bubbling fluidized beds (BFB) with Geldart A, B and D particles, for which 3D and pseudo-2D experimental devices have been developed to measure the pressure drop and solids volume fraction in the bed. The comparison between experimental and simulated results showed that ANSYS Fluent(R) and OpenFOAM(R) give an adequate qualitative prediction of the bubble size and the solids fraction for freely bubbling Geldart B and D particles. For Geldart A particles, operating on slugging mode, the qualitative predictions are again correct, but the numerical values of the slugging patterns (length, velocity and frequency) slightly favor the use of OpenFOAM(R), although there are some deviations in comparison to the experimental results.

1. INTRODUCCIÓN

Los lechos fluidizados de partículas son sistemas muy utilizados a nivel industrial debido a la agitación generada que asegura elevadas tasas de transferencia de calor y materia. Se pueden obtener diferentes regímenes en un lecho fluidizado a partir de modificar la velocidad superficial del gas, tipo de partícula o la geometría del sistema. Los lechos fluidizados se usan en procesos que involucran reacciones químicas siendo algunos ejemplos el craqueo catalítico, la polimerización de etileno, la combustión y gasificación de carbón, el tratamiento de desechos sólidos, etc. El diseño de los sistemas de lecho fluidizado requiere una comprensión adecuada del comportamiento del flujo multifásico. En este marco, la fluidodinámica computacional (CFD) ha asumido un rol importante en el estudio de lechos fluidizados siendo, a menudo, un complemento de los datos experimentales. En particular, [Reyes Urrutia et al. \(2016\)](#) estudiaron el comportamiento de una suspensión densa de partículas de Geldart A usadas en concentradores solares como vector térmico utilizando el software ANSYS Fluent(R) v14.5 ([Fluent Manual, 2003](#)) para diferentes condiciones operativas. [Herzog et al. \(2012\)](#) usaron una versión temprana de OpenFOAM(R) (v1.6 y v2.0) ([Weller et al., 1998](#)), ANSYS Fluent(R) v6.0 y MFX(R) ([Syamlal et al., 1993](#)), y concluyeron que OpenFOAM(R) no pudo reproducir ciertos patrones de flujo en comparación con los otros códigos. Más recientemente, [Venier et al. \(2018\)](#) investigaron el rendimiento de OpenFOAM(R) v2.2 y los diferentes modelos físicos involucrados en problemas de fluidización pseudo-2D, alcanzando una buena concordancia entre experimentos y simulaciones en términos de forma de burbuja y distribución de sólidos media. El éxito en la representación de los fenómenos de fluidización a través del enfoque CFD no se relaciona exclusivamente con los modelos y los algoritmos involucrados, sino también con la forma en que se implementan. En este trabajo, los códigos CFD ANSYS Fluent(R) v19.2 y OpenFOAM(R) v6.0 se utilizaron empleando el enfoque multifásico Euler-Euler ([Drew, 1982](#)), en diferentes condiciones de operación, utilizando distintos tipos de partículas y geometrías del recinto. Los resultados de las simulaciones son comparados contra los propios experimentales con el fin de sacar conclusiones sobre el desempeño en el estado actual de desarrollo de los softwares mencionados para la representación de sistemas de lechos fluidizados.

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Modelo Matemático

Para el modelado computacional de este tipo de sistemas, se utilizará el Modelo de Dos Fluidos (TFM) basado en el tratamiento de ambas fases (gas y partículas) como si fueran dos continuos interpenetrados ([Drew, 1982](#)). Para ello se utilizan técnicas de promediado sobre las ecuaciones de Navier-Stokes para arribar al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s) + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{u}_s) &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g) + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g \mathbf{u}_g) &= 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho_s \alpha_s \mathbf{u}_s) + \nabla \cdot (\rho_s \alpha_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) &= -\alpha_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot (\alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) + \rho_s \alpha_s \mathbf{g} + K_{sg}(\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) \\
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho_g \alpha_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\rho_g \alpha_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) &= -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) + \rho_g \alpha_g \mathbf{g} + K_{sg}(\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_g)
 \end{aligned} \tag{1}$$

donde p_s representa la presión de sólidos y los tensores de tensiones se definen como:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\tau}_s &= \mu_s [\nabla \mathbf{u}_s + \nabla \mathbf{u}_s^T] + \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) (\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \\ \boldsymbol{\tau}_g &= \mu_g [\nabla \mathbf{u}_g + \nabla \mathbf{u}_g^T] - \frac{2}{3} \mu_g (\nabla \cdot \mathbf{u}_g) \mathbf{I}\end{aligned}\quad (2)$$

Además, la suma de las fracciones de cada fase α deben sumar 1.

El cierre matemático de estas ecuaciones se logra através del modelado de las fuerzas interfaciales (modelo de arrastre) y los modelos reológicos para la fase de partículas. En cuanto a los modelos de arrastre, se utilizará el modelo de [Gidaspow \(1994\)](#) para las partículas B y D:

$$K_{sg} = \begin{cases} 150 \frac{\mu_g \alpha_s^2}{(\Phi d_p)^2 \alpha_g} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_s}{\Phi d_p} |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s| & \alpha_s > 0,2 \\ 0,75 \frac{C_d \alpha_s \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{\Phi d_p} \alpha_g^{-2,65} & \alpha_s \leq 0,2 \end{cases}\quad (3)$$

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) & Re_p < 1000 \\ 0,44 & Re_p \geq 1000 \end{cases}\quad (4)$$

Para partículas aerables (Geldart A), se utilizará una forma modificada del modelo de [Gibilaro et al. \(1985\)](#):

$$K_{sg} = C \left[\frac{17,3}{Re_p} + 0,336 \right] \frac{\alpha_s \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{d_p} \alpha_g^{-1,8}\quad (5)$$

donde $C = 0,3$.

En cuanto a la reología de la fase particulada, para las condiciones de mediana a bajas concentraciones de partículas, se utilizará la teoría cinética de flujo granular (KTGF), basada en los desarrollos de [Jenkins y Savage \(1983\)](#) y [Lun et al. \(1984\)](#), mientras que para altas concentraciones, se utilizará la teoría friccional basada en los desarrollos de [Johnson y Jackson \(1987\)](#) y [Schaeffer \(1987\)](#).

3. MATERIALES Y MÉTODOS

En esta sección se describen los experimentos desarrollados para una posterior validación con las herramientas computacionales. Se proponen 3 disposiciones experimentales como se describe en la Tabla 1.

| Casos | Partículas | Arreglo | Composición | ρ_s [Kg/m ³] | d_p [μ m] | H_{bed} [m] |
|-------|------------|------------|--------------|-------------------------------|------------------|---------------|
| 1 | Geldart B | Cilíndrico | Arena | 2650 | 512.5 | 0.11 |
| 2 | Geldart D | Pseudo-2D | Urea | 1333 | 2600 | 0.107 |
| 3 | Geldart A | Cilíndrico | Cristobalita | 2720 | 75 | 0.632 |

Tabla 1: Casos de prueba

3.1. Caso 1: Lecho fluidizado cilíndrico con partículas Geldart B

Para este caso se ha utilizado una columna cilíndrica de acrílico de 0.11 m de diámetro y 0.86 m de altura. Las partículas sólidas entran en fluidización con aire que circula a través de un distribuidor en el fondo del lecho y las presiones se miden mediante un transmisor de presión en el plenum como se describe en la Fig. 1. La señal de presión se samplea a una frecuencia de 50 Hz con un sistema de adquisición de datos de 10 bits y un algoritmo de FFT para obtener la densidad del espectro de potencias. Además, se utilizó un transmisor ultrasónico de nivel para medir las oscilaciones y expansiones instantáneas del lecho.

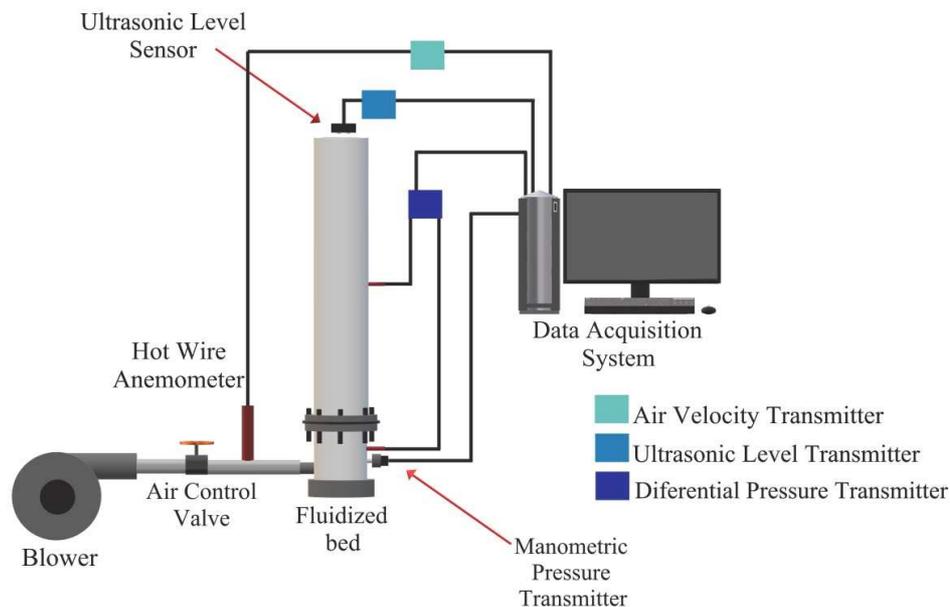


Figura 1: Disposición experimental para el Caso 1.

3.2. Caso 2: Lecho pseudo-2D con partículas Geldart D

Para este caso se utilizó un arreglo pseudo-2D de acrílico como se muestra en la Fig. 2. El contenedor tiene 0.6 m de ancho, 0.76 m de alto y una separación entre placas de 0.025 m. El aire para la fluidización se introduce por medio de un distribuidor en la base del lecho y los resultados se obtienen por medio de procesamiento de imágenes, haciendo uso de una cámara de alta velocidad.

3.3. Caso 3: Lecho fluidizado cilíndrico con partículas Geldart A

Aquí se utilizan los resultados experimentales obtenidos por Kong et al. (2017). El lecho consiste en un tubo cilíndrico de acrílico de 0.05 m de diámetro y 2 m de altura lleno con partículas de arena de cristobalita, el cual fue originalmente diseñado para estudiar la formación de slugs.

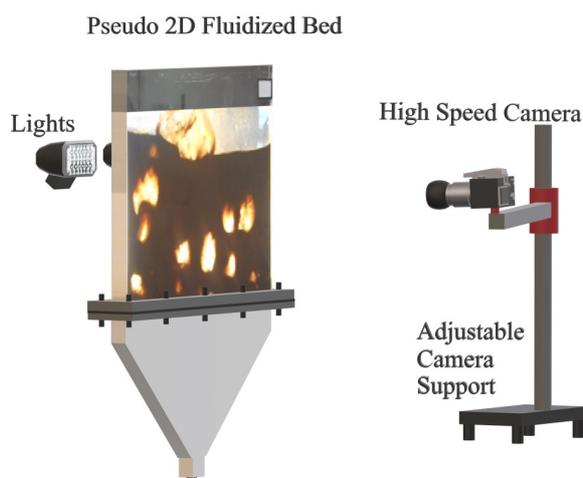


Figura 2: Disposición experimental para el Caso 2.

4. RESULTADOS

En esta sección se describen los seteos numéricos para la simulación computacional de los 3 casos descritos y se comparan los resultados con los propios experimentales. En la Tabla 2 se describen los parámetros físicos y numéricos elegidos para cada uno de los casos.

| Tipo | Descripción |
|---------------------------------------|--|
| Modelo de arrastre | Gidaspow (Caso 1 y 2) y Gibilaro (Caso 3) |
| Maximo empaquetamiento | 0,63 |
| Fracción friccional mínima | 0,5 |
| Coefficiente de restitución | 0,9 |
| Tiempo de simulación total | 10 s (Caso 1), 60 s (Caso 2) and 30 s (Caso 3) |
| Residuos máximos permitidos | 1×10^{-6} |
| Paso de tiempo | 1×10^{-4} s |
| Iteraciones por paso de tiempo | 30 |
| Discretización temporal | 2do orden implícita |
| Esquemas de advección para momento | Upwind lineal de 2do orden |
| Esquemas de advección para α_s | QUICK |

Tabla 2: Parámetros físicos y numéricos.

Donde el método Upwind lineal de 2do orden se basa en una interpolación acotada donde $\phi_f = \phi + \nabla\phi \cdot \vec{r}$, siendo ϕ_f es el valor de la variable en caras mientras que ϕ es el valor de la variable centrada en celda “aguas arriba”. Por otro lado, el método QUICK es un esquema de alto orden basado en interpolación cuadrática para calcular los valores de las variables en caras.

4.1. Caso 1

Para este caso se optó por una malla de 39.240 celdas con un refinamiento uniforme en la dirección axial de la columna. Para la simulación y el experimento, se realizaron una serie de pruebas con distintas velocidades de entrada de gas (desde 0,1 m/s a 0,45 m/s) para reproducir la curva de fluidización (Fig. 3). La salida (borde superior) tiene condiciones de presión atmosférica y las velocidades de sólidos y temperatura granular están configuradas como no-deslizamiento y gradiente nulo, respectivamente. En la Fig. 3 se muestran los resultados experimentales y de la simulación utilizando un coeficiente de esfericidad de 1 y luego de 0.8. Este

último resulta más adecuado dada la falta de esfericidad de las partículas de arena.

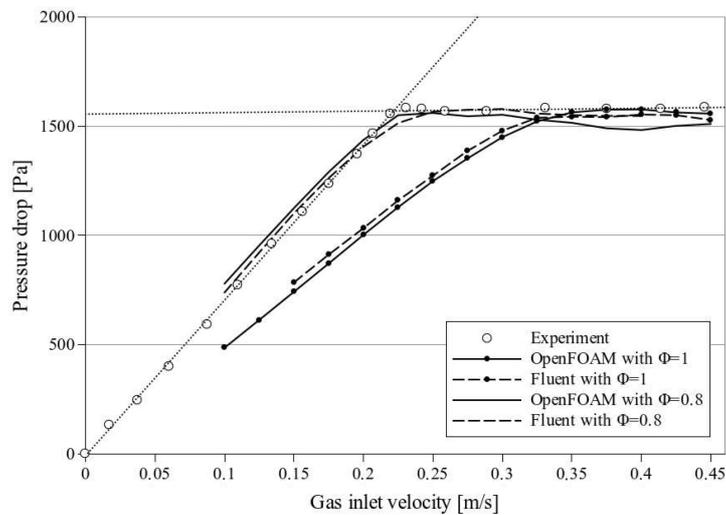


Figura 3: Curva de fluidización para $\Phi = 1$ y $\Phi = 0,8$ para partículas Geldart B.

La Tabla 3 presenta una comparación de los resultados de expansión del lecho y frecuencia de erupción de burbujas para $\Phi = 0,8$. En ambos casos, los resultados de las simulaciones se asemejan a los resultados experimentales con un rango de discrepancia aceptable.

| | Experimento | ANSYS Fluent [®] | OpenFOAM [®] |
|------------------------------|-------------|---------------------------|-----------------------|
| Expansión del lecho [m] | 0.13 | 0.14 | 0.13 |
| Frecuencia de burbujas [1/s] | 5 | 5.07 | 5.26 |

Tabla 3: Comparación de la expansión del lecho y frecuencia de burbujas entre experimentos y simulación para $U = 0.45$ m/s.

4.2. Caso 2

Para este caso, se ha utilizado una malla de FVM de 120.000 (120x100x10) celdas hexaédricas regulares. Las condiciones numéricas y modelos físicos utilizados para este caso son similares a las del Caso 1. Aquí se busca observar los aspectos cualitativos de la fluidización (distribución de sólidos, tamaño y forma de burbujas, etc.). Los resultados instantáneos de distribución de partículas mediante ambos programas se comparan con fotografías instantáneas para las mismas velocidades de ingreso de gas en la Fig. 4. En cuanto a la velocidad de partículas, en las simulaciones se optó por condiciones de no-deslizamiento en las paredes laterales y condiciones de deslizamiento puro en las paredes frontal y posterior.

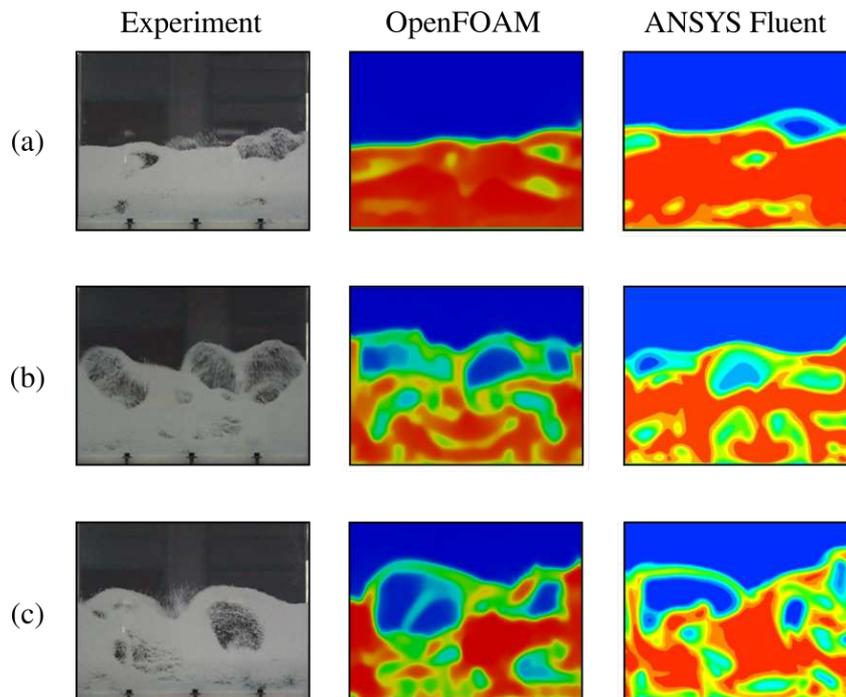


Figura 4: Comparación cualitativa de los experimentos y simulación para distintas velocidades de ingreso de gas: (a) $U = 1.22$ m/s; (b) $U = 1.46$ m/s and (c) $U = 1.63$ m/s.

Para la velocidad intermedia ($U = 1,46$ m/s), se calcularon los perfiles de fracción de sólidos media a distintas alturas y se compararon los resultados experimentales con los de la simulación computacional, como se aprecia en la Fig. 5. Aquí puede observarse que para $y = 0,11$ m por encima del distribuidor, la distribución de partículas se asemeja más a los resultados obtenidos con OpenFOAM®, sin embargo, para $y = 0,22$ m, ambos programas fallan en predecir la distribución media de partículas correcta. Estos resultados indican que, si bien las observaciones cualitativas de tamaños y cantidad de burbujas se asemejan a los observados experimentalmente, la distribución de partículas a distintas alturas del lecho aún no ajustan adecuadamente a los resultados experimentales. Esto implica que aún deben realizarse esfuerzos en el modelado de este tipo de configuraciones pseudo-2D. En particular, en la selección de los modelos físicos y condiciones de borde, debido a la fuerte influencia de las paredes sobre los resultados fluidodinámicos.

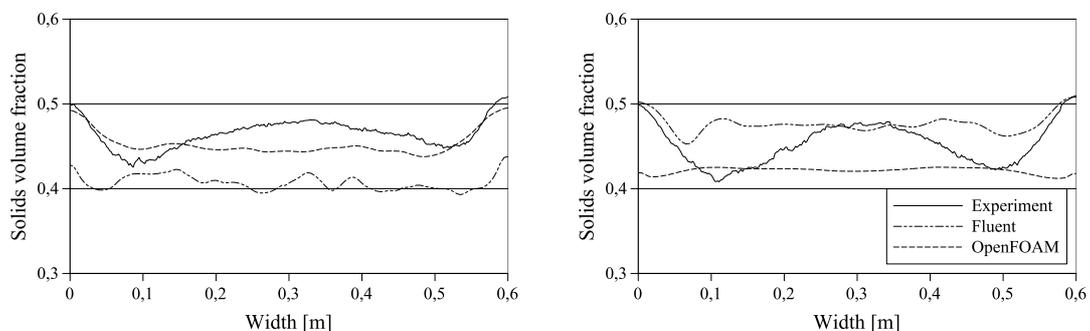


Figura 5: Distribución promediada en el tiempo de fracción de partículas en $y = 0,11$ m (izquierda) y $y = 0,22$ m (derecha) desde la base.

4.3. Caso 3

Aquí se utilizó una malla de 66.304 celdas como se muestra en la Fig. 6. El seteo numérico para este caso es similar a excepción del modelo de arrastre, que en este caso es el modelo de Gibilaro. Las condiciones de borde utilizadas son de deslizamiento puro para la velocidad de las partículas sobre la pared del tubo.

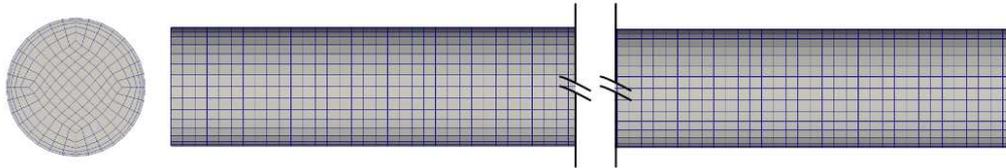


Figura 6: Malla de FVM para partículas Geldart A

Las Figs. 7 y 8 muestran una secuencia de fluidización desde el reposo hasta 10 segundos mediante ambos programas con velocidades de ingreso de gas de $U = 0,12$ m/s y $U = 0,2$ m/s respectivamente. Ambos programas predicen una generación incipiente de burbujas cerca del distribuidor, una zona media de crecimiento y una zona superior de formación de slugs, lo cual es cualitativamente consistente con lo observado experimentalmente (Kong et al., 2017). En particular, ANSYS Fluent[®] predice burbujas más regulares con una frecuencia de generación uniforme en comparación con OpenFOAM[®].

Las Tablas 4 y 5 muestran resultados cuantitativos del experimento y se los compara con los propios del CFD. Para la velocidad más baja, la predicción de velocidad de slugs y frecuencia de OpenFOAM[®] se encuentran más cerca de los resultados de ANSYS Fluent[®], sin embargo, ambos códigos sobre-estiman la longitud de los slugs. Por otro lado, para la velocidad más alta, ambos códigos predicen una velocidad de slugs muy distinta a lo observado experimentalmente.

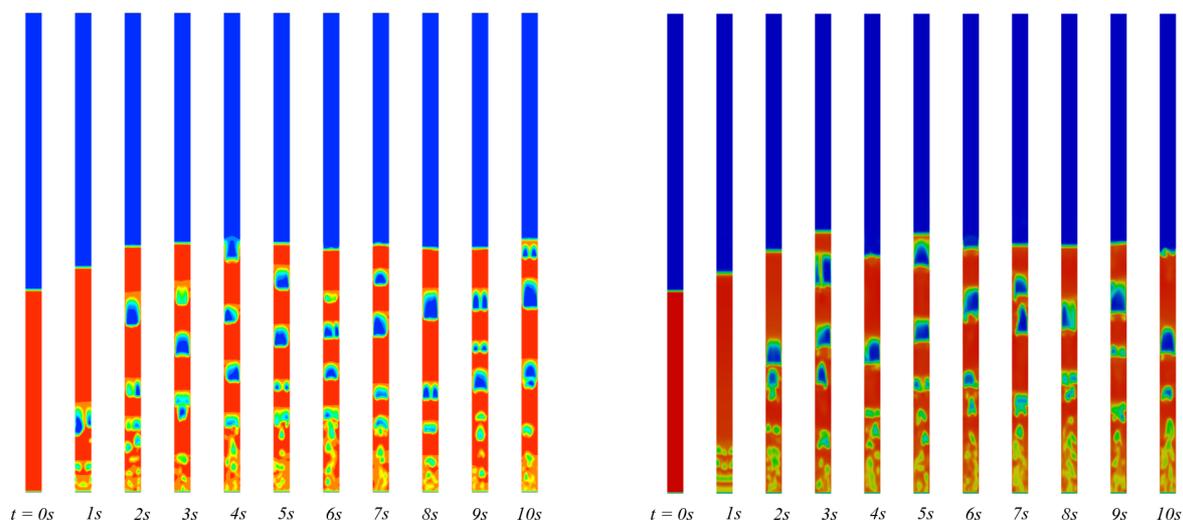
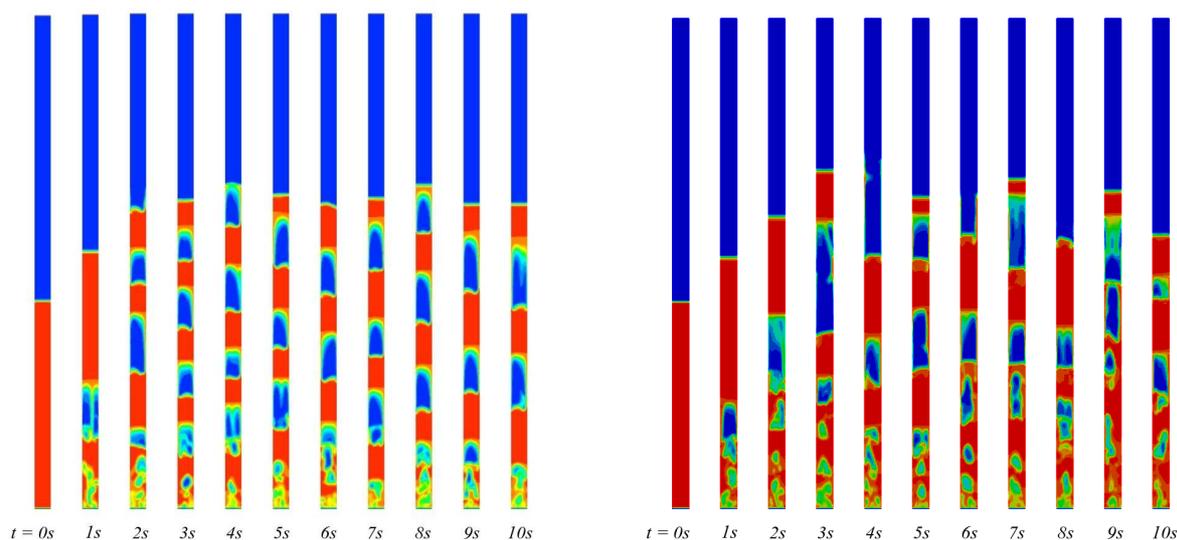


Figura 7: Fracción de sólidos para ANSYS Fluent[®] (izquierda) y OpenFOAM[®] (derecha) para $U = 0,12$ m/s.

| | Experiment | ANSYS Fluent [®] | OpenFOAM [®] |
|----------------------|------------|---------------------------|-----------------------|
| Slug velocity [m/s] | 0.45 | 0.3 | 0.4 |
| Slug length [cm] | 4.2 | 4.5 | 4.5 |
| Slug frequency [1/s] | 1.2 | 1.7 | 1.2 |

Tabla 4: Comparación de parámetros de slugging para $U = 0,12$ m/s.Figura 8: Fracción de sólidos para ANSYS Fluent[®] (izquierda) y OpenFOAM[®] (derecha) para $U = 0,2$ m/s.

| | Experiment | ANSYS Fluent [®] | OpenFOAM [®] |
|----------------------|------------|---------------------------|-----------------------|
| Slug velocity [m/s] | 0.61 | 0.34 | 0.27 |
| Slug length [cm] | 10.2 | 11.0 | 12.0 |
| Slug frequency [1/s] | 1.1 | 1.5 | 1.0 |

Tabla 5: Comparación de parámetros de slugging para $U = 0,2$ m/s.

Estos resultados sugieren que ambos programas resultan inadecuados para predecir el fenómeno de slugging en detalle en sistemas con partículas Geldart A usando los modelos físicos estándar y con refinamientos de malla medios (~ 20 celdas en un diámetro). Para mejorar la precisión de las predicción CFD, los autores consideran que se deben focalizar los esfuerzos en los modelos físicos (i.e. modelos de arrastre adecuados para este tipo de partículas), teniendo en cuenta que un mayor refinamiento de malla es prácticamente inevitable (en base a lo observado por Wang et al. (2008)).

5. CONCLUSIONES

Este trabajo ha investigado el desempeño de las herramientas ANSYS Fluent[®] v19.2 y OpenFOAM[®] v6.0 para el estudio de lechos fluidizados burbujeantes con partículas Geldart A, B y D; y se han comparado los resultados contra los propios experimentales en lechos cilíndricos y pseudo-2D. Se puede concluir que ambos softwares proveen una buena predicción de las fracciones de sólido y burbujas en lechos fluidizados con Geldart B y D. En particular, ANSYS Fluent[®] tiene menor precisión para predecir el tamaño correcto de las burbujas, mientras que para Geldart D, este código provee mejores resultados en la zona fluidizada de la curva

de fluidización comparado con OpenFOAM[®]. En lo respectivo a la fluidización de partículas pequeñas (Geldart A), existe una ligera ventaja en el uso de OpenFOAM[®] frente a ANSYS Fluent[®], al estudiar las características relevantes de fenómenos de slugging (tamaño, velocidad y frecuencia de burbujas). Dicho esto, aún se requieren mejoras sobre ambas herramientas para el modelado preciso de sistemas de lechos fluidizados. Esto se destaca especialmente para condiciones demandantes, como son la fluidización de partículas Geldart A, donde las técnicas alternativas a métodos Euler-Euler, como el Método de Elementos Discretos (DEM), se vuelven prácticamente inabordables.

REFERENCIAS

- Drew D.A. Continuum modeling of two-phase flows. Informe Técnico, DTIC Document, 1982.
- Fluent Manual F.U. Fluent inc. *Chapter*, 6:14–16, 2003.
- Gibilaro L., Di Felice R., Waldram S., y Foscolo P. Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid-particle interactions. *Chemical Engineering Science*, 40(10):1817–1823, 1985.
- Gidaspow D. *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. Academic press, 1994.
- Herzog N., Schreiber M., Egbers C., y Krautz H.J. A comparative study of different CFD-codes for numerical simulation of gas–solid fluidized bed hydrodynamics. *Computers & Chemical Engineering*, 39:41–46, 2012.
- Jenkins J.T. y Savage S.B. A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *Journal of fluid mechanics*, 130:187–202, 1983.
- Johnson P.C. y Jackson R. Frictional–collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing. *Journal of Fluid Mechanics*, 176:67–93, 1987.
- Kong W., Tan T., Baeyens J., Flamant G., y Zhang H. Bubbling and slugging of Geldart group A powders in small diameter columns. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 56(14):4136–4144, 2017.
- Lun C., Savage S., Jeffrey D., y Chepurny N. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *Journal of Fluid Mechanics*, 140:223–256, 1984.
- Reyes Urrutia A., Benoit H., Zambon M., Gauthier D., Flamant G., y Mazza G. Simulation of the behavior of a dense SiC particle suspension as an energy transporting vector using computational fluid dynamics (CFD). *Chemical Engineering Research and Design*, 106:141–154, 2016.
- Schaeffer D.G. Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow. *Journal of Differential Equations*, 66(1):19–50, 1987.
- Syamlal M., Rogers W., y O'Brien T.J. MFIX documentation: Theory guide. *National Energy Technology Laboratory, Department of Energy, Technical Note DOE/METC-95/1013 and NTIS/DE95000031*, 1993.
- Venier C.M., Marquez Damian S., y Nigro N.M. Assessment of gas-particle flow models for pseudo-2d fluidized bed applications. *Chemical Engineering Communications*, 205(4):456–478, 2018.
- Wang H., Yang W., Senior P., Raghavan R., y Duncan S. Investigation of batch fluidized-bed drying by mathematical modeling, CFD simulation and ECT measurement. *AIChE journal*, 54(2):427–444, 2008.
- Weller H.G., Tabor G., Jasak H., y Fureby C. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, 12(6):620–631, 1998.