

Trabajo Final de Máster

Máster en Mecánica de Fluidos Computacional

**Simulación de un lecho
fluidizado gas-sólido en 2D
utilizando OpenFoam**

Presentado por: González Weiberlen, Diego René

Director/a: Stiriba, Youssef

Fecha: 21-07-2020

ÍNDICE

	Página
1 INTRODUCCIÓN	1
1.1 Fundamentos teóricos	4
1.2 Revisión bibliográfica	6
1.3 Objetivos	10
1.3.1 Objetivo General	10
1.3.2 Objetivos Específicos	10
1.4 Estructura del trabajo	11
2 ECUACIONES DE GOBIERNO	12
2.1 Ecuaciones promediadas para flujos multifásicos	12
2.1.1 Conservación de masa	14
2.1.2 Conservación de cantidad de movimiento	15
2.2 Modelo Euleriano-Euleriano para un sistema gas-sólido	16
2.3 Interacción entre las fases	17
2.3.1 Modelo de Syamlal O'Brien	17
2.3.2 Modelo de Gidaspow	18
2.4 Teoría cinética de sólidos granulares	19
2.4.1 Viscosidad y presión de la fase sólida	20
2.5 Modelo de turbulencia para la fase gas	21
3 METODOLOGÍA	24
3.1 Revisión de resolvers implementados para conducir simulaciones de flujos multifásicos	24

3.1.1	Estructura de un caso en OpenFoam	25
3.2	<i>Solvers</i> disponibles para flujos multifásicos en OpenFoam	27
3.3	Discretización de las ecuaciones	28
3.3.1	Algoritmo de solución - PIMPLE	31
3.4	Caso de estudio	32
3.4.1	Condiciones de frontera	33
3.4.2	Datos de las simulaciones	35
4	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	38
4.1	Validación del solver <i>twoPhaseEulerFoam</i>	38
4.2	Hidrodinámica del flujo	42
4.2.1	Fracción de la fase sólida y velocidad del gas	42
4.2.2	Caída de presión en el lecho	46
4.2.3	Expansión del lecho	47
4.3	Evaluación de modelos para el coeficiente de interacción entre fases	49
4.4	Evaluación de modelo de turbulencia para el gas	50
5	CONCLUSIONES	53
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	55

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 1. Regímenes de fluidización. Adaptado de (Kunii et al., 1991)	5
Figura 2. Estructura de un caso en OpenFoam. Adaptado de (OpenCFD, 2019)	26
Figura 3. Esquema del problema. Adaptado de (Liu & Hinrichsen, 2014)	33
Figura 4. a) Malla estructurada de 56×200 elementos. b) Acercamiento a la malla estructurada de 56×200 elementos	36
Figura 5. Evolución de valores promedios e instantáneos de la fracción de sólido y la componente de velocidad en y del gas para velocidad de entrada de 0.38 m/s	39
Figura 6. Evolución de valores promedios e instantáneos de la fracción de sólido y la componente de velocidad en y del gas para velocidad de entrada de 0.46 m/s	40
Figura 7. Fracción de sólidos promedio en $y = 0.2$ m con $u_{\text{gas}} = 0.38$ m/s.	41
Figura 8. Fracción de sólidos promedio en $y = 0.2$ m con $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s.	42
Figura 9. Contornos de fracción de sólidos instantáneos y vectores de fluctuación de velocidad del gas entre 0–1 s para $u_{\text{gas}} = 0.38$ m/s.	43
Figura 10. Contornos de fracción de sólidos instantáneos y vectores de fluctuación de velocidad del gas entre 5–20 s para $u_{\text{gas}} = 0.38$ m/s.	44
Figura 11. Contornos de fracción de sólidos instantáneos y vectores de fluctuación de velocidad del gas entre 0–1 s para $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s.	45
Figura 12. Contornos de fracción de sólidos instantáneos y vectores de fluctuación de velocidad del gas entre 5–20 s para $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s.	45
Figura 13. Perfil de presión promedio a lo largo del centro del lecho	46

Figura 14. Caída de presión promedio en el lecho	47
Figura 15. Expansión del lecho	48
Figura 16. Tasa de expansión del lecho fluidizado H/H_0 en función a la velocidad de entrada del gas	48
Figura 17. Comparación del coeficiente de interacción entre fases para $u_{\text{gas}} = 0.38$ m/s y distintos regímenes de flujo de gas.	50
Figura 18. Comparación del coeficiente de interacción entre fases para $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s y distintos regímenes de flujo de gas.	50
Figura 19. Comparación entre flujo laminar y turbulento para $u_{\text{gas}} =$ 0.38 m/s y distintos modelos de interacción entre fases	51
Figura 20. Comparación entre flujo laminar y turbulento para $u_{\text{gas}} =$ 0.46 m/s y distintos modelos de interacción entre fases	52

LISTA DE TABLAS

	Página
Tabla 1. Constantes del modelo de turbulencia $k - \varepsilon$	23
Tabla 2. Condiciones de frontera para la fase gas en OpenFoam	34
Tabla 3. Condiciones de frontera para la fase sólida en OpenFoam . . .	34
Tabla 4. Esquemas de discretización utilizados	35
Tabla 5. Resumen de las condiciones utilizadas en las simulación	37

SIMULACIÓN DE UN LECHO FLUIDIZADO GAS-SÓLIDO EN 2D UTILIZANDO OPENFOAM

Autor: Diego René González Weiberlen

Director: Prof. Youssef Stiriba

RESUMEN

Este trabajo consiste en la simulación numérica de un flujo bifásico gas-sólido en un lecho fluidizado en dos dimensiones. El modelo Euleriano-Euleriano es utilizado para la simulación del problema, las ecuaciones que modelan el flujo son las ecuaciones de continuidad y Navier-Stokes promediadas para cada fase. Además, la teoría cinética de sólidos granulares se utiliza para la descripción de las propiedades de la fase sólida. Las simulaciones se llevan a cabo mediante el software OpenFoam, utilizando específicamente el solver *twoPhaseEulerFoam*. Los resultados obtenidos son validados con datos experimentales y simulaciones disponibles en la literatura. Dos velocidades de entrada de gas 0.38 y 0.46 m/s son consideradas, los resultados se analizan mediante la comparación del perfil de fracción de sólidos promedio, caída de presión y tasa de expansión del lecho. En todas las simulaciones realizadas, se constata que los resultados obtenidos se ajustan a los proporcionados por la literatura. Se evalúan dos coeficientes de interacción entre las fases, y se encuentra que el modelo de Syamlal O' Brien predice mejor el comportamiento de la fracción de sólidos promedio en el lecho que el modelo de Gidaspow. Comparaciones entre regímenes laminar y turbulento para el flujo de gas, en la distribución radial de las partículas en el lecho también fueron realizadas, no se encontraron diferencias apreciables entre el flujo laminar y turbulento, sin embargo, es necesario llevar a cabo estudios posteriores como simulaciones en tres dimensiones para realizar un análisis más completo.

Palabras clave: Simulación numérica - Flujo multifásico - OpenFoam - Modelo Euleriano-Euleriano

GAS-SOLID FLUIDIZED BED SIMULATION IN 2D USING OPENFOAM

Author: Diego René González Weiberlen

Adviser: Prof. Youssef Stiriba

SUMMARY

This work deals with 2D numerical simulations of two-phase flows in a gas-solid fluidized bed. A general numerical setting has been constructed based on two-phase Eulerian-Eulerian model and the kinetic theory of solid particles using twoPhaseEulerFoam solver implemented in the open source CFD package OpenFoam. The numerical results were validated with experimental measurements available in the literature. Two superficial gas velocities $u_{gas} = 0.38$ and 0.46 m/s were considered, and the the numerical results were analyzed in terms of both instantaneous and time-averaged solid volume fraction, pressure drop, and instantaneous gas velocities. Simulation results are in good agreement with the data available in the literature. Different momentum exchange coefficient for drag models has been tested, and found that the Syamlal O' Brien model provide slightly better results of the averaged solid fraction than the Gidaspow model. Comparison between both regimes of the gas, laminar and turbulent, show no major differences in the averaged solid fraction profile. Further investigations, such as 3D simulations must be achieve in order to provide a complete analysis of the hydrodynamic and the flow pattern.

Key words: Numerical simulation - Multiphase flow - Eulerian model - OpenFoam

Capítulo 1

1. INTRODUCCIÓN

Muchos procesos industriales se caracterizan por la presencia de más de una fase fluida, como columnas de burbujeo (sistema gas-líquido), reactores de tanque agitado (sistema líquido-líquido), separadores ciclón (gas-sólido) y sistemas de lecho fluidizado (gas-sólido o líquido-sólido) (Portela & Oliemans, 2006). En cada uno de estos casos se distingue siempre una fase continua y una fase dispersa o sólida.

El estudio de un sistema de flujo multifásico no es una tarea sencilla, ya que, dependiendo de las condiciones de las fases, se pueden presentar distintos niveles de interacción entre dichas fases. Desde los problemas más sencillos, donde el flujo de la fase continua predomina (*one way coupled*), hasta sistemas complejos donde existen interacciones entre componentes de una misma fase, por ejemplo las aglomeraciones y colisiones entre partículas (*four way coupled*) (Balachandar & Eaton, 2010).

Existen distintas metodologías para abordar los problemas relacionados a los procesos mencionados. Primeramente se cuenta con el método experimental, que presenta las ventajas de poder estudiar y controlar con detalle las variables en los experimentos realizados, siendo una de las desventajas el requerimiento económico para llevar a cabo los experimentos a gran escala, y la repetición exhaustiva de los mismos si fuese necesario. En los estudios experimentales también surge la dificultad relacionada con las técnicas de medición, sobre todo con caudales elevados el flujo es turbulento y con la presencia de partículas las técnicas actuales a veces fallan (Grace & Taghipour, 2004).

Como alternativa al estudio experimental, el uso de simulación computacional presenta las ventajas de poder estudiar el problema y las variables que intervienen en él sin necesidad de realizar pruebas experimentales, de manera a contribuir al diseño y optimización de los procesos, reduciendo los costos (Shi et al., 2019).

Un ejemplo de carácter industrial serían los reactores químicos, los cuales pueden diseñarse a escala de laboratorio, y utilizar dichos datos para validar las simulaciones, de manera a escalar el reactor para operaciones de nivel industrial. Además, la simulación computacional presenta la posibilidad de realizar estudios de caso de manera a predecir el comportamiento de nuevas situaciones no analizadas o estudiadas previamente, mediante experimentos.

En este trabajo se pretende estudiar un sistema de lecho fluidizado gas-sólido mediante CFD (*computational fluid dynamics*). Algunas aplicaciones específicas de los lechos fluidizados gas-sólidos son gasificación, síntesis de productos químicos, intercambio de calor y secado (Kunii et al., 1991). Las aplicaciones mencionadas implican procesos de transferencia de masa, energía y cantidad de movimiento

Antes de enfocarse en una aplicación específica del sistema de lecho fluidizado, primeramente, es necesario contar con soluciones de la hidrodinámica del flujo y partículas para comprender mejor los fenómenos de transporte y las estructuras del flujo que afectan directamente la transferencia de masa, energía y posibles reacciones químicas. Un sistema de lecho fluidizado gas-sólido se caracteriza principalmente por las variables: velocidad de gas, dispersión de las partículas, coeficiente de arrastre y coeficiente de restitución (Shi et al., 2019).

El estudio del lecho fluidizado mediante simulación computacional puede llevarse a cabo mediante simulación numérica directa DNS (*direct numerical simulation*), métodos lagrangianos y métodos Eulerianos. La simulación DNS se utiliza cuando el tamaño de las partículas es del orden de las menores escalas turbulentas (Balachandar & Eaton, 2010). Los métodos Lagrangianos y Eulerianos se caracterizan por considerar al gas como una fase fluida, y a las partículas como la fase dispersa, también existen metodologías que adoptan una combinación de ambos esquemas de solución (Stroh et al., 2016).

El método Lagrangiano utiliza la segunda ley de Newton para describir el movimiento de las partículas, y se modelan las fuerzas que actúan sobre las mismas. El método Euleriano considera, tanto a la fase fluida como a las partículas, como un medio continuo, y se resuelven ecuaciones de conservación para cada fase (Stroh et al., 2016).

Dentro de cada una de estas metodologías, se pueden encontrar a su vez los métodos: VOF (*volume of fluid*), se caracteriza por resolver ecuaciones de conservación de masa y momento para la fracción volumétrica de cada fase; el modelo de mezcla (*mixture model*) plantea una sola ecuación con propiedades de mez-

cla para ambas fases, adicionalmente se evalúan las velocidades relativas de las fases. Por último, se encuentra el modelo Euleriano-Euleriano, en este caso se resuelven ecuaciones de conservación de masa y momento para cada fase (Khan et al., 2014). La elección del método de solución depende del comportamiento e interacción entre las fases del problema, los resultados que se desea obtener y el coste computacional. De acuerdo a las características del problema planteado, se recomienda que el modelado de un sistema de lecho fluidizado gas-sólido se realice mediante el modelo Euleriano-Euleriano (Khan et al., 2014).

De las alternativas mencionadas, en este trabajo se utiliza el modelo Euleriano-Euleriano para la simulación del lecho fluidizado gas-sólido, principalmente por las ventajas relacionadas al coste computacional. La simulación por el método Lagrangiano implica resolver una ecuación para cada una de las partículas del sistema, esto conlleva a que el coste computacional para sistemas con alta concentración de partículas como un lecho fluidizado sea muy elevado. Para una simulación DNS, la resolución de la malla y el paso de tiempo deben ser lo suficientemente pequeños para captar todas las escalas turbulentas del flujo, lo cual también hace que el método tenga un alto coste computacional.

El coeficiente de transferencia de cantidad de movimiento entre las fases es un parámetro muy importante en el modelado de flujos multifásicos. Para un sistema gas-sólido, está dado principalmente por la fuerza de arrastre, algunos de los modelos de arrastre comúnmente utilizados son el de (Gidaspow, 1994) y (Syamlal et al., 1993). Debido a que el modelo Euleriano considera a la fase sólida como un medio continuo, las propiedades de esta fase se modelan mediante la teoría cinética de sólidos granulares (*KTGF*-por sus siglas en inglés) (Gidaspow, 1994).

Existen numerosos softwares de simulación computacional disponibles para la solución del problema planteado, entre los que se pueden mencionar Ansys Fluent, MFIIX (**M**ulti-phase **F**low with **I**nterphase **eX**changes) y OpenFoam (**O**pen **F**ield **O**peration **A**nd **M**anipulation). En este trabajo se opta por la utilización de OpenFoam, por ser de carácter libre y abierto, esto permite la modificación del código fuente en caso de ser necesario para el trabajo actual, como también futuros. OpenFoam dispone de muchos resolvedores de flujos multifásicos, en este trabajo se utiliza específicamente el solver *twoPhaseEulerFoam*.

La simulación del lecho fluidizado gas-sólido de este trabajo se realiza en dos dimensiones. Los resultados del perfil de la fracción de la fase sólida, la caída de presión en el lecho y la tasa expansión del lecho son comparados con datos experimentales y simulaciones de (Taghipour et al., 2005). Además, se evalúa

la incorporación del modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ al flujo de gas, así como dos modelos para la estimación del coeficiente de interacción entre las fases.

1.1 Fundamentos teóricos

La operación de fluidización es aquella que consiste en llevar partículas sólidas a un estado semifluido mediante la suspensión de dichas partículas gracias a una corriente de gas o líquido (Kunii et al., 1991). Al tratarse de un sistema de dos fases, normalmente se denomina al fluido (gas o líquido) como fase continua y al sólido como fase dispersa.

Un lecho fluidizado es un sistema donde las partículas, inicialmente en reposo, son fluidizadas mediante una corriente de gas o líquido que atraviesa el lecho en dirección ascendente.

Existen numerosas aplicaciones industriales que se basan en la utilización de lechos, por ejemplo, los sistemas de gasificación, reactores de lecho fluidizado para la síntesis de productos químicos, intercambiadores de calor y procesos de secado de sólidos (Kunii et al., 1991). También se pueden encontrar procesos complejos que utilicen más de un lecho fluidizado en todo el sistema, como por ejemplo los procesos de craqueo catalítico (Portela & Oliemans, 2006). Algunas características comunes que se encuentran en estos procesos son la facilidad de mezcla de los sólidos, importante para los procesos de transferencia de calor y masa.

Dependiendo del tipo de fase continua, y la velocidad con la cual atraviesa el lecho, se pueden observar distintos regímenes de fluidización. Algunos de ellos son (Kunii et al., 1991):

- a. Lecho fijo (*fixed bed*): el flujo de la fase continua es muy bajo, no tiene la capacidad suficiente de arrastrar las partículas sólidas; a este tipo de sistema se le denomina lecho fijo.
- b. Lecho en condiciones de mínima fluidización (*minimum fluidization*): a medida que el flujo de la fase continua aumenta, las partículas se elevan hasta alcanzar cierta altura, donde quedan suspendidas debido a que la fuerza de rozamiento entre las partículas y el fluido equipara el propio peso de las partículas.
- c. Lecho fluidizado burbujeante (*bubbling fluidization*): este tipo de lechos se

observa cuando la velocidad de la fase continua supera la velocidad mínima de fluidización, es decir, la fuerza de arrastre es mayor a la del peso de las partículas. Se caracteriza por inestabilidades y una agitación más intensa por parte de las partículas.

Los tres tipos de lecho mencionados se pueden observar en la Figura 1.

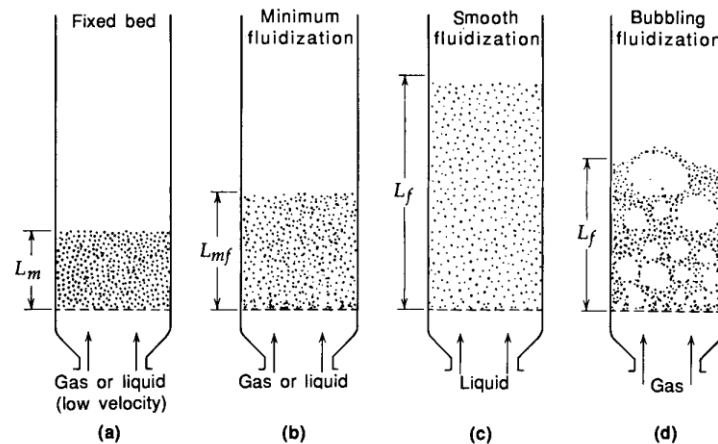


Figura 1. Regímenes de fluidización. Adaptado de (Kunii et al., 1991)

Las características físicas de las partículas sólidas también son importantes a la hora de analizar un lecho fluidizado. (Geldart, 1973) clasificó el comportamiento de los sólidos en un lecho fluidizado en cuatro grupos principales. Para ello utilizó dos parámetros físicos, la diferencia entre las densidades del sólido y el fluido, y el tamaño medio de las partículas. Los cuatro grupos se describen brevemente a continuación:

- Grupo A: antes de llegar al régimen de mínima fluidización, la expansión del lecho ya es considerable. Las partículas que se encuentran dentro de este grupo se caracterizan por poseer tamaño pequeño y/o densidades bajas ($\rho_s \leq 1.4 \text{ g/cm}^3$).
- Grupo B: la expansión del lecho no es tan elevada en comparación a las partículas del grupo A, la formación de burbujas se da cuando se alcanza el régimen de mínima fluidización. Las partículas de este grupo se caracterizan por poseer densidades y tamaños intermedios.
- Grupo C: este grupo se caracteriza por ser difícil de fluidizar, esto se debe a que la fuerza de atracción que ejercen las partículas entre sí es mayor que la que el fluido puede transferir como resultado de la interacción partícula-fluido, otro motivo comúnmente es que el lecho esté húmedo. Normalmente

las partículas de este grupo son de tamaño pequeño y poseen altas cargas electrostáticas.

- Grupo D: corresponde al grupo donde las partículas requieren mayor energía para fluidizarse. El tamaño, así como la densidad de las partículas de este grupo es el mas elevado.

1.2 Revisión bibliográfica

El estudio de flujos multifásicos es un área del conocimiento relativamente nueva, especialmente desde el campo numérico. Los primeros trabajos relacionados a sistemas de flujo gas-sólido son de carácter experimental, a través de correlaciones y/o balances macroscópicos.

Como ejemplos se tienen los trabajos de (Wen & Hashinger, 1960), donde se estudió de manera experimental el proceso de elutriación de partículas de vidrio y carbón mediante un flujo de helio, y a partir de estos datos obtener correlaciones para la tasa de elutriación, estudiando como parámetros el tamaño de partícula y las dimensiones del lecho. (Pigford & Baron, 1965) estudia la estabilidad hidrodinámica de un lecho fluidizado a partir de ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento simplificadas, aplicadas a las partículas, encontrándose soluciones analíticas aproximadas.

(Ogawa et al., 1980) estudió el movimiento de materiales granulares en un lecho fluidizado, específicamente analizó la diferencia entre el proceso de transferencia de cantidad de movimiento entre dos fases fluidas (por ejemplo gas-líquido) y un sistema gas-sólido, encontrándose que la transferencia de cantidad de movimiento en este tipo de sistema se da principalmente mediante colisión entre partículas, mas que por difusión molecular. (Jenkins & Savage, 1983) también realizó estudios acerca del movimiento de partículas, dando especial atención a las colisiones entre las mismas, utilizando balances de masa, cantidad de movimiento, energía y funciones de distribución de probabilidad. Siguiendo la línea de colisiones un estudio importante es el de (Kuwabara & Kono, 1987), donde se introduce el concepto del coeficiente de restitución, definido como relación entre las velocidades relativas de las partículas, antes y después de la colisión; siendo este coeficiente característico para los materiales considerados en la colisión.

Un avance importante en el modelado del comportamiento de las partículas fue la teoría cinética de sólidos granulares (*KTGF*), la cual permite, a través de la

solución de una ecuación de conservación, estimar las propiedades de la fase sólida, considerada como un medio continuo (Gidaspow, 1994). Para ello se resaltan los trabajos de (Lun et al., 1984), donde se describe un modelo para el cálculo de la presión de la fase sólida, responsable de los esfuerzos normales. (Johnson & Jackson, 1987) estudió la fricción entre las partículas, y también la fricción de las partículas con las paredes del sistema, obteniendo como resultado una de las condiciones de frontera comúnmente adoptada en los modelos actuales. Y por último se menciona a (Ding & Gidaspow, 1990), donde se presentan modelos para el cálculo de la viscosidad del sólido. La mayoría de estas propiedades mencionadas son funciones de la temperatura granular, cuya ecuación de conservación es la que se debe resolver, y que representa una medida de la fluctuación de velocidad de las partículas.

Una variable importante en el modelado de los sistemas multifásicos es el coeficiente de transferencia de cantidad de movimiento entre las fases, para un sistema gas-sólido está dado principalmente por la fuerza de arrastre. En este campo los modelos de (Syamlal et al., 1993), basado en la velocidad terminal de las partículas, y el modelo de (Gidaspow, 1994), el cual es una combinación de las ecuaciones de (Ergun, 1952) y (Wen, 1966) son los más comúnmente utilizados. La ecuación de Ergun se obtiene a partir de la caída de presión en el lecho, mientras que la ecuación de Wen y Yu fue formulada a partir de un lecho fluidizado con expansión homogénea.

Desde el punto de vista numérico, muchos estudios relacionados a sistemas de lecho fluidizado se realizan mediante el modelo Euleriano-Euleriano, donde se tratan a las fases fluida (gas) y dispersa (partículas) como medios continuos, cuyas ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento se basan en las ecuaciones de Navier-Stokes (Ishii & Hibiki, 2010). La ventaja principal de esta metodología es el coste computacional, el cual es más bajo entre las otras opciones disponibles (DNS o modelos Lagrangianos). En este contexto, es importante mencionar que el comportamiento de las partículas como un medio continuo debe ser analizado con detalle.

Mediante el método de simulación de partícula discreta (DPMs por sus siglas en inglés), (Tanaka et al., 1993) estudió la hidrodinámica de un lecho fluidizado en dos dimensiones, comparando de manera cualitativa los resultados con experimentos también realizados. Se puede destacar que los resultados obtenidos son alentadores, pero posteriores estudios en tres dimensiones deben ser realizados, y comparados cuantitativamente para validar las simulaciones. (Deen et al., 2007)

también utiliza el modelo discreto de partícula, en este modelo se trata a la fase gaseosa como continua, y a las partículas como entidades discretas, además se tienen en cuenta las interacciones no sólo entre el gas y las partículas, sino también las interacciones entre partículas.

Entre otros estudios numéricos relacionados a sistemas de lecho fluidizado gas-sólido se menciona a (Cammarata et al., 2003), el cual realiza simulaciones en dos y tres dimensiones de lecho fluidizado aplicando el modelo Euleriano-Euleriano y la teoría cinética de los gases, utilizando el software comercial CFX-4. Entre los resultados obtenidos se encuentran la tasa de expansión del lecho y el tamaño de burbujas (o la fracción del gas en el lecho), los cuales son comparados con otros modelos distintos a la teoría cinética de sólidos granulares.

(Ellis et al., 2004) estudio experimentalmente el efecto del diámetro del sistema de lecho fluidizado en la hidrodinámica del flujo para un proceso de craqueo catalítico. Encontraron que la velocidad superficial del gas necesaria para un régimen de fluidización en condiciones turbulentas, depende de la relación altura/diámetro del lecho en cuestión. Así también, las fracciones de gas promediadas en el tiempo se ven afectadas, pero en menor medida, por las dimensiones del lecho.

Uno de los primeros trabajos numéricos bastante completos acerca de lechos fluidizados fue realizado por (Taghipour et al., 2005). En el trabajo se estudia la hidrodinámica del lecho mediante simulación con Ansys Fluent, la cual es validada con sus propios experimentos. Se utiliza el modelo Euleriano-Euleriano, los modelos de (Syamlal et al., 1993) y (Gidaspow, 1994) en una geometría en dos dimensiones. Los resultados obtenidos, como la caída de presión, la tasa de expansión del lecho y la fracción de la fase gaseosa promedio son coherentes con los valores experimentales medidos.

Un estudio experimental fue conducido por (Laverman et al., 2008), donde se estudia la hidrodinámica de un lecho fluidizado utilizando imágenes de partículas y velocimetría, acoplado con un análisis digital de imágenes. Los resultados obtenidos demuestran que estas técnicas poco invasivas de medición permiten medir correctamente variables como la velocidad instantánea de cada fase, así como también la distribución de las burbujas y el tamaño presente en el lecho.

Utilizando MFIX, aplicado al modelo Euleriano-Euleriano acoplado con la teoría cinética, (Parmentier et al., 2008) estudió el efecto del refinamiento de malla en un lecho fluidizado en dos dimensiones para partículas pertenecientes a los grupos A y B de Geldart. Los resultados obtenidos indican que el refinamiento de malla

afecta fuertemente a las cantidades promediadas calculadas (como fracciones) y depende del tipo de partícula utilizada en la simulación.

Otro estudio experimental fue llevado a cabo por (Hernández-Jiménez et al., 2011), donde se comparan resultados experimentales obtenidos a partir de imágenes de partículas y velocidad con simulaciones en dos dimensiones para un lecho fluidizado en dos dimensiones utilizando el modelo Euleriano-Euleriano y la teoría cinética de sólidos granulares.

(Passalacqua & Fox, 2011) implementó la solución del modelo Euleriano-Euleriano aplicado a un sistema gas-sólido en OpenFoam. La validación del solver implementado se llevó a cabo mediante varios casos de prueba, y comparando los resultados con referencias de la literatura y resultados obtenidos con MFIX. Los resultados obtenidos demuestran que el solver es estable, capaz de resolver problemas, por un lado, con alta concentración de gas, y otro con alta concentración de partículas.

(Gao et al., 2012) realizó experimentos y simulaciones de lechos fluidizados utilizando Ansys Fluent en su versión 6.3 en condiciones laminar y turbulento, con el modelo Euleriano-Euleriano y la teoría cinética de los gases. También evalúan una modificación al coeficiente de arrastre, comparando los resultados con los modelos de (Syamlal et al., 1993) y (Gidaspow, 1994).

Viendo que existen distintas metodologías y softwares para la simulación de lechos fluidizados, (Herzog et al., 2012) realizó una comparación entre MFIX, OpenFoam y Fluent. En los estudios realizados se demuestra que la caída de presión y la expansión del lecho calculados con los tres simuladores se ajustan a los valores de la literatura, sin embargo, los valores promediados de la fracción de vacío y los perfiles de velocidad se ajustan a los valores de la literatura con las simulaciones realizadas en MFIX y Fluent, no así con OpenFoam, indicando que el mismo está en una etapa temprana de desarrollo con relación a la resolución de ecuaciones con el modelo Euleriano-Euleriano, o también puede deberse a la falta de implementación correcta de los modelos de la teoría cinética de sólidos granulares.

Un estudio acerca de como influye el coeficiente de restitución, en simulaciones de lecho fluidizado fue realizado por (Loha et al., 2014). Para ello se realizaron simulaciones utilizando el modelo Euleriano-Euleriano y la teoría cinética de sólidos granulares. Se encontró que para un coeficiente igual a 1 (colisión perfectamente elástica) no se verifica la formación de burbujas. Los resultados obtenidos son comparados con la literatura, encontrándose que para valores del coeficiente de

restitución entre 0.95 y 0.99 se obtienen los mejores resultados.

Aprovechando las posibilidades de modificación que presenta OpenFoam, (Liu & Hinrichsen, 2014) también implementa el modelo de dos fluidos junto con la teoría cinética para simular un lecho fluidizado con dos situaciones, una con una alimentación de gas uniforme, y la otra con alimentación de gas en la zona central del lecho. Además, estudia los efectos de los esquemas de discretización de los términos convectivos en la solución de las ecuaciones diferenciales. Los resultados obtenidos son comparados con referencias de la literatura, obteniéndose buenas aproximaciones en ambos casos.

Una modificación realizada al solver gas-sólido propuesto por (Passalacqua & Fox, 2011) en OpenFoam fue realizada por (Venier et al., 2016), especialmente se analizan las formas de garantizar la conservación en la ecuación de cantidad de movimiento. Las modificaciones realizadas y la implementación son validadas mediante diversos casos de estudio, entre ellos un sistema de lecho fluidizado. Los resultados de la fracción de sólidos promedio son consistentes con los presentados por (Passalacqua & Fox, 2011) y (Parmentier et al., 2008). Cabe destacar que (Venier et al., 2013) ya habían realizado simulaciones de lecho fluidizado, pero sin las modificaciones en la ecuación de conservación de cantidad de movimiento, donde los resultados de la fracción de sólidos obtenidos no se ajustaban correctamente a los presentes en la literatura.

Existen diferencias en el comportamiento de la hidrodinámica de lechos fluidizados si estos son densos y no. Un estudio realizado por (Kia & Aminian, 2017), utilizando OpenFoam evalúa el comportamiento de estos tipos de lecho fluidizado, para ello se consideran distintos tipos de modelos de arrastre, así como también distintos modelos para la estimación de la viscosidad de la fase sólida, de manera a encontrar la configuración adecuada en cada caso.

Uno de los estudios más recientes y bastante completo fue realizado por (Shi et al., 2019), donde se realizaron simulaciones, tanto en dos y tres dimensiones de lechos fluidizados, utilizando Ansys Fluent. En cada caso, se evalúa el efecto del flujo de gas en régimen laminar y turbulento, los modelos para el coeficiente de arrastre, el coeficiente de restitución y especularidad. Los resultados obtenidos se validan mediante comparación con valores reportados en la literatura. Se encontró que, para ambos casos analizados, con un flujo turbulento de gas y el modelo de (Syamlal et al., 1993) se obtienen los mejores resultados. Comparativamente, las simulaciones en tres dimensiones presentan menor error a aquellas realizadas en dos dimensiones.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Utilizar herramientas de simulación computacional para estudiar la hidrodinámica de un sistema de lecho fluidizado gas-sólido.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Identificar los resolvers disponibles para flujos multifásicos en OpenFoam, y seleccionar el/los más adecuados para la simulación de un lecho fluidizado gas-sólido.
- Verificar la validez de los resultados de la simulación mediante comparación con resultados experimentales y simulaciones disponibles en la literatura.
- Evaluar los modelos de Gidaspow y Syamlal O' Brien para el coeficiente de interacción entre la fase gas y sólida.
- Evaluar la influencia del régimen de flujo de la fase gaseosa como laminar y turbulento (utilizando el modelo $k - \varepsilon$) en los resultados obtenidos.

1.4 Estructura del trabajo

En el Capítulo 2 se muestra una de las formas de promediar las ecuaciones de conservación, aplicadas a sistemas multifásicos. Seguidamente, se establecen las ecuaciones diferenciales promediadas que gobiernan el sistema gas-sólido y se presentan los modelos para la fuerza de interacción entre las fases considerados. Por último, se presentan las ecuaciones de la teoría cinética de sólidos granulares, utilizada para el modelado de las propiedades de la fase sólida.

El Capítulo 3 describe la metodología utilizada para la simulación del problema planteado. Se especifica la herramienta computacional seleccionada para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales que gobierna el sistema en estudio. A continuación se muestra el proceso de discretización de las ecuaciones de gobierno del sistema, y el algoritmo de solución que utiliza OpenFoam para la resolución de las mismas. Luego se presenta una descripción del problema, incluyendo las propiedades físicas de las fases, la geometría, malla utilizada, condiciones iniciales y de frontera aplicadas al sistema de lecho fluidizado.

En el Capítulo 4 se presentan los resultados numéricos obtenidos junto con el análisis de los mismos. Primeramente se realiza la validación de los resultados, mediante comparaciones con datos disponibles en la literatura, tanto de experimentos como simulaciones. Luego se realiza un análisis de la hidrodinámica del sistema, evaluando el comportamiento del sólido y el gas en el lecho, así como la caída de presión y la tasa de expansión del lecho. Por último se realiza el análisis de la influencia del régimen de flujo de gas, y los modelos para el coeficiente de interacción entre fases considerados.

En el Capítulo 5 se dan las conclusiones finales con relación a los objetivos planteados y se presentan los posibles trabajos futuros.

Capítulo 2

2. ECUACIONES DE GOBIERNO

En este capítulo se presenta un método de promediado de las ecuaciones de conservación, seguidamente se aplica este método de promediado a las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento para las fases continua (gas) y dispersa (sólido).

Debido a que las ecuaciones de cantidad de movimiento poseen un término de interacción entre las fases, es necesario modelar estos términos para dar cierre al conjunto de ecuaciones diferenciales. Así también, es necesaria la utilización de modelos para describir las propiedades de la fase sólida, por ejemplo, presión y viscosidad.

El resto del capítulo presenta los modelos de coeficiente de arrastre comúnmente utilizados en sistemas gas-sólido, así como la teoría cinética de sólidos granulares, requerida para la estimación de propiedades de la fase dispersa.

2.1 Ecuaciones promediadas para flujos multifásicos

La necesidad de las ecuaciones promediadas para flujos multifásicos radica en que hay muchos problemas donde soluciones analíticas no son posibles de obtener. Existen diversos métodos para promediar ecuaciones, como el promedio en el tiempo, promedio de volumen, y el promedio ensamblado, utilizado por ejemplo para la obtención de las ecuaciones de RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes).

De acuerdo a (Prosperetti & Tryggvason, 2009), el método de promediado mas adecuado para flujos multifásicos es el de volumen. Se define un volumen promedio V , encerrado por una frontera S , donde, para un sistema de dos fases $V = V_1 + V_2$ y $S = S_1 + S_2$. Asimismo, para una fase genérica j , el volumen promedio V_j posee frontera S_j y S_i , siendo ésta última la frontera correspondiente a la interfase.

Se define, entonces, una cantidad extensiva F_j (por ejemplo masa, cantidad de movimiento o energía) de forma diferencial como:

$$dF_j = \rho_j f_j dV_j \quad (2.1)$$

Donde ρ_j corresponde a la densidad de la fase j , y f_j es la cantidad F_j por unidad de masa, dicho de otra manera, representa la cantidad intensiva de F_j .

Así, la ecuación de conservación general para cualquier cantidad extensiva F_j se escribe como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_j} \rho_j f_j dV_j &= \int_{S_j} (-\rho_j f_j \mathbf{u}_j + \mathbf{\Phi}_j) \cdot \mathbf{n}_j dS_j + \int_{V_j} \rho_j \theta_j dV_j \\ &+ \int_{S_i} [-\rho_j f_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{w}) + \mathbf{\Phi}_j] \cdot \mathbf{n}_j dS_i \end{aligned} \quad (2.2)$$

Donde \mathbf{u}_j es la velocidad de la fase j , $\mathbf{\Phi}_j$ denota los efectos difusivos (por ejemplo el tensor viscoso en la ecuación de conservación de cantidad de movimiento), \mathbf{n}_j es un vector normal a la superficie j y \mathbf{w} es la velocidad de la interfase.

En la ecuación 2.2, el primer término corresponde a la variación de la cantidad F_j en el volumen de dicha fase. El primer término de la derecha indica la variación de la cantidad por procesos convectivos y difusivos a través de la frontera S_j , el segundo indica los términos fuente θ_j en el volumen de control, y el último determina la variación por convección y difusión, a través de la interfase.

A continuación se define el promedio de volumen para una cantidad q_j (Prosperetti & Tryggvason, 2009):

$$\langle q_j \rangle(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V_j} \int_{V_j} q_j(\mathbf{x} + \xi, t) d\xi^3 \quad (2.3)$$

Donde ξ es una variable relacionada al centro del volumen promediado \mathbf{x} .

Utilizando esta definición es posible reescribir los términos con integrales sobre el volumen de control V_j de la ecuación (2.2) como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_j} \rho_j f_j dV_j &= \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_j f_j \rangle V_j) \\ \int_{V_j} \rho_j \theta_j dV_j &= \langle \rho_j \theta_j \rangle V_j \end{aligned} \quad (2.4)$$

Para escribir los términos con derivadas en las superficies S_j y S_i se utiliza la

relación:

$$\int_{S_j} \mathbf{A}_j \cdot \mathbf{n}_j dS_j = \nabla \cdot \int_{V_j} \mathbf{A}_j d^3\xi \quad (2.5)$$

En donde \mathbf{A}_j representa una cantidad vectorial (por ejemplo velocidad) o tensorial (por ejemplo el tensor de esfuerzos). Utilizando esta relación para el primer término del lado derecho de la ecuación (2.2) se tiene:

$$\int_{S_j} (-\rho_j f_j \mathbf{u}_j + \Phi_j) \cdot \mathbf{n}_j dS_j = \nabla \cdot \langle \rho_j f_j \mathbf{u}_j \rangle V_j \quad (2.6)$$

Combinando los resultados de las ecuaciones (2.4) y (2.6), y dividiendo la ecuación resultante por el volumen promedio V , se obtiene la ecuación general de conservación promediada en volumen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_j f_j \rangle \alpha_j) + \nabla \cdot (\langle \rho_j f_j \mathbf{u}_j \rangle \alpha_j) &= \nabla \cdot (\langle \Phi_j \rangle \alpha_j) + \langle \rho_j \theta_j \rangle \alpha_j \\ &+ \frac{1}{V} \int_{S_i} [-\rho_j f_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{w}) + \Phi_j] \cdot \mathbf{n}_j dS_i \end{aligned} \quad (2.7)$$

En donde el término α_j corresponde a la fracción de volumen para la fase j , definida como:

$$\alpha_j = \frac{V_j}{V} \quad (2.8)$$

En adelante, solamente es necesario expresar correctamente el término f_j para obtener las ecuaciones de conservación deseadas.

2.1.1 Conservación de masa

En la ecuación de conservación de masa, el término F_j corresponde a la masa y $f_j = 1$, quedando así la ecuación (2.7) como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_j \rangle \alpha_j) + \nabla \cdot (\langle \rho_j \mathbf{u}_j \rangle \alpha_j) &= \nabla \cdot (\langle \Phi_j \rangle \alpha_j) + \langle \rho_j \theta_j \rangle \alpha_j \\ &+ \frac{1}{V} \int_{S_i} [-\rho_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{w}) + \Phi_j] \cdot \mathbf{n}_j dS_i \end{aligned} \quad (2.9)$$

En casos generales, los efectos convectivos son mucho mayores a los difusivos, por lo que podría despreciarse dicho término de la ecuación de arriba. Así también, los términos fuente son despreciables si no existen reacciones químicas, y por último, considerando que no existan cambios de fase, el último término de la

ecuación (2.9) es nulo. Con estas consideraciones la ecuación de conservación de masa queda reducida a:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_j \rangle \alpha_j) + \nabla \cdot (\langle \rho_j \mathbf{u}_j \rangle \alpha_j) = 0 \quad (2.10)$$

2.1.2 Conservación de cantidad de movimiento

En este caso, F_j representa la cantidad de movimiento y $f_j = \mathbf{u}_j$, así también, el término fuente se reemplaza por la fuerza de cuerpo $\theta_j = \mathbf{g}$. Los efectos difusivos se reemplazan con el tensor de esfuerzos $\Phi_j = \boldsymbol{\sigma}_j$, donde el mismo tiene componentes normales debido a la presión, y componentes tangenciales debido a los gradientes de velocidad, siendo $\boldsymbol{\sigma}_j = p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_j$, donde \mathbf{I} representa la matriz identidad. En algunos casos, por ejemplo en sólidos, también se tienen en cuenta esfuerzos debido a las colisiones, siendo este efecto representado por $\boldsymbol{\sigma}_c$. Nuevamente, reemplazando estos términos en la ecuación de conservación general (2.2) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_j \mathbf{u}_j \rangle \alpha_j) + \nabla \cdot (\langle \rho_j \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j \rangle \alpha_j) &= \nabla \cdot (\langle \boldsymbol{\sigma}_j \rangle \alpha_j) + \nabla \cdot (\langle \boldsymbol{\sigma}_c \rangle \alpha_j) + \langle \rho_j \rangle \mathbf{g} \alpha_j \\ &+ \frac{1}{V} \int_{S_i} \boldsymbol{\sigma}_j \cdot \mathbf{n}_j dS_i - \frac{1}{V} \int_{S_i} [\rho_j \mathbf{u}_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{w})] \cdot \mathbf{n}_j dS_i \end{aligned} \quad (2.11)$$

Es posible relacionar el penúltimo término del lado derecho de la ecuación de arriba con la fuerza que ejerce una fase sobre otra en la interfase. Si se expresa esta integral de la siguiente manera:

$$\frac{1}{V} \int_{S_i} \boldsymbol{\sigma}_j \cdot \mathbf{n}_j dS_i = \nabla \cdot (\alpha_j \boldsymbol{\sigma}_j) \quad (2.12)$$

esto daría posibilidades a interpretaciones sin sentido físico. Por ejemplo, si se toma un sistema en equilibrio mecánico $\langle \boldsymbol{\sigma}_j \rangle$ debería ser constante, por lo que $\nabla \cdot (\alpha_j \boldsymbol{\sigma}_j) = \langle \boldsymbol{\sigma}_j \rangle \cdot \nabla \alpha_j$, donde esto significa que se generan fuerzas debido a gradientes de concentración en el sistema, lo cual no es posible. Para corregir esto es necesario combinar este término con el primero del lado derecho de la ecuación (2.11), quedando así:

$$\nabla \cdot (\langle \boldsymbol{\sigma}_j \rangle \alpha_j) + \frac{1}{V} \int_{S_i} \boldsymbol{\sigma}_j \cdot \mathbf{n}_j dS_i = \alpha_j \nabla \cdot \langle \boldsymbol{\sigma}_j \rangle + \mathbf{F}_{int} \quad (2.13)$$

Siendo el término \mathbf{F}_{int} la fuerza de interacción entre las fases presentes.

Es posible reducir la ecuación (2.11), el último término del lado derecho de la ecuación representa la transferencia de cantidad de movimiento debido a la transferencia de masa de una fase a otra. Si se considera que el sistema no presenta cambios de fase, éste término es nulo, quedando así la ecuación de conservación de cantidad de movimiento simplificada:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho_j \mathbf{u}_j \rangle \alpha_j) + \nabla \cdot (\langle \rho_j \mathbf{u}_j \mathbf{u}_j \rangle \alpha_j) = \alpha_j \nabla \cdot \langle \boldsymbol{\sigma}_j \rangle + \nabla \cdot (\langle \boldsymbol{\sigma}_c \rangle \alpha_j) + \langle \rho_j \rangle \mathbf{g} \alpha_j + \mathbf{F}_{int} \quad (2.14)$$

2.2 Modelo Euleriano-Euleriano para un sistema gas-sólido

El modelo Euleriano para dos fluidos se apoya en las ecuaciones (2.10) y (2.14) obtenidas en el apartado anterior. Además, cada una de las fases se trata como independiente y continua, donde la sumatoria de las fracciones es igual a uno (Gidaspow, 1994). Se hace la aclaración que de ahora en adelante, para fines prácticos, las variables presentes son las promediadas en el volumen.

Las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento reducidas para la fase gaseosa son:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) - \alpha_g \nabla p + \alpha_g \rho_g \mathbf{g} + K_{sg} (\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_g) \quad (2.16)$$

De manera análoga, las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento reducidas para la fase sólida son:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{u}_s) = 0 \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \rho_s \mathbf{u}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) = \nabla \cdot (\alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) - \alpha_s \nabla p - \nabla p_s + \alpha_s \rho_s \mathbf{g} + K_{sg} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) \quad (2.18)$$

Donde α_i es la fracción de volumen, ρ_i es la densidad, \mathbf{u}_i es la velocidad, $\boldsymbol{\tau}_i$ es el tensor de esfuerzo cortante, para $i = g, s$. La gravedad se denota con \mathbf{g} , p es la presión (que comparten ambas fases), p_s es la presión del sólido y el valor K_{sg} corresponde al coeficiente de interacción entre las fases.

Se considera que cada fase se comporta como un fluido Newtoniano, por lo que

los tensores de esfuerzo cortante se definen como:

$$\boldsymbol{\tau}_g = \mu_g [\boldsymbol{\nabla} \mathbf{u}_g + \mathbf{u}_g^T] - \frac{2}{3} \mu_g (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}_g) \mathbf{I} \quad (2.19)$$

$$\boldsymbol{\tau}_s = \mu_s [\boldsymbol{\nabla} \mathbf{u}_s + \mathbf{u}_s^T] + \left(\lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{u}_s) \mathbf{I} \quad (2.20)$$

Donde μ_i , para $i = g, s$ son las viscosidades dinámicas del gas y sólido, respectivamente; \mathbf{I} es la matriz identidad y λ_s es la viscosidad de volumen para el sólido.

El sistema de ecuaciones diferenciales compuesto por las ecuaciones 2.15, 2.17, 2.16 y 2.18 no puede ser resuelto sin conocer, por ejemplo, el coeficiente de interacción entre las fases, así como las propiedades de viscosidad y presión para el sólido, por lo que estos términos deben ser modelados para dar el cierre correspondiente a las ecuaciones.

2.3 Interacción entre las fases

En flujos multifásicos, la transferencia de cantidad de movimiento se da, no solamente en cada fase, sino que también existen fuerzas de interacción entre las fases que afectan al fenómeno. Según (Prosperetti & Tryggvason, 2009), las principales fuerzas presentes en flujos multifásicos son las de arrastre (*drag*), la fuerza virtual de masa (*virtual mass*), la fuerza de Basset, la fuerza de sustentación (*lift*), la fuerza de *lift* en las paredes y la fuerza debido a la dispersión turbulenta.

En el sistema gas-sólido estudiado, donde existe una amplia diferencia entre las densidades de la fase continua y dispersa, así como también se tratan con partículas de tamaño pequeño, la principal fuerza de interacción es la de arrastre (Ranaide, 2001). Entre los modelos que permiten calcular el coeficiente de arrastre para un sistema gas-sólido, los mas ampliamente utilizados en flujos gas-sólido son los de (Gidaspow, 1994) y el de (Syamlal et al., 1993), como se ha destacado en la revisión bibliográfica.

2.3.1 Modelo de Syamlal O'Brien

A partir de datos experimentales, es posible relacionar la velocidad terminal de la partícula en un lecho fluidizado o fijo como función del número de Reynolds y la fracción de vacío. (Syamlal et al., 1993) se ocupó de modificar esta ecuación para la velocidad terminal y convertirla en una expresión para el coeficiente de

transferencia de cantidad de movimiento.

$$K_{sg} = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_g \alpha_s \rho_g}{u_r^2 d_p} |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s| \quad (2.21)$$

$$C_D = \left(0.63 + 4.8 \sqrt{\frac{u_r}{\text{Re}}} \right)^2 \quad (2.22)$$

$$u_r = 0.5 \left[a - 0.06 \text{Re} + \sqrt{(0.06 \text{Re})^2 + 0.12 \text{Re} (2b - a) + a^2} \right] \quad (2.23)$$

$$a = \alpha_g^{4.14}, \quad b = \begin{cases} 0.8 \alpha_g^{1.28} & \alpha_g \leq 0.85 \\ \alpha_g^{2.65} & \alpha_g > 0.85 \end{cases} \quad (2.24)$$

$$\text{Re} = \frac{\rho_g d_p |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s|}{\mu_g} \quad (2.25)$$

Donde C_D es el coeficiente de arrastre, d_p es el diámetro de la partícula sólida y Re es el número de Reynolds basado en la velocidad relativa de las fases.

2.3.2 Modelo de Gidaspow

Este modelo se basa en resultados de dos experimentos. Uno de ellos utiliza correlaciones a partir de datos de caída de presión en lechos empacados, válido para altas fracciones de la fase sólida en el lecho, en este caso la correlación corresponde al trabajo de (Ergun, 1952). Para lechos donde la fracción de sólidos no sea tan alta, (Wen, 1966) establecieron una correlación a partir de experimentos en un lecho fluidizado con expansión homogénea.

$$K_{sg} = \begin{cases} \frac{3}{4} \frac{C_D \alpha_g \alpha_s \rho_g}{d_p} |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s| \alpha_g^{-2.65} & \alpha_s < 0.2 \\ 150 \frac{\mu_g \alpha_s^2}{\alpha_g^2 d_p^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_s}{\alpha_g d_p} |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s| & \alpha_s \geq 0.2 \end{cases} \quad (2.26)$$

El coeficiente de arrastre C_D depende del número de Reynolds Re , y se calcula de la siguiente manera.

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re} [1 + 0.15 (Re)^{0.687}] & Re < 1000 \\ 0.44 & Re \geq 1000 \end{cases} \quad (2.27)$$

El número de Reynolds se calcula de igual manera que en el modelo anterior.

2.4 Teoría cinética de sólidos granulares

Para dar cierre a las ecuaciones (2.16) y (2.18), se ha mencionado que es necesario contar primeramente con modelos para el coeficiente de transferencia de cantidad de movimiento K_{sg} , los cuales fueron presentados en el apartado anterior. Ahora es necesario estimar las propiedades de la fase sólida.

La teoría cinética de sólidos granulares (*KTGF* por sus siglas en inglés) (Gidaspow, 1994) es un mecanismo para el cálculo de estas cantidades desconocidas. Para ello se define una cantidad denominada temperatura granular Θ , que es una medida de la fluctuación de velocidad de las partículas.

$$\Theta = \frac{1}{3} \overline{\mathbf{u}'^2} \quad (2.28)$$

Donde \mathbf{u}' corresponde a la fluctuación de velocidad de las partículas.

De esta manera, es necesario resolver una ecuación de conservación para la temperatura granular de la forma.

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial (\alpha_s \rho_s \Theta)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{u}_s \Theta) \right] = (-p_s \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_s) : \nabla \mathbf{u}_s + \nabla \cdot (\kappa_s \nabla \Theta) - \gamma_s + J_{vis} \quad (2.29)$$

Donde κ_s es la conductividad de la temperatura granular, γ_s es la tasa de disipación debido a las colisiones entre partículas, J_{vis} es la disipación de la temperatura granular debido a la viscosidad (Gidaspow, 1994).

La conductividad κ_s se calcula como sigue

$$\kappa_s = \frac{150 \rho_s d_p \sqrt{\Theta \pi}}{384 g_0 (1 + e)} \left[1 + \frac{6}{5} g_0 \alpha_s (1 + e) \right]^2 + 2 \alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \left(\frac{\Theta}{\pi} \right)^{0.5} \quad (2.30)$$

Donde e es el coeficiente de restitución, una medida de la relación entre la velocidad relativa de las fases después y antes de las colisiones. Este parámetro normalmente adopta valores entre 0 y 1, siendo valor 0 choques completamente inelásticos y valor 1 choques perfectamente elásticos. El término g_0 es una función de distribución radial, que en este caso se calcula según (Sinclair & Jackson, 1989).

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \right)^{1/3} \right]^{-1} \quad (2.31)$$

Donde $\alpha_{s,\max}$ representa la máxima fracción de sólidos presente en el sistema, siendo un parámetro de diseño en la mayoría de los casos.

La tasa de disipación debido a las colisiones γ_s se calcula como

$$\gamma_s = 3 (1 - e^2) \rho_s \alpha_s^2 g_0 \Theta \left[\frac{4}{d_p} \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} - \nabla \cdot \mathbf{u}_s \right] \quad (2.32)$$

Por último, la tasa de disipación debido a viscosidad es

$$J_{vis} = -3K_{sg}\Theta \quad (2.33)$$

2.4.1 Viscosidad y presión de la fase sólida

El cálculo del esfuerzo cortante para la fase sólida en la ecuación (2.20) depende de las viscosidades de volumen λ_s y viscosidad molecular μ_s . Estas cantidades se modelan de acuerdo a (Gidaspow, 1994). La viscosidad de volumen se calcula como

$$\lambda_s = \frac{4}{3} \alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \quad (2.34)$$

Mientras que la viscosidad molecular es la suma de dos contribuciones, una cinética ($\mu_{s,\text{cin}}$) y otra debida a las colisiones ($\mu_{s,\text{col}}$)

$$\mu_s = \mu_{s,\text{cin}} + \mu_{s,\text{col}} \quad (2.35)$$

A su vez, cada una de estas viscosidades se calcula según

$$\mu_{s,\text{cin}} = \frac{10\rho_s d_p \sqrt{\Theta\pi}}{96g_0(1+e)} \left[1 + \frac{4}{5}(1+e)\alpha_s g_0 \right]^2 \quad (2.36)$$

$$\mu_{s,\text{col}} = \frac{4}{5} \alpha_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \sqrt{\frac{\Theta}{\pi}} \quad (2.37)$$

El esfuerzo normal en la fase sólida está dado por la presión del sistema y la presión debido a las interacciones entre partículas, ésta última también se modela como la contribución de un término cinético y otro debido a las colisiones según (Lun et al., 1984)

$$p_s = p_{s,\text{cin}} + p_{s,\text{col}} \quad (2.38)$$

Donde cada una de las presiones se calcula de la siguiente manera

$$p_{s,\text{cin}} = \alpha_s \rho_s \Theta \quad (2.39)$$

$$p_{s,\text{col}} = 2\rho_s \alpha_s^2 g_0 \Theta (1 + e) \quad (2.40)$$

Como puede apreciarse, tanto en los modelos para la viscosidad y presión, estos dependen de la temperatura granular Θ , de ahí la importancia de la teoría cinética de sólidos granulares en el modelado de flujos multifásicos gas-sólido.

En algunos casos, además de los esfuerzos normales y de corte en la fase sólida mencionados, es necesario incluir términos relacionados a la fricción en dicha fase. Se propone una viscosidad de fricción $\mu_{s,\text{fric}}$ calculada según (Johnson et al., 1990) y una presión de fricción $p_{s,\text{fric}}$ dada por (Schaeffer, 1987).

$$p_{s,\text{fric}} = Fr \frac{(\alpha_s - \alpha_{s,\text{min}})^n}{(\alpha_{s,\text{max}} - \alpha_s)^p} \quad (2.41)$$

$$\mu_{s,\text{fric}} = \frac{p_{s,\text{fric}} \sin \phi_{\text{fric}}}{2\sqrt{I_{2D}}} \quad (2.42)$$

Donde los valores de las constantes presentes en las expresiones son $Fr = 0.05$ N/m², $n = 2$, $p = 5$ y $\phi_{\text{fric}} = 28.5$.

Teniendo en cuenta estos modelos, junto con la teoría cinética de sólidos granulares, puede decirse que las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento para ambas fases ya pueden ser resueltas.

2.5 Modelo de turbulencia para la fase gas

Existen numerosos modelos de turbulencia para estudios en flujos de fase única, incluyendo modelos simples de ecuaciones algebraicas, como también modelos más complejos que implican la resolución de una o más ecuaciones diferenciales, adicionales a las leyes de conservación; algunos de ellos se pueden encontrar en (Michael, 2015). De igual manera, es posible adaptar estos modelos para flujos

multifásicos sin necesidad de alterar demasiado las ecuaciones.

Uno de los modelos de turbulencia más utilizado es el modelo $k - \varepsilon$, que resuelve ecuaciones de conservación para la energía cinética turbulenta y la disipación de la energía cinética turbulenta, respectivamente. La viscosidad turbulenta ν_t se expresa así en función a estas cantidades, y una constante C_μ como.

$$\nu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.43)$$

Cabe destacar que, a diferencia de la viscosidad cinemática ν , la viscosidad turbulenta no es una propiedad del fluido, sino del flujo. Se define de esta manera la viscosidad efectiva ν_{eff} como

$$\nu_{\text{eff}} = \nu + \nu_t \quad (2.44)$$

Así, las ecuaciones de k y ε para el gas, aplicadas a un sistema multifásico, adaptadas a partir de (Launder & Spalding, 1983) son

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha_g \rho_g k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g k) - \nabla^2 (\alpha_g \rho_g D_k k) &= \alpha_g \rho_g G - \left(\frac{2}{3} \alpha_g \rho_g \nabla \cdot \mathbf{u}_g k \right) \\ &- \left(\alpha_g \rho_g \frac{\varepsilon}{k} k \right) + S_k \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\alpha_g \rho_g \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g \varepsilon) - \nabla^2 (\alpha_g \rho_g D_\varepsilon \varepsilon) &= C_1 \alpha_g \rho_g G \frac{\varepsilon}{k} - \left(C_2 \alpha_g \rho_g \frac{\varepsilon}{k} \varepsilon \right) + S_\varepsilon \\ &- \left[\left(\frac{2}{3} C_1 - C_{3,\text{RDT}} \right) \alpha_g \rho_g \nabla \cdot \mathbf{u}_g \varepsilon \right] \end{aligned} \quad (2.46)$$

Donde G es la producción de energía cinética turbulenta debido a la parte anisotrópica del tensor de Reynolds, D_ε y D_k son difusividades efectivas para ε y k , respectivamente, $C_{3,\text{RDT}}$ es un coeficiente de compresión, S_k y S_ε son términos fuente de cada una de las ecuaciones; y por último C_1 y C_2 son constantes del modelo.

La Tabla 1 reúne los valores de las constantes del modelo de turbulencia utilizado (Launder & Spalding, 1983).

Tabla 1. Constantes del modelo de turbulencia $k - \varepsilon$

Coeficiente	Valor
C_μ	0.09
C_1	1.44
C_2	1.92
$C_{3,\text{RDT}}$	0.0
σ_k	1.0
σ_ε	1.3

Capítulo 3

3. METODOLOGÍA

Las ecuaciones presentadas en el Capítulo 2, aplicadas a problemas complejos, no poseen soluciones analíticas. Es por eso que la metodología aplicada a este problema es mediante simulación numérica computacional.

En esta sección se presentan primeramente algunas herramientas para la simulación de flujos multifásicos gas-sólido. De las posibles opciones disponibles, se selecciona el software OpenFoam, al cual se da una pequeña introducción, así como a los resolvers para sistemas multifásicos implementados. Seguidamente, se expone de manera breve el algoritmo de solución de las ecuaciones diferenciales del sistema gas-sólido.

La segunda parte de este capítulo detalla el problema de lecho fluidizado a resolver en este trabajo, especificando la geometría y malla, así como también las condiciones iniciales y de frontera planteadas.

3.1 Revisión de resolvers implementados para conducir simulaciones de flujos multifásicos

En la revisión de la literatura, presentada en la sección 1.2, se mencionan varios trabajos de simulación de lechos fluidizados gas-sólido. De los cuales, las principales herramientas que se destacan para las simulaciones son Ansys Fluent (Ansys, 2020), MFX (Laboratory's, 2020) y OpenFoam (OpenCFD, 2020a).

Una de las ventajas que presenta Ansys Fluent es que, al ser un software con licencia, puede ser utilizado con confianza ya que los modelos implementados deben ser validados rigurosamente, para cualquier tipo de problema físico. En contrapartida, la necesidad de licencia limita la utilización del software por cuestiones económicas, así como las posibilidades de acceso al código interno. El método numérico implementado en Ansys Fluent es el de volumen finito.

En el campo de flujos multifásicos, especialmente en sistemas gas-sólido, MFIIX (**M**ulti-phase **F**low with **I**nterphase **eX**changes) ha demostrado ser una herramienta bastante completa. Cuenta con distintos tipos de metodologías para la solución de dichos problemas, por ejemplo se tiene el modelo Euleriano de dos fluidos y el modelo de Euleriano-Lagrangiano, donde se considera una de las fases continua (por ejemplo gas o líquido), y la fase dispersa (por ejemplo partículas), las cuales son modeladas según un esquema Lagrangiano. El software está basado en lenguaje Fortran y tiene la ventaja de ser un software libre, en comparación con Fluent.

OpenFoam (**O**pen **F**ield **O**peration **A**nd **M**anipulation) es un software para aplicaciones de dinámica de fluidos computacional. Tiene la particularidad de ser un código libre y abierto, no posee una licencia comercial pero si una licencia GPL que permite acceder al código fuente para su utilización, siendo susceptible a modificaciones para aplicaciones específicas. Así también, tiene la desventaja de no contar con una documentación tan detallada como el caso de Ansys Fluent, por ejemplo. OpenFoam es un conjunto de librerías y aplicaciones hechas en lenguaje C++, que combinadas crean *solvers* para aplicaciones particulares como dinámica de fluidos, transferencia de calor y masa, y sistemas multifásicos. El método numérico implementado en los resolvedores de OpenFoam es el de volumen finito.

De las opciones presentadas, en este trabajo se opta por la herramienta OpenFoam ya que tiene implementados algunos resolvedores para flujos multifásicos en base al modelo Euleriano-Euleriano presentado en el Capítulo 2, además, al ser un código abierto abre posibilidades a modificaciones en caso de ser necesario.

3.1.1 Estructura de un caso en OpenFoam

A diferencia de softwares como Ansys Fluent, una de las desventajas de OpenFoam es no contar con una interfaz gráfica para la ejecución del programa. La estructura de trabajo en OpenFoam es a través de una lista de archivos, ordenados en carpetas, siendo cada una de ellas necesaria para cumplir una acción específica en la configuración de un problema.

Las carpetas, junto con los archivos principales en la configuración de un problema en OpenFoam se muestran en la Figura 2.

En la carpeta “*system*”, se establece el solver que será utilizado, el tiempo inicial y final de simulación, el paso de tiempo y otros parámetros de control mediante el archivo “*controlDict*”. En el archivo “*fvSchemes*” se establece el tipo de discretiza-

ción para cada uno de los términos de las ecuaciones diferenciales a resolver, y en “*fvSolution*” se especifican detalles acerca de la solución de los sistemas lineales, resultante de la discretización de las ecuaciones a través del método de volumen finito. La malla para el problema puede ser elaborada con medios externos, ya sea Ansys Fluent o algún otro software, OpenFoam cuenta con una herramienta para la creación de mallas, la cual se define en el archivo “*blockMeshDict*”.

La carpeta “*constant*” contiene información relacionada a las propiedades físicas presentes en el problema (por ejemplo, densidad y viscosidad), así como también las posibilidades de seleccionar modelos de turbulencia o no. La subcarpeta “*polyMesh*” guarda la información acerca de la malla creada, como las fronteras, número de puntos y otras variables relacionadas.

Finalmente, la carpeta denominada “*time directories*” contiene, primeramente, sólo una carpeta denominada “*0*”, donde se especifican las condiciones iniciales y de frontera para las variables presentes en el problema. A medida que se realiza la simulación, en esta carpeta se van generando los resultados correspondientes a los pasos de tiempo especificados en el archivo “*controlDict*”.

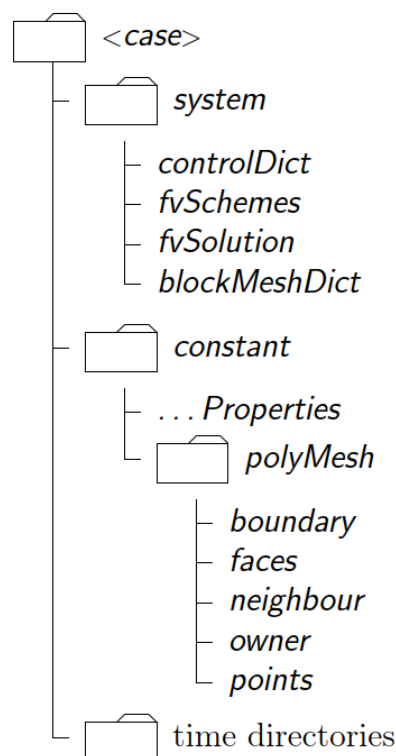


Figura 2. Estructura de un caso en OpenFoam. Adaptado de (OpenCFD, 2019)

Además de estas carpetas y archivos, OpenFoam dispone de herramientas que

permiten realizar tanto el pre-procesamiento de los casos, por ejemplo, creación de mallas, asignación de condiciones iniciales en una región específica del dominio, conversión de mallas de otros softwares como Gmsh (Geuzaine & Remacle, 2020). Y también cuenta con diversas funciones para el postprocesado de las simulaciones, incluyendo librerías que permiten realizar determinados cálculos, y la representación de variables mediante gráficos.

3.2 Solvers disponibles para flujos multifásicos en OpenFoam

De acuerdo al nivel de detalle necesario en la simulación, se distinguen tres tipos principales de metodologías (ya mencionadas en el Capítulo 1); DNS, modelos Euleriano-Lagrangiano y modelos Euleriano-Euleriano. OpenFoam dispone de solvers para cada uno de éstos métodos. En este trabajo se opta por el modelo basado en la formulación Euleriana-Euleriana por el hecho de que el número de partículas (sólidas o burbujas) es muy elevado, por lo tanto, el uso de la formulación Lagrangiana es muy limitado. Además, utilizar DNS requiere una malla fina para resolver todas las escalas turbulentas del flujo, sobre todo para velocidades superficiales del gas altas (el número de Reynolds es elevado) y el flujo de la fase continua es turbulento, además la turbulencia inducida por las partículas también debe ser captada por la simulación.

Los principales *solvers* que pertenecen al grupo de modelos Euleriano-Euleriano son (OpenCFD, 2020b):

- *twoLiquidMixingFoam*: solución de una mezcla de dos fases líquidas, ambas consideradas incompresibles.
- *twoPhaseEulerFoam*: resuelve un sistema bifásico, donde una de las fases es considerada dispersa, y la otra continua. Este solver también tiene implementado la solución de la ecuación de conservación de energía.
- *reactingTwoPhaseEulerFoam*: resolvidor similar al anterior, pero en este caso permite la incorporación de términos fuente en las ecuaciones de conservación de masa. Una característica relevante es que la presión del sistema es considerada una sola, no así el resto de las variables. También resuelve la ecuación de conservación de energía.

El solver utilizado en este trabajo es *twoPhaseEulerFoam*, ya que se está trabajando con dos fases, gas y sólido, y el objetivo es solamente evaluar el comportamiento hidrodinámico de un sistema de lecho fluidizado, por lo que la presencia de

reacciones química como términos fuente en la ecuación de conservación de masa, así como los cambios de fase en el sistema no son considerados. Cabe destacar además, que haciendo referencia a las ecuaciones promediadas en el Capítulo 2, el método de promediado de las ecuaciones aplicado en OpenFoam es el *weighted conditional averaging*, siguiendo el trabajo de (Dopazo, 1977).

Un detalle de formulación y discretización inicial del solver *twoPhaseEulerFoam* puede encontrarse en (OpenCFD, 2005), a continuación se presenta la discretización de la versión más reciente, utilizada en este trabajo, incluyendo el algoritmo PIMPLE para la resolución de las ecuaciones.

3.3 Discretización de las ecuaciones

Para resolver el conjunto de ecuaciones que modelan el sistema en estudio, primeramente es necesario discretizar dichas ecuaciones. Para ello, se considera que las densidades de ambas fases son constantes, entonces las ecuaciones para la fase sólida (2.17) y (2.18), se expresan, al dividir entre ρ_s como:

$$\frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \mathbf{u}_s) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_s \mathbf{u}_s) + \nabla \cdot (\alpha_s \mathbf{u}_s \mathbf{u}_s) = \frac{1}{\rho_s} \nabla \cdot (\alpha_s \boldsymbol{\tau}_s) - \frac{\alpha_s}{\rho_s} \nabla p - \frac{1}{\rho_s} \nabla p_s + \alpha_s \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_s} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) \quad (3.2)$$

Para la fase gas se tendrían las expresiones análogas, partiendo de las ecuaciones (2.15) y (2.16).

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = \frac{1}{\rho_g} \nabla \cdot (\alpha_g \boldsymbol{\tau}_g) - \frac{\alpha_g}{\rho_g} \nabla p + \alpha_g \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_g} (\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_g) \quad (3.4)$$

La discretización de las ecuaciones, presentada a continuación, sigue el trabajo de (Passalacqua & Fox, 2011). Primeramente se presenta la forma semidiscreta de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento (3.2).

$$\mathbf{A}_s \mathbf{u}_s = \mathbf{H}_s - \frac{\alpha_s}{\rho_s} \nabla p - \frac{1}{\rho_s} \nabla p_s + \alpha_s \mathbf{g} + \frac{K_{sg}}{\rho_s} (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_s) \quad (3.5)$$

Donde \mathbf{A}_s representa la diagonal de la matriz de coeficientes resultante de la discretización de la ecuación, y \mathbf{H}_s representa a los términos fuera de la diagonal

de dicha matriz, así como también recoge el vector de términos fuente que no esté explícitamente en la ecuación (3.2). Cabe destacar que los términos discretizados en la ecuación de arriba corresponden a los términos convectivos, difusivos y el término conocido de la parte temporal.

Se puede reordenar la expresión (3.5) si, por un lado se agrupan los términos que contienen la variable desconocida \mathbf{u}_s como:

$$\lambda_s = \frac{1}{A_s + \frac{K_{sg}}{\rho_s}} \quad (3.6)$$

De la misma manera es posible obtener un término análogo λ_g para la fase gas. Por otro lado se agrupan los demás términos de la ecuación (3.5) como:

$$H_s^* = H_s - \frac{\alpha_s}{\rho_s} \nabla p - \frac{1}{\rho_s} \nabla p_s + \alpha_s \mathbf{g} \quad (3.7)$$

Introduciendo estas expresiones en la ecuación (3.5) se tiene una expresión para la velocidad de la fase sólida en forma:

$$\mathbf{u}_s = \lambda_s H_s^* + \lambda_s \frac{K_{sg}}{\rho_s} \mathbf{u}_g \quad (3.8)$$

Esta ecuación todavía no puede resolverse, ya que el lado derecho contiene la otra incógnita, que es la velocidad de la fase gas. Una manera de resolver este problema es introduciendo ésta velocidad en la ecuación de conservación de cantidad de movimiento semidiscreta para la fase gas, y viceversa, teniendo así una ecuación explícita para el cálculo de la velocidad de la fase sólida:

$$\mathbf{u}_s = \xi_s H_s^* + \xi_s \frac{K_{sg}}{\rho_s} \lambda_s H_g^* \quad (3.9)$$

Donde H_g^* es término similar al de la ecuación (3.7), para la fase gas. Y el término ξ_s se define como:

$$\xi_s = \frac{1}{A_s - \lambda_g \frac{K_{sg}^2}{\rho_s \rho_g} + \frac{K_{sg}}{\rho_s}} \quad (3.10)$$

De igual manera, para la fase gas también se cuenta con un coeficiente de la forma ξ_g . Reemplazando de vuelta la expresión (3.7) en la ecuación (3.9), se obtiene la

ecuación final semidiscreta para la velocidad de la fase sólida:

$$\mathbf{u}_s = \xi_s \left[\mathbf{H}_s + \frac{K_{sg}\lambda_g \mathbf{H}_g}{\rho_s} - \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} + \frac{K_{sg}\lambda_g \alpha_g}{\rho_s \rho_g} \right) \nabla p - \frac{1}{\rho_s} \nabla p_s + \left(\alpha_s + \frac{K_{sg}\lambda_g \alpha_g}{\rho_s} \right) \mathbf{g} \right] \quad (3.11)$$

Siguiendo el mismo procedimiento, la velocidad de la fase gas se puede expresar en forma explícita como:

$$\mathbf{u}_g = \xi_g \left[\mathbf{H}_g + \frac{K_{sg}\lambda_s \mathbf{H}_s}{\rho_g} - \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} + \frac{K_{sg}\lambda_s \alpha_s}{\rho_s \rho_g} \right) \nabla p - \frac{K_{sg}\lambda_s}{\rho_s \rho_g} \nabla p_s + \left(\alpha_g + \frac{K_{sg}\lambda_s \alpha_s}{\rho_g} \right) \mathbf{g} \right] \quad (3.12)$$

Éstas son la ecuaciones para predecir la velocidad, previamente conocida la presión. A continuación, es necesario encontrar una ecuación para calcular la presión y corregir dichas velocidades estimadas.

El procedimiento para encontrar la ecuación para la presión se basa en utilizar la condición de que, al considerar el sistema como incompresible, la divergencia del flujo de volumen debe ser nula, esto es:

$$\nabla \cdot \varphi = \nabla \cdot (\alpha_g \varphi_g + \alpha_s \varphi_s) = 0 \quad (3.13)$$

Donde φ , φ_g y φ_s corresponden a los flujos total, de la fase gas y sólida respectivamente. El flujo de volumen se calcula como el producto escalar entre la velocidad con la superficie normal \mathbf{S} . Utilizando las ecuaciones semidiscretas (3.11) y (3.12) para el cálculo de los flujos de sólido y gas, respectivamente, la ecuación (3.13) queda:

$$\nabla \cdot \left\{ \left[\alpha_{g,f} \xi_{g,f} \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} + \frac{K_{sg}\lambda_s \alpha_s}{\rho_s \rho_g} \right)_f + \alpha_{s,f} \xi_{s,f} \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} + \frac{K_{sg}\lambda_g \alpha_g}{\rho_s \rho_g} \right)_f \right] |\mathbf{S}| \nabla^\perp p \right\} = \nabla \cdot \varphi^0 \quad (3.14)$$

Donde se resalta que el flujo de volumen φ^0 del lado derecho no contiene la contribución del gradiente de presión. De esta manera, la presión puede calcularse con ésta última ecuación, y los flujos de volumen pueden corregirse de la siguiente manera:

$$\varphi_s = \varphi_s^0 - \xi_{s,f} \left(\frac{\alpha_s}{\rho_s} + \frac{K_{sg}\lambda_g \alpha_g}{\rho_s \rho_g} \right)_f |\mathbf{S}| \nabla^\perp p \quad (3.15)$$

$$\varphi_g = \varphi_g^0 - \xi_{g,f} \left(\frac{\alpha_g}{\rho_g} + \frac{K_{sg}\lambda_s \alpha_s}{\rho_s \rho_g} \right)_f |\mathbf{S}| \nabla^\perp p \quad (3.16)$$

Siendo la resolución de las velocidades y presión un sistema tipo predictor-corrector. Prediciendo las velocidades con (3.11) y (3.12), calculando la presión con (3.14), y volviendo a corregir los flujos con estas últimas ecuaciones.

Por último se presenta la obtención de la ecuación de conservación de masa para la fase sólida, necesaria para el cálculo de α_s . Para ello se discretiza el término convectivo de la ecuación (3.1), con el flujo de la fase sólida φ_s , quedando así:

$$\frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{s,f} \varphi_s^*) - \nabla \cdot \left[\alpha_{s,f} \xi_{s,f} \left(\frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right)_f |\mathbf{S}| \nabla^\perp \alpha_s \right] = 0 \quad (3.17)$$

Donde, de forma similar a la definición de φ^0 , en este caso φ^* representa el flujo, pero sin considerar la contribución del término de presión de la fase sólida. Es importante recalcar que, resolviendo esta ecuación, la fracción de la fase sólida α_s debe estar entre los límites cero y uno. Para mantener esto, se reescribe el flujo convectivo como función de un flujo de mezcla y un flujo relativo $\varphi_{r,s} = \varphi_s - \varphi_g$, más detalles se pueden encontrar en (Passalacqua & Fox, 2011). Finalmente la ecuación de conservación de masa se escribe como:

$$\frac{\partial \alpha_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \alpha_s \varphi_{r,s}^*) - \nabla \cdot \left[\alpha_{s,f} \xi_{s,f} \left(\frac{\partial p_s}{\partial \alpha_s} \right)_f |\mathbf{S}| \nabla^\perp \alpha_s \right] = 0 \quad (3.18)$$

La solución de esta ecuación se realiza de forma implícita, de manera a garantizar que la fracción del sólido esté dentro del rango adecuado, el procedimiento de solución es iterativo, ya que la ecuación es no lineal con respecto a la fracción α_s . Una vez obtenido el valor de α_s , la fracción de la fase gas se calcula simplemente aplicando la relación $\alpha_s + \alpha_g = 1$.

3.3.1 Algoritmo de solución - PIMPLE

La mayoría de los códigos de CFD que resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes se basan en los algoritmos SIMPLE (Caretto et al., 1973) y PISO (Issa, 1986). En OpenFoam, una combinación de ambos algoritmos, con la posibilidad de introducir factores de relajación, es utilizado para la solución de las ecuaciones presentadas en la sección anterior, este algoritmo se denomina PIMPLE. La secuencia de cálculo que se presenta a continuación está detallada en (Venier et al., 2016):

1. Empezar con las condiciones iniciales, de frontera, y los parámetros físicos

y numéricos necesarios para la simulación.

2. Inicio de las iteraciones de PIMPLE

- a) Resolver la ecuación de conservación de masa para la fase sólida
 - Resolver la ecuación (3.18) aplicando relajación de forma implícita a la matriz obtenida.
 - Agregar la contribución de la presión de partícula de forma implícita
 - Calcular α_s , y la fracción de la fase gas como $\alpha_g = 1 - \alpha_s$
- b) Calcular el coeficiente de interacción de fases K_{sg}
- c) Calcular los términos de la ecuación de la temperatura granular (2.29)
- d) Resolver la ecuación de la temperatura granular
- e) Calcular las propiedades del sólido μ_s y p_s de acuerdo a los modelos considerados
- f) Resolver las ecuaciones de movimiento (3.11) y (3.12) para predecir los valores de velocidad
- g) Iniciar las iteraciones de la ecuación de presión (3.14), para corregir las velocidades del paso anterior mediante los flujos (3.15) y (3.16) hasta convergencia

3. Repetir los cálculos para un nuevo paso de tiempo

3.4 Caso de estudio

El problema planteado en este trabajo corresponde a un sistema de lecho fluidizado gas-sólido, basado en el trabajo experimental y simulación de (Taghipour et al., 2005), donde el lecho está constituido por partículas esféricas de vidrio con una densidad de 2500 kg/m^3 y un diámetro de partículas igual a $275 \mu\text{m}$, el gas utilizado corresponde a aire con una densidad de 1.225 kg/m^3 .

La dimensión del lecho es de 1 m de alto, 0.28 m de ancho y 0.025 m de profundidad. Al inicio, las partículas cubren una altura de 0.4 m del lecho, con una fracción de volumen igual a 0.6. La alimentación del gas es uniforme en la región inferior del lecho, mientras que la parte superior del lecho está abierta, de tal

manera que la corriente de gas salga del sistema. Un esquema del problema, en dos dimensiones se muestra en la Figura 3, junto con las fronteras del sistema.

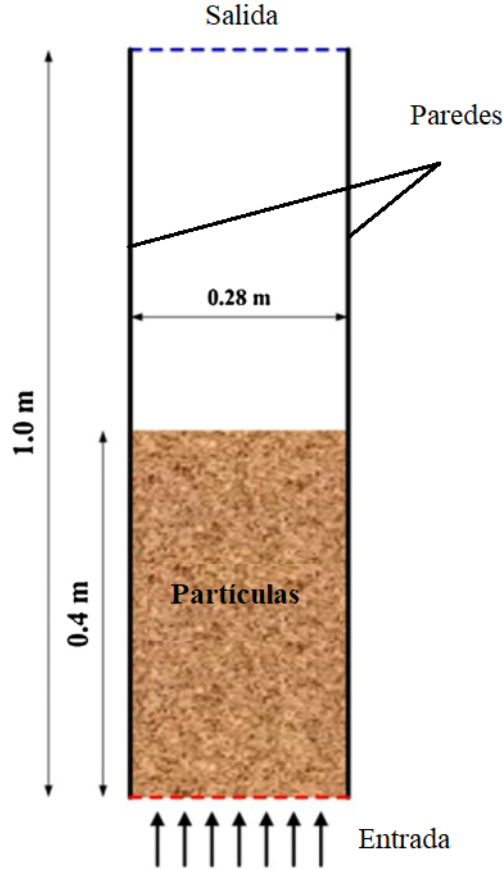


Figura 3. Esquema del problema. Adaptado de (Liu & Hinrichsen, 2014)

3.4.1 Condiciones de frontera

Con respecto a la fase gas, se consideran dos velocidades de entrada, iguales a 0.38 y 0.46 m/s, la condición de salida se establece como una presión conocida, igual a 10^5 Pa, en las paredes del sistema se considera la condición de no deslizamiento. Para la fase sólida, se establece que la velocidad es cero tanto en la entrada como la salida del sistema, en las paredes se adopta la condición propuesta por (Johnson & Jackson, 1987):

$$\nabla \tau_{s,w} = -\frac{\pi}{6} \frac{\alpha_s}{\alpha_{s,\max}} \psi \rho_s g_0 \sqrt{3\Theta} \mathbf{u}_{s,w} \quad (3.19)$$

Donde $\tau_{s,w}$ es el esfuerzo cortante de la fase sólida en la pared, ψ es el coeficiente de especularidad, si el valor es cero indica una colisión perfectamente elástica con la pared, si es uno, la condición de no deslizamiento es adoptada, y $\mathbf{u}_{s,w}$ es la velocidad de la fase sólida en la pared, en este trabajo se utiliza un valor de $\psi =$

0.5. El valor de $\alpha_{s,max}$ es un parámetro que limita la fracción de empaquetamiento de sólidos en el sistema, y normalmente los valores son de diseño, en este caso se utiliza una fracción máxima de 0.70. El coeficiente de restitución, presentado en la ecuación (2.30) se toma igual a 0.9, de acuerdo a (Taghipour et al., 2005).

El solver seleccionado tiene implementado la solución de la ecuación de conservación de energía, como este trabajo solamente evalúa la hidrodinámica del sistema, se fija una temperatura constante en todas las fronteras de manera a evitar que las transferencias de energía afecten al problema.

Una lista mas específica de las condiciones de frontera para la fase gas, utilizadas en OpenFoam se muestra en la Tabla 2.

Tabla 2. Condiciones de frontera para la fase gas en OpenFoam

Frontera	Variables de la fase gas			
	U.air	alpha.air	p	p_rgh
Entrada	instititial InletVelocity	zeroGradient	calculated internalField	fixedFluxPressure internalField
Salida	pressureInlet OutletVelocity	zeroGradient	calculated internalField	prghPressure internalField
Paredes	noslip	zeroGradient	calculated internalField	fixedFluxPressure internalField

De la misma manera, en la Tabla 3 se especifican las condiciones de frontera para la fase sólida, también utilizadas en OpenFoam.

Tabla 3. Condiciones de frontera para la fase sólida en OpenFoam

Frontera	Variables de la fase slida		
	U.particles	alpha.particles	theta.particles
Entrada	fixedValue	zeroGradient	fixedValue
Salida	fixedValue	zeroGradient	zeroGradient
Paredes	JohnsonJackson ParticleSlip	zeroGradient	JohnsonJackson ParticleTheta

OpenFoam dispone de herramientas que permiten discretizar los términos de las ecuaciones de distintas maneras, esto se realiza en el archivo *fvSchemes*, como se

ha mencionado previamente. En la Tabla 4 se muestran los esquemas de discretización utilizados en este trabajo.

Tabla 4. Esquemas de discretización utilizados

Término	Discretización
$\frac{\partial}{\partial t}$	backward
$\nabla\psi$	Gauss Linear
$\nabla \cdot \psi$	limitedLinear
∇p	Gauss Linear
$\nabla \cdot (\mathbf{u}_i \mathbf{u}_i)$	limitedLinearV
$\nabla \cdot (\mathbf{u}_i \alpha_i)$	limitedLinear1
$\nabla \cdot \tau_i$	Gauss linear
$\nabla^2 \psi$	Gauss linear corrected
$\nabla^\perp \psi$	corrected
ψ_f	linear

Los parámetros numéricos en la Tabla 4 identifican una variable cualquiera ψ , el gradiente normal a la superficie $\nabla^\perp \psi$, el esquema de interpolación en la cara de la celda es ψ_f , y el número 1 indica que el esquema es TVD (*total variation diminishing*).

3.4.2 Datos de las simulaciones

La simulación se realiza en dos dimensiones, utilizando una malla de 56x200 elementos, siendo el espacio entre celdas igual a 0.005 m en ambas direcciones. Esta malla corresponde a la utilizada por (Taghipour et al., 2005), donde se ha realizado el test de independencia de malla correspondiente. Además, la malla utilizada cumple el requisito $\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2} \geq d_p$, permitiendo por lo menos la presencia de dos partículas en una celda de la malla (Shi et al., 2019). La malla utilizada, junto con un acercamiento de la misma se muestra en la Figura 4.

De manera a comparar los resultados correctamente con los obtenidos por (Taghipour et al., 2005), es necesario un tiempo de simulación suficiente para alcanzar un estado estadísticamente estacionario. En este caso la simulación se lleva a cabo con un paso de tiempo de 1×10^{-3} s, siendo este paso de tiempo suficiente

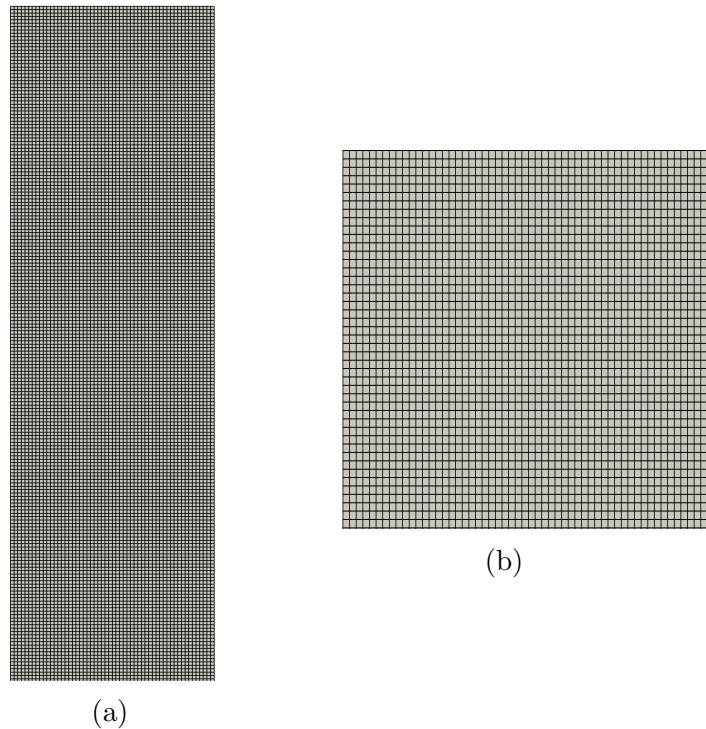


Figura 4. a) Malla estructurada de 56×200 elementos. b) Acercamiento a la malla estructurada de 56×200 elementos

para satisfacer la condición de CFL (Courant-Friedrichs-Lewy). El tiempo total de simulación es de 60 s, también se toman muestras a los 20 s, de manera a evaluar la evolución de las cantidades promediadas. El cálculo de los promedios en el tiempo se realizan desde el tiempo 5 s en adelante, de manera a evitar las fluctuaciones en el arranque del proceso.

Para validar las simulaciones, se realiza la comparación del perfil de la fracción del sólido promedio a una altura de 0.2 m. Luego, también se comparan la caída de presión en el lecho, y la tasa expansión del lecho H/H_0 , donde H es la altura del lecho en las condiciones estacionarias, y H_0 es la altura inicial del lecho.

Con las simulaciones realizadas, se pretende estudiar el efecto del régimen de flujo de gas, siendo éstos laminar y turbulento con un modelo RANS, específicamente $k - \varepsilon$. También se evalúa el efecto de los modelos de (Syamlal et al., 1993) y (Gidaspow, 1994) para el coeficiente de arrastre entre las fases, en los resultados obtenidos.

Un resumen de las condiciones de simulación utilizadas se muestra en la Tabla 5.

Tabla 5. Resumen de las condiciones utilizadas en las simulación

Variable	Valor
Densidad aire	1.225 kg/m ³
Densidad partícula	2500 kg/m ³
Diámetro de partícula	275 μ m
Dimensión del lecho	Ancho = 0.28 m, Alto = 1 m
Espaciado de malla	$\Delta x = \Delta y = 0.005$
Altura inicial de partículas	0.4 m
Fraccion inicial de partículas	0.6
Refinamiento de malla	56 \times 200
Paso de tiempo	1×10^{-3} s
Tiempo total	20 s, 60 s
Velocidad del gas	0.38-0.46 m/s
Coefficiente de restitución	0.9
Coefficiente de especularidad	0.5
Modelo de turbulencia	k - ε
Coefficiente de interacción	Syamlal O'Brien, Gidaspow

Capítulo 4

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados de las simulaciones realizadas según la metodología propuesta en el Capítulo 3.

Primeramente se realiza la validación del solver utilizado, para ello se comparan los perfiles de la fracción de sólidos promediada en el tiempo, para dos velocidades de entrada del gas, con resultados experimentales y simulaciones disponibles en la literatura.

Una vez validado el solver, se realiza un análisis de la hidrodinámica del sistema, mediante la visualización de los contornos de la fracción de sólidos y los vectores de la fluctuación de velocidad de la fase gas, también se evalúa la caída de presión en el lecho, y la tasa de expansión del lecho, para las dos velocidades de entrada de gas.

Por último, se investiga el efecto de los modelos para el coeficiente de interacción entre las fases y el régimen de flujo de gas (laminar y turbulento) en los perfiles de la fracción de sólidos.

4.1 Validación del solver *twoPhaseEulerFoam*

La validación del solver consiste en la comparación de los resultados de las simulaciones, con resultados disponibles en la literatura, ya sean simulaciones tipo DNS o experimentos, por ejemplo.

En este caso, la validación se realiza por comparación de los perfiles de fracción de sólido promediada en el tiempo con los resultados experimentales y simulaciones de (Taghipour et al., 2005), el perfil de la fracción promedio se evalúa a una altura del lecho de 0.2 m.

Es importante destacar que el promedio realizado por (Taghipour et al., 2005)

fue calculado entre 5-25 s de simulación, mientras que para los resultados experimentales se realizaron tres mediciones en períodos de 100 s cada uno. En este trabajo, los resultados promedios se obtuvieron para dos períodos de tiempo distintos, uno entre 5-20 s y otro entre 5-60 s. También es importante mencionar que los parámetros utilizados para la obtención de estos resultados se encuentran en la Tabla 5, donde el flujo de gas es considerado laminar, y el modelo de interacción entre fases es el propuesto por (Syamlal et al., 1993).

En la Figura 5 y Figura 6 se muestra la evolución de la fracción de sólidos, y el componente de velocidad en dirección y para la fase gas, esto para las velocidades de entrada de gas igual a 0.38 m/s y 0.46 m/s. Esta evolución se evalúa en dos regiones del flujo, una en un punto inmediato a la pared, y otro en el centro del lecho fluidizado, ambos a una altura de $y = 0.2$ m.

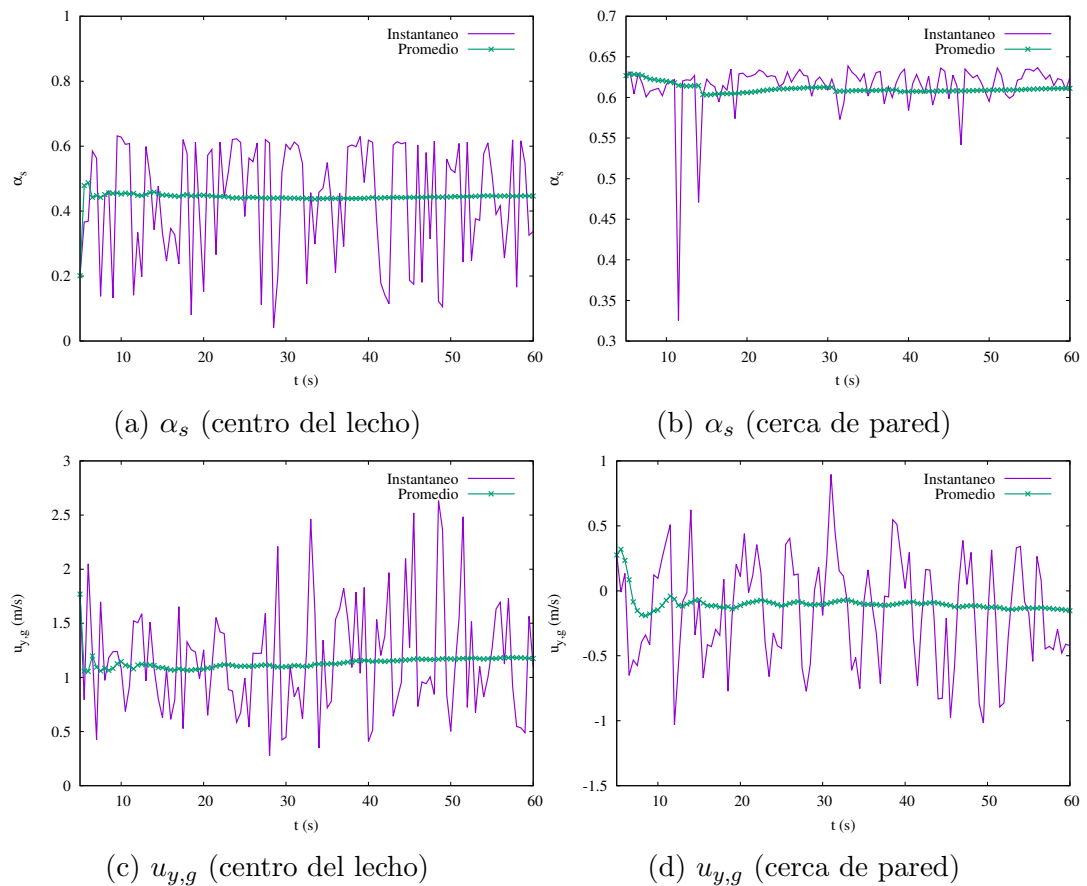


Figura 5. Evolución de valores promedios e instantáneos de la fracción de sólido y la componente de velocidad en y del gas para velocidad de entrada de 0.38 m/s

En base a esto, puede observarse que el período de tiempo de 20 s para la toma del promedio no es completamente adecuado, ya que principalmente se siguen

observando variaciones en el promedio, tanto para la fracción del sólido como el componente de velocidad en y de la fase gas, en la zona cercana a la pared. Cabe resaltar, además, que las variaciones en las cantidades promedio son mayores para la velocidad de 0.46 m/s.

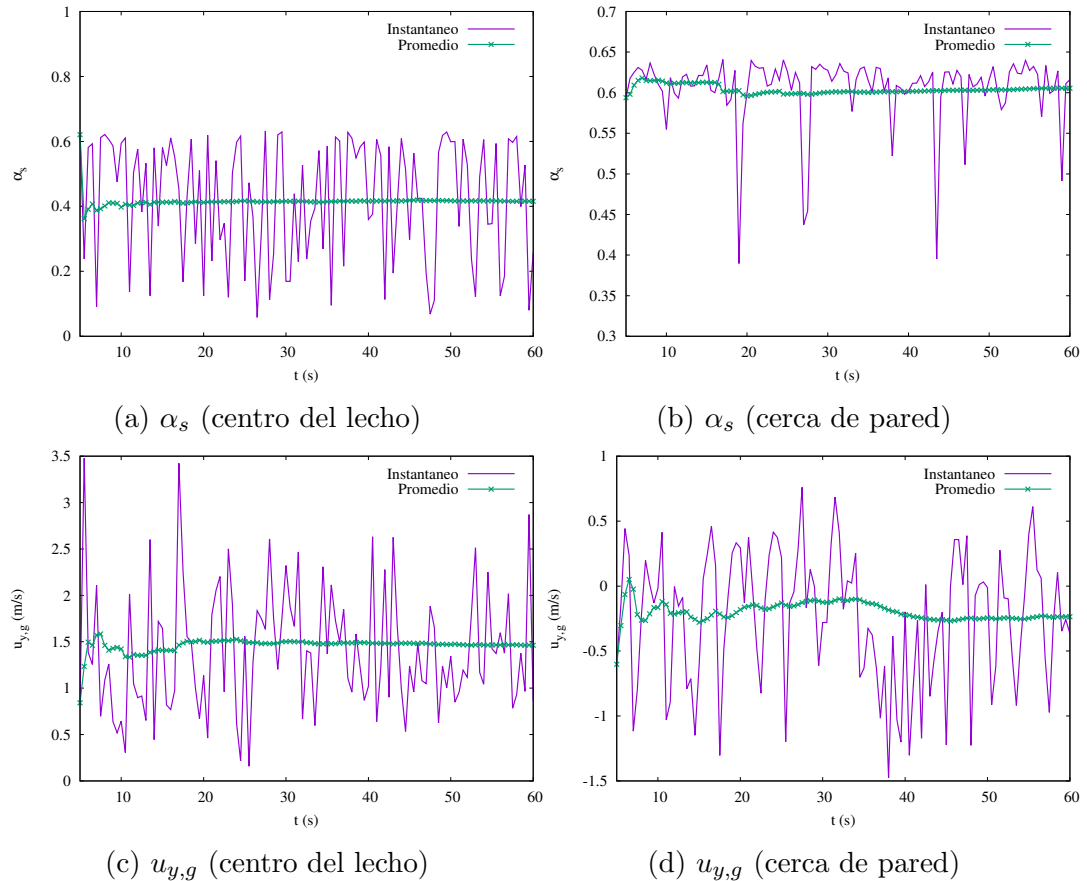


Figura 6. Evolución de valores promedios e instantáneos de la fracción de sólido y la componente de velocidad en y del gas para velocidad de entrada de 0.46 m/s

En la Figura 7 se muestra el perfil de la fracción de sólidos obtenida para una velocidad de entrada del gas igual a 0.38 m/s. Se puede apreciar que el perfil de la fracción promediada entre 5-20 s no es simétrica, en comparación a la obtenida con un tiempo mayor para el cálculo del promedio, es importante notar que los valores experimentales tampoco presentan un comportamiento simétrico. Puede apreciarse que en los resultados de este trabajo, y en las simulaciones de (Taghipour et al., 2005), las fracciones del sólido máximas se encuentran en las zonas cercanas a las paredes del lecho, alcanzando valores cercanos a 0.6, siendo esto similar a las medidas experimentales. Sin embargo, en los resultados experimentales también se observa que existe una alta concentración de sólidos en el centro del lecho, alcanzando valores cercanos a 0.55, lo cual difiere con

las simulaciones realizadas, tanto en este trabajo como en las simulaciones de (Taghipour et al., 2005). De esta manera, es posible decir que los resultados de este trabajo se aproximan de manera razonable a los resultados experimentales. Se logra captar el comportamiento cerca de las paredes, lugar donde existen las mayores variaciones en la fracción del sólido.

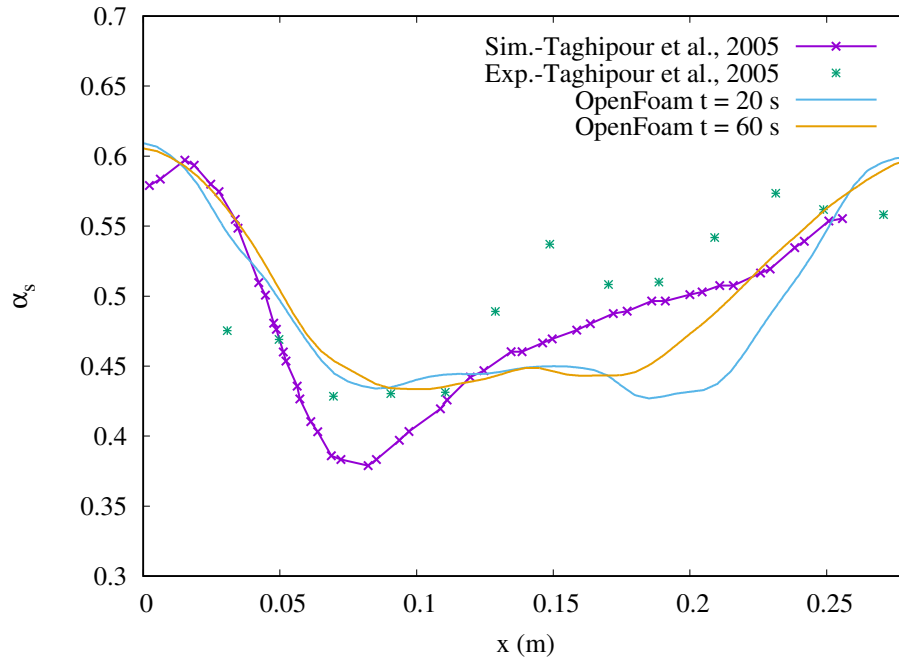


Figura 7. Fracción de sólidos promedio en $y = 0.2$ m con $u_{gas} = 0.38$ m/s.

En la Figura 8 se muestra el perfil de la fracción de sólidos obtenida para una velocidad de entrada del gas igual a 0.46 m/s. En este caso se observa un comportamiento más simétrico de la fracción del sólido. Se puede apreciar que los resultados de la simulación de (Taghipour et al., 2005) subpredicen los valores de la fracción en casi todo el lecho, mientras que los resultados de este trabajo se ajustan mejor a los resultados del experimento. Nuevamente se encuentra una pequeña diferencia entre los resultados para los tiempos de promediado considerados, de acuerdo al comportamiento de los valores experimentales es posible decir que los resultados promediados para un tiempo entre 5-60 s presentan una mejor aproximación. Así también puede mencionarse que el tiempo de simulación de 60 s posiblemente sea insuficiente para que los promedios sean independientes del tiempo, como se ve en la Figura 6.

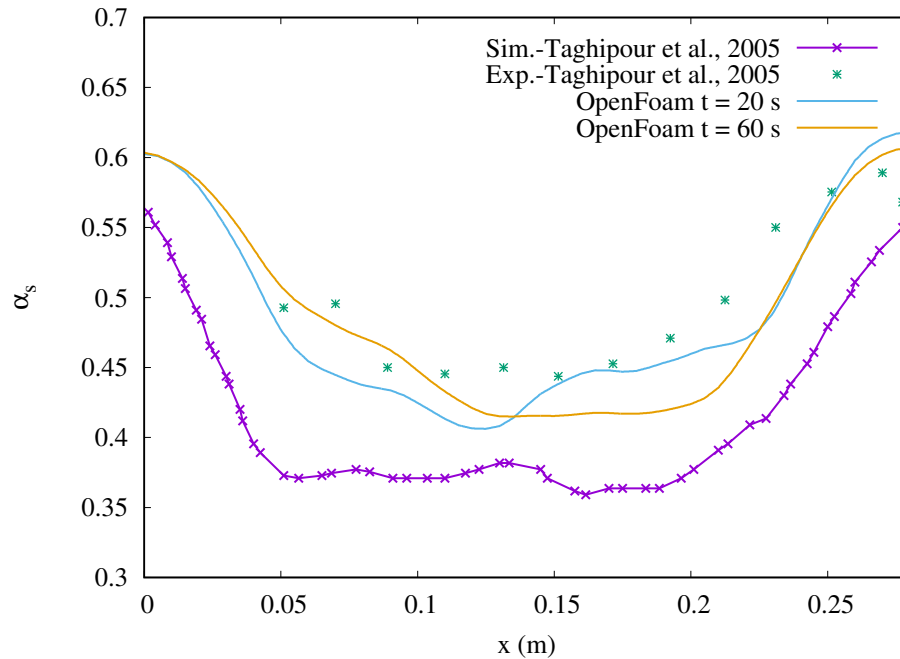


Figura 8. Fracción de sólidos promedio en $y = 0.2$ m con $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s.

De forma similar que en el caso anterior, aquí también se observa que las mayores fracciones de sólido se concentran cerca de las paredes, también alcanzando cercanos a 0.6. Esto ocurre porque la velocidad del gas es mayor en el centro del lecho, facilitando el arrastre del sólido en esta zona, y como la velocidad del gas no es lo suficientemente elevada, las partículas alcanzan cierta altura máxima y luego tienden a distribuirse hacia las paredes.

4.2 Hidrodinámica del flujo

En esta sección se describe el comportamiento de las partículas y el gas en el lecho, para las dos velocidades consideradas. El análisis del comportamiento de las fases se realiza para dos períodos de tiempo, uno al inicio del proceso (entre 0-1 s), y otro para tiempos más elevados (5-20 s). Luego se analiza la caída de presión y el nivel de expansión del lecho, también para las dos velocidades consideradas. Los parámetros y condiciones de la simulación son los mismos que los expuestos en el apartado anterior.

4.2.1 Fracción de la fase sólida y velocidad del gas

En la Figura 9 se muestran los contornos de la fracción de sólido instantáneas al inicio del proceso, y los vectores de la fluctuación de velocidad del gas, para una

velocidad de entrada de gas igual a 0.38 m/s. Se puede apreciar que los contornos son prácticamente simétricos en cada uno de los tiempos mostrados. Se puede observar que a medida que el gas atraviesa el lecho, las partículas se ubican en el centro, esto puede relacionarse con los vórtices mostrados por los vectores de velocidad, los cuales tienen sentidos diferentes. Una manera de explicar esta disposición del sólido es que debido a las fuerzas de inercia generadas por los vórtices, las partículas no pueden permanecer dentro de los mismos, tendiendo a dispersarse fuera de los vórtices.

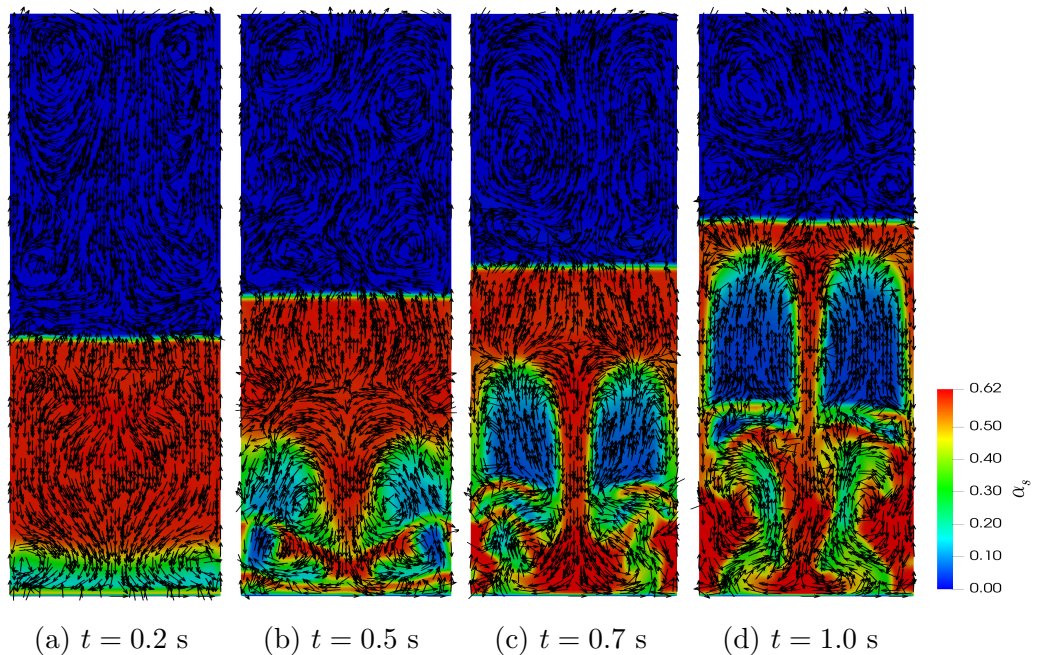


Figura 9. Contornos de fracción de sólidos instantáneos y vectores de fluctuación de velocidad del gas entre 0 – 1 s para $u_{\text{gas}} = 0.38$ m/s.

En la Figura 10 se muestran los contornos de la fracción de sólido instantáneas para tiempos mayores, y los vectores de la fluctuación de velocidad de la fase gas, para una velocidad de entrada de gas igual a 0.38 m/s. A diferencia del arranque, en este caso se observa que el comportamiento no es simétrico, incluso podría decirse caótico. Se destaca que para distintos tiempos se observan sendas preferenciales para el flujo de gas, así también los vórtices formados en un tiempo dado, desaparecen en tiempos posteriores, dando la idea de que el flujo es turbulento instantáneo. Los vórtices que se forman, se descomponen en otros vórtices, siguiendo la cascada de energía cinética turbulenta. Además, se puede destacar que en las regiones donde se ubican las partículas la dirección de la velocidad del gas es hacia abajo, mientras que en las regiones donde se forman burbujas de aire la velocidad del gas va hacia arriba; esto puede indicar que la presencia

de las partículas dificulta el movimiento del gas, ocasionando estos cambios en la dirección de la velocidad.

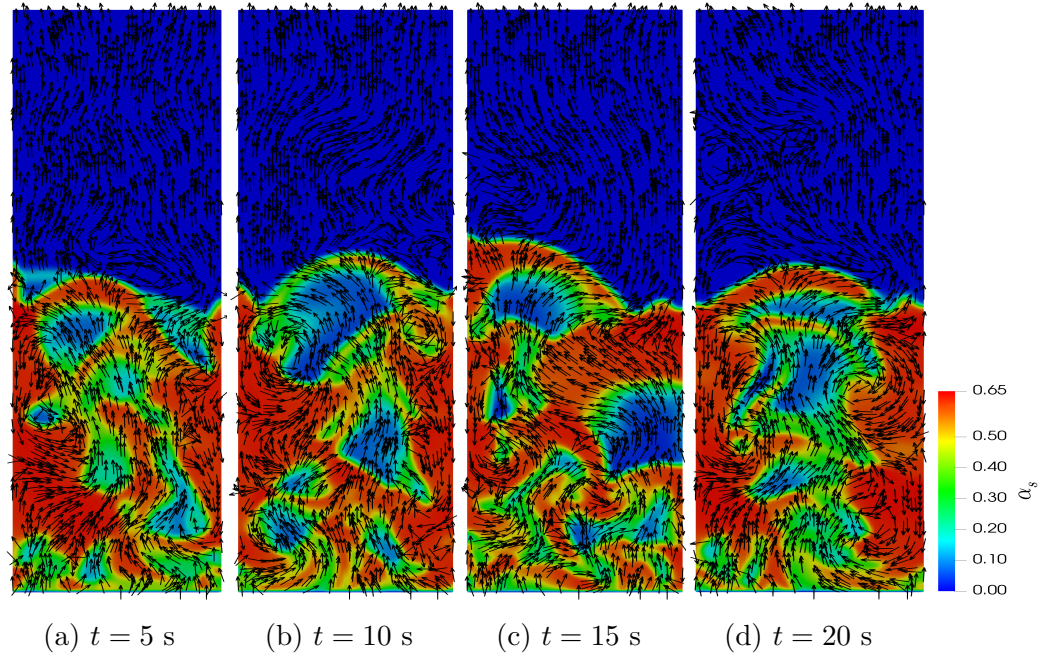


Figura 10. Contornos de fracción de sólidos instantáneos y vectores de fluctuación de velocidad del gas entre 5 – 20 s para $u_{\text{gas}} = 0.38$ m/s.

Al igual que los resultados analizados previamente, los contornos instantáneos de la fracción del sólido al inicio del proceso, y los vectores de la fluctuación de velocidad de la fase gas, para una velocidad de entrada de gas igual a 0.46 m/s, se muestran en la Figura 11. Se puede apreciar que el comportamiento simétrico de la fracción del sólido es similar al mostrado en la Figura 9. Con respecto a la fase gas, se siguen apreciando la formación de vórtices con sentidos de giro distintos, pero también de mayor tamaño. Otra diferencia apreciable con respecto a la Figura 9 es que la altura máxima del lecho es mayor, siendo este resultado coherente ya que la velocidad de entrada del gas también es mayor.

En la Figura 12 se muestran los contornos instantáneos de la fracción del sólido, y los vectores de la fluctuación de velocidad de la fase gas, para tiempos posteriores al inicio del proceso, para la velocidad de entrada igual a 0.46 m/s. Al igual que los resultados mostrados en la Figura 10, el comportamiento del sistema ya no es simétrico. Nuevamente se observa la formación y desaparición de vórtices en cada uno de los tiempos, notándose un comportamiento turbulento instantáneo. La principal diferencia que se puede apreciar, con relación a la Figura 10, es también la altura máxima del lecho alcanzado, y los vórtices formados en la zona libre de

sólido.

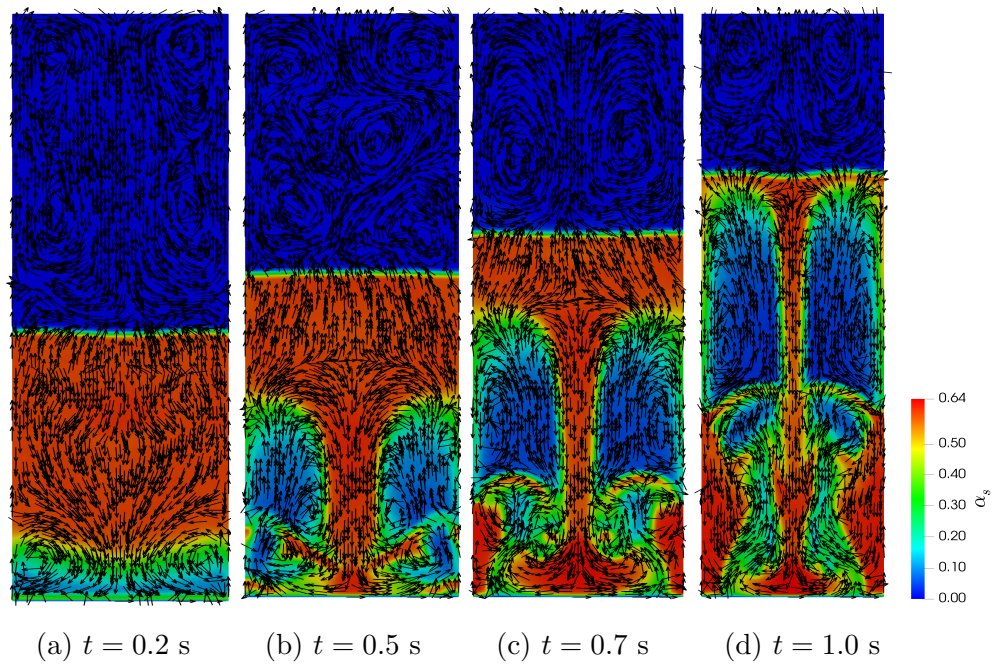


Figura 11. Contornos de fracción de sólidos instantáneos y vectores de fluctuación de velocidad del gas entre 0 – 1 s para $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s.

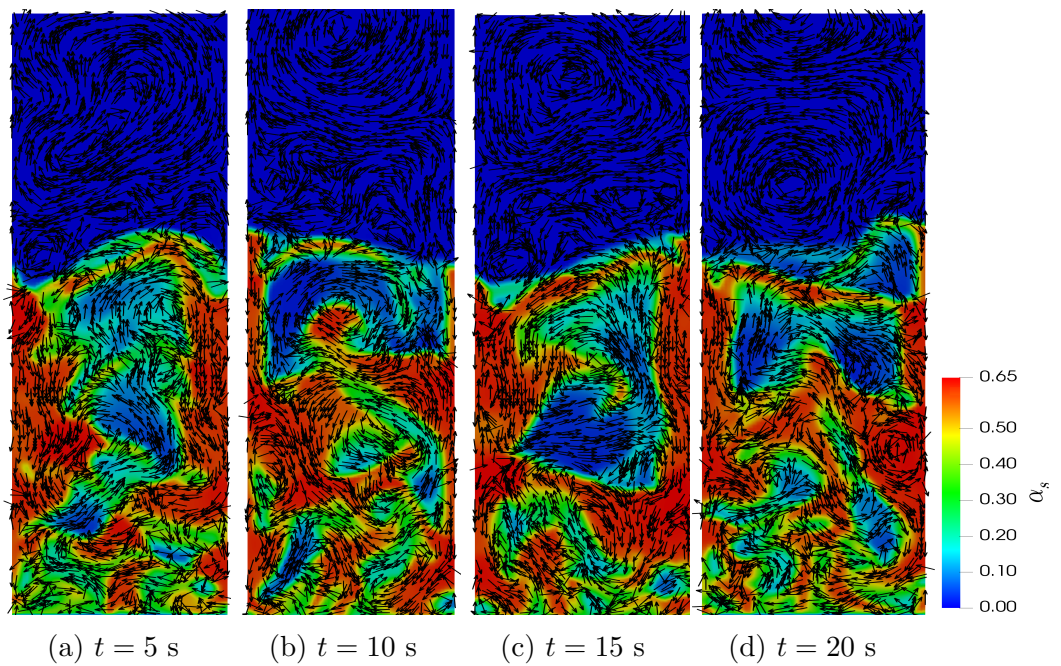


Figura 12. Contornos de fracción de sólidos instantáneos y vectores de fluctuación de velocidad del gas entre 5 – 20 s para $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s.

Así también, en la Figura 12 es posible visualizar nuevamente que en las zonas donde hay presencia de partículas la velocidad del gas presenta direcciones descendentes, sin embargo, las zonas donde no hay partículas la velocidad es siempre ascendente.

4.2.2 Caída de presión en el lecho

En la Figura 13 se muestran los perfiles de presión manométricos promediados en el tiempo 5-60 s, a lo largo del lecho, en el centro del mismo, para las dos velocidades de entrada de gas consideradas.

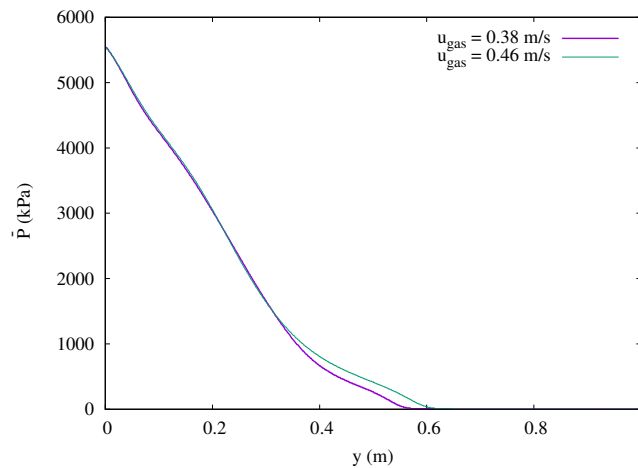


Figura 13. Perfil de presión promedio a lo largo del centro del lecho

Como puede observarse, en ambos casos la presión máxima en el lecho es igual a 5500 kPa, aproximadamente, y esto se verifica en la base del lecho. A medida que el flujo de gas avanza, la caída de presión se hace visible, adoptando un decaimiento brusco al inicio, hasta la altura de 0.4 m, luego la caída de presión es mas leve.

Es posible comparar la caída de presión total en el lecho con las medidas experimentales de (Taghipour et al., 2005). Estos resultados se muestran en la Figura 14, como puede observarse, los valores de caída de presión obtenidos en este trabajo son consistentes con las mediciones experimentales de (Taghipour et al., 2005).

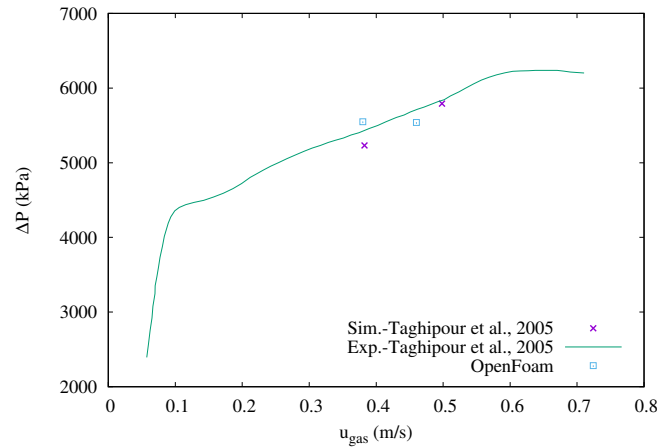


Figura 14. Caída de presión promedio en el lecho

4.2.3 Expansión del lecho

La tasa de expansión del lecho se define como la relación H/H_0 , donde H es la altura del lecho en las condiciones estadísticamente estacionarias, y H_0 es la altura inicial del lecho.

Como se ha mencionado previamente, un tiempo de simulación total de 60 s es necesario para que las cantidades promediadas presenten variaciones mínimas en el tiempo, de esta manera, en la Figura 16 se muestran los contornos de la fracción de sólidos promediados en el tiempo 5-60 s, indicado en este caso con el símbolo $\bar{\alpha}_s$, para las dos velocidades consideradas.

Lo primero que se puede notar es que el comportamiento de ambos sistemas es similar, adoptando un carácter simétrico. Para las dos velocidades, las fracciones del sólido más elevadas se distribuyen cerca de las paredes, con valores alrededor de 0.6, estas fracciones máximas se distribuyen a alturas por debajo del nivel máximo del lecho.

Con respecto a la tasa de expansión del lecho, puede observarse que las alturas máximas de los lechos son 0.56 m y 0.61 m, aproximadamente. Considerando la altura inicial del lecho $H_0 = 0.4$ m se obtienen tasas de expansión de 1.40 y 1.53, para las velocidades de 0.38 m/s y 0.46 m/s, respectivamente. Estos resultados son razonables ya que se nota un aumento en la tasa de expansión con el aumento de la velocidad de entrada del gas.

A modo de comparación, en la Figura 16 se muestran las medidas experimentales y las simulaciones con distintas velocidades de la tasa de expansión del lecho, realizadas por (Taghipour et al., 2005). Como puede observarse, los valores de

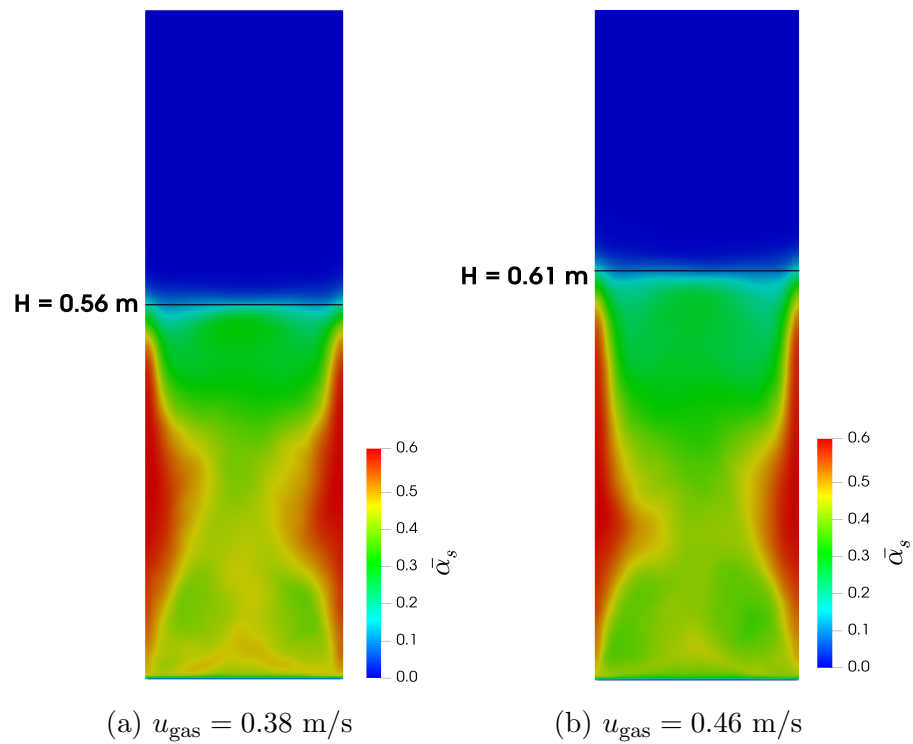
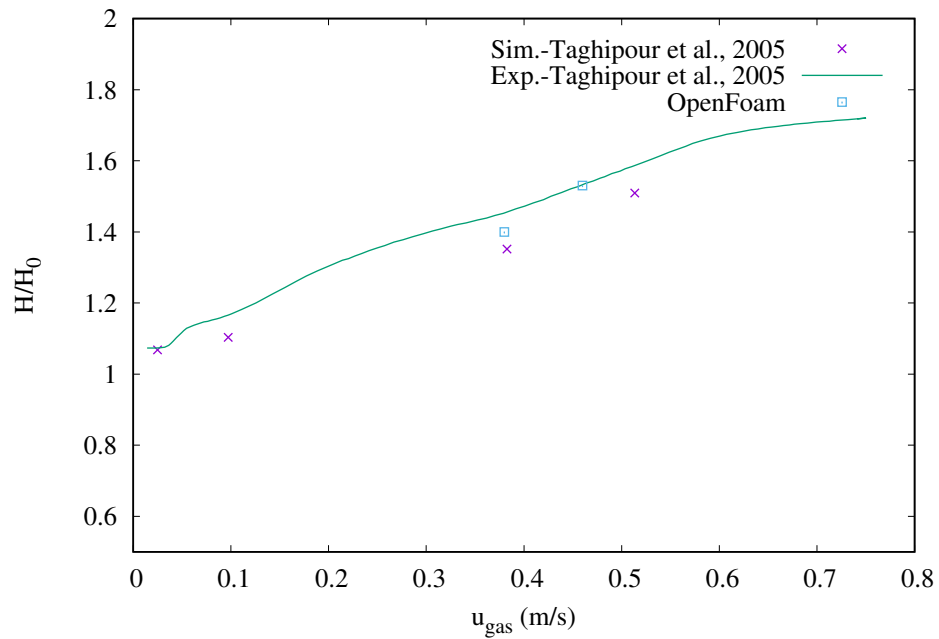


Figura 15. Expansión del lecho

expansión obtenidos en este trabajo se ajustan correctamente a las mediciones experimentales.

Figura 16. Tasa de expansión del lecho fluidizado H/H_0 en función a la velocidad de entrada del gas

4.3 Evaluación de modelos para el coeficiente de interacción entre fases

De acuerdo a lo expuesto en la revisión de la literatura, el parámetro o coeficiente de interacción entre las fases gas-sólido es de gran importancia en la predicción del comportamiento de un sistema de lecho fluidizado. En esta sección se evalúa la fracción de sólidos promedio en un tiempo entre 5-60 s, a una altura del lecho igual a 0.2 m, para las dos velocidades en estudio, y dos modelos para el coeficiente de interacción entre las fases. También se hace una distinción entre el régimen de flujo de gas, siendo éste laminar o turbulento, de manera a evaluar el comportamiento de los modelos de interacción en estas situaciones.

En la Figura 17 se muestran las fracciones obtenidas para la velocidad del gas igual a 0.38 m/s. Como puede apreciarse, tanto en caso laminar como turbulento los resultados obtenidos son mejores con el modelo de (Syamlal et al., 1993), esto no descarta que los resultados con el modelo de (Gidaspow, 1994) sean correctos, simplemente presentan una desviación mayor respecto a los resultados de la literatura.

Para el caso laminar, la forma de ambos perfiles de la fracción de sólidos son similares, siendo los valores obtenidos con el modelo de (Gidaspow, 1994) ligeramente subestimados con relación al modelo de (Syamlal et al., 1993).

Con el régimen turbulento se aprecian diferencias mayores, principalmente en la zona central del lecho, donde se ha visto que la fracción de sólidos alcanza valores en el rango de 0.55-0.6, al igual que en las paredes. En este caso el modelo de (Syamlal et al., 1993) logra captar ligeramente el aumento de la fracción de sólidos en el centro, mientras que con el modelo de (Gidaspow, 1994) se observa un descenso de la fracción del sólido, llegando a alcanzar valores cercanos a 0.4, que distan de los resultados experimentales, los cuales alcanzan 0.55 aproximadamente.

En la Figura 18 se muestran los perfiles de la fracción de sólidos promedio para una velocidad del gas igual a 0.46 m/s. Para el régimen laminar se observan diferencias significativas en el centro del lecho, donde nuevamente los valores de la fracción de sólido son subestimados con el modelo de (Gidaspow, 1994). Para el flujo turbulento del gas, las diferencias entre los perfiles son menores, se puede destacar el comportamiento aproximadamente simétrico para el modelo de (Syamlal et al., 1993), en contraste con el modelo de (Gidaspow, 1994).

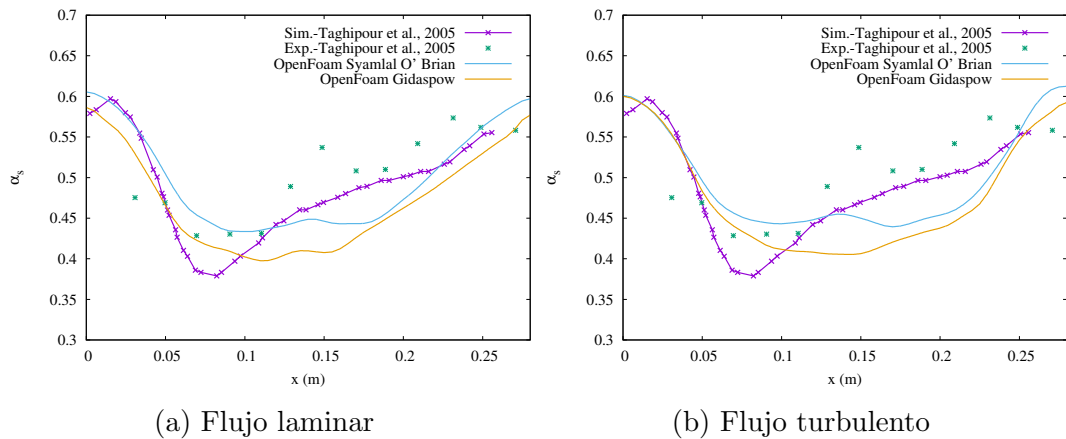


Figura 17. Comparación del coeficiente de interacción entre fases para $u_{\text{gas}} = 0.38$ m/s y distintos regímenes de flujo de gas.

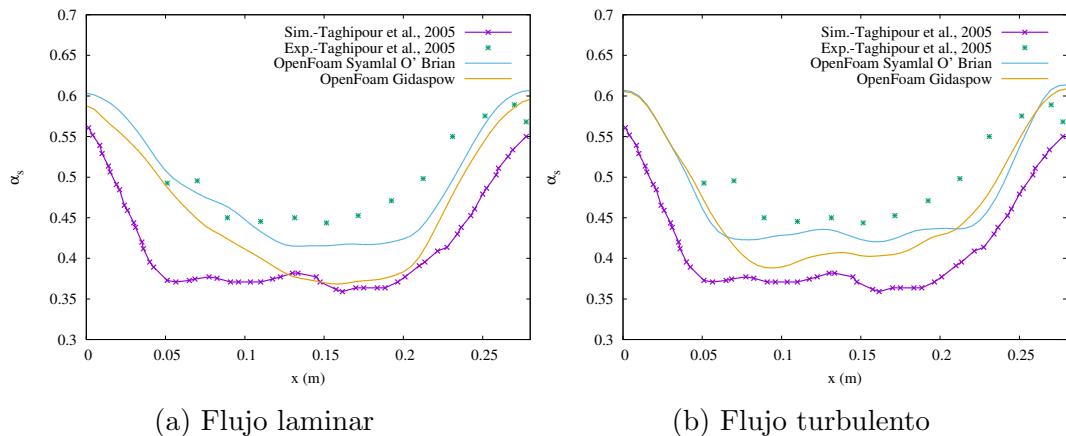


Figura 18. Comparación del coeficiente de interacción entre fases para $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s y distintos regímenes de flujo de gas.

Como resumen de este apartado, se puede mencionar que para las dos velocidades consideradas, y los regímenes de flujo analizados, el modelo de interacción entre fases propuesto por (Syamlal et al., 1993) es el más adecuado para este sistema de lecho fluidizado gas-sólido, no obstante, el modelo de (Gidaspow, 1994) también arroja resultados que se encuentran en rangos aceptables en cuanto a comparación con los resultados de la literatura.

4.4 Evaluación de modelo de turbulencia para el gas

Existen trabajos en la literatura, como el de (Shi et al., 2019), donde se realizan simulaciones de un sistema de lecho fluidizado en regímenes laminar y turbulento, en dos y tres dimensiones, observándose que se obtienen mejores resultados en

condiciones 3D y flujo turbulento de gas. En esta sección se pretende evaluar si los resultados de las simulaciones realizadas con OpenFoam en 2D presentan diferencias significativas con relación al régimen de flujo del gas. Se toma la fracción promedio del sólido en el tiempo 5-60 s como referencia para las comparaciones realizadas, el modelo de turbulencia utilizado en este trabajo es el modelo de RANS, $k - \varepsilon$.

En la Figura 19 se muestran las fracciones de sólido promedio para la velocidad de entrada del gas igual a 0.38 m/s. Se muestran los resultados para los regímenes laminar y turbulento, y para los modelos de (Syamlal et al., 1993) y (Gidaspow, 1994). Para ambos modelos de coeficiente de interacción, no es posible visualizar diferencias significativas con relación al régimen de flujo. Podría decirse que en la Figura 19a, las ligeras diferencias se encuentran en el centro del lecho, donde el modelo de turbulencia logra mejores resultados, pero asimismo, el flujo en condiciones laminar logra predecir mejor las fracciones promedio del sólido en la región entre 0.15-0.25 m del lecho, con relación a los resultados experimentales.

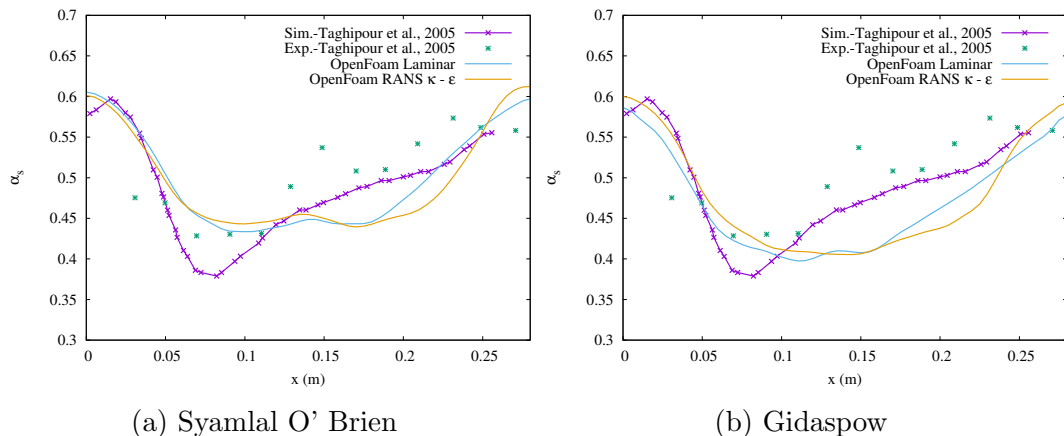


Figura 19. Comparación entre flujo laminar y turbulento para $u_{\text{gas}} = 0.38$ m/s y distintos modelos de interacción entre fases

Con respecto a la velocidad de entrada de gas igual a 0.46 m/s, los resultados de la fracción de sólidos promedio se muestra en la Figura 20. También se analizan los resultados de los regímenes de flujo para cada modelo del coeficiente de interacción considerado.

Para esta velocidad, las diferencias entre los regímenes de flujo son mas apreciables. En la Figura 20a se puede ver que el perfil de la fracción de sólidos obtenida con régimen turbulento de gas es más plano, adoptando valores alrededor de 0.45 en casi todo el lecho, excepto cerca de las paredes, mientras que la fracción

obtenida con régimen laminar presenta un comportamiento más próximo a uno parabólico. En la Figura 20b las diferencias principales se encuentran nuevamente en el centro del lecho, donde en este caso se observa una mejora aproximación con el régimen turbulento. Sí podría resaltarse que en este caso el perfil de la fracción de sólido no es simétrico, lo cual podría significar que el tiempo de promediado en este caso no es suficiente, como se ha mencionado previamente.

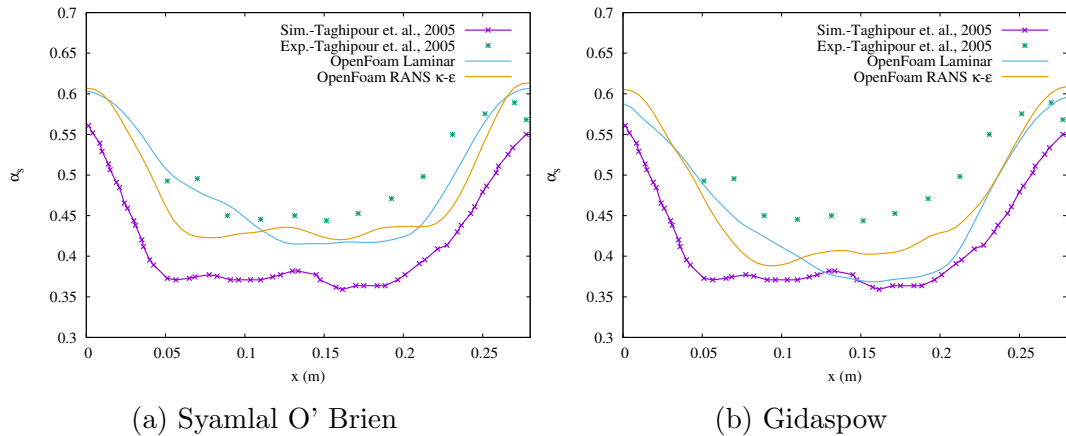


Figura 20. Comparación entre flujo laminar y turbulento para $u_{\text{gas}} = 0.46$ m/s y distintos modelos de interacción entre fases

Como resumen de este apartado, es posible decir que para la velocidad de 0.38 m/s, no existen diferencias significativas en cuanto a la fracción promedio de sólidos para ambos regímenes de flujo de gas, sin embargo, para la velocidad de 0.46 m/s las diferencias son más apreciables. De igual manera, ambos regímenes de flujo son igualmente válidos para la simulación de un lecho fluidizado gas-sólido.

Capítulo 5

5. CONCLUSIONES

En este trabajo, la simulación de un lecho fluidizado gas-sólido en 2D fue realizada. Las ecuaciones de conservación corresponden al modelo Euleriano-Euleriano, la resolución del problema fue mediante el resolvidor *twoPhaseEulerFoam*. Luego de la presentación de los resultados, y su discusión en el Capítulo anterior se exponen las siguientes conclusiones:

- Luego de realizar una revisión de los resolvidores de flujos multifásicos en OpenFoam, se encuentra que el resolvidor *twoPhaseEulerFoam* es el más adecuado para estudiar la hidrodinámica de un sistema de lecho fluidizado gas-sólido sin transferencia de calor.
- Se ha verificado que las simulaciones realizadas en OpenFoam dan buenos resultados con los parámetros utilizados, esto puede afirmar gracias a las comparaciones realizadas con los resultados de la literatura.
- Con relación a los tiempos de simulación considerados, es posible que el tiempo final de 60 s sea insuficiente, especialmente para el flujo de alimentación de gas de 0.46 m/s.
- Entre los modelos para el coeficiente de interacción entre las fases estudiados, se encuentra que el modelo de Syamlal O' Brien es el más adecuado para simular un sistema de lecho fluidizado gas-sólido.
- Mediante las comparaciones realizadas con el flujo de gas, siendo éste laminar o turbulento, no se encontraron diferencias apreciables para la velocidad de entrada de gas de 0.38 m/s. En cambio, para una velocidad de entrada igual a 0.46 m/s, el flujo turbulento logra representar mejor el fenómeno en estudio.

Trabajos futuros

De manera a mejorar los resultados obtenidos en este trabajo, se proponen las siguientes metodologías que pueden aplicarse para la simulación del flujo multifásico en un sistema de lecho fluidizado:

- Simular el problema propuesto en un tiempo mayor a 60 s, de manera a garantizar que el flujo alcanza efectivamente un estado estadísticamente estacionario, especialmente para velocidad de entrada de gas elevada.
- Realizar una simulación 2D, con refinamiento de malla en las paredes, de manera a evaluar si se logra captar mejor la física del fenómeno en esta zona.
- Utilizar un modelo de turbulencia distinto al $k - \varepsilon$, como por ejemplo el modelo $k - \omega$, ya que normalmente este modelo se desenvuelve mejor en zonas de capa límite, como ocurre en las paredes del lecho.
- Realizar una simulación en 3D considerando algún modelo de turbulencia tipo RANS, de manera a comparar los resultados con simulaciones 2D.
- Aplicar el modelo de Large Eddy Simulation para la fase gaseosa.
- Considerar la posibilidad de simulación de sistemas multifásicos que impliquen más de dos fases, por ejemplo gas-líquido-sólido.
- Realizar un estudio de los datos en el tiempo para identificar la existencia de patrones o estructuras coherentes en el flujo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Anslys, I. (2020). Ansys Fluent Consultado 15 mayo 2020 Disponible en. <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent>.
- Balachandar, S. & Eaton, J. K. (2010). Turbulent dispersed multiphase flow. *Annual review of fluid mechanics*, 42:111–133.
- Cammarata, L., Lettieri, P., Micale, G. D., & Colman, D. (2003). 2d and 3d cfd simulations of bubbling fluidized beds using eulerian-eulerian models. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 1(1).
- Caretto, L., Gosman, A., Patankar, S., & Spalding, D. (1973). Two calculation procedures for steady, three-dimensional flows with recirculation. In *Proceedings of the third international conference on numerical methods in fluid mechanics*, pages 60–68. Springer.
- Deen, N., Annaland, M. V. S., Van der Hoef, M. A., & Kuipers, J. (2007). Review of discrete particle modeling of fluidized beds. *Chemical engineering science*, 62(1-2):28–44.
- Ding, J. & Gidaspow, D. (1990). A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE journal*, 36(4):523–538.
- Dopazo, C. (1977). On conditioned averages for intermittent turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 81(3):433–438.
- Ellis, N., Bi, H., Lim, C., & Grace, J. (2004). Hydrodynamics of turbulent fluidized beds of different diameters. *Powder technology*, 141(1-2):124–136.
- Ergun, S. (1952). Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48:89–94.
- Gao, X., Wu, C., Cheng, Y.-w., Wang, L.-j., & Li, X. (2012). Experimental and

- numerical investigation of solid behavior in a gas–solid turbulent fluidized bed. *Powder technology*, 228:1–13.
- Geldart, D. (1973). Types of gas fluidization. *Powder technology*, 7(5):285–292.
- Geuzaine, C. & Remacle, J.-F. (2020). A three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities Consultado 15 mayo 2020 Disponible en. <https://gmsh.info/>.
- Gidaspow, D. (1994). *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. Elsevier Science.
- Grace, J. R. & Taghipour, F. (2004). Verification and validation of cfd models and dynamic similarity for fluidized beds. *Powder technology*, 139(2):99–110.
- Hernández-Jiménez, F., Sánchez-Delgado, S., Gómez-García, A., & Acosta-Iborra, A. (2011). Comparison between two-fluid model simulations and particle image analysis & velocimetry (piv) results for a two-dimensional gas–solid fluidized bed. *Chemical engineering science*, 66(17):3753–3772.
- Herzog, N., Schreiber, M., Egbers, C., & Krautz, H. J. (2012). A comparative study of different cfd-codes for numerical simulation of gas–solid fluidized bed hydrodynamics. *Computers & Chemical Engineering*, 39:41–46.
- Ishii, M. & Hibiki, T. (2010). *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. Springer Science & Business Media.
- Issa, R. I. (1986). Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of computational physics*, 62(1):40–65.
- Jenkins, J. T. & Savage, S. B. (1983). A theory for the rapid flow of identical, smooth, nearly elastic, spherical particles. *Journal of fluid mechanics*, 130:187–202.
- Johnson, P. C. & Jackson, R. (1987). Frictional–collisional constitutive relations for granular materials, with application to plane shearing. *Journal of fluid Mechanics*, 176:67–93.
- Johnson, P. C., Nott, P., & Jackson, R. (1990). Frictional–collisional equations of motion for particulate flows and their application to chutes. *Journal of fluid*

- mechanics*, 210:501–535.
- Khan, M., Hussain, M., Mansourpour, Z., Mostoufi, N., Ghasem, N., & Abdullah, E. (2014). Cfd simulation of fluidized bed reactors for polyolefin production—a review. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 20(6):3919–3946.
- Kia, S. A. & Aminian, J. (2017). Hydrodynamic modeling strategy for dense to dilute gas–solid fluidized beds. *Particuology*, 31:105–116.
- Kunii, D., Levenspiel, O., & Brenner, H. (1991). *Fluidization Engineering*. Butterworth-Heinemann series in chemical engineering. Elsevier Science.
- Kuwabara, G. & Kono, K. (1987). Restitution coefficient in a collision between two spheres. *Japanese journal of applied physics*, 26(8R):1230.
- Laboratory's, N. E. T. (2020). NETL Multiphase Flow Science Consultado 15 mayo 2020 Disponible en. <https://mfix.netl.doe.gov/mfix/>.
- Launder, B. E. & Spalding, D. B. (1983). The numerical computation of turbulent flows. In *Numerical prediction of flow, heat transfer, turbulence and combustion*, pages 96–116. Elsevier.
- Laverman, J. A., Roghair, I., Annaland, M. v. S., & Kuipers, H. (2008). Investigation into the hydrodynamics of gas–solid fluidized beds using particle image velocimetry coupled with digital image analysis. *The Canadian journal of chemical engineering*, 86(3):523–535.
- Liu, Y. & Hinrichsen, O. (2014). Cfd modeling of bubbling fluidized beds using openfoam®: Model validation and comparison of tvd differencing schemes. *Computers & chemical engineering*, 69:75–88.
- Loha, C., Chattopadhyay, H., & Chatterjee, P. K. (2014). Effect of coefficient of restitution in euler–euler cfd simulation of fluidized-bed hydrodynamics. *Particuology*, 15:170–177.
- Lun, C., Savage, S. B., Jeffrey, D., & Chepuruiy, N. (1984). 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.
- Michael, L. (2015). *Statistical turbulence modelling for fluid dynamics-*

- demystified: an introductory text for graduate engineering students.* World Scientific.
- Ogawa, S., Umemura, A., & Oshima, N. (1980). On the equations of fully fluidized granular materials. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 31(4):483–493.
- OpenCFD, L. (2005). *Derivation, Modelling and Solution of the Conditionally Averaged Two-Phase Flow Equations.*
- OpenCFD, L. (2019). *OpenFoam User Guide.*
- OpenCFD, L. (2020a). OpenFoam: The open source CFD toolbox Consultado 15 mayo 2020 Disponible en. <https://www.openfoam.com/>.
- OpenCFD, L. (2020b). OpenFoam: The open source CFD toolbox Consultado 15 mayo 2020 Disponible en. <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide/standard-solvers.php>.
- Parmentier, J.-F., Simonin, O., & Delsart, O. (2008). A numerical study of fluidization behavior of geldart b, a/b and a particles using an eulerian multifluid modeling approach.
- Passalacqua, A. & Fox, R. O. (2011). Implementation of an iterative solution procedure for multi-fluid gas-particle flow models on unstructured grids. *Powder technology*, 213(1-3):174–187.
- Pigford, R. L. & Baron, T. (1965). Hydrodynamic stability of a fluidized bed. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 4(1):81–87.
- Portela, L. & Oliemans, R. (2006). Possibilities and limitations of computer simulations of industrial turbulent dispersed multiphase flows. *Flow, turbulence and combustion*, 77(1-4):381–403.
- Prosperetti, A. & Tryggvason, G. (2009). *Computational methods for multiphase flow.* Cambridge university press.
- Ranade, V. V. (2001). *Computational flow modeling for chemical reactor engineering.* Elsevier.

- Schaeffer, D. G. (1987). Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow. *Journal of differential equations (Print)*, 66(1):19–50.
- Shi, H., Komrakova, A., & Nikrityuk, P. (2019). Fluidized beds modeling: Validation of 2d and 3d simulations against experiments. *Powder technology*, 343:479–494.
- Sinclair, J. & Jackson, R. (1989). Gas-particle flow in a vertical pipe with particle-particle interactions. *AIChE journal*, 35(9):1473–1486.
- Stroh, A., Alobaid, F., Hasenzahl, M. T., Hilz, J., Ströhle, J., & Epple, B. (2016). Comparison of three different cfd methods for dense fluidized beds and validation by a cold flow experiment. *Particuology*, 29:34–47.
- Syamlal, M., Rogers, W., & OBrien, T. J. (1993). Mfix documentation theory guide. Technical report, USDOE Morgantown Energy Technology Center, WV (United States).
- Taghipour, F., Ellis, N., & Wong, C. (2005). Experimental and computational study of gas–solid fluidized bed hydrodynamics. *Chemical engineering science*, 60(24):6857–6867.
- Tanaka, T., Kawaguchi, T., & Tsuji, Y. (1993). Discrete particle simulation of flow patterns in two-dimensional gas fluidized beds. *International Journal of Modern Physics B*, 7(09n10):1889–1898.
- Venier, C., Marquez Damian, S., Ramajo, D., & Nigro, N. (2013). Numerical analysis of multiphase solid-gas flow with eulerian models and kinetic theory closure. *Asociacion Argentina de Mecanica Computacional*, 32:1849–1862.
- Venier, C. M., Damian, S. M., & Nigro, N. M. (2016). Numerical aspects of eulerian gas–particles flow formulations. *Computers & Fluids*, 133:151–169.
- Wen, C. Y. (1966). Mechanics of fluidization. In *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, volume 62, pages 100–111.
- Wen, C. Y. & Hashinger, R. F. (1960). Elutriation of solid particles from a dense-phase fluidized bed. *AIChE Journal*, 6(2):220–226.