

## ESTUDIO DE LA PÉRDIDA DE CARGA EN LECHOS DE PARTÍCULAS MEDIANTE LA UTILIZACIÓN DE CFD

Mariana T. Zambon<sup>a</sup>, Daniela A. Asensio<sup>a</sup>, Francisca J. Barassi<sup>a</sup> Guillermo F. Barreto<sup>b</sup>  
y Germán D. Mazza<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Química, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, Buenos Aires 1400, 8300 Neuquén, Argentina, gmazza@uncoma.edu.ar, <http://www.uncoma.edu.ar>

<sup>b</sup>PROIRQ y CINDECA, Universidad Nacional de La Plata, Calle 47 esq.1, 1900 La Plata, Argentina, barreto@quimica.unlp.edu.ar, <http://www.ing.unlp.edu.ar>

**Palabras Clave:** Lecho Fijo, Pérdida de Carga, Fluidodinámica Computacional.

**Resumen.** La determinación de la pérdida de carga ( $\Delta P$ ) en lechos fijos es un aspecto fundamental en el diseño de reactores, debido a los significativos costos asociados a la impulsión de fluidos a través del lecho. Además, la determinación de su correcto valor es imprescindible porque el diámetro de tubo resultante debe luego compatibilizarse con una apropiada velocidad de transferencia de calor desde o hacia el exterior del tubo.

A pesar de existir un número importante de estudios reportados en la bibliografía sobre el tema, y de las numerosas expresiones predictivas empíricas y modelísticas propuestas (A. Montillet et al., *Chem. Eng. and Processing*, 46: 329-333 (2007)), puede apreciarse una considerable dispersión en los resultados de diferentes autores, esencialmente para valores elevados del número de Reynolds.

En este trabajo se aplica la técnica de fluidodinámica computacional (CFD), a través del programa Fluent 6.2.16 y el generador de mallas Gambit 2.2.30. Se utiliza la metodología de Fronteras Periódicas para obtener información sobre la pérdida de carga en lechos fijos de partículas esféricas para diferentes porosidades y valores del número de Reynolds. La simulación se realiza en 3D y se incluyen diferentes arreglos espaciales para reproducir diversas porosidades del lecho. Los resultados obtenidos evidencian una muy buena concordancia con los datos experimentales de Montillet (referencia mencionada previamente) mientras que se apartan apreciablemente, para elevados números de Reynolds ( $> 500$ ), de los valores predichos por un conjunto de correlaciones pre-existentes. Se analiza y discute esta situación.

## 1 INTRODUCCION

La determinación de la pérdida de carga ( $\Delta P$ ) en lechos fijos es un aspecto de gran importancia en el análisis de este tipo de reactores químicos, ya que su evaluación confiable se relaciona directamente con el conocimiento de los costos de compresión o impulsión, permitiendo, además, visualizar la factibilidad de operación con diámetros compatibles con una apropiada transferencia de calor hacia el exterior del tubo.

El tratamiento del caso particular de sistemas con baja relación de aspecto ( $a = D_i/d_p$ ) es el objetivo de este artículo que se inscribe en un estudio más amplio centrado en la modelización ágil de la transferencia de calor entre un lecho fijo y la pared de tubo utilizando el denominado modelo de Dos Zonas, (MDZ) (Zambon et al., 2006, 2007). La CFD se utiliza para obtener información precisa de los campos de velocidad y temperatura en el lecho, para llevar a cabo, posteriormente, la correcta evaluación de diferentes parámetros que el MDZ requiere. La metodología adoptada, las características del método numérico y su aplicación se describen en la Sección 3 de este trabajo.

A pesar de existir en la bibliografía un conjunto importante de trabajos publicados sobre el tema, evidenciando que la pérdida de presión en lechos fijos ha sido extensamente estudiada por diferentes autores y con concepciones diferentes, existe una importante dispersión de resultados en cuanto a la generación de expresiones predictivas y correlaciones propuestas para la evaluación de ( $\Delta P$ ). Gran parte de la información existente no es reproducible o no resulta apropiada para la derivación de una correlación consistente (Montillet et al., 2007). Investigaciones recientes han considerado nuevamente aspectos tales como: relación entre la estructura del lecho y el comportamiento del fluido en su movimiento a través del mismo, mecanismos actuantes para provocar las pérdidas de energía por términos viscosos e inerciales. Estos tópicos han sido re-analizados con nuevos aportes de información que permiten llevar a cabo estudios comparativos de interés en la predicción de ( $\Delta P$ ) (Montillet et al., 2007; Montillet, 2004; Niven, 2002). La finalidad de este trabajo no reside en proponer correlaciones alternativas para la evaluación de ( $\Delta P$ ), sino que los resultados de pérdida de carga obtenidos por CFD para los sistemas de lecho fijo mencionados, se comparan con los reportados por otros autores, fundamentalmente con los más recientes, a fin de aportar información y contribuir al conocimiento y validación de diversas alternativas para la evaluación de ( $\Delta P$ ).

## 2 ECUACIONES EXISTENTES PARA EL CALCULO DE LA PÉRDIDA DE CARGA EN LECHOS FIJOS

La pérdida de carga producida cuando un fluido atraviesa un lecho de partículas se ha expresado usualmente mediante una ecuación del tipo *Forchheimer*, con la suma de dos términos: la pérdida de energía por fenómenos viscosos y la pérdida de energía cinética (pérdidas inerciales), con la correspondiente proporcionalidad lineal y cuadrática con la velocidad superficial del fluido ( $A$  y  $B$ , coeficientes):

$$\frac{\Delta P}{L} = A U + B U^2 \quad (1)$$

No obstante, para intervalos amplios de valores del número de Reynolds ( $Re_p = \rho d_p U / \mu = G d_p / \mu$ ) y particularmente a valores elevados de  $Re_p$ , la variación de la caída de presión no puede ser representada por una ecuación de este tipo (Montillet et al., 2007).

Resulta ineludible, cuando se analizan las ecuaciones propuestas en la bibliografía para

evaluar la pérdida de carga, destacar la conocida expresión de [Ergun \(1952\)](#), en la cual se parte de considerar que el lecho relleno está constituido por un banco de canales paralelos no conectados entre sí, con un radio hidráulico (relación entre la porosidad del lecho y el área de sólido por unidad de volumen de lecho)  $R_h = \varepsilon/a_v$ . El diámetro equivalente  $d_p$  para las partículas es el diámetro de una esfera con igual valor de relación *área de superficie externa/volumen de partícula* que el sólido que forma el relleno. Siendo para esferas  $S_v = 6/d_p$  y dado que se cumple que  $S_v = a_v/(1-\varepsilon)$ , el diámetro equivalente resultante es

$$d_p = \frac{6(1-\varepsilon)}{a_v} \quad (2)$$

Introduciendo el diámetro dado por la ecuación (2) en la definición del radio hidráulico, y adicionando las expresiones del factor de fricción para regímenes laminar y altamente turbulento, además de correcciones de coeficientes por la condición tortuosa de los canales en el lecho fijo, [Ergun \(1952\)](#) estableció la siguiente relación:

$$\frac{\Delta P}{L} g = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu U}{d_p^2} + 1.75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{GU}{d_p} \quad (3)$$

o equivalentemente, en términos del correspondiente factor de fricción,

$$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[ a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right] \quad (4)$$

con  $a = 1.75$  y  $b = 150$ . Algunos autores han modificado las constantes  $a$  y  $b$ , de acuerdo al ajuste realizado sobre datos experimentales propios, resultando las expresiones de [Handley y Heggs \(1968\)](#), [Mc Donald et al. \(1979\)](#), [Hicks \(1970\)](#), [Tallmadge \(1970\)](#) según son citadas por [Froment y Bischoff \(1990\)](#). Las ecuaciones y parámetros se resumen en la [Tabla 1](#).

En los trabajos reportados en la bibliografía, existen diversos aspectos relativos a la predicción de la pérdida de carga que se han discutido y posteriormente intentado incluir en la formulación propuesta para el cálculo de  $(\Delta P)$ . Uno de ellos es la existencia de los diferentes regímenes que, desde el régimen de Darcy para muy bajos valores de  $Re_p$  hasta el régimen caótico de alta turbulencia, para muy elevados  $Re_p$ , se pueden hallar en el rango intermedio del número de Reynolds. [Montillet et al. \(2007\)](#) y [Niven \(2002\)](#) reconocen claramente la existencia de una situación en el flujo donde los términos de inercia son relevantes luego de superado el régimen puramente viscoso o reptante, cuando se incrementa el  $Re_p$  (Condición de Forchheimer para el flujo). Así se encuentran los regímenes laminar estacionario no lineal (términos de inercia relevantes) y de transición (laminar no estacionario) hasta alcanzar el extremo turbulento [Montillet et al. \(2007\)](#). Una discusión del efecto del cambio de régimen ha sido presentada por [Montillet \(2004\)](#).

Un aspecto que no ha sido considerado en numerosas correlaciones es el efecto de la pared del tubo sobre la pérdida de carga resultante. [Mehta y Hawley \(1969\)](#) han propuesto tener en cuenta dicho efecto mediante una modificación del radio hidráulico en la derivación de la expresión de Ergun. Dicha modificación consiste en formular un término de corrección del radio hidráulico efectivo, que incluya la relación  $(D_t/d_p)$ . El término de corrección resultante es:

$$M = 1 + \frac{4d_p}{6D_t(1-\varepsilon)} \quad (5)$$

que luego permite calcular el radio hidráulico considerando los efectos de pared,  $R_{hw}$

$$R_{hw} = \frac{\varepsilon d_p}{6(1-\varepsilon)M} \quad (6)$$

Autor(es) y Referencia	Ecuación propuesta	Observaciones
Ergun (1952)	$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[ a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right]$ <b>Ecuación (4)</b>	$a = 1.75$ ; $b = 150$ .
Handley y Heggs, citado por Froment y Bischoff (1990)	$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[ a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right]$ <b>Ecuación (4)</b>	$a = 1.24$ ; $b = 368$
Mc Donald et al., citado por Froment y Bischoff (1990)	$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[ a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right]$ <b>Ecuación (4)</b>	Partículas lisas $a = 1.8$ Partículas rugosas $a = 4$ $b = 368$
Tallmadge, citado por Froment y Bischoff (1990)	$f = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \left[ a + \frac{b(1-\varepsilon)}{Re_p} \right]$ <b>Ecuación (4)</b>	$a = 1.75$ ; $b = 4.2 Re_p^{5/6}$
Montillet et al. (2007); Montillet (2004)	$\left( \frac{\Delta P}{L} \right) \left( \frac{d_p}{\rho U^2} \right) = a \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \left[ \frac{D_t}{d_p} \right]^{0.2} [1000 Re_p^{-1} + 60 Re_p^{-0.5} + 12]$ <b>Ecuación (7)</b>	$3.8 \leq d_t/d_p \leq 40-50$ $10 < Re_p < 2500$ Valores de $a$ y $b$ , en texto
Mehta y Hawley (1969)	$\left( \frac{\Delta P}{G^2} \right) \left( \frac{d_p}{L} \right) \left( \frac{\varepsilon^3}{1-\varepsilon} \right) \left( \frac{1}{M} \right) = \frac{150 \mu (1-\varepsilon) M}{d_p G} + 1.75$ <b>(Ecuación 10)</b>	$M$ se evalúa por la Ec.(5)
Hicks, citado por Froment y Bischoff (1990)	$f = 6.8 \frac{(1-\varepsilon)^{1.2}}{\varepsilon^3} Re_p^{-0.2}$ <b>(Ecuación 11)</b>	Formulada para esferas.

Tabla 1. Correlaciones para  $(\Delta P)$  utilizadas en la comparación con los valores calculados por CFD,  $(\Delta P_{CFD})$

La ecuación que da la pérdida de carga, obtenida a partir de la modificación descrita se incluye en la [Tabla 1](#). Los autores concluyen que los efectos de pared dejan de ser importantes para relaciones de aspecto superiores a 50. Por su parte, [Fand y Thinakaran \(1990\)](#) proponen un valor límite de 40 para ignorar la influencia de la pared. Los efectos de pared también han sido considerados en la expresión propuesta por [Montillet et al. \(2007\)](#) y [Montillet \(2004\)](#), basada en la forma de una correlación pre-existente, ajustando datos experimentales propios y de otros autores ([Fand et al, 1987](#)). En los trabajos de, [Montillet et al. \(2007\)](#) y [Montillet \(2004\)](#), los autores proponen una correlación que explícitamente incluye los efectos de pared,

$$\left( \frac{\Delta P}{L} \right) \left( \frac{d_p}{\rho U^2} \right) = a \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \left[ \frac{D_t}{d_p} \right]^{0.2} [1000 Re_p^{-1} + 60 Re_p^{-0.5} + 12] \quad (7)$$

con  $a = 0.061$  para empaquetamiento compacto del lecho y  $a = 0.050$  en el caso de lechos diluidos. Las restantes condiciones de aplicabilidad de la correlación se dan en la [Tabla 1](#). Los autores, si bien adoptan la presencia de tres términos en el segundo miembro de la ecuación (7), reconocen que la aparición del término en el cual  $Re_p$  se eleva a la potencia (-0.5) no responde a una formulación teórica que arroje dicho exponente como resultado. La existencia del término en sí da cuenta, si los otros dos se asignan a los regímenes viscoso y puramente turbulento, de la presencia del régimen intermedio (en el cual tienen importancia los efectos inerciales y de inestabilidad laminar, para alrededor de  $50 \leq Re_p \leq 600$ ).

Finalmente, en el trabajo de [Martin et al. \(1951\)](#) se presenta un análisis centrado en el efecto de la orientación del arreglo de partículas sobre la pérdida de carga generada a través

del lecho. El autor muestra el efecto de la ubicación del centro de las partículas en una misma capa en relación a un plano perpendicular a la dirección de flujo. De esta manera, lechos de igual porosidad, igual diámetro y geometría de partículas, pero con diferente orientación, presentan valores distintos de ( $\Delta P$ ).

### 3 METODOLOGIA

#### 3.1 Generalidades de la evaluación de la pérdida de carga en lechos fijos por CFD

En la bibliografía pueden hallarse trabajos recientes donde se ha utilizado la CFD en sistemas constituidos por arreglos de partículas sólidas atravesados por corrientes de fluido con diferentes finalidades (Guardo et al., 2005; Dixon et al., 2005; Ranade, 2002). En este trabajo se utiliza la CFD para la evaluación de la pérdida de carga en lechos de partículas esféricas de baja relación de aspecto, a través de los cuales circula una corriente gaseosa, empleando el programa **Fluent 6.2.16** asistido por el programa **Gambit 2.2.30** para la generación de la malla que regirá luego en la aplicación del método de volúmenes finitos, con el Programa **Fluent**.

Para la resolución de las ecuaciones microscópicas de balance, en particular las de cantidad de movimiento que resultan relevantes para la determinación del valor de ( $\Delta P$ ) se debe adoptar un esquema estructural (geométrico) para la disposición de las partículas en el lecho, y una metodología específica para la implementación del cálculo por CFD.

Con respecto a la estructura, se adoptó un lecho conformado por partículas esféricas regulares de diámetro  $d_p$ , dispuestas en diferentes arreglos, que permitieron representar los distintos casos de análisis buscados (diferencias de porosidades y/o planos opuestos al flujo de gas). Cada arreglo, y además la ubicación del mismo en relación a la pared y a la dirección de flujo dan lugar a las “configuraciones” de lecho que pueden apreciarse en la **Figura 1**.

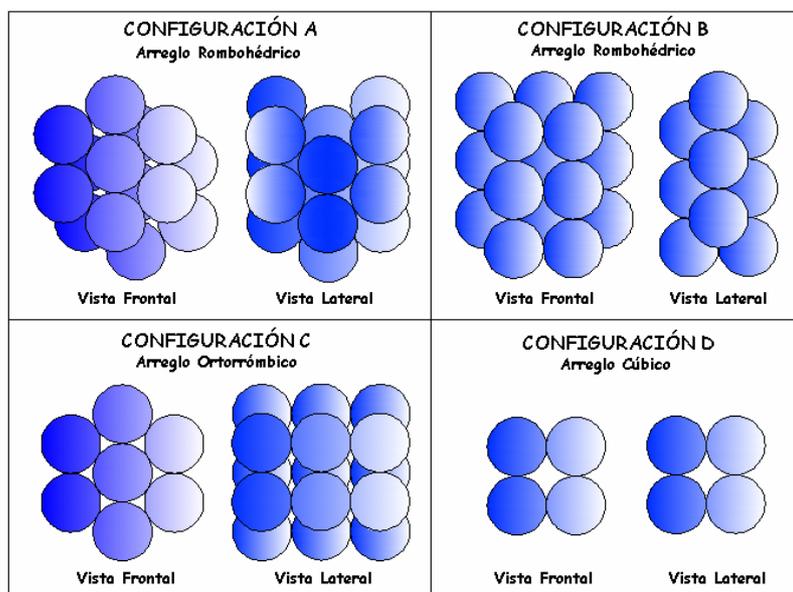


Figura 1. Arreglos espaciales de partículas.

En cada caso, se designa como *vista frontal* la cara del conjunto en contacto con la pared y como *vista lateral* la correspondiente a la posición perpendicular al flujo de gas. Se utilizó una geometría conformada por placas paralelas (secciones de flujo) en lugar de un conducto circular. Esta alternativa es apropiada si el radio de tubo es suficientemente mayor que el

diámetro de partícula utilizado. En todos los casos se utilizó una relación de aspecto mayor que 5.

Con respecto a la resolución por CFD, la aplicación de la misma en estado estacionario puede hacerse con el programa Fluent, en principio, por dos vías diferentes que ya han sido discutidas en trabajos previos (Zambon et al., 2006, 2007). En las referencias mencionadas se demuestra la viabilidad y ventajas de utilización del cálculo con Fronteras Periódicas, como se describe en la Sección 3.3 de este trabajo.

### 3.2 Descripción del método numérico y del software utilizado

Esta sección se vincula estrechamente con la siguiente, y se destina a detallar puntualmente características específicas del método y programa utilizados. Se ha mencionado que se realizó el estudio con el paquete comercial de dinámica de fluidos computacional Fluent 6.2.16 en su versión 3D. Este software es capaz de resolver numéricamente las ecuaciones microscópicas de balance de materia, cantidad de movimiento y energía en geometrías relativamente complejas, tal como la que se presenta en un lecho fijo.

Fluent utiliza el método numérico de volúmenes finitos para resolver las ecuaciones de gobierno de un flujo de fluidos. Las ecuaciones de balance y los procedimientos utilizados para discretizarlas han sido descritos por Patankar (1980). La construcción de la geometría y la generación de la malla se realizaron utilizando el pre-procesador GAMBIT 2.2.30, incluido en el paquete Fluent.

Las características fundamentales de la simulación numérica realizada se pueden sintetizar como se describe a continuación. El modelo simulado es tridimensional, siendo el fluido utilizado aire, definido como incompresible. Se analizaron condiciones de flujo que, en función del valor del  $Re_p$  (entre 100 y 2000), abarcaron los regímenes desde laminar hasta altamente turbulento. Con respecto al modelo de turbulencia utilizado fue el *Standard k- $\epsilon$*  con “*standard wall function*” como función de pared. Esta selección resultó de estudios previos y, fundamentalmente, de la atención a condiciones de tratamiento de la turbulencia recomendadas en la bibliografía (Calis et al., 2001).

Con respecto al método numérico, deben puntualizarse algunas características del mismo, a fin de contextualizar el procedimiento adoptado. Los aspectos inherentes al mallado y construcción de la celda se describen en la sección 3.4, por cuanto revisten una identidad que hace necesario detallarlos separadamente. Adicionalmente, debe mencionarse que, a fin de mantener el tamaño de la malla acotado, con la premisa de que los tiempos de computo sean razonables, se utilizaron fronteras periódicas translacionales, aplicadas a las fronteras de entrada y salida del flujo de aire (véase la Sección 3.3 para la descripción detallada de esta técnica). Las siguientes características técnicas complementan la descripción del método numérico y su implementación:

- Se utilizó el método segregado de resolución, que consiste en resolver las ecuaciones de gobierno discretizadas en forma secuencial en cada ciclo de iteración. Se trabajó con simple precisión ya que ensayos de prueba demostraron la inconveniencia de utilizar doble precisión, por cuanto se incrementa el tiempo de cálculo sin lograr una mejora apreciable en la calidad de los resultados.
- En todos los casos las iteraciones se realizaron inicialmente con esquemas de discretización de primer orden, para luego pasar a esquemas de segundo orden que arrojan resultados más precisos. Esta alternativa fue sugerida desde el sector de asistencia técnica de Fluent y, puesta a prueba, resultó enteramente satisfactoria puesto que solamente bajo este modo de operación se logró alcanzar la convergencia en

especial para valores elevados de  $Re_p$ ,

- Durante las simulaciones se modificaron gradualmente los factores de sub-relajación durante las iteraciones iniciales, con discretizaciones de primer orden. Una vez alcanzados valores bajos de los residuos y una tendencia adecuada resulta factible pasar a trabajar con discretizaciones de segundo orden, siendo luego innecesario modificar estos factores. En todos los casos se trabajó con factores de sub-relajación finales de 0.7 para la presión (P) y 0.3 para cantidad de movimiento. En los casos de simulaciones con flujos turbulentos para los factores de sub-relajación de las variables que controlan la turbulencia se adoptaron valores finales de 0.85.
- La convergencia numérica del modelo fue evaluada en base a la disminución de los residuos normalizados de las variables calculadas. FLUENT presenta permanentemente un gráfico de los residuos que permite realizar su seguimiento durante el desarrollo del cálculo. Adicionalmente se monitoreó la tendencia de la variable ( $\Delta P$ ) en la celda de cálculo. Se consideraron finalizadas las simulaciones sólo cuando se alcanzaron valores de los residuos del orden de  $10^{-5}$ , verificándose que el valor de la pérdida de carga permaneciese invariable.

### 3.3 Modalidad de Fronteras Periódicas (FP)

En la modalidad de (FP) en (3D) aplicada al caso que se analiza en este trabajo, el sistema de ecuaciones se resuelve, utilizando CFD, en un volumen limitado por dos planos perpendiculares al eje  $z$  (dirección del flujo de fluido) en los que la estructura del lecho presenta periodicidad en los valores de velocidad y temperatura (eventualmente de composición, en sistemas con cambio de concentración). Estos planos conformarán las “fronteras periódicas”. La utilización de FP se sustenta en detectar estructuralmente las posiciones en el lecho donde las variables deben adoptar valores periódicos y construir la celda de periodicidad consecuentemente. La condición de periodicidad implica que los componentes de la velocidad se repiten, en sus valores en el espacio, de la siguiente forma (véase, por ejemplo, [Fluent 6.2.16](#))

$$u(\vec{r}) = u(\vec{r} + \vec{L}) = u(\vec{r} + 2\vec{L}) = \dots ; v(\vec{r}) = v(\vec{r} + \vec{L}) = v(\vec{r} + 2\vec{L}) = \dots ; w(\vec{r}) = w(\vec{r} + \vec{L}) = w(\vec{r} + 2\vec{L}) = \dots \quad (8)$$

donde  $(u, v, w)$  son las componentes del vector velocidad,  $(\vec{r})$  es el vector posición,  $(\vec{L})$  es el vector de longitud periódica del dominio considerado, y (A), (B) y (C) los puntos de periodicidad ([Figura 2](#)).

Los dos planos que conforman las FP sustituyen funcionalmente a las condiciones iniciales y finales que se establecen en una descripción completa de la extensión del lecho, y su utilización reduce notablemente el tiempo de cálculo, facilitando, en la mayoría de los casos, la obtención de la convergencia.

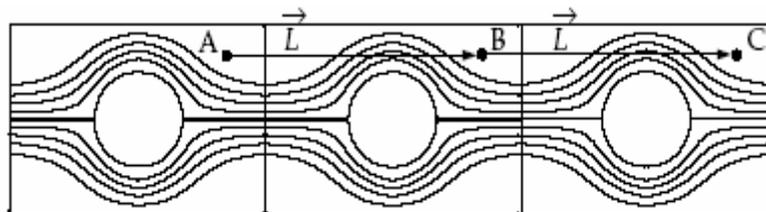


Figura 2. Posiciones de periodicidad en la celda de cálculo ([Fluent 6.2.16](#))

La [Figura 3](#) muestra una celda de cálculo con fronteras periódicas, con siete estratos de

partículas separando las paredes planas del recipiente. El gas fluye a través de las FP, planos (x-y), completándose la celda con los dos planos (x-z) donde se ubican las paredes y otros dos planos (z-y) para los cuales se aplican condiciones de simetría. Este sistema coincide con el utilizado previamente por los autores (Zambon et al., 2006, 2007).

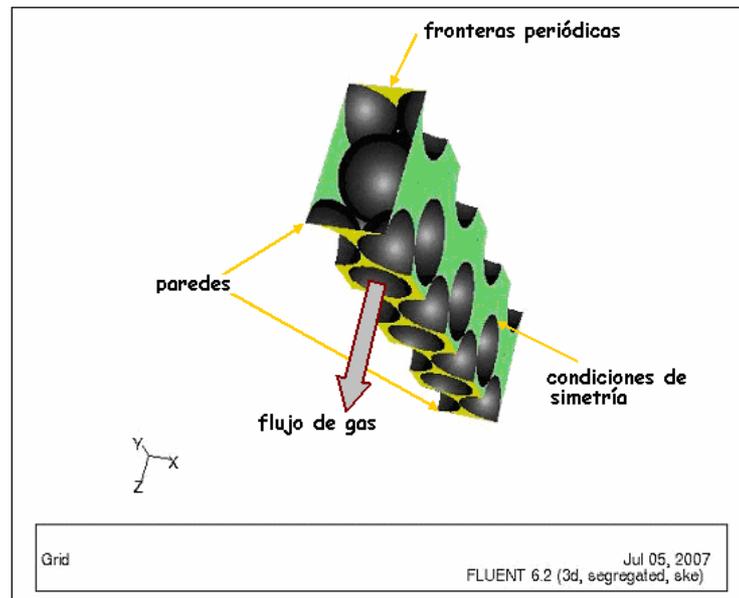


Figura 3. Celda de Cálculo con Fronteras Periódicas.

Un aspecto final pertinente para la construcción de la celda periódica es el número de estratos de partículas, que define la relación de aspecto. Este número puede variarse y el mismo influye en la porosidad global resultante de la celda debido al efecto de mayor porosidad local en la región adyacente a las paredes. La Figura 4 muestra la variación de la porosidad global resultante en la celda cuando ésta se construye con diferente número de estratos entre las paredes (se muestra el ejemplo para un arreglo rombohédrico, configuración A en la Figura 1, con esferas reducidas ligeramente para eliminar los puntos de contacto según se detalla en la Sección 3.4). Puede apreciarse que cuando el número de estratos es muy elevado se tiende hacia el valor de la porosidad del arreglo regular sin efectos de las paredes (porosidad media). Adicionalmente, existe un efecto de separación mínima entre partículas que evita el efectivo contacto entre dos esferas, que incrementa en un pequeño valor a la porosidad media, debido a una condición requerida por la malla.

Para obtener las diferentes porosidades se han estudiado diversos arreglos que se muestran en la Figura 1.

En todas las simulaciones se utilizan arreglos regulares y a su vez en cada arreglo se ha variado el número de estratos cuando resultó necesario. En todos los casos el número de estratos fue mayor que 5, estableciéndose dicho valor como límite inferior para la relación de aspecto. El número impar se adoptó en razón de mantener la condición simétrica de la celda sobre ambas paredes límite.

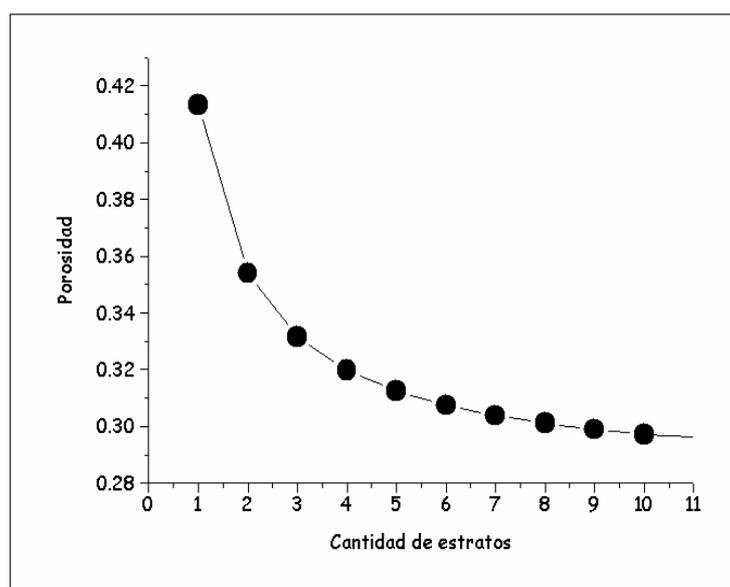


Figura 4. Evolución de la porosidad con el número de estratos para arreglo rombohédrico. Porosidad media del arreglo (con la separación mínima presente),  $\bar{\epsilon} = 0.2815$

### 3.4 Construcción de la geometría de la celda y generación de la malla: validación y descripción de características.

Para implementar las simulaciones, se construyeron celdas de cálculo de geometría tridimensional. La porción de tubo de reactor con su relleno fue modelada por medio de una celda conformada por dos paredes planas con 7 estratos de partículas en su interior (en la mayoría de los casos), reemplazando de esta forma la curvatura propia del tubo por las superficies mencionadas, lo cual es válido para relaciones de aspecto no demasiado pequeñas. Las partículas sólidas utilizadas presentan geometría esférica y su diámetro es de 0.01 m.

Para definir el tamaño del modelo geométrico a simular (configuración de cada estrato) se analizó la periodicidad de la estructura del lecho, buscando representar la estructura del arreglo con la menor cantidad posible de partículas. La geometría adoptada, para el caso de arreglo rombohédrico, se representa en la [Figura 3](#).

En el lecho real las partículas están mayoritariamente en contacto entre ellas y, eventualmente, con las paredes del tubo. En el proceso de construcción de la malla según esta geometría se observó la presencia de volúmenes de control sumamente distorsionados en las zonas que rodean a los puntos de contacto, lo que conduce a mallas de muy baja calidad. Para salvar este inconveniente se modificó la geometría original, realizándose una disminución del 1% del diámetro de las esferas, pero manteniendo su ubicación en la celda. De esta forma se eliminan de la geometría las dificultades generadas sobre puntos de contacto, y éstos mismos. Otros autores han reportado procedimientos similares para tratar los puntos de contacto entre superficies ([Nijemeisland et al., 2001](#); [Guardo, 2005](#)).

El esquema geométrico se construyó a partir de la generación del volumen de la celda y de las esferas, ubicándolos en posiciones previamente calculadas por consideraciones geométricas correspondientes a los arreglos regulares estudiados. El volumen a mallar, que para este estudio corresponde al ocupado por el fluido, se obtiene como diferencia de los volúmenes de celda y esferas. A pesar de haberse eliminado los puntos de contacto, las zonas donde ellos se hallaban fueron consideradas críticas en la realización del mallado, ya que en esos sectores la sección de pasaje del fluido se estrecha de manera ostensible. En tales regiones resulta necesario refinar la malla, mientras que, en la situación opuesta, una malla

más abierta puede considerarse aceptable en posiciones alejadas de las superficies.

Se calculó la ubicación geométrica de todos los puntos críticos para la generación de la malla y se volcó esta información en el pre-procesador GAMBIT a través de la incorporación de nodos que fueron utilizados para guiar el refinado de la malla. En todos los casos se utilizaron mallas no estructuradas conformadas por volúmenes tetrahédricos.

En la construcción de la malla se utilizaron las *funciones de tamaño (size function)*, para lograr una malla más cerrada en las zonas identificadas previamente como críticas, de acuerdo a la programación prevista por GAMBIT. La *función de tamaño* requiere que se definan tres parámetros: tamaño inicial, velocidad de crecimiento y tamaño límite, de los volúmenes de control. De esta manera se regula el crecimiento de la grilla a partir de un nodo o superficie especificado. Valores típicos de estos parámetros son: 0.00017, 1.15 y 0.0015, respectivamente.

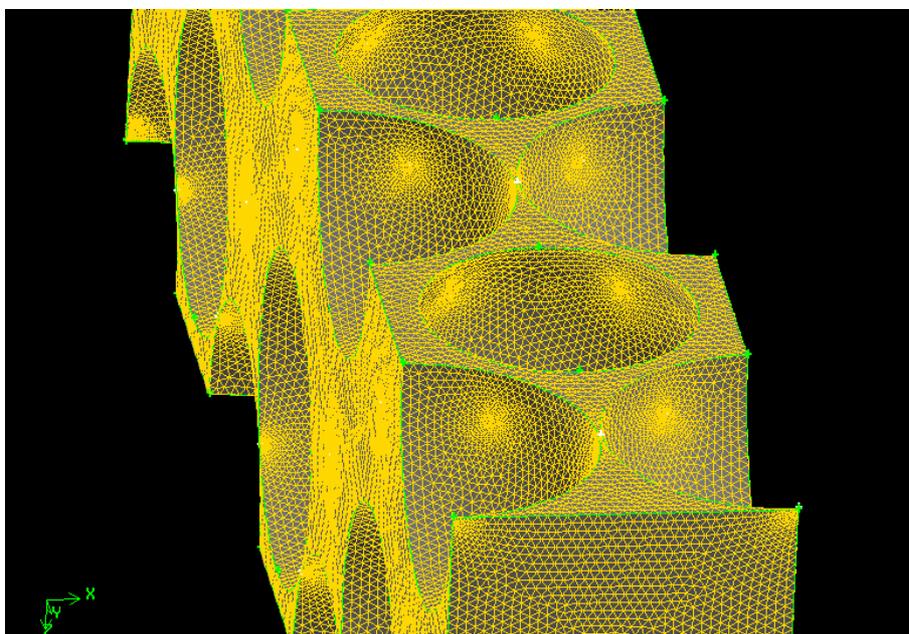


Figura 5 Malla de 1276286 volúmenes de control, arreglo rombohédrico

Para todas las configuraciones geométricas simuladas, se llevó a cabo la validación de la malla con el objeto de verificar si la solución era independiente de la malla. Se ensayaron mallas de distinta densidad hasta lograr identificar la de menor tamaño que lograba reproducir adecuadamente la variable ( $\Delta P$ ). Estas pruebas de validación se efectuaron sobre una celda de cálculo de menor tamaño, conformada por sólo 3 estratos de partículas, según el procedimiento reportado por Zambon et al. (2007). Esta prueba arrojó como resultado, por ejemplo, para el caso de arreglo rombohédrico con 7 estratos de esferas, una malla conformada por 1276286 volúmenes de control (Figura 5).

#### 4 ANÁLISIS DE RESULTADOS

En la sección precedente se ha descrito en detalle la forma en que se obtuvieron por CFD los valores de ( $\Delta P$ ) con un cuidado riguroso de las condiciones de funcionamiento de Fluent. Un primer análisis de los resultados obtenidos permite señalar que los valores de pérdida de carga calculados por CFD, que denotaremos como ( $\Delta P_{CFD}$ ) (aun cuando se evalúan por unidad de longitud de lecho,  $L$ ) presentan una desviación sistemática de los correspondientes a la

correlación de Ergun, ecuación (4),  $(\Delta P_{Ec.(4)})$ , para números de Reynolds  $Re_p > 500$  y relación de aspecto baja. En la Figura 6 se aprecian cuatro valores de  $(\Delta P_{CFD})$  obtenidos para diferentes porosidades y  $Re_p = 1000$ , graficados simultáneamente con los valores generados a partir de la ecuación (4). La porosidad en la Figura 6 se varió cambiando los arreglos (del conjunto de la Figura 1) desde el más compacto hasta el más diluido (cúbico).

Los valores de  $(\Delta P_{CFD})$  resultan siempre menores que los correspondientes a la ecuación (4).

Con respecto a la orientación de los arreglos relativa al plano perpendicular al flujo, se realizó la simulación de la configuración A (Figura 1) para obtener la pérdida de carga  $(\Delta P_{CFD})|_A$  y también de la configuración B (Figura 1), obteniéndose valores de  $(\Delta P_{CFD})|_B$ . Por ejemplo, para  $Re_p = 1000$ ,  $\varepsilon_{celda} = 0.3039$  los valores de  $(\Delta P_{CFD})|_B$  son 18.5 % menores que los de  $(\Delta P_{CFD})|_A$ . Esta situación concuerda cualitativamente con las observaciones reportadas por Martin et al (1951). Los valores de  $(\Delta P_{CFD})|_B$ , en consecuencia, se alejarán aun más de los predichos por la ecuación (4). Es necesario notar que la porosidad de la celda para las configuraciones A y B (Figura 1), si bien es conceptualmente la misma (idéntico arreglo) resulta, por razones de construcción) ligeramente diferente al delimitar los cortes de las esferas en la celda con planos diferentes. Si bien esto influye en el resultado de pérdida de carga, no es el causante de la diferencia marcada de valores de la misma entre las configuraciones A y B y no invalida la observación.

Si bien el uso de la ecuación de Ergun está muy difundido, presenta algunas deficiencias. Ergun (1952) se basó en un rango estrecho de porosidades y el resultado es una funcionalidad de  $(\Delta P)$  con la porosidad, muy débil. Ello es crítico a valores altos de la porosidad ( $\geq 0.5$ ), tal como los típicos de un lecho diluido o de la fase densa de un lecho fluidizado. No obstante, en todos los casos el sentido de la diferencia de  $(\Delta P_{Ec.(4)})$  con respecto a  $(\Delta P_{CFD})$  se mantuvo. Esta observación es coincidente con la reportada por Montillet et al. (2007). Estos autores informan una considerable desviación entre sus resultados (ecuación (7), Tabla 1) y la correlación de Ergun para las bajas relaciones de aspecto estudiadas y para  $Re_p$  a partir de 100-200. =

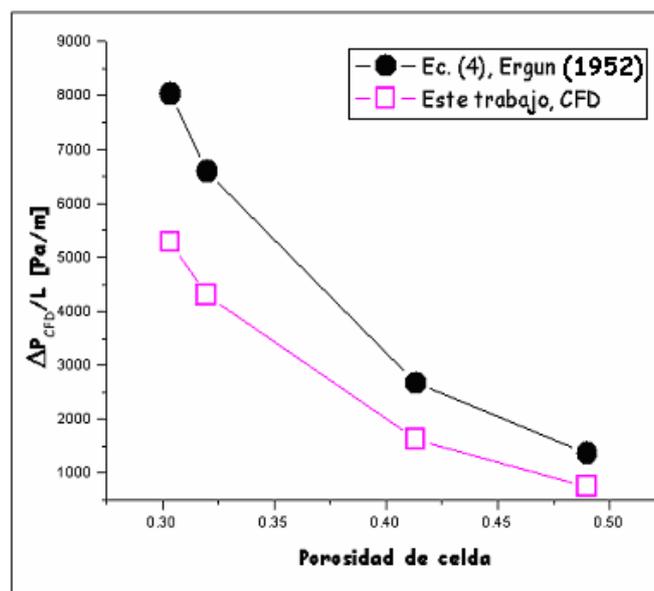


Figura 6. Valores de  $(\Delta P_{CFD})/L$  y ecuación (4) vs. porosidad de lecho (celda), fluido: aire

En la [Figura 7](#) se presentan los valores de  $(\Delta P_{CFD})$  en función de  $Re_p$ , conjuntamente con los valores calculados por las diferentes correlaciones citadas en la [Tabla 1](#), para un lecho en arreglo ortorrómbico (Configuración C, de la [Figura 1](#)). Se puede constatar el crecimiento de la diferencia  $((\Delta P_{Ec(4)} - \Delta P_{CFD}))$  a medida que se abandona el régimen estrictamente laminar y se avanza en los valores de Reynolds hacia la condición de turbulento. Idéntica tendencia muestran las correlaciones que se basan en la ecuación (4). Para la correlación de [Mehta y Hawley \(1969\)](#), que enfatiza el valor de la pérdida de carga al sumar las paredes en la definición del  $R_h$  (con respecto a un sistema que sólo incluya el arreglo de partículas) y lo aplica luego a la ecuación (4), es lógico esperar una mayor desviación que se evidencia en la [Figura 7](#) con respecto a los valores de  $(\Delta P_{CFD})$ .

La concordancia entre los valores obtenidos de pérdida de carga  $(\Delta P_{CFD})$  y los correspondientes a la correlación de [Montillet et al., 2007](#) y [Montillet, 2004](#); puede considerarse excelente para un rango de  $Re_p$  que abarca los regímenes desde laminar hasta transición al turbulento. Adicionalmente, se trata de una correlación basada en un amplio conjunto de datos experimentales (propios y de otros autores, [Fand et al., 1987](#)) y que incluye explícitamente en su formulación la relación de aspecto, abarcando especialmente rangos de valores bajos de dicha variable.

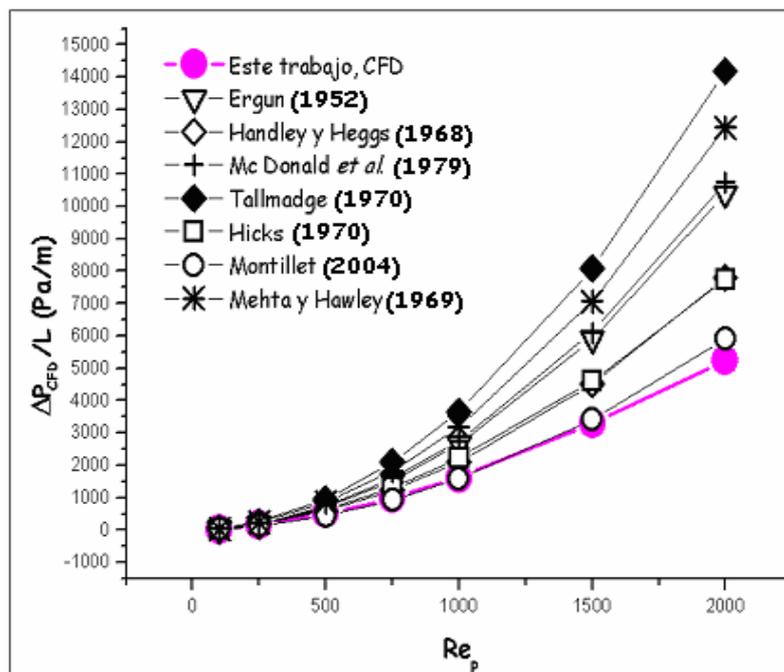


Figura 7. Comparación de resultados de  $(\Delta P_{CFD})$  con expresiones de la [Tabla 1](#)  
Número estratos: 7, arreglo ortorrómbico, Porosidad: 0.4133

La [Figura 8](#) muestra los errores relativos obtenidos para cada correlación en las condiciones de la [Figura 7](#), siendo el promedio de las mismas en todas las condiciones de 57%. Se destaca el bajo error de la correlación de Montillet (8.1%) y la desviación elevada de las correlaciones de Mehta y Tallmadge (85.9 y 103.9 %, respectivamente).

La [Figura 9](#) y la [Figura 10](#) presentan valores de  $(\Delta P_{CFD})$  en función de  $Re_p$ , conjuntamente con los valores calculados por las diferentes correlaciones citadas en la [Tabla 1](#), de manera análoga a la [Figura 7](#) pero para lechos con arreglos rombohédrico y cúbico (configuraciones A y D, de la [Figura 1](#)). La observación de estos resultados permite afirmar que, tal como es

previsible, se produce una disminución de la pérdida de carga con la porosidad, siendo, para un mismo  $Re_p$ , el menor valor de  $(\Delta P_{CFD})$  el correspondiente a la [Figura 10](#) (arreglo cúbico).

Cualitativamente, las observaciones realizadas sobre los valores de pérdida de carga graficados en la [Figura 7](#) son aplicables a los resultados de la [Figura 9](#) y de la [Figura 10](#). En relación a la correlación de [Montillet, 2004](#), el error promedio de la misma con respecto a los valores de  $(\Delta P_{CFD})$  es del 13% para el arreglo rombohédrico ([Figura 9](#)) y del 9% para el arreglo cúbico ([Figura 10](#)).

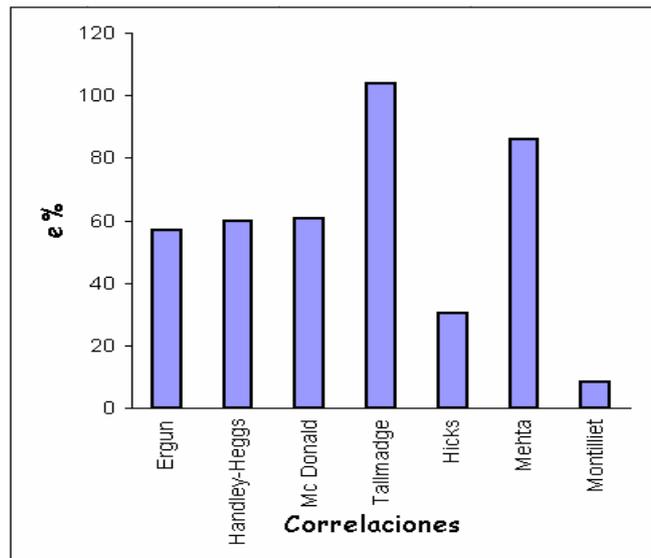


Figura 8. Error relativo a  $(\Delta P_{CFD})/L$ , de las correlaciones de la [Tabla 1](#) para los resultados de la [Figura 7](#)

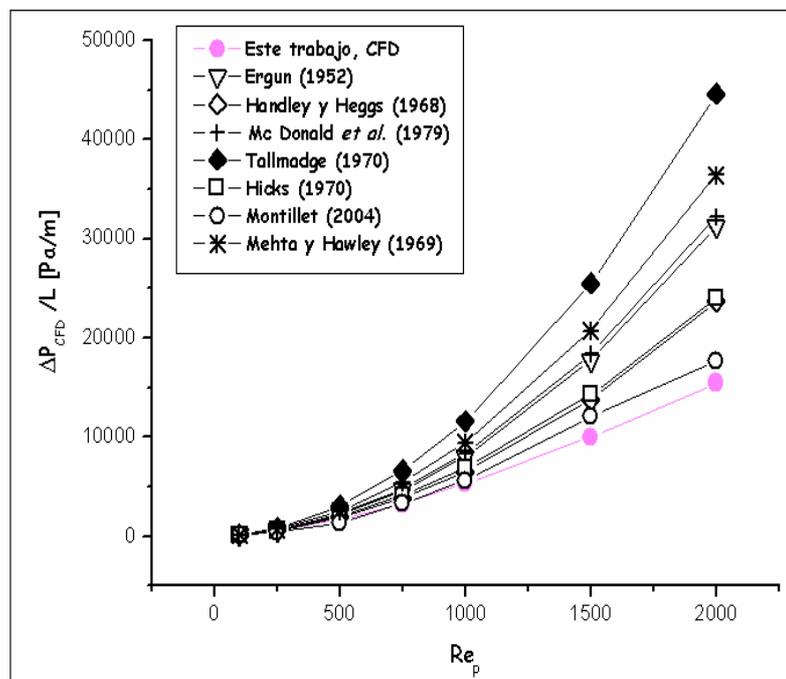


Figura 9. Comparación de resultados de  $(\Delta P_{CFD})$  con expresiones de la [Tabla 1](#), Número estratos: 7, arreglo rombohédrico. Porosidad: 0.3039

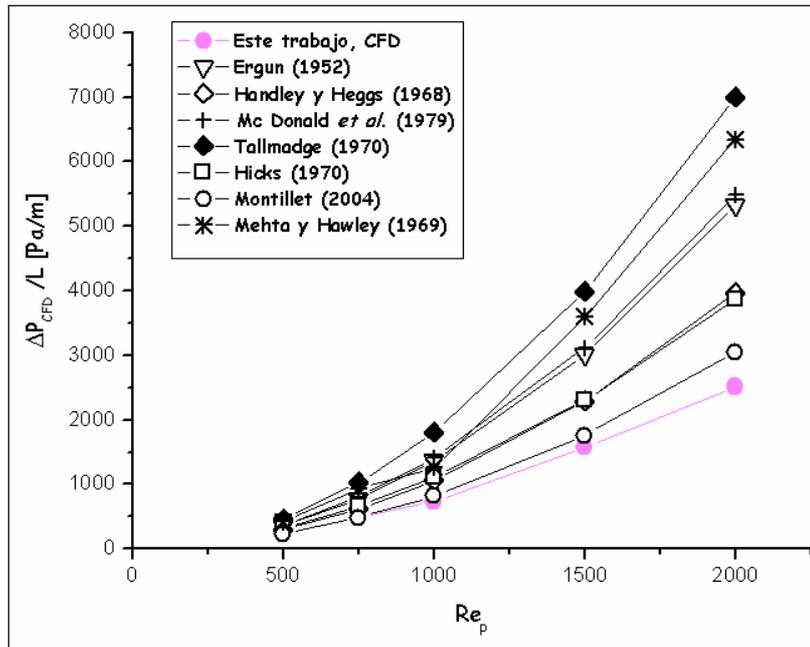


Figura 10. Comparación de resultados de  $(\Delta P_{CFD})$  con expresiones de la [Tabla 1](#),  
Número estratos: 7, arreglo cúbico, Porosidad: 0.4919

La [Figura 9](#) y la [Figura 10](#), evidencian una tendencia análoga para el comportamiento de la pérdida de carga en relación a  $Re_p$  cuando se analiza un arreglo rombohédrico o cúbico. Se observa una desviación ligeramente superior de los valores obtenidos por CFD con respecto a la correlación de Montillet (ecuación (7), [Tabla 1](#)) para los arreglos de mayores porosidades.

Se ha comprobado que el programa Fluent evidencia un tratamiento consistente de la influencia de los términos inerciales a valores moderados de  $Re_p$ . Si se corre el programa en la modalidad “laminar” o “turbulento”, ambas arrojan valores coincidentes de  $(\Delta P_{CFD})$  hasta valores de  $Re_p$  cercanos a 250 (error relativo entre ambas modalidades del programa en  $(\Delta P_{CFD})$  de 5 % para  $Re_p=250$  y de 11% para  $Re_p=300$ ). Ello confirma que el régimen estrictamente laminar partiendo de la condición de Darcy, se prolonga luego en el estado donde los términos inerciales comienzan a tomar importancia sin por ello llegar al estado turbulento.

En la [Figura 11](#) se grafican los valores de  $(\Delta P_j)$ , donde “j” representa cada una de las condiciones (caudales, arreglos estructurales, porosidades) calculados con cada correlación de la [Tabla 1](#) utilizada (subíndice “i”), en función del valor de  $(\Delta P_{j,CFD})$ , calculados por Fluent en las mismas condiciones. El error promedio puede expresarse como:

$$e(\%) = \left( \frac{1}{NTC} \right) \sum_{i=1}^{NTC} \left( \frac{1}{NDJ} \right) \sum_{j=1}^{NDJ} \left| \frac{(\Delta P_{i,j} - \Delta P_{j,CFD})}{\Delta P_{j,CFD}} \right| \quad (9)$$

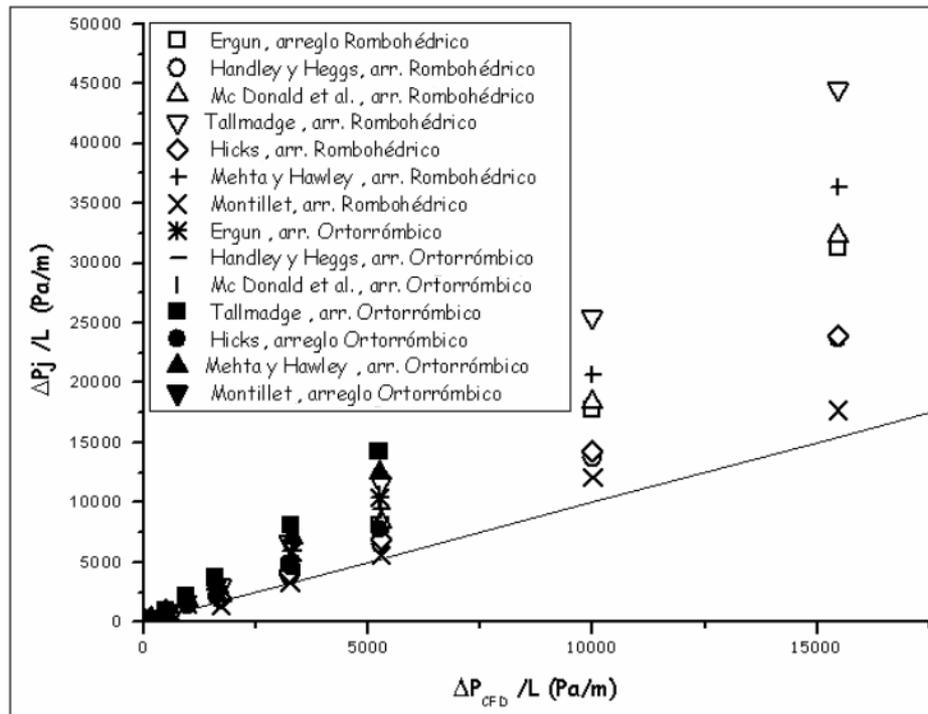


Figura 11. Error Promedio, ecuación (9), para todas las condiciones: “j” designa ecuación de la **Tabla 1** para  $(\Delta P_j)$ , una configuración estructural (**Figura 1**) y un caudal

Los cálculos realizados abarcan rangos de  $Re_p$  entre 100 y 2000 y  $0.3 \leq \varepsilon_{celda} \leq 0.5$ . En la ecuación (9),  $NTC$  es el número total de correlaciones utilizadas y  $NDJ$  el número de puntos (condiciones) en los que se realizó la comparación de  $(\Delta P_{CFD})$ . Para  $NTC=9$  y un número total de terminaciones de 100, se obtiene  $e$  (%) = 51.8. Debido a que se analizó el caso de lechos de baja relación de aspecto, se advierte que para los mismos gran parte de las correlaciones existentes no reproducen los valores de  $(\Delta P_{CFD})$  que, por su rigurosidad, pueden aceptarse como sustitutos de determinaciones experimentales. Las razones de este resultado pueden residir en la diversidad de condiciones en las que se han generado las correlaciones existentes, la imposibilidad de reproducción de valores con algunas de ellas, la ausencia de información complementaria y la carencia de fundamentaciones fenomenológicas en una gran parte de los trabajos existentes.

## 5 CONCLUSIONES

En este trabajo se ha propuesto una metodología para calcular la pérdida de carga en lechos fijos de baja relación de aspecto en base a CFD. Los resultados generados tienen rigurosidad puesto que se obtienen a partir de la resolución del conjunto de ecuaciones de balances microscópicos en el volumen de control representativo del lecho. Se han presentado resultados que evidencian los efectos de diversas variables, fundamentalmente la velocidad del fluido, el régimen de operación, el arreglo utilizado y la posición de las partículas, aplicando el modelo de turbulencia Standard  $k-\varepsilon$ .

Las características del método numérico y los parámetros para la implementación de su funcionamiento en el programa Fluent se describen en detalle habiéndose logrado obtener resultados en condiciones seguras de convergencia y con aceptable velocidad.

Se realizó el estudio con diferentes valores de porosidad, generados tanto por variación de la cantidad de partículas (o estratos) en el volumen de control, como por el cambio del arreglo

geométrico adoptado. Las tendencias y variaciones son las esperables para la pérdida de carga.

En la comparación con contribuciones previas se encuentra un apartamiento sistemático con los valores arrojados por la ecuación de Ergun y correlaciones derivadas y una concordancia muy buena con las correlaciones generadas por información experimental de Montillet, para arreglos rombohédrico, ortorrómbico y cúbico. Esto permite reconocer a la ecuación (7) como una alternativa rápida y de elevada confiabilidad para la evaluación de ( $\Delta P$ ) en este tipo de lechos, en el amplio rango de  $Re_p$  que abarca regímenes desde el de Darcy hasta el caótico o turbulento de altos  $Re_p$ .

## 6 NOMENCLATURA

- $a$  =  $D_t/d_p$ , relación de aspecto, (adimensional)  
 $a_v$  área de sólido por unidad de volumen de lecho, ( $m^2/m^3$ )  
 $d_p$  diámetro equivalente de partícula (m), o diámetro de partícula (m)  
 $D_t$  diámetro del tubo o recipiente, (m)  
 $f$  factor de fricción, (adimensional)  
 $G$  flujo másico, ( $kg/(m^2 s)$ )  
 $g$  aceleración de la gravedad, ( $m/s^2$ )  
 $L$  longitud del lecho, longitud de la celda periódica de cálculo, (m)  
 $Re_p$  =  $G d_p / \mu$ , número de Reynolds de partícula, (adimensional)  
 $R_h$  =  $\varepsilon/a_v$ , radio hidráulico para lechos rellenos, (m)  
 $S_V$  relación área externa / volumen para las partículas, (1/m)  
 $U$  velocidad superficial del fluido (valor promedio sobre la sección de flujo), (m/s)  
 $\rho$  densidad del fluido, ( $kg/m^3$ )  
 $\mu$  viscosidad del fluido, ( $kg/(m s)$ )  
 $\varepsilon$  porosidad del lecho, (adimensional)

## Agradecimientos

El presente trabajo se realizó con el financiamiento de la Universidad Nacional del Comahue y de la Universidad Nacional de La Plata de la República Argentina. Guillermo Barreto y Germán Mazza son miembros de la Carrera del Investigador Científico del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CONICET, Argentina.

## REFERENCIAS

- Calis, H. P. A., Nijenhuis, J., Paikert, C., Dautzenberg, F. M., and van den Bleek, C. M., CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing, *Chem. Eng. Sci.*, 56: 1713-1720, 2001.
- Dixon, A. G., Nijemeisland, M., and Stitt, E. H., CFD study of heat transfer near and at the wall of a fixed bed reactor tube- Effect of wall conduction, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 44:6342-6353, 2005.
- Ergun, S., Fluid flow through packed columns, *Chem. Eng. Prog.*, 48: 89-94, 1952.
- Fand, R. M., Kim, K., Lam, A. C. C. and Phan, R. T., Resistance to the flow of fluids through simple and complex porous media whose matrices are composed of randomly packed spheres, *J. Fluids Eng.*, 109: 268-274, 1987.
- Fand, R. M. and Thinakaran, R., The influence of the wall on flow through pipes packed with spheres, *J. Fluids Eng.*, 112: 84-88, 1990.

- Fluent, Inc. *Gambit 2.2.30*, "Modeling Guide", 2004.
- Froment, G. F. and Bischoff, K. B., *Chemical Reactor Analysis and Design*, Wiley Series in Chemical Engineering, 2<sup>nd</sup> Edition, New York, chapter 3, 1990.
- Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M. A., Recasens, F. and Egusquiza, E., Influence of the turbulence model in CFD modeling of wall-to-fluid heat transfer in packed beds, *Chem. Eng. Sci.*, 60: 1733-1742, 2005.
- Martin, J. J., McCabe, W. L. and Monrad, C. C., Pressure drop through stacked spheres, effect of orientation, *Chem. Eng. Prog.*, 47:91-93, 1951.
- Mehta, D. and Hawley, M. C., Wall effect in packed columns, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 8: 280-282, 1969.
- Montillet, A., Flow through a finite packed bed of spheres: A note on the limit of applicability of the Forchheimer-Type equation, *J. Fluids Eng.*, 126: 139-143, 2004.
- Montillet, A., Akkari E. and Comiti, J., About a correlating equation for predicting pressure drops through packed beds of spheres in a large range of Reynolds numbers, *Chem. Eng. Process.*, 46: 329-333, 2007.
- Nijemeisland, M. and Dixon, A. G., Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed, *Chem. Eng. J.*, 82: 231-246, 2001.
- Niven, R. K., Physical insight into the Ergun and Wen & Yu equations for fluid flow in packed and fluidized beds, *Chem. Eng. Sci.*, 57: 527-534, 2002.
- Patankar, S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Taylor and Francis Ed., USA, 1980.
- Ranade, V., *Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering*, Academic Press, NY, 2002.
- Zambon, M. T., Barreto, G. F. y Mazza, G. D., Modelo de Dos Zonas para lecho fijos con información asistida por CFD, *Revista Ingeniería Mecánica, Tecnología y Desarrollo, SOMIM, México*, 2(4): 123-131, 2007.
- Zambon, M. T., Barassi, F. J., Mazza G. D. y Barreto, G. F. , Cuantificación de la Transferencia de Calor sobre la Pared de un Lecho Fijo mediante la utilización de Fronteras Periódicas en la aplicación de Fluidodinámica Computacional, *Actas del XXII Congreso Interamericano de Ingeniería Química, CD, ISSN 1850 3535, 2-043*, Buenos Aires, Argentina, 2006.