

## X-012 – AVALIAÇÃO DE PARÂMETROS FLUIDODINÂMICOS DE UM ESCOAMENTO GASOSO UTILIZANDO SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL-CFD

**Tamiris Uana Tonello<sup>(1)</sup>**

Engenheira Agrícola. Mestre e Doutoranda em Engenharia Agrícola pela Unioeste.

**Eduardo Borges Lied**

Engenheiro Ambiental. Doutor em Engenharia Química pela Universidade Estadual do Oeste do Paraná (PEQ/Unioeste).

**Ana Paula Trevisan**

Tecnóloga em Gestão Ambiental. Mestre em Agronomia pela UEM. Doutoranda em Engenharia Agrícola pela Unioeste.

**Kauana Uyara Devens**

Engenheira Ambiental. Mestranda em Engenharia Agrícola pela Unioeste.

**Camilo Freddy Mendoza Morejon**

Engenheiro Químico. Doutor em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio de Janeiro (COPPE/UFRJ)

**Endereço<sup>(1)</sup>:** Rua Agronomia, 907 – Universitário – Cascavel – PR – CEP: 85819240 – Brasil – Tel: (44) 9 9997-7307 – e-mail: [uana@hotmail.com](mailto:uana@hotmail.com)

### RESUMO

Compreender o comportamento fluidodinâmico de equipamentos, como reatores, pode auxiliar na detecção de problemas associados a falhas operacionais e de projeto, situações que prejudicam o desempenho e performance do equipamento para a finalidade a qual ele se destina. Neste artigo, realizaram-se simulações da fluidodinâmica computacional (CFD) de escoamento de fase gasosa de um equipamento com geometria prismática retangular ( $V = 3,84 \text{ L}$ ). Um dos objetivos foi determinar a discrepância dos valores de tempo de residência (TR) teóricos com os valores de TR simulados. Foram avaliadas 5 vazões diferentes (2 a  $14 \text{ L min}^{-1}$ ). Entre as cinco condições de vazão avaliadas na simulação, as principais diferenças no resultado da simulação se referem à magnitude de velocidade, que é aproximadamente sete vezes mais alta em relação as simulações entre as vazões de 2 e  $14 \text{ L min}^{-1}$ . Isto é, enquanto que na simulação com vazão mais baixa ( $2 \text{ L min}^{-1}$ ), a velocidade máxima do fluxo atinge  $0,22 \text{ m s}^{-1}$ , na simulação com vazão mais alta ( $14 \text{ L min}^{-1}$ ), a velocidade máxima é  $1,53 \text{ m s}^{-1}$ . Portanto, o modelo demonstrou que o arranjo geométrico (design) do sistema influencia significativamente o comportamento fluidodinâmico do equipamento, de modo que o comportamento apresenta anomalias de fluxo, que são prejudiciais para diversas aplicações.

**PALAVRAS-CHAVE:** Anomalias fluidodinâmicas, zonas de estagnação, tempo de residência, velocidade do escoamento, recirculação.

### INTRODUÇÃO

O software *Comsol Multiphysics* se caracteriza por estar dividido em módulos e, segundo Gutiérrez (2013), esses módulos criados no programa são definidos com base no tipo de análise que se pretende realizar (elétricos, mecânicos, fluidos, reações químicas ou combinação destes). Alguns deles contém um conjunto de física para análise, outros módulos permitem que você importe a geometria de outros programas e outros permitem que você modifique os parâmetros que são definidos pelo programa (como equações, intervalos de valores ou valores em propriedades de um material).

Em termos gerais, o programa tenta resolver as equações diferenciais parciais (EDP) por discretização, tendo como ponto de partida as condições de contorno, de modo a se chegar a um sistema de equações algébricas que poderão ser resolvidas por métodos numéricos. O método utilizado para resolução dessas equações é o de Elementos Finitos. Depois disso o computador será capaz de apresentar resultados como perfis velocidade, pressão, temperatura, entre outros (Adaptado MARTINS, 2016).

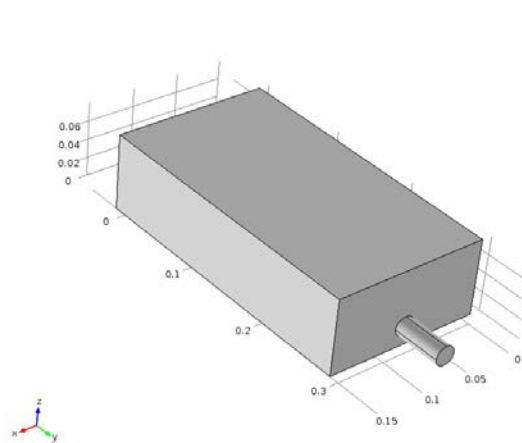
De acordo com Kanayama e Miyaoka (2011) o método dos Elementos Finitos consiste em diferentes métodos numéricos que aproximam a solução de problemas de valor de fronteira descritos tanto por equações diferenciais ordinárias quanto por equações diferenciais parciais através da subdivisão da geometria do problema em elementos menores, chamados elementos finitos, nos quais a aproximação da solução exata pode ser obtida por interpolação de uma solução aproximada.

O objetivo deste trabalho foi avaliar as características fluidodinâmicas e a formação de zonas mortas e de caminhos preferenciais para diferentes vazões utilizando software tipo CFD (Computational Fluid Dynamics).

## MATERIAIS E MÉTODOS

A simulação foi realizada por meio do uso do *software Comsol Multiphysics 5.0*, que utiliza o Método dos Elementos Finitos para solucionar as equações diferenciais parciais de escoamento da continuidade e de Navier-Stokes, necessárias para a resolução do balanço de massa.

De forma resumida, os procedimentos de simulação utilizando o *Comsol Multiphysics* iniciam pela definição da geometria da região de escoamento. No caso do presente trabalho a geometria corresponde ao desenho da Figura 1.



**Figura 1: Desenho geométrico em 3D nas dimensões do reator**

De acordo com Bird et al. (2004), a determinação das distribuições de pressões e velocidades para um escoamento com as condições consideradas de fluido newtoniano a temperatura constante, com densidade e viscosidade também constantes, pode ser realizada a partir da equação da continuidade e da equação de Navier-Stokes. A equação da continuidade apresenta-se como (Equação 1):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \mathbf{v}) \quad (1)$$

Em que  $\rho$  é a densidade de massa,  $\mathbf{v}$  é o vetor velocidade,  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  equivale a taxa de aumento de massa por unidade de volume, o vetor  $\rho \mathbf{v}$  é o fluxo de massa, e  $\nabla \cdot \rho \mathbf{v}$  é chamado “divergente de  $\rho \mathbf{v}$ ” e significa a taxa líquida de saída de massa por unidade de volume.

No caso de um fluido com densidade constante, escoamento incompressível e regime permanente, como são as considerações utilizadas, a Equação 1 assume a forma da Equação 2 e 3 (MUNSON et al., 2002):

$$(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0 \quad (2)$$

Ou

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3)$$

Em que  $u$ ,  $v$  e  $w$  são as componentes cartesianas do vetor velocidade.

$$\rho \frac{dv}{dt} + \rho (v \cdot \nabla) v = -\nabla p + \mu \nabla^2 v + \rho g \quad (4)$$

Em que  $\mu$  é a viscosidade do fluido, e  $\rho$  a sua densidade. Cujas componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$  nas coordenadas retangulares, para o estado estacionário, podem ser escritas da seguinte forma (Equação 5):

$$\begin{aligned} \rho \left( V_x \frac{\partial u}{\partial x} + V_y \frac{\partial u}{\partial y} + V_z \frac{\partial u}{\partial z} \right) &= \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \\ \rho \left( V_x \frac{\partial v}{\partial x} + V_y \frac{\partial v}{\partial y} + V_z \frac{\partial v}{\partial z} \right) &= \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \\ \rho \left( V_x \frac{\partial w}{\partial x} + V_y \frac{\partial w}{\partial y} + V_z \frac{\partial w}{\partial z} \right) &= \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

Para solucionar as equações de Navier-Stokes para essas condições (incompressível, laminar, fluxo estacionário), foram adotadas as condições de contorno descritas na Tabela 1.

**Tabela 1: Condições de contorno utilizados nas simulações dos modelos.**

Condição de Contorno	Superfície de geometria aplicada	Valores	
		Modelo 2D	Modelo 3D
Condição de parede (wall)	-	No slip	No slip
Velocidade de entrada (inlet)	Dispositivo de entrada	0,212 m s <sup>-1</sup> (2 L min <sup>-1</sup> )	
		0,528 m s <sup>-1</sup> (5 L min <sup>-1</sup> )	
		0,849 m s <sup>-1</sup> (8 L min <sup>-1</sup> )	
		1,167 m s <sup>-1</sup> (11 L min <sup>-1</sup> )	
		1,484 m s <sup>-1</sup> (14 L min <sup>-1</sup> )	
Condição de saída (outlet)	Dispositivo de saída	0 Pa	0 Pa

Foram realizadas simulações preliminares utilizando as interfaces de fluxo laminar e de fluxo turbulento (modelo k-ε). Devido ao perfil de baixas velocidades resultante dos dois modelos, na ordem de 10<sup>-1</sup> m s<sup>-1</sup>, o modelo laminar foi escolhido como o mais provável a prever de forma adequada o fluxo no reator.

Algumas simplificações foram adotadas para realizar as simulações: por se tratar de uma corrente gasosa diluída em ar, a sua densidade e viscosidade foram consideradas iguais às do ar atmosférico; fluido incompressível; fluxo estacionário; fluido com apenas uma fase; e uma temperatura constante de 293,15 K.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a simulação considerou-se que a região de escoamento se dá através de um canal de seção retangular tridimensional (plano xyz) de dimensões 8 x 16 x 30 cm. A geometria foi criada no ambiente do *software Comsol Multiphysics*.

Como descrito anteriormente, para a simulação fluidodinâmica foram estabelecidas diferentes vazões, sendo que para cada escoamento foram calculadas as respectivas velocidades máxima, mínima e média, bem como o tempo de residência (TR). A seguir as Tabelas 2 e 3 trazem o resumo dos resultados estimados pela simulação.

**Tabela 2: Resumo dos resultados de simulação fluidodinâmica relacionados ao campo de velocidade**

Vazão (L min <sup>-1</sup> )	Velocidade máxima (m s <sup>-1</sup> )	Velocidade mínima (m s <sup>-1</sup> )	Velocidade média (m s <sup>-1</sup> )
2	0,22287	0,0	0,009849
5	0,73886	0,0	0,035465
8	0,87698	0,0	0,041445
11	1,2077	0,0	0,056896
14	1,5378	0,0	0,072278

Entre as cinco condições de vazão avaliadas na simulação, as principais diferenças no resultado da simulação se referem à magnitude de velocidade, que é aproximadamente sete vezes mais alta em relação as simulações entre as vazões de 2 e 14 L min<sup>-1</sup>. Isto é, enquanto que na simulação com vazão mais baixa (2 L min<sup>-1</sup>), a velocidade máxima do fluxo atinge 0,22 m s<sup>-1</sup>, na simulação com vazão mais alta (14 L min<sup>-1</sup>), a velocidade máxima é 1,53 m s<sup>-1</sup>.

Com base nos valores calculados de velocidade média foi possível determinar os respectivos tempos de residência (TR) de acordo com as vazões utilizadas. A Tabela 3 classifica os valores de TR em teórico e simulado.

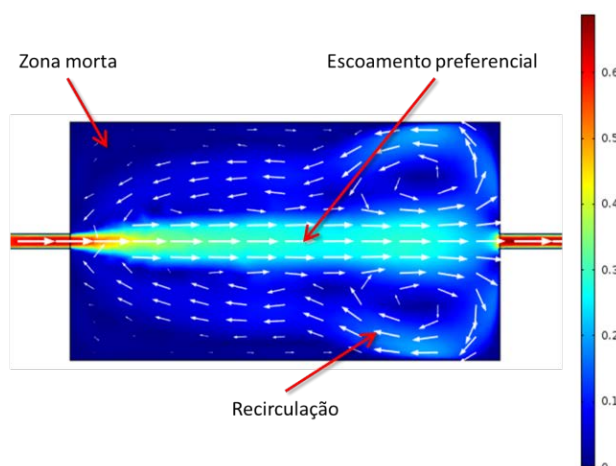
**Tabela 3: Resumo dos resultados de simulação fluidodinâmica relacionados ao tempo de residência.**

Q (L min <sup>-1</sup> )	TR teórico <sup>1</sup> X	TR simulado <sup>2</sup> Y	Y/X
2	1 min 55 s	30 s	0,26
5	46 s	8 s	0,17
8	29 s	7 s	0,24
11	21 s	5 s	0,23
14	16 s	4 s	0,25

$$^1 TR = \frac{V}{Q}; ^2 TR = \frac{V}{v \times A} \text{ (v é a velocidade média calculada pelo software)}$$

A análise da Tabela 3 permite concluir que os valores de TR simulados representam em média 26% o valor do TR teórico para a faixa de vazão estudada (2 a 14 L min<sup>-1</sup>). Este resultado ao ser interpretado fisicamente pode indicar a existência e formação de caminhos preferenciais no escoamento, fazendo com que o tempo de residência seja menor ao valor teórico. A hipótese da formação de caminho preferencial é fortalecida pela apresentação dos resultados gráficos em 2D do perfil de velocidade, conforme ilustrado na Figura 2.

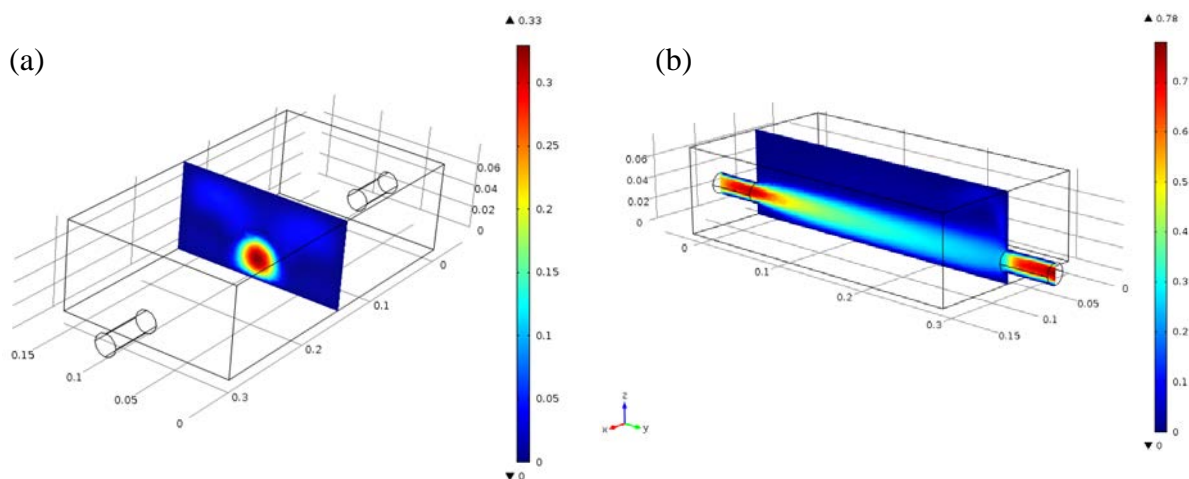
As simulações para as diferentes vazões apresentaram perfis com características semelhantes, portanto optou-se por apresentar o resultado do perfil de velocidade para a simulação com vazão de 5 L min<sup>-1</sup>. Percebem-se alguns fenômenos fluidodinâmicos esperados em reatores retangulares, como uma zona de escoamento preferencial no eixo central do reator, recirculação interna em algumas regiões e zonas mortas.



**Figura 2:** Perfil de velocidade ( $\text{m s}^{-1}$ ) gerado pelo software Comsol para vazão de  $5 \text{ L min}^{-1}$ . Vetores velocidade em branco estão na escala logarítmica.

O perfil de velocidade gerado pelo software consegue deixar evidente visualmente a formação de caminhos preferenciais dada pelas cores diferenciadas no gráfico. As regiões onde predomina o tom de azul mais escuro são as chamadas zonas de estagnação (ou zonas mortas). As zonas de estagnação são regiões do reator em que os tempos de residência são relativamente altos, quando comparados ao TR teórico.

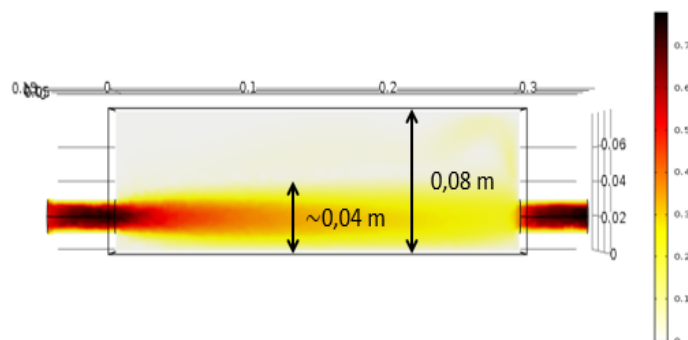
A simulação tridimensional permite melhor representar espacialmente os escoamentos, tendo em vista que os fenômenos de recirculação, zonas mortas e caminhos preferenciais ocorrem nas três direções no interior do reator. As Figuras 3 (a) e (b) trazem a representação gráfica dos perfis de velocidade utilizando planos de corte dentro da imagem 3D.



**Figura 3:** Perfis de velocidade ( $\text{m s}^{-1}$ ) em diferentes planos de corte: (a) frontal e (b) lateral.

As regiões de maior velocidade se concentram em uma pequena porção da seção transversal conforme as Figuras 3 (a) e (b) ilustram com clareza. É possível perceber que o escoamento se dá na região inferior do reator, sendo que na região superior é notória a formação de zonas de estagnação (regiões de baixa velocidade). Esses caminhos preferenciais são aspectos indesejáveis em fenômenos que dependem do tempo de contato, como é o caso de reações químicas com catalisadores.

A Figura 4 consegue traçar as dimensões em termos de altura das regiões de maior velocidade e de menor velocidade no interior do reator.



**Figura 3: Perfil de velocidade do ponto de vista lateral (plano zy).**

Portanto, a Figura 4 apresenta que a região de maior velocidade está restrita a uma altura aproximada de 0,04 m (4 cm), enquanto que acima disso é perceptível a existência de uma região de baixa velocidade indicada pelos tons mais claros da legenda. Isto pode indicar que a configuração final de uma geometria de um reator em escala maior deve atentar para este fenômeno, pois as regiões de estagnação podem se constituir em volume desnecessário na construção e execução do projeto do equipamento.

## CONCLUSÕES

Nas simulações bidimensionais e tridimensionais realizadas neste trabalho, constataram-se:

- identificação de anomalias como a formação de caminhos preferenciais nas regiões axiais do reator, que contém uma entrada, apontando a ineficiente mistura do fluxo de gás afluente no interior do reator;
- visualização de zonas de estagnação no reator e regiões de recirculação, sugerindo intensa formação de anomalias fluidodinâmicas no interior do reator estudado.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. COMSOL. Enciclopédia Multifísica. Disponível em: < <https://br.comsol.com/multiphysics> > Acesso em 14/06/2017.
2. GUTIÉRREZ, A. M. Introducción al Uso del Software Comsol Multiphysics. Universidad Veracruzana Facultad de Ingeniería Mecánica Eléctrica, 2013.
3. KANAYAMA, A. Y.; MIYAOKA, F. Y. Simulação da distribuição da vazão de ar e da perda de carga em sistema de alimentação de dois queimadores de coque com utilização de dois códigos de CFD. Trabalho (Conclusão de Curso) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, 2011.
4. MARTINS, V. A. M. Fluidodinâmica Computacional Aplicada à Geração e Propagação de Ondas em um Reservatório. Trabalho (Conclusão de Curso) – Departamento de Engenharia Química e Petróleo, Universidade Federal Fluminense, 2016.