

# MODELAMENTO MATEMÁTICO EM 3D DA FLUIDODINÂMICA DAS FASES GÁS-SÓLIDO EM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO<sup>1</sup>

Anderson Willian de Souza Baltazar<sup>2</sup>

Jose Adilson de Castro<sup>2</sup>

Alexandre Jose da Silva<sup>2</sup>

## Resumo

Processos utilizando leito fluidizado são conhecidos desde 1920, no entanto só se popularizaram nas décadas de 80 e 90 com a aplicação deste equipamento para geração elétrica. O uso do leito fluidizado torna possível o uso de matérias-primas de qualidade inferior as normalmente usadas em processos similares. Esta técnica ainda não está muito difundida no Brasil, onde problemas com a matriz energética têm aberto a opção para o uso de novas tecnologias de geração elétrica. Geração térmica é uma das opções que pode usar reator de leito fluidizado para a combustão de materiais como carvão e biomassas. O carvão nacional apresenta um alto teor de cinzas e enxofre, fato que o torna impróprio para o uso direto em termelétricas convencionais. No entanto, o uso do leito fluidizado para produção de gás para geração elétrica é uma técnica promissora para o uso de matérias-primas impuras com alta eficiência de combustão e energia. Os modelos matemáticos têm provado sua eficiência para investigar condições operacionais de processos industriais virtualmente. O objetivo deste estudo é o desenvolvimento de um modelo para simular o fenômeno de fluidização considerando duas fases. O modelo utiliza-se do conceito de multifases para simular o escoamento em um reator de leito fluidizado em 3D. As equações de transporte de massa, momentum e energia são resolvidas pelo método de volumes finitos implementado em um código escrito em Fortran 90/95. As fases são modeladas usando princípios da mecânica do contínuo, onde uma coleção de partículas idênticas é considerada como tendo diâmetro e densidade representativos. Este modelo se apresenta como uma inovação na simulação de leitos fluidizados por considerar três dimensões em um processo transiente. Os resultados obtidos mostram-se em concordância com resultados experimentais e computacionais previamente investigados para validar o modelo. Após a validação o modelo foi expandido para a geometria de um reator em escala industrial para verificar o comportamento em processo industriais, apresentando resultados compatíveis.

**Palavras-chave:** Escoamento multi-fásico; Modelamento matemático; Simulação computacional; Três dimensões; Transiente.

## 3D MATHEMATICAL MODELING OF GAS-SOLID PHASES FLUIDDYNAMICS IN FLUIDIZED BED REACTOR Abstract

Processes using fluidized bed reactors are well known since 1920, although in some processes like combustion, this equipment only started to be used in the 80-90's with special application to installations for electric generation. Fluidized bed process makes possible the use of raw materials with quality lower than the materials normally used in similar processes. The fluidized bed technics is not spread out in Brazil, where the problems with energetic matrix have opened the options to use new processes to electric generation. Thermal generation is one of this options that can use fluidized bed reactor to burn materials like coals and biomasses. The Brazilian coals presents high ash and sulfur content which is impossible to directly use in conventional thermoelectric facilities. Therefore, the use of fluidized bed to produce hot gas for power generation is a promising technique to overcome the use of impure raw materials with high combustion efficiency and energy savings. Mathematical models have proved their efficiency to investigate optimum operational conditions and reproduce virtually the industrial process. The objective of this work is to develop a computational model that simulates the fluidized bed phenomena considering two phases. The model uses the multiphase concept to simulate the flow in a 3D fluidized bed reactor. Transport equations of mass, momentum and energy are solved by the finite volume method for non-orthogonal system implemented in a complex computational code written in Fortran 90/95. The phases are modeled using continuum mechanics principles where collection of particles is considered identical having a representative diameter and density. This model has been an innovation of fluidized bed study by considering 3D, transient features. The results shown good agreements with experimental and computational results previously investigated. After validation of model, the model was expanded to industrial scale reactor geometry to verify the behavior of model in industrial process, showing compatible results.

**Key words:** Multiphase flow; Mathematical modeling; Computational simulation; Three dimensions; Transient.

<sup>1</sup> Contribuição técnica ao VIII Seminário Brasileiro de Minério de Ferro, 18 a 21 de setembro de 2007, Salvador - BA, Brasil.

<sup>2</sup> Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica-EEIMVR-UFF, Av. dos Trabalhadores 420 – Vila Sta. Cecília – 27255-125 – Volta Redonda – RJ [anderson@metal.eeimvr.uff.br](mailto:anderson@metal.eeimvr.uff.br)

# 1 INTRODUÇÃO

A fluidização não é uma técnica nova ela é conhecida desde 1920, no entanto a combustão em leito fluidizado só ganhou status a partir de 1970, embora sua utilização fosse ampla em vários processos nas indústrias químicas e de petróleo.<sup>(1)</sup> O leito fluidizado, no entanto, ganhou grande popularidade nas décadas de 80 e 90 com o aumento do interesse nas instalações para geração de energia, devido à flexibilidade de combustíveis e influências ambientais positivas. No Brasil esta técnica ainda não está muito difundida, e o carvão mineral nacional não é muito utilizado em processos industriais, devido ao fato de apresentarem elevado teor de cinzas e enxofre. No entanto, problemas na matriz energética têm aberto opções para o uso de novas técnicas para geração elétrica. Dentre estas opções a geração térmica destaca-se por viabilizar o uso de reatores de leito fluidizado para a combustão de carvões, biomassas e alguns resíduos industriais e agrícolas. Modelos matemáticos para combustão ainda são escassos no mercado principalmente devido ao complexo modelamento matemático e a instabilidade numérica das equações que devem ser resolvidas para representar o processo.<sup>(2)</sup> O modelamento do movimento gás-sólido no interior de reatores de leito fluidizado é uma tarefa complexa, porque a interface é desconhecida, transiente e as interações só são conhecidas numa limitada região.<sup>(3)</sup> Dois métodos têm sido utilizados para simular leito fluidizado gás-sólido: O primeiro utiliza método discreto baseado na dinâmica molecular (modelo Lagrangeano); O segundo utiliza a mecânica do contínuo tratando as duas fases se interpenetrando continuamente (multifluido ou modelo Euleriano).<sup>(3)</sup> O modelo lagrangeano simula partículas individuais, limitando assim, a simulação a um pequeno número de partículas. Portanto, em escala industrial o número de partículas necessárias para simular um processo é normalmente grande, fato este que tem limitado o uso desta aproximação. Por outro lado, esforços têm sido concentrados para desenvolver modelos utilizando mecânica do contínuo capaz de reproduzir o comportamento industrial com razoável trabalho computacional. Isso se torna desejável porque os modelos matemáticos têm provado sua eficiência em simular condições operacionais e, reproduzir virtualmente processos industriais. Nesse contexto o objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo computacional capaz de simular o fenômeno de fluidização considerando duas fases. O modelo utiliza o conceito de multifases para simular o escoamento em 3D de um reator de leito fluidizado. As equações de transporte de massa, momentum e energia são resolvidas utilizando a técnica de volumes finitos para um sistema não ortogonal implementado em um complexo código computacional escrito em Fortran 90/95. As fases são modeladas usando princípios de mecânica do contínuo, onde coleções de partículas são consideradas idênticas tendo diâmetro e densidade representativos. A equação de momentum da fase sólida é modificada para contabilizar a transferência de momentum devido às colisões partícula-partícula baseada no modelo da teoria cinética<sup>4</sup>. A temperatura granular,  $\Theta$ , é definida para representar a energia cinética específica da velocidade de flutuação, ou a energia de flutuação translacional resultantes da velocidade de flutuação da partícula<sup>3</sup>. No escoamento granular, velocidades de flutuação das partículas são assumidas como sendo resultantes das partículas que são carregadas pelo escoamento. A equação da temperatura granular da partícula pode ser expressa em termos de flutuações causadas por cisalhamento, dissipação por escoamento cinético e calor de colisão, dissipação devido a colisões inelásticas, turbulência do fluido, colisões com moléculas e dissipação devido a interações com o fluido.<sup>(4)</sup> Diversos estudos têm

mostrado a potencialidade do uso da teoria granular para simular leitos fluidizados. Embora os modelos para simular leitos fluidizados estejam atingindo maturidade, validações com resultados experimentais ainda devem ser feitas principalmente porque muitas das correlações usadas são empíricas ou semi-empíricas. Este estudo considera um modelo transiente em 3D para analisar o movimento e a fração volumétrica das fases gás-sólido em um reator de leito fluidizado em escala experimental usado para validação do modelo. Posteriormente é expandido para a geometria e dimensões de reator em escala industrial.

## 2 MODELAMENTO MATEMÁTICO

O presente modelo consiste em descrever o fenômeno que ocorre no interior de um reator de leito fluidizado composto de um sistema com duas fases. A formulação matemática considera a hipótese de meio contínuo, expressa pela equação de transporte de massa, momentum e energia. O transporte de massa, momentum e energia no interior do reator é representado pela equação geral do transporte (equação 1). Onde, o índice  $i$  representa as fases gás e sólidos. O coeficiente efetivo de difusão ( $\Gamma_{\phi_i}$ ) assume diferentes significados de acordo com o tipo de equação a ser resolvida, por exemplo, se a equação a ser resolvida é a equação de momentum, então, o coeficiente de difusão assume a viscosidade dinâmica da fase. O termo fonte ( $S_{\phi_i}$ ) representa a geração ou consumo de massa, momentum e energia. Nos termos fontes são consideradas, por exemplo, o fenômeno de interação entre as fases, interações mecânicas resultando no acoplamento entre as equações de massa momentum e energia. Os modelos de momentum e energia são obtidos na literatura e foram detalhados em estudos de leito fluidizado.<sup>(3)</sup> A esta formulação foi adicionada a teoria cinética do escoamento granular para contabilizar a energia de flutuação das partículas sólidas e determinar os termos de tensão dos sólidos nas equações de momentum.<sup>(3)</sup> A equação 2 é introduzida ao modelo, exatamente, para descrever a energia de flutuação das partículas sólidas.<sup>(3)</sup>

$$\frac{\partial (\varepsilon_i \rho_i \phi_i)}{\partial t} + \text{div} (\varepsilon_i U_i \phi_i) = \text{div} (\varepsilon_i \Gamma_{\phi_i} \text{grad} \phi_i) + S_{\phi_i} \quad (1)$$

$$\frac{3}{2} \left[ \frac{\partial (\varepsilon_s \rho_s \Theta_s)}{\partial t} + \text{grad}(\varepsilon_s \rho_s \Theta_s \vec{v}_s) = (-p_s \bar{I} + \bar{\tau}_s) \div \text{grad} \vec{v}_s + \text{grad}(k_{\Theta_s} \cdot \text{grad} \Theta_s) - \gamma_{\Theta_s} \right] \quad (2)$$

Onde, ( $\Theta_s$ ) é a temperatura granular, ( $I$ ) é o tensor tensão adimensional, ( $\bar{\tau}_s$ ) é o tensor tensão, ( $p_s$ ) é a pressão do sólido e ( $\gamma_{\Theta_s}$ ) é a dissipação de energia por colisão. Às equações diferenciais representadas pela equação 1 devem ser impostas condições iniciais e de contorno que representem as condições de processo serão mostradas na seção seguinte de acordo com o caso a ser analisado.

## 3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 3.1 Validação do Modelo

Os resultados desta seção referem-se à validação do modelo, ou seja, a comparação dos resultados obtidos com resultados investigados na literatura. As

condições operacionais e parâmetros utilizados para a validação do modelo podem ser vistos na Tabela 1.

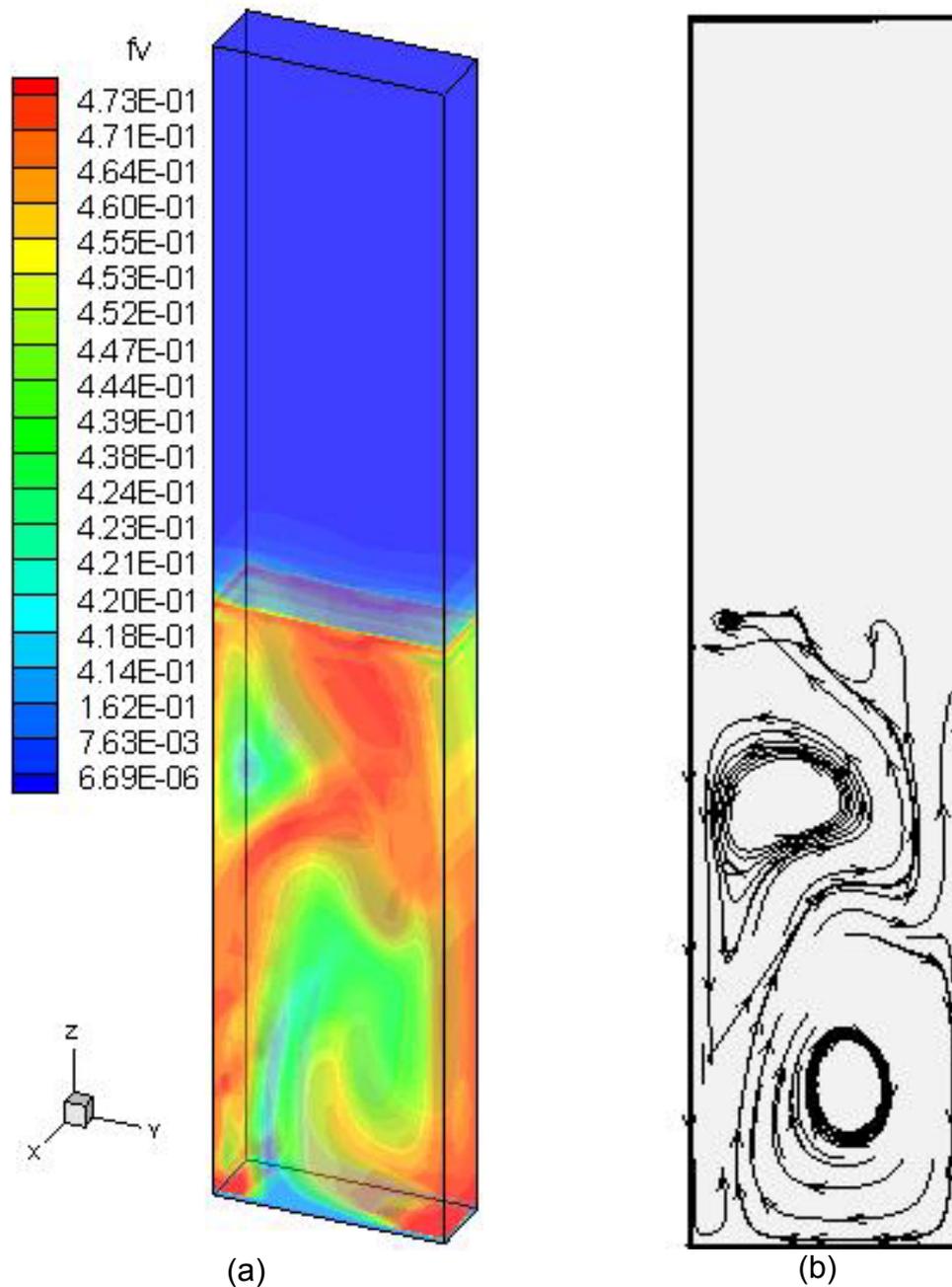
**Tabela 1.** Parâmetros para simulação.

Descrição	Valor	Comentário
Densidade da partícula, $\rho_p$	2500 kg/m <sup>3</sup>	“Glass beads”
Densidade do Gás, $\rho_g$	1,225kg/m <sup>3</sup>	Ar
Diâmetro das partículas, $d_p$	275µm	Distribuição uniforme
Coefficiente de restituição, $e_{ss}$	0,90	Valor da literatura
Fração inicial no leito fixo, $\varepsilon_{s0}$	0,60	Valor Fixo
Velocidade superficial do gás, $U$	0,38m/s	$\sim 6 * U_{mf}$
Profundidade do Leito	0,28m	Valor Fixo
Espessura do Leito	0,025m	Valor Fixo
Altura do Leito	1,00m	Valor Fixo
Altura inicial do leito de partículas	0,40m	Valor Fixo
Condições na entrada	Velocidade	Velocidade do gás
Condições da saída	Escoamento	Desenvolvido
“Time steps”	0,001s	Especificado
Critério de convergência	10 <sup>-6</sup>	Especificado

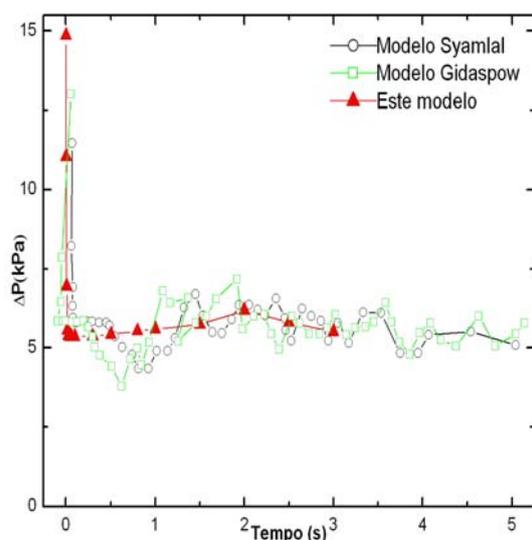
A Figura 1 (a) mostra imagem em 3D da fração volumétrica de sólidos em uma coluna vertical utilizada em experimentos de fluidização, obtida através de simulação computacional, para  $t=3s$ . A expansão do leito é evidenciada e a formação de aglomerados de partículas (*clusters*) também está caracterizada nesta figura. Na Figura 1 (b) pode ser visto uma imagem em 2D das linhas de corrente (stream traces) do movimento das partículas no interior do leito. As linhas de corrente demonstram que ocorre uma recirculação das partículas na região inferior do leito evidenciando, assim, o fenômeno de fluidização.

A Figura 2 mostra a comparação da queda de pressão,  $\Delta P$ , obtido neste modelo e os modelos de Syamlal-O’Brien e Gidaspow apresentados por Taghipour e colaboradores.<sup>(3)</sup> Este parâmetro é importante porque a fração volumétrica no leito pode ser estimada pelo  $\Delta P$ .<sup>(5)</sup> No início da fluidização o modelo prevê altos valores de  $\Delta P$ , que começa a estabilizar em torno de um valor médio. A diferença observada entre os modelos inicialmente pode ser atribuída à metodologia de solução para o cálculo da fração volumétrica de sólidos. Neste modelo ela é calculada diretamente pela equação da continuidade, enquanto em outros modelos é calculada por correlações empíricas baseada na queda de pressão. A instabilidade da queda de pressão reflete a flutuação total e a formação de bolhas e aglomerados *clusters*, a qual, após a estabilização indica condições apropriadas para operação. Um outro fato a ser ressaltado é que os modelos citados utilizam critério de convergência de 10<sup>-3</sup>, enquanto que neste modelo o valor utilizado foi de 10<sup>-6</sup> o que contribui para maior estabilidade dos resultados. Um outro parâmetro importante no processo de fluidização é a taxa de expansão, porque este parâmetro mostra o deslocamento da coluna de sólidos no leito. Este parâmetro pode ser visto na Figura 3, onde as taxas obtidas para este trabalho são comparadas com resultados experimentais e com os modelos citados. Pode-se ver que os resultados obtidos neste modelo apresentam-se com boa concordância com os obtidos na literatura. A diferença entre eles pode

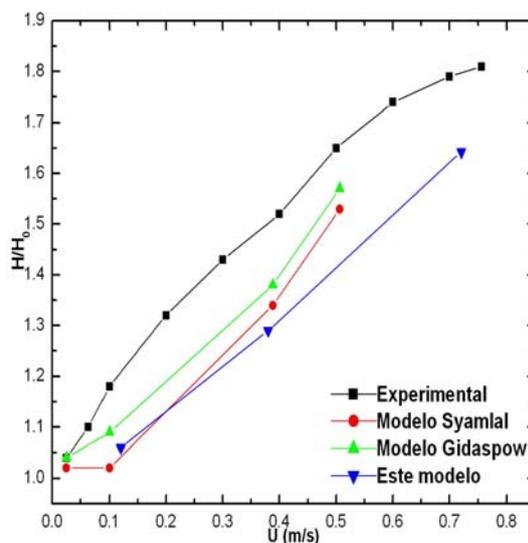
ser explicada pelas funções de coeficiente de arraste usadas nos modelos, as quais não cobrem todas as regiões de fluidização observadas no interior do reactor.



**Figura 1.** (a) Imagem 3D da fração volumétrica de uma coluna retangular utilizada em experimentos de fluidização;<sup>(3)</sup> (b) Imagem em 2D das linhas de corrente do escoamento das partículas.



**Figura 2.** Gráfico da queda de pressão ( $\Delta P$ ) no leito obtida por este modelo e por Taghipour *et al.*<sup>(3)</sup> usando diferentes funções de coeficiente de arraste.



**Figura 3.** Gráfico para a taxa de expansão do leito  $H/H_0$  mostradas por Taghipour *et al.*<sup>(3)</sup> e este modelo para velocidades do gás de ( $U= 0.12, 0.38, 0.72\text{m/s}$ ).

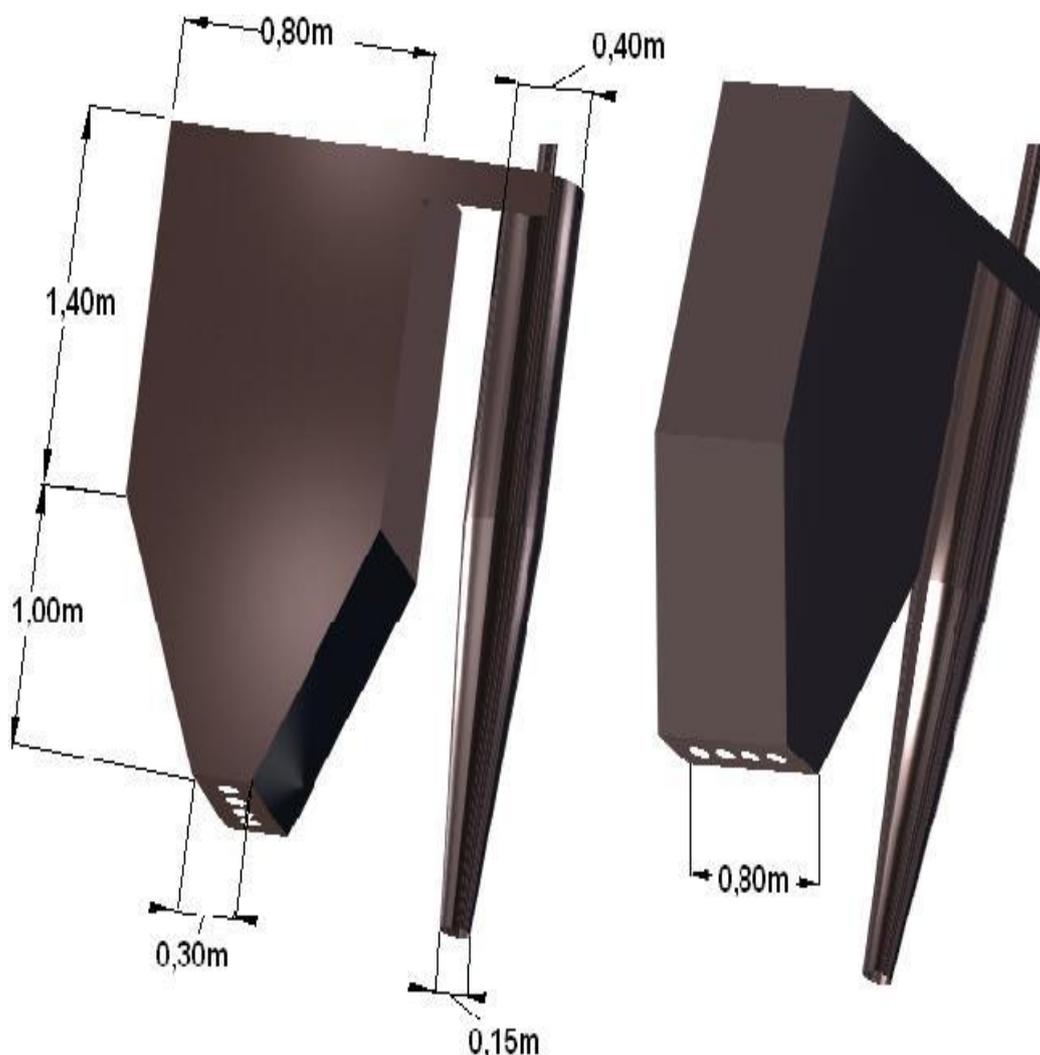
### 3.2 Reator de Leito Fluidizado

Os resultados apresentados nesta seção referem-se ao modelo de um reator de leito fluidizado em escala industrial. Este modelo de reator é utilizado para processos de combustão de carvão e Biomassas. Os parâmetros utilizados para a simulação desse reator podem ser vistos na Tabela 2.

**Tabela 2.** Parâmetros para simulação do reator de leito fluidizado.

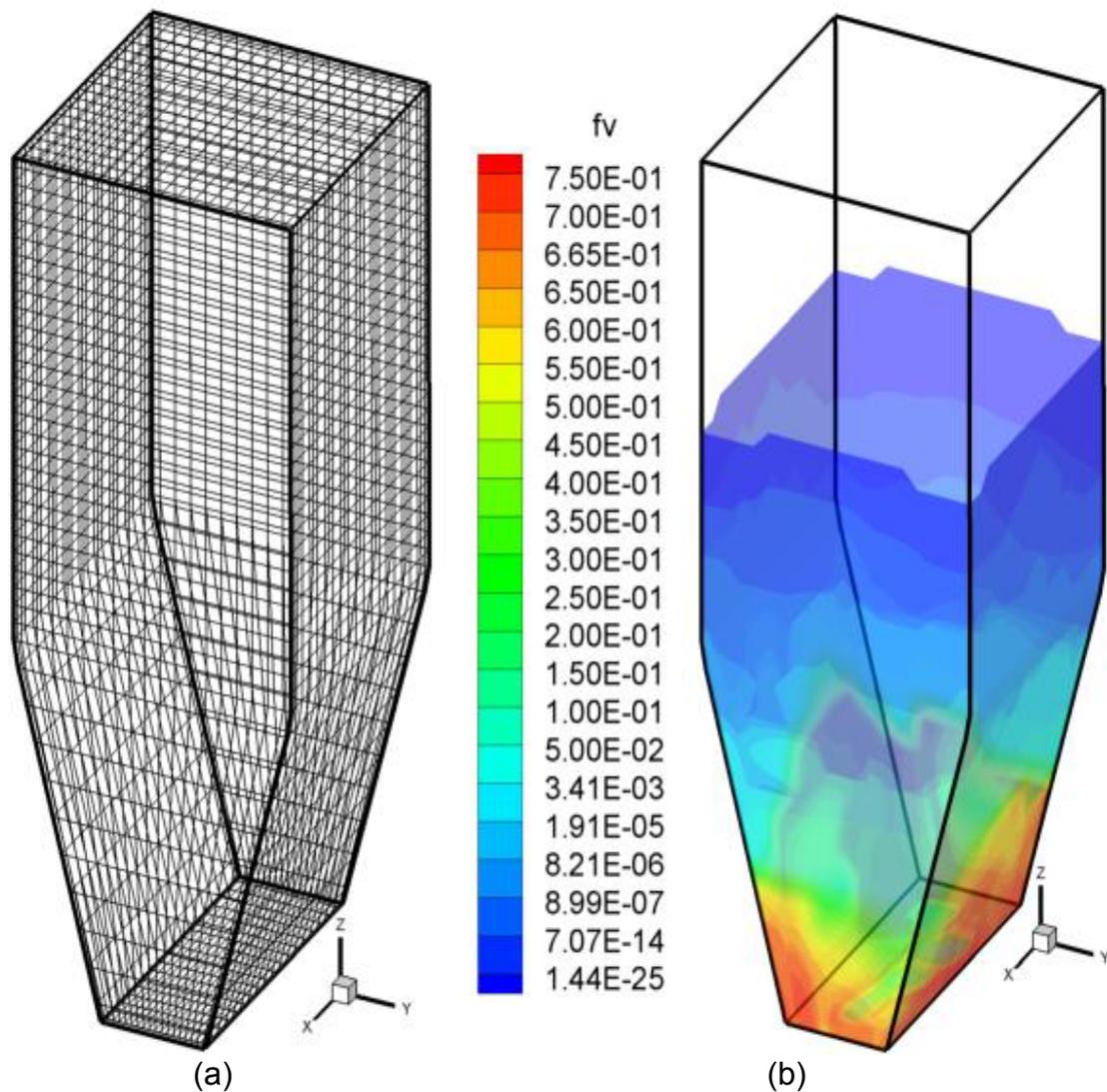
Descrição	Valor	Comentário
Densidade da partícula, $\rho_p$	2600 kg/m <sup>3</sup>	Areia
Densidade do Gás, $\rho_g$	1,225kg/m <sup>3</sup>	Ar
Diâmetro das partículas, $d_p$	2500 $\mu\text{m}$	Distribuição uniforme
Coefficiente de restituição, $e_{ss}$	0,90	Valor da literatura
Fração inicial no leito fixo, $\epsilon_{s0}$	0,60	Valor Fixo
Velocidade superficial do gás, $U$	0,7m/s	$\sim 6,5^* U_{mf}$
Pressão de entrada	1atm	Valor Fixo
Temperatura granular	100m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	Valor Fixo
Altura do leito de partículas	0,70m	Valor Fixo
Condições na entrada	Velocidade	Velocidade do gás
Condições na saída	Escoamento	Desenvolvido
"Time steps"	0,001s	Especificado
Critério de convergência	10 <sup>-6</sup>	Especificado

A Figura 4 mostra um desenho esquemático do reator e suas respectivas dimensões.



**Figura 4.** Geometria e dimensões do reator.

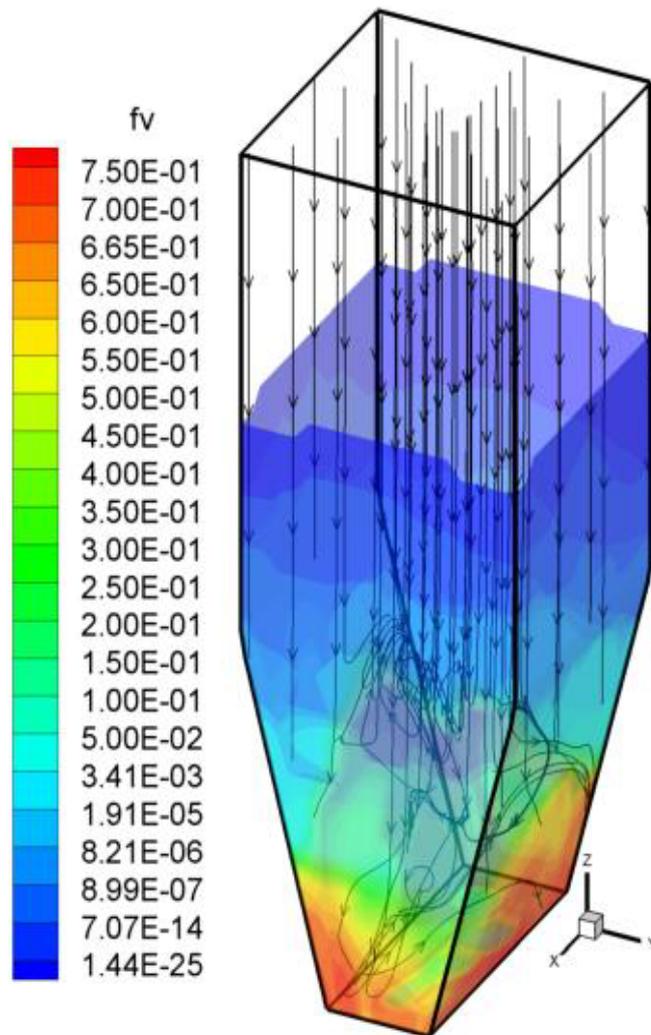
A Figura 5 (a) mostra a malha gerada na discretização das equações resolvidas pelo método de volumes finitos e, (b) os valores de contorno obtido para a fração volumétrica. As condições de contorno laterais do reator são condições de parede, porém as partículas têm uma velocidade mínima de deslizamento para que estas possam escoar no leito. As condições de entrada e saída são, respectivamente, velocidade do gás e de escoamento completamente desenvolvido. O gás, no entanto, entra no reator por quatro distribuidores no fundo fato este que foi considerado e utilizado nas simulações. O comportamento das partículas no interior do leito foi correspondente ao esperado, mas a formação de bolhas, que é uma característica da fluidização, só fica evidenciada no início do processo. Isto se deve basicamente à presença de quatro distribuidores no fundo do reator, o que faz com que após o deslocamento inicial do leito tenham-se quatro jatos de gás mantendo as partículas suspensas e recirculando continuamente no interior do reator. Na figura 5 (b) pode-se observar um acúmulo de partículas nas paredes do reator, este fato é explicado pelos distribuidores estarem localizado na região central. Portanto, as partículas são jogadas da região central para a periferia do reator onde a velocidade do gás é menor e, então, se aglomeram e começam a cair dando movimento ao leito.



**Figura 5.** (a) Malha gerada pela discretização das equações e (b) Imagem 3D da fração volumétrica dos sólidos no leito. ( $t=5s$ )

O movimento relativo das partículas pode ser visto na figura 6, onde as linhas de corrente do escoamento *stream traces* são mostradas caracterizando uma recirculação, ou seja, um movimento contínuo das mesmas no reator, que são arrastadas pela corrente de gás. Após serem arrastadas pelo gás as partículas atingem uma altura onde o arraste se torna menor que a força gravitacional, então elas começam a cair com velocidade terminal  $U_t$ .

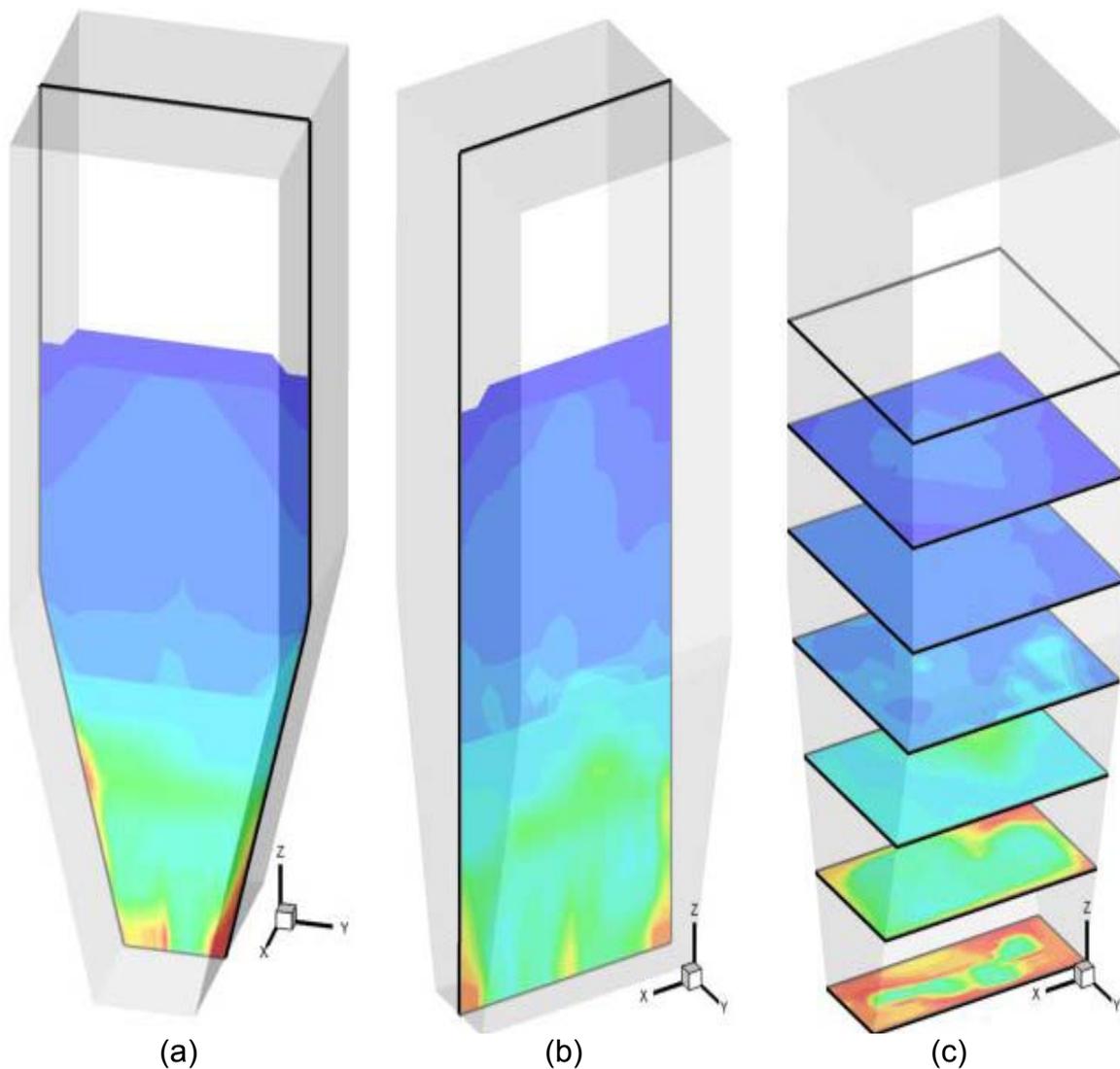
A Figura 7 mostra o contorno obtido para a fração volumétrica de sólidos no interior do reator. A Figura 6 (a) representa uma fatia *slice* em um ponto sobre um dos distribuidores e foi retirada em um plano X. A Figura 6 (b) é a representação do contorno da fração volumétrica sobre os pontos de distribuição do gás, retirada em uma fatia no plano Y. A Figura 6 (c) mostra a fração volumétrica em varias fatias no plano Z. Nas imagens mostradas na Figura 7 (a, b, c) fica evidente que as partículas estão sendo arrastadas pelo gás e atingem uma altura muito maior que a altura inicial de partículas no leito. Os principais parâmetros de avaliação de fluidização, que são queda de pressão  $\Delta P$  e taxa de expansão do leito  $H/H_0$  são, 0,081 atm (8,207kPa) e 2,61, respectivamente.



**Figura 6.** Linhas de corrente *stream traces* do movimento das partículas no reator. ( $t=5s$ )

## 4 CONCLUSÕES

Um código computacional baseado na equação geral do transporte, cuja discretização resulta em equações diferenciais parciais, que podem ser resolvidas usando método dos volumes finitos foi desenvolvido para simular um reator de leito fluidizado em escala industrial. O modelo foi primeiramente comparado com resultados obtidos na literatura e, este apresentou comportamento compatível ao fenômeno de fluidização. Os resultados da validação demonstraram condições para o uso da simulação em reator de escala industrial. Os resultados apresentados e discutidos, tanto para a validação quanto para o reator em escala industrial mostram o comportamento das partículas em muito boa concordância com os mostrados em processos de leito fluidizado. Os parâmetros operacionais, tais como  $\Delta P$  e a taxa de expansão do leito também se mostraram de acordo com os resultados experimentais obtidos da literatura usando funções de arraste diferentes daquelas usadas no desenvolvimento deste modelo. A taxa de expansão do leito neste modelo mostrou o comportamento quase linear. As linhas de contorno para a fração volumétrica apresentaram padrão similar, quando comparadas, a resultados da fluidodinâmica gás-sólido em reator de leito fluidizado apresentadas em trabalhos previamente consultados.



**Figura 7.** Fração volumétrica de sólidos no interior do reator; (a) plano X; (b) plano Y; (c) plano Z. (t=5s)

## 5 NOMENCLATURA

$U_{mf}$	Velocidade de mínima fluidização	$\Gamma_{\phi}$	Coefficiente de difusão
$U_t$	Velocidade terminal	$\Theta_s$	Temperatura granular
$U$	Velocidade do gás	$\bar{\tau}_s$	Tensor tensão
$S_{\phi}$	Termo fonte	$\gamma_{\Theta_s}$	Energia dissipada por colisão
$I$	Tensor tensão adimensional	$\Delta P$	Queda de pressão
$P_s$	Pressão do sólido	$H/H_0$	Taxa de expansão do leito
$ess$	Coeficiente de restituição	$\rho$	densidade

## Agradecimentos

Os Autores agradecem ao CNPq, CAPES por fomentarem a pesquisa. Ao CIENTEC-R. S. pelas informações técnicas e, especialmente ao professor Wolfgang

Kalkreuth do departamento de Geociências da UFRGS, Coordenador da “Rede cooperativa de pesquisa para incremento da utilização de carvão nacional na geração de energia elétrica no Brasil Combustão de carvão e Biomassa em pequenas centrais térmicas em leito fluidizado“ que suporta este projeto.

## REFERÊNCIAS

- 1 Bittanti, S. et al., 2000, “A model of a bubbling fluidized bed combustor oriented to char mass estimation”, IEEE Transactions on control systems technology, vol. 8, N° 2, pp. 247-256.
- 2 Zhou, H. et al., 2004, “DEM-LES of coal combustion in a bubbling fluidized bed part I: gas particle turbulent flow structure”, Chemical engineering science, N° 59, pp. 4193-4203.
- 3 Taghipour, F., et al., 2005, “Experimental and computational study of gas-solid fluidized bed hydrodynamics”, Chemical Engineering Science, vol. 60, pp. 6857-6867.
- 4 Gidaspow, D., 1994, “Multiphase flow and fluidization: Continuum and kinetic theory descriptions”, Academic press, San Diego.
- 5 Kunni, D., Levenspiel, O., 1991, “Fluidization engineering”, second edition Butterworth-Heinemann, London, pp. 70.