

## Simulação transiente de um reator de leito fluidizado em 3D

(3D transient simulation of a fluidized bed reactor)

Anderson Willian de Souza Baltazar

Doutorando (Engenharia Metalúrgica)  
Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica - EEIMVR/UFF  
E-mail: anderson@metal.eeimvr.uff.br

José Adilson de Castro

Prof. Ph.D., Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica - EEIMVR/UFF  
E-mail: adilson@metal.eeimvr.uff.br

Alexandre José da Silva

Prof. Dr.Ing., Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica - EEIMVR/UFF  
E-mail: adilson@metal.eeimvr.uff.br

### Resumo

Reatores de leito fluidizado atingiram o ápice de aplicação a partir dos anos 80 e 90. Desde então, esses equipamentos têm se tornado importantes na geração termelétrica, pois abrem as opções dos combustíveis utilizados, os quais podem apresentar qualidade inferior àqueles usados em processos industriais com alto grau de conversão. Essa técnica não está muito difundida no Brasil, onde as opções para o uso de tecnologias de geração elétrica estão em aberto. A geração térmica é uma opção que pode usar leito fluidizado para a combustão de materiais como carvão e biomassas. Os modelos matemáticos, por sua vez, têm se mostrado eficientes para investigar condições operacionais de processos industriais virtualmente. O modelo desenvolvido utiliza o conceito de multifases, multicomponente simulando o escoamento transiente em 3D. As equações de transporte de massa, momento e energia são resolvidas pelo método de volumes finitos. As fases são modeladas usando os princípios da mecânica do contínuo, onde uma coleção de partículas idênticas é considerada. Os resultados obtidos através da simulação de reator de leito fluidizado borbulhante se mostram de acordo com dados experimentais.

**Palavras-chave:** Escoamento multifásico, transiente, 3D, simulação computacional.

### Abstract

*Fluidized bed reactors reached became popular in the 80-90s. Since then, this equipment has become important for thermo electrical generation, because it permits fuel options for a high degree of conversion but with lower costs than those used in industrial processes. This technique does not play an important role in Brazil yet, where the use of optional electric generation technologies are now being considered. Thermal generation is one option in which that fluidized bed reactors can be used to burn materials like coal and biomasses. The mathematical models have been efficient in investigating the virtual conditions of the processes. In this work, a mathematical model aiming to simulate the fluidized bed reactor is proposed. The model uses the concept of a multiphase-multicomponent system to simulate the transient inner flowing conditions in 3D. The transport equations of mass, momentum and energy are solved by the finite volumes method. The phases are modeled using continuum mechanics principles, where a collection of identical particles is considered. The simulation results of the fluidized bed reactor showed good agreement with the experimental data.*

**Keywords:** Multiphase flow, transient, 3D, Computational simulation.

## 1. Introdução

O fenômeno de fluidização é conhecido desde 1920, no entanto a combustão em leito fluidizado só ganharia crédito a partir de 1970, embora esse tipo de reator fosse amplamente utilizado em vários processos nas indústrias químicas e de petróleo<sup>[1]</sup>. O leito fluidizado, porém, ganha 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, essa técnica ainda não está muito difundida. Contudo problemas na matriz energética têm aberto opções para o uso de novas tecnologias para geração elétrica. Entre essas 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 à instabilidade numérica das equações, que devem ser resolvidas para representar o processo<sup>[2]</sup>. Esse fato torna o modelamento do movimento gás-sólido no interior de reatores de leito fluidizado uma tarefa complexa, porque a interface é transiente e as interações são conhecidas numa região limitada<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. Em se tratando de escala industrial, o número de partículas necessárias para simular um processo é normalmente grande, fato este que tem limitado o uso dessa aproximação. Por outro lado, esforços têm sido concentrados para desenvolver modelos, utilizando mecânica do contínuo, capazes de reproduzirem o comportamento industrial com razoável esforço computacional. Isto se torna desejável por-

que os modelos matemáticos têm provado sua eficiência em simular condições operacionais e reproduzir virtualmente processos industriais. Nesse contexto, o objetivo desse trabalho é simular o fenômeno de fluidização considerando duas fases. O modelo utiliza o conceito de multifases, multicomponente, para simular o escoamento transiente em três dimensões de um reator de leito fluidizado. As equações de transporte de massa, momento e energia são resolvidas utilizando a técnica de volumes finitos para um sistema não ortogonal. 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 momento da fase sólida é modificada para contabilizar a transferência de momento devido às colisões partícula-partícula e é baseada no modelo da teoria cinética<sup>[4]</sup>. A temperatura granular,  $\Theta$ , é definida para representar a energia cinética específica da flutuação de velocidade, ou a energia de flutuação translacional resultantes da flutuação de velocidade da partícula<sup>[3]</sup>. No escoamento granular, flutuações de velocidade 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, além de fenômenos de 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 leitões fluidizados<sup>[5-6]</sup>. Esse 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 com geometria e dimensões de reator em escala semi-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 geral de transporte de massa, momento e energia (equação 1).

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

Onde, o índice  $i$  representa as fases gás ou sólidos. O coeficiente efetivo de difusão ( $\Gamma_{\phi}$ ) assume diferentes significados de acordo com o tipo de equação a ser resolvida. Assim, por exemplo, se a equação a ser resolvida é a equação de momento, então, o coeficiente de difusão é a viscosidade dinâmica da fase. O termo fonte ( $S_{\phi}$ ) representa a geração ou consumo de massa, momento e energia. Nos termos fontes são considerados os fenômenos de interação entre as fases, que podem ser resultantes, por exemplo, de interações mecânicas resultando no acoplamento entre as equações de massa, momento e energia. Os modelos de momento e energia são obtidos na literatura e foram detalhados em estudos de leito fluidizado<sup>[3]</sup>. A essa 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 momento<sup>[3]</sup>. A equação 2 é introduzida ao modelo, exatamente, para descrever a energia de flutuação das partículas sólidas<sup>[3]</sup>. A equação 2 é resolvida e usada para determinar uma das fontes de momento na equação 1 em adição ao termo de viscosidade aparente.

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

onde,  $(\Theta_s)$  é a temperatura granular,  $(\vec{I})$  é o tensor tensão adimensional,  $(\vec{\tau}_s)$  é o tensor tensão (equação 3),  $(p_s)$  é a pressão do sólido e  $(\gamma_{\Theta_s})$  é a dissipação de energia por colisão.

$$\tau_s = \varepsilon_s \mu_s (\nabla \vec{v}_s + \nabla \vec{v}_s^T) + \varepsilon_s \left( \lambda_s - \frac{2}{3} \mu_s \right) \nabla \cdot \vec{v}_s I \quad (3)$$

### 3. Resultados e discussão

O modelo foi validado com resultados obtidos da literatura mostrando excelente concordância como pode ser visto na Figura 1. Os resultados correspondem a parâmetros controlados durante a fluidização. A Figura 1 (a) mostra a comparação da queda de pressão,  $\Delta P$ , ao longo do tempo obtido nesse modelo e nos modelos apresentados<sup>[3]</sup>. Esse parâmetro é importante porque a fração volumétrica no leito pode ser estimada pelo  $\Delta P$ . 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. Nesse modelo, ela é calculada diretamente pela equação da continuidade e, nos outros modelos, é calculada por correlações empíricas baseadas na queda de pressão. Um outro fato a ser ressaltado é que, nos modelos citados, o critério de convergência é de  $10^{-3}$ , enquanto que, nesse modelo, o valor foi de  $10^{-6}$ , o que contribui para maior estabilidade dos resultados.

Na Figura 1 (b), pode ser vista a taxa de expansão do leito  $H/H_0$ . Os resultados obtidos, nesse modelo, apresentam-se com boa concordância com os obtidos na literatura. Os modelos extraídos da literatura são próprios para a fluidização, enquanto o modelo desse trabalho é adaptado para o processo. No entanto, os resultados entre os modelos mostraram muito boa aproximação entre eles, embora se afastem do comportamento experimental. A diferença entre eles se explica pelas funções do coeficiente de arraste usadas nos modelos, as quais não cobrem todas as regiões de fluidização no interior do reator. Os resultados apresentados a seguir dizem respeito à simulação de um reator de leito fluidizado em escala semi-industrial utilizado para a combustão de carvão e biomassa. Os parâmetros para a simulação podem ser vistos na Tabela 1.

A Figura 2 mostra a malha gerada para discretização das equações resolvidas pelo método de volumes finitos. 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. A entrada de gás no reator é feita por quatro distribuidores no fundo, fato este que foi considerado nas simulações. O comportamento das partículas no interior do leito mostra-se de acordo com modelos previamente consultados, porém a formação de bolhas, que é uma característica da fluidização, é mais evidente no início do processo. Isto se deve basicamente ao modo de entrada e distribuição do gás, 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. A Figura 3 mostra uma imagem 3D da fração volumétrica das partículas no reator. Pode-se observar um acúmulo de partículas nas paredes do reator. Esse fato é explicado em função de os distribuidores estarem locali-

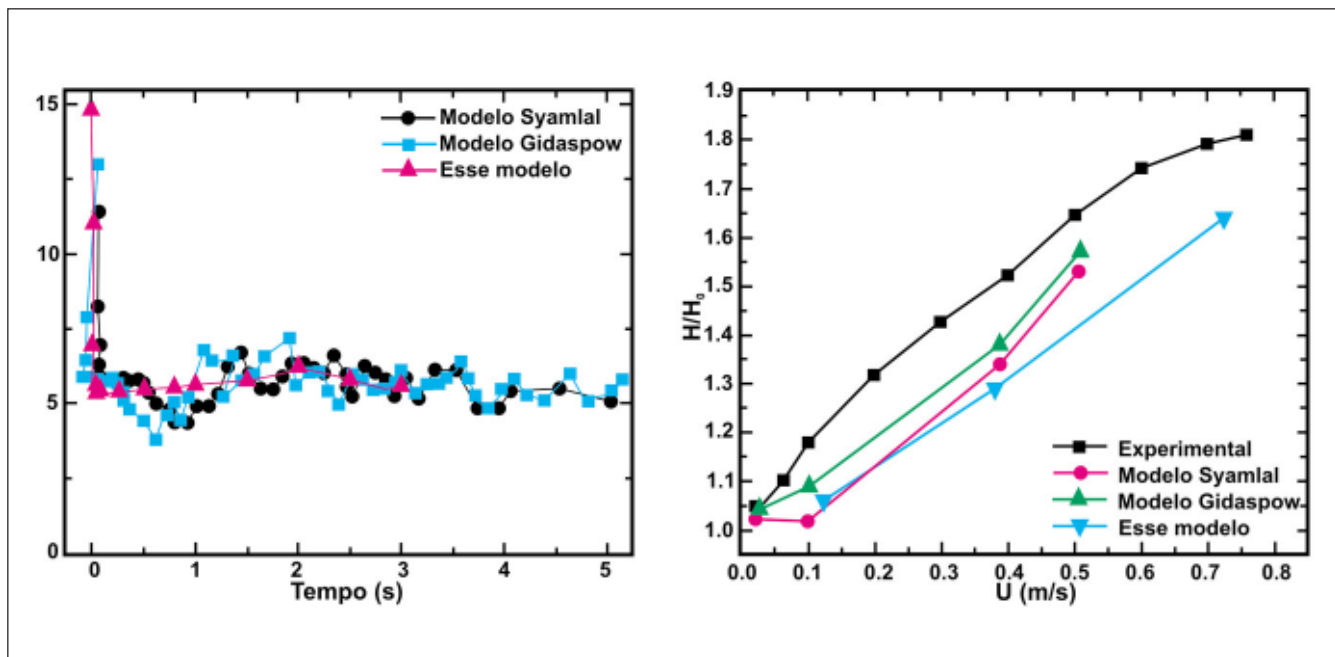


Figura 1 - Gráficos de  $\Delta P$  em (a) e de  $H/H_0$  em (b) obtidos por esse modelo comparados aos obtidos por<sup>[3]</sup>.

zados 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. Na Figura 3, pode ser observado também uma característica do funcionamento do leito fluidizado, que é a divisão em duas zonas distintas após o fenômeno estar desenvolvido. A primeira se localiza na região inferior do reator e é chamada de seção ou zona fluidizada, onde o fenômeno é caracterizado pela formação de bolhas que arrastam as partículas no interior do leito. A segunda, que é uma região imediatamente acima da primeira, é chamada de seção ou zona de desprendimento "disengaging section", que é formada pelas partículas que se desprendem da região fluidizada e ficam flutuando acima do leito.

A Figura 4 mostra a evolução do processo de fluidização com o tempo, o qual varia entre zero e 4,0 segundos. Na

Tabela 1 - Parâmetros para simulação do reator de leito fluidizado.

Descrição	Valor	Comentário
Densidade da partícula, $\rho_p$	2600kg/m <sup>3</sup>	Areia
Densidade do gás, $\rho_g$	1,225kg/m <sup>3</sup>	Ar
Diâmetro das partículas, $d_p$	2500 $\mu$ m	Uniforme
Temperatura inicial do gás	298 K	Constante
Coefficiente de restituição, $e_{ss}$	0,90	Literatura
Fração inicial no leito fixo, $\varepsilon_{s0}$	0,60	Valor fixo
Velocidade superficial do gás, $U$	0,7m/s	$\sim 6,5 * U_{mf}$
Pressão de entrada	1atm	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
Crítério de convergência	10 <sup>-6</sup>	Especificado

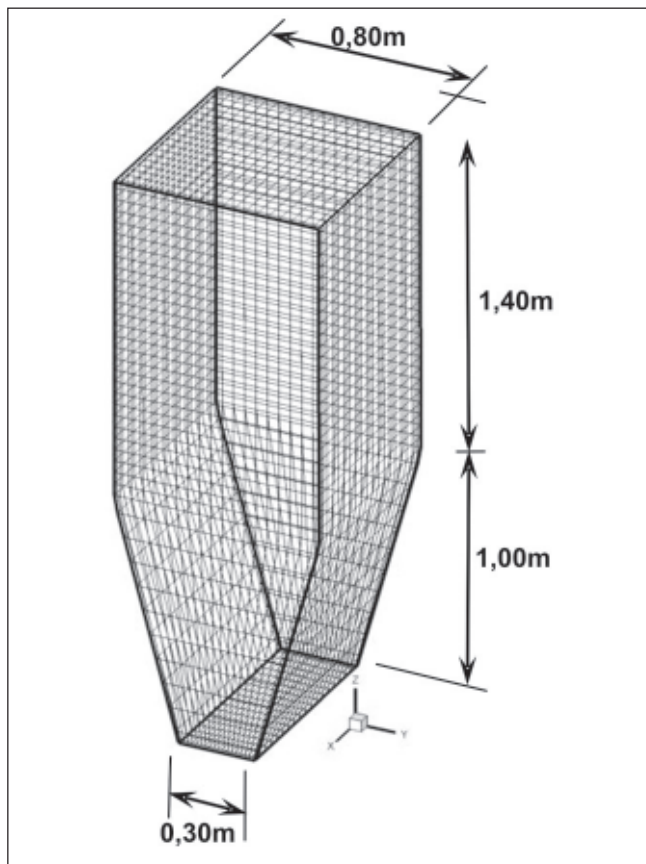


Figura 2 - Malha do reator, gerada para discretização das equações.

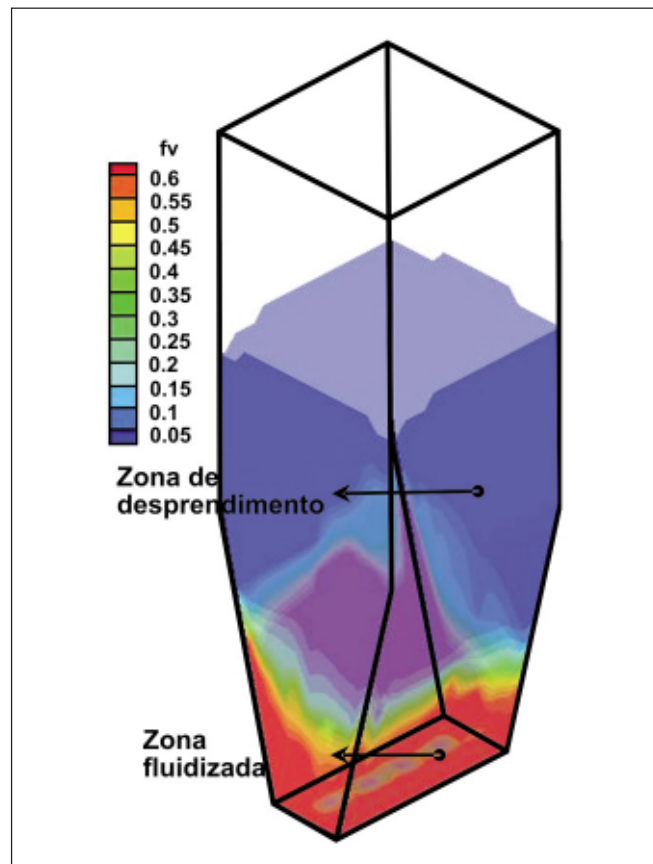


Figura 3 - Imagem 3D da fração volumétrica da fase sólida. (t=4,0s).

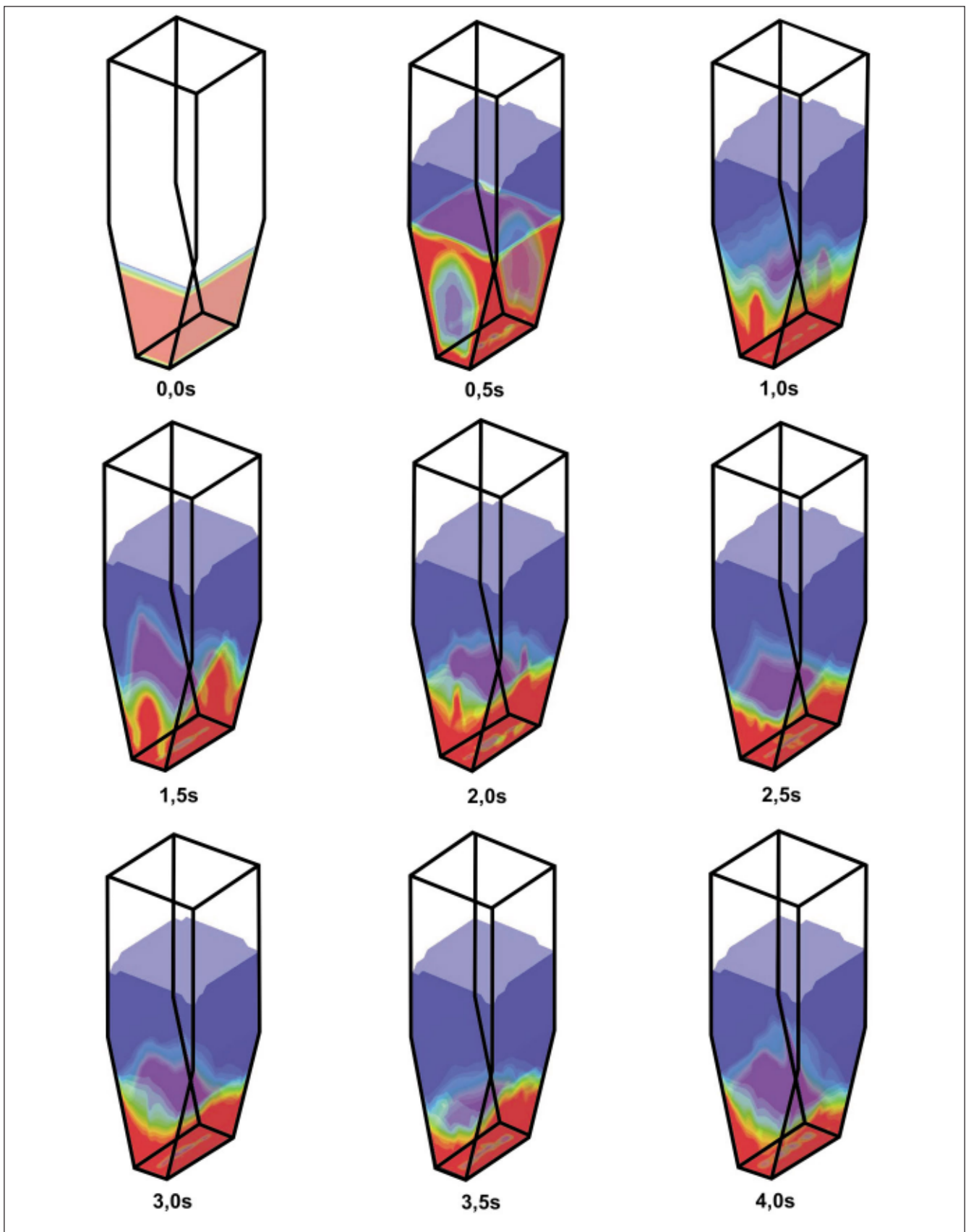


Figura 4 - Evolução transiente da fluidização. (t=0-4,0s).

evolução da fluidização, pode ser observada a formação de bolhas. No início, uma grande bolha é formada e o leito inicia sua expansão. Após isto, é observada uma queda de pressão do leito e um movimento caótico das partículas devido à formação de bolhas e aglomeração das partículas "clusters". Trabalhos anteriores relatam que as partículas na região inferior do reator começam a recircular quando a velocidade do gás é maior que a velocidade de mínima fluidização  $U_{mf}$ <sup>[7]</sup>. Então, 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  $U_t$ . Embora as bolhas tenham sua formação evidenciada, elas explodem por serem formadas muito próximas aos bicos injetores de gás. Então, a poucos centímetros de elevação, as bolhas se transformam em uma emulsão "slug". Essa característica concorda com resultados experimentais narrados na literatura<sup>[8]</sup>. A recirculação das partículas mostra que a fluidização foi alcançada, fato que contribui para aumentar o tempo de residência das partículas no reator para operações em processos contínuos.

#### 4. Conclusões

Os resultados apresentados anteriormente mostraram comportamento de acordo com resultados experimentais e calculados previamente pesquisados na literatura<sup>[2,7]</sup>. A evolução da fluidização

com o tempo pôde ser verificada. Os parâmetros avaliados mostram-se de acordo com o esperado, pois a queda de pressão  $\Delta P$  e a taxa de expansão do leito  $H/H_0$  são, respectivamente, 0,081 atm (8,207kPa) e 2,61. As linhas de contorno para a fração volumétrica da fase sólida apresentaram similaridade com resultados da fluidodinâmica para sistemas gás-sólido em reator de leito fluidizado.

#### 5. Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, CAPES. Ao CIENTEC-R.S. e 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" (Processo individual: 382957/2005-9 (NV)) que suporta este projeto.

#### 6. Referências bibliográficas

- [1] BITTANTI, S. et al. A model of a bubbling fluidized bed combustor oriented to char mass estimation. *IEEE Transactions on control systems technology*, v. 8, n. 2, p. 247-256, 2000.
- [2] ZHOU, H. et al. DEM-LES of coal combustion in a bubbling fluidized bed part I: gas particle turbulent flow structure. *Chemical engineering science*, n. 59, p. 4193-4203, 2004.
- [3] TAGHIPOUR, F. et al. Experimental and computational study of gas-solid fluidized bed hydrodynamics. *Chemical Engineering Science*, v. 60, p. 6857-6867, 2005.
- [4] GIDASPOW, D. Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions. Academic press, San Diego, 1994.
- [5] DING, J., GIDASPOW, D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *A.I.Ch.E. Journal*, v. 36, p. 523-538, 1990.
- [6] PAIN, C.C. et al. A study of bubbling and slugging fluidized beds using the two fluid granular temperature model. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 27, p. 527-551, 2001.
- [7] KAWAGUCHI, T., et al. Numerical simulation of two dimensional fluidized beds using the discrete element method (comparison between the two-and three-dimensional models). *Powder Technology*, v. 96, p. 129-138, 1998.
- [8] HOOMANS, B.P.B. et al. Discrete particle simulation of bubble and slug formation in a two dimensional gas-fluidized bed: A hard sphere approach. *Chemical Engineering Science*, v. 51, n. 1, p. 99-118, 1996.

Artigo recebido em 03/10/2007 e aprovado em 19/11/2008.

**A REM tem novo endereço:  
Rua Carlos Walter Marinho Campos, 57  
Bairro: Vila Itacolomy  
35400-000 - Ouro Preto - MG**