

MODELAGEM MATEMÁTICA DA FLUIDODINÂMICA DE REATORES DE LEITO FLUIDIZADO

Roberto José de Carvalho
Carlos Augusto Ribeiro Queiroz
Francisco José Moura

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
Departamento de Ciência dos Materiais e Metalurgia
Rua Marquês de São Vicente, 225 — Gávea
22453-900 — Rio de Janeiro, Rio de Janeiro

RESUMO

A fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado operando no regime borbulhante é descrita por meio de um modelo matemático. O modelo baseia-se na divisão do leito numa série de compartimentos perfeitamente misturados. O movimento do gás e dos sólidos no leito foi obtido a partir de estudos da dinâmica das bolhas. A fluidodinâmica dos reatores foi modelada em função das variáveis do processo. O modelo foi aplicado à ustulação oxidante de um concentrado de sulfeto de zinco num reator de leito fluidizado de laboratório operando com os sólidos em batelada. Os resultados mais relevantes de duas simulações fluidodinâmicas do reator, variando a velocidade do gás e usando condições típicas de futuros experimentos para determinar a cinética da reação, são apresentados e discutidos.

ABSTRACT

The fluid dynamics of fluidized bed reactors operating in the bubbling regime is described by a mathematical model. The model is based on the compartmentalization of the bed into a network of perfectly mixed reactors. The gas and solids movement in the bed was derived from studies of bubble dynamics. The fluid dynamics of the reactors was modeled as a function of the process variables. The model was applied to the oxidizing roasting of a zinc sulfide concentrate in a batch-fluidized bed with respect to the solids. The most relevant results from two fluid dynamic simulations of the reactor, varying the superficial gas velocity and using typical experimental conditions of future runs to determine the reaction kinetics, are presented and discussed.

Palavras-chave: fluidodinâmica, fluidização, modelagem e ustulação.

INTRODUÇÃO

Reatores de leito fluidizado têm sido utilizados em processos pirometalúrgicos industriais envolvendo reações gás-sólido, como a ustulação de sulfetos e a cloração redutora de concentrados de titânio. Nestes reatores, a alta mistura dos sólidos, causada principalmente pelo borbulhamento do leito, dá origem a elevadas taxas de transferência de calor e massa, favorecendo as reações químicas heterogêneas que neles ocorrem. As bolhas levam ao movimento contínuo dos sólidos e minimizam a formação de zonas estagnadas no leito.

Contudo, apesar das vantagens dos leitos fluidizados como reatores para sistemas gás-sólido, deve-se salientar que o projeto e o aumento de escala destes reatores são tarefas difíceis [1,2]. Tal fato é devido à complexa fluidodinâmica que rege o movimento do gás e dos sólidos no leito. Além disso, como frequentemente o gás escoia através do leito na forma de bolhas, irá ocorrer um desvio desvantajoso do reagente gasoso em relação aos sólidos levando a um menor contato gás-sólido. É interessante notar que as bolhas causam efeitos tanto favoráveis como adversos no leito.

Em decorrência do importante papel exercido pela fluidodinâmica no desempenho dos reatores de leito fluidizado, um grande número de investigações experimentais tem sido conduzidas nas últimas décadas e modelos matemáticos tem sido formulados para tentar descrever a fluidodinâmica da fluidização. Neste sentido, uma modelagem matemática da fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado operando no regime borbulhante é apresentada no presente trabalho. O modelo baseia-se na divisão do leito num determinado número de compartimentos perfeitamente misturados. O movimento do gás e dos sólidos no leito é representado por mecanismos derivados do estudo da dinâmica das bolhas. A fluidodinâmica do reator é modelada em função das variáveis do processo. O modelo foi aplicado à ustulação oxidante de um concentrado de sulfeto de zinco num reator de leito fluidizado de laboratório que opera com os sólidos em regime de batelada. Alguns resultados que ilustram a modelagem são apresentados e discutidos. O objetivo do trabalho é estudar de forma mais detalhada a fluidodinâmica dos leitos fluidizados, a qual pode influenciar fortemente a cinética de reações gás-sólido nestes reatores.

MODELAGEM FLUIDODINÂMICA DE LEITOS FLUIDIZADOS

Um leito fluidizado pode operar nos modos particulado ou uniforme (ausência de bolhas), agregativo ou borbulhante ou, em velocidades muito altas, em fase diluída próxima a um leito de arraste. A maioria dos leitos fluidizados gás-sólido de interesse prático opera no regime borbulhante. Neste regime, coexistem no leito uma fase “diluída” (bolhas) e uma fase “densa” (emulsão) em relação à quantidade de sólidos presente. Na emulsão o gás está em contato estreito com as partículas do leito.

Vários modelos matemáticos tem sido usados para prever o desempenho de reatores de leito fluidizado operando no regime borbulhante [3-10]. Contudo, apesar de alguns destes modelos serem satisfatórios em determinados casos, nenhum deles é capaz de descrever de forma generalizada e precisa as reações gás-sólido nos leitos fluidizados. Isto se deve principalmente aos fenômenos de mistura dos sólidos, variações na granulometria, atrito, aglomeração e arraste das partículas [1], os quais certamente afetam a cinética das reações gás-sólido no leito.

O movimento e a mistura dos sólidos no leito é função da dinâmica das bolhas, conforme observado por diferentes autores [11,12]. A partir destes estudos pode-se concluir que os sólidos são transportados nas esteiras das bolhas ascendentes, ocorrendo a transferência de sólidos entre as esteiras e a fase densa vizinha. Em decorrência do movimento das bolhas os sólidos na emulsão adquirem um movimento descendente. A mistura dos sólidos pode também ser causada pela coalescência, divisão e erupção das bolhas na superfície do leito.

Rhee e Sohn [1] formularam um modelo matemático para o processo de cloração seletiva do ferro do minério de ilmenita por misturas CO-Cl_2 num leito fluidizado com os sólidos em batelada. O modelo de Rhee e Sohn é uma modificação do “modelo da assembléia de bolhas” [7], combinado com a descrição do movimento do gás e dos sólidos, mistura dos sólidos e as reações químicas no leito e se baseia na divisão do leito fluidizado numa série de reatores perfeitamente misturados. O modelo descreveu adequadamente os resultados experimentais destes autores.

MODELO MATEMÁTICO

Um modelo para simular a fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado incorporando o movimento do gás e dos sólidos, a mistura dos sólidos, o crescimento das bolhas ao longo da altura do leito e a transferência de massa do gás e dos sólidos entre as bolhas e a emulsão foi desenvolvido. O modelo foi implementado em microcomputador através de um código em Turbo Pascal.

As principais suposições do modelo são:

- i. O leito é isotérmico devido aos altos coeficientes de transferência de calor;
- ii. O movimento dos sólidos é causado pela sua circulação devido ao arraste nas esteiras das bolhas ascendentes e ao movimento descendente na emulsão;
- iii. Gás e sólidos são transferidos entre as bolhas e a emulsão;
- iv. A porosidade da emulsão é igual a porosidade do leito em condição de mínima fluidização;
- v. O leito fluidizado é dividido em uma série de compartimentos ao longo de sua altura. O gás e os sólidos são perfeitamente misturados em cada compartimento.

A Figura 1 ilustra o movimento do gás e dos sólidos no leito fluidizado e o esquema de fluxos e transferências do gás e dos sólidos entre as bolhas e a emulsão.

Os parâmetros fluidodinâmicos e as taxas de transferência de massa foram calculados a partir de equações e procedimentos extraídos da literatura [1,13,14] e apresentados abaixo.

- a. Velocidade e vazão mínima de fluidização (u_{mf} e V_{mf}).

$$Re_{mf} = \left(33,7^2 + 0,0408G_u \right)^{1/2} - 33,7 \quad (1)$$

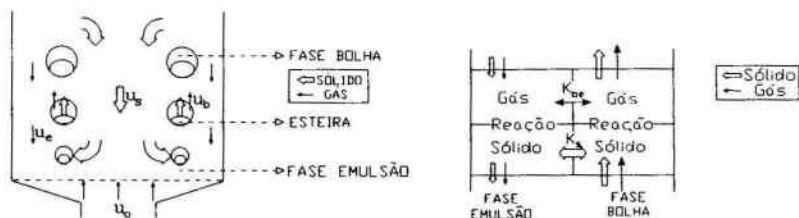


Figura 1 - Movimento do gás e dos sólidos no leito e suas transferências entre as bolhas e a emulsão.

sendo

$$G_s = \frac{d_p^3 \rho_s (\rho_s - \rho_g) g}{\mu_g} \quad (2)$$

e

$$Re_{mf} = \frac{u_{mf} d_p \rho_g}{\mu_g} \quad (3)$$

G_a = número de Galileo (-)

d_p = diâmetro médio das partículas (m)

ρ_s = massa específica dos sólidos (kg/m^3)

g = aceleração da gravidade (m/s^2)

Re_{mf} = número de Reynolds em condição de mínima fluidização (-)

A massa específica do gás (ρ_g) foi calculada supondo-o ideal:

$$\rho_g = \sum_{i=1}^n X_i \rho_i \quad (4)$$

X_i = fração molar do gás i (-)

ρ_i = massa específica do gás i (kg/m^3)

e

$$\rho_i = \frac{PM_i}{RT} \quad (5)$$

P = pressão total (Pa)

R = constante dos gases ($\text{Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol} \cdot \text{K}$)

T = temperatura (K)

A viscosidade do gás (μ_g) foi calculada pela equação:

$$\mu_g = \frac{\sum_{i=1}^n X_i \mu_i}{\sum_{j=1}^n X_j \Phi_{ij}} \quad (6)$$

onde
$$\mu_i = 2,6693 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma_i^2 \Omega} \quad (7)$$

e
$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (8)$$

Φ_{ij} = fator de interação entre os gases i e j

$\mu_{i(j)}$ = viscosidade do gás i (j) (Pa.s)

$M_{i(j)}$ = massa molecular do gás i (j) (kg ou g/mol)

σ_i = diâmetro de colisão do gás i (Å)

Ω = integral de colisão (-)

$$V_{mf} = \frac{\pi D^2 u_{mf}}{4} \quad (9)$$

D = diâmetro do reator (m)

b. Velocidade e vazão operacional do gás (u e V).

$$u = c u_{mf} \quad (10)$$

$$V = \frac{\pi D^2 u}{4} \quad (11)$$

c = fator multiplicativo (-)

c. Diâmetro inicial e máximo das bolhas (d_{bo} e d_{bm}).

$$d_{b_o} = 0,376(u - u_{mf})^2 \quad (12)$$

$$d_{b_m} = 1,635 \left[\frac{\pi D^2 (u - u_{mf})}{4} \right]^{0,4} \quad (13)$$

d. Porosidade e altura do leito em condição de mínima fluidização (ϵ_{mf} e H_{mf}).

$$\epsilon_{mf} = (14\phi_s)^{-1/3} \quad (14)$$

ϕ_s = fator de forma dos sólidos (-)

$$H_{mf} = \frac{m_s}{\rho_s(1 - \epsilon_{mf}) \frac{\pi D^2}{4}} \quad (15)$$

m_s = massa dos sólidos (kg)

e. Altura do leito fluidizado (H).

O seguinte procedimento iterativo, descrito por Grace [13], foi usado:

i. Supor um valor para a fração volumétrica média das bolhas no leito ($\bar{\delta}$);

ii. Calcular $H = \frac{H_{mf}}{1 - \bar{\delta}}$;

iii. Calcular a velocidade das bolhas (u_b): $u_b(H/2) = u - u_{mf} + 2,226d_b^{1/2}(H/2)$;

sendo o diâmetro das bolhas (d_b) calculado pela equação:

$$d_b(H/2) = d_{b_m} - (d_{b_m} - d_{b_o}) \exp \left[-\frac{0,3(H/2)}{D} \right];$$

iv. Verificar se $\bar{\delta} = \frac{u - u_{mf}}{u_b(H/2)}$;

v. Se a igualdade do item iv não for aproximadamente satisfeita, admitir um novo valor para $\bar{\delta}$ e repetir o procedimento iterativo a partir do item ii até que a igualdade seja satisfeita dentro de uma faixa de erro estabelecida, quando então $\bar{\delta}$ e H são obtidos.

f. Altura dos compartimentos e diâmetro das bolhas em cada compartimento (Δh e d_b).

Adotou-se o seguinte procedimento, de acordo com Mori e Wen [15]:

i. Primeiro compartimento: $\Delta h_1 = d_{b_1} = d_{b_o}$ (16)

ii. Segundo até (n-1)-ésimo compartimentos:

Como $d_b(h_i) = d_{b_m} - (d_{b_m} - d_{b_o}) \exp\left(-0,3 \frac{h_i}{D}\right)$, d_b não é diretamente proporcional a h.

Assim, a altura destes compartimentos, Δh_i , é determinada expandindo-se d_b numa série de Taylor em torno de $h_i(d_{b_i}^*)$:

$$\Delta h_i = \frac{d_{b_i}^*}{1 + 0,15 \left(\frac{d_{b_i}^* - d_{b_m}}{4} \right)} \quad (17)$$

$d_{b_i}^*$ é o diâmetro das bolhas calculado na altura da fronteira entre os compartimentos (i-1) e i, (h_{i-1}), ou seja:

$$h_i = \sum_{j=1}^{i-1} \Delta h_j \quad (18)$$

d_b é calculado na metade do i-ésimo compartimento, isto é, na altura:

$$h_i = h_i + \frac{\Delta h_i}{2} = \sum_{j=1}^{i-1} \Delta h_j + \Delta h_i \quad (19)$$

$$d_{b_i} = d_{b_m} - (d_{b_m} - d_{b_o}) \exp\left(\frac{-0,3h_i}{D}\right) = \Delta h_i \quad (20)$$

iii. n-ésimo compartimento

$$\Delta h_n = H - h_n \quad (21)$$

sendo o número de compartimentos (n) determinado pela condição:

$$h_i + \Delta h_i \geq H \quad (22)$$

Nesta posição, $n = i$

$$d_{b_n} = \Delta h_n \quad (23)$$

g. Velocidade do gás e dos sólidos nas bolhas em cada compartimento (u_b).

$$u_{b_i} = u - u_{mf} + 2,226 d_{b_i}^{1/2} \quad (24)$$

h. Fração volumétrica das bolhas em cada compartimento (δ).

$$\delta_i = \frac{u - u_{mf}}{u_{b_i}} \quad (25)$$

i. Velocidade do gás na emulsão em cada compartimento (u_e).

$$u_{e_i} = \frac{u_{mf}}{\varepsilon_{mf}} - \alpha \left[\frac{u}{1 - \delta_i - \alpha \delta_i} - u_{mf} \right] \quad (26)$$

α = razão volumétrica esteira /bolha (-)

j. Velocidade dos sólidos na emulsão em cada compartimento (u_s).

$$u_{s_i} = \frac{\alpha \delta_i u_{b_i}}{1 - \delta_i - \alpha \delta_i} \quad (27)$$

l. Coeficientes de transferência de massa em cada compartimento (baseados no volume das bolhas).

l.1. Bolha-nuvem (K_{bn}).

$$K_{bn_i} = 4,5 \frac{u_{mf}}{d_{b_i}} + 5,85 \frac{D^{1/2} g^{1/4}}{d_{b_i}^{1,25}} \quad (28)$$

l.2. Nuvem-emulsão (K_{ne}).

$$K_{ne_i} = 6,78 \left(\frac{\epsilon_{mf} D u_{b_i}}{d_{b_i}^3} \right)^{1/2} \quad (29)$$

l.3. Bolha-emulsão (K_{be}).

$$K_{be_i} = \left(\frac{1}{K_{bn_i}} + \frac{1}{K_{ne_i}} \right)^{-1} \quad (30)$$

l.4. Sólidos (K_s).

$$K_{s_i} = \frac{3(1 - \epsilon_{mf})}{(1 - \delta_i) \epsilon_{mf}} \frac{u_{mf}}{d_{b_i}} (1 + \alpha) \delta_i \quad (31)$$

m. Frações volumétricas do gás e dos sólidos nas bolhas e na emulsão em cada compartimento ($f_{i,j}$).

$$f_{g,b_i} = \delta_i(1 + \alpha \varepsilon_{mf}) \quad (32)$$

$$f_{s,b_i} = \alpha \delta_i(1 - \varepsilon_{mf}) \quad (33)$$

$$f_{g,e_i} = (1 - \delta_i - \alpha \delta_i) \varepsilon_{mf} \quad (34)$$

$$f_{s,e_i} = (1 - \delta_i - \alpha \delta_i)(1 - \varepsilon_{mf}) \quad (35)$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O modelo foi aplicado à ustulação oxidante de um concentrado de sulfeto de zinco fluidizado com ar num reator de laboratório operando com os sólidos em batelada. O reator, de aço inoxidável e usando como distribuidor um disco poroso de alumina, foi construído no DCMM-PUC - Rio.

De modo a ilustrar a aplicação do modelo, duas simulações da fluidodinâmica do reator são apresentadas abaixo, variando-se somente a velocidade operacional do gás. As seguintes condições, típicas de futuros experimentos para se investigar a cinética da ustulação oxidante do concentrado de zinco no reator, foram usadas nestas simulações:

$$T = 900^\circ\text{C}$$

$$P = 1 \text{ atm}$$

$$d_p = 0,0005\text{m}$$

$$\phi_s = 1$$

$$m_u = 0,1\text{kg}$$

$$\rho_s = 4100 \text{ kg/m}^3$$

$$D = 0,0325\text{m}$$

$$\alpha = 0,25$$

$$u = 1,5 \text{ e } 2 u_{mf}$$

Os parâmetros fluidodinâmicos que mais influenciam a velocidade da reação no leito fluidizado são o diâmetro das bolhas, as velocidades e os coeficientes de transferência de massa do gás e dos sólidos entre as bolhas e a emulsão. As variações destes parâmetros com a altura no leito, são mostradas nas Figuras 2 a 4. Conforme indicado na Figura 2, a menor velocidade do gás origina menores bolhas no leito. Um leito operando com alta velocidade do gás tende a entrar em pistonamento, ou seja, o diâmetro das bolhas torna-se próximo ou igual ao diâmetro interno do reator a partir de uma determinada altura no leito, principalmente quando este é profundo. Neste caso, o desempenho do reator será prejudicado pelo decréscimo do contato entre o reagente gasoso e os sólidos. A tendência ao pistonamento pode ser verificada na Figura 2 onde observa-se que para $u = 2 u_{mf}$, o diâmetro das bolhas no topo do leito é aproximadamente igual a 0,025m enquanto que o diâmetro do reator é 0,0325. Para $u = 1,5 u_{mf}$, o diâmetro das bolhas no topo do leito é da ordem de 0,015m.

Os coeficientes de transferência de massa do gás e dos sólidos entre as bolhas e a emulsão (K_{be} e K_s) decrescem acentuadamente com a altura no leito para a menor velocidade do gás e apresentam um comportamento mais uniforme quando a velocidade do gás aumenta, de acordo com a Figura 3. A simulação também mostra que coeficientes de transferência de massa elevados são obtidos nas regiões do leito próximas ao distribuidor, para a menor velocidade do gás. A medida em que a altura no leito aumenta, a influência da velocidade do gás torna-se menos significativa especialmente para o transporte de massa nos sólidos.

As variações das velocidades do gás e dos sólidos nas bolhas (u_b) e na emulsão (u_e e u_s) com a altura no leito, para as duas velocidades do gás, encontram-se na Figura 4. Nota-se nesta figura que com o aumento na altura, a velocidade do gás e dos sólidos nas bolhas aumenta consideravelmente. Por outro lado, a velocidade do gás e a dos sólidos na emulsão sofrem respectivamente um ligeiro aumento e um decréscimo nas regiões inferiores do leito, permanecendo praticamente constantes a partir de uma certa altura.

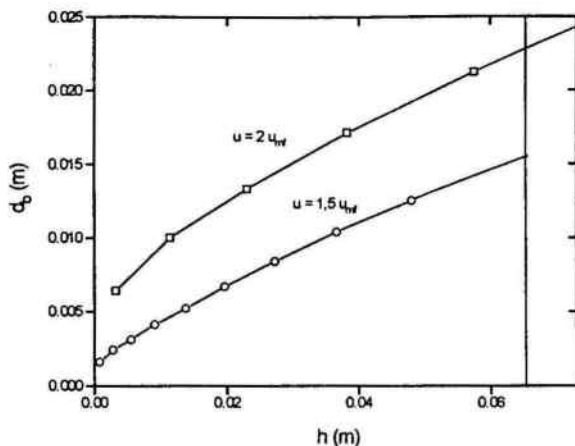


Figura 2 - Variação do diâmetro das bolhas (d_b) com a altura no leito (h).

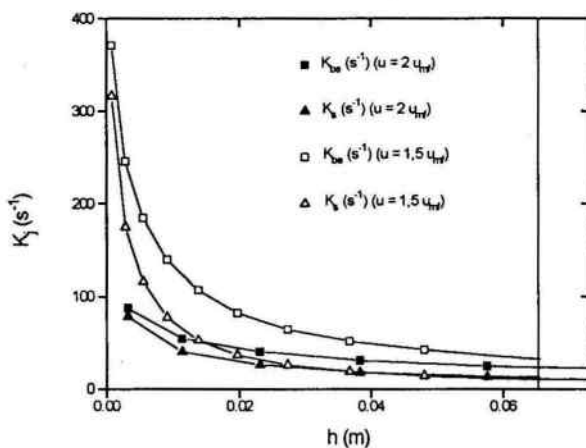


Figura 3 - Variação dos coeficientes de transferência de massa do gás e dos sólidos entre as bolhas e a emulsão (K_{bg} e K_s) com a altura no leito (h).

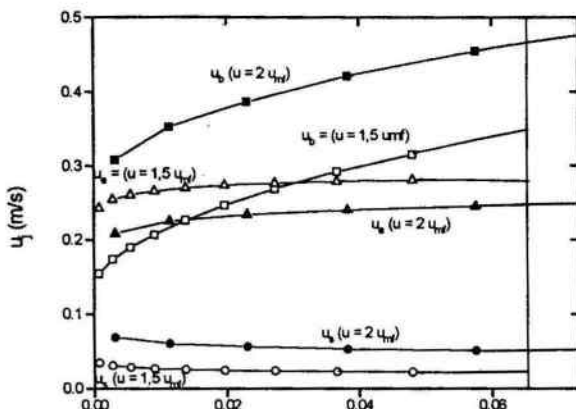


Figura 4 - Variação das velocidades do gás e dos sólidos nas bolhas (u_b) e na emulsão (u_e e u_s) com a altura no leito (h).

CONCLUSÃO

Um modelo matemático para descrever a fluidodinâmica de reatores de leito fluidizado operando no regime borbulhante foi apresentado. O modelo foi aplicado à ustulação oxidante de um concentrado de sulfeto de zinco num pequeno reator de leito fluidizado. Embora não existam resultados experimentais comparativos, simulações usando velocidades de gás iguais a 1,5 e 2 vezes a velocidade mínima de fluidização e condições típicas dos testes para determinar a cinética da reação, permitiram uma avaliação detalhada da fluidodinâmica do reator. Com a incorporação da equação da velocidade de reação ao modelo fluidodinâmico, o modelo completo do reator será formulado.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Rhee, K.I. e Sohn, H.Y.: The selective chlorination of iron from ilmenite ore by CO-Cl₂ mixtures : Part II. mathematical modeling of the fluidized-bed process - Metall. Trans. B, Vol. 21B, 331-340, 1990.
- [2] Grace, J.R.: An evaluation of models for fluidized bed reactors - AIChE Symp. Ser., Vol. 67, No. 116, 159-167, 1971.
- [3] Orcutt, J.C., Davidson, J.F. e Pigford, R.L.: Reaction time distributions in fluidized catalytic reactors - Chem. Eng. Prog. Symp. Ser. Vol. 58, No. 38, 1-15, 1962.
- [4] Davidson, J.F. e Harrison, D.: Fluidized Bed Particles, Cambridge University Press, Cambridge, 302-351, 1963.
- [5] Partridge, B.A. e Rowe, P.N.: Chemical reaction in a bubbling gas fluidized bed - Trans. Inst. Chem. Eng., Vol. 44, 335-348, 1966.
- [6] Kunii, D. e Levenspiel, O.: Fluidization Engineering, John Wiley & Sons, New York, 1969.
- [7] Kato, K. e Wen, C.Y.: Bubble assemblage model for fluidized bed catalytic reactors - Chem. Eng. Sci., Vol. 24, 1351-1369, 1969.
- [8] Chiba, T. e Kobayashi, H.: Proc. Int. Conf. on Fluidization and its Applications, 468-480, 1973.
- [9] Van Swaaij, W.P.M. e Zuiderweg, F.J.: Proc. 5th Europ. Symp. on Chem. React. Engng. Vol. B9, 25-36, Elsevier Publ. Co., Amsterdam, 1972.
- [10] Werther, J.: Fluidization Technology, ed. D.L. Keairns, Hemisphere Publ. Co., Vol. 1, 215, Washington, 1976.
- [11] Rowe, P.N. e Partridge, B.A.: An X-ray study of bubbles in fluidized beds - Trans. Inst. Chem. Eng., Vol. 43, 157-175, 1965.
- [12] Yoshida, K. e Kunii, D.: Stimulus and response of gas concentration in bubbling fluidized beds - J. Chem. Eng. Jpn., Vol. 1, No. 1, 11-16, 1968.
- [13] Grace, J.R.: Fluidized-Bed Hydrodynamics, Cap. 8 em Handbook of Multiphase-Systems, ed. G. Hetsroni, McGraw Hill, New York, 1982.
- [14] Gaskell, D.: An Introduction to Transport Phenomena in Materials Engineering, Macmillan, New York, 1992.
- [15] Mori, S. e Wen, C.Y.: Fluidization Technology, ed. D.L. Keairns, Hemisphere Publ. Co., Vol. 1, 179-203, Washington, 1976.