

BREVE INTRODUÇÃO À MODELAGEM FUNDAMENTAL DE PROCESSOS DE FLUIDIZAÇÃO GÁS-SÓLIDOS

Luben Cabezas Gómez

Fernando Eduardo Milioli

Núcleo de Engenharia Térmica e Fluidos, Escola de Engenharia de São Carlos, USP. Av. Dr. Carlos Botelho, N° 1465, São Carlos, SP, Brasil. CEP 13560-250. E-mail: lubencg@sc.usp.br

Resumo

Apresenta-se uma descrição geral da modelagem matemática de escoamentos bifásicos gás-sólidos aplicada a processos de fluidização, particularmente a leitos circulantes. São descritas as linhas gerais de modelagem matemática fundamental em fluidização. Finalmente são apresentados resultados de simulação numérica de leitos circulantes obtidos a partir de modelagem Euleriana usando o modelo tradicional das duas fases separadas.

Palavras-chaves: modelagem fundamental, fluidização, escoamentos gás-sólidos.

1. INTRODUÇÃO

A fluidização gás-sólidos tem variadas aplicações industriais entre as quais incluem-se as indústrias do petróleo, química, metalúrgica e de geração de energia. Reatores de leito fluidizado são amplamente utilizados na combustão de carvão e na queima parcial de combustível renovável (gaseificação da biomassa) para geração termoelétrica de energia em grande escala. Outra grande aplicação de reatores de leito fluidizado circulante ocorre no craqueamento catalítico de hidrocarbonetos pesados na indústria do petróleo.

Os combustores de leito circulante têm emergido como uma opção promissora para a geração de energia em caldeiras de queima de carvão e de gaseificação de biomassa. Existem muitas vantagens na utilização destes combustores, tais como: a flexibilidade no combustível, a grande eficiência da combustão, a ampla faixa de carga, as baixas emissões de óxidos de nitrogênio e enxofre NO_x e SO_2 , e a boa taxa de recirculação do material no tubo ascendente. O leito circulante denomina-se a segunda geração de combustores de leito fluidizado (Tsuo, 1989).

No entanto, a tecnologia de fluidização gás-sólidos apresenta ainda problemas a serem resolvidos, tais como: a forte erosão das superfícies internas ao leito, dos tubos de troca de calor, etc., assim como a possível bloqueio das partículas finas no tubo ascendente. Além disso, devido à sensibilidade do escoamento fluidizado à escala e às condições operacionais, o processo de escalonamento torna-se extremamente complexo (Ding, 1990).

Os estudos hidrodinâmicos podem contribuir de forma significativa para o melhor conhecimento e solução desses problemas. A estrutura do escoamento multifásico em colunas de leito fluidizado circulante é bastante complexa, caracterizada por grandes variações da fração volumétrica de sólidos ao longo do tubo ascendente, pela formação e dissipação de aglomerados de particulado e pela grande recirculação de sólidos. Essas complexas condições

de escoamento provêm um intenso contato superficial entre gases e sólidos, garantindo as altas taxas de reação necessárias aos processos reativos. O conhecimento da hidrodinâmica do processo é então de grande importância para que os parâmetros reativos e de transporte de massa no reator possam ser estabelecidos.

A modelagem matemática dos processos de fluidização gás-sólidos representa uma ferramenta auxiliar para a minimização dos esforços experimentais requeridos no desenvolvimento de instalações industriais. A experimentação e o desenvolvimento de protótipos são as ferramentas principais no projeto de qualquer processo industrial em engenharia. No entanto, os procedimentos de modelagem matemática e simulação numérica estão em constante desenvolvimento contribuindo de forma crescente para uma melhor compreensão de processos e fenômenos físicos. Além disso os modelos do processo de fluidização necessitam, para sua validação, de medições experimentais complexas de difícil execução. Assim, o desenvolvimento de modelagem também representa um estímulo ao desenvolvimento de novas técnicas e métodos experimentais.

O objetivo deste trabalho é oferecer uma breve introdução aos procedimentos usados em modelagem matemática fundamental em processos de fluidização, especificamente em leitos fluidizados circulantes gás-sólidos.

2. LINHAS GERAIS DE MODELAGEM MATEMÁTICA EM FLUIDIZAÇÃO

Harris and Davidson apud Pugsley and Berruti (1996) apresentam uma classificação de modelos utilizados na simulação de leitos fluidizados circulantes. Segundo esses autores existem três tipos de modelos matemáticos utilizados para modelar os processos de fluidização gás-sólidos em leitos circulantes:

1. Os modelos que predizem a variação axial da densidade da suspensão de sólidos, mas que não caracterizam a variação radial.
2. Os modelos que predizem a variação radial da densidade da suspensão de sólidos e as altas velocidades médias de deslizamento, assumindo duas ou mais regiões com diferentes características de escoamento (por exemplo, os modelos pistonado anular e de escoamento anular com aglomerados).
3. Os modelos que utilizam as equações fundamentais da dinâmica dos fluidos para prever o escoamento bifásico gás-sólidos. Tal é o caso do modelo das duas fases separadas (modelo tradicional) e do modelo baseado na teoria cinética dos escoamentos granulares (TCEG).

Os dois primeiros tipos de modelos são preferencialmente utilizados como ferramentas de projeto, para investigar os efeitos das condições de operação e das dimensões do tubo ascendente do leito na estrutura do escoamento. Esses modelos podem ser facilmente acoplados à modelos cinético-químicos para simular o desempenho dos reatores de leito circulante (Pugsley and Berruty, 1996).

Os modelos do terceiro tipo são mais adequados para pesquisar as estruturas locais do escoamento, e para verificar a influência local da geometria sobre o escoamento (Pugsley and Berruty, 1996). Segundo Kuipers *et al.* (1998) estima-se que a utilização destes modelos para projeto e operação de reatores de leitos fluidizados experimentará uma significativa expansão num futuro próximo. Estes autores apresentam uma breve comparação, mostrada a seguir na tabela 1, deste tipo de modelos com os denominados modelos de sistemas globais ou de reatores clássicos, que são semelhantes àqueles dos tipos um e dois acima descritos.

Existe controvérsia entre os vários pesquisadores quanto a qual tipo de filosofia de modelagem é mais válida (Pugsley and Berruty, 1996), fato este reforçado pela comparação apresentada na Tabela 1.

Tabela 1. Comparação dos modelos fundamentais com os modelos globais.

Modelos fundamentais	Modelos globais
Vantagens	Vantagens
Disponibilidade de uma solução mais exata; o fenômeno descreve-se por cálculos de forma direta; pode-se obter equações de balanço formais de maneira rigorosa; pode-se visualizar o processo.	Modelos e soluções simples que facilitam a compreensão do fenômeno; modelos adaptáveis à informação requerida; uma capacidade limitada de cálculo é suficiente; pode-se obter predição exata do comportamento do sistema por posterior ajuste de parâmetros.
Desvantagens	Desvantagens
Requer-se: Conhecimento detalhado de processos elementares; redução de dados; grande capacidade de cálculo; esforço computacional adicional para cada problema específico; e o comportamento macroscópico não sempre é obtido com exatidão.	Necessita-se de conhecimento prévio do fenômeno além de imaginação; necessita-se de validação experimental previa e ajuste de parâmetros; o sentido dos parâmetros é as vezes pouco claro devido às considerações médias feitas.

Nesse trabalho considera-se a descrição dos modelos fundamentais do terceiro tipo, aplicados estritamente a processos de fluidização gás-sólidos. A Figura 1 apresenta as linhas ou tendências atuais da modelagem matemática nessa classe de modelos.

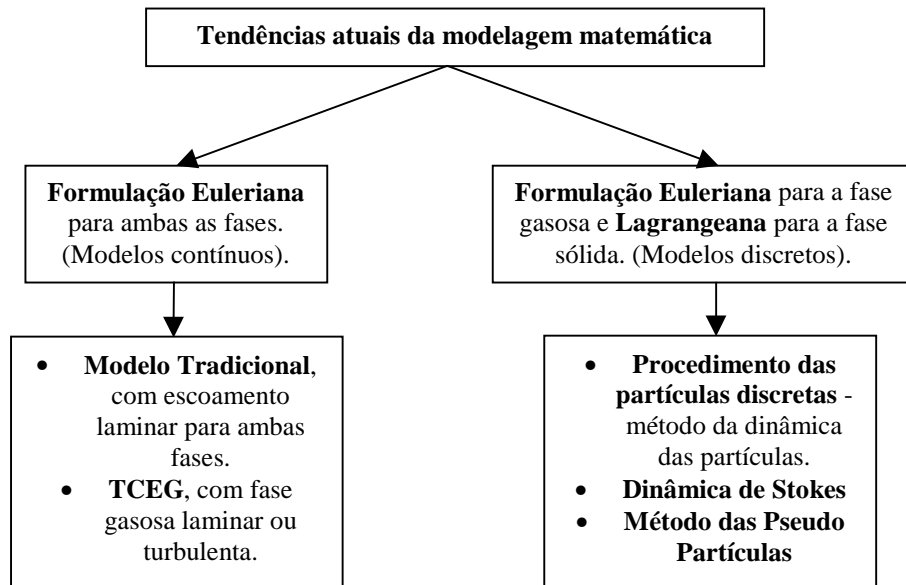


Figura 1. Tendências atuais da modelagem matemática em fluidização baseadas em equações fundamentais.

O método de Euler ou formulação Euleriana tem sido muito utilizado na modelação dos processos de fluidização. O método de Euler divide-se em dois procedimentos principais: o modelo tradicional e a teoria cinética dos escoamentos granulares.

O modelo tradicional, que utiliza o método das médias de Euler e considera as duas fases como fases contínuas, denomina-se **modelo das duas fases separadas**. Este modelo é formulado considerando cada fase em separado, em termos de um sistema de equações de conservação de massa, quantidade de movimento para cada direção coordenada, e

conservação da energia, para cada fase respectivamente. Devido a que ambas as fases interagem entre si, aparecem nas equações de campo termos devidos a essa interação, que especificam o transporte de massa, quantidade de movimento e energia através da interface. Na literatura existe um grande número de publicações que utilizam este modelo das duas fases, tais como Gidaspow and Ettehadieh (1983), Syamlal and Gidaspow (1985), Gidaspow (1986), Bouillard *et al.* (1989) entre outras.

A desvantagem do modelo tradicional consiste na necessidade de introduzir a viscosidade dinâmica do sólido, μ_s , como um dado obtido experimentalmente mediante um balanço de quantidade de movimento, como mostrado em Miller and Gidaspow (1992). Devido a esse fato este modelo é também denominado de modelo das duas fases com viscosidade constante.

Os modelos baseados na TCEG para tratamento da fase sólida são atualmente adotados pela maioria dos pesquisadores, embora ainda não tenha sido demonstrado que este modelo possa produzir resultados mais realistas que os obtidos através do modelo das duas fases com viscosidade constante (Kuipers and van Swaaij, 1997).

A TCEG foi desenvolvida por vários pesquisadores com base na teoria cinética dos gases densos (Chapman and Cowling, 1970). A grande vantagem dos modelos baseados nessa teoria é que permitem calcular diretamente o valor de μ_s , além da pressão da fase sólida. Suas desvantagens são a maior complexidade numérica e a necessidade de mais tempo de cálculo computacional. Alguns dos trabalhos que utilizam a TCEG são Ding and Gidaspow (1990), Boemer *et al.* (1995), e Samuelsberg and Hjertager (1996) entre outros.

A formulação de Euler-Lagrange constitui outra linha de modelagem numérica atualmente utilizada em fluidização. Nessa formulação, em geral, a fase gasosa é modelada como uma fase continua pelo método das médias de Euler, enquanto a fase sólida é modelada utilizando a formulação Lagrangeana.

De maneira geral essa linha de modelagem permite uma melhor compreensão das interações partícula-partícula e partícula-parede. Isto oferece uma ferramenta para obter novos modelos reológicos das suspensões fluidizadas, o que permite melhorar a formulação das leis de fechamento necessárias nos modelos contínuos (modelo das duas fases separadas).

Como mostra-se na Figura 1 podem-se distinguir três procedimentos gerais deste tipo de formulação: o procedimento das partículas discretas, o modelo da dinâmica de Stokes, e o método das pseudo partículas (Kuipers and van Swaaij, 1997).

No procedimento das partículas discretas o movimento das partículas individuais esféricas é calculado diretamente a partir das forças que atuam sobre essas partículas, levando em consideração as interações partícula-partícula e partícula-parede, assim como o arrasto entre as partículas e fase gasosa intersticial. Os trabalhos de Tsuji *et al.* (1998) e de Hoomans *et al.* (1996) entre outros são representativos deste procedimento. Os primeiros autores utilizam o modelo das “partículas brandas”, considerando que as partículas se deformam durante as iterações entre si. Os segundos autores utilizam o modelo das “partículas duras”, considerando as partículas como esferas quase rígidas que não sofrem deformações durante as interações.

O modelo da dinâmica de Stokes e o método das pseudo partículas constituem os outros dois procedimentos que utilizam a formulação de Euler-Lagrange. Uma explanação destes dois procedimentos assim como do procedimento das partículas discretas é apresentada no trabalho de Kuipers and van Swaaij (1997).

A formulação Lagrangeana aplicada à fase de sólidos implica em que um conjunto de equações seja gerado e resolvido para cada partícula no domínio físico de cálculos. Esse fato dificulta tremendamente sua aplicação à escoamentos contendo grandes quantidades de particulado, como é o caso de escoamentos fluidizados, em vista das limitações dos recursos computacionais atuais.

A seguir mostra-se na Tabela 2 uma comparação entre modelos contínuos e discretos para a fase sólida tomada de Kuipers *et al.* (1998). Segundo estes autores, devido à variedade e grau de complexidade dos sistemas de fluidização modelados, existe uma forte demanda por um procedimento integrado de modelagem onde modelos com elevado grau de sofisticação devem ser usados para alimentar modelos que usam sub-modelos com forte base empírica. Nesse contexto os modelos discretos oferecem uma ferramenta para desenvolver leis de fechamento para as interações partícula-partícula e partícula-parede, que podem ser usadas e testadas nos modelos contínuos desenvolvidos para a simulação dos sistemas macroscópicos de interesse, tais como os leitos fluidizados circulantes gás-sólidos.

Tabela 2. Comparação entre modelos contínuos (MC) e modelos discretos (MD).

	MC	MD
Úteis para predições engenharieis de escala	+	-
Incorporação dos efeitos distribuídos sob a fase dispersa (sólida)	-	+
Esforço computacional	+	-
Nível de detalhamento computacional	-	+
Fechamento das equações	-	+

3. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO

A seguir apresenta-se resultados de simulação numérica do escoamento bifásico gás-sólidos no tubo ascendente da instalação do sistema de transporte gás-sólidos do IIT (Illinois Institute of Technology) apresentada em (Luo, 1987) e em (Tsuo, 1989) segundo as condições e geometria especificadas na Figura 2.

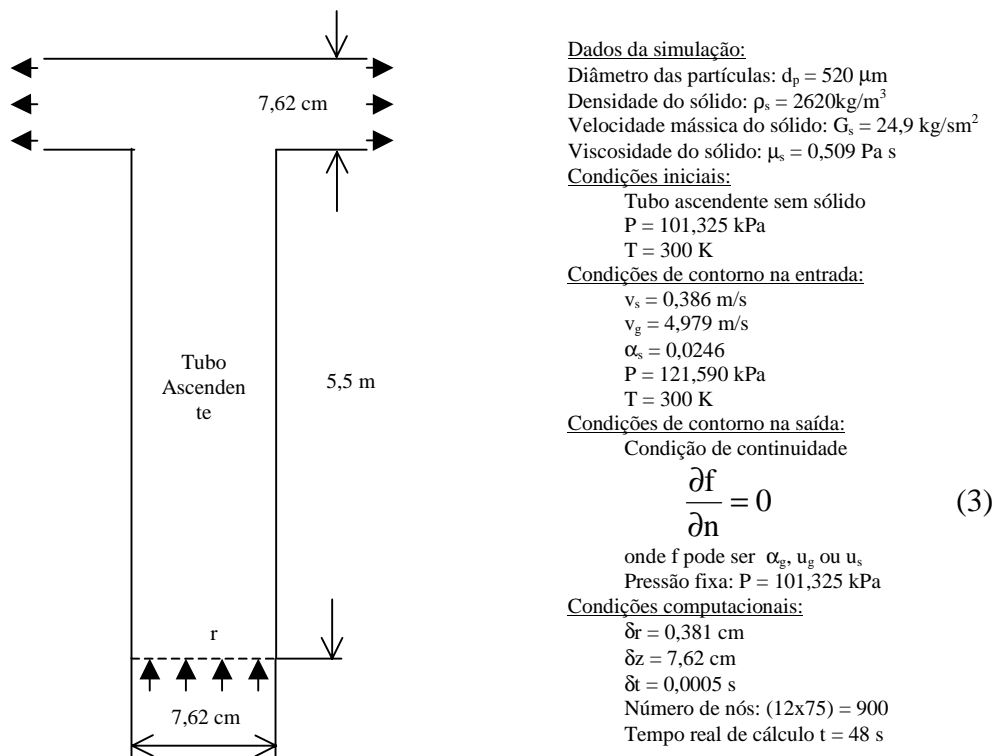


Figura 2. Geometria e condições iniciais e de contorno usadas na simulação do sistema de transporte do IIT apresentado em (Luo, 1987) e em (Tsuo, 1989).

Na simulação utiliza-se o modelo hidrodinâmico B usado pelo grupo de pesquisa do IIT/ANL (Argonne National Laboratory). Este consiste no modelo tradicional das duas fases separadas com algumas modificações. As equações básicas de conservação da massa e da quantidade de movimento do modelo tradicional são dadas respectivamente por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{U}_k) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \vec{U}_k) + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{U}_k \vec{U}_k) = -\alpha_k \vec{\nabla} P + \vec{\nabla} \cdot (\alpha_k \tau_k) + M_{ki} + \alpha_k \rho_k \vec{g} \quad (2)$$

onde α_k , ρ_k , U_k , e τ_k representam respectivamente a fração volumétrica, densidade (kg/m^3), velocidade média (m/s), e o tensor das tensões viscosas (Pa) para a fase k, P a pressão termodinâmica ou pressão do gás (Pa), g a aceleração da gravidade (m/s^2), e M_{ki} a transferência de quantidade de movimento na interface entre as fases (N/m^3).

Para fechar as equações (1) e (2) precisa-se modelar os termos τ_k e M_{ki} . Para o tensor das tensões viscosas normalmente assume-se um fluido Newtoniano tanto para a fase gasosa quanto para a fase sólida. Além disso deve-se especificar a viscosidade da fase sólida, μ_s . No modelo clássico assume-se um valor constante para esse coeficiente. Outro aspecto a modelar através das leis de fechamento é a denominada pressão do sólido que caracteriza as tensões normais que aparecem na fase sólida devido às colisões partícula-partícula e às flutuações da velocidade do particulado. No modelo tradicional a pressão do sólido é modelada por equações empíricas.

No modelo utilizado são também consideradas as seguintes hipóteses simplificativas: escoamento bifásico não reativo sem transferência de massa na interface; escoamento laminar e isotérmico para ambas as fases, as quais são consideradas meios contínuos; e particulado homogêneo caracterizado por apenas um diâmetro médio de partícula d_p (m). Para maiores detalhes da derivação do modelo hidrodinâmico utilizado, da técnica numérica usada, assim como de aspectos concernentes à modelagem matemática de escoamentos bifásicos gás-sólidos pode-se consultar os trabalhos de Cabezas (1999), e Cabezas e Milioli, (1999).

A Figura 3 mostra os contornos de fração volumétrica de sólidos no tubo ascendente. Nessa figura, quanto menos intenso o tom de cinza maior a fração volumétrica de sólidos. Observa-se a formação e dissipação de aglomerados, formando-se o primeiro à 1,5 segundos aproximadamente. Os resultados mostrados na Fig.3 são qualitativamente semelhantes aos obtidos por Tsuo (1989), que modelou essa mesma instalação utilizando coordenadas cartesianas (vide Cabezas, 1999). Como observa-se na figura a hidrodinâmica do escoamento bifásico gás-sólidos numa coluna de leito circulante é bastante complexa, caracterizando-se por grandes variações radiais e axiais da concentração de sólidos, e pela freqüente formação e dissociação de aglomerados sólidos que escoam de forma ascendente e descendente.

4. COMENTÁRIOS FINAIS

Existem diferentes tipos de modelos para simular o escoamento multifásico num leito fluidizado. Entre os modelos usados em modelagem fundamental destacam-se os modelos contínuos e os modelos discretos. Apesar dos avanços atingidos no desenvolvimento e utilização destes tipos de modelos, ainda existem problemas significativos a serem resolvidos. Entre eles estão a modelagem dos termos viscosos para a fase sólida e a modelagem da turbulência, entre outros, para os modelos contínuos, e o alto custo computacional dos modelos discretos, impossibilitando sua aplicação à simulação de sistemas fluidizados de escala industrial.

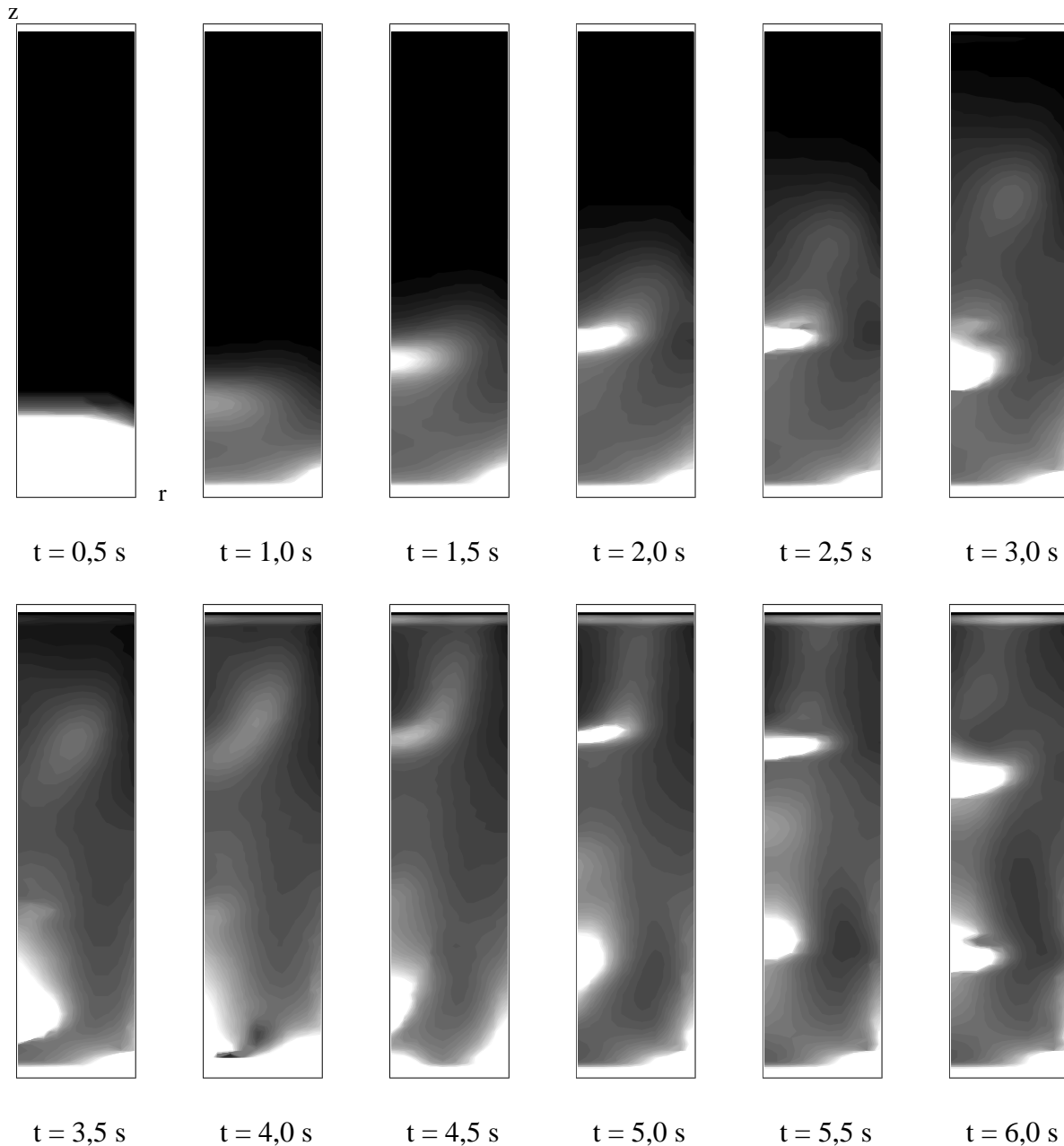


Figura 3 - Perfis do contorno da fração volumétrica de sólidos em função do tempo.

Salienta-se a importância da pesquisa e desenvolvimento destes tipos de modelos visando sua aplicação ao projeto de unidades industriais de leitos fluidizados para geração de energia e produção de combustíveis. Uma forma de atingir esse propósito é a utilização de procedimentos de modelagem integrados, como descrito na seção 2.

Atualmente estão sendo desenvolvidos trabalhos de pesquisa nesta área de modelagem fundamental de processos de fluidização em continuidade ao presente trabalho.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer o apoio financeiro do CNPq na forma de bolsa de mestrado para o primeiro autor do trabalho.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Boemer, A., Qi, H., Renz, U., Vasquez, S., Boysan, F., 1995, "Eulerian computation of fluidized hydrodynamics-a comparison of physical models", Proc.13th Int. Conf. on Fluidized Bed Combustion, v.2, p.775-787.
- Bouillard, J.X., 1989, "Porosity distributions in a fluidized bed with an immersed obstacle", AIChE Journal, v.35, n.6, p.908-922.
- Cabezas, L.G., 1999, "Um estudo da modelagem matemática e simulação numérica de escoamentos bifásicos gás-sólidos", Dissertação de mestrado, Escola de Engenharia de São Carlos, USP, São Carlos, Brasil.
- Cabezas, L.G., Milioli, F.E., 1999, "Modelagem matemática e simulação numérica do escoamento bifásico gás-sólidos num leito fluidizado circulante", XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Águas de Lindoia, SP, Brasil.
- Chapman, S., Cowling, T.G., 1970, "The mathematical theory of non-uniform gases", 3rd Ed., Cambridge Univ. Press, Cambridge, U.K.
- Ding, J., 1990, "A fluidization model using kinetic theory of granular flow", Ph.D. Thesis, Illinois Institute of Technology, Chicago.
- Ding, J., Gidaspow, D., 1990, "A bubbling model using kinetic theory of granular flow", AIChE Journal, v.36, n.4, p.523-538.
- Gidaspow, D., Ettehadieh, B., 1983, "Fluidization in two-dimensional beds with a jet 2. Hydrodynamics modeling", Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals, v.22, p.193-201.
- Gidaspow, D., 1986, "Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: Supercomputing modeling", Applied Mechanical Reviews, v.39, n.1, p.1-23.
- Gidaspow, D., 1994, Multiphase Flow and Fluidization. Continuum and Kinetic Theory Descriptions, Academic Press, Boston.
- Hoomans, B.P.B., Kuipers, J.A.M., Briels, W.J., van Swaaij, W.P.M., 1996, "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.
- Kuipers, J.A.M., van Swaaij, W.P.M., 1997, "Application of computational fluid dynamics to chemical reaction engineering", Reviews in Chemical Engineering, v.13, n.3.
- Kuipers, J.A.M., Hoomans, B.P.B., van Swaaij, W.P.M., 1998, "Hydrodynamic models of gas-fluidized beds and their role for design and operation of fluidized bed chemical reactors", In Fluidization IX, Engineering Foundation, Fan, L.-S., Knowlton, T.M., Eds., Engineering Foundation: New York, p. 15-30.
- Miller, A., Gidaspow, D., 1992, "Dense, vertical gas-solid flow in a pipe", AIChE Journal, v.38, n.11, p.1801-1815.
- Pugsley, T.S., Berruti, F., 1996, "A predictive model for circulating fluidized bed risers", Powder Technology, v.89, p.57-69.
- Samuelsberg, A., Hjertager, B.H., 1996, "An experimental and numerical study of flow patterns in a circulating fluidized bed reactor", International Journal of Multiphase Flow, v.22, n.3, p.575-591.
- Syamlal, M., Gidaspow, D., 1985, "Hydrodynamics of fluidization: prediction of wall to bed heat transfer coefficients", AIChE Journal, v.31, n.1, p.127-135.
- Tsuji, Y., Tanaka, T., Yonemura, S., 1998, "Cluster patterns in circulating fluidized beds by numerical simulation (discrete particle model versus two-fluid model)", Powder Technology, v.95, n.3, p.254-264.
- Tsuo, Y.P., 1989, "Computation of flow regimes in circulating fluidized beds", Ph.D. Thesis, Illinois Institute of Technology, Chicago.