

76

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE QUIMICA

MODELO MATEMATICO PARA LA SIMULACION
DE UN REACTOR NO CATALITICO DE
LECHO FLUIDIZADO SOLIDO-GAS

GUILLERMO CALDERON AGUILERA
FRANCISCO SALVADOR TORRES ROLDAN

INGENIERIA ⁶⁵ QUIMICA

1 9 7 6



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

CLAS. Tesis

ADQ. 1976

FECHA 11-10

PROC. _____

68

LA CIENCIA DEBE DESARROLLARSE PARA SERVIR AL PUEBLO,
NO PARA EXPLOTARLO.

PRESIDENTE PROF. ENRICO MARTINEZ SAENZ

VOCAL PROF. RODOLFO MORA

Jurado asignado originalmente SECRETARIO PROF. JORGE RAMIREZ SOLIS

según el Tema 1er. SUPLENTE PROF. JOSE LUIS HERCE VIGIL

2do. SUPLENTE PROF. MARIO VIZCARRA MENDOZA

Sitio donde se desarrolló el tema: FACULTAD DE QUIMICA, C.S.C.

Nombre completo y firma del sustentante: GUILLERMO CALDERON AGUILERA

FRANCISCO SALVADOR TORRES ROLDAN

Nombre completo y firma del asesor del tema: DR. JORGE RAMIREZ SOLIS.

INDICE.

	Pág.
I INTRODUCCION	2
II APLICACIONES DE LOS LECHOS FLUIDIZADOS	7
III CARACTERISTICAS DE LOS LECHOS FLUIDIZADOS	10
IV MODELOS SOBRE EL COMPORTAMIENTO DE BURBUJAS	18
V TRANSFERENCIA DE CALOR Y MASA EN REACTORES DE LE- CHO FLUIDIZADO	31
VI MODELO CINETICO DE UNA REACCION SOLIDO-GAS NO CA- TALITICA	36
VII DESARROLLO DEL MODELO DE SIMULACION	46
VIII RESULTADOS	58
IX CONCLUSIONES	77
X BIBLIOGRAFIA	82
XI APENDICE. NOMENCLATURA	84

SINOPSIS

El uso de reactores de lecho fluidizado ha tenido un incremento notable en los últimos años .

En los primeros dos capítulos de este trabajo se hace una descripción del fenómeno de fluidización. El tercer capítulo contiene nociones básicas para el estudio de lechos fluidizados. El capítulo cuarto se ocupa de los modelos que se encuentran reportados en la literatura sobre el crecimiento de burbujas. En los capítulos quinto y sexto, se habla sobre la transferencia de calor y masa y el modelo cinético respectivamente, sentando las bases para el desarrollo del modelo de simulación que se lleva a cabo en el 7o. capítulo. Finalmente los últimos capítulos contienen los resultados y las conclusiones obtenidas en el trabajo.

I.- INTRODUCCION.

El avance de la industria química ha requerido de nuevos procesos más eficientes y económicos.

Estos atributos se realizan, en mayor o en menor grado, en muchos de los procesos industriales por los métodos de contacto.

Entre los que se han desarrollado en los últimos treinta y cinco años, destaca el llamado "método de fluidización".

Este método tiene aplicación en operaciones tanto de tipo físico como químico.

En las de tipo químico, por las características que ofrece, el empleo de reactores de lecho fluidizado para reacciones heterogéneas sólido-gas se ha incrementado en cantidad y en calidad.

Hasta el momento no hay una teoría uniforme de la fluidización. Tanto la información como las correlaciones propuestas son imprecisas, y, a veces, contradictorias.

La siguiente exposición intenta desarrollar un modelo -- confiable para la simulación de reactores de lecho fluidizado con base en los estudios que sobre el tema se han hecho hasta ahora.

a).-Descripción del fenómeno de fluidización.

La fluidización es una operación por medio de la cual -- una corriente líquida o gaseosa mantiene a las partículas de un sólido en un estado semejante al de un fluido.

Esta descripción elemental del fenómeno de fluidización requiere de las siguientes aclaraciones para no incurrir en confusiones:

- 1) Cuando una corriente fluye únicamente a través de los espacios entre las partículas de un sólido sin moverlas se considera que el lecho es fijo.
- 2) Si el fluido causa un movimiento restringido de las partículas, se trata de un lecho expandido.
- 3) Si las partículas se encuentran suspendidas en la corriente fluida, se le denomina lecho a fluidización mínima.
- 4) Si un incremento en la velocidad de flujo en un lecho a -- fluidización mínima causa una expansión progresiva de la cama se tiene un lecho homogéneamente fluidizado que corresponde, por lo general, a un fluido líquido.
- 5) Cuando el fluido es un gas, al aumentar la velocidad del -- flujo en un lecho a fluidización mínima, no continúa la expansión de la cama, sino que se observa la formación de burbujas por lo que a este estado se le denomina lecho fluidizado burbujeante.
- 6) Si la velocidad del flujo es suficientemente alta, las par

tículas de sólido son arrastradas y entonces se considera que el lecho está en un estado de fluidización con transporte neumático de sólidos.

El lecho fluidizado burbujeante es el que más se utiliza en la industria, por lo que el siguiente estudio se referirá a él en lo particular

b).- La Fluidización comparada con otros métodos de contacto.

La fluidización, como cualquier otra operación, presenta características favorables y negativas en su utilización, pero el balance general sobre este método de contacto es positivo, lo que se comprueba por el incremento de su aplicación en la industria.

En términos generales, las principales ventajas de los lechos fluidizados son:

- 1) La rapidez de mezclado de sólidos, lo que da lugar a condiciones prácticamente isotérmicas a lo largo de todo el reactor.
- 2) La velocidad de transferencia de calor y masa entre el gas y las partículas es mayor que la de otros métodos de contacto.
- 3) La circulación de sólidos entre dos lechos fluidizados hace posible el transporte de grandes cantidades de calor
- 4) Facilidad en su manejo y control.

En cambio, algunos de sus inconvenientes son:

- 1) El rápido mezclado de sólidos en el lecho lo que causa tiempos de residencia poco uniformes en el reactor.
- 2) La dificultad para la descripción del flujo de gas.
- 3) Cierta tipo de sólidos son pulverizados y arrastrados por el fluido, por lo que deben ser reemplazados.
- 4) Se presenta erosión de los recipientes y tuberías, debida a la abrasión de los sólidos.

Si se compara el de fluidización con otros métodos de -- contacto, se aprecia:

- 1). Para reacciones en fase gaseosa con catalizador sólido -- que son difíciles de llevar a cabo en reactores de lecho fijo en los de lecho fluidizado sus resultados son buenos debido a el excelente control de temperatura que se obtiene en ellos y a que los problemas de la desactivación del catalizador se resuelven con facilidad porque se puede regenerar sin necesidad de interrumpir la operación. (Cracking, C activado, etc.)
- 2) En reacciones heterogéneas sólido-gas el reactor de lecho fluidizado puede utilizarse en un amplio rango de tamaño de partículas sin la restricción que para la operación tienen -- los reactores de lecho móvil.
- 3) El producto que se obtiene es mucho más uniforme en un reactor de lecho fluidizado que en uno de lecho fijo.
- 4) Los gradientes de temperatura que pueden ser importantes -

en un reactor de lecho fijo practicamente son nulos en un -- reactor de lecho fluidizado.

5) El intercambio y transporte de calor en un reactor de lecho fluidizado es muy superior al de cualquier otro tipo de reactor.

6) La conversión en un reactor de lecho fluidizado es menor a la obtenida en uno de lecho fijo, ya que el primero opera en forma semejante a un tanque agitado.

Naturalmente que en el desarrollo de procesos completos, los lechos fluidizados pueden ser combinados con otros métodos de contacto.

7) En cambio, la caída de presión, que en un reactor de lecho fijo no constituye un problema grave, si lo es en el de lecho fluidizado.

II APLICACIONES DE LECHOS FLUIDIZADOS.

Las aplicaciones industriales de los lechos fluidizados, pueden dividirse, por su operación, en físicas y químicas.

a).- Operaciones Físicas.

Este tipo de aplicaciones, incluye operaciones en las -- cuales, cantidades relativamente grandes de material sólido -- van a ser sometidas a algún proceso físico, ya sea de trans -- porte, secado, mezclado, intercambio de calor, adsorción o a -- algún otro.

1).- Transporte.

Los lechos fluidizados se han utilizado mucho para el -- transporte de sólidos, información detallada puede encontrar -- se en libro de la EE.U.A. [1].

2).- Secado.

Otro empleo de los lechos fluidizados ha sido para el se -- cado y clasificación de materiales pulverizados, ya que se ob -- tiene un producto de mayor calidad y consume menos combusti -- ble que otros secadores convencionales.

3).- Mezclado.

En el mezclado íntimo de diferentes clases de materiales pulverizados, que es difícil de lograr con técnicas convenci -- nales, se obtienen excelentes resultados utilizando lechos -- fluidizados, como puede verse en los estudios realizados por Rowe y Shuterland, [2] quienes encontraron la dependencia que existe entre el mezclado de sólidos en un lecho fluidizado y la formación y movimiento de las burbujas.

4).-Intercambio de Calor.

Entre las cualidades de los lechos fluidizado , sobresale la capacidad de transportar grandes cantidades de calor y mantener una temperatura uniforme, por lo que se les ha usado ampliamente, tanto en operaciones físicas como en procesos químicos, y en un gran rango de temperaturas. Varios estudios sobre el tema se han escrito en la literatura de la materia.

b).- Operaciones Químicas.

La otra aplicación importante de los lechos fluidizados, es en operaciones químicas.

1).- Reacciones de Síntesis.

Debido al estricto control de temperatura que requieren muchas reacciones en fase gaseosa con catalizador sólido es preferible utilizar reactores de lecho fluidizado que los de lecho fijo, ya que los primeros, como se mencionó anteriormente, son capaces de mantener la temperatura constante a lo largo de todo el reactor.

2).- Reacciones de Hidrocarburos.

El rompimiento de cadenas de hidrocarburos para obtener materiales de menor peso molecular y la síntesis para dar lugar a materiales de mayor peso molecular, son reacciones endotérmicas y que van acompañadas de un depósito de carbón sobre la superficie del sólido. Estas dos características y el hecho de que grandes cantidades de material tienen que ser tratadas, hace que el único sistema eficiente para este tipo de operación sea uno que incluya lechos fluidizados como parte del proceso.

3).- Reacciones Sólido-Gas.

Todas aquellas reacciones no homogéneas sólido-gas, en las que se requiere manejar grandes cantidades de calor, es decir, reacciones altamente exotérmicas o endotérmicas, se llevan a cabo en forma satisfactoria en reactores de lecho fluidizado.

III.- CARACTERISTICAS DE LOS LECHOS FLUIDIZADOS.

a).-Características que definen un Lecho Fluidizado.

Para describir el comportamiento de los lechos fluidizados, es necesario establecer algunos conceptos.

1).- El diámetro equivalente de partícula d_p , se define como el diámetro que tendría una esfera con el mismo volumen que la partícula. Este diámetro será semejante al diámetro -- real de la partícula, si esta es prácticamente esférica; en -- otro caso, el diámetro será sobreestimado.

2).- La esfericidad ϕ_s , es la razón de la superficie de la esfera a la superficie de la partícula, referidas al mismo volumen. Es evidente a partir de la definición, que los valores que podrá tomar la esfericidad están entre cero y uno.

3).-La fracción de espacios vacíos ϵ , es el cociente entre el volumen vacío y el volumen total de la cama. Debido a -- que la fracción de huecos es difícil de predecir con exacti -- tud, pero fácil de medir, es recomendable obtenerla en forma experimental. En recipientes de diámetro pequeño, su valor se -- ve alterado debido a los efectos de pared.

4).- A la razón entre la superficie de la partícula y el volumen de esta, se le conoce como superficie específica. En términos algebraicos:

$$a' = \frac{\pi d_p^2 / \phi_s}{\pi d_p^3 / 6} = \frac{6}{\phi_s d_p} \quad (1)$$

o bien,

$$Q = \frac{G(1 - \epsilon_{mf})}{\phi_s d_p} \tag{2}$$

5).- La velocidad mínima de fluidización u_{mf} , es aquella velocidad superficial de gas a la cual las partículas de sólido quedan suspendidas en la corriente fluida. Se puede calcular a partir del balance entre la fuerza de arrastre y el peso de la partícula [3], obteniendo la siguiente expresión.

$$\frac{1.75}{\phi_s \epsilon_{mf}^3} \left(\frac{d_p u_{mf} \rho_g}{\mu} \right) + \frac{150(1 - \epsilon_{mf})}{\phi_s^2 \epsilon_{mf}^3} \left(\frac{d_p u_{mf} \rho_g}{\mu} \right) = \frac{d_p^3 \rho_s (\rho_s - \rho_g) g}{\mu^2} \tag{3}$$

donde ϵ_{mf} es la fracción de espacios vacíos a condiciones mínimas de fluidización, Dado que ϵ_{mf} y ϕ_s son frecuentemente desconocidas, es posible utilizar una modificación [4] basada en las relaciones.

$$\frac{1}{\phi_s \epsilon_{mf}^3} \cong 14 \tag{4}$$

$$\frac{1 - \epsilon_{mf}}{\phi_s^2 \epsilon_{mf}^3} \cong 11 \tag{5}$$

que son válidas en un amplio rango de número de Reynolds. Sustituyendo (4) y (5) en la expresión (3) se obtiene

$$\frac{d_p u_{mf} \rho_g}{\mu} = \left[(33.7)^2 + 0.0409 \frac{d_p^3 \rho_s (\rho_s - \rho_g) g}{\mu^2} \right]^{1/2} - 33.7 \tag{6}$$

esta es la forma más simple de calcular u_{mf} ; sin embargo, hay formas alternas reportadas en la literatura.

6).- La velocidad de flujo de gas a través de un lecho fluidizado está limitada por un lado por u_{mf} y por otro, por el arrastre de sólidos. El límite superior de velocidad de flujo de gas se aproxima por la velocidad terminal o de caída libre de las partículas, la cual puede ser calculada a partir de mecánica de fluidos y está dada por

$$u_t = \left[\frac{4.9 d_p (\rho_s - \rho_g)}{3 \rho_g C_d} \right] \quad (7)$$

donde el coeficiente de arrastre, C_d , se determina experimentalmente [3].

Para evitar el arrastre de sólidos de una cama, la velocidad del gas para la operación de lechos fluidizados debe mantenerse entre los valores de u_{mf} y u_t .

La altura máxima de la cama es donde esta es apenas fluidizada en la parte baja de la cama y la velocidad terminal comienza a alcanzarse por la parte alta.

b).- Formación de Burbujas.

Una de las características de los reactores de lechos -- fluidizados sólido-gas es la formación de burbujas de gas que son responsables del mezclado de las partículas [2] y la consecuente elevada conductividad térmica de la cama. Sin embargo, son también la causa de la desintegración de las partículas de catalizador, de la erosión del equipo y debido a que las burbujas contienen solo pequeñas cantidades de sólidos, se pueden presentar corrientes laterales que disminuyen la -- eficiencia de la reacción en comparación con aquella que se obtiene en un reactor de lecho fijo operando a las mismas condiciones de velocidad de gas y masa de catalizador.

Las burbujas que se forman se mueven, en todo lecho fluidizado burbujeante, a través de una fase particular densa por la cual fluye gas a una velocidad cercana a la mínima de fluidización. A lo largo de la cama existe una amplia distribución de tamaño de burbujas, siendo el tamaño inicial determinado principalmente por el tipo de distribuidor utilizado. La coalescencia de las burbujas es la causa del crecimiento de estas a medida que avanzan en el lecho.

Es importante hacer notar que la formación de burbujas -- no se presenta hasta que la velocidad superficial del gas ha alcanzado un valor aproximadamente 1.2 veces la velocidad mínima de fluidización [2] y por tanto, puede ser que las burbujas no se originen en el distribuidor sino a una altura de la

cama en la cual dicha velocidad se ha alcanzado.

c).-Tipos de Distribuidor, Características y Efectos.

La forma, tamaño y distribución de las burbujas en un lecho fluidizado son afectadas considerablemente por el tipo de distribuidor utilizado. Existen tres tipos principales de distribuidores que son: el de plato perforado, el de plato multi perforado y el de plato poroso, los cuales se fabrican tanto con materiales cerámicos como con metálicos. Los primeros son más resistentes a la corrosión y a la temperatura, pero en -- cambio, tienen el inconveniente de ser poco resistentes a esfuerzos de tipo mecánico, lo que ocasiona la preferencia de -- los materiales metálicos, que por o ro lado, son más económicos.

Aunque el contacto que se obtiene utilizando platos poros os es muy superior al obtenido con otros tipos de plato, des de el punto de vista industrial, tales distribuidores dan lugar a una excesiva caída de presión, que se refleja en la economía del proceso. Debido a esta y a otras limitaciones que -- presentan los platos porosos, se ha preferido el empleo de -- platos multiperforados, habiéndose desarrollado varios modelos de este tipo de plato. Algunos modelos comunmente empleados son:

- 1).-Plato de malla de alambre, que es comunmente utilizado para operaciones en pequeña escala (laboratorio) .
- 2).- Plato con malla doble, cuyas características favorecen su empleo a escala industrial.
- 3).-Plato cóncavo, que se utiliza para contrarrestar las

canalizaciones que comunmente se producen en el centro de la cama.

4).-Plato convexo, es empleado para operación a elevadas temperaturas, aliviando esfuerzos producidos sobre el recipiente con otro tipo de platos.

5).- Plato empacado, que consiste de dos placas perforadas, separadas por una sección empacada con algún material y que es un excelente distribuidor.

Muchos otros modelos de plato multiperforado han sido utilizados tanto en el laboratorio como en la industria y se encuentran reportados en la literatura [3].

El diseño de los platos perforados se basa en la teoría de orificios y la metodología puede resumirse como sigue:

1).- Determinar la caída de presión a través del distribuidor,

$$\Delta P_{d,min} = \text{Max} (0.1 \Delta P_{cama}; 35 \text{ cm H}_2\text{O}; 100 \Delta P_{exp}) \quad (8)$$

2).-Calcular el número de Reynolds para el flujo total y el correspondiente coeficiente del orificio [5].

3).- Determinar la velocidad del fluido a través de los orificios.

$$u_{or} = C_d' \left(\frac{2g_c \Delta P_d}{\rho_g} \right)^{1/2} \quad (9)$$

4).-Escoger N_{or} , número de orificios por unidad de área y encontrar el correspondiente diámetro de orificios según la ecuación.

$$u_0 = \frac{\pi}{4} d_{or}^2 u_{or} N_{or}$$

(10)

Los subíndices que tienen las caídas de presión en la ecuación 8, indican respectivamente, caída de presión mínima para el distribuidor, caída de presión total en la cama y caída de presión del lecho expandido.

IV.- MODELOS SOBRE EL COMPORTAMIENTO DE BURBUJA.

El conocimiento adecuado de características de las burbujas, tales como el tamaño, su crecimiento y causas del mismo, resulta un factor indispensable para el diseño y la simulación de reactores de lechos fluidizados usados para llevar a cabo reacciones catalíticas y no catalíticas.

En el capítulo anterior se mencionó la existencia de dos regiones dentro de un lecho burbujeante. La región de baja densidad de sólidos se llama fase burbuja, mientras que la región de alta densidad de sólidos recibe el nombre de fase emulsión. El comportamiento de la fase burbuja en un reactor de lecho fluidizado, afecta significativamente las características de flujo del gas y de las partículas sólidas con la consiguiente influencia sobre la distribución del gas en las fases, el grado de conversión química y la transferencia de calor y masa dentro del reactor. Lo anterior ha motivado que numerosos autores [3], [6], [7], [8], [9] hayan desarrollado trabajos describiendo estos fenómenos. En todos los modelos propuestos, el factor que controla la conversión química es el diámetro de burbuja dentro de la cama, siendo tratado este último desde diferentes puntos de vista.

A continuación se presentan algunos de los modelos más relevantes para el análisis del comportamiento de burbujas.

a).-Modelo de Davidson.

Davidson [11] fue el primero en proponer un modelo capaz de describir en forma adecuada el movimiento de gas y sólidos dentro de un lecho fluidizado y en esto reside su importancia. Debido a sus cualidades muchos autores han propuesto extensiones y modificaciones en base a este modelo. Esencialmente, - el modelo Davidson se basa en los siguientes postulados:

1).- Las burbujas de gas son de forma circular y están exentas de sólidos.

2).- A medida que las burbujas suben en la cama, las partículas alrededor de estas se mueven como si se tratara de un fluido no viscoso incompresible de densidad $\rho_s(1-\epsilon_{mf})$, lo que permite predecir el movimiento de los sólidos,

3).- El gas fluye en la fase emulsión como un fluido viscoso incompresible. De aquí que las velocidades relativas entre el gas y el sólido satisfacen la ley de Darcy.

$$(u_{ms} - u_{mv})_x = -K \frac{\partial P}{\partial x} \quad (11)$$

que bajo las condiciones de frontera apropiadas permite obtener la distribución de presiones en una vecindad de la burbuja en ascenso. La velocidad de la burbuja es considerada en este modelo como

$$u_{br} = 0.711 (gd_b)^{1/2} \quad (12)$$

mientras que la velocidad de ascenso del gas a condiciones mínimas de fluidización viene dada por

$$u_f = \frac{u_{mf}}{E_{mf}} \quad (13)$$

Dependiendo de estas velocidades se pueden observar dos casos

1).- $u_{br} < u_f$ (burbuja lenta). En este caso el gas que fluye a través de la fase emulsión sube a mayor velocidad que -- las burbujas, por lo que se forman corrientes parásitas alrededor de ellas.

2).- Cuando u_{br} es mayor de u_f , burbuja rápida, el gas entra a la burbuja por la parte baja y sale por la parte superior regresando a la parte baja rodeando a la burbuja. Esto da lugar a una nueva región que rodea a la burbuja y que es conocida como fase nube. Unicamente el gas que se encuentra en la nube penetra a la burbuja; el resto del gas no se mezcla con el gas que circula entre nube y burbuja.

La correlación propuesta por este modelo para el crecimiento de burbuja toma la siguiente forma para el caso de una cama bidimensional. (R_c radio de nube)

$$\frac{R_c^2}{R_b^2} = \frac{u_{br} + u_f}{u_{br} - u_f} \quad (14)$$

y para el caso tridimensional

$$\frac{R_c^3}{R_b^3} = \frac{u_{br} + 2u_f}{u_{br} - u_f} \quad (15)$$

En resumen, la teoría de Davidson explica la estabilidad de las burbujas así como la forma en que el gas de una burbuja puede retener su identidad, pasando a través del lecho sin

interaccionar prácticamente con el resto de la cama. Los experimentos han demostrado, que el patrón de flujo de gas, la -- disti ción entre burbujas rápidas y lentas, la distribución -- de presiones y el patrón de flujo de sólidos predic os por el modelo, son correctos.

Por otro lado, la desviación más notable que observa el modelo de Davidson con respecto a la realidad es la forma de la parte baja de la burbuja, ya que se ha encontrado que en -- realidad, las burbujas son cóncavas en su parte inferior, debi do a que la presión dentro de la burbuja en esta parte, es me nor que en la fase emulsión adyacente. Esto ocasiona que el -- ga sea arrastrado a la burbuja, dando lugar a inestabilida -- des y turbulencias, cuyo resultado es el arrastre de sólidos y la formación de una estela (figura 1)

Cuando dos burbujas están lo suficientemente cercanas en tre sí, la segunda se acelera y es arrastrada por la primera, dando lugar a una burbuja de mayor tamaño.

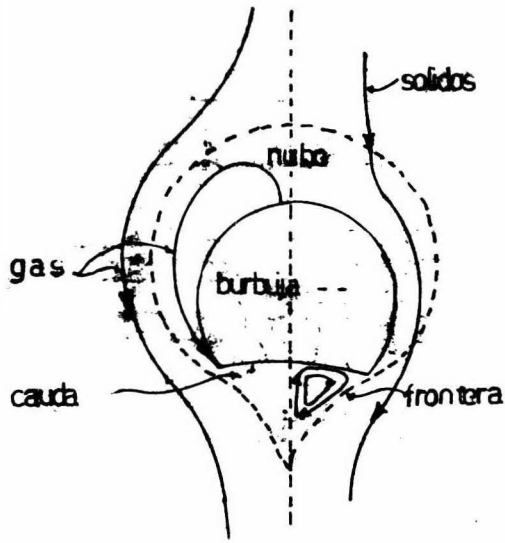


fig. 1

b).- Modelo de Cama Burbujeante.

Este modelo, desarrollado por Kunii y Levenspiel [3] para el crecimiento de burbuja está basado en los siguientes--- postulados.

1).- En la vecindad de cualquier burbuja ascendente, el flujo de gas está aproximado por el modelo de Davidson.

2).- Se forman burbujas pequeñas en el distribuidor, que coalescen, crecen y se aceleran a medida que suben a través de la cama. A cada nivel de la cama, las burbujas tiene aproximadamente el mismo tamaño (tamaño efectivo de burbuja).

3).- La velocidad de ascenso del conjunto de burbujas es tá dado por la velocidad del ascenso de una simple burbuja.

$$u_b = u_o - u_{mt} + u_{br} \quad (16)$$

donde u_{br} se calcula según la ecuación (12).

4).- El mayor crecimiento de las burbujas se da cerca -- del distribuidor, dependiendo el tamaño de éstas, del tipo de distribuidor utilizado.

5).- El contenido de sólidos en la burbuja es despreciable, es decir, la fracción de huecos dentro de la burbuja, ϵ_p es uno; mientras que la fracción de huecos en la emulsión está dada por

$$\epsilon_p = \epsilon_{mt} \quad (17)$$

y por lo tanto

$$\frac{L_{mt}}{L_f} = \frac{1 - \epsilon_f}{1 - \epsilon_{mt}} \quad (18)$$

donde L_f es la altura del lecho fluidizado.

Con respecto a la fase emulsión, el modelo hace las siguientes consideraciones para poder explicar su comportamiento:

1).- Cada burbuja en ascenso arrastra una estela de material. Definiendo V_e como el cociente del volumen de estela a volumen de burbuja y tomando la fracción de huecos de la estela igual a la de la fase emulsión.

2).- Arriba del distribuidor, el sólido es arrastrado -- por las burbujas ascendentes formando la estela. Este sólido sube a una velocidad u_p , y es continuamente intercambiado con sólido de la emulsión, regresando totalmente a esta al llegar a la parte alta de la cama, descendiendo entonces a una velocidad u_s .

3).- La velocidad relativa entre el gas que asciende a través de la emulsión y el sólido que desciende u_s está dada por

$$u_p = u_f - u_s = \frac{u_{mf}}{\epsilon_{mf}} - u_s \quad (19)$$

4).- Solo se consideran camas con burbujas rápidas acompañadas de nubes delgadas.

La frecuencia de burbujas está dada por

$$n = \frac{u_p}{h} \quad (20)$$

donde n es la altura entre dos burbujas sucesivas. Relacionando las anteriores ecuaciones se obtienen la siguiente correlación para el diámetro de la burbuja.

$$d_b = \frac{1.5 u_b}{n} \cdot \frac{u_g - u_{mf}}{u_b - u_{mf}} \quad (21)$$

Resumiendo, se puede decir que el modelo presentado por Kunii y Levenspiel está diseñado para representar un lecho -- fluidizado altamente burbujeante, con canalizaciones y co --- rrientes parásitas despreciables y cuyo tamaño de burbujas es tá bajo control. Lo anterior se cumple cuando la velocidad -- inicial superficial de gas es mayor a dos veces la mínima de fluidización. Este modelo es consistente y capaz de explicar varios de los resultados encontrados experimentalmente sobre el movimiento de gas y los sólidos. El modelo pretende ser -- sencillo y para obtener resultados más exactos es necesario -- modificar el modelo.

c).- Otros Modelos.

Además de las correlaciones propuestas en sus respectivos modelos por Davidson [11] y por Kunii [3], muchas otras correlaciones han sido desarrolladas para describir el crecimiento de burbuja en un lecho fluidizado. Algunas de estas correlaciones, que se encuentran reportadas en la literatura, son, en orden cronológico, las siguientes:

1).- Una de las primeras correlaciones propuestas (1958) es la Yasui y Johanson [12], quienes utilizaron burbujas pequeñas durante sus observaciones experimentales, llegando a la siguiente expresión (h altura)

$$d_b = 1.6 \rho_p d_p \left(\frac{u_0}{u_{mf}} - 1 \right)^{0.68} h \quad (22)$$

2).- En 1967, Whietehed y Young [13] propusieron una correlación más complicada que la anterior, cuya forma es

$$d_b = 9.76 \left(\frac{u_0}{u_{mf}} \right)^{0.33} (0.032h)^{0.54} \quad (23)$$

3).- Park y sus colaboradores [14] desarrollaron en 1969 una ecuación similar a la propuesta por Yasui

$$d_b = 33.3 d_p^{1.5} \left(\frac{u_0}{u_{mf}} - 1 \right)^{0.77} h \quad (24)$$

4).- En el mismo año, Kato y Wen presentaron un trabajo [15], cuyas cualidades llevaron a otros autores a utilizarla [3], [6], [19]. La correlación que obtuvieron es

$$d_b = 1.4 \rho_p d_p \left(\frac{u_0}{u_{mf}} \right) h + d_w \quad (25)$$

donde d_{b0} es el diámetro de la burbuja saliendo del plato distribuidor.

$$d_{b0} = \left[\frac{6(u_0 - u_{mf})}{\pi N_0} \right]^{0.4} g^{0.2} \quad (26)$$

5).- Geldart [16] llegó a la siguiente expresión.

$$d_b = d_{b0} + 0.027 (u_0 - u_{mf})^{0.74} h \quad (27)$$

6).- Otra correlación propuesta es la de Rowe y Everett [17] que ofrece excelentes resultados, pero su uso está restringido debido a que involucra el cálculo de una serie de coeficientes a partir de las propiedades del sólido

$$d_b = -A + Bh + C \left(\frac{u_0}{u_{mf}} \right) + Dh \left(\frac{u_0}{u_{mf}} \right) + E \left(\frac{u_0}{u_{mf}} \right)^2 \quad (28)$$

7).- En 1973, Chiba y colaboradores [18] propusieron una correlación cuya forma es

$$d_b = d_{b0} \left[(2^{2k} - 1)(h - h_{b0}) / d_{b0} + 1 \right]^{2/3} \quad (29)$$

para $h < h_k$.

d_{b0} se calcula según la expresión.

$$d_{b0} = (6G / \pi K_b)^{0.4} / g^{0.2} \quad (30)$$

donde K_b es una constante que depende de las partículas sólidas h_{b0} es la altura del dorro arriba del distribuidor y h_k es la altura desde el fondo de la cama al lugar donde el radio de la burbuja es igual al arreglo de los agujeros del distribuidor.

d).-Modelo de Mori y Wen.

Experimentalmente, se ha observado que el diámetro de la cama tiene una gran influencia sobre el diámetro de la burbuja. Sin embargo, ninguna de las correlaciones anteriores toma en cuenta este hecho. Por lo tanto, el escalamiento en reactores de lecho fluidizado, utilizando dichas correlaciones, puede ser inadecuado.

Mori y Wen [9] desarrollaron un trabajo en el cual toman en cuenta el hecho anterior para estudiar el crecimiento de burbuja en un lecho fluidizado burbujeante. En el mismo trabajo proponen una correlación semi-empírica, que puede predecir el diámetro de burbujas razonablemente bien para camas con diámetros hasta de 1.3 Mts.

De acuerdo con sus estudios, las variables que afectan principalmente el diámetro de burbuja son cuatro, a saber, diámetro de burbuja inicial, diámetro de burbuja máximo, la altura desde el plato distribuidor y el diámetro de la cama.

1).- Diámetro de Burbuja Inicial.

La importancia que tiene el diámetro inicial de la burbuja, es evidente, ya que este tamaño será la base a partir de la cual las burbujas crecerán al ascender en el lecho.

Para el cálculo de este diámetro, Mori y Wen utilizan las correlaciones de Miwa. Tales correlaciones, para el caso de platos perforados.

$$d_b = 0.347 [S_c (u_o - u_{mc})] / n_d \quad (31)$$

y para un distribuidor de plato poroso

$$d_b = 0.00376 (u_o - u_{mc})^2 \quad (32)$$

2).- Diámetro Máximo de Burbuja.

Después de que las burbujas son formadas en el plato distribuidor de un lecho fluidizado, chocan y posiblemente son desviadas hacia el eje central de la cama debida a la pared. A medida que son desviadas o canalizadas hacia dicho eje, empiezan a crecer por coalescencia dada la alta densidad de burbujas que en un lecho fluidizado existe en el centro de la cama. Si la cama fuera lo suficientemente alta, habría un momento en el que todas las burbujas formarían un solo tren, subiendo por el eje central de la cama. Al diámetro de estas burbujas se le conoce como diámetro máximo de burbuja d_{bm} debido a coalescencia total. El diámetro máximo de burbuja, es un diámetro ficticio, sin embargo, es necesario calcularlo. La ecuación que el modelo propone para ello es

$$d_{bm} = 0.347 (\beta S_c (u_o - u_{mc}))^{2/3} \quad (33)$$

donde β es el número de diámetros de burbujas que debe ser -- mantenido entre ellas para evitar la coalescencia. De observaciones experimentales, es aproximadamente cuatro y la ecuación (33) puede escribirse

$$d_{bm} = 0.347 (1.87) (S_0 (u_0 - u_{mf}))^{2/5} \quad (34)$$

3).- Modelo de Crecimiento.

En base a las observaciones de Miwa y Werther, Mori y -- Wen propusieron una correlación del tipo

$$\frac{d_{bm} - d_b}{d_{bm} - d_{b0}} = e^{-kh/d_t} \quad (35)$$

donde k para propósitos prácticos es una constante, cuyo valor estadístico resultó ser de 0.3 con error medio de 3.1%. La ecuación final

$$\frac{d_{bm} - d_b}{d_{bm} - d_{b0}} = e^{-0.3h/d_t} \quad (36)$$

que es válida dentro de los siguientes rangos

$$0.5 < u_{mf} < 20 \text{ cm/seg}$$

$$0.006 < d_p < 0.045 \text{ cm.}$$

$$d_t < 130 \text{ cm.}$$

En aquellos casos en que el diámetro de la burbuja exceda a un tercio del diámetro de la cama, el lecho no sería libremente burbujeante y no es posible aplicar la correlación.

V.- TRANSFERENCIA DE CALOR Y MASA EN REACTORES DE LECHO
FLUIDIZADO.

El diseño de reactores de lecho fluidizado, al igual que otro tipo de reactores, requiere del conocimiento adecuado de las velocidades con que la masa y el calor se transfieren en el lecho, ya que pueden ser factores determinantes en el desarrollo de la reacción. [6]

a).- Velocidad de Transferencia.

1.- Transferencia calor.

La elevada velocidad de transferencia que puede ser alcanzada en un lecho fluidizado, es la razón principal por la cual este tipo de sistemas han sido utilizados en una gran variedad de procesos a temperaturas elevadas. En particular, los lechos fluidizados han sido utilizados para llevar a cabo reacciones exotérmicas y endotérmicas, así como, una gran cantidad de operaciones físicas.

Debido al mezclado vigoroso de la fase sólida, la transferencia de calor en el lecho es muy rápida y las conductividades térmicas muy elevadas, dando lugar a temperaturas uniformes en toda la cama.

La velocidad de transferencia de calor está determinada por

1).-Propiedades del Sólido: diámetro, densidad, calor específico, conductividad térmica.

2).-Propiedades del Gas: densidad, viscosidad, calor específico, conductividad térmica.

3).- Condiciones mínimas de fluidización.

4).- Velocidad superficial de gas.

5).-Características geométricas y estructurales de la cama.

Sin embargo, como se mencionó anteriormente, la transferencia de calor es muy rápida y por lo tanto, en el presente trabajo se omitirá el estudio detallado de este fenómeno con-

siderando que es posible alcanzar en corto tiempo temperaturas constantes en este tipo de reactores. Trabajos sobre este tema pueden ser encontrados en la literatura [3], [8].

2).-Transferencia Masa.

En todos los procesos de fluidización, tanto físicos como químicos, se presenta transferencia de masa. De acuerdo con el modelo de lecho burbujeante [3], los sólidos se encuentran distribuidos entre las burbujas, la nube y caída y la fase emulsión. En base a lo anterior podemos definir las siguientes relaciones:

$$Y_b = \frac{\text{Volumen de sólidos en las burbujas}}{\text{Volumen de Burbujas}}$$

$$Y_c = \frac{\text{Volumen de sólidos en la nube y su caída}}{\text{Volumen de Burbujas.}}$$

$$Y_e = \frac{\text{Volumen de sólidos en la emulsión.}}{\text{Volumen de Burbujas.}}$$

Los valores de Y_c pueden calcularse suponiendo que las burbujas son esféricas mediante la ecuación.

$$Y_c = (1 - \epsilon_{me}) \left[\frac{3U_{ms} / \epsilon_{me}}{U_{br} - U_{ms} / \epsilon_{me}} + \alpha \right] \quad (37)$$

y la transferencia de masa está dada por

$$-\frac{1}{4\pi r_c^2 a} \cdot \frac{dN_s}{dt} = k_{d,m} (C_{As} - C_{As}) \quad (38)$$

donde $k_{d,tot}$ es el coeficiente de transferencia del sólido y C_{Ab} es la concentración de A en la superficie del sólido y a se obtiene de la ecuación (2).

Como alternativa para la definición del coeficiente de transferencia de masa puede utilizarse el volumen como base - en lugar de la superficie.

$$-\frac{1}{\frac{4}{3}\pi r_0^3 v} \frac{dN_{As}}{dt} \approx -\frac{dC_{As}}{dt} = (k_d)_v (C_{As} - C_{As}) \quad (39)$$

b).- Coeficiente de Transferencia de Masa.

Una evaluación correcta de los coeficientes de transferencia de masa debe de tener presente el siguiente mecanismo: la absorción total comprende tanto, la absorción dentro de la burbuja por sólidos como la transferencia a la nube. Esta transferencia a la nube dará lugar a la absorción dentro de la nube y a una transferencia a la emulsión y finalmente, la transferencia a la emulsión dará lugar a la absorción dentro de la emulsión por sólidos.

Yoshida y Kunii [20] propusieron una forma de evaluar el coeficiente de intercambio de sólidos entre la burbuja y la fase densa $(K_{be})_b$ en base al postulado

$$\frac{1}{(K_{be})_b} = \frac{1}{(K_{be})_n} + \frac{1}{(K_{ce})_b} \quad (40)$$

donde $(K_{be})_b$ es el coeficiente de transferencia entre la burbuja y la nube y $(K_{ce})_b$ el coeficiente entre la nube y la emulsión. La ecuación propuesta es:

$$(K_{be})_b = 3 \frac{(1 - \epsilon_{ns}) U_{ns} U_b}{\epsilon_{nf} U_{nf} d_b} \quad (41)$$

Por otro lado Kayashi y sus colaboradores [21] encontraron que sus datos experimentales, seguían la relación

$$(K_{ce})_b = \frac{11}{d_b} \quad (42)$$

VI.- MODELO CINETICO DE UNA REACCION SOLIDO GAS NO CATALITICA.

El estudio de la cinética de una reacción heterogénea, resulta complejo, ya que involucra tanto el conocimiento de los efectos físicos, como el de los químicos. El no considerar cualquiera de estos efectos puede dar lugar a diseños inadecuados.

Una reacción de este tipo, consta de varias etapas: en la primera etapa, el reactivo fluido se difunde a través de la película estacionaria que rodea al sólido; en seguida, se difunde en los poros del sólido hasta adsorberse en la superficie del mismo. Una vez adsorbido, el gas reacciona con el sólido originando el producto, que posteriormente se desorbe y se difunde hacia el exterior.

En base a las anteriores consideraciones, se ha propuesto un modelo general [22] para describir la conversión de sólidos en una reacción sólido - gas.

a).- Modelo General

Este modelo considera que debido a que la reacción sobre la superficie de la partícula es más rápida que en el interior de esta, después de un cierto tiempo, se formará una capa inerte de producto alrededor del sólido.

En la etapa anterior a la formación de la capa inerte, - el balance de masa está dado por

$$D'_{Ca} \left(\frac{\partial^2 C_a}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_a}{\partial r} \right) - a k_0 C_{Ca} C'_a = 0 \quad (43)$$

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} = -k_0 C_{Ca} C'_a \quad (44)$$

que bajo las condiciones de frontera

$$\begin{aligned} D'_{Ca} \frac{\partial C'_a}{\partial r} &= k_{m,d} (C_{Ca} - C'_a) & @ \quad r=R \\ \frac{dC'_a}{dr} &= 0 & @ \quad r=0 \\ C_a &= C_{Ca} & @ \quad t=0 \end{aligned} \quad (45)$$

da el siguiente perfil de concentraciones para el gas

$$\frac{C'_a}{C_{Ca}} = \frac{1}{\Theta_{Ca}} \frac{\sinh(\alpha' \xi)}{\sinh \alpha' R} \quad (46)$$

donde

$$\xi = \frac{r}{R}$$

$$\phi_0' = R \sqrt{\frac{ak_0 C_{\infty 0}}{D_{ca}}} \quad (47)$$

y para el sólido

$$\frac{C_s}{C_{\infty}} = 1 - \frac{\sum \sinh(\phi_0' \xi_1)}{\xi \sum \sinh \phi_0'} \frac{\theta_0}{\theta_{\infty}} \quad (48)$$

donde

$$\theta_0 = k_0 C_{\infty 0} t \quad (49)$$

Una vez que la capa inerte de producto se ha formado, el balance de materia para esta capa puede escribirse

$$D_{ca} \left(\frac{d^2 C}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dC}{dr} \right) = 0 \quad (50)$$

quedando el perfil de concentraciones para el gas, expresado por

$$\frac{C_0'}{C_{\infty}} = \frac{C_{Am} \xi_1 \sum \sinh(\phi_0' \xi_1)}{C_{\infty} \xi \sum \sinh(\phi_0' \xi_1)} \quad (51)$$

donde C_{Am} es la concentración del componente A en la frontera entre las dos zonas.

Análogamente para el sólido

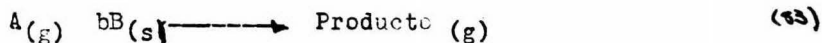
$$\frac{C_s}{C_{\infty}} = 1 - \frac{\xi_1 \sum \sinh(\phi_0' \xi_1)}{\xi \sum \sinh(\phi_0' \xi_1)} \quad (52)$$

Un caso que se presenta con relativa frecuencia es aquel

en el que la difusividad a través de la capa inerte, es mucho mayor que la difusividad a través del corazón del sólido. Bajo esta condición, este modelo se reduce a uno más sencillo, que fué desarrollado en forma independiente y que se conoce - como modelo de corazón con reactante o de corazón sin reaccionar.

b).- Modelo de Coraza sin Reaccionar (Coraza Decreciente).

Este modelo, que explica el comportamiento de reacciones irreversibles sólido-gas del tipo



supone que las partículas del sólido son esféricas, con un radio inicial R . Primero, la reacción toma lugar sobre la superficie de la partícula, pero a medida que la reacción progresa, la superficie de la reacción se mueve hacia el interior del sólido, dando lugar a la formación de una capa inerte y a un corazón sin reaccionar que se contrae con el tiempo. No obstante esto, el radio de la partícula no se altera y se considera que no se altera la geometría de este. Así mismo, supone que la zona de reacción es pequeña comparada con las dimensiones de la partícula.

A fin de que el fluido A alcance la superficie del corazón sin reaccionar, tiene que superar varias resistencias en serie que pueden ser:

1).- Difusión de A a través de la película estacionaria que rodea al sólido.

2).- Difusión de A a través de la capa inerte hacia la superficie de reacción.

3).- Reacción entre A y B en una pequeña zona.

4).- Difusión de los productos a través de la capa inerte hacia la superficie del sólido.

5).- Difusión de los productos hacia la corriente fluida.

Si la conversión de sólidos es controlada por la reacción química, la velocidad de reacción sobre la superficie del corazón contractante puede representarse por

$$-\frac{1}{4\pi r_c^2} \frac{dN_A}{dt} = -\frac{1}{4\pi r_c^2} \frac{dN_B}{dt} = k_c C_A \tag{54}$$

donde r_c es el radio del corazón sin reaccionar y k_c es la constante de reacción sobre la superficie.

El balance de materiales para el componente A puede escribirse en condiciones de régimen permanente

$$D_{ca} \left(\frac{\partial C_A}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) = 0 \tag{55}$$

con las siguientes condiciones de frontera

$$i) \quad D_{ca} \left(\frac{\partial C_A}{\partial r} \right)_{r_c} = k_{na} (C_{Ao} - C_{Aa})$$

$$ii) \quad D_{ca} \left(\frac{\partial C_A}{\partial r} \right)_{r_c} = \alpha k_s C_{Ao} C_{Aa} \tag{56}$$

$$iii) \quad -D_{ca} \left(\frac{\partial C_A}{\partial r} \right)_{r_c} = \alpha C_{Ao} \left(\frac{\partial r_c}{\partial t} \right)$$

con lo que puede obtenerse el perfil de concentraciones para el componente gaseoso

$$\frac{C_A}{C_{Ao}} = \frac{\left(1 + \frac{D_{ca}}{\alpha k_s C_{Ao} r_c} \right) \frac{1}{r_c} - \frac{1}{r}}{\left(1 + \frac{D_{ca}}{\alpha k_s C_{Ao} r_c} \right) \frac{1}{r_c} - \left(1 - \frac{D_{ca}}{k_{na} R} \right) \frac{1}{R}} \tag{57}$$

Por otro lado, el tiempo requerido para que el radio del corazón sin reaccionar sea reducido de R a r_c está dado [22]

$$t = \frac{R C_a}{C_a} \left[\frac{b}{3} \left(\frac{1}{k_{na}} - \frac{R}{D_a} \right) \left(1 - \frac{r_c^2}{R^2} \right) + \frac{P_b}{b k_c C_a} \left(1 - \frac{r_c}{R} \right) + \left(\frac{R b}{2 D_{ca}} \right) \left(1 - \frac{r_c^2}{R^2} \right) \right] \quad (50)$$

y por tanto, para la conversión total

$$\zeta = \frac{R C_a}{C_a} \left(\frac{b}{3 k_{na}} + \frac{P_b}{b k_c C_a} + \frac{R b}{6 D_{ca}} \right) \quad (51)$$

Si las velocidades de difusión son muy rápidas en comparación con la velocidad de reacción química estas ecuaciones se reducen a

$$t = \frac{R P_b}{b k_c C_a} \left(1 - \frac{r_c}{R} \right) \quad (60)$$

$$\zeta = \frac{R P_b}{b k_c C_a} \quad (61)$$

En el caso en el cual las velocidades de difusión son equivalentes o menores a la de reacción, estos factores deben ser tomados en cuenta [3], [22].

Una forma conveniente de expresar el tiempo de reacción, es ligándolo con la conversión. Puesto que la conversión está dada por

$$X = 1 - \frac{(4/3)\pi r_c^3}{(4/3)\pi R^3} = 1 - \left(\frac{r_c}{R}\right)^3 \quad (62)$$

la ecuación (60) toma la forma

$$t = \frac{R \rho_0}{b k_c C_0} (1 - (1-X)^{1/3}) \quad (63)$$

y

$$\frac{t}{\tau} = 1 - (1-X)^{1/3} \quad (64)$$

expresiones que serán utilizadas posteriormente.

c).- Conversión de Sólidos.

La conversión X_B en un reactor de lecho fluidizado de -- una partículas de sólido depende de su tiempo de residencia - dentro del reactor; sin embargo, cada partícula tiene un tiempo de residencia distinto , que da lugar a distintas conversiones de sólido. Por lo anterior, es necesario hablar de una conversión media de sólidos, que puede expresarse [3]

$$1 - \bar{X}_B = \int_0^{\infty} (1 - X_B)_{\text{partícula}} E(t) dt \quad (65)$$

donde

$$E(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} \quad (66)$$

combinando estas ecuaciones con la ecuación (64)

$$1 - \bar{X}_B = \int_0^{\infty} \left(1 - \frac{X}{2}\right)^3 \frac{e^{-t/\tau}}{\tau} dt \quad (67)$$

que al ser integrada

$$1 - \bar{X}_B = 1 - 3\left(\frac{\tau}{2}\right) + 6\left(\frac{\tau}{2}\right)^2 - 6\left(\frac{\tau}{2}\right)^3 \left(1 - e^{-3/\tau}\right) \quad (68)$$

resultado que puede extenderse a reactores en serie con los - que mejora el rendimiento de la reacción.

d).- Conversión de Gas y Sólidos.

En general, se puede decir que los sólidos reaccionan -- con una corriente fluida cuya concentración varía constante -- mente dentro de un mismo punto debido a las fases existentes, a la coalescencia entre burbujas, al tipo de distribuidor y a otros efectos de menor importancia. Sin embargo, la concentración de salida del gas y la del sólido no son variables independientes, sino que están relacionadas entre sí por medio de la velocidad de reacción y el balance de masa. Una forma conveniente de resolver el problema, involucra el cálculo de las concentraciones en cada una de las fases y la concentración promedio de las mismas, con lo cual, es posible conocer el valor medio de la concentración de la corriente gaseosa. Por medio de la ecuación de la velocidad de reacción y el balance de material se ligan las conversiones de reactivo sólido y gaseoso.

VII.- DESARROLLO DEL MODELO DE SIMULACION.

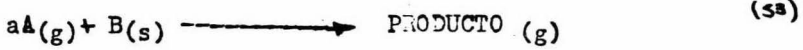
A).- Introducción.

Los capítulos anteriores han tenido como objeto establecer los conceptos y describir los modelos que son necesarios para simular en forma adecuada un reactor no catalítico, de lecho fluidizado sólido-gas.

En el modelo de simulación que se propone en el presente trabajo, se ha seleccionado para la descripción del comportamiento de la cama el modelo de lecho burbujeante propuesto -- por Kuni y Levenspiel [3] en vista de que ofrece la posibilidad de obtener buenos resultados sin ser un modelo complicado. El modelo de crecimiento de burbujas, que como se ha insistido es de gran importancia en el estudio de lechos fluidizados, ha sido elaborado combinando el modelo propuesto por Kato y Wen [15] y la correlación presentada en el trabajo de Torii y Wen [9] debido a que ésta es la mejor correlación existente a la fecha, como se mencionó en el capítulo IV. En la descripción de la conversión de sólidos se considera que es posible aplicar el modelo de coraza decreciente [22], que es el paso químico al que controla y que los flujos de sólido y gas están en corriente paralela. Estas últimas consideraciones no restringen el empleo de modelo de simulación ya que pueden modificarse con cierta facilidad cuando sea necesario.

b).- Modelo Matemático

El desarrollo que se presenta a continuación considera reacciones sólido-gas del tipo



con flujos paralelos del sólido y del gas.

El modelo supone que se conocen los siguientes datos:

- 1). Velocidad superficial del gas.
- 2). Densidad de la partícula y del gas.
- 3). Velocidad terminal de las partículas
- 4). Diámetro y altura de la cama
- 5). Gastos y concentraciones iniciales de sólido y gas.
- 6). Viscosidad del gas.
- 7). Constante de reacción superficial. (1er. orden)
- 8). Altura incipiente del lecho.
- 9). Fracción de huecos a condiciones mínimas de fluidización.

1) Comportamiento de la Cama.

Según establece el modelo de Kato y Wen un lecho fluidizado puede representarse por "N" compartimientos en serie - - siendo la altura de cada uno de ellos igual al diámetro que tienen las burbujas a esa altura de la cama (Fig 2). Así mismo, considera que el espacio vacío dentro de la fase emulsión es igual al que tendría la cama en condiciones mínimas de fluidización y que las burbujas crecen continuamente a lo largo de la cama hasta alcanzar un tamaño máximo. Por último, ya que se ha demostrado que la transferencia de calor en un le -

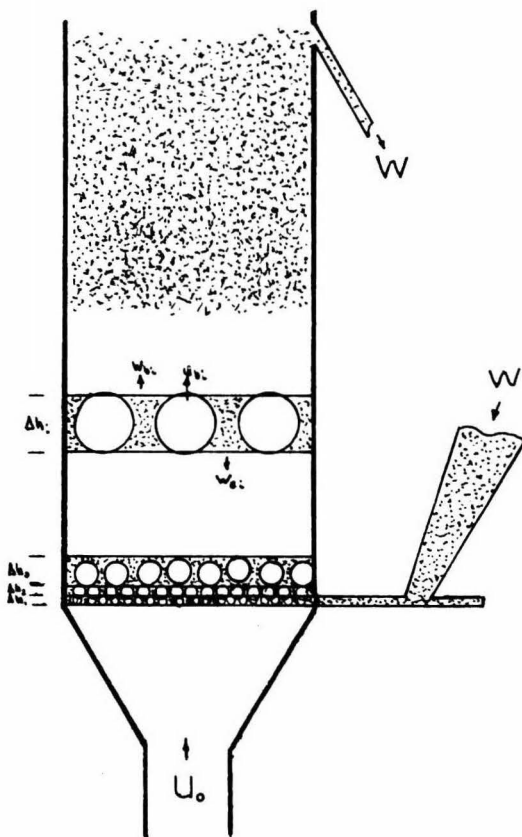


fig. 2

cho fluidizado es muy grande, supone que la cama opera bajo - condiciones isotérmicas.

Por otro lado, como se hace ver en el capítulo IV, el -- diámetro de burbuja a través de la cama puede calcularse por medio de la correlación

$$d_b = d_{bm} + (d_{bo} - d_{bm}) e^{-0.3h/d_c} \quad (69)$$

d_{bo} es el diámetro inicial de burbuja y está dado por

$$d_{bo} = 0.00376 (u_0 - u_{mf})^2 \quad (32)$$

si el distribuidor es un plato pososo y por

$$d_{bo} = 0.347 S_c (u_0 - u_{mf}) / w_d \quad (31)$$

para un plato perforado.

d_{bm} es el diámetro máximo de burbuja

$$d_{bm} = 0.64889 (S_c (u_0 - u_{mf}))^{0.64} \quad (20)$$

y u_{mf} la velocidad mínima de fluidización

$$u_{mf} = \frac{\lambda}{\rho_s d_r} \left[\left[(33.7)^2 + \frac{0.0408 d_r^3 \rho_g (\rho_r - \rho_g) g}{\lambda^2} \right]^{1/2} - 33.7 \right] \quad (71)$$

la altura del lecho fluidizado está dada por

$$L_f = \left(L_{mf} (u_0 - u_{mf}) / 0.711 (g d_{bp})^{1/2} \right) + L_{mf} \quad (72)$$

donde el diámetro de burbuja promedio d_{bp} se define como

$$d_{bp} = d_{bm} + (d_{bo} - d_{bm}) e^{-0.3 L_{mf} / z_d} \quad (73)$$

En el mismo capítulo se hace mención a la fracción de huecos

$$1 - \epsilon = \frac{L_{mf}}{L_f} (1 - \epsilon_{mf}) \quad ; \quad h \leq L_{mf} \quad (74)$$

y

$$1 - \epsilon = \frac{L_{mf}}{L_f} (1 - \epsilon_{mf}) - \frac{L_{mf} (1 - \epsilon_{mf}) (h - L_{mf})}{2 L_f (L_f - L_{mf})} \quad (75)$$

para

$$L_{mf} \leq h \leq H$$

Por lo tanto, el número de burbujas, η en el compartimiento i está dado por

$$\eta = \frac{6 S_{oi}}{\pi (\Delta h_i)^2} \cdot \frac{\epsilon - \epsilon_{mf}}{1 - \epsilon_{mf}} \quad (76)$$

donde $\Delta h_i = d_{oi}$.

Conocido el número de burbujas, se puede calcular el volumen que estas ocupan en el i -ésimo compartimento

$$V_{bi} = \eta \frac{\pi}{6} (\Delta h_i)^3 \quad (77)$$

el volumen ocupado por la fase nube, V_{ci} ,

$$V_{ci} = \eta \frac{\pi}{6} (\Delta h_i)^3 \left(\frac{3 u_{ms} / \epsilon_{mf}}{u_{br_i} - u_{mf} / \epsilon_{mf}} \right) \quad (78)$$

donde u_{br_i} está definida por la ecuación

$$u_{br_i} = 0.711 (g d_{bi})^{1/2} \quad (12)$$

el resto del volumen es ocupado por la fase emulsión

$$V_{ei} = S_c \Delta h_i - V_{bi} - V_{ci} \quad (79)$$

El coeficiente total de intercambio entre la fase burbuja y la emulsión puede calcularse (Capítulo V) por medio de

$$(K_{be})_{bi} = 11 / d_{bi} \quad (42)$$

Partiendo de las definiciones de la distribución de sólidos se tiene (ec.37)

$$Y_c = (1 - \epsilon_{mf}) \left(\frac{3 u_{mf} / \epsilon_{mf}}{u_{br_i} - u_{mf} / \epsilon_{mf}} + \alpha \right) \quad (37)$$

y análogamente

$$Y_e = (1 - \epsilon_{mf}) \frac{V_{ei}}{V_{hi}} \quad (80)$$

donde alfa es la relación entre el volumen de la cauda y el volumen de la burbuja.

Suponiendo que el flujo neto de sólidos hacia la parte superior de la cuna es W , el flujo total hacia arriba del compartimiento (i) al compartimiento (i+1) es

$$W_{bi} = \left(\frac{W}{S_c} + \alpha \frac{S_{bi} \cdot U_{bi}}{S_{bi}} \right) S_{bi} \tag{81}$$

donde $S_{bi} = \eta \frac{P}{A} (\Delta h_i)^2$

y el flujo total hacia abajo (del compartimiento (i+1) al (i)) está dado por

$$W_{q(i)} = \left(\frac{\alpha S_{bi} \cdot U_{bi}}{S_c - S_{bi}} - \frac{W}{S_c} \right) (S_c - S_{bi}) \tag{82}$$

Una vez que estas propiedades han sido calculadas, es posible, en base al modelo de Kato y Wen, distinguir tres zonas en el lecho fluidizado: el último compartimiento (N), los compartimientos intermedios (i) y el primer compartimiento (1), ya que los compartimientos intermedios son semejantes entre sí, mientras que el primero está relacionado con las corrientes alimentadas y el último con las corrientes de salida. Debido a las condiciones iniciales que se tiene, es necesario para el caso de flujo paralelo, calcular el reactor a partir del compartimiento (N) descendiendo a través de los compartimientos intermedios hasta terminar con el primero.

Para calcular el compartimiento (N) es necesario suponer el valor que tiene la constante de velocidad de reacción K_r , y el valor de la concentración del gas en fase burbuja C_{gbn} , en ese compartimiento, con lo cual es posible calcular la concentración del gas en la fase emulsión mediante la ecuación

$$C_{gci} = \frac{(K_{bc})_{ci} C_{gbi}}{(K_{bc})_{ci} + Y_{ci} K_{rc}} \quad (84)$$

y suponiendo que el mezclado de sólido es completo como se menciona en el capítulo V la concentración promedio del gas es

$$\bar{C}_{gi} = \frac{Y_{ci} C_{gbi}}{Y_{ci} + Y_{ci}} + \frac{Y_{ci} C_{gei}}{Y_{ci} + Y_{ci}} \quad (85)$$

siendo el tiempo medio de residencia de la partículas en ese compartimento

$$\bar{t}_i = (\alpha V_{bi} + V_{ci} + V_{ei}) (1 - \epsilon_{mf}) / W \quad (86)$$

combinando las ecuaciones 61, 68, 85 y 86 es posible calcular la conversión media de sólidos \bar{X}_{sn}

Mediante un balance total del compartimento (N-1) al -- primero, se puede calcular la concentración de sólidos en el compartimento (N-1)

$$U(C_g - C_{g0(i-1)})/a = WC_{s0} + (W_{ei}(1 - \bar{X}_{si}) - W_{b(i-1)}) C_{s(i-1)} \quad (87)$$

y el balance de materia en el compartimento (N) es

$$\frac{1}{a} UC_{g0(N-1)} X_{g(N)} = W_{b(N-1)} C_{s(N-1)} \bar{X}_{s(N)} \quad (88)$$

como puede apreciarse en la figura 3, y que será satisficcho - cuando el valor de K_T supuesto sea el correcto.

En los compartimientos intermedios, el procedimiento de cálculo es esencialmente el mismo, aunque no es necesario suponer la concentración del gas en la corriente de salida C_{gb_i} , ya que este valor ha sido calculado en el paso anterior. En estos casos, los balances de materia son, para la sección restante.

$$\frac{1}{Q}(C_{g0} - C_{gb(i-1)}) = W \cdot C_{a0} + W_{a(i)} \cdot C_{a(i)} - W_{b(i-1)} \cdot C_{a(i-1)} \quad (89)$$

y para el compartimiento (i)

$$\frac{1}{Q} C_{gb(i-1)} X_{g_i} = (W_{b(i-1)} \cdot C_{a(i-1)} + W_{b(i)} \cdot C_{a(i)}) \bar{X}_{a(i)} \quad (90)$$

que de nuevo, es satisficcho cuando se ha encontrado el valor correcto de K_T .

Para calcular el primer compartimiento, ya no es necesario hacer suposiciones debido a que las corrientes de entrada y de salida son datos o han sido calculadas. El valor de K_{T1} , se calcula mediante la ecuación

$$(K_T)_{b_1} = (K_{a1})_{b_1} + Y_{c_1} K_{r_1} - \frac{(K_{a1})_{b_1}^2}{(K_{a1})_{b_1} + Y_{c_1} K_{r_1}} \quad (91)$$

donde $(K_T)_{b_1}$ está dado por

$$(K_T)_{b_1} = ((U \cdot C_{g0} / C_{g_{b_1}}) - U) / V_{b_1} \quad (92)$$

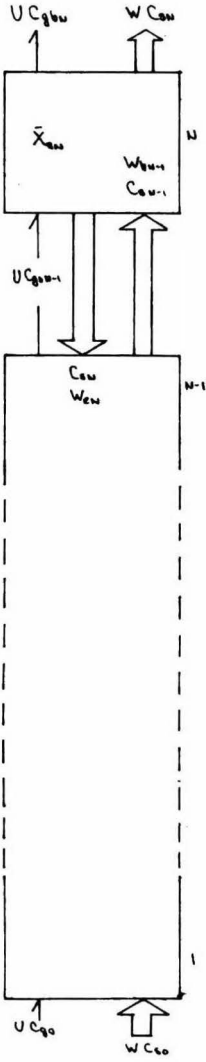
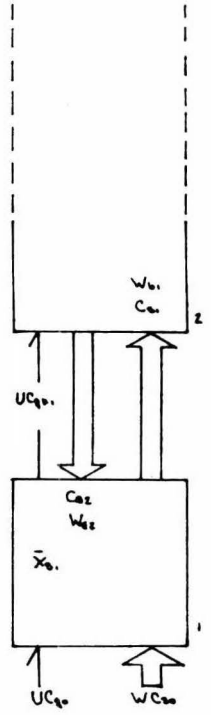
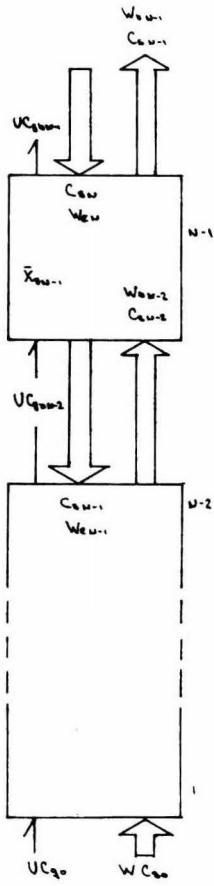


fig. 3



y el balance de materia en el primero compartimento es

$$\frac{1}{Q} U C_{g0} \bar{X}_{g1} = (W C_{s1} + W C_{s2}) \bar{X}_{s1} \quad (93)$$

la condición necesaria para que esta ecuación se cumpla, es la de que las concentraciones de las corrientes de salida del reactor C_{g1} y C_{s1} sean las correctas. En otro caso, el valor de C_{g1} debe ser modificado.

Una de las posibles secuencias de cálculo se ilustra en la Fig. 4.

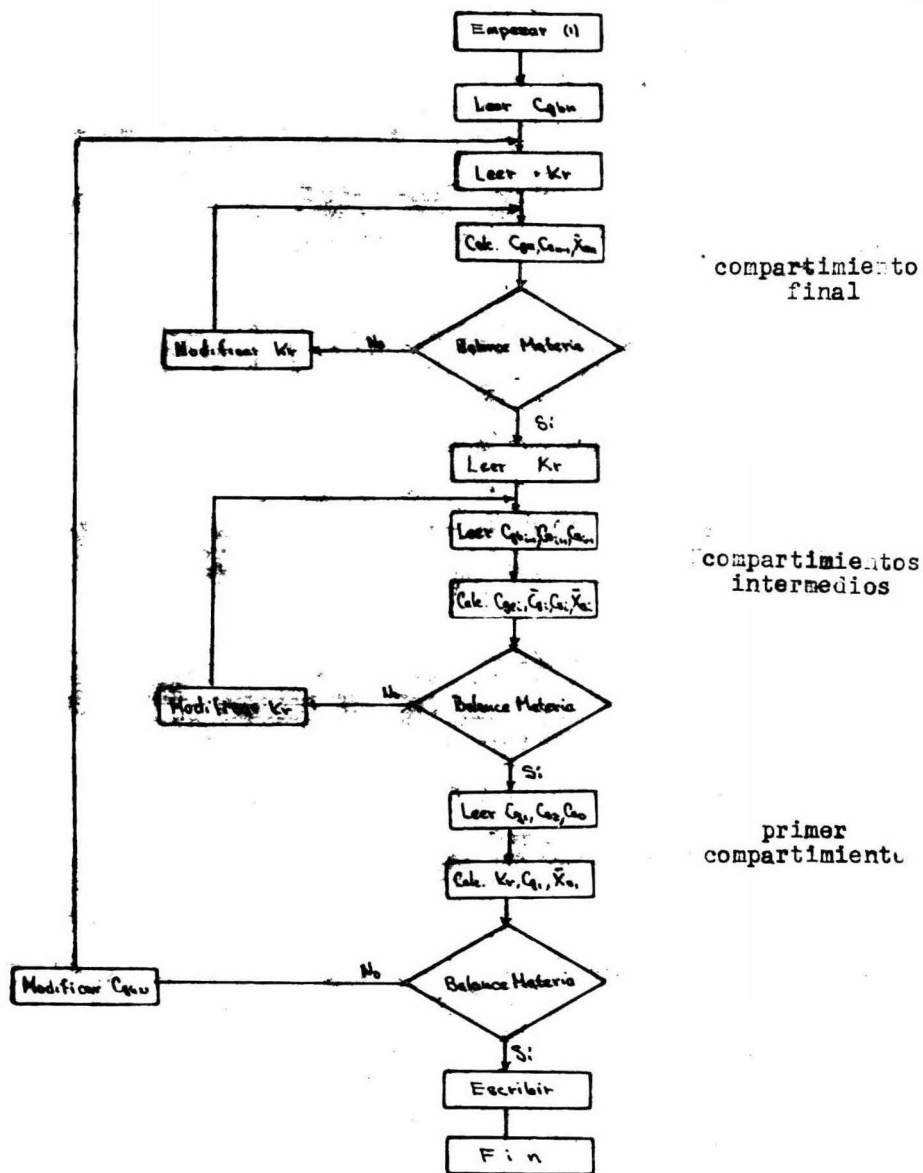


fig. 4.

VIII.- RESULTADOS.

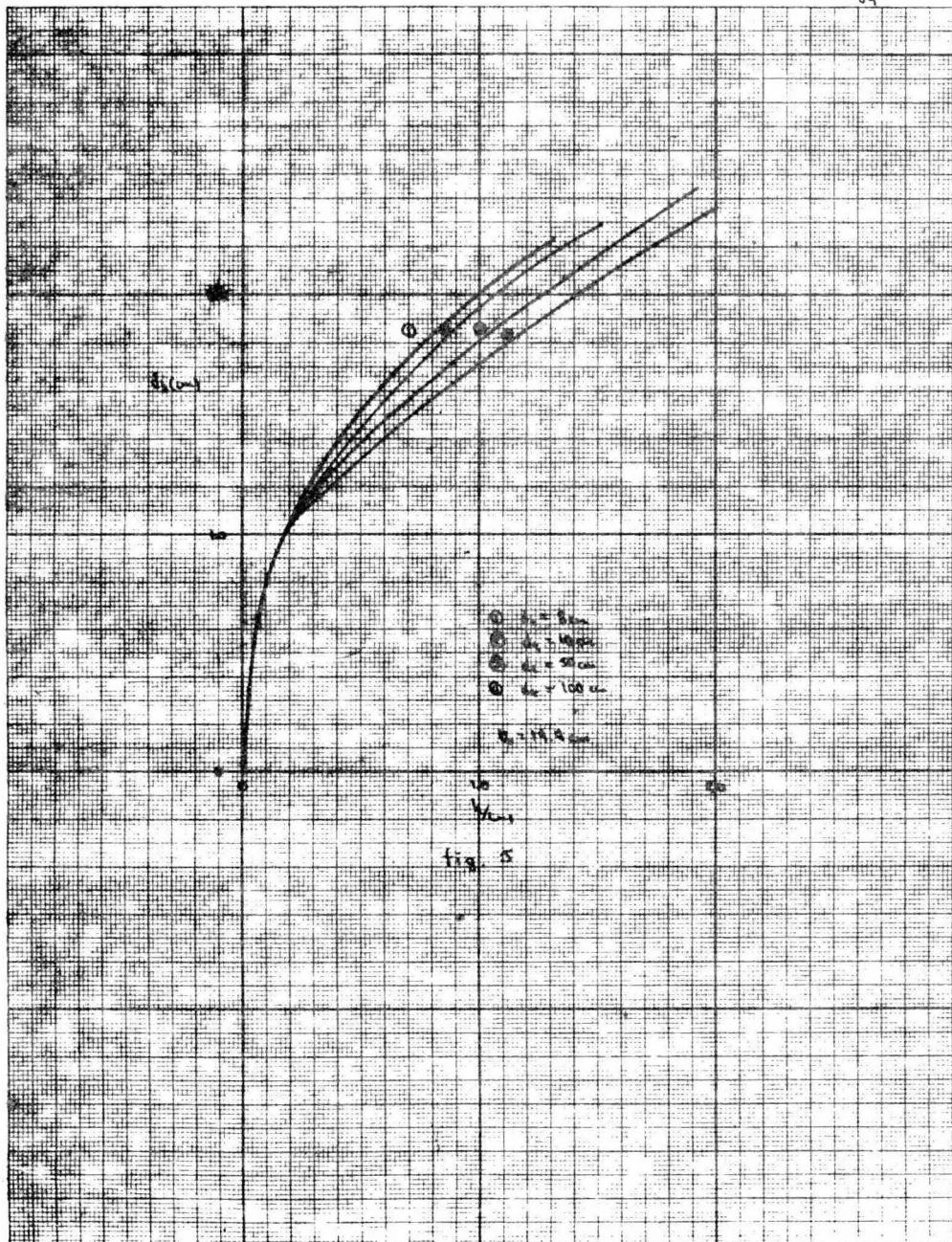
El modelo de simulación desarrollado en el capítulo VII, fué implementado en una computadora Burroughs 6700 del Centro de Servicios de Cómputo de la U.N.A.M.

En la programación del modelo se utilizó lenguaje Fortran. Una copia del listado del programa se anexa en el apéndice.

Para generar los perfiles de conversión de sólido y gas, así como, la variación del diámetro de burbuja a través del lecho, es necesario alimentar al programa además de los datos -- mencionados en el capítulo anterior (u_c , ρ_s , ρ_g , etc.) los valores de las tolerancias aceptadas en los balances de materia.

Al variar los valores de algunos parámetros con respecto a un cuadro básico de datos, es posible hacer un análisis de sensibilidad, es decir, estudiar la importancia relativa que estos parámetros tienen en el comportamiento del lecho fluidizado.

Así por ejemplo, en la figura 5, la influencia que el diámetro de la cama tiene en el crecimiento de las burbujas a lo largo del lecho se hace evidente. En la parte baja de la cama el diámetro de burbuja no depende del diámetro de aquella -- sino tan solo del tipo de plato distribuidor utilizado. Sin embargo, a medida que las burbujas ascienden en la cama, el diámetro de ésta determina, en parte el crecimiento de las burbujas.

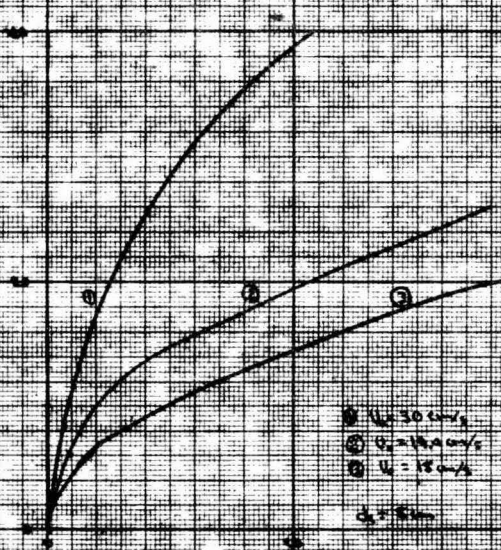


A una altura igual a la mínima de fluidización, el diámetro de burbuja obtenida para una cama de 5 cm es 3% mayor al obtenido para una cama de 10 cm de diámetro, 10.5% mayor al de una cama de 50 cm. y 17% con respecto al de una cama de 100 cm de diámetro. Estos resultados subrayan la importancia que el diámetro de la cama ejerce en un lecho fluidizado.

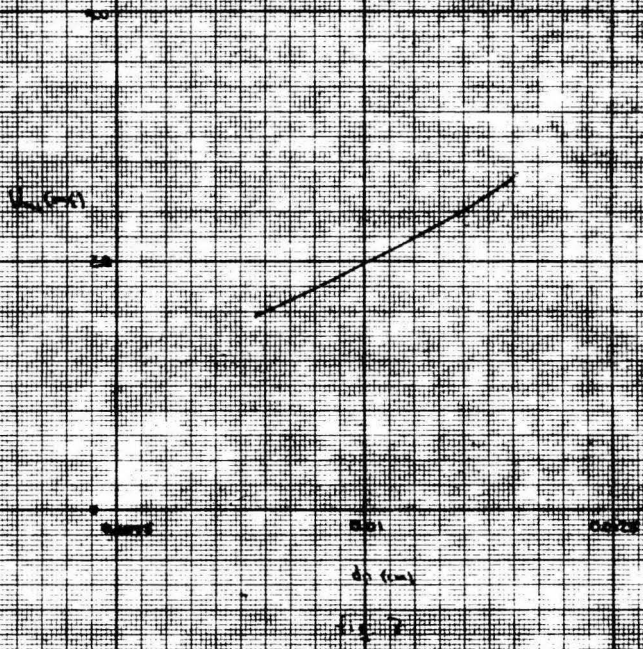
Otro factor que afecta el comportamiento del lecho (figura 6) es la velocidad superficial del gas, que, a diferencia del diámetro de la cama, sí tiene influencia sobre el diámetro inicial de las burbujas. La importancia de la velocidad superficial del gas es tal que un incremento del 100% de la velocidad a 15 cm/s, da lugar a un aumento del 162% en el diámetro de burbuja. Desde luego, es necesario que el valor de la velocidad superficial del gas esté entre los valores correspondientes a la velocidad mínima de fluidización y a la velocidad terminal de las partículas, es decir, dentro del rango de velocidades en que tiene lugar la fluidización.

En la figura 7 se aprecia la marcada dependencia de la velocidad mínima de fluidización con respecto al diámetro de partícula. Cabe recordar que el modelo de Mori-Wen [9] restringe el tamaño del diámetro de partícula al rango comprendido entre 0.006 y 0.045 cm. Sin embargo, para diámetros mayores a 0.015 cm. la ecuación 6 debe ser sustituida por la ecuación 3 en el modelo de simulación.

Uno de los objetivos del programa de simulación es la de



h, cm
fig. 6



predecir los perfiles de conversión que se obtienen en un lecho fluidizado operando bajo ciertas condiciones. Las figuras 8 a 16 ilustran algunos de los resultados obtenidos concernientes a este punto.

La influencia del diámetro de partícula sobre la velocidad mínima de fluidización ilustrada en la figura 7, se refleja en el perfil de conversión como se muestra en la figura 8. Al aumentar el diámetro de partícula se obtienen burbujas de diámetro menor dando lugar a mayores conversiones. Así mismo, la velocidad superficial del gas tiene influencia no solo sobre el crecimiento de las burbujas sino que también juega un papel muy importante en la conversión. Esto se observa en las marcadas diferencias que presentan los perfiles de conversión a distintas velocidades superficiales (Fig. 9). Para obtener -- una conversión de 0.506 en el sólido con una velocidad superficial de 30 cm/s se requiere utilizar una altura de 3.93 veces mayor a la que se necesitaría si la velocidad fuera de la mitad.

La figura 10 muestra una ligera disminución en la conversión al aumentar la fracción de huecos a condiciones mínimas de fluidización.

Como consecuencia del papel que juega el diámetro de la cama en el crecimiento de burbujas tenemos la marcada diferencia en los perfiles de conversión que se observa en la figura 11. Así podemos observar que cuando se trabaja con un lecho de

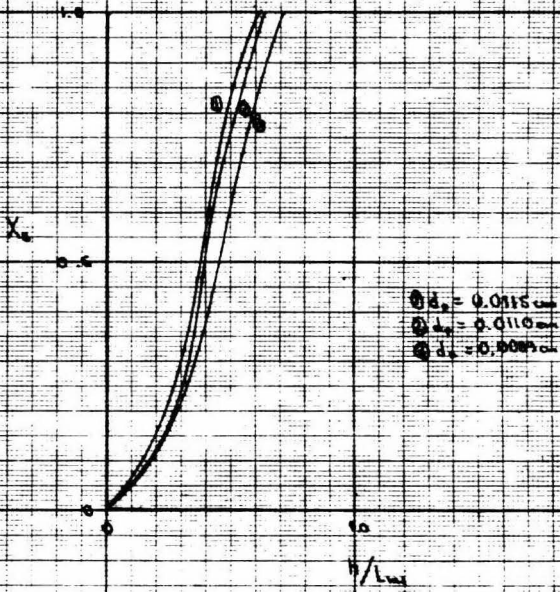
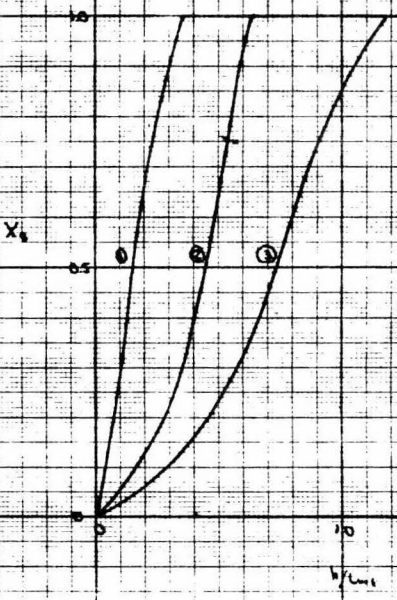
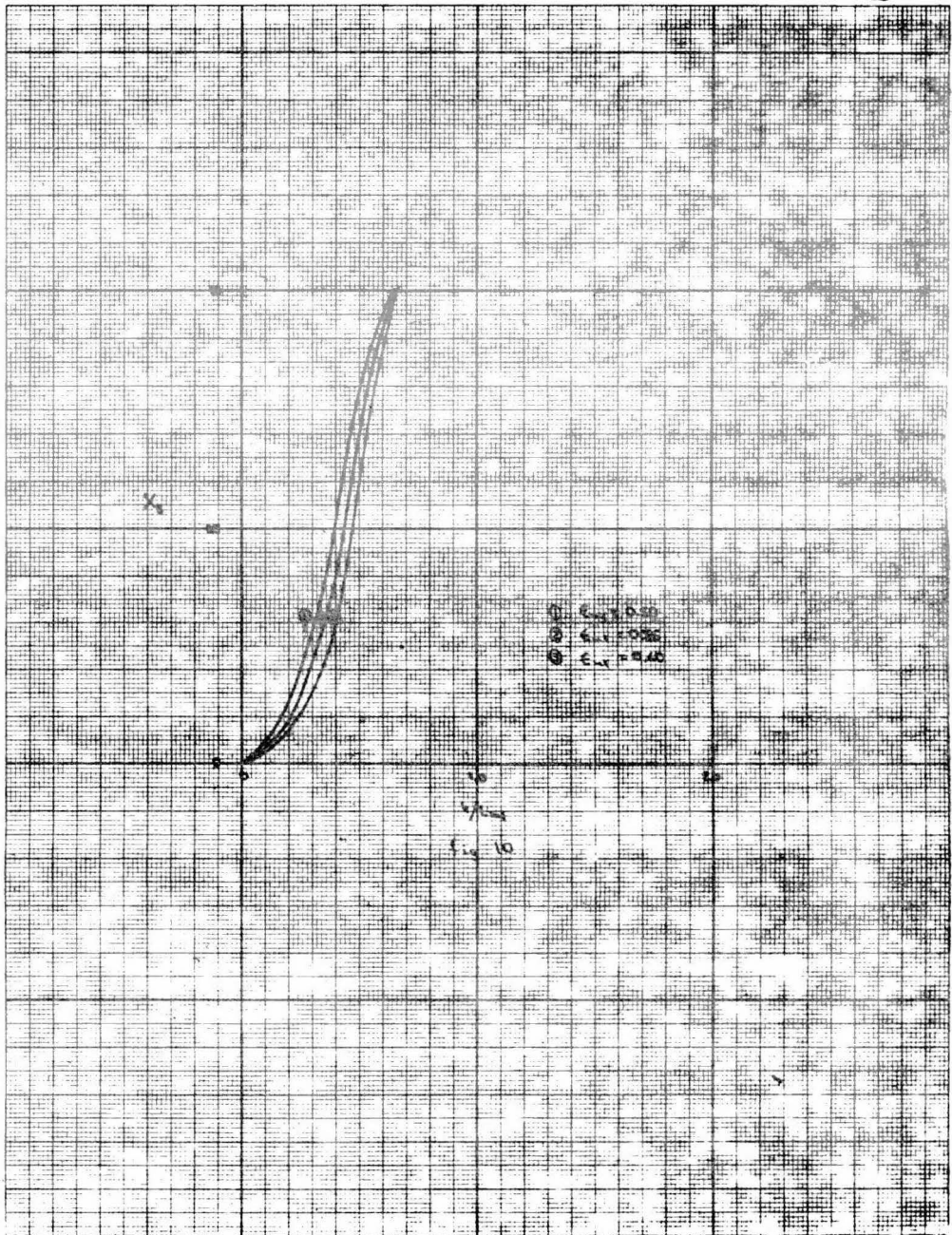


Fig. 8



- ① $U_0 = 15 \text{ cm/s}$
 - ② $U_0 = 19.4 \text{ cm/s}$
 - ③ $U_0 = 30 \text{ cm/s}$
- $d_x = 5 \text{ cm}$

fig. 9



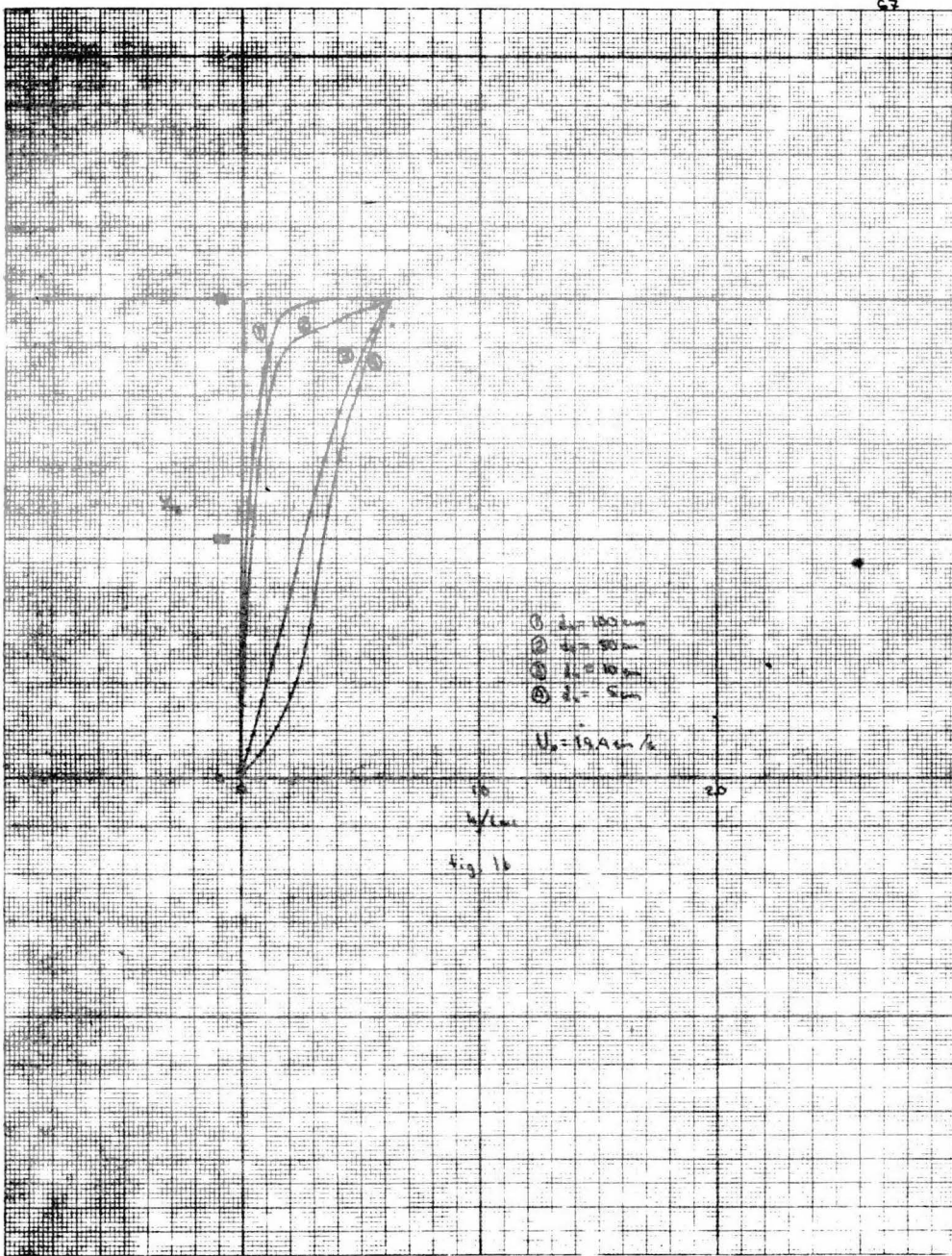
- ① $d_w = 100 \mu\text{m}$
- ② $d_w = 50 \mu\text{m}$
- ③ $d_w = 10 \mu\text{m}$
- ④ $d_w = 5 \mu\text{m}$

$$U_0 = 19.4 \text{ cm/s}$$

10
4/cm

20

fig. 1b



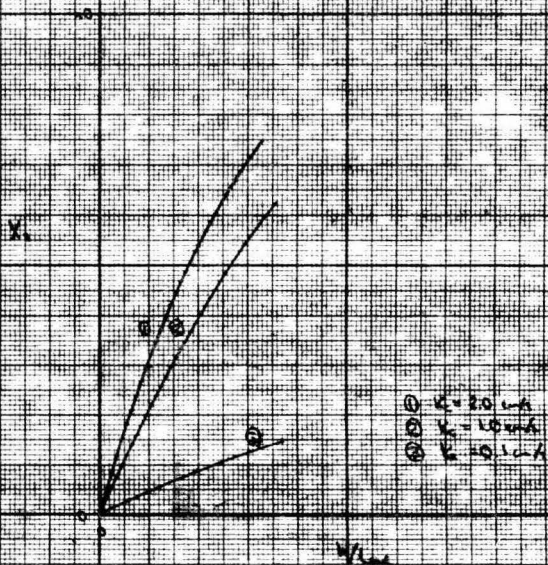


Fig. 12

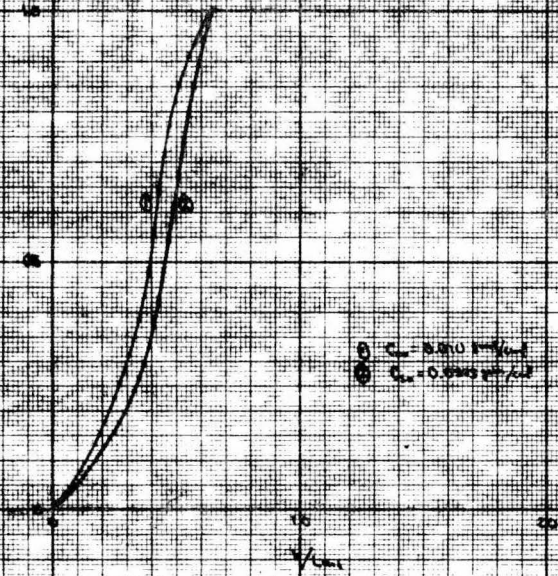


fig. 13

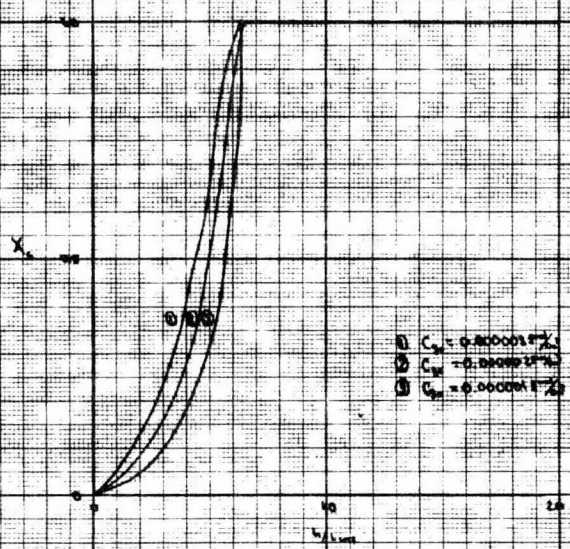
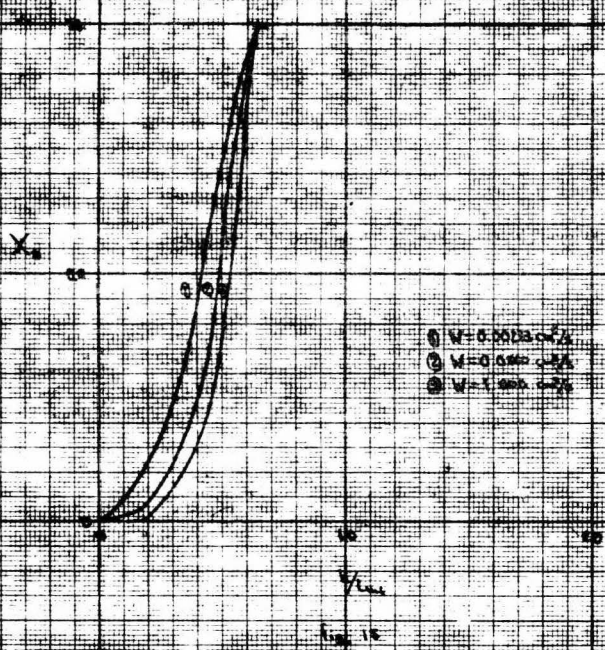
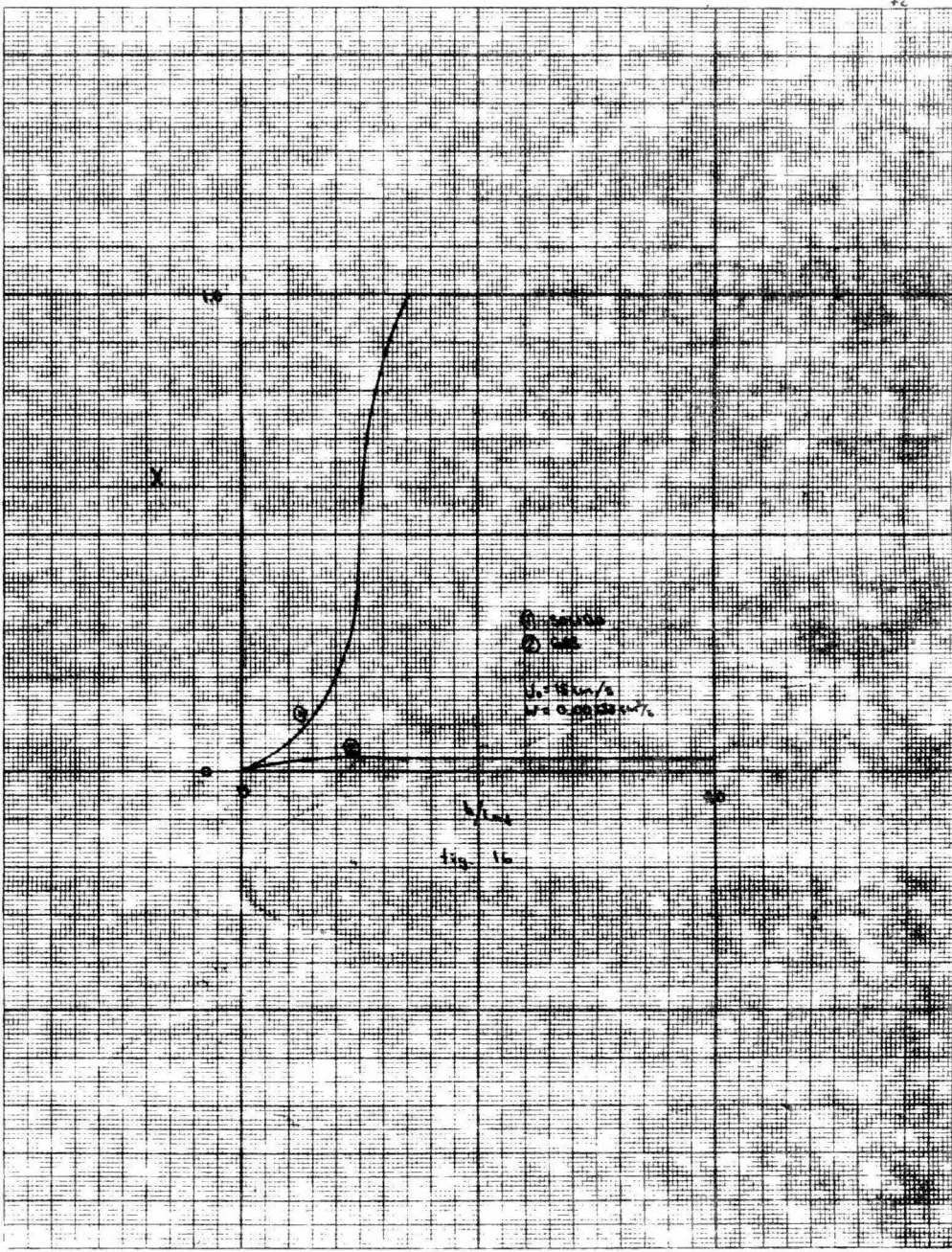


fig 14





50 cm. de diámetro, para alcanzar una conversión de 0.5 se requiere una altura de cama de bola 13.5% con respecto a la necesaria para una cama de 5 cm. de diámetro.

En la figura 12 se encuentran graficados los perfiles de conversión de sólidos obtenidos con distintos valores de la -- constante de reacción sobre la superficie de las partículas, -- es decir, a distintas temperaturas de reacción.

Las figuras 13 y 14 ilustran los perfiles obtenidos con distintas concentraciones iniciales del sólido y gas respectivamente.

Una variación en el gasto de sólidos da lugar, como podía esperarse, a distintas conversiones para la misma altura del lecho.

Por último, la figura 16 muestra una gráfica comparativa entre los perfiles de conversión del sólido y del gas en función de la altura del lecho. La conversión tan baja en el gas es debida al orden de reacción y a que el sólido era en este caso el reactivo limitante.

En el cuadro 1 se listan los datos que se tomaron como base; algunas de las propiedades calculadas bajo estas condiciones aparecen en el cuadro 2.

CUADRO

I

ALTURA MINIMA FLUIDIZACION	3.000000
VELOCIDAD SUPERFIC GAS	19.400000
DENSIDAD DE LA PARTICULA	6.000000
SECCION TRANSVERSAL CAMA	19.63
CONCENTRACION INICIAL GAS	0.000000
CONCENTRACION INICIAL SOLIDO	0.057300
GASTO DE SOLIDO	0.002330
GASTO DE GAS	380.82
EPSILON MF	0.500000
ALFA	0.100000
ALTURA TOTAL	5.000000
CONSTANTE REACCION SUPERFICIE	0.100000
DIAMETRO PARTICULA	0.011000

CUADRO II

I= 1		I= 2	
LF=	.24177E+01	DB=	.108438E+01
EF _S (I)=	.68955E+00	UB _R (I)=	.23178E+02
NU(I)=	.12087E+02	VB(I)=	.80698E+01
VC(I)=	.63820E+01	KB _{EB} (I)=	.10144E+02
GAC(I)=	.44543E+00	GAE(I)=	0.423469
SB(I)=	.11163E+02	UB(I)=	.40160E+02
WB(I)=	.44831E+02	WE(J)=	.44829E+02
		DHT=	.10844E+01
I	H(I)	DE(I)	
2	.19306E+01	.16907E+01	
EF _S (I)=	.68955E+00	UB _R (I)=	.28941E+02
NU(I)=	.49720E+01	VB(I)=	.12582E+02
VC(I)=	.75715E+01	KB _{EB} (I)=	.45061E+01
GAC(I)=	.35088E+00	GAE(I)=	0.518012
SB(I)=	.11163E+02	UB(I)=	.45824E+02
WB(I)=	.51265E+02	WE(J)=	.51262E+02
		DHT=	.27751E+01

CUADRO

II

(cont.)

I	H(I)	DB(I)
3	.38886E+01	.22380E+01
I= 3	EPS(I)= .68955E+00	UBR(I)= .33297E+02
NU(I)= .26377E+01	VH(I)= .16655E+02	VC(I)= .84884E+01
KHEH(I)= .42152E+01	GAC(I)= .30483E+00	GAE(I)= 0.564061
BR(I)= .11103E+02	UH(I)= .50280E+02	
WB(I)= .6127E+02	VE(J)= .56125E+02	DHT= .50131E+01
N= 3		

IX.- CONCLUSION .

El presente estudio puede separarse en dos partes. La primera de ellas es el estudio bibliográfico de los lechos fluidizados y la segunda el desarrollo del modelo de simulación. Esto dá lugar a conclusiones referentes tanto a la fluidización como al modelo de simulación en sí.

Dada la facilidad con que un reactor de lecho fluidizado puede operar en forma isotérmica, es recomendable su empleo en aquellos casos en los que un control de temperatura estricto sea necesario.

Como consecuencia del vigoroso mezclado que se observa en este tipo de reactores es posible obtener productos de calidad uniforme.

El tamaño de las partículas de sólido es importante para obtener condiciones de fluidización. Si las partículas de sólido son demasiado grandes, la fracción de huecos será mayor y el gas tenderá a fluir a través de los espacios vacíos sin fluidizar el lecho. Ese tamaño de las partículas también tiene influencia sobre la conversión como se puede ver en la figura 3, donde se encuentra graficada la conversión del sólido contra la altura del lecho a diferente diámetro de partículas. Es interesante observar que un pequeño incremento en el diámetro de las partículas da lugar a un ligero aumento en la conversión. La razón de este aumento es que al aumentar el tamaño de las partículas de sólido disminuye el diámetro de las burbujas de

gas y en consecuencia la velocidad de reacción es mayor.

La velocidad superficial del gas es la variable determinante en el comportamiento general del lecho, ya que como se menciona en el capítulo anterior, un incremento del 100% en la velocidad a 15 cm/s dá lugar a un incremento del 162 % en el diámetro de la burbuja. Además, esta velocidad determina también el diámetro inicial de las burbujas, su velocidad de ascenso, el mezclado de sólidos, la fracción de huecos y finalmente, la conversión. Con respecto a esta última se encontró que para obtener una conversión de 0.5 en el sólido con una velocidad superficial de 30 cm/s se requiere utilizar una altura de cama de casi cinco veces la que se necesitaría si la velocidad fuera de la mitad.

El efecto que el diámetro de la cama tiene sobre el crecimiento de las burbujas debe ser considerado en el estudio de lechos fluidizados y sobre todo al hacer "escalamientos", ya que influye en el grado de conversión alcanzado. Este efecto ha sido, no obstante ignorado por muchos investigadores.

Al aumentar el flujo de sólidos disminuye la conversión de éstos para una misma altura. Esto se debe a que el tiempo de residencia medio es menor.

Los diámetros iniciales de burbuja son determinados en gran parte por el tipo de plato distribuidor utilizado. El modelo aquí desarrollado hace distinción entre dos tipos de platos distribuidores, a saber, platos perforados y platos perforados.

Existen sin embargo, muchos otros factores que influyen en el tamaño inicial de las burbujas. Las correlaciones de Chiba (ecuaciones 31, 32) usadas en el modelo para calcular el diámetro inicial de burbuja toman en cuenta algunos de ellos. A pesar de esto, no todos los resultados obtenidos son satisfactorios. Por ejemplo, en la figura 11 podemos apreciar en la parte baja del reactor, que mientras las curvas 1, 2 y 3 muestran una velocidad inicial de reacción alta que disminuye al aumentar la altura del lecho, la curva 4 presenta una velocidad inicial baja que se incrementa con la altura. Esto lleva a pensar en posibles desviaciones del modelo en esta zona. Es uno de los trabajos que sobre el tema se han publicado [6], los autores evitan calcular los diámetros iniciales de burbuja asignándoles en forma arbitraria algún valor, probablemente por haber encontrado desviaciones similares. El asignar arbitrariamente un tamaño inicial a la burbujas constituye una alternativa empírica que puede conducir a buenos resultados.

En las zonas de conversión media, las gráficas muestran resultados que son en general más satisfactorios que los iniciales, ya que están de acuerdo con el comportamiento observado en este tipo de reacciones.

Otros resultados que requieren especial atención son los puntos finales de conversión. En las figuras 10, 11, 13, 14, 15 los puntos finales de conversión corresponden a una misma altura. Esto se debe a que el cálculo de los compartimientos

se hace en base al tamaño de las burbujas considerando tan solo las propiedades de tipo físico. Cada compartimiento es representado posteriormente por un punto y la conversión calculada en el compartimiento es asignada a ese punto. Por lo anterior, los puntos extremos de conversión no son asignados al lugar real donde suceden sino a un punto que ha sido previamente calculado. Es entonces necesario analizar con precaución los puntos extremos de conversión. Al estudiar los resultados obtenidos por el modelo se deben tener presentes estas consideraciones con el fin de evitar errores.

Las variables que tienen más importancia en el diseño y operación de un lecho fluidizado, son la velocidad superficial del gas, el tamaño de las partículas de sólido y el diámetro de la cama. Esta importancia reside, como se dijo en párrafos anteriores, en la influencia que tienen sobre el crecimiento de las burbujas y, como consecuencia sobre las conversiones alcanzadas por el sólido y el gas.

El modelo puede ser mejorado utilizando una correlación de crecimiento de burbujas que incluya un término de temperatura, ya que todas las correlaciones existentes han sido obtenidas a temperatura ambiente, es decir, muy por debajo de las temperaturas a las cuales operan los reactores normalmente.

El modelo puede extenderse fácilmente a reacciones químicas mediante la inclusión del modelo cinético apropiado, como se muestra en el capítulo VI.

Se puede utilizar el modelo de simulación para un patrón de flujo a contracorriente modificando las balanzas de materia en el programa. Este patrón de flujo da lugar a un sistema más inestable, que el de flujo paralelo y, por lo tanto, de más difícil convergencia. [23]

El modelo de simulación está constituido por un conjunto de modelos particulares. Los modelos utilizados son: el modelo propuesto por Mori y Wen [9] para predecir el crecimiento de las burbujas a lo largo del lecho fluidizado; el diámetro inicial de las burbujas se basa en el trabajo de Chiba y sus colaboradoras [18]; el modelo de cama burbujeante propuesto por Kunii y Levenspiel [3] es utilizado para analizar los fenómenos de la cama en base al tamaño de las burbujas; el modelo utilizado para la conversión de sólidos es el de coraza decreciente [22] y finalmente, los flujos de sólido y gas en el lecho fluidizado son aproximados mediante el modelo de Kato y Wen [15]. Cualquiera de estos modelos puede ser substituido en el modelo de simulación por un modelo superior, debiéndose obtener mejores resultados.

El método de convergencia utilizado en el programa - un Regula Falsi modificado - puede ser reemplazado por otro más rápido y eficiente.

X.- BIBLIOGRAPHIA.

- [1] E.E.U.A., Pneumatic Handling of Powdered Materials, Constable, and Company, London, 1963.
- [2] F.N. Rowe and K.S. Sutherland, Solids Mixing Studies in Gas Fluidised Beds, Trans, Instn. Chem. Engrs., 42, T 55, - - 1964.
- [3] D. Kunii O. Levenspiel, Fluidization Engineering. J. Wiley and Sons, (1969)
- [4] C.Y. Wen and Y.H. Yu, A.I.Ch.E. Journal, 12, 610 (1966)
- [5] J.M. Perry, Chemical Engineer's Handbook, Mc. Graw-Hill -- 4th ed.
- [6] K. Yoshida and C.Y. Wen. Chem. Eng. Sc., 25, 1395 (1970)
- [7] B.A. Patridge and P.N. Rowe, Trans. Instn. Chem. Engrs., - 44, 349, (1966)
- [8] J.F. Davidson, Fluidization. Univ. Press. (1967)
- [9] S. Mori and C.Y. Wen, Recent Advances in Reaction Kinetics Symp. Washington (1974)
- [10] J.F. Davidson, R.C. Paul, S.S. Smith and H.A. Duxburg, - - Trans. Inst. Chem. Engrs., 37, 323 (1959)
- [11] S.F. Danielson and D. Harrison, Fluidized Particles, Cambridge University Press, New York, (1963)
- [12] G. Yasui and L.W. Schanson, A.I. Ch. E. Journal, 4, 445 -- (1958)
- [13] A.B. Whitehead and A.D. Young, Proc. Intn. Symp. on Fluidization, 246, Netherland (1968)
- [14] W.H. Park W.K. Kang., C.E. Jones and E.L. Osberg, Chem. -- Eng. Sci., 24, 851 (1960)

- [15] K. Kato and, C.Y. Wen, Chem. Eng. Sci., 24, 1351 (1969)
- [16] D. Geldart, Power Technol., 4, 41 (1970-1971).
- [17] F.N. Rowe and D.S. Everett, Trans, Instn. Chem Eng., 50, 55 (1972)
- [18] T. Chiba, K. Terashima and J. Kobayashi, J. o J. of Chem. Eng., Japan, 6, 78 (1973)
- [19] I.D. Shaw , T.W. Hoffman, A. Orlickas and P.M. Reilly, The Canadian Journal of Chem. Eng., 50, 637 (1972)
- [20] K. Yoshida and. D. Kunii, Journal of Chem. Eng. Japan, 1 , 11, (1968)
- [21] H. Kobayashi, F. Arai and T. Sunagawa, Kagaku Kogaku, 31 , 239 (1967)
- [22] C. Y. Wen, Ind. and Eng. Chem., Monthly, 60, 34 (1968)
- [23] F. Barnés. Entrevista personal.

APENDICE

NOTACION

- a Superficie específica por volumen de cama cm^{-1}
- a' Superficie específica por volumen de sólido cm^{-1}
- b Coeficiente estequiométrico
- b Constante
- C, C' Coeficientes de arrastre
- C_s Concentración de sólidos g/cm^3
- C_g, C_g, C_g, C_g Concentración de gas en la burbuja, emulsión, promedio o inicial mol/cm^3
- d, Diámetro efectivo de burbuja cm.
- d_o Diámetro de orificio cm.
- d_p Diámetro de partícula cm.
- d_i Diámetro inicial de burbujas cm.
- d_m Diámetro máximo de burbujas cm.
- d_c Diámetro de cama cm.
- D Coeficiente de difusión cm^2/seg .
- E(t) Función de distribución de edades seg^{-1}
- g aceleración de la gravedad cm/seg^2
- g Factor de conversión.
- h Altura cm.
- H Altura total cm.
- k Constante de reacción sobre superficie cm/seg
- k_t Coeficiente de transferencia de masa cm/seg
- k_r Constante de reacción sobre superficie $\text{cm}^3/\text{mol}\cdot\text{seg}$.
- (K_g) Coeficiente de intercambio gaseoso entre nube y burbuja
- (K_g) Coeficiente total de intercambio gaseoso entre burbuja y emulsión en base al volumen de burbujas seg^{-1}

- (k) Coeficiente global de transferencia de masa. seg^{-1}
- k_r Constante de velocidad de reacción para lecho fijo. seg^{-1}
- (k_v) Constante de reacción en base al volumen de sólidos. seg^{-1}
- k_g Coeficiente global de velocidad de reacción. seg^{-1}
- L Altura del lecho fluidizado burbujeante. cm
- L_m Altura de la cama a condiciones mínimas de fluidización. cm
- N Número de orificios.
- N_A Número de moles de A.
- N_u Número de orificios por unidad de área. cm^{-2}
- P Presión. atm
- ΔP Caída de Presión. atm.
- r Radio. cm
- r_c Radio contraído. cm.
- R Radio de la partícula. cm.
- r_b Radio de la burbuja. cm.
- r_c Radio de la nube. cm.
- S Sección transversal de la cama. cm^2
- t Tiempo. seg.
- \bar{t} Tiempo de residencia medio. seg
- U Caudal de gas. cm^3/seg
- u_b Velocidad de ascenso de una burbuja. cm/seg
- u_{br} Velocidad de la burbuja con respecto a la emulsión. cm/seg .
- u_{mf} Velocidad de ascenso a condiciones mínimas de fluidización
- u_s Velocidad superficial de gas a condiciones mínimas de fluidización cm/seg .
- u_g Velocidad del gas a través de un orificio. cm/seg .

- u, Velocidad media de sólidos en la emulsión. cm/seg.
- u, Velocidad terminal de partículas . cm/seg
- u, Velocidad superficial del gas. cm/seg
- v Flujo volumétrico de gas. cm^3/seg
- V₁ Volumen de burbuja . cm^3
- V₂ Volumen de nube. cm^3
- V₃ Volumen de emulsión. cm^3
- W₁ Flujo de sólidos hacia arriba . cm^3/seg
- W₂ Flujo de sólidos hacia abajo. cm^3/seg
- W Flujo neto de sólidos . cm^3/seg
- X₁ Conversión de gas .
- X₂ Conversión de sólido
- α Razón de volumen de cauda a volumen de burbuja
- β Número de diámetro de burbujas de separación para evitar -- coalescencia.
- γ₁ Razón de volumen de sólidos en las burbujas a volumen de -- burbuja.
- γ₂ Razón de volumen de sólidos en la nube a volumen de burbuja
- ε Fracción de huecos
- ε₁ Fracción de huecos a condiciones mínimas de fluidización.
- ξ Distancia adimensional
- η Número de burbujas
- μ Viscosidad del gas. g/cm-sec
- ρ Densidad g/cm³
- τ Tiempo necesario para la conversión total . seg
- φ Esfericidad de la partícula.

PROGRAMA.

El programa de simulación está escrito en lenguaje Fortran y su empleo es relativamente sencillo. Las unidades que se manejan a lo largo de él son las correspondientes al sistema c.g.s.

Para obtener los perfiles de conversión en un reactor de lecho fluidizado es necesario alimentar al programa los siguientes datos: En la primera tarjeta, los valores correspondientes a la constante de reacción sobre superficie, el diámetro de partícula, dos valores del radio contráido para iniciar los cálculos, el área transversal del reactor, la viscosidad del gas, el coeficiente estequiométrico para el gas y el número de orificios en el plato distribuidor; en la segunda tarjeta deben estar los valores de las tolerancias aceptadas en los balances de materia; la tercer tarjeta deberá contener los datos de altura mínima de fluidización, velocidad superficial de gas, densidad de la partícula, velocidad terminal, concentración inicial de gas, gasto de sólidos y de gas; en la tarjeta siguiente, la gravedad, la fracción de huecos a condiciones mínimas de fluidización, Alfa, la altura total del reactor y la densidad del gas; a continuación debe ir el valor correspondiente a la variante Delta que puede ser en general de 0.1 y que sirve únicamente para cálculos internos del programa; las dos últimas tarjetas llevan respectivamente los valores de las concentraciones de salida del gas y la concen-

tracción inicial e sólidos.

La nomenclatura utilizada en el programa corresponde a la empleada para la elaboración del modelo; por ejemplo DB corresponde a la variable d_b , VB a V_b , etc. Solo las variables utilizadas para la convergencia del modelo de simulación, no tienen equivalente en el modelo del capítulo VII. Estas variables son FI que es una variable asignada a los errores obtenidos en los balances de materia y RC1 y RC2 que son utilizadas para distinguir entre radios positivos y negativos. Sin embargo el uso de estas últimas variables es interno y no aparece en los resultados del programa .


```

13 UC(I)=
  UC(I)= (1)
  WFI= (6,1)
14 FORAT(///,10X) I=,15X, ' -(I) ',23, ' UB(I) ',///
  WRITE(6,15)I,UB(I)
15 FORAT(///,10X) I=,10X,15.5,10X,E15.5)
16 IF(DHT=RT+L) GO TO 31
  EPS(I)=1.-L/UF*(1.-EPSF)
  UE=UE+1
20 LPS(I)=1.-LH/UL*(1.-EPSHF)+(LH*(1.-EPSHF)*(DHT=LH))/(2.0*LF*(LF
  1-LH))
21 UE*(I)=711*SQRT(C*UB(I))
  UC(I)=*.5*(C1+41*(I)**2)*(EPS(I)-EPSF)/(1.-EPSF)
  VB(I)=*.5*(I**2+16*(I)**3)/6.
  VC(I)=VB(I)+C1*UMF/EPHF/UB(I)-C1/EPHF
  VL(I)=ST*(I)-UB(I)-VC(I)
  WRITE(6,22)I,LPS(I),UB(I),UC(I),VB(I),VC(I),VE(I)
22 FORAT(///,10X) I=,2X,E15.5, ' EPS(I)= ',2X,E15.5,5X, ' UBR(I)= ',
  1X,E15.5,5X, ' LUN(I)= ',2X,E15.5,5X, ' VB(I)= ',2X,E15.5,5X, ' VC(I)= ',
  1X,E15.5,5X, ' VE(I)= ',2X,E15.5)
  REEL(I)=1./VE(I)
  GAE(I)=(1.-EPHF)*(C1+41*(I)**2)*UMF/EPHF/(CUB(I)-UMF/EPHF)+ALFA)
  GAC(I)=(1.-EPHF)*VE(I)/VB(I)
  SB(I)=UB(I)*3+1+16/4*(UB(I)**2)
  GBC(I)=UB(I)*5.711*SQRT(G*UB(I))
  WE(I)=(C/ST+(ALFA*SB(I)+UB(I)/SU(I)))/SU(I)
  J=J+1
  UE(J)=(ALFA*SB(J)+UB(J)/(ST-SU(J)))/ST*(ST-SB(J))
  IF(I.NF.1) DHT=DHT+DHC(I)
  WRITE(6,23)UE(I),GAE(I),GAC(I),SB(I),UB(I),WB(I),WE(J),DHT
23 FORAT(///,10X) UE(I)=,E15.5,3X, ' GAC(I)= ',E15.5,3X, ' GAE(I)= ',E
  15.5,7X, ' SB(I)= ',E15.5,3X, ' UB(I)= ',E15.5,7X, ' WB(I)= ',E15.5,3
  15.5,2X, ' DHT= ',E15.5)
  IF(DHT.RE.N) GO TO 31
30 CONTINUE
31 N=I
  WRITE(6,32)
32 FORAT(///,10X) N=,10)

```

C
C
C

****CALCULO DE LAS PROPIEDADES QUIMICAS DE EL LECHO FLUIDIZADO****

```

REAL(5,33)C1,C2
33 FORAT(2F10.6)
  CGE(1,1)=1
  CGC(1,1)=1
  REAL(5,44)CGC
  DO 40 K1=1,N
40 I=N
  W=1
  UC=1
  UE=5.1
  RC(I,L)=FC(I,L)
41 KR(I,L)=24.*UC(I,L)**2*KC/PH**3
  CGE(I,L)=RC(I,L)*CGC(I,1,K1)/(K*EB(I)+GAE(I)+KR(I,L))
  CGC(I,L)=FC(I,L)*CGC(I,1,K1)+GAE(I)+CGE(I,L)/(GAC(I)+GAE(I))
  TAC(I,L)=RC(I,L)*CGC(I,2)*KC*CGC(I,L)
  IPS(I)=(LH*VB(I)+VC(I)+VE(I))/(1.-EPSHF)/J
  T=TP(I)/TAC(I,L)
  XSP(I,L)=3.*T-6.*T**2+6.*T**3*(1.-EXP(-1./T))

```

```

KRB(I)=K*BE(I)+GAC(I)*KBE(I)-K*EB(I)**2/(K*BE(I)+GAE(I)*KRC(I)
CGR(I-1,1,1)=CGP(I,1,1)*PL(I)+BC(I)+VE(I)+CGG(I,1,KL)/U
CS(I-1,1)=(C*CGC-CG(I-1,1,KL))/A+*CS(I)/HE(I)*(1.-XSP(I,L))-WB(I
1-1))
K=I-1
CG(I)=(CGC-CGR(I,1,KL))/CGG
XC(I,L)=(CGR(K,1,KL)-CGR(I,1,KL))/CGR(K,1,KL)
IF(I-1,1) GO TO 42
CS(I,L)=CS(I-1,L)*(1.-XSP(I,L))
FI(I,L,1)=H(K)*CS(I,L)*XSP(I,L)-U/A*CGR(K,1,KL)*XC(I,L)
GO TO 43
42 XSP(I+1,1)=XSP(I+1,2)
CS(I+1,1)=CS(I+1,2)
FI(I,L,1)=(HE(K)*CS(K,L)+L(I+1)*CS(I+1,2))*XSP(I+1,L)=U/A*CGR(K
1,1,KL)*XR(I,L)
43 IF(ABS(FI(I,L,KL))>LE*TOLE+ND*KR(I,L)*U*0.01)GO TO 50
44 FOPRAT(FI0,C)

```

C
C ** METODO DE CONVERGENCIA **
C

```

IF(C(I,L,1).GT.0.0) GO TO 105
106 IND1=11
RC1(IND1)=C(I,L)
I1=I1+1
107 IF(C(I,L,1).LT.-.5) GO TO 108
GO TO 109
108 IND2=12
RC2(IND2)=C(I,L)
I2=I2+1
109 IF(C1(IND1).EQ.0.0)GO TO 110
IF(C2(IND2).EQ.0.0)GO TO 111
110 IF(L.EQ.1) GO TO 45
RC(I,2)=(RC1(I,2)*FI(I,2,KL)-RC(I,2)*FI(I,1,KL))/(FI(I,2,KL)-FI(I,1
1,KL))
RC(I,L)=RC(I,2)
GO TO 41
111 IF(L.EQ.1)GO TO 45
RC(I,2)=(RC1(IND1)+RC2(IND2))/2.
GO TO 41
45 CONTINUE
50 I=I-J
IND1=IND1+1
IND2=IND2+1
IF(C(I,E),1)GO TO 52
51 CONTINUE
52 NRE(1)=(U*CGP/CGR(I,1,KL)-1)/VR(1)
B=KRP(1)*GAE(1)-K*EB(1)+GAE(1)*H*EB(1)
C=SQRT(B**2+4.*GAC(1)*GAE(1))*RB(1)*K*EB(1)
N1(1,1)=(C-1)/(C-2.*GAC(1)*GAE(1))
N2(1,1)=(C+1)/(C-2.*GAC(1)*GAE(1))
IF(C*P.LT.0)N1(1,1)=N2(1,1)
CG(I,1,1)=K*BE(I)*CG(I,1,1)/((K*EB(I)+GAE(1)*KRC(1,1))
CGP(I,1)=(GAC(1)+CG(I,1,1)*GAE(1)+CGE(1,1))/((GAC(1)+GAE(1))
LE(I,1)=(CG-CGR(I,1,KL))/ZCG
TOL(I,1)=CG(I,1,1)*KRC(I,1)
FI(I,1)=CG(I,1)*WB(I,1)+TOL(I,1)*(1.-XSP(I,1))/A
TOL(I,1)=CG(I,1)*KRC(I,1)
XSP(I,1)=XSP(I-1,1)-6.*XSP(I-1,1)*T)
XC(I,1)=(CGR(I,1,KL)-CG(I,1,KL))/CG(I,1,KL)

```

```

11 C(1,1)=C(1,1)+C(2)*C(1,1)*XSP(1,1)-J*C(2)*C(1,1)/A
12 IF(CABS(FI(1,1)*KL)).LE.TOL)GO TO 61
13 IF(C(1,1).GT.C)GO TO 61
14 C=C*(.99**I)
15 CGR(N,1,2)=(CGB(N,1,1)*FI(1,1,2)-CGB(N,1,2)*FI(1,1,1))/(FI(1,1,2)-
16 FI(1,1,1))
17 IF(CGB(N,1,2).GT.C)GO TO 61
18 CGR(N,1,2)=C/C
19 GO TO 61
20 CONTINUE
61 IF(CGB(1,1,1).LT.C)CGR(1,1,KL)=C
21 CSS(1)=C*(1.-XSP(1,1))
22 IF(C(1).LE.C)C(1)=C.-
23 XSP(1)*C(1,1)
24 J=J+1
25 CSS(I)=CSS(I)*C(1.-XSP(I,2))
26 XSS(I)=(C-CSS(I))/C
70 CONTINUE
71 WRITE(6,72)
72 FORMAT(//////,10X,' COMPARTIMENTO',10X,' CONVERSION GAS',10X,
73 '1' CONVERSION SOLIDO')
74 IF(C(1,1).GT.C)XSS(I)=1-I
75 FORMAT(////,10X,'5'10X'E12.6,'14'10X'E12.6)
76 WRITE(6,74)
77 FORMAT(//////,20X,' CONCENTRACION BURBUJA')
78 WRITE(6,75)(CGR(I,1,KL),K=1,2,I=1,N)
79 FORMAT(////,10X,'15'10X'E15.6,'16'10X'E15.6)
80 FORMAT(////,20X,' ALTURA MINIMA FLUIDIZACION',3X,F10.6,////,20X,' VE
81 LOCIDAD SUPERFICIE GAS',3X,F10.6,////,20X,' DENSIDAD DE LA PARTICULA
82 10X,F10.6,////,20X,' METODO DE TERMINAL GAS',7X,F10.6,////,20X,' SEC
83 LUCION TRANSVERSAL CARRA',5X,F10.2,////,20X,' CONCENTRACION INICIAL GA
84 15'10X,F10.6,////,20X,' CONCENTRACION INICIAL SOLIDO',1X,F10.6,////,
85 10X,' GASTO DE GAS',16X,F10.6,////,
86 1'////,20X,' SILICIO',18X,F10.5,////,20X,' ALFA',24X,F10.6,////,20X
87 1,' ALTURA TOTAL',10X,F10.6,////,20X,' CONSTANTE REACCION SUPERFICIE
88 1,'F10.6,////,20X,' DIAMETRO PARTICULA',10X,F10.6)
89 STOP
90 END

```