



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS

TESE DE DOUTORADO

**REATOR CILÍNDRICO - ELÍPTICO DE LEITO FIXO. AVALIAÇÕES
FENOMENOLÓGICA E GEOMÉTRICA TRANSIENTES**

Rodrigo Moura da Silva

Campina Grande - PB

Agosto/2018.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS

**REATOR CILÍNDRICO - ELÍPTICO DE LEITO FIXO. AVALIAÇÕES
FENOMENOLÓGICA E GEOMÉTRICA TRANSIENTES**

Rodrigo Moura da Silva

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Doutorado em Engenharia de Processos da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito para obtenção do título de Doutor.

Orientador: Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima

Campina Grande - PB

Agosto/2018.

S586r

Silva, Rodrigo Moura da.

Reator cilíndrico-elíptico de leito fixo. Avaliações fenomenológica e geométrica transientes / Rodrigo Moura da Silva. – Campina Grande, 2018.

169 f. : il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2018.

"Orientação: Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima".

Referências.

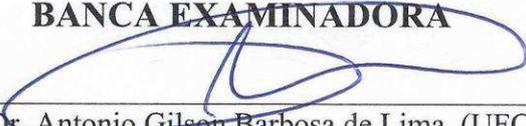
1. Transferência de Calor – Reator. 2. Reator Cilíndrico-elíptico. 3. Meio-poroso. 4. Transiente. 5. Perfil Curvilíneo. 6. Porosidade Variável. I. Lima, Antonio Gilson Barbosa de. II. Título.

CDU 66.021.4(043)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **RODRIGO MOURA DA SILVA** APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS DO CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE.

Tese de Doutorado **aprovada** em 31 de Agosto de 2018.

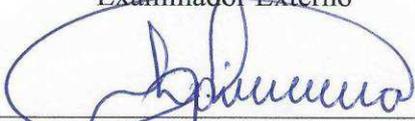
BANCA EXAMINADORA



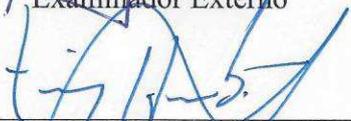
Prof. Dr. Antonio Gilson Barbosa de Lima (UFCG)
Orientador



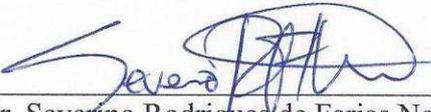
Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira (UEPB)
Examinador Externo



Prof. Dr. Laércio Gomes de Oliveira (UFCG)
Examinador Externo



Prof. Dr. Tony Herbert Freire de Andrade (UFCG)
Examinador Externo



Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto (UFCG)
Examinador Interno

Campina Grande, Agosto de 2018.

DEDICATÓRIA

À minha saudosa mãe, Marli dos Santos Moura Queiroga (*in memoriam*), a qual nunca desistiu de batalhar por minha educação. Sem o esforço dela, não seria possível eu estar aqui.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, ao Deus todo poderoso, de inteligência suprema, detentor de todos os mistérios da ciência e da sabedoria, os quais, nós, meros humanos, produtos de criação, tanto corremos atrás de desvendá-los através de trabalhos como esse, por exemplo.

À minha amada esposa Milene Santiago Moura que sempre foi tão compreensiva em momentos difíceis de elaboração deste trabalho. O meu amor e respeito a esta grande mulher.

Ao meu querido filhinho Ibrahim Santiago Moura, cuja carinha angelical removiu o estresse de momentos tensos do final deste trabalho, pelo simples olhar do seu rostinho.

Ao meu querido orientador, o doutor Antonio Gilson Barbosa de Lima, da Unidade Acadêmica de Engenharia Mecânica - CCT-/UFCEG, o qual sempre apostou em mim e me estimulou em tempos difíceis com aconselhamentos e ações que contribuíram de forma imprescindível para a minha formação acadêmica e êxito profissional. Todo o meu respeito a este professor de notável inteligência e renome como pesquisador.

Aos doutores, também por esse programa de pós-graduação, Laércio Gomes de Oliveira (UAEQ/CCT/UFCEG) e Aguinaldo Araújo Silva Filho (UPE-PE), por terem feito pesquisas pretéritas que motivaram e impulsionaram o desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus amigos do Laboratório Computacional de Térmica e Fluidos (LCTF/UAEM/CCT/UFCEG), Robson, Vanderson, Conceição, Antonildo, Verônica, Hallyson, Balbina, Vanessa, Morgana, entre tantos outros com os quais tive um convívio cordial e amistoso, me proporcionando momentos de descontração e boa conversa nas horas do “cafezinho”.

Ao Programa de Pós - Graduação em Engenharia de Processos, CCT/UFCEG, por tornar possível a realização deste trabalho.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior- CAPES, pelo apoio financeiro concedido e pela disponibilização de acervo periódico de alto nível que muito auxiliou na realização deste trabalho.

“Se A é sucesso na vida, então A é igual a X
mais Y mais Z. Trabalho é X, Y é diversão e Z
é manter sua boca calada.”

Albert Einstein
(The Yale Book of Quotations)

“Os céus declaram a glória de Deus e o
firmamento anuncia a obra das suas mãos.”

Salmos 19:1
(Bíblia Sagrada)

RESUMO

Reatores tubulares de leito fixo são equipamentos utilizados amplamente na indústria, em operações como absorção, adsorção, catalisação de reações químicas altamente endotérmicas ou exotérmicas, entre outras, com o intuito de gerar produtos de valor comercial altamente agregado. Sua concepção consta de um arranjo de partículas porosas estabelecido de forma fixa ao longo de seu leito, por onde faz-se escoar um fluido (ou combinação de mais de um), o qual percola o arranjo de partículas do leito realizando as trocas necessárias de calor e massa entre as espécies fluida e sólida (partículas) envolvidas. Seu projeto geralmente é marcado por dificuldades de pleno conhecimento da natureza de parâmetros térmicos e as pesquisas limitam-se, muitas vezes, na convencional geometria cilíndrico - circular e operação em regime permanente, com propriedades termofísicas constantes em todo o domínio, além da abordagem uni ou bidimensional. Nesse sentido, este trabalho estudou a transferência de calor tridimensional transiente num reator cilíndrico-elíptico de leito fixo via simulação numérica através do método de volumes finitos, com propriedades termofísicas variáveis, um perfil curvilíneo de temperatura na entrada do reator e um modelo de porosidade variável com a posição do leito. Os resultados atestam que: 1) variando-se a razão de aspecto geométrica (L_2/L_1) praticamente não se altera as condições operacionais do reator; 2) Na medida em que se aumenta a velocidade do ar na entrada, mais rápido se alcança o regime permanente; 3) Um perfil de temperatura variável com a posição na entrada do reator, comparado com um perfil plano de mesma temperatura média altera bastante o campo de temperatura do reator; 4) Um perfil de porosidade constante obtido da média do perfil de porosidade variável não altera significativamente a distribuição de temperatura; 5) Com um termo de reação química de 1ª ordem na modelagem, o campo de temperatura só experimenta mudanças significativas à altas concentrações de reagentes ou com o aumento da temperatura dos reagentes na entrada do reator.

Palavras-chave: transferência de calor, meio-poroso, cilindro-elíptico, transiente, perfil curvilíneo, porosidade variável.

ABSTRACT

Fixed bed tubular reactors are widely used equipment in the industry, in operations such as absorption, adsorption, catalysis of highly endothermic or exothermic chemical reactions, among others, in order to generate products of highly aggregated commercial value. Its conception consists of an arrangement of porous particles established in a fixed manner along its bed, where a fluid (or combination of more than one) is drawn, which percolates the arrangement of particles of the bed by performing the necessary exchanges of heat and mass between the fluid and solid species (particles) involved. Its design is usually marked by difficulties in the knowledge of the nature of thermal parameters, and research are often limited to conventional cylindrical-circular geometry and steady-state operation, with constant thermophysical properties throughout the domain, as well as the uni or two-dimensional approach. In this sense, this work studied the transient three-dimensional heat transfer in a fixed-bed cylindrical-elliptical reactor by numerical simulation using the finite volume method, with variable thermophysical properties, a curvilinear temperature profile at the reactor inlet and a variable porosity model with the position of the bed. The results confirm that: 1) By varying the geometric aspect ratio (L_2/L_1) practically does not change the operational conditions of the reactor; 2) As the velocity of air at the reactor inlet increases, the faster the permanent regime is reached; 3) A variable temperature profile with the position at the reactor inlet, compared to a flat profile of the same average temperature, greatly changes the temperature field of the reactor; 4) A constant porosity profile obtained from the mean of the variable porosity profile does not significantly alter the temperature distribution; 5) With a first-order chemical reaction term in the modeling, the temperature field only undergoes significant changes at high reagent concentrations or with increasing reagent temperature at the reactor inlet.

Keywords: heat transfer, porous media, cylinder-elliptic, transient, curvilinear profile, variable porosity.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	ix
CAPÍTULO 1	1
INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Objetivo geral.....	4
1.2 Objetivos específicos	4
CAPÍTULO 2	6
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
2.1 O estudo dos meios porosos na indústria e na natureza.....	6
2.2 Características gerais dos meios porosos	8
2.3 Parâmetros importantes na descrição de meios porosos	10
2.3.1 Porosidade	10
2.3.2 Área superficial específica	10
2.4 Caracterização de partículas em leitos de enchimento.....	11
2.5 Reatores de leito fixo	12
2.5.1 Comentários gerais	12
2.5.2 A importância da modelagem matemática no projeto de reatores de leito fixo	15
2.5.3 Aspectos inerentes à estrutura de leitos fixos e sua simulação	18
2.6 Importantes pesquisas na literatura (Estado da arte).....	21
2.6.1 Reação global de 1ª ordem em reatores de leito fixo.	37
CAPÍTULO 3	39
METODOLOGIA.....	39
3.1 Modelagem da transferência de calor em reator de leito fixo.....	39
3.1.1 A equação da energia no sistema de coordenadas cilíndrico-elípticas.....	40
3.1.2 Solução numérica das equações governantes	52
3.1.3 Cálculo das propriedades termofísicas nas interfaces dos volumes de controle	68
3.1.4 Perfil de temperatura curvilíneo na entrada do reator	70
3.1.5 Termo de reação química	73
3.1.5.1 Linearização do termo de reação química (termo fonte).....	75
3.1.6 Solução do sistema de equações e critérios de convergência.....	75
3.2 Parâmetros termofísicos e geométricos utilizados nas simulações	76
CAPÍTULO 4	83

RESULTADOS E DISCUSSÃO	83
4.1 Confiabilidade do modelo	83
4.2 Refino de malha e passo de tempo computacional	84
4.2.1 Refino de malha.....	85
4.2.2 Refino do passo de tempo	86
4.3 Análise térmica do reator cilíndrico-elíptico.....	90
4.3.1 Influência da razão de aspecto (L_2/L_1) do reator	90
4.3.2 Influência da velocidade na entrada do reator	104
4.3.3 Influência da temperatura de entrada no reator	113
4.3.3.1 Perfil de temperatura constante na entrada	113
4.3.3.2 Perfil de temperatura variável na entrada do reator	119
4.3.4 Influência da porosidade do leito	127
4.3.5 Influência de reação química sobre o perfil de temperatura	132
4.3.5.1 Efeito da concentração do reagente sobre os perfis de temperatura no reator ..	133
4.3.5.2 Efeito da temperatura do reagente na entrada sobre os perfis de temperatura no reator	135
4.3.5.3 Efeito do fator pré-exponencial de Arrhenius sobre os perfis de temperatura do reator	137
CAPÍTULO 5	140
5.1 CONCLUSÕES	140
5.2 SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS	143
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	144
ANEXO	153

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Estado inicial (a) e final (b) de um enchimento de partículas após sinterização por compressão e/ou aquecimento.	9
Figura 2.2 - Esquema de um reator de leito fixo.	13
Figura 2.3 - Célula de medidas térmicas	15
Figura 2.4 - a) Malhamento do domínio via “achatamento” das partículas; b) casca coaxial com perfil de porosidade; c) perfil final de empacotamento de partículas via DEM.	37
Figura 3.1 - Reator de leito compactado cilíndrico-elíptico.	42
Figura 3.2 - Sistema de coordenadas cilíndrico-elípticas no plano ξ - η	44
Figura 3.3 - Configuração geométrica do problema físico.	53
Figura 3.4 - Volume de controle da malha numérica no espaço 3-D.	55
Figura 3.5 - Esquema mostrando as trocas de calor de maneira geral consideradas na condição de contorno na fronteira.	62
Figura 3.6 - Condição convectiva na fronteira do reator considerada neste trabalho.	64
Figura 3.7 - Ilustração do balanço de energia para estimativa da temperatura nos pontos de simetria em $\eta = 0$	66
Figura 3.8 - Ilustração do balanço de energia para estimativa da temperatura nos pontos de simetria em $\eta = 1$	67
Figura 3.9 - Ilustração do balanço de energia para estimativa da temperatura nos pontos de simetria em $\xi = 1$	68
Figura 3.10 - Esquema mostrando a posição da k-ésima interface entre os pontos P e um K-ésimo ponto nodal vizinho.	69
Figura 3.11 - Variáveis utilizadas para o perfil curvo de temperatura na entrada do reator. ..	72
Figura 3.12 - Coordenada r do modelo de porosidade.	79
Figura 4.1 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.	91
Figura 4.2 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.	91
Figura 4.3 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.	92
Figura 4.4 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.	92

Figura 4.5 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.	92
Figura 4.6 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.	93
Figura 4.7 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.	94
Figura 4.8 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.	94
Figura 4.9 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.	94
Figura 4.10 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.	95
Figura 4.11 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.	95
Figura 4.12 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.	96
Figura 4.13 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.	96
Figura 4.14 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.	97
Figura 4.15 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	97
Figura 4.16 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.	98
Figura 4.17 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.	98
Figura 4.18 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	98
Figura 4.19 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.00556$ m.	99
Figura 4.20 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.03889$ m.	99

Figura 4.21 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.0944$ m.....	99
Figura 4.22 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.01944$ m.....	100
Figura 4.23 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 3$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.	100
Figura 4.24 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.00556$ m.....	100
Figura 4.25 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.03889$ m.....	101
Figura 4.26 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.0944$ m.....	101
Figura 4.27 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.1944$ m.....	101
Figura 4.28 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 3$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.	102
Figura 4.29 – Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da razão de aspecto L_2/L_1 ($t = 1.5$ s).....	103
Figura 4.30 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da razão de aspecto L_2/L_1 ($t = 1.5$ s).....	103
Figura 4.31 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.....	105
Figura 4.32 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.....	106
Figura 4.33 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	106
Figura 4.34 - Distribuição de temperatura adimensional interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.00556$ m; b) $x = z = 0.03889$ m.	106
Figura 4.35 - Distribuição de temperatura adimensional interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $x = z = 0.1944$ m.	107
Figura 4.36 - Distribuição de temperatura adimensional interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $y=0$ m; b) $x=0$ m.	107

Figura 4.37 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.00556$ m; b) $x = z = 0.03889$ m.	107
Figura 4.38 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.....	108
Figura 4.39 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	108
Figura 4.40 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.35$ m/s): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.....	109
Figura 4.41 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.35$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.....	110
Figura 4.42 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.35$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	110
Figura 4.43 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.35$ m/s): a) $z = 0.0556$ m; b) $z = 0.03889$ m.....	110
Figura 4.44 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.35$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.....	111
Figura 4.45 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.35$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	111
Figura 4.46 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da velocidade do fluxo de ar na entrada ($t = 0.5$ s).	112
Figura 4.47 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da velocidade do fluxo de ar na entrada ($t = 1.5$ s).	112
Figura 4.48 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da velocidade do fluxo de ar na entrada (u_z) ($t = 3.0$ s).	113
Figura 4.49 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da velocidade do fluxo de ar na entrada u_z ($t = 4.5$ s).	113
Figura 4.50 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0$ m) = 40°C): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.	114
Figura 4.51 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0$ m) = 40°C): a) $z = 0.944$ m; b) $z = 0.1944$ m.	114
Figura 4.52 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0$ m) = 40°C): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	115

Figura 4.53- Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ\text{C}$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.3889$ m.	115
Figura 4.54 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ\text{C}$): a) $z = 0.0944$ m; b) $z=0.1944$ m.	115
Figura 4.55 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ\text{C}$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	116
Figura 4.56 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.	116
Figura 4.57 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.	117
Figura 4.58 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	117
Figura 4.59- Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.	117
Figura 4.60 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.	118
Figura 4.61 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.	118
Figura 4.62 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da temperatura do fluxo de ar na entrada $T(z = 0 \text{ m})$ ($t = 1.5$ s).	119
Figura 4.63 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da temperatura do fluxo de ar na entrada $T(z = 0 \text{ m})$ ($t = 4.5$ s).	119
Figura 4.64 – Perfil adimensional de temperatura x posição radial adimensional em função de um perfil de temperatura variável da entrada do reator ($H = 0.1$).	120
Figura 4.65- - Perfil adimensional de temperatura x posição radial adimensional em função de um perfil de temperatura variável da entrada do reator ($H = 0.3$)	121
Figura 4.66 - Distribuição de temperatura ($^\circ\text{C}$) na entrada do reator ($z = 0 \text{ m}$).	122
Figura 4.67 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.	122
Figura 4.68 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $z=0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.	122

- Figura 4.69** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m. ... 123
- Figura 4.70**- Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $z = 0.00556$ m; b) $y = 0.03889$ m. 123
- Figura 4.71** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $z = 0.0944$ m; b) $y = 0.1944$ m. 123
- Figura 4.72** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m. ... 124
- Figura 4.73** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico ($T(z = 0 \text{ m}) = 70^\circ\text{C}$) x $T(z = 0 \text{ m})$ variável): a) $t = 0.5$ s; b) $t = 1.5$ s. 125
- Figura 4.74** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico ($T(z = 0 \text{ m}) = 70^\circ\text{C}$) x $T(z = 0 \text{ m})$ variável): a) $t = 3.0$ s; b) $t = 4.5$ s. 126
- Figura 4.75** - Distribuição de porosidade variável utilizada neste trabalho (porosidade variável com a posição radial, Equação 3.142): a) $L_2/L_1 = 1.5$, b) $L_2/L_1 = 2.0$ e c) $L_2/L_1 = 3.0$ 128
- Figura 4.76** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m. 128
- Figura 4.77** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $z = 0.0944$ m; b) $x = 0.1944$ m. 128
- Figura 4.78** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m. 129
- Figura 4.79** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m. 129
- Figura 4.80** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m. 129
- Figura 4.81** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m. 130
- Figura 4.82** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico: a) $t = 0.5$ s; b) $t = 1.5$ s. (porosidade constante x porosidade variável). 131
- Figura 4.83** - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico: a) $t = 3.0$ s; b) $t = 4.5$ s. (porosidade constante x porosidade variável). 132

- Figura 4.84** - Perfil de temperatura adimensional no reator cilíndrico-elíptico (sem reação x com reação, $C = 0.8 \text{ Kmol/m}^3$) no plano $y = 0 \text{ m}$: a) $t = 1.5 \text{ s}$, b) 3.0 s , c) 4.5 s 135
- Figura 4.85** - Perfil de temperatura adimensional no reator cilíndrico-elíptico ($T(z = 0) = 100^\circ\text{C}$ x $T(z = 0) = 120^\circ\text{C}$), $C = 0.8 \text{ Kmol/m}^3$, no plano $y = 0 \text{ m}$: a) $t = 1.5 \text{ s}$, b) 3.0 s , c) 4.5 s 136
- Figura 4.86** - Perfil de temperatura adimensional no reator cilíndrico-elíptico ($A_0 = 9.4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$ x $9.4 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$) no plano $y = 0 \text{ m}$: a) $t = 1.5 \text{ s}$, b) 3.0 s , c) 4.5 s 139

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Casos simulados neste trabalho	82
Tabela 4.1 - Teste para escolha da malha e custo computacional.	85
Tabela 4.2 - Obtenção do melhor passo de tempo com base na relação menor erro cometido x menor tempo computacional.	89

SIMBOLOGIA

Letras Latinas

$A_P, A_N, A_S, A_E, A_W, A_F, A_T, A_P^*, A_T^*, A_P^0$ - coeficientes das equações discretizadas	[-]
A_{tr} - área de seção transversal do reator	[m ²]
A_{Sp} - área superficial específica	[m ²]
B - termo de geração de energia na Equação 3.88	[W/m ³]
B* - termo de geração de energia na Equação 3.114	[W/m ³]
c_p - calor específico do fluido	[kJ/kg/K]
D_m - difusividade molecular	[m ² /s]
D_p - diâmetro da partícula	[m]
D_t - diâmetro do leito	[m]
e, w, s, n, f, t - referência das faces dos pontos nodais	[-]
E, N, P, W, S - referência dos pontos nodais	[-]
H - comprimento (altura) do leito	[m]
h_w - coeficiente de transferência de calor parede-meio poroso	[W/m ² .K]
J - jacobiano da transformação	[1/m ²]

J_H - fator de Colburn	[-]
k_r, k_a - condutividade térmica radial e axial respectivamente	[W/m.K]
k - condutividade térmica efetiva	[W/m.k]
L - distância focal da elipse na Figura 3.1	[m]
L_1 - semi - eixo menor da elipse	[m]
L_2 - semi - eixo maior da elipse	[m]
\hat{n} - número de iterações em cada instante de tempo	[-]
P - perímetro molhado	[m]
Pe, Pe_o - número de Peclet e número de Peclet molecular, respectivamente	[-]
q'' - fluxo de calor	[W/m ²]
r – coordenada radial do sistema de coordenadas cilíndricas	[m]
Re - número de Reynolds	[-]
Re_p - número de Reynolds de partícula	[-]
Sc – número de Schmidt	[-]
Sh – número de Sherwood	[-]
S_p – superfície de partícula	[m ²]
St – número de Stanton	[-]

S^Φ - termo de geração interna de energia	[W/m ³]
t - tempo	[s]
T - variável temperatura	[°C]
T_{win} - temperatura no lado interno da parede do reator	[°C]
T_{wext}, T_w - temperatura no lado externo da parede do reator	[°C]
T_m - temperatura do fluido refrigerante	[°C]
T_M - temperatura média da seção de entrada	[°C]
\tilde{U}, \tilde{V} e \tilde{W} - componentes contravariantes do vetor velocidade	[m/s]
\hat{U}, \hat{V} e \hat{W} - coeficientes métricos	[-]
V - volume	[m ³]
\vec{v} - vetor velocidade	[m/s]
u_z - velocidade superficial do fluido no leito	[m/s]
u_{zint} - velocidade intersticial do fluido no leito	[m/s]
x, y - coordenadas cartesianas	[m]
z - variável posição axial	[m]

Letras gregas

α - difusividade térmica	[m ² /s]
α_{ij} - coeficientes	[-]
δ, Δ - variação	[-]
τ e φ - ângulos definidos nas equações 3.2 e 3.3	[-]
φ – fator de esfericidade	[-]
ρ - densidade do fluido	[kg/m ³]
ε - fração de vazios do leito	[-]
μ - viscosidade do fluido	[N.s/m ²]
ξ, η - variáveis no sistema de coordenadas cilíndrico elíptico	[-]
Φ - função da variável observada	[-]
Γ, Γ^Φ - propriedade genérica na equação geral da conservação	[-]
∇ - operador de gradiente	[-]
Ψ - variável do termo de dissipação viscosa	[-]
ν - viscosidade cinemática	[m ² /s]
θ – ângulo do sistema de coordenadas cilíndricas	[-]

Subscritos

ξ, η, z - direção perpendicular ao fluxo	[-]
e, w, s, n, f, t - faces dos pontos nodais	[-]
int – intersticial	[-]
med – médio	[-]
o - inicial	[-]
P – partícula	[-]
T – total	[-]
V – vazio	[-]
Wext - parede externa	[-]
Win - parede interna	[-]
w - parede do leito	[-]
Superescritos	
o - anterior	[-]
\hat{n} – iteração do método Gauss-Seidel	[-]

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Os meios porosos estão presentes na natureza, a saber, em solos e plantas, por exemplo, como também na maioria das operações unitárias empregadas na engenharia química, tais como: destilação, filtração, adsorção e absorção em colunas recheadas, secagem e reações catalíticas em leitos fixos e fluidizados (Freire, 1979; Oliveira, 2002). Conseqüentemente, a transferência de calor em meios porosos com escoamento fluido na direção axial é um fenômeno cujo estudo é de grande pertinência, pelo fato de que são muitas as áreas de atuação em ciência e tecnologia que fazem uso desse tipo de sistema em suas operações.

No contexto das aplicações industriais de sistemas particulados, os reatores tubulares de leito fixo de paredes aquecidas ou resfriadas são largamente usados no sentido de promoverem reações catalíticas heterogêneas gás-sólido, altamente exotérmicas ou endotérmicas, exigindo um projeto de tais equipamentos com base na adoção de modelos confiáveis, os quais se utilizam de experimentos de fluxo de fluido (resfriado ou aquecido) e experimentos cinéticos, que permitam simular situações representando diversas condições experimentais, visando uma futura mudança de geometria ou ampliação de escala de forma segura (Azevedo et al., 1990; Oliveira, 2004).

Em se tratando de modelagem matemática de sistemas para engenharia, no seu desenvolvimento é necessário se fazer considerações que apresentem harmonia com os princípios físicos que regem o problema. A não validade dessas considerações ou hipóteses faz

com que o prognóstico dado pelo modelo não seja adequado com a realidade do problema. Daí se justifica a necessidade do pleno conhecimento da física do problema, para conferir integridade ao modelo como representativo do sistema analisado, e de uma gama de técnicas matemáticas, a fim de tornar possível a solução das equações provenientes da modelagem, muitas vezes altamente não lineares.

Uma vez havendo a necessidade de estudar o controle da temperatura no leito fixo de um reator, uma tendência esperada, a priori, é a adoção de modelos mais simples, que exigem menores esforços e tempos computacionais. Porém, estas simplificações não devem ultrapassar um limite além do qual tornam-se exageradas, pois podem conduzir o modelo a gerar resultados não condizentes com os fenômenos envolvidos no problema. Desse modo, a modelagem matemática adequada do fenômeno torna-se um requisito considerado imprescindível.

O manuseio de técnicas de solução matemática de equações diferenciais parciais também é muito importante, uma vez que as equações geradas para um modelo, dependendo dos termos que traduzem matematicamente um determinado mecanismo físico de um problema, podem suscitar diferentes técnicas matemáticas para sua solução. Acrescente-se também a extrema importância do conhecimento dos parâmetros que regem o problema físico. Se estes forem bem conhecidos podem apontar para um nível de maior ou menor dificuldade de se resolver as equações governantes. Se bem estimados ajudam a determinar com bastante acurácia as variáveis do problema em questão. As simplificações matemáticas demasiadas do modelo, a fim de facilitar a sua solução e uma estimativa superficial de parâmetros, podem burlar a física do problema e tornar o modelo não replicante da realidade. Neste sentido, parâmetros que sejam representativos do leito como um todo (valores assintóticos) são uma exigência básica fundamental.

Outro grande desafio na modelagem de reatores de leito fixo são os efeitos térmicos de entrada, os quais são de difícil percepção e tratamento, e que podem implicar em estimativas inadequadas dos parâmetros do modelo. Um reflexo disso é, por exemplo, quando se verifica a condutividade térmica muito dependente do comprimento do leito. Observações feitas por pesquisadores advindas do ajuste do modelo aos perfis radiais de temperatura a cada altura isoladamente, tem apontado que, em geral, estes coeficientes apresentam um decaimento à medida que a altura do leito poroso aumenta (Dixon, 1996; Thoméo e Freire, 2000; Ferreira et

al., 2002; Oliveira, 2004). Dessa forma, os vários trabalhos na literatura para estimativa de parâmetros que não consideram este efeito podem produzir valores diferentes para os coeficientes de transporte, mesmo com técnicas experimentais e correlações bem acuradas (Borkink e Westerterp, 1992; Iordanidis, 2004).

Soluções analíticas ou numéricas da equação da difusão/convecção de calor em reator de leito fixo, para vários casos tem sido reportadas na literatura ao longo dos anos. Porém, os estudos se limitam ao uso de geometria cilíndrico-circular e poucos são os trabalhos que assumem propriedades termofísicas e condições de contorno variáveis para o fluido na entrada do reator. Justifica-se aqui a necessidade de serem apresentadas soluções mais amplas e rigorosas para o problema em questão e que ainda envolvam a operação em regime transiente.

Mais recentemente, Oliveira (2004) estudou a transferência de calor em reator cilíndrico - elíptico, visando avaliar as condições de operação em regime permanente. O autor avaliou o efeito da velocidade do gás e calor de reação na transferência de calor em regime permanente. Em continuidade, Silva Filho (2013) fez estudos adicionais, os quais levaram em consideração diferentes valores para propriedades termofísicas do fluido e reator em regime permanente, constantes em todo o leito, e, no caso da porosidade no leito, em alguns casos ela foi considerada variável em todo o domínio. Ambos trabalharam com um modelo matemático pseudo-homogêneo resolvido pelo método numérico de volumes finitos, o qual foi validado pelo primeiro autor (Oliveira, 2004) por confronto com dados experimentais para o caso particular em que a geometria do sistema apresenta a forma cilíndrica circular. Além disso, Oliveira (2004) apresentou uma validação também com uma solução analítica. Trata-se, portanto, de um modelo consistente, passível de incorporação de novos termos representativos de mecanismos físicos da operação do reator, visando descrição mais rica da distribuição de temperatura no mesmo, incluindo processos transientes.

Diante do exposto, este trabalho visa ir mais além do que Oliveira (2004) e Silva Filho (2013) fizeram. A contribuição aqui visa partir do mesmo modelo matemático de ambos e analisar o processo em regime transiente frente às diferentes condições geométricas, fluidodinâmicas e térmicas, a que pode estar submetida operação do reator, propondo-se a investigar a influência de um perfil curvilíneo de temperatura na entrada do reator e confrontar os resultados com os de um perfil plano, bem como confrontar os resultados para um perfil

variável de porosidade com os de um perfil de porosidade constante com igual valor médio do perfil variável. O perfil de porosidade variável teve uma melhoria de adaptação em relação ao modelo usado por Silva Filho (2013) ficando mais consistente em relação aos modelos propostos na literatura. Acrescente-se que a proposta de estudo via solução analítica feita por Oliveira (2004) para um perfil curvilíneo na entrada do reator e que foi executada por Lucena (2016) foi validada numericamente neste trabalho, porém, com a vantagem de ser estendida para uma geometria cilíndrico-elíptica, conferindo ainda mais integridade e versatilidade ao modelo utilizado.

O aspecto inovador deste trabalho reside em abordar uma metodologia mais abrangente, a qual propõe uma modelagem matemática em três dimensões, mais generalista, que pode simular a transferência de calor transiente em um leito fixo compactado podendo variar a sua geometria desde um canal retangular, passando para um cilindro de seção transversal circular, até um cilindro de seção transversal elíptica e que permite ir além das restrições convencionais na literatura de propriedades termofísicas constantes e operação em regime permanente. O sistema de coordenadas utilizado na modelagem trata-se de um sistema não convencional que, embora gere mais trabalho na discretização das equações, tem o ganho de facilitar a aplicação das condições de contorno e codificação do programa computacional para se resolver o sistema linear.

1.1 Objetivo geral

Estudar a transferência de calor num reator cilíndrico-elíptico de leito fixo em regime transiente adotando o sistema de coordenadas cilíndrico-elíptico.

1.2 Objetivos específicos

a) Validar numericamente uma proposta de perfil de temperatura variável com a posição na entrada do reator (perfil curvilíneo) que foi resolvida, na literatura, analiticamente para uma geometria cilíndrico-circular e estender a sua validade para a geometria cilíndrico-elíptica;

- b) Utilizar este perfil curvilíneo de temperatura na entrada do reator para verificar a resposta de distribuição de temperatura no equipamento e confrontar os resultados obtidos com a resposta para o perfil plano nas mesmas condições operacionais;
- c) Utilizar um perfil de porosidade variável ao longo do leito e comparar os resultados obtidos com os do perfil de porosidade constante nas mesmas condições operacionais;
- d) Verificar a influência da razão de aspecto geométrica L_2/L_1 sobre a distribuição de temperatura do reator e transferência de calor no reator;
- e) Verificar a influência do valor de temperatura para o perfil plano na entrada sobre a distribuição de temperatura do reator;
- f) Verificar a influência da velocidade do fluxo de ar na entrada sobre a distribuição de temperatura do reator;
- g) Verificar o comportamento da distribuição de temperatura no interior do reator quando ocorre uma reação química simples de primeira ordem.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Serão abordados neste capítulo aspectos de transferência de calor em reatores de leito fixo segundo descrições de resultados de inúmeros trabalhos na literatura, no intuito de conferir base ao trabalho que está sendo desenvolvido. Trata-se de uma revisão geral sobre leitos porosos, aspectos fluidodinâmicos e estruturais de reatores de leito fixo, modelos matemáticos, parâmetros de modelo e outros itens.

2.1 O estudo dos meios porosos na indústria e na natureza

Na natureza e em um grande número de aplicações práticas industriais é comum encontrar meios porosos. Praticamente todos os materiais sólidos podem ser considerados como porosos, com exceção de estruturas metálicas, rochas densas e alguns plásticos (Dullien, 1992). Em certas práticas científicas e tecnológicas é de fundamental importância dispor de modelos adequados que possam prognosticar o comportamento dos meios porosos e dos fenômenos de transporte que neles ocorrem. Alguns exemplos de áreas em que este conhecimento é vantajoso são (Sahimi, 1995; Martins, 2006):

- Engenharia de processos químicos: reatores de leito fixo, filtração, secagem, reatores de leito fluidizado, cromatografia, absorção/adsorção, trocas iônicas, células de combustível, conversores catalíticos para redução de emissões de poluentes em automóveis, colunas de

absorção com e sem reação química, colunas de destilação com ou sem reação química, entre outros;

- Engenharia ambiental: migração de contaminantes no solo e através de lençóis freáticos, irrigação, limpeza de solos por injeção de vapor, incineração, entre outros;

- Recursos naturais: produção de gás natural e petróleo, escoamento em minas de água, entre outros;

- Engenharia Mecânica: isolantes térmicos, combustão envolvendo pirólise de materiais reativos ou não, tribologia e lubrificação, reatores nucleares com arrefecimento por gases, solidificação ou fusão de misturas binárias, desumidificação, sinterização e agregação de partículas por compressão e aquecimento, entre outros;

- Construção Civil: penetração de umidade em materiais porosos e desenvolvimento de estratégias de proteção para evitar a degradação destes pela difusão de água através dos mesmos, análise da retenção de água de barragens e fluxo através do leito das mesmas; entre outros;

Com uma compreensão mais aprofundada dos fenômenos de transporte que ocorrem no interior de um meio poroso é possível implementar alterações mais adequadas ou desenvolver processos mais otimizados para um desenvolvimento sustentável pautado na menor emissão de poluentes no meio ambiente e na maior eficiência no ponto de vista energético e de consumo racional de matérias-primas.

Como o comportamento em todos os processos supracitados que envolvem meios porosos é influenciado determinantemente pela estrutura desses meios, qualquer modelo com que se objetive descrever adequadamente um meio poroso deverá considerar este aspecto e incluí-lo na modelagem dos fenômenos de transporte. Quanto mais informação da estrutura do meio é considerada, mais complexos se tornam os modelos e a análise dos resultados obtidos. Assim, faz-se necessário adotar simplificações na representação da estrutura do meio poroso tendo o cuidado de não perder características essenciais.

A modelagem de estruturas em meios porosos não é feita, portanto, de forma universal e vai depender do tipo de estrutura assumida para o meio. Surge então a necessidade de desenvolver a estratégia mais coerente baseada num modelo mais simples matematicamente, mas rigoroso do ponto de vista físico, a fim de descrever os fenômenos de transporte que podem ocorrer no meio poroso.

2.2 Características gerais dos meios porosos

De acordo com Dullien (1992), um material é considerado meio poroso se for verificado uma das seguintes condições:

- Contém espaços vazios relativamente pequenos, geralmente denominados por poros, no interior de uma matriz sólida ou semi-sólida. Os poros contêm normalmente um fluido, como ar, água, petróleo, ou mistura de vários fluidos.

- É permeável a alguns tipos de fluidos, isto é, estes fluidos deverão penetrar no meio poroso através de uma face e emergir na outra face. Meios porosos com esta propriedade são chamados meios porosos permeáveis. O nível de facilidade com que um fluido pode atravessar um determinado meio poroso depende tanto das características do próprio fluido como das do meio, para além das condições termodinâmicas em que decorre o escoamento fluido.

Em função do tipo de interligações entre os elementos (partículas) que os constituem, é possível dividí-los em duas classes principais (Sahimi, 1995; Martins, 2006) :

- **Meio poroso não consolidado:** É aquele em que é possível distinguir visualmente os seus elementos constituintes e separá-los fisicamente. Podem ser criados por deposição de partículas no interior de um recipiente, como se pode observar na Figura 2.1. O termo normalmente designado para este tipo de meio poroso é leito de enchimento ou recheado, que remete à maneira como é gerado. Apenas a fase associada aos vazios do meio poroso é contínua, sendo a estrutura desta definida pelo posicionamento relativo das partículas que formam a fase sólida descontínua.

- **Meio poroso consolidado:** É aquele em que a fase sólida é contínua ou não é possível distinguir as partículas que formam a estrutura do meio. Podem ser formados de diferentes formas, como por exemplo, pela dissolução de uma matriz sólida, ou pela compressão e/ou aquecimento das partículas de um meio não consolidado, como pode ser visto também na Figura 2.1.

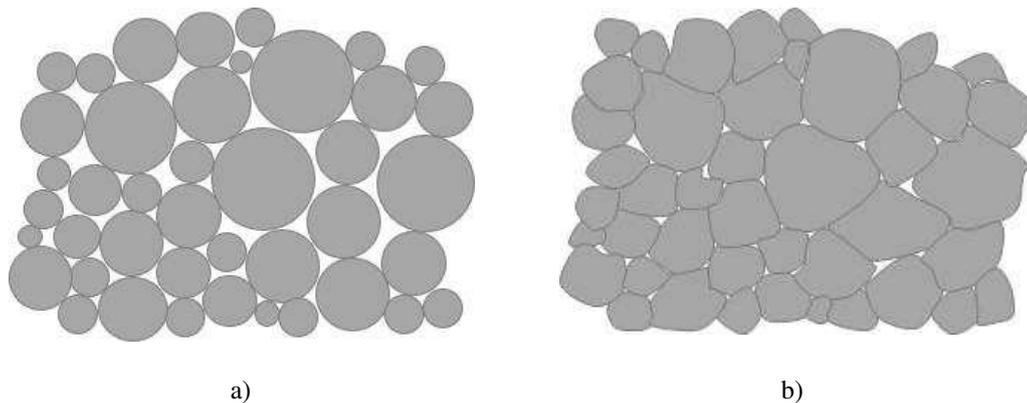


Figura 2.1 - Estado inicial (a) e final (b) de um enchimento de partículas após sinterização por compressão e/ou aquecimento. (autoria própria)

Quando a mobilidade do fluido depende do meio está se falando na resistência que o meio oferece ao escoamento do fluido devido a estrutura deste meio. Essa condição é caracterizada por um parâmetro, denominado permeabilidade, que é independente das propriedades do fluido. A propriedade da permeabilidade implica que as dimensões características dos espaços vazios atravessados pelo fluido são muito maiores que as dimensões das moléculas do fluido que o atravessa. A estrutura dos meios porosos depende fortemente da sua origem.

No problema a ser tratado nesta pesquisa a permeabilidade não toma lugar como fator influente no escoamento fluido na coluna recheada de partículas do reator de leito fixo, pois há pouca resistência à passagem desse fluido nos interstícios formados pelo recheio de partículas, apesar de o leito fixo ser um meio poroso. Logo, só se faz sentido falar em permeabilidade do meio à passagem do fluido em meios porosos com elevado nível de compactação.

2.3 Parâmetros importantes na descrição de meios porosos

Normalmente para se descrever um meio poroso em termos de modelagem faz-se necessário utilizar alguns parâmetros termofísicos e geométricos. A importância destes parâmetros é delinear fisicamente o tipo de meio poroso que se objetiva estudar, a fim de comunicar ao modelo matemático a sua configuração, de forma a descrevê-lo adequadamente, o mais próximo da realidade. Nesse sentido são importantes os parâmetros descritos a seguir.

2.3.1 Porosidade

Este parâmetro é um dos mais importantes na caracterização de um meio poroso em escala macroscópica. Ele é definido como a razão entre o volume de vazios, V_V , e o volume total da amostra, V_T (Dullien, 1992),

$$\varepsilon = \frac{V_V}{V_T} \quad (2.1)$$

Define-se porosidade efetiva como sendo a fração volumétrica associada aos canais através dos quais ocorre o escoamento de fluido, o que na prática trata-se dos canais interligados entre si. Em meios não consolidados geralmente as porosidades total e efetiva são consideradas aproximadamente iguais, já para os meios porosos consolidados estes dois parâmetros podem ser bastante diferentes, a depender da forma como o meio foi gerado. Por exemplo, há meios consolidados nos quais é comum a existência de poros sem saída ou isolados os quais resistem à passagem do escoamento. Nestes casos a porosidade efetiva é bem diferente da real, tendo um valor menor, pelo fato de que não considera, em sua estimativa, a quantificação dos poros isolados na estrutura.

2.3.2 Área superficial específica

A área superficial específica, A_{Sp} , é definida como sendo a razão entre a área superficial do espaço vazio e o volume total de amostra de meio poroso. Ele representa uma medida da área de contato entre a fase sólida e a fase fluida, o que é um aspecto muito importante num grande número de processos. Por exemplo, em adsorção industrial ela é uma medida da

capacidade de adsorção e influencia fortemente o desempenho de certos processos, como é o caso de reatores de leito fixo com partículas de catalisador ou unidades de absorção química, caracterizadas normalmente através deste parâmetro associado a um coeficiente de transferência de massa entre as fases (Dullien, 1992).

2.4 Caracterização de partículas em leitos de enchimento

As características geométricas das partículas que constituem os meios porosos, a saber, sua forma geométrica e as distribuições de suas dimensões características, influenciam o comportamento dos meios porosos não consolidados.

O diâmetro equivalente, D_p , que é definido como sendo o diâmetro da esfera com o mesmo volume de partícula (McCabe et al., 1993), pode ser determinado, entre outras formas, pela relação $D_p = 6/A_{Sp}$, se a área superficial específica for conhecida. Um diâmetro nominal equivalente também pode ser obtido por peneiramento, caso a medida de um diâmetro equivalente não esteja disponível. Esta expressão para o diâmetro é mais usada para partículas com geometria mais próxima da esférica, para partículas com geometria mais irregular atribui-se um fator de esfericidade ϕ , definido pela seguinte expressão:

$$\phi = \frac{6}{D_p} \frac{V_p}{S_p} \quad (2.2)$$

onde valores deste fator diferenciam-se para partículas de diferentes formas. Nele tem-se que V_p é a velocidade intersticial do fluido através do meio poroso e S_p é a superfície da partícula

Visto que, em muitas aplicações, as partículas que constituem um leito de enchimento não possuem um diâmetro uniforme, mas uma distribuição de tamanhos, é prática comum determinar um valor médio para o diâmetro de partículas do leito de enchimento, que vai funcionar como diâmetro equivalente. O reflexo desta aproximação é que haverá, para fins de facilitação de modelagem, um sistema em que o leito real com distribuição de vários tamanhos de partículas será representado por um equivalente com partículas com um diâmetro constante e médio.

O fato de se expor nas seções iniciais sobre meios porosos é devido a que o reator cilíndrico-elíptico a ser estudado neste trabalho é um leito fixo recheado com partículas, entre as quais escoar-se um gás a fim de produzir trocas de calor entre estes meios materiais, constituindo-se assim como um meio poroso não consolidado. A sua estrutura será tratada de forma mais minuciosa no Capítulo 3.

2.5 Reatores de leito fixo

2.5.1 Comentários gerais

Com a descoberta dos catalisadores sólidos no início do século passado, a sua aplicação se difundiu nos processos químicos de forma que a indústria química se diversificou vertiginosamente através do desenvolvimento de novos processos e do melhoramento dos já existentes. Os reatores de leito fixo estão muito presentes na realização de processos catalíticos que envolvem reagentes gasosos (Froment e Bischoff, 2010).

Simplificadamente pode-se descrever um reator de leito fixo como um tubo cilíndrico preenchido, de forma compacta e estacionária, por partículas de catalisador com um reagente em fase fluida escoando através deste meio poroso, promovendo trocas de calor gás-partícula. Trata-se, portanto, de um meio poroso não consolidado.

Pelo fato de haver grande escala de aplicações destes equipamentos, o reator de leito fixo é o carro-chefe da indústria química, agregando alto valor econômico para os materiais por ele produzidos. Na Figura 2.2 tem-se o esquema de um reator de leito fixo com a entrada de fluido (*inlet*), saída de fluido (*outlet*) e as partículas de recheio ou empacotamento do leito fixo do reator, conforme a descrição feita.

Reatores de leito fixo podem ter a escala ampliada (*scale-up*) de várias maneiras, mas vale salientar que a teoria da similaridade é de pouco uso nesse caso. Logo, a prática comum é proceder da escala de laboratório à escala comercial gradativamente, passando pelo menos por duas escalas intermediárias: a unidade piloto e a unidade demonstração. Mesmo com o emprego de grandes pilotos é difícil obter exatamente o mesmo comportamento do reator, tornando-se necessária uma análise mais detalhada.

Atualmente, em função do contínuo e acelerado desenvolvimento da informática e da existência e disponibilidade de simuladores industriais, com crescente possibilidade de maior concepção para os mesmos, não é algo prudente que se amplie a escala de reatores sem antes desenvolver alguma modelagem por mais simples que seja. A modelagem pode variar de fundamental, a qual pode utilizar equações diferenciais mais simples avaliando separadamente cada mecanismo que influencia o processo, para posteriormente aditar mais informações dos mesmos mecanismos ao modelo, proporcionando a simulação do reator, ou pode ser semi-empírica, baseando-se assim em experimentação piloto para ajuste dos chamados "parâmetros efetivos do modelo" (Carberry e Varma, 1987). Um bom ajuste desses parâmetros é fundamental para que o uso do valor estimado inadequadamente não venha a produzir dispersão nos resultados. Os processos de otimização que envolvem métodos numéricos, como o dos mínimos quadrados, por exemplo, tem sido muito empregados nesse sentido.

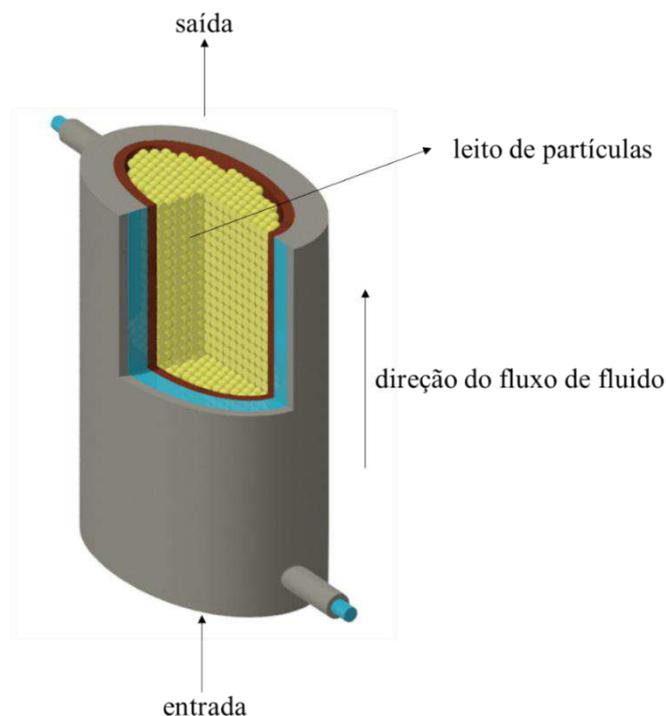


Figura 2.2 - Esquema de um reator de leito fixo.

Pode-se listar algumas vantagens do reator de leito fixo em relação a outros equipamentos, tais como: a) simplicidade; b) baixo custo de construção e manutenção; c) pouca necessidade de equipamentos auxiliares, devido à flexibilidade da fixação das partículas no leito dispensando gastos com implantação de unidades de separação a jusante, e d) gama de

aplicações. É mediante o uso de um reator de leito fixo que se obtém as condições econômicas ideais, quando se tem uma reação a qual ocorre a temperaturas extremamente altas ou elevadas pressões e empregando catalisadores sólidos (Hill e Tatcher, 2014)

Na operação com os reatores catalíticos de leito fixo, problemas que podem surgir estão relacionados com a transferência de calor. Fato que é motivado pela taxa de liberação de energia ao longo do comprimento do reator, que não é uniforme, sendo que a maior parte da reação normalmente ocorre nas proximidades da entrada do reator. Em se tratando de reações exotérmicas, a taxa de reação pode ser relativamente maior na entrada do reator devido à maior concentração dos reagentes.

Em reatores não adiabáticos com reações exotérmicas, o aumento da taxa de reação local é provocado pela grande diferença de temperatura no centro do eixo do leito e na parede, o que pode tender a aumentar ainda mais essa taxa de reação local levando ao esgotamento dos reagentes. Assim, medidas devem ser tomadas a fim de evitar este inconveniente operacional, uma delas é a adoção de reatores multitubulares (McGreavy e Maciel Filho, 1988).

Uma outra técnica útil é o uso de diluentes inertes na alimentação. A diluição do catalisador com material sólido inerte, permite reduzir os efeitos térmicos da reação. O controle da temperatura do fluido refrigerante externo e a divisão do leito em seções independentes permitem também controlar finamente a temperatura interna do reator. Este procedimento foi feito por Maciel Filho e Domingues (1992) e Oliveira (2004) conforme pode-se visualizar na Figura 2.3. Nela tem-se um reator cilíndrico-circular com as seções de entrada, a seção térmica e a seção de suporte de termopares. A primeira seção objetiva desenvolver plenamente o escoamento com empacotamento idêntico ao da segunda seção, visando minimizar os efeitos térmicos de entrada; a segunda é onde ocorre o fenômeno estudado e a terceira é onde se pode fazer o acompanhamento da operação do reator por meio de posicionamento de instrumentos de medição de temperatura. Tratam-se de estratégias de controle com o intuito de levar o reator a altos níveis de desempenho.

Ainda no tocante ao projeto de reatores de leito fixo, as pesquisas tem alcançado sucesso: a) no desenvolvimento de novos catalisadores bem como na modificação dos existentes; b) no estudo dos dados físico-químicos, com destaque para a obtenção dos

parâmetros de transporte de calor e a ênfase em dados cinéticos confiáveis; c) na sistematização do planejamento experimental, a qual oportuniza métodos mais eficazes para a aquisição de dados experimentais; d) nos métodos mais poderosos de análises de dados e, e) em relação à modelagem matemática, a possibilidade de solução de modelos cada vez mais robustos, a qual tem sido mais alcançável com o desenvolvimento contínuo dos métodos numéricos como fortes aliados no tratamento de não linearidades das equações diferenciais constituintes do problema. Neste último aspecto, os computadores sempre vem ocupando posição imprescindível com o seu contínuo desenvolvimento, refletido por maiores capacidades de processamento e os *softwares* de simulação com interface gráfica cada vez mais atraente para apresentação dos resultados.

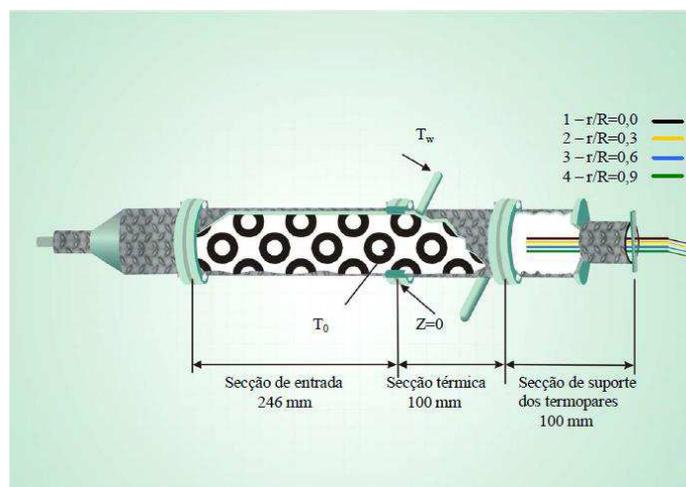


Figura 2.3 - Célula de medidas térmicas (Fonte: Oliveira, 2004)

2.5.2 A importância da modelagem matemática no projeto de reatores de leito fixo

Reator químico é o cérebro da maioria dos processos químicos. Seu design e operação geralmente determinam o sucesso ou o fracasso de todo o processo. Em um processo, em geral, as matérias-primas são entregues a este equipamento em condições específicas de temperatura, pressão e concentração de espécies. O reator químico é um componente essencial no qual a matéria-prima de menor valor agregado é convertida em produtos de alto valor comercial.

O reator é geralmente seguido por equipamentos de separação, com a tarefa de separar os produtos das matérias-primas não reativas e subprodutos do reator. As modernas instalações de processamento químico têm operações altamente integradas, pois são usadas na fabricação

de produtos químicos e farmacêuticos, refino de petróleo ou dispositivos microeletrônicos. Embora o objetivo principal da aplicação de um reator seja obter eficiência na produção, seu projeto e operação também são às vezes influenciados por metas conflitantes de minimização do consumo de energia, bem como pela quantidade de matéria-prima ou produto que deve ser mantido no armazenamento. Logo, a tarefa de otimização que consiste em maximizar a produção com minimização de custos com energia é um grande desafio no projeto.

Em geral, os reatores podem ser classificados em termos de projeto, tipo de reação e operação. Nesse sentido, os reatores químicos podem ser modelados usando três arquétipos principais: batelada, tanque de agitação contínua e fluxo pistonado (plug). Estes três tipos de reatores são definidos sob certas hipóteses idealizadas em relação ao fluxo de fluido. O reator em batelada e o tanque de agitação contínua são idealmente considerados bem misturados, o que significa que a temperatura, a pressão e as concentrações específicas são independentes da posição espacial dentro do reator. Por sua vez, o reator de fluxo pistonado, tipo plug, descreve um tipo especial de fluxo, no qual o fluido é bem misturado na direção radial e varia somente na direção do comprimento (ou direção axial) do tubo. Assim, por causa de sua complexidade de projeto, para fins práticos, sempre podem ser enquadrados em um desses três tipos citados, que são considerados mais simples para fins de projeto (Rawlings e Eckerdt., 2002).

Para se obter operações seguras, o controle efetivo desses reatores é fundamental, principalmente quando alto desempenho é desejado. Assim, é de grande importância o profundo conhecimento do reator a ser controlado, implicando na necessidade de um modelo que descreva o seu comportamento de forma otimizada, dando condições de prognosticar detalhes de operação em regime dinâmico.

As aplicações de um modelo dinâmico normalmente demandam um grande esforço computacional com implicações negativas em termos de tempo de processamento e esforço computacional. Dessa forma, constitui-se um grande desafio o desenvolvimento de modelos com grande capacidade de predição, aliado à dificuldade na sua solução em termos computacionais e à disponibilidade dos parâmetros necessários.

O interesse pela simulação dinâmica de reatores químicos tem se impulsionado muito nos últimos anos. Essa atividade tem subsidiado vários propósitos, a saber: projeto de reatores,

estratégias de partida e parada do reator, determinação de condições operacionais desejadas e de risco para o controle do processo, estudos de controle e otimização, etc. Nos três primeiros propósitos, os modelos a serem utilizados são mais detalhados, muitas vezes heterogêneos, aplicados com a intenção de se obter resultados mais precisos do reator tanto qualitativamente como quantitativamente, onde a precisão computacional tem mais destaque em relação à velocidade computacional. Nos casos de controle e otimização são mais viáveis modelos pautados em soluções mais rápidas e fáceis, gerando respostas que concordem qualitativamente com o processo, os quais podem ser resolvidos em computadores de menor capacidade (Pirkle et al., 1987).

Especificamente este trabalho se presta a estudar um reator de leito fixo de recheio de partículas, sendo um sistema do tipo *plug-flow* para fins de simplificação da análise. O mesmo é um reator tubular de seção transversal constante e, sob condições controladas de fluxo, o perfil de velocidade se torna do tipo *plug*, o que simplifica muito o balanço de energia e massa. No caso aqui em questão tratar-se-á o gradiente de pressão como inexistente na operação, o que descarta ter que resolver equações de *momentum* e, então, o problema se concentrará em estudar a transferência de calor e distribuição de temperatura no sistema.

A formulação dinâmica determinística de reatores de leito fixo é feita através de equações diferenciais parciais para o balanço de massa, energia e momento linear com as devidas condições iniciais e de contorno. As variáveis independentes consistem nas dimensões espaciais - uma, duas ou três - dependendo da dimensionalidade do modelo, e o tempo. Os modelos também podem incorporar a variação das propriedades físicas, e sua influência sobre o escoamento, e dos parâmetros de transferência. Também pode ser incorporada a variação temporal da temperatura do fluido refrigerante, do tipo de material empregado na camisa de refrigeração e nas partículas do empacotamento, bem como suas dimensões, avaliando de forma global a influência das variáveis operacionais no comportamento dinâmico do reator.

Às vezes a modelagem de um reator de leito fixo é bastante simples, como descrever uma única reação em um reator isotérmico. Nestes casos, uma única equação diferencial ordinária ou equação algébrica descreve a concentração de uma única espécie ou a extensão de uma única reação. Muitas vezes o projeto envolve muitas reações e operação não-isotérmica, e sistemas de equações diferenciais ordinárias acopladas ou equações algébricas são necessárias

para descrever a temperatura, pressão e concentrações da espécie. Independentemente da complexidade, o problema de design é abordado da mesma maneira. Existem muitos casos, exceto os mais simples, onde métodos numéricos são necessários para resolver as equações governantes.

Felizmente, as linguagens de programação de alto nível, bem como os códigos comerciais, estão prontamente disponíveis e podem ser facilmente usados para resolver modelos complexos (Rawlings e Ekerdt. 2002).

Quando se lida com metodologia numérica de solução, as não linearidades do modelo dificultam bastante a solução. Um outro agravante é a diferença de capacidades térmicas do sólido e do fluido; ambos se não forem bem tratados podem levar o modelo a reproduzir resposta inversa e “*runaway*” de temperatura (Pirkle et al., 1987).

Os reatores catalíticos de leito fixo apresentam um complexo comportamento tanto em termos de operação em regime estacionário quanto em regime dinâmico. Logo, existem regiões no domínio que apresentam comportamento instável e que mudam no tempo e no espaço, e que são dependentes das perturbações na entrada. Tais ocorrências são designadas como efeitos térmicos de entrada. Isso implica que sem um modelo detalhado, capaz de incorporar esses efeitos, não é possível fazer previsões confiáveis. (McGreavy e Maciel Filho, 1989).

Modelos confiáveis, dependem do conhecimento de como os mecanismos físicos, químicos e fatores externos afetam o desempenho geral do sistema. O grande desafio é obter um modelo representativo, o qual mantenha as características essenciais do sistema (Oliveira, 2004)

2.5.3 Aspectos inerentes à estrutura de leitos fixos e sua simulação

Simulação de reator de leito fixo não é uma tarefa fácil devido a alguns fatores que já foram mencionados, os quais, pode-se dar maior destaque, as perturbações na entrada que influenciam o sistema e dificultam a reprodução do mesmo pelo modelo; a não linearidade das equações diferenciais, que requer estudos mais aprofundados nos métodos numéricos para solucioná-las;

as dificuldades de obtenção de parâmetros de transporte, os quais, se bem estimados, podem evitar o problema de dispersão nos resultados; entre outros.

A adoção de um perfil plano ou parabólico para descrever a velocidade e a temperatura na entrada do reator pode afetar profundamente os resultados do sistema; quanto mais se distanciar da realidade qualquer dado de entrada, maior pode se tornar a discrepância nos resultados da estimativa de parâmetros e conseqüentemente na determinação da grandeza física a ser estudada.

Há condições extremamente delicadas que podem tornar o problema da modelagem matemática de reatores uma tarefa muito inglória, a exemplo da distribuição das partículas de empacotamento do leito. Esta distribuição pode, em determinado nível, influenciar bastante no perfil de velocidade e temperatura do leito, produzindo flutuações angulares de temperatura, as quais, geralmente, devem ser aplicadas técnicas de medição para filtrar as mesmas.

Oliveira (2004) traz em sua tese uma boa discussão a esse respeito quando cita o trabalho de Wijngaarden e Westerterp (1992), com maior destaque entre vários outros, os quais comprovaram que a discrepância na estimativa dos coeficientes de transporte de calor está intimamente ligada aos efeitos térmicos de entrada, principalmente, e na estrutura do empacotamento do leito. Este fato foi observado pelos autores quando reempacotaram um leito e fizeram novas medições nas mesmas condições de operação, apontando para uma distribuição em caráter estatístico do direcionamento da corrente de gás e de valores da porosidade fora de um padrão estabelecido, apresentando máximos e mínimos alternados, se acompanhados em cada altura.

Uma maneira de se tentar minimizar a discrepância na estimativa dos valores de coeficientes de transporte de calor frente a esses efeitos, segundo esses e outros autores, a exemplo de Dixon (1993), Giudici e Nascimento (1989, 1994) e Schouten e Westerterp (1996), seria fazer medições variando-se o ângulo em diferentes posições axiais, obtendo-se médias angulares e gerando-se perfis radiais de temperatura, os quais darão melhor subsídio na determinação dos parâmetros térmicos que regem o escoamento. Essa técnica, que tem algumas variantes, é possível de ser implementada com o uso de um suporte de termopares que tem graus de liberdade na posição axial e angular e, mesmo em leitos cuja relação diâmetro do tubo

por diâmetro de partícula (D_t/D_p) é pequena, tem apresentado resultados promissores quando se utilizam pelo menos oito termopares. A mesma é bem descrita por Dixon (1993).

Conclusões gerais sobre o caráter estatístico das variações angulares de temperatura do leito apontadas por Schouten e Westerterp (1996) podem assim ser listadas: o reempacotamento do leito conduz aproximadamente às mesmas temperaturas médias após cada reempacotamento, apesar das diferenças nos desvios padrões; nos experimentos de transferência de calor, as maiores variações angulares de temperatura provocadas pelos gradientes radiais de temperatura ocorrem na região de entrada; apesar do caráter estatístico do leito resultar em significativas variações de temperatura, estas podem ser desprezadas se uma temperatura angular média for usada.

Diante do exposto, é plausível que, com um modelo determinístico bidimensional, se possa interpretar os dados térmicos e fazer estimativa confiável dos parâmetros do modelo.

Sumariamente os modelos utilizados no estudo da transferência de calor em leitos fixos são dois: o modelo heterogêneo (fase sólida + fase fluida) e o modelo a uma fase (pseudo-homogêneo).

No modelo a duas fases (sólida + fluida), também chamado de heterogêneo, cada fase tem uma dinâmica independente na transferência de calor, necessitando da definição de um parâmetro para cada fase e um outro cuja função é fazer a ponte de comunicação da transferência de calor entre elas. Trata-se de um modelo mais realista do ponto de vista físico, mas a sua modelagem possui complicações, a saber: solução consideravelmente mais complicada das equações da energia, dificuldade experimental na determinação do coeficiente de transferência de calor sólido-fluido necessário a esse modelo e a dificuldade na medida pontual da temperatura para cada fase (especialmente nos casos onde $D_p \leq 3$ mm) (Oliveira, 2004).

No modelo pseudo-homogêneo, as fases se comportam como uma única fase, não há distinção entre elas e é postulado que a mistura (sólido + fluido), em termos de transferência de calor, está à mesma temperatura em cada ponto do leito. A natureza heterogênea do leito é

comunicada ao modelo apenas indiretamente ou implicitamente por meio de parâmetros efetivos.

Entre os vários modelos pseudo-homogêneos reportados na literatura pode-se mencionar o uso daqueles unidimensionais que são usados preferencialmente para leitos de baixa razão diâmetro do tubo para diâmetro de partícula (Colburn, 1931). Geralmente nesses modelos assume-se temperatura constante ao longo de uma posição radial e apenas um parâmetro de transporte para ser estimado que é o coeficiente global de transferência de calor.

Os modelos bidimensionais agregam os efeitos da variação radial e axial de temperatura. Geralmente há dois parâmetros ou mais a serem estimados que são um coeficiente de transferência de calor parede-leito, uma condutividade térmica radial e outra axial. O termo difusivo da equação da energia na direção axial às vezes é desprezado em algumas modelagens devido, dependendo das condições do sistema, pouco influenciar nos resultados e ainda poupar tempo e esforço computacional. Sendo assim, torna-se desnecessária a determinação de uma condutividade térmica axial e, a condutividade térmica a ser estimada, nesse caso, chama-se condutividade térmica efetiva.

2.6 Importantes pesquisas na literatura (Estado da arte)

A fim de se enriquecer ainda mais o nível de informações acerca do problema de transferência calor em reator de leito fixo faz-se necessário averiguar na literatura problemas semelhantes ao que está sendo estudado neste trabalho. Isto é de crucial ajuda no tocante a fornecer o que há de mais consagrado ou atual em correlações para estimativa de parâmetros, em mecanismos físicos com modelagem validada, além de dados para subsidiar comparações com resultados obtidos. A seguir, está catalogada uma coletânea de alguns importantes trabalhos na literatura que podem vir a contribuir para a supracitada finalidade. Vale salientar que todos eles tratam da convencional geometria cilíndrico-circular, nenhum se reportando à geometria cilíndrico-elíptica deste trabalho.

Wash e Froment (1972) estudaram a transferência de calor em leito fixo no tocante às interações térmicas do escoamento fluido/parede por meio de um modelo unidimensional caracterizado por um coeficiente de transferência de calor global, e também por dois modelos

bidimensionais em que um deles é a um parâmetro, a saber, a condutividade térmica efetiva, e o outro é a dois parâmetros, os quais são a condutividade térmica e o coeficiente de transferência de calor na parede. Os resultados experimentais para todos os parâmetros aqui mencionados são dados como correlações em função do número de Reynolds, do empacotamento e do diâmetro do tubo, sendo as mesmas correlações todas lineares. Os autores ainda registram correlações entre os parâmetros de vários modelos.

Tsotsas e Schlünder (1990) em seu trabalho mostram que a abordagem de se adotar um coeficiente de transferência de calor para a parede de um leito empacotado é adequada apenas para grandes valores do número de Peclet molecular (Pe_o). Nesta região, a transferência de calor para a parede é inibida por uma camada de fluido não misturado. Para pequenos valores do número de Peclet molecular não existe resistência na parede rígida. Os autores sugerem que os resultados experimentais para esta região poderiam ser plotados num diagrama Nusselt – Graetz, usando as propriedades efetivas do leito nas definições de números adimensionais. Os mesmos fazem uma rica discussão sobre o tipo de condição de contorno que pode ser utilizada na região de parede com a modelagem por eles utilizada, e também da influência da má distribuição lateral da velocidade do fluido e /ou condutividade térmica, da dispersão axial de calor, e dos pequenos erros sistemáticos nas medições.

Wijngaarden e Westerterp (1992) estudaram a transferência de calor em um leito fixo utilizando um modelo heterogêneo. Para descrever as mudanças dos perfis de temperatura radial e axial, eles assumiram que o transporte de calor nas fases gasosa e sólida ocorriam em série pela atuação de três mecanismos de transferência de calor: do sólido para o gás, descrito pelo coeficiente de transferência de calor entre partícula e gás; do gás em direção à parede externa, descrita pela condutividade térmica radial efetiva, e a transferência de calor na parede através do gás, por sua vez, descrita pelo coeficiente de transferência de calor entre o leito fixo e a parede. Os valores desses três coeficientes foram determinados pelo ajuste dos perfis de temperatura medidos através do modelo heterogêneo dinâmico proposto. Foram empregados para a sua pesquisa dois leitos empacotados com diferentes diâmetros de partícula com geometria de anel.

Os valores obtidos para o coeficiente de transferência de calor entre partícula e gás, a condutividade térmica radial efetiva e o coeficiente de transferência de calor entre o leito fixo

e a parede apresentaram boa concordância com os apresentados na literatura. Ainda se obteve boa concordância entre os perfis de temperatura medidos e os obtidos pelo ajuste do modelo, o que pode confirmar a eficácia do modelo de série como fisicamente realista. Ainda foi constatado que é muito significativa a heterogeneidade do leito compactado na modelagem.

Borkink e Westeterp (1992) fizeram um estudo a fim de tratarem da determinação do coeficiente de transferência de calor efetivo parede-leito para leitos empacotados resfriados. Os autores verificaram as influências sob várias considerações geralmente feitas na literatura para a condutividade térmica radial efetiva, coeficiente de transferência de calor na parede e coeficiente de transferência de calor global. Para isso utilizaram um sistema que consistiu em um leito empacotado de paredes resfriadas e sem reações químicas. Foram estudadas a influência da presença de perfis radiais de velocidade e uma correlação de parâmetros foi obtida e avaliada.

Como conclusões de seu trabalho, estes autores observaram que a escolha do tipo de condição de contorno de entrada pode influenciar fortemente nos valores obtidos. Por exemplo, se o perfil de temperatura for considerado plano quando na realidade seria curvo, pode implicar numa aparente dependência do comprimento do leito para os coeficientes de transferência de calor e para o termo de dispersão axial. A presença de um perfil de velocidade superficial radial pode conduzir a maiores taxas globais de transferência de calor radial. A condutividade térmica na direção radial e o coeficiente de transferência de calor na parede foram determinados, verificando-se uma forte correlação entre eles. Além disso, foi verificado que ambos os parâmetros são independentes do diâmetro do tubo.

Borkink e Westeterp (1994) estudaram em um reator de leito fixo de paredes resfriadas, a influência dos perfis de porosidade radial e de velocidade sobre a temperatura predita e a concentração dos mesmos perfis próximo à parede com e sem reação química exotérmica de primeira ordem. Para tal, os autores partiram de correlações da literatura para os coeficientes de transporte de calor efetivo, obtendo outras variantes a partir de experimentos tipo “*cold - flow*” por meio de ajustes do modelo que levaram em consideração ou não o perfil de velocidade radial. Os perfis de porosidade e velocidade radial foram aproximados por uma função de degrau, modelo chamado pelos autores de “modelo de duas zonas”.

Ficou demonstrado que a condutividade térmica efetiva radial pode ser constante ao longo do raio, apesar do efeito de parede. No entanto, a influência de um perfil de velocidade superficial radial pode ser significativa sobre o termo convectivo do balanço de energia, especialmente para baixas relações D_t/D_p . O NTU predito, número que os autores definem como unidades de transferência de calor para fins de comparação entre dois sistemas diferentes e que é função da temperatura, pode aumentar na ordem de 20% para valores elevados do número de Reynolds e até 100% para valores baixos deste parâmetro. Isto é confirmado pelos resultados obtidos a partir de ajuste do modelo. No caso de uma reação exotérmica de primeira ordem, valores significativamente mais elevados para as temperaturas em pontos de contato com a parede são previstos se um perfil de porosidade e velocidade radial é incorporado nos balanços de calor e massa. A explicação para isso seria principalmente a não-uniformidade da distribuição de catalisador ativo ao longo do raio, devido ao perfil de porosidade.

Dixon e van Dongeren (1998) estudaram as variações dos parâmetros de transporte de calor quando se muda o diâmetro de tubo e de partículas simultaneamente, mantendo-se fixa a relação diâmetro tubo/diâmetro da partícula, usando um modelo pseudo - homogêneo em experimentos em leito fixo de paredes aquecidas. O tipo de empacotamento utilizado foi de esferas de cerâmica porosa, nylon e aço. Três colunas de diâmetros diferentes foram usadas numa razão de $D_t/D_p = 8$. Dois conjuntos de experimentos foram realizados, entre os quais o sistema de aquisição de dados foi alterado e várias peças de equipamentos reconicionados. As experiências foram também realizadas com esferas de nylon com $D_t/D_p = 4$, utilizando-se quatro colunas de diferentes diâmetros.

Como respostas ao estudo, verificou-se que o efeito da condutividade térmica radial para cada empacotamento teve excelente concordância, para ambos os casos $D_t/D_p = 8$ e $D_t/D_p = 4$, dando então suporte à hipótese de que este parâmetro deve depender apenas da relação D_t/D_p e não dos diâmetros dos tubos e de partículas individualmente. O coeficiente aparente de transferência de calor na parede apresentou boa concordância para todas as quatro colunas para $D_t/D_p = 4$. Para $D_t/D_p = 8$, os valores deste último parâmetro nas colunas maiores e menores, para cada empacotamento, também apresentaram boa concordância. Os valores do coeficiente aparente de transferência de calor na parede obtidos a partir de uma coluna com diâmetro intermediário foram sistematicamente superiores em quase todos os casos. As comparações com experiências anteriores na mesma coluna sugeriram que os valores desse trabalho foram

muito altos e que o coeficiente aparente de transferência de calor na parede também depende apenas da relação D_t/D_p .

Thoméo e Freire (2000) realizaram estudos sobre a transferência de calor em um leito compactado de grânulos de vidro percolados por ar à velocidades moderadas. Uma análise estatística rigorosa dos dados experimentais foi realizada e o modelo tradicional a dois parâmetros foi usado para a modelagem. Os parâmetros estimados foram a condutividade térmica radial e coeficiente de parede, através do método dos mínimos quadrados. Os resultados foram avaliados considerando uma temperatura fixa de entrada no leito, um razoável número de termos da série para a solução e o número de pontos experimentais utilizados na estimativa. Seus resultados indicaram que uma pequena diferença na temperatura de entrada do leito foi suficiente para promover grandes modificações nos parâmetros estimados e nas propriedades estatísticas do modelo.

Nijemeisland e Dixon (2001) fizeram um trabalho o qual mostra uma comparação de resultados quantitativos experimentais com dados de CFD de um problema de transferência de calor em leito fixo com reação gás-sólido. As simulações foram apresentadas para uma geometria do modelo com 44 esferas sólidas num tubo com relação diâmetro do tubo/partícula (D_t/D_p) igual a 2. Perfis do vetor velocidade e isotermas foram obtidos, com ênfase na região parede-partícula. As comparações são feitas com perfis de temperatura medidos em uma configuração experimental típica com a mesma geometria. Vários fatores de correção foram requeridos a fim de compensar as não linearidades das medições experimentais e para os fenômenos que não foram incluídos no modelo de CFD. Após a correção, encontrou-se excelente concordância entre simulação e experimento.

Ferreira et al. (2002) estudaram experimentalmente a transferência de calor em leito fixo empacotado com partículas adsorventes poliméricas percolados por uma fase líquida com escoamento ascendente à 60°C e também descendente à 20°C em uma coluna com 9 cm de diâmetro e 1 m de comprimento. Eles mediram o perfil de temperatura transiente axialmente e radialmente nessa coluna, e utilizaram um método baseado na verificação da independência linear das funções de sensibilidade, que permitiu mostrar que os parâmetros térmicos poderiam ser obtidos a partir dos dados experimentais provenientes da localização radial e axial dos sensores. O método ainda proveu informação sobre os pontos de localização ótima dos sensores.

Os autores ainda compararam respostas transientes da temperatura experimental com aquelas preditas pelos modelos unidimensional (1D) e bidimensional (2D) pseudo-homogêneos. Através do ajuste da solução do modelo bidimensional às respostas experimentais, foram encontrados valores para os parâmetros térmicos, a saber, condutividade térmica radial e axial, e coeficiente de transferência de calor na parede.

A manufatura do Nylon 12 é feita mediante um processo de polimerização a partir de partículas monômeras sólidas. Este processo ocorre com ar circulando nos interstícios de um meio poroso em um leito fixo, sendo que o oxigênio do ar é um forte inibidor da reação de polimerização, e é, portanto, indesejável no processo, tendo que ser eliminado.

Com o intuito de aperfeiçoar esse processo, Natarajan et al. (2005) propuseram um trabalho que visa contribuir com a eliminação desse oxigênio de forma mais efetiva. Para tal, estes autores utilizaram um método numérico para otimizar os parâmetros que afetam o processo de eliminação do oxigênio em leitos fixos, tais como o número de jatos de injeção de nitrogênio (o qual ocupa o lugar do ar nos interstícios para eliminar a presença do O_2), sua posição e ângulos, etc, no intuito de economizar tempo e reduzir custos.

Entretanto o modelo numérico precisou ser validado antes de conduzir tal estudo paramétrico. Dessa forma, experimentos no escoamento fluido no leito fixo foram conduzidos a fim de avaliar o modelo numérico. Os resultados do mesmo foram confrontados com dados experimentais e resultados analíticos, e boa concordância foi obtida para um modelo com geometria simplificada. O modelo é capaz de propor a melhor combinação da quantidade de jatos de injeção de nitrogênio, posição de jatos e angulação, no sentido de produzir a melhor efetividade na eliminação de oxigênio no meio poroso. Os autores trataram o escoamento gasoso através do leito fixo como sendo um escoamento em meio poroso, sendo que a resistência ao escoamento devido à presença do meio poroso é representada por um termo de correção de momento nas equações de Navier- Stokes.

Dixon e Nijemeisland (2005) estudaram a inclusão da condução de calor na parede de um tubo sob condições típicas de reforma de vapor. Eles usaram a fluidodinâmica computacional (CFD) para obter detalhes dos campos de temperatura e do escoamento em um segmento de parede representativo do tubo com empacotamento de esferas, cilindros completos

e cilindros com vazios internos. A temperatura média da parede não foi afetada pela inclusão da condução na parede, nem os perfis radiais de temperatura no leito também, contudo, a distribuição de temperatura na parede mudou consideravelmente. A inclusão da condução na parede limitou a distribuição de temperatura na parede do tubo, suprimindo temperaturas extremas.

Moreira et al. (2006) em seu trabalho, analisaram cinco dos mais utilizados modelos pseudo-homogêneos (para um, dois e três parâmetros), para as configurações de fluxo de gás e líquido-gás. Os modelos foram avaliados quanto aos seguintes aspectos: (a) o ajuste entre as temperaturas calculadas e medidas, (b) os valores dos parâmetros térmicos, (c) seus intervalos de confiança, (d) a qualidade da estimativa dos parâmetros térmicos e (e) a dependência não-linear das temperaturas calculadas sobre os parâmetros térmicos (usando as medidas de curvatura de Bates e Watts).

Como principais resultados observou-se que: 1) Particularmente no fluxo de gás-líquido, os ajustes entre os perfis de temperatura calculados e medidos são melhores para modelos em que um coeficiente de transferência de calor na parede é incorporado para considerar a resistência convectiva na parede do leito; 2) Notou-se que os valores dos parâmetros térmicos ajustados a partir dos modelos pseudo-homogêneos podem ser muito diferentes em condições operacionais idênticas; 3) A condutividade térmica axial efetiva pode ser desprezada na modelagem porque sua estimativa não afeta as funções residuais. Além disso, a estimativa deste parâmetro é complicada, porque depende da suposição inicial e também porque o mesmo é extremamente sensível a alterações nas condições operacionais; 4) Os intervalos de confiança para os parâmetros dependem do modelo e são também afetados pelas condições experimentais; 5) A estimativa dos parâmetros foi adequada para os modelos de condutividade térmica efetiva radial - coeficiente de transferência de calor na parede (k_r-h_w), e condutividade térmica efetiva radial - condutividade térmica efetiva axial ($k_r - k_a$).

Modelos unidimensionais tubulares de reatores de leito fixo são quase sempre utilizados quando o esforço computacional requerido é pequeno, porém, é conhecida na literatura como principal desvantagem, o fato de a taxa de reação ser calculada usando a temperatura média ao longo da secção transversal do reator. A implicação disso é que a diferença entre a velocidade de reação e a taxa média de reação através da secção transversal torna-se cada vez mais

significativa com o aumento da diferença de temperatura ao longo do raio do reator e com o aumento da energia de ativação da(s) reação(ões).

De posse dessas informações Koning et al. (2006) desenvolveram em seu trabalho um novo modelo como uma alternativa aos modelos unidimensionais existentes. Ele tem a mesma forma que o modelo unidimensional convencional e contém apenas funções explícitas. É demonstrado que, em condições com considerações bem próximas, o novo modelo tem um desempenho melhor do que o modelo δ que é mais conhecido na literatura. Também foi constatado por esses autores que o novo modelo proposto é simples o suficiente para ser implementado em uma planilha, e que seus resultados tem boa concordância com o modelo 2D homogêneo.

Wen et al. (2006) relatam em seu artigo um estudo experimental que fizeram sobre o comportamento da transferência de calor no escoamento de um gás que flui de um leito fixo em condições de regime transiente e também em estado estacionário, sob a consideração de temperatura de parede constante. A condutividade térmica efetiva e coeficiente de transferência de calor por convecção foram derivados com base em medições em estado estacionário e o modelo usado foi o bidimensional tipo *plug flow* com dispersão axial (2DADPF).

Os resultados reportados nesta pesquisa revelam uma grande queda de temperatura na região da parede, sendo essa queda depende da distância axial a partir da entrada. O modelo 2DADPF prediz a distribuição axial de temperatura razoavelmente bem, mas a previsão é ruim para a distribuição de temperatura radial, creditando-se como responsáveis por isso, a dependência dos parâmetros efetivos de transferência de calor em relação ao comprimento do leito e a não uniformidade do escoamento. Uma comparação com correlações previamente publicadas e dados na literatura mostra que as relações propostas por Bunnell et al. (1949) e Demirel et al. (2000) concordam bem com as medidas de condutividade térmica radial efetiva, enquanto o coeficiente de transferência de calor parede - fluido é melhor representado pela correlação Li-Finlayson (1977).

Laguerre et al. (2006) estudaram a transferência de calor entre a parede e o leito fixo composto por esferas de diâmetro de 3.8 cm atravessado por fluxo de ar de baixa velocidade. Na sua abordagem, consideraram temperaturas locais para as fases fluida e sólida a fim de

caracterizar a transferência de calor entre a parede e o ar e entre a parede e as partículas adjacentes. Uma correlação adimensional foi proposta para estimar o coeficiente de transferência de calor por convecção. A condução entre os produtos foi quantificada experimentalmente e uma extrapolação dos resultados foi proposta para estimar as trocas de calor entre a parede condutora e os produtos.

Entre alguns de seus resultados, verificou-se que a velocidade do ar e a posição ao longo da parede tem grande influência na transferência de calor convectiva entre cavidade da parede e o ar. Já o efeito da diferença de temperatura entre a parede e o ar é desprezível. O simultâneo desenvolvimento hidrodinâmico e térmico contribuiu para uma redução do coeficiente de transferência de calor por convecção em comparação com o efeito de desenvolvimento hidrodinâmico isoladamente. Foi também observado que, comparando-se os dois estudos feitos, em ambas as simulações, as temperaturas do ar e do produto foram bastante heterogêneas em ambas as direções radial e axial.

No intuito de investigar o coeficiente de transferência de calor partícula-fluido que é de fundamental importância para projetos de reatores de leito fixo, Guardo et al. (2006) utilizaram um *software* comercial de CFD para resolver o problema da transferência de calor partícula-fluido em leito fixo.

Estes autores analisaram duas configurações diferentes: convecção forçada à baixa pressão (com o ar como fluido circulante) e mista (ou seja, livre + forçada) em alta pressão (com CO₂ supercrítico como fluido circulante). A fim de impor propriedades do fluido supercrítico para o modelo, modificações no código de CFD foram introduzidas por meio de funções e equações definidas pelo usuário. Os dados numéricos obtidos de velocidade de escoamento e temperatura foram comparados com dados publicados anteriormente e uma correlação diferenciada baseada em CFD (para convecção livre, forçada e mista em alta pressão) foi apresentada. Entre os principais resultados obtidos por esses autores pode-se listar: 1) Comparando-se os resultados numéricos obtidos para o coeficiente de transferência com o obtido por Ranz e Marshall (1952), obteve-se uma boa concordância; 2) Quanto a influência da velocidade do fluido sobre a transferência de calor, foi analisada a convecção forçada à baixa pressão e verificou-se que, para valores de $Re > 10$, onde $Re = \frac{\rho u_{zint} D_p}{\mu}$, foi obtida uma boa concordância com a correlação apresentada por Wakao et al. (1979); 3) Em números de

Reynolds inferiores ($Re < 10$), os resultados mostram que o ajuste com a mesma correlação não é bom; 4) Nenhuma sensibilidade de malha foi notada entre a zona laminar e de transição, mas na zona de fluxo turbulento uma boa definição da malha em torno da superfície das partículas é de importância primordial a fim de captar os efeitos associados à turbulência; 5) Outra conclusão importante foi que os resultados numéricos obtidos validaram a proposta de uma correlação modificada a partir da apresentada por Stüber et al. (1996). A correlação deste autor é válida para a transferência de massa por convecção mista sob condições supercríticas em leitos fixos. A forma modificada obtida pode ser usada para descrever os fenômenos de transferência de calor em um leito fixo sob regime de convecção mista em altas pressões.

Schröder et al. (2006) estudaram a transferência de calor entre partículas e o gás em leitos fixos de partículas à baixos números de Reynolds. Os autores obtiveram, através de medições locais de temperatura do gás e da partícula, dados transientes de transferência de calor durante o fluxo de gás nitrogênio através de leitos fixos preenchidos por partículas porosas de ardósia e de cubos de madeira. O coeficiente de transferência de calor convectivo entre o fluido e as partículas sólidas foi calculado a partir das medições de temperatura. As variações da temperatura do gás e as taxas de escoamento foram levadas em conta. A influência da radiação sobre o transporte de calor foi considerada numericamente resolvendo - se as equações para um modelo de partículas unidimensional

Listam-se, sumariamente, como principais conclusões desta pesquisa que: 1) O arranjo especial das partículas de teste assegura que a condução de calor é excluída. 2) O aumento do fluxo do gás conduz o sistema a maiores valores do coeficiente de transporte de calor. 3) Os resultados experimentais são comparados com as relações funcionais entre os números de Nusselt e Reynolds (baseados no diâmetro da partícula) dados por vários autores, mostrando uma grande variância, em particular em baixos números de Reynolds ($Re_p < 200$). Esse fato pode se creditar à falta de homogeneidade das velocidades nos poros e é tratado por um método estatístico, resultando em funções de distribuição de probabilidade logarítmica para os diferentes materiais. Essas funções são úteis para o tratamento matemático do aquecimento dos leitos aleatoriamente empacotados; 5) É mostrado que, abaixo de 500 °C, a influência da radiação é desprezível.

Akpan et al. (2007) realizaram estudos experimentais, cinéticos, e de modelagem e simulação de dióxido de carbono obtido da reforma de metano (CDRM) num reator catalítico de leito empacotado com o uso de um novo catalisador de Ni/CeO₂ - ZrO₂. A modelagem do reator foi realizada utilizando um modelo numérico abrangente consistindo de balanços acoplados das equações de massa e energia bidimensionais. O modelo cinético que melhor prognosticou as taxas experimentais foi desenvolvido com base na formulação Eley-Rideal (ER), assumindo a adsorção dissociativa do metano como o passo determinante da taxa de reação.

Com relação ao modelo cinético, o melhor modelo mecanicista desenvolvido foi incorporado no modelo de reator que continha o termo de dispersão axial e foi resolvido usando o método de elementos finitos. A validade do modelo de reator foi testada diante de dados experimentais e uma concordância satisfatória entre a predição do modelo e resultados medidos foi obtida. Além disso, os perfis de concentração e de temperatura preditos para o referido processo, na direção radial indicam que a hipótese de comportamento tipo *plug flow* isotérmico está justificado em determinadas condições da cinética de funcionamento.

Wen et al. (2007) reportaram em seu trabalho um estudo experimental em ambos os regimes estacionário e transiente, do comportamento da transferência de calor para uma mistura de duas fases, gás-sólido, escoando através de um leito empacotado sob condições de temperatura de parede constante. O método de diferença de temperatura média logarítmica (LMTD) foi usado para processar os dados de temperatura e obter o coeficiente de transferência de calor global. As influências da carga de partículas e do número de Reynolds do escoamento de gás sobre o perfil de temperatura foram investigadas.

Os resultados obtidos por estes autores mostram que a introdução de partículas em suspensão aumenta grandemente a transferência de calor entre o escoamento da mistura gás-sólido e o leito empacotado. Os dados do coeficiente de transferência de calor foram processados para se obter o número de Nusselt, o qual é bem correlacionado com o número de Reynolds, o número de Arquimedes e a relação de carga de partículas em suspensão. Uma comparação entre os dados obtidos com os dados publicados na literatura revela grande discrepância, sendo os efeitos térmicos de entrada, as diferentes condições de contorno e os materiais do leito fixo considerados como possíveis razões.

Laguerre et al. (2008) realizaram duas abordagens de modelagem de transferência de calor transiente por convecção livre em um leito fixo de esferas comparando com resultados experimentais. Na primeira abordagem usaram um *software* de dinâmica dos fluidos computacional que resolve diretamente as equações de Navier-Stokes e as equações de energia locais para ambas as fases fluida e sólida, incluindo também radiação entre as superfícies sólidas. Na segunda abordagem, estes autores utilizaram métodos desenvolvidos para meios porosos e leitos compactados. O modelo de transferência de calor, com base numa abordagem de partículas dispersas, levou em conta a convecção ar-partículas, condução e radiação entre as partículas e condução unidimensional no interior das mesmas. Os resultados numéricos obtidos com as duas abordagens tiveram boa concordância com os valores experimentais para temperatura do ar e de partículas para uma configuração de convecção livre particular. Segundo os autores, a principal limitação desta abordagem é a necessidade de correlações para a resistência ao fluxo de fluido e coeficientes de transferência de calor que são específicos para uma dada geometria.

Yang et al. (2010) estudaram numericamente a transferência de calor do escoamento de ar no interior de pequenos poros, usando novos modelos de leito fixo estruturado e caracterizados pelo empacotamento feito com partículas elipsoidais ou esféricas não uniformes.

Trata-se de um trabalho inovador no qual alguns novos fenômenos de transporte foram obtidos. As equações de Navier-Stokes tridimensionais e o modelo de turbulência RNG k- ϵ junto com a função de parede foram adotados para os cálculos. Os efeitos da forma de empacotamento e geometria das partículas foram estudados em detalhes e os desempenhos do escoamento e da transferência de calor em leitos com empacotamentos uniforme e não uniforme também foram comparados uns com os outros.

Em primeiro lugar, verificou - se que, mediante uma seleção adequada da forma do empacotamento e a geometria da partícula, a queda de pressão em leitos compactados estruturados pode ser bastante reduzida e a performance global de transferência de calor melhorada. As correlações tradicionais de transferência de calor e escoamento extraídos de empacotamentos aleatórios foram usadas para prever as quedas de pressão e o número de Nusselt para todas estas empacotamentos estruturados, e novas correlações de transferência calor e escoamento fluido foram obtidas.

Em segundo lugar, foi também obtido que, ambos os efeitos da forma de empacotamento e geometria de partículas são significativos sobre a transferência de calor e o escoamento fluido nos leitos empacotados estruturados. Com a mesma geometria de partículas (esfera), a eficiência de transferência de calor global de empacotamentos cúbicos simples (SC) é mais alta. Com a mesma forma de empacotamento, tais como empacotamentos cúbicos de faces centradas (FCC), o desempenho da transferência de calor global do modelo de partículas elipsoidais longas é o melhor. Além disso, com a mesma geometria de partículas e forma de empacotamento, tais como o cúbico de corpo centrado (BCC) e empacotamento com esferas, o desempenho de transferência de calor global do modelo de empacotamento uniforme é melhor que o do modelo de empacotamento não uniforme. Os autores alegam ser o seu modelo muito útil para projeto de reatores de leito fixo.

Augier et al. (2010) investigaram os parâmetros de transporte na transferência de calor dentro de leitos recheados com partículas esféricas via simulações em CFD. As propriedades de transferência de calor e massa foram calculadas em configurações de empacotamento de complexidade crescente variando de baixos para moderados números de Reynolds ($1 < Re < 80$). Somente os escoamentos em fase líquida foram estudados sob $300 < Sc < 1000$, onde $Sc = \frac{\nu}{D_m}$. O problema de pontos de contato entre as partículas, que é inerente ao método numérico de volumes finitos, é resolvido pela aplicação de uma contração de 2% sobre todas as partículas do leito. Mostrou-se que este tratamento tem muito pouca influência sobre os resultados quando analisados com números adimensionais como $Nu = f(Re, Pr)$ ou $Sh = f(Re, Sc)$.

Os autores conceberam a simulação de empacotamento muito denso de esferas utilizando um método dos elementos discretos para representar o meio granular real, o que resultou em predições bastante realistas para o modelo. Coeficientes de dispersão longitudinal e transversal foram determinados para geometrias contendo centenas de partículas. As predições dos coeficientes de dispersão foram consistentes com a literatura, mas foi aplicada uma correção para melhorar os resultados, porque a contração do leito levou à subestimação do coeficiente de dispersão transversal. O modelo estudado pelos autores pode ser muito promissor para o estudo do fenômeno da “canalização perto da parede” em pequenas colunas empacotadas provocado pela heterogeneidade do perfil de porosidade perto da parede.

Eppinger et al. (2011) desenvolveram um novo método para empacotar leitos fixos que consiste em partículas esféricas monodispersas no qual as partículas são achatadas perto dos pontos de contato entre partícula-partícula e partícula-parede, respectivamente, a fim de evitar células de qualidades ruins. Comparado com os métodos conhecidos da literatura, as modificações foram tão pequenas que uma posterior correção destas alterações não foi necessária no tocante a porosidade e queda de pressão. Simulações em CFD foram realizadas em tubos com as razões de diâmetro do tubo/diâmetro de partícula no range $3 \leq D_t/D_p \leq 10$ nos regimes de fluxo laminar, de transição e turbulento, e foram comparados com resultados da literatura referente a porosidade e queda de pressão. O padrão de fluxo dentro do leito também foi investigado.

A metodologia de trabalho adotada por estes autores consistiu na geração do leito com o DEM, geração geométrica via CAD articulada com a simulação em CFD, num processo que é totalmente automatizado e os resultados foram obtidos em poucas horas. o domínio fluido foi gerado com o código comercial chamado CFD STAR-CCM+. Os autores observaram que este método pode ser adaptado para qualquer tipo de geometria de partícula. O modelo de abordagem para uma velocidade variando radialmente apresentou uma significativa melhoria em comparação com a premissa de fluxo plano. No entanto, foi observado que este modelo não pode ser aplicado para regiões com estagnação ou contra - fluxo. Assim, uma simulação CFD de reatores de leito fixo, com uma relação D_t/D_p pequena feita de forma tridimensional é útil e razoável para uma melhor compreensão de, por exemplo, reatores em escala laboratorial para catálise heterogênea. Para tais reatores é importante conhecer exatamente os campos de temperatura e concentração e, no momento, apenas usando CFD este conhecimento pode ser obtido em curto período de tempo.

Béttega et al. (2011) utilizaram um modelo matemático pseudo-homogêneo para descrever a transferência de calor em leito fixo considerando perfil de velocidade e porosidade oscilatórios, usando um modelo dependente do raio para a condutividade térmica radial efetiva. Vários perfis de temperatura foram obtidos para um leito compactado com uma fonte térmica localizada na parede. A temperatura predita e a condutividade térmica obtidos das simulações foram comparados com dados experimentais e com resultados de um modelo baseado no ajuste da condutividade térmica radial efetiva uniforme. Os resultados indicam que o modelo

matemático proposto foi capaz de representar os perfis de temperatura no leito fixo sem necessitar de usar alguma condutividade térmica efetiva obtida de ajuste de dados.

Behnam et al. (2013) apresentaram uma nova abordagem baseada em velocidade para transferência de calor radial em leito fixo. Componentes de velocidade axial e radial foram usados a partir de resultados detalhados gerados de simulação via fluidodinâmica computacional 3D em leitos fixos de esferas, a fim de modelar a convecção térmica radial de um novo modelo. Os termos de convecção foram acoplados com um leito estagnado, variando radialmente a condutividade térmica, em um modelo 2D pseudo-contínuo de transferência de calor em leito. A condutividade térmica efetiva radial e o coeficiente de transferência de calor aparente da parede não foram utilizados, e não havia parâmetros ajustáveis. A variação das temperaturas radial e axial prevista pelo modelo baseado na velocidade concordou muito bem com as temperaturas angulares média de simulações de CFD 3D na faixa de $80 \leq Re \leq 1900$ ($Re = \frac{\rho D_p u_z}{\mu}$) e $D_t/D_p = 3.96, 5.96$ e 7.99 .

Wehinger et al. (2015) realizaram um estudo com um modelo tridimensional para simulação de reforma catalítica de metano seco (DRM) sobre ródio em um reator de leito fixo em combinação com um mecanismo de reação detalhado. O leito foi constituído por 113 partículas sólidas esféricas em que sua condutividade térmica foi considerada. Dois números de Reynolds de partícula ($Re_p = \frac{u_{zint} D_p}{\nu}$) diferentes foram investigados (35 e 700). Como resultados observados, os autores listaram que: o sistema de leito fixo simulado demonstra a forte interação entre cinética química e transporte de *momentum*, calor e massa; os campos de velocidade, temperatura e espécies são caracterizados pelo seu comportamento tridimensional. Além disso, o mecanismo de reação determina regiões com desativação do catalisador por deposição de carbono. Este estudo demonstra as vantagens do modelo heterogêneo totalmente tridimensional de reator de leito fixo catalítico com pequenos valores para D_t/D_p em combinação com mecanismos de reação detalhada.

Uma poderosa ferramenta de simulação de empacotamento de leitos com pequena relação D_t/D_p que vem ganhando força na indústria e na academia para apoiar as simulações tridimensionais CFD, é a técnica de Método de Elementos Discretos (DEM).

A técnica consiste, em linhas gerais, em simular um empacotamento de leito por meio de software que simula a geometria e a queda das partículas, sendo que a acomodação das partículas é aceita pelo software quando estas atingem velocidade nula na queda, sendo necessárias correções pelo fato de que no problema real há uma maior compactação das partículas. Quando a simulação do empacotamento é concluída, através de cascas cilíndricas coaxiais faz-se uma medida da porosidade do leito a nível planar e se reproduz o perfil radial final com esses resultados. Nesses problemas envolvendo DEM é necessário fazer um malhamento do domínio admitindo-se pequenos espaços vazios entre as partículas que estão em contato, de forma a fazer comunicação entre os espaços vazios; essa técnica se chama “achatamento” e acarreta uma alteração mínima no valor da porosidade total que não vem a distorcer o modelo, devido aos mínimos erros. (Mueller, 2005; Dong et al., 2017; Eppinger et al., 2011).

Fazendo uso das técnicas inovadoras de medição de perfil de porosidade, Dong et al. (2017), antes fazendo a validação do perfil de porosidade por ele obtido via DEM com medições experimentais próprias e também com resultados de outros autores (de Klerk, 2003; Mueller, 2005), obteve perfis radiais de temperatura e pressão em um reator de leito fixo de tubo fino repleto de esferas de vidro e anéis de esteatita em diferentes alturas de empacotamento e diferentes taxas de escoamento a uma relação $D_t/D_p = 5.96$ e 7. Os autores verificaram a influência de várias variáveis no modelo como pressão relativa, vazão de entrada em escoamento ascendente, módulo de Young e coeficiente de atrito estático. Uma boa concordância foi encontrada entre medidas experimentais e resultados simulados para ambos os tipos de empacotamento.

Os autores verificaram ainda, através de gráficos, que um modelo de porosidade radial sofre variações angulares e que se o mesmo for tratado sem variação angular num modelo bidimensional, pode fornecer resultados insatisfatórios, sendo que o problema das variações angulares no perfil radial pode ser mitigado com o uso de um modelo tridimensional.

Na Figura 2.4 a - c pode-se ver o “achatamento” das partículas para facilitar a construção da malha para aplicação das equações de momento linear; as cascas cilíndricas que dão suporte ao cálculo da porosidade média na respectiva posição radial das mesmas, e a acomodação das partículas simulada via DEM.

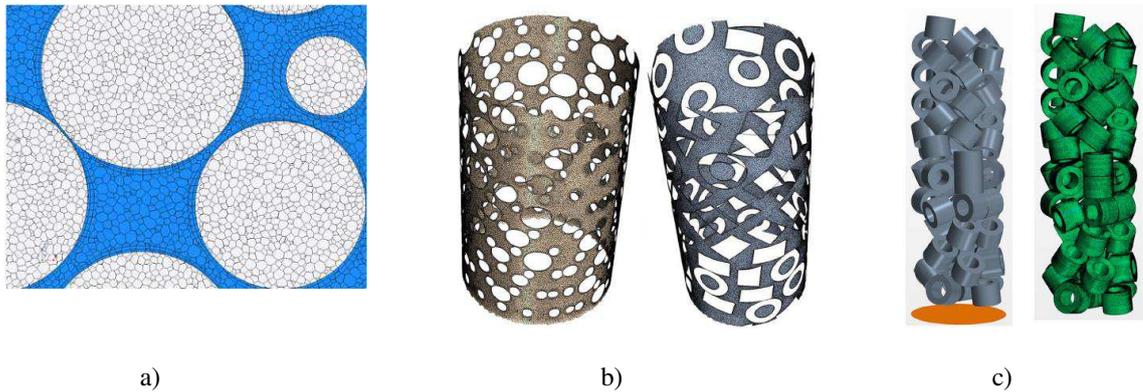


Figura 2.4 - a) Malhamento do domínio via “achatamento” das partículas; b) casca coaxial com perfil de porosidade; c) perfil final de empacotamento de partículas via DEM.

2.6.1 Reação global de 1ª ordem em reatores de leito fixo.

Segundo Levenspiel (2000), existe uma dependência da taxa de reação com a temperatura que é caracterizada pela variação da velocidade específica de reação com a temperatura e, na maioria dos sistemas de reação, essa verificação é expressa pela equação de Arrhenius, conforme a seguir:

$$\hat{k} = A_0 \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad (2.3)$$

Nesta equação, \hat{k} (constante de velocidade) é proporcional ao número de colisões das moléculas por unidade de concentração, e o termo $\exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right)$ é conhecido como fator de Boltzmann, e representa a fração de colisões com capacidade energética suficiente para que ocorra a reação.

Desde que a concentração dos componentes do sistema de reação independe da temperatura, Levenspiel (2000) afirma que a taxa de reação varia igualmente com a temperatura. Para reações elementares simples, irreversíveis ou reversíveis, a constante A_0 e a energia de ativação E_A independem da temperatura. Porém, para reações não elementares, podem depender da temperatura.

De acordo com Atkins e Jones (2001), as duas constantes A_0 e E_A , são conhecidas como parâmetros de Arrhenius da reação e são encontradas experimentalmente. Estas duas constantes

são praticamente independentes da temperatura, mas dependem da reação que está sendo estudada. A energia de ativação é a energia mínima que as moléculas precisam possuir para que, numa colisão efetiva entre elas, ocorra a quebra de ligação e formação de novas ligações e novos compostos. As reações com energia de ativação baixa (ao redor de 10 kJ/mol, com gráficos de Arrhenius não muito inclinados) têm velocidades que crescem apenas ligeiramente com a temperatura. Reações com energias de ativação altas (60 kJ/mol, com gráficos de Arrhenius não muito inclinados) têm velocidades que dependem fortemente da temperatura.

Fogler (2009) reporta que a constante da velocidade k , não é verdadeiramente uma constante, mas apenas é independente das espécies envolvidas na reação. A quantidade A_0 é quase sempre fortemente dependente da temperatura. Em reação de fase gasosa, depende do catalisador e pode ser uma função da pressão total. Em sistemas líquidos, ela também pode ser uma função da pressão total e, adicionalmente, pode também depender de outros parâmetros. Estas outras variáveis tem menor efeito sobre a velocidade específica de reação do que a temperatura.

Assim, em geral, tem – se que: a) quanto menor a energia de ativação mais facilmente se forma o complexo ativado e, portanto, mais rápida é a reação; b) quanto maior a temperatura, maior energia possuem as moléculas e, portanto, maior é a probabilidade de haver a colisão efetiva e como consequência maior velocidade de reação; c) quanto maior a concentração dos reagentes, maior o número de moléculas colidindo num determinado espaço e, portanto, é maior a probabilidade de se dar a colisão efetiva que conduza uma maior velocidade de reação; d) aumentar a pressão (para reagentes gasosos) significa diminuir o volume e, portanto, aumentar a concentração que conduz a um aumento da velocidade de reação; e) quando um reagente se encontra no estado sólido, as colisões ocorrem na sua superfície, então quanto maior a superfície de contato, maior o número de colisões que leva a um aumento da velocidade de reação; f) existem substâncias que, quando misturadas com os reagentes, possuem a probabilidade de aumentar a velocidade da reação; tais substâncias são denominadas catalisadores; g) além disso, no caso de reações fotoquímicas, a presença da luz aumenta a velocidade da reação (Oliveira, 2004).

CAPÍTULO 3

METODOLOGIA

3.1 Modelagem da transferência de calor em reator de leito fixo

Como foi exposto no capítulo anterior, pesquisas envolvendo leitos compactados, analisando os aspectos térmicos, fluidodinâmicos e geométricos tem sido incessantemente objeto de estudos dos diversos pesquisadores ao longo dos anos. Isso se deve à importância que esses sistemas desempenham na indústria em geral, conforme comentado no primeiro capítulo.

Na literatura, a maioria dos trabalhos descreve restrições no sistema e na modelagem matemática utilizada, seja na geometria, limitando ao uso apenas da geometria cilíndrica-circular, por motivos de ampla aplicação na prática industrial; seja na dimensionalidade do modelo (apenas uma ou duas dimensões); condições de contorno utilizadas; versatilidade do modelo; entre outras coisas.

A seguir é abordada a metodologia para a obtenção da solução numérica da equação que representa o balanço térmico em um leito compactado cilíndrico-elíptico, baseado em trabalhos publicados na literatura. O ponto de partida é a equação geral da conservação da energia em coordenadas cartesianas sobre a qual serão feitas manipulações algébricas a fim de convertê-la ao sistema de coordenadas cilíndrico-elípticas.

A formulação numérica utilizada neste trabalho é válida se tiver:

- Condição de contorno na parede do reator, constante ou convectiva;
- Coeficiente de transporte de calor constantes ou variáveis com a posição e temperatura;
- Padrão de malha uniforme ou não-uniforme;
- Propriedades físicas do fluido constantes ou variáveis com a temperatura;
- Reator de leito fixo com forma que varia de um cilindro circular até um canal retangular, passando por um cilindro elíptico.

Especificamente considerar-se-á neste trabalho que:

- O leito compactado é considerado como uma pseudofase;
- A forma, tamanho, direções dos interstícios e a localização detalhada das partículas dentro do leito são ignoradas.
- O fluxo de fluido no leito, na direção axial, é assumido como pistonado, considerando-se também a existência de dispersão axial, radial e angular de calor.

A seguir, em detalhes, são descritos todos os passos, revelando todas as métricas necessárias para a conversão de um sistema cartesiano para o outro.

3.1.1 A equação da energia no sistema de coordenadas cilíndrico-elípticas

A equação geral da energia para o caso tridimensional transiente é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon c_p T) + \nabla \cdot (\rho \varepsilon c_p v T) = \frac{DP}{Dt} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \mu \Psi + \dot{q} \quad (3.1)$$

onde ρ é massa específica, ε é a porosidade do meio, c_p é o calor específico, v é o vetor velocidade e k é a condutividade térmica, μ é a viscosidade dinâmica e T é a variável temperatura.

O primeiro termo do primeiro membro da Equação 3.1 representa o fluxo transiente de energia e o segundo, o transporte convectivo de calor nas três direções. $\frac{DP}{Dt}$, é a derivada

substantiva da pressão, $\mu\Psi$, representa o termo de dissipação viscosa, $\nabla \cdot (k\nabla T)$, o transporte de calor por condução e \dot{q} , a geração interna de energia.

Existem alguns problemas físicos que possuem geometria específica, a qual é complicada para implementação das condições de contorno em coordenadas cartesianas, assim, a representação das condições de contorno na maioria dos problemas físicos, exige que os valores de uma função (ou de suas derivadas) sejam especificados em curvas ou superfícies curvadas (esferas, cilindros, etc.). Logo, a forma geométrica de um sistema em estudo aponta para o uso de determinado sistema de coordenadas que melhor se adeque a essa geometria e, conseqüentemente, conduzirá a uma maior eficiência na validade dos resultados (Lima, 1999).

Quando se deseja trabalhar com um sistema de coordenadas curvilíneas, a exemplo do cilíndrico - elíptico, é necessária uma mudança de variáveis. Essa mudança decorre da forma geométrica do sistema considerado. As relações entre os sistemas de coordenadas cartesianas (x, y, z) e o de cilíndrico elípticas (τ, φ, z) são dadas a seguir (Magnus et al., 1966):

$$x = L \cosh \tau \cos \varphi \quad (3.2)$$

$$y = L \sinh \tau \sin \varphi \quad (3.3)$$

$$z = z \quad (3.4)$$

onde L é o comprimento focal, e igual a $\sqrt{L_2^2 - L_1^2}$, sendo L_1 e L_2 os semi-eixos menor e maior da elipse, respectivamente, conforme mostra a Figura 3.1. Vale aqui destacar que, dada a simetria axial em relação aos eixos x e y , o sistema de coordenadas cilíndrico-elíptico possibilita a solução da equação governante do fenômeno apenas para o primeiro quadrante aplicando-se as devidas condições de contorno de simetria nos eixos x e y .

Considere as seguintes variáveis:

$$\xi = \cosh \tau \quad (3.5)$$

$$\eta = \cos\varphi \quad (3.6)$$

$$z = z \quad (3.7)$$

Dessa forma, a substituição direta dessas variáveis nas Equações 3.2 e 3.3, fornece as relações entre os dois sistemas de coordenadas (Magnus et al., 1966):

$$x = L\xi\eta \quad (3.8)$$

$$y = L\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \quad (3.9)$$

$$z = z \quad (3.10)$$

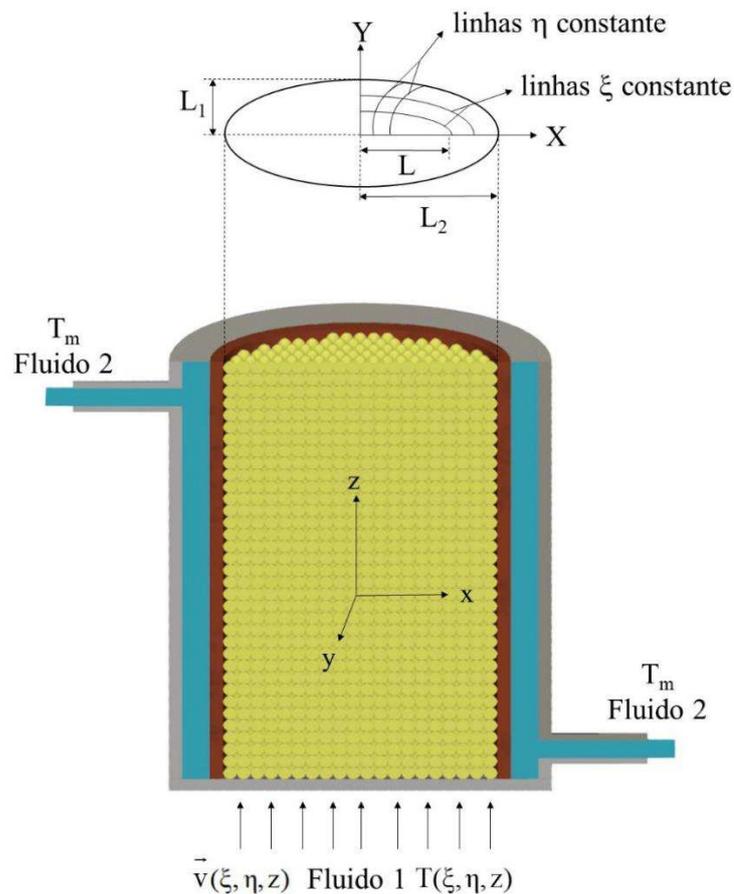


Figura 3.1 - Reator de leito compactado cilíndrico-elíptico.

O domínio das variáveis ξ , η e z , no sistema, é dado por:

$$1 \leq \xi \leq L_2/L \quad (3.11)$$

$$0 \leq \eta \leq 1 \quad (3.12)$$

$$0 \leq z \leq H \quad (3.13)$$

A atribuição de valores a τ na Equação 3.5, dentro de seu intervalo de validade, produz uma família de curvas no plano xy , caracterizadas pelos parâmetros $\xi = \xi_0$ (constante). As superfícies $\xi_0 > 1$, é uma família de elipses com centro na origem. A linha $\xi = \frac{L_2}{L}$ é a maior das elipses, conforme pode ser visto na Figura 3.2, cujos dois focos estão localizados no eixo x nos pontos $(x = \pm L, y = 0)$. A superfície $\xi = 1$ é a linha reta que une a origem $(x = 0)$ e o ponto focal $(x = L)$.

Analogamente, a atribuição de valores a φ , dentro de seu intervalo de validade, na Equação 3.6, produz uma família de curvas no plano xy , correspondendo a diferentes valores constantes do parâmetro η , que são hipérbolas cujos eixos principais coincidem com o eixo x . Uma análise mais detalhada da Figura 3.2 revela que cada curva $\eta = \eta_0$ (constante), é na realidade, somente a metade do ramo de uma hipérbole; se $\eta = \eta_0$ (constante), $0 < \eta_0 < 1$, é a família de hipérbolas que está localizada no primeiro quadrante. Quando $\eta = 0$, encontra-se uma hipérbole degenerada, reduzindo-se a uma linha reta que se estende de $y = 0$ até $y = +\infty$, ao longo do eixo y . A superfície $\eta = 1$, é a parte eixo x que vai além do ponto focal $(x > L)$.

De acordo com as Figuras 3.1 e 3.2, quando $L_2 \rightarrow L_1$, o cilindro elíptico tende a um cilindro circular. Sendo assim, no limite quando a distância interfocal tende a zero, o sistema de coordenadas cilíndrico-elípticas se reduz ao sistema de coordenadas cilíndrico - circular. Para L finito, as superfícies ξ constante serão cilindros retos, quando ξ tende ao infinito. Isto é: $L\xi \rightarrow r$; $\eta \rightarrow \cos\theta$, quando $\xi \rightarrow \infty$, onde r e θ são as coordenadas cilíndricas normais. Informações adicionais sobre o sistema de coordenadas cilíndrico- elípticas podem ser obtidas em Morse e Feshbach (1953), Happel e Brenner (1991), Lima (1999), entre outros.

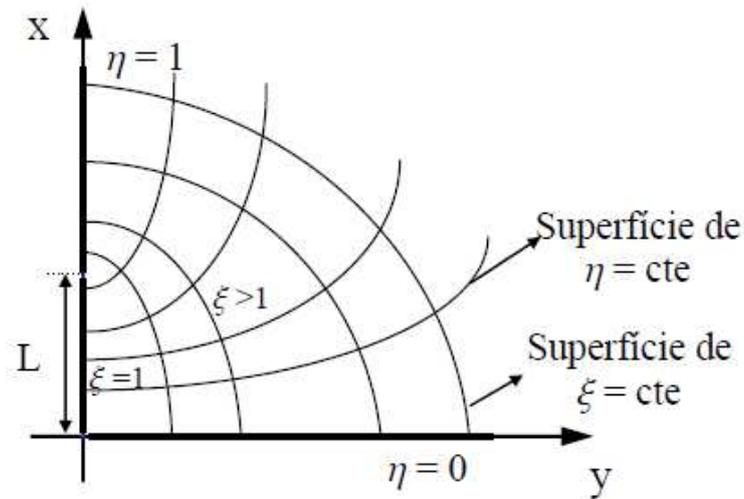


Figura 3.2 - Sistema de coordenadas cilíndrico-elípticas no plano ξ - η .

A seguir é descrita a metodologia para se obter a equação geral da energia partindo - se das coordenadas cartesianas a fim de se chegar na forma para as coordenadas cilíndrico-elípticas (Maliska, 2004). Partindo da Equação 3.1, é feita a consideração de $\frac{DP}{Dt} \approx 0$, pois a mesma é válida quando se tem a velocidade do fluido muito menor que a velocidade do som.

A equação geral da conservação para uma dada grandeza, aplicada a um meio poroso, representada pela variável Φ , escrita de maneira que seja aplicada ao novo sistema de coordenadas, é dada como:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \varepsilon c_p \frac{\Phi}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho \varepsilon c_p \tilde{U} \Phi \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\rho \varepsilon c_p \tilde{V} \Phi \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \varepsilon c_p \tilde{W} \Phi \right) = \\
 & = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\alpha_{11} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{12} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{13} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\alpha_{21} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{22} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{23} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \\
 & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\alpha_{31} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + \alpha_{32} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + \alpha_{33} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \frac{DP}{Dt} + \frac{\mu \Psi}{J} + \frac{\dot{q}}{J} \Phi
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

onde J é o jacobiano da transformação, expresso por:

$$J^{-1} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial z} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial z} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial z} \end{vmatrix} \quad (3.15)$$

A determinação da inversa do jacobiano fornece como resultado:

$$J^{-1} = -\frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \quad (3.16)$$

Os coeficientes α_{ij} , são fornecidos pelas seguintes relações matemáticas:

$$\alpha_{11} = \frac{a'}{J^2} \quad (3.17)$$

$$\alpha_{22} = \frac{b'}{J^2} \quad (3.18)$$

$$\alpha_{33} = \frac{c'}{J^2} \quad (3.19)$$

$$\alpha_{12} = \alpha_{21} = \frac{d'}{J^2} \quad (3.20 - 3.21)$$

$$\alpha_{13} = \alpha_{31} = \frac{e'}{J^2} \quad (3.22 - 3.23)$$

$$\alpha_{23} = \alpha_{32} = \frac{f'}{J^2} \quad (3.24 - 3.25)$$

com:

$$a' = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial z}\right)^2 \quad (3.26)$$

$$b' = \left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial z}\right)^2 \quad (3.27)$$

$$c' = \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \right)^2 \quad (3.28)$$

$$d' = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial \xi}{\partial z} \frac{\partial \eta}{\partial z} \right) \quad (3.29)$$

$$e' = \left(\frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) \quad (3.30)$$

$$f' = \left(\frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial \eta}{\partial z} \right) \quad (3.31)$$

Fazendo-se os cálculos dos coeficientes α_{ij} , obtém-se:

$$\alpha_{11} = \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{(1 - \eta^2)} \quad (3.32)$$

$$\alpha_{22} = \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)} \quad (3.33)$$

$$\alpha_{33} = \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \quad (3.34)$$

e para $i \neq j$, tem-se $\alpha_{ij} = 0$.

Na equação geral (Eq. 3.14), os termos que contém α_{ij} , com $i \neq j$, são os termos difusivos referentes à não-ortogonalidade da malha. Desta forma, a verificação da ortogonalidade do sistema de coordenadas adotado, torna-se um requisito importante.

As condições necessárias e suficientes para que um sistema de coordenadas seja ortogonal, são (Mac Robert, 1967):

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta}\right) + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta}\right) + \left(\frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta}\right) = 0 \quad (3.35)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial z}{\partial \eta} \frac{\partial z}{\partial z}\right) = 0 \quad (3.36)$$

$$\left(\frac{\partial x}{\partial z} \frac{\partial x}{\partial \xi}\right) + \left(\frac{\partial y}{\partial z} \frac{\partial y}{\partial \xi}\right) + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \xi}\right) = 0 \quad (3.37)$$

Pode ser verificado que estas condições são todas satisfeitas pelo sistema de coordenadas cilíndrico - elípticas, nas variáveis ξ , η e z . Portanto, os termos d' , e' e f' (nas Equações 3.29 a 3.31), são eliminados.

Na Equação 3.14, as variáveis \tilde{U} , \tilde{V} e \tilde{W} são as componentes contravariantes do vetor velocidade e são calculadas por:

$$\tilde{U} = \frac{1}{J} \left(\frac{\partial \xi}{\partial t} + u \frac{\partial \xi}{\partial x} + v \frac{\partial \xi}{\partial y} + w \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) \quad (3.38)$$

$$\tilde{V} = \frac{1}{J} \left(\frac{\partial \eta}{\partial t} + u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} + w \frac{\partial \eta}{\partial z} \right) \quad (3.39)$$

$$\tilde{W} = \frac{1}{J} \left(\frac{\partial z}{\partial t} + u \frac{\partial z}{\partial x} + v \frac{\partial z}{\partial y} + w \frac{\partial z}{\partial z} \right) \quad (3.40)$$

A relação para conversão das componentes do vetor velocidade de coordenadas cartesianas para coordenadas curvilíneas é dada por:

$$u_{\xi} = \hat{U} \left(u \frac{\partial x}{\partial \xi} + v \frac{\partial y}{\partial \xi} + w \frac{\partial z}{\partial \xi} \right) \quad (3.41)$$

$$\mathbf{u}_\eta = \hat{\mathbf{V}} \left(\mathbf{u} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \eta} + v \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \eta} + w \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \eta} \right) \quad (3.42)$$

$$\mathbf{u}_z = \hat{\mathbf{W}} \left(\mathbf{u} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial z} + v \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial z} + w \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial z} \right) \quad (3.43)$$

Das Equações 3.38 a 3.43, obtêm-se:

$$\tilde{\mathbf{U}} = -L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(1 - \eta^2)}} \mathbf{u}_\xi \quad (3.44)$$

$$\tilde{\mathbf{V}} = -L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} \mathbf{u}_\eta \quad (3.45)$$

$$\tilde{\mathbf{W}} = -L^2 \frac{(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \mathbf{u}_z \quad (3.46)$$

Utilizando todas as relações matemáticas anteriores, a Equação 3.14 pode assim ser reescrita, como segue:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \varepsilon \mathbf{c} \frac{\Phi}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho \varepsilon \mathbf{c} \frac{\mathbf{u}_\xi}{J} \Phi \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\rho \varepsilon \mathbf{c} \frac{\mathbf{u}_\eta}{J} \Phi \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho \varepsilon \mathbf{c} \frac{\mathbf{u}_z}{J} \Phi \right) = \\ & = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\alpha_{11} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\alpha_{22} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\alpha_{33} J \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + \frac{\mu \Psi}{J} + \frac{\dot{q}^\Phi}{J} \end{aligned} \quad (3.47)$$

Substituindo-se os valores do jacobiano J e dos coeficientes α_{ij} , com $i = j$; para o caso onde $\Phi = T$ e $\Gamma^\Phi = k$ e rearranjando os termos, a Equação 3.47, por sua vez, pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_\xi}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_\eta}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_z}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{1 - \eta^2}} k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - 1}} k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) k}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial z} \right] + \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) \dot{q}^\Phi}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) \mu \Psi}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right]
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Considerando que $u_z \gg u_\xi$ e u_η , que o termo de dispersão axial é desprezível quando comparado com os demais, e que também é desprezível fisicamente o termo de dissipação viscosa – último termo do segundo membro da Equação 3.48 (Oliveira, 2004), a equação assume, então, a forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\rho \varepsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2) u_z T}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right] = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{1 - \eta^2}} k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right] + \\
& + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - 1}} k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) k}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial z} \right] + \left[\frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2) \dot{q}^\Phi}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right]
\end{aligned} \tag{3.49}$$

A Equação 3.49 é a forma final da equação da conservação da energia a ser resolvida para o problema em questão. Trata-se de uma equação diferencial parcial de segunda ordem em relação à posição e de primeira em relação ao tempo e a sua solução exige no mínimo duas condições de contorno para cada direção (seis no total) e uma condição inicial. Além do mais, ela é uma equação elíptica, fazendo-se necessário definir estas condições de contorno ao longo de toda a fronteira do domínio considerado. No problema a ser tratado adotar-se-á as seguintes condições inicial e de contorno:

- Condição inicial

$$T(\xi, \eta, z, t = 0) = f_1(\xi, \eta, z) \tag{3.50}$$

- Condições de simetria:

$$\frac{\partial T}{\partial z}(\xi = 1, \eta, z, t) = \frac{\partial T}{\partial z}(\xi, \eta = 0, z, t) = \frac{\partial T}{\partial z}(\xi, \eta = 1, z, t) = 0 \quad (3.51 - 3.53)$$

- Condição de contorno na parede do reator:

$$T\left(\xi = \frac{L_2}{L}, \eta, z, t\right) = f_2(\eta, z, t) \quad (3.54)$$

- Condição de contorno na entrada do reator:

$$T(\xi, \eta, z = 0, t) = f_3(\xi, \eta, t) \quad (3.55)$$

- Condição parabólica na saída do reator:

$$\frac{\partial T}{\partial z}(\xi, \eta, z = H, t) = 0 \quad (3.56)$$

O gradiente de temperatura, as áreas de troca de calor e o volume de um elemento infinitesimal no sistema de coordenadas cilíndrico-elíptico, podem ser obtidos, usando-se as relações matemáticas fornecidas por Magnus et al. (1966), Brodkey (1967), Abramowitz e Stegun (1970) e Kreyszig (2006), como segue:

- Volume diferencial do corpo:

$$dV = \frac{1}{\hat{U}\hat{V}\hat{W}} d\xi d\eta dz \quad (3.57)$$

- Áreas diferenciais para o fluxo de calor:

$$dS_\xi = \frac{1}{\hat{V}\hat{W}} d\eta dz \quad (3.58)$$

$$dS_\eta = \frac{1}{\hat{U}\hat{W}} d\xi dz \quad (3.59)$$

$$dS_z = \frac{1}{\hat{U}\hat{V}} d\xi d\eta \quad (3.60)$$

• Gradiente de temperatura:

$$\nabla T = \left(\hat{U} \frac{\partial T}{\partial \xi}, \hat{V} \frac{\partial T}{\partial \eta}, \hat{W} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.61)$$

onde:

$$\frac{1}{\hat{U}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \xi} \right)^2 \quad (3.62)$$

$$\frac{1}{\hat{V}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \eta} \right)^2 \quad (3.63)$$

$$\frac{1}{\hat{W}^2} = \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial z} \right)^2 \quad (3.64)$$

são os coeficientes métricos, cujo produto gera como resultado o próprio jacobiano da transformação (J).

Com a substituição dos resultados envolvendo o jacobiano e os coeficientes métricos, pode-se escrever:

$$dV = \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} d\xi d\eta dz \quad (3.65)$$

$$dS_\xi = L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(1 - \eta^2)}} d\eta dz \quad (3.66)$$

$$dS_{\eta} = L \sqrt{\frac{(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 - 1)}} d\xi dz \quad (3.67)$$

$$dS_z = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} d\xi d\eta \quad (3.68)$$

$$\nabla T = \left(\frac{1}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \xi}, \frac{1}{L} \sqrt{\frac{(1 - \eta^2)}{(\xi^2 - \eta^2)}} \frac{\partial T}{\partial \eta}, \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (3.69)$$

complementando, dessa forma, o equacionamento necessário à modelagem.

3.1.2 Solução numérica das equações governantes

Na Figura 3.3 está definido o domínio computacional utilizado para representar o problema físico no reator de leito fixo cilíndrico-elíptico. Da Figura 3.1, percebe-se a simetria, nos quatro quadrantes, da seção transversal do equipamento. Neste trabalho optou-se pelo uso do 1º quadrante ($x > 0$ e $y > 0$), por proporcionar tratamento matemático mais simples na discretização das equações governantes. Na Figura 3.3 observa-se o volume de controle associado ao ponto nodal P e as linhas de ξ e η constantes delimitando o mesmo. Os pontos N, S, E e W são seus pontos nodais vizinhos, letras as quais significam norte, sul, leste e oeste, respectivamente. Na Figura 3.4 está representado as faces do volume de controle e, w, n, s, f e t em torno do ponto P, as dimensões do volume de controle, $\Delta\xi$, $\Delta\eta$ e Δz , assim como as distâncias entre o ponto P e os pontos adjacentes.

A ortogonalidade do sistema de coordenadas e, conseqüentemente, da malha numérica associada, é um requisito considerado essencial na aplicação do método dos volumes finitos, segundo Patankar (1980). De acordo com esse autor, a face de um volume de controle onde é calculado o fluxo de uma variável Φ , deve ser normal à linha que une os dois pontos nodais adjacentes (a linha PN, na Figura 3.4, exemplifica esta afirmativa). Neste trabalho ficou demonstrado a partir das Equações 3.35 a 3.37, que o sistema de coordenadas cilíndrico-elípticas é ortogonal.

A Equação 3.49 em coordenadas cilíndrico-elípticas, que descreve a transferência de calor no leito, é resolvida numericamente pela técnica dos volumes finitos, junto com a prática de localizar os pontos nodais no centro do volume de controle (Patankar, 1980; Maliska, 2004). A justificativa da escolha desta metodologia, reside no fato que esta facilita a determinação dos coeficientes de transporte, assim como, simplifica a aplicação das condições de contorno.

A integração da Equação 3.49, no volume e no tempo, assumindo-se uma formulação totalmente implícita e o esquema WUDS como função de interpolação espacial para os fluxos difusivo e convectivo, sobre o volume de controle (Figura 3.4), gera a equação discretizada que será válida para todos os pontos internos da malha. Então, para um ponto nodal P do volume de controle, têm-se:

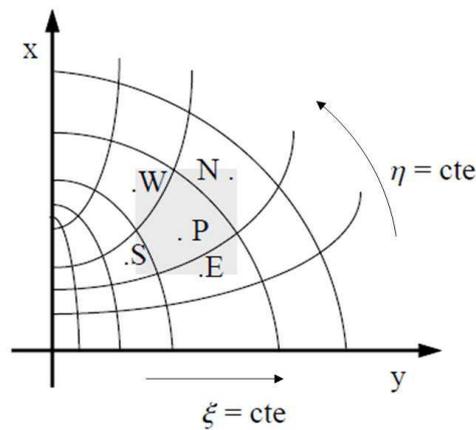


Figura 3.3 - Configuração geométrica do problema físico.

- Termo temporal:

$$\begin{aligned} & \int_t \int_v \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho \epsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right) dv dt = \\ & = \int_t^{t+\Delta t} \int_t^f \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho \epsilon c_p L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right) d\xi d\eta dz dt \end{aligned} \quad (3.70)$$

- Termo convectivo:

$$\begin{aligned} & \int_t \int_v \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho \epsilon c_p u_z L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right) dv dt = \\ & = \int_t^{t+\Delta t} \int_t^f \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\rho \epsilon c_p u_z L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \right) d\xi d\eta dz dt \end{aligned} \quad (3.71)$$

- Termo difusivo (direção ξ):

$$\int_t \int_v \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\sqrt{\frac{\xi^2-1}{1-\eta^2}} k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) dv dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_t^f \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\sqrt{\frac{\xi^2-1}{1-\eta^2}} k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) d\xi d\eta dz dt \quad (3.72)$$

- Termo difusivo (direção η):

$$\int_t \int_v \frac{\partial T}{\partial \eta} \left(\sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2-1}} k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) dv dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_t^f \int_w^e \int_s^n \frac{\partial T}{\partial \eta} \left(\sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2-1}} k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) d\xi d\eta dz dt \quad (3.73)$$

- Termo difusivo (direção z):

$$\begin{aligned} \int_t \int_v \frac{\partial T}{\partial z} \left(\frac{L^2(\xi^2-\eta^2)}{\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}} k \frac{\partial T}{\partial z} \right) dv dt = \\ = \int_t^{t+\Delta t} \int_t^f \int_w^e \int_s^n \frac{\partial T}{\partial z} \left(\frac{L^2(\xi^2-\eta^2)}{\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}} k \frac{\partial T}{\partial z} \right) d\xi d\eta dz dt \end{aligned} \quad (3.74)$$

- Termo de geração interna de energia:

$$\int_t \int_v \frac{\dot{q} L^2(\xi^2-\eta^2)}{\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}} dv dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_t^f \int_w^e \int_s^n \frac{\dot{q} L^2(\xi^2-\eta^2)}{\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}} d\xi d\eta dz dt \quad (3.75)$$

Após a integração de cada termo da Equação 3.49, tem-se a seguinte equação discretizada:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta V}{J_p} [\rho_p c_{p_p} \varepsilon_p T_p - \rho_p^0 c_{p_p}^0 \varepsilon_p^0 T_p^0] + \left[\rho c_p \varepsilon \frac{u_z}{J} \Delta \xi \Delta \eta T \Big|_f - \rho c_p \varepsilon \frac{u_z}{J} \Delta \xi \Delta \eta T \Big|_i \right] = \\ \left[\left(D_{11} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_n - D_{11} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_s \right) + \left(D_{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \Big|_e - D_{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \Big|_w \right) + \left(D_{33} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_f - D_{33} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_i \right) \right] \cdot \Delta t + \\ + \frac{\dot{q}}{J_p} \Delta V \Delta t \end{aligned} \quad (3.76)$$

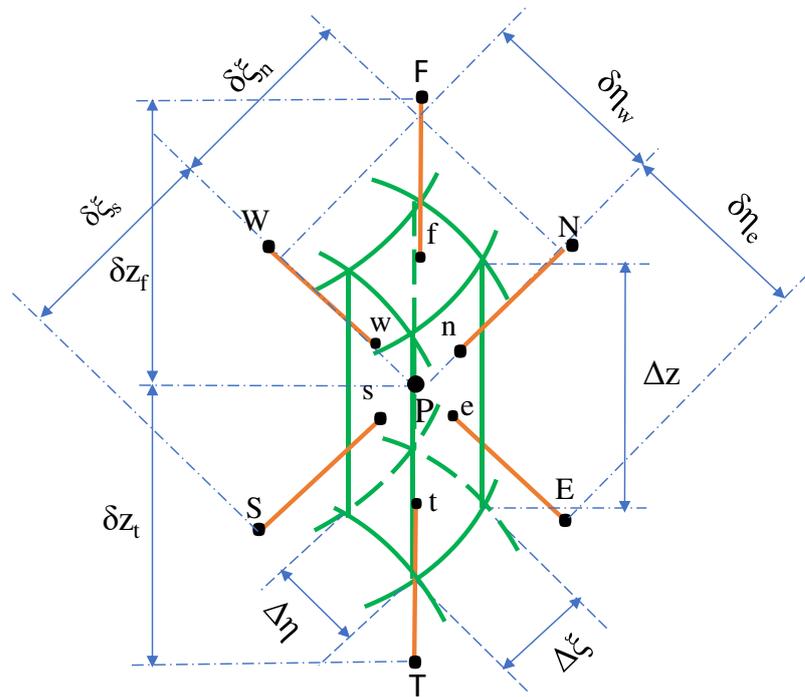


Figura 3.4 - Volume de controle da malha numérica no espaço 3-D.

Na Equação 3.76 tem-se:

$$\Delta V = \Delta \xi \Delta \eta \Delta z; \quad D_{11} = \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{1 - \eta^2}} k; \quad D_{22} = \sqrt{\frac{1 - \eta^2}{\xi^2 - 1}} k; \quad D_{33} = \frac{k}{J};$$

Considerando-se que, para o problema em estudo, a função de interpolação espacial entre dois pontos nodais adjacentes seja uma função do tipo linear, as derivadas relativas ao fluxo difusivo nas faces dos volumes de controle, referentes à Figura 3.4, segundo o esquema WUDS de interpolação são dadas por:

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) \Big|_n = k_n \frac{\beta_n (T_N - T_P)}{\delta \xi_n} \quad (3.77)$$

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) \Big|_s = k_s \frac{\beta_s (T_P - T_S)}{\delta \xi_s} \quad (3.78)$$

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right)_e = k_e \frac{\beta_e (T_E - T_P)}{\delta n_e} \quad (3.79)$$

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial \eta} \right)_w = k_w \frac{\beta_w (T_P - T_W)}{\delta n_w} \quad (3.80)$$

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right)_f = k_f \frac{\beta_f (T_F - T_P)}{\delta z_f} \quad (3.81)$$

$$\left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right)_t = k_t \frac{\beta_t (T_P - T_T)}{\delta z_t} \quad (3.82)$$

Para os termos correspondentes aos fluxos convectivos, Maliska (2004) recomenda as seguintes funções de interpolação para o valor da variável na face dos volumes de controle:

$$T_f = \left(\frac{1}{2} + \alpha_f \right) T_P + \left(\frac{1}{2} - \alpha_f \right) T_F \quad (3.83)$$

$$T_t = \left(\frac{1}{2} + \alpha_t \right) T_T + \left(\frac{1}{2} - \alpha_t \right) T_P \quad (3.84)$$

Os coeficientes α e β que aparecem nas Equações 3.77 a 3.84 são constantes ponderadoras, calculadas por:

$$\alpha = \frac{Pe^2}{10 + 2Pe^2} \quad (3.85)$$

$$\beta = \frac{1 + 0,005Pe^2}{1 + 0,05Pe^2} \quad (3.86)$$

onde Pe é o número de Peclet, que fisicamente representa a razão entre o fluxo convectivo e o difusivo na direção da coordenada em questão. No caso em estudo, só faz sentido determinar o número de Pe na direção z . Assim, nessa direção, o mesmo é calculado por:

$$Pe = \frac{\rho \epsilon u_z c_p \delta z}{k} \quad (3.87)$$

O esquema de interpolação WUDS é usado quando o número de Peclet é pequeno, garantindo assim uma boa precisão. Para números de Peclet elevados, $Pe \geq 2$, é usado o esquema UPWIND que garante o transporte da variável na direção do escoamento.

Após a integração dos termos da Equação 3.49, usando-se as derivadas nas interfaces dos volumes de controle, Equações 3.77 - 3.82, a função de interpolação espacial para os fluxos convectivos de transporte de calor, Equações 3.83 e 3.84, rearranjando e colocando em evidência os termos comuns, a equação na forma algébrica linear discretizada, aplicada ao ponto nodal P da malha, passa a ser escrita como segue:

a) Pontos internos da malha

$$A_P T_P = A_E T_E + A_W T_W + A_N T_N + A_S T_S + A_F T_F + A_T T_T + A_P^0 T_P^0 + B \quad (3.88)$$

onde:

$$A_E = \sqrt{\frac{1 - \eta_e^2}{\xi_e^2 - 1}} \frac{k_e \beta_e \Delta \xi \Delta z}{\delta \eta_e} \quad (3.89)$$

$$A_W = \sqrt{\frac{1 - \eta_w^2}{\xi_w^2 - 1}} \frac{k_w \beta_w \Delta \xi \Delta z}{\delta \eta_w} \quad (3.90)$$

$$A_N = \sqrt{\frac{\xi_n^2 - 1}{1 - \eta_n^2}} \frac{k_n \beta_n \Delta \eta \Delta z}{\delta \eta_n} \quad (3.91)$$

$$A_S = \sqrt{\frac{\xi_s^2 - 1}{1 - \eta_s^2}} \frac{k_s \beta_s \Delta \eta \Delta z}{\delta \eta_s} \quad (3.92)$$

$$A_F = \frac{L^2 (\xi_f^2 - \eta_f^2)}{\sqrt{(\xi_f^2 - 1)(1 - \eta_f^2)}} [(0.5 + \alpha_f) \rho_f \varepsilon_f c_{Pf} u_z + \frac{\beta_f k_f}{\delta z_f}] \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.93)$$

$$A_T = \frac{L^2 (\xi_t^2 - \eta_t^2)}{\sqrt{(\xi_t^2 - 1)(1 - \eta_t^2)}} [(0.5 - \alpha_t) \rho_t \varepsilon_t c_{Pt} u_z + \frac{\beta_t k_t}{\delta z_t}] \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.94)$$

$$A_P^0 = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \frac{\rho^0 c_P^0 \varepsilon^0 \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t} \quad (3.95)$$

$$A_P = A_E + A_W + A_N + A_S + A_F^* + A_T^* + \frac{L^2 (\xi_P^2 - \eta_P^2)}{\sqrt{(\xi_P^2 - 1)(1 - \eta_P^2)}} \frac{\rho c_P \varepsilon \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t} + A_P^0 \quad (3.96)$$

com:

$$A_F^* = \frac{L^2 (\xi_f^2 - \eta_f^2)}{\sqrt{(\xi_f^2 - 1)(1 - \eta_f^2)}} [(\alpha_f + 0.5) \rho_f \varepsilon_f c_{Pf} u_z + \frac{\beta_f k_f}{\delta z_f}] \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.97)$$

$$A_T^* = \frac{L^2 (\xi_t^2 - \eta_t^2)}{\sqrt{(\xi_t^2 - 1)(1 - \eta_t^2)}} [(\alpha_t - 0.5) \rho_t \varepsilon_t c_{Pt} u_z + \frac{\beta_t k_t}{\delta z_t}] \Delta \xi \Delta \eta \quad (3.98)$$

$$A_P^0 = \frac{L^2 (\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \frac{\rho^0 c_P^0 \varepsilon^0 \Delta \xi \Delta \eta \Delta z}{\Delta t} \quad (3.99)$$

Os coeficientes A_K , com $K \neq P$, representam as contribuições dos transportes difusivo e convectivo de calor provenientes dos pontos vizinhos em direção ao ponto P. Os efeitos da variável T referentes ao tempo anterior, sobre o seu valor no tempo atual, são computados no

coeficiente A_0^P . Esses efeitos vão diminuindo, à medida que o processo tende para o regime permanente.

b) Pontos de fronteira:

A discretização da equação para os volumes de controle situados na região de fronteira segue o mesmo raciocínio mostrado para os pontos internos do domínio computacional, sendo semelhante a dos pontos internos, devendo ser aplicada à condição de contorno da Equação 3.54, a qual possui diferentes tipos de acordo com o perfil de troca de calor considerado nessa região. Dessa forma, a Equação 3.76 apresenta outra forma para os pontos na superfície do reator, a qual é:

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta V}{J_P} \left[\rho_P c_{pP} \varepsilon_P T_P - \rho_P^0 c_{pP}^0 \varepsilon_P^0 T_P^0 \right] + \left[\rho c_p \varepsilon \frac{u_z}{J} \Delta \xi \Delta \eta T \Big|_f - \rho c_p \varepsilon \frac{u_z}{J} \Delta \xi \Delta \eta T \Big|_t \right] = \\ & \left[\left(q'' dS_\xi - D_{11} \frac{\partial T}{\partial \xi} \Big|_s \right) + \left(D_{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \Big|_e - D_{22} \frac{\partial T}{\partial \eta} \Big|_w \right) + \left(D_{33} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_f - D_{33} \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_t \right) \right] \Delta t + \\ & + \frac{\dot{q}}{J_P} \Delta V \Delta t \end{aligned} \quad (3.100)$$

O termo de geração de energia, último termo do segundo membro da Equação 3.100, é tratado de forma específica na seção 3.1.5.

A primeira parcela do primeiro termo do segundo membro da Equação 3.100, decorrente da aplicação do método dos volumes finitos aos pontos na região da parede, depende do tipo de condição de contorno imposta ao problema real. Uma vez que nestes pontos nodais não existe o coeficiente A_N , o mesmo deve ser substituído pelo fluxo de calor q'' na superfície.

De acordo com Maliska (2004), três tipos de condições de contorno são possíveis: T prescrito, q'' prescrito e convecção.

b1) T prescrito

Neste tipo de condição de contorno, o valor de q'' é substituído por:

$$q'' dS_{\xi} = k_n \beta_n dS_{\xi} \frac{(T_n - T_p)}{\delta \xi_n} \Rightarrow q'' = k_n \beta_n \frac{(T_n - T_p)}{\delta \xi_n} \Rightarrow q'' = k_n \beta_n \frac{(T_n - T_p)}{\frac{\Delta \xi}{2}} \quad (3.101)$$

onde T_n é a temperatura específica na fronteira.

b2) Fluxo de calor (q'') prescrito

Neste caso, o valor de q'' deve ser substituído pelo valor prescrito do fluxo na fronteira.

Ou seja:

$$q'' dS_{\xi} = D_{11} \frac{dT}{d\xi} \left(\xi = \frac{L_2}{L} \right) = \text{valor conhecido} \quad (3.102)$$

b3) Convecção na interface fluido-sólido

Nesta situação, o fluxo difusivo que atravessa a fronteira é igual ao fluxo convectivo na vizinhança da mesma e fora do domínio em estudo. Assim, tem-se:

$$q'' dS_{\xi} = D_{11} \frac{dT}{d\xi} \left(\xi = \frac{L_2}{L} \right) = \text{fluxo convectivo, que é função de } T_n. \quad (3.103)$$

Neste trabalho é aplicado o terceiro tipo de condição de contorno de fronteira (b3), porém, faz-se necessário explorar um pouco mais essa condição, que é a de convecção sólido-fluido, pelo fato de que, no modelo proposto nessa pesquisa, verifica-se uma variante dela que engloba condições físicas mais abrangentes.

Trata-se de adicionalmente considerar que o fluxo que advém do domínio para a fronteira também se realiza, além de difusão, também por convecção na parte interna da parede do reator, e, intermediariamente, antes de esse fluxo de calor deixar o domínio, atravessa a parede do reator por condução de calor, para, por fim, se dissipar no fluido arrefecedor na camisa de refrigeração por meio de convecção.

Na prática, no balanço térmico na região de fronteira neste trabalho, considera-se que o fluxo difusivo e convectivo de calor do fluido para a parede do leito é igual ao fluxo de calor difusivo através da parede e também ao fluxo convectivo da mesma parede (lado externo) para

o fluido refrigerante. Na Figura 3.5 é apresentado um esquema descrevendo o transporte de calor nessa região destacando-se as variáveis envolvidas para os cálculos. Matematicamente tem-se o seguinte:

$$\begin{aligned}
 q'' &= \underbrace{-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{(\xi_n^2 - 1)}{(\xi_n^2 - \eta_P^2)}}}_{\text{I}} \underbrace{\frac{(T_{\text{win}} - T_P)}{\delta \xi_n}}_{\text{II}} + \underbrace{h_{\text{win}} (T_P - T_{\text{win}})}_{\text{III}} = \\
 &= \underbrace{h_{\text{wext}}(T_{\text{wext}} - T_m)}_{\text{IV}} = \underbrace{-\frac{k_{\text{wr}}}{L} \sqrt{\frac{(\xi^2 - 1)}{\xi^2 - \eta^2}}}_{\text{V}} \frac{(T_{\text{wext}} - T_{\text{win}})}{\delta \xi_w}
 \end{aligned} \tag{3.104}$$

Após manipulação matemática da múltipla igualdade apresentada pela Equação 3.104, cujos termos foram convenientemente enumerados para tal, verifica-se que a partir dos termos (II), (III) e (V), substituindo-se o valor de T_{win} delas obtido, nos termos (II) e (III) desta equação, encontra-se a seguinte expressão para o fluxo de calor que atravessa a parede do reator:

$$q'' = \frac{T_m - T_P}{\left(1 + \frac{k \delta \xi_w}{k_{\text{wr}} \delta \xi_n} + \frac{h_{\text{win}}}{h_{\text{wext}}} + \frac{k \hat{U}}{h_{\text{wext}} \delta \xi_n} + \frac{h_{\text{win}} \delta \xi_w}{k_{\text{wr}} \hat{U}}\right) / \left(h_{\text{win}} + \frac{k \hat{U}}{\delta \xi_n}\right)} \tag{3.105}$$

onde \hat{U} é dado pela Equação 3.62.

Por conseguinte, a equação representativa do cálculo da temperatura na parede interna do leito compactado é dada por:

$$T_{\text{win}} = \frac{T_m + T_P \left(\frac{k \delta \xi_w}{k_{\text{wr}} \delta \xi_n} + \frac{h_{\text{win}}}{h_{\text{wext}}} + \frac{k \hat{U}}{h_{\text{wext}} \delta \xi_n} + \frac{h_{\text{win}} \delta \xi_w}{k_{\text{wr}} \hat{U}}\right)}{\left(1 + \frac{k \delta \xi_w}{k_{\text{wr}} \delta \xi_n} + \frac{h_{\text{win}}}{h_{\text{wext}}} + \frac{k \hat{U}}{h_{\text{wext}} \delta \xi_n} + \frac{h_{\text{win}} \delta \xi_w}{k_{\text{wr}} \hat{U}}\right)} \tag{3.106}$$

Poder-se-ia aqui realizar os balanços de energia para várias situações específicas de trocas de calor na superfície, afim de se mostrar a obtenção da temperatura na superfície do reator, bem como o cálculo do fluxo de calor nessa região. Estes balanços e cálculos foram feitos por Oliveira (2004) em seus vários estudos de caso.

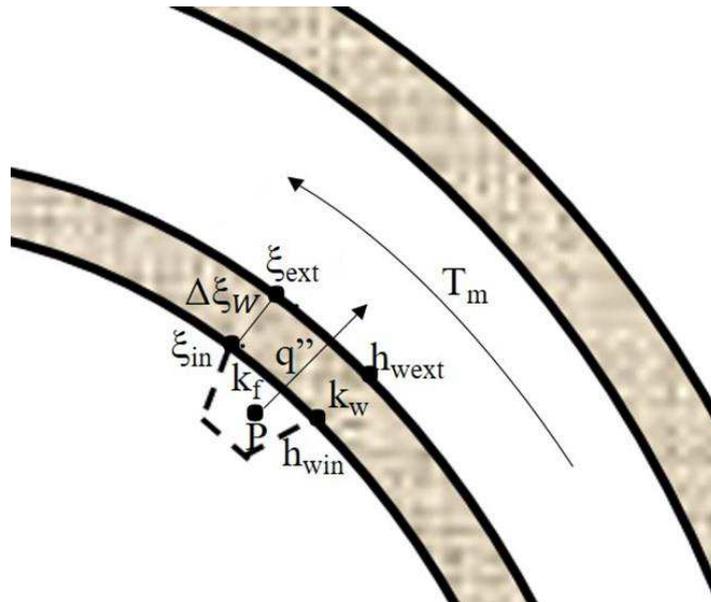


Figura 3.5- Esquema mostrando as trocas de calor de maneira geral consideradas na condição de contorno na fronteira.

Para fins de simplificação da discussão, será preterida, então, neste trabalho a apresentação desses balanços de energia das variantes de condição convectiva na fronteira. Mas, a partir das Equações 3.105 e 3.106, com uma discussão levando em conta aproximações matemáticas nas variáveis envolvidas, pode-se chegar ao resultado de cada uma dessas variantes de balanços como consequência dessas aproximações. Na prática, obtendo-se os mesmos resultados de Oliveira (2004).

Nesse sentido, na Equação 3.105, ao considerar a espessura $\delta\xi_w$ da parede como nula e o coeficiente de transferência convectiva de calor h_{win} também nulo, estar-se-á aproximando da condição física de convecção apenas na superfície externa, com espessura desprezível da parede do reator, que equivaleria ao mesmo resultado proveniente do balanço térmico da terceira condição de contorno em sua forma padrão. Logo, o fluxo de calor a partir dessas considerações é calculado por:

$$q'' = \frac{T_m - T_P}{\left(1 + \frac{k\bar{U}}{h_{wext}\delta\xi_n}\right) / \left(\frac{k\bar{U}}{\delta\xi_n}\right)} = \frac{T_m - T_P}{\left(\frac{k\bar{U}}{\delta\xi_n} + \frac{1}{h_{wext}}\right)} \quad (3.107)$$

com conseqüente temperatura para os pontos de fronteira dada por:

$$T_{win} = T_{wext} = \frac{T_m + T_P \left(\frac{k\hat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} \right)}{\left(1 + \frac{k\hat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} \right)} \quad (3.108)$$

Por sua vez, ao se considerar $\delta\xi_w = 0$, $h_{win} = 0$ e $h_{wext} \rightarrow \infty$, ter-se-á para o fluxo de calor, a seguinte equação:

$$q'' = \frac{-k\hat{U}(T_P - T_m)}{\delta\xi_n} \quad (3.109)$$

com conseqüente temperatura na fronteira, fazendo-se as mesmas aproximações na Equação 3.106, que é :

$$T_{win} = T_{wext} = T_m \quad (3.110)$$

Isto significa que, sob as aproximações matemáticas feitas, tem-se a primeira condição de contorno de T prescrito na fronteira.

A situação que envolve convecção do lado interno e externo da parede com espessura desprezível da mesma é obtida ao se considerar $\delta\xi_w = 0$ e $k_{wr} \rightarrow \infty$, cuja substituição na Equação 3.105, resulta na seguinte equação para o fluxo de calor:

$$q'' = \frac{T_m - T_P}{\left(1 + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k\hat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} \right) / \left(h_{win} + \frac{k\hat{U}}{\delta\xi_n} \right)} \quad (3.111)$$

com conseqüente temperatura na fronteira, a partir das mesmas aproximações sobre Equação 3.106, como segue:

$$T_{win} = \frac{T_m + T_P \left(\frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k\hat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} \right)}{\left(1 + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k\hat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} \right)} \quad (3.112)$$

Essa última forma de tratamento físico para a fronteira do sistema é a que foi utilizada neste trabalho. A justificativa está no fato de que as outras formas foram executadas não

gerando disparidade significativa em relação à escolhida. Dessa forma, a Figura 3.5 pode ser reesquematizada de maneira a descrever a situação mais específica adotada neste trabalho, que é de se considerar como desprezível a espessura da parede do reator, conforme Figura 3.6 a seguir.

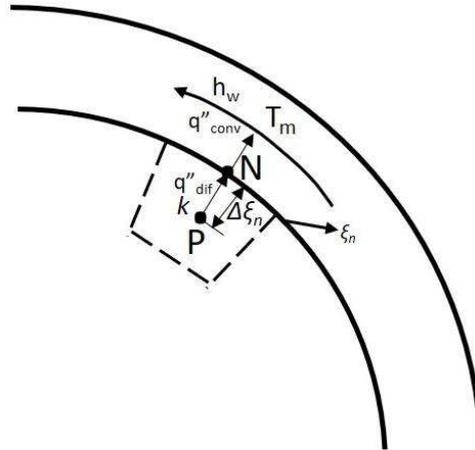


Figura 3.6 - Condição convectiva na fronteira do reator considerada neste trabalho.

Assim, para o caso particular de condição de fronteira, o perfil de equação discretizada para os pontos nessa região assume praticamente a mesma forma que a Equação 3.88, a diferença estando apenas na rescrita do termo B como B^* , matematicamente dado pela Equação 3.114, e no acréscimo do termo \overline{SM} ao termo A_P (Equação 3.96), em lugar do termo A_N que é nulo na fronteira do sistema. O termo \overline{SM} faz alusão ao fenômeno diferenciado nos pontos da fronteira e é obtido a partir de relação matemática entre Equações 3.104, sendo escrito conforme Equação 3.113.

Observando a Figura 3.5, a qual foi esboçada a fim de considerar os diferentes mecanismos citados de trocas de calor na região de fronteira, pode-se verificar que a discretização dos pontos internos ou dos da fronteira poderão apresentar diferentes valores para os termos A_N , A_P , B^* e \overline{SM} na modelagem. Logo, para fins mais generalistas, cada uma dessas quantidades são apresentadas conforme a seguir:

$$\overline{SM} = \begin{cases} \frac{L\Delta\eta\Delta z \sqrt{\frac{(\xi_n - \eta_P)}{(1 - \eta_P)}}}{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k\hat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} + \frac{h_{win}\delta\xi_n}{k_{wr}\hat{U}}\right)} & \text{para os pontos de fronteira} \\ \left(h_{win} + \frac{k\hat{U}}{\delta\xi_n}\right) & \text{para os pontos internos} \\ 0 & \end{cases} \quad (3.113)$$

$$B^* = \begin{cases} B + \frac{T_m L\Delta\eta\Delta z \sqrt{\frac{(\xi_n - \eta_P)}{(1 - \eta_P)}}}{\left(1 + \frac{k}{k_{wr}} + \frac{h_{win}}{h_{wext}} + \frac{k\hat{U}}{h_{wext}\delta\xi_n} + \frac{h_{win}\delta\xi_n}{k_{wr}\hat{U}}\right)} & \text{para os pontos de fronteira} \\ \left(h_{win} + \frac{k\hat{U}}{\delta\xi_n}\right) & \text{para os pontos internos} \\ B & \end{cases} \quad (3.114)$$

$$A_N = \begin{cases} 0 & \text{para os pontos de fronteira} \\ \frac{\sqrt{\xi_n^2 - 1} k_n \beta_n \Delta\eta\Delta z}{\sqrt{1 - \eta_n^2} \delta\eta_n} & \text{para os pontos internos} \end{cases} \quad (3.115)$$

c) Pontos de simetria

Os pontos de simetria não entram no conjunto de equações a serem resolvidas. Após o sistema de equações ter sido resolvido, sua estimativa é realizada. Nesse caso, assume-se que o fluxo de calor por condução que sai do ponto adjacente ao ponto de simetria é igual ao fluxo de calor por condução que chega nesses pontos, o que nos dá os seguintes balanços de energia:

- Para os pontos em $\eta = 0$ ($0 < y < L_1$)

Observando-se a Figura 3.7 é fácil de perceber que o balanço de energia resulta na seguinte equação:

$$q_w'' = q_e'' \Rightarrow \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2-\eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_e = \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2-\eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_w \quad (3.116)$$

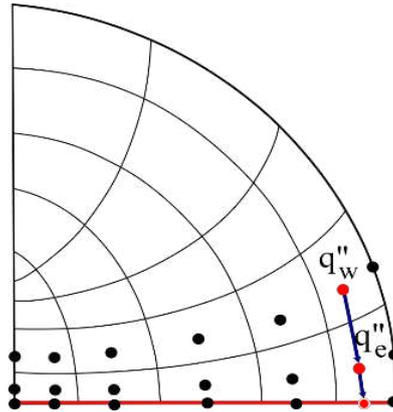


Figura 3.7 - Ilustração do balanço de energia para estimativa da temperatura nos pontos de simetria em $\eta = 0$.

Discretizando-se a Equação 3.116, obtém-se a respectiva temperatura nos pontos na região $\eta = 0$ ($0 < y < L_1$):

$$T_E = \left(1 + \frac{\frac{k_w}{\delta \eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi^2-\eta_w^2}}}{\frac{k_e}{\delta \eta_e} \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi^2-\eta_e^2}}} \right) T_P - \frac{\frac{k_w}{\delta \eta_w} \sqrt{\frac{1-\eta_w^2}{\xi^2-\eta_w^2}}}{\frac{k_e}{\delta \eta_e} \sqrt{\frac{1-\eta_e^2}{\xi^2-\eta_e^2}}} T_W \quad (3.117)$$

- Para os pontos em $\eta = 1$ ($L < x < L_2$)

Analogamente para os pontos em $\eta = 1$, observando-se a Figura 3.8, tem-se como resultado o seguinte balanço de energia:

$$q_e'' = q_w'' \Rightarrow \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2-\eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_w = \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{1-\eta^2}{\xi^2-\eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \Big|_e \quad (3.118)$$

E a equação discreta é dada por:

$$T_W = \left(1 + \frac{\frac{k_e \sqrt{1-\eta_e^2}}{\delta\eta_e \sqrt{\xi^2 - \eta_e^2}}}{\frac{k_w \sqrt{1-\eta_w^2}}{\delta\eta_w \sqrt{\xi^2 - \eta_w^2}}} \right) T_P - \left(\frac{\frac{k_e \sqrt{1-\eta_e^2}}{\delta\eta_e \sqrt{\xi^2 - \eta_e^2}}}{\frac{k_w \sqrt{1-\eta_w^2}}{\delta\eta_w \sqrt{\xi^2 - \eta_w^2}}} \right) T_E \quad (3.119)$$

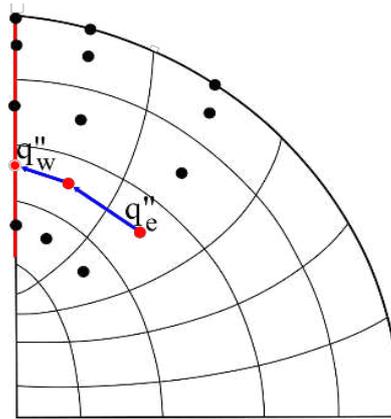


Figura 3.8 - Ilustração do balanço de energia para estimativa da temperatura nos pontos de simetria em $\eta = 1$.

- Para os pontos em $\xi = 1$ ($0 < x < L$)

Observando-se por sua vez a Figura 3.9, e adotando-se o mesmo procedimento empregado nas Equações 3.116 a 3.119, tem-se:

$$q_n'' = q_s'' \Rightarrow \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) \Big|_n = \left(-\frac{k}{L} \sqrt{\frac{\xi^2 - 1}{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) \Big|_s \quad (3.120)$$

a qual, discretizada, resulta em:

$$T_S = \left(1 + \frac{\frac{k_n \sqrt{\xi_n^2 - 1}}{\delta\eta_n \sqrt{\xi_n^2 - \eta^2}}}{\frac{k_s \sqrt{\xi_s^2 - 1}}{\delta\eta_s \sqrt{\xi_s^2 - \eta^2}}} \right) T_P - \left(\frac{\frac{k_n \sqrt{\xi_n^2 - 1}}{\delta\eta_n \sqrt{\xi_n^2 - \eta^2}}}{\frac{k_s \sqrt{\xi_s^2 - 1}}{\delta\eta_s \sqrt{\xi_s^2 - \eta^2}}} \right) T_N \quad (3.121)$$

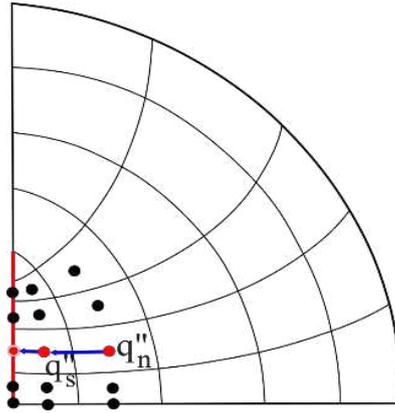


Figura 3.9 - Ilustração do balanço de energia para estimativa da temperatura nos pontos de simetria em $\xi = 1$.

d) Pontos na saída do reator

Adotando-se o tratamento semelhante aos pontos de simetria, a equação para o balanço de energia é dada por:

$$q_f'' = q_t'' \Rightarrow \left(-k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \Big|_f = \left(-k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \Big|_t \quad (3.122)$$

e após a discretização, obtém-se a temperatura nos pontos na saída do reator:

$$T_F = \left(1 + \frac{\frac{k_t}{\delta z_t}}{\frac{k_f}{\delta z_f}} \right) T_P - \left(1 + \frac{\frac{k_t}{\delta z_t}}{\frac{k_f}{\delta z_f}} \right) T_T \quad (3.123)$$

3.1.3 Cálculo das propriedades termofísicas nas interfaces dos volumes de controle

Na solução numérica também é necessário se obter os valores das variáveis Γ^Φ nas interfaces dos volumes de controle, principalmente quando se trata de um meio cujas propriedades termofísicas variam com a posição ou temperatura do leito. O procedimento adotado para se obter o valor da variável Γ^Φ nas interfaces do volume de controle (Figura 3.4) é baseado em Patankar (1980) e consiste em assumir uma variação de Γ^Φ entre o ponto P do

volume de controle e seus vizinhos em uma K-ésima direção, expressa em uma k-ésima face correspondente, da seguinte forma:

$$\Gamma_k^\Phi = \left(\frac{1 - \hat{f}_i}{\Gamma_P^\Phi} + \frac{\hat{f}_i}{\Gamma_K^\Phi} \right)^{-1} \quad (3.124)$$

onde $k = s, n, f, t, e$ ou w e $K = S, N, F, T, E$ ou W , sendo que quando k assume um índice minúsculo, K , que representa um K-ésimo ponto vizinho associado a essa face, assume o seu respectivo índice maiúsculo

Na equação 3.124, \hat{f}_i é o fator de interpolação, dado por:

$$\hat{f}_i = \frac{(\delta d)_i^+}{(\delta d)_i} \quad (3.125)$$

onde os valores de $(\delta d)_i$ correspondem aos ilustrados genericamente na Figura 3.10.

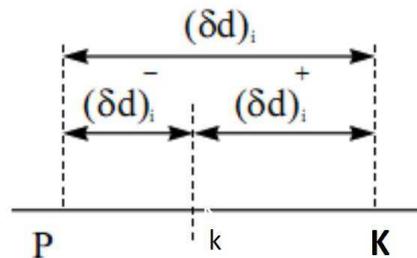


Figura 3.10 - Esquema mostrando a posição da k-ésima interface entre os pontos P e um K-ésimo ponto nodal vizinho.

Se Γ^Φ situa-se no ponto médio entre P e K (malha uniforme), então $\hat{f}_i = 0.5$ e, portanto,

Γ_k^Φ é a média harmônica entre Γ_P^Φ e Γ_K^Φ . Isto é:

$$\Gamma_k^\Phi = \frac{2\Gamma_P^\Phi\Gamma_K^\Phi}{\Gamma_P^\Phi + \Gamma_K^\Phi} \quad (3.126)$$

Esta é uma formulação mais efetiva, uma vez que, se Γ_p^Φ ou Γ_k^Φ for nulo, não há fluxo de calor e Γ_k^Φ é também nulo, o que é fisicamente uma realidade (Oliveira, 2004; Silva Filho, 2013).

3.1.4 Perfil de temperatura curvilíneo na entrada do reator

No caso de se considerar uma condição de contorno na entrada do reator de temperatura variando com a posição radial, deve-se retomar à Equação 3.55 e utilizar a função mais adequada para isso. A literatura registra funções do tipo parabólica para tal (Bergman et al., 2014; Dixon et al., 2012), mas o faz para a geometria cilíndrico circular.

Sabe-se que antes da seção térmica é necessária uma seção no reator a qual ajuda na formação do escoamento que irá interagir com as partículas de recheio da seção térmica. Esse escoamento à montante da seção térmica deve estar plenamente desenvolvido hidrodinamicamente e termicamente, porém, o estudo do que acontece à montante da seção térmica não é o objeto deste trabalho. Contudo, alguns apontamentos fazem-se necessários, conforme a seguir.

Do ponto de vista hidrodinâmico, um escoamento plenamente desenvolvido num tubo circular também geraria um perfil curvo de velocidade, e isso geraria gradientes de pressão que tornaria necessário a solução de equações de *momentum* para essa análise. Porém, nas considerações para o modelo, descartou-se esses gradientes de pressão e considerou-se um escoamento pistonado, o qual postula velocidade constante ao longo de todo o reator, por se tratar de um modelo pseudo-homogêneo e requerer mais simplicidade.

Por outro lado, com relação à condição térmica na entrada do reator, não há incoerência física ao se considerar um perfil de temperatura curvilíneo, mesmo que dissociado de um perfil de velocidade da também curvilíneo.

Como este estudo é teórico, em virtude de a geometria cilíndrico-elíptica ser não convencional na literatura, propôs-se estabelecer um perfil curvilíneo de temperatura na entrada do reator adaptado de um perfil corrente. Assim, esta adaptação foi feita com base em Bergman

et al. (2014), o qual tem deduzido na sua obra, para um tubo cilíndrico-circular, com algumas considerações para o fluxo de calor ou temperatura na superfície do tubo como sendo constante.

De acordo com Bergman et al. (2014), o perfil curvilíneo de temperatura por eles deduzido para um duto cilíndrico-circular é um perfil parabólico com um valor mínimo da temperatura na parede e máximo no centro, então, conseqüentemente, é lógico que fisicamente, para um duto cilíndrico-elíptico mantenha-se essas mesmas características, com a diferença que o perfil esperado seja um parabolóide elíptico, sendo este um argumento hipotético lógico na ausência de investigações experimentais que possam comprovar.

Considerou-se que a temperatura T_s na superfície do reator, em sua entrada, está em equilíbrio térmico com a temperatura do fluido arrefecedor. Estabeleceu-se igualmente uma temperatura máxima no centro da seção transversal de entrada resultante da consideração de uma temperatura média, T_M , em toda a seção de entrada. Nos resultados foi proposto um valor para T_M de forma que se possa comparar os resultados da distribuição de temperatura com este perfil variável na entrada com os resultados para um perfil plano com o mesmo valor de temperatura e, assim, verificar como se dá a dinâmica do processo sob as duas condições, no sentido de se verificar se há discrepâncias em se considerar um perfil plano, quando este, na realidade, deveria ser variável com a posição na entrada.

Assim, na condição de conorno na entrada do reator (Equação 3.55), propõe-se o uso da seguinte função para $f_3(\xi, \eta, z = 0, t)$:

$$T(\xi, \eta, z = 0, t) = T_s - \frac{2u_z R_m^2}{\alpha} \left(\frac{dT_m}{dz} \right) \left[\frac{3}{16} + \frac{1}{16} \left(\frac{r}{R} \right)^4 - \frac{1}{4} \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (3.127)$$

onde α é a difusividade térmica $\left(\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \right)$, calculada com base na temperatura média da seção transversal de entrada do reator. R é a distância do centro do reator até um ponto na sua superfície e que forma uma linha reta sobre a qual estão os pontos internos de interesse, que distam r do centro do reator. Para entender melhor, a Figura 3.11 ilustra o que foi colocado.

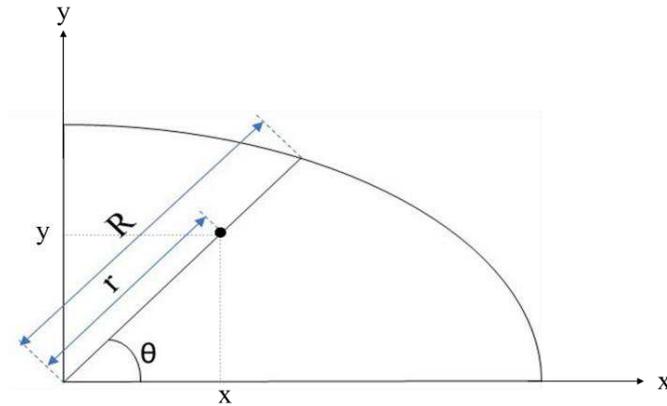


Figura 3.11 - Variáveis utilizadas para o perfil curvo de temperatura na entrada do reator.

Assim, pode-se verificar que:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (3.128)$$

onde r é a coordenada radial do sistema de coordenadas polares que, em termos das coordenadas cilíndrico-elípticas será dada por:

$$r = L\sqrt{\xi^2 + \eta^2 - 1} \quad (3.129)$$

O parâmetro R é dada por:

$$R = \sqrt{(L_1 \sin \theta)^2 + (L_2 \cos \theta)^2} \quad (3.130)$$

também em coordenadas polares. Contudo, quando escrita no sistema de coordenadas cilíndrico-elípticas resulta em:

$$R = \sqrt{L_1^2 \left[\frac{(\xi^2 - 1)(1 - \eta)^2}{\xi^2 + \eta^2 - 1} \right] + L_2^2 \left[\frac{(\xi \eta)^2}{\xi^2 + \eta^2 - 1} \right]} \quad (3.131)$$

Por conseguinte:

$$\frac{r}{R} = \frac{L(\xi^2 + \eta^2 - 1)}{\sqrt{L_1^2 [(\xi^2 - 1)(1 - \eta)^2] + L_2^2 [\xi^2 \eta^2]}} \quad (3.132)$$

A variável R se tornaria o raio de uma circunferência, ao se estudar um problema com um tubo cilíndrico-circular e, nesse caso, seria constante, reduzindo-se à forma original de Bergman et al. (2014), ponto de partida dessa argumentação. Não é o caso em questão na geometria aqui estudada, a qual trata-se de uma elipse e o R, portanto, é variável.

Nesse sentido, o modelo aqui proposto para o perfil variável de temperatura na entrada verifica-se como generalista, contemplando também a geometria cilíndrico-circular, acompanhando a natureza da metodologia numérica em questão que, como já dito, abrange desde a geometria circular até a elíptica, evidenciando sua versatilidade e praticidade em se estudar diferentes geometrias.

Ainda na Equação 3.127, T_s é a temperatura na superfície do reator na entrada; $\frac{dT_M}{dz}$ é o gradiente de temperatura na seção transversal de entrada que, segundo Bergman et al. (2014), é função da diferença entre a temperatura média da seção transversal, T_M , e a temperatura na superfície do reator, T_s . Logo, é dada por:

$$\frac{dT_M}{dz} = \frac{-(T_M - T_s)}{\frac{11}{48} \frac{u_z R_h^2}{\alpha}} \quad (3.133)$$

Nessa última equação, R_h é a metade do diâmetro hidráulico da seção de entrada do reator.

3.1.5 Termo de reação química

Para se determinar o termo fonte de reação foi assumido que seria calculado sempre no tempo anterior ao que é os outros termos das equações discretizadas, diferentemente do tratamento corrente reportado na literatura, a exemplo de Maliska (2004), que lineariza o termo fonte de energia.

Inicialmente, supõe-se uma solução de um reagente A de concentração C_A , e que ocorre uma reação simples dada pela taxa de reação:

$$r_A = \frac{dC_A}{dt} = -\hat{k}C_A^m \quad (3.134)$$

onde m , representa a ordem global da reação; o coeficiente \hat{k} representa a constante de velocidade da reação e é função da temperatura absoluta T , dada pela relação de Arrhenius, como segue:

$$\hat{k} = A_0 \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad (3.135)$$

onde E_A é energia de ativação da reação (J/mol), R é a constante universal dos gases, e A_0 é uma constante chamada fator pré-exponencial de Arrhenius.

Se for considerado que o material sólido do meio poroso seja inerte; que a reação gera um produto cuja massa pode ser ignorada; que a variação de volume é desprezível, e ainda que um consumo de 1 mol do reagente provoque um aumento na energia térmica de uma quantidade igual a $-\Delta H$ devido à reação química, então, pode-se escrever a energia por unidade de volume da mistura fluida \dot{q} , termo da Equação. 3.1, como sendo:

$$\dot{q} = \Delta \hat{H} \frac{dC_A}{dt} = -A_0 \Delta \hat{H} \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) C_A^m \quad (3.136)$$

No caso de uma reação envolvendo gases, é mais conveniente expressar a taxa de consumo do reagente, pela sua pressão parcial, que por sua vez está relacionada diretamente a concentração pela equação geral dos gases, como segue:

$$C_A = \frac{y_A P}{RT} \quad (3.137)$$

onde y_A é a fração molar do reagente A, P é a pressão total do sistema, R é a constante universal dos gases e T a temperatura absoluta. Desta maneira, a parcela de energia gerada na reação química é determinada por:

$$\dot{q} = \Delta\hat{H} \frac{dC_A}{dt} = -A_o \Delta\hat{H} \left(\frac{y_{AP}}{RT} \right)^m \exp\left(\frac{-E_A}{RT} \right) \quad (3.138)$$

Neste trabalho será considerada a ocorrência de reações químicas no reator de leito fixo compactado na sua forma mais simplificada, sendo $m = 1$, ou seja, reação de 1ª ordem.

3.1.5.1 Linearização do termo de reação química (termo fonte)

Fez-se a linearização do termo fonte obtido na Equação 3.138, a fim de se incorporar às equações discretizadas da modelagem deste trabalho, as parcelas a ele referentes, porém, executando-se o programa e comparando-se resultados e tempo computacional para obtê-los, observou-se praticamente nenhuma disparidade quando alternativamente se executou o programa computando os efeitos do termo-fonte sempre no tempo anterior como influentes sobre o tempo atual, considerando que o passo de tempo na simulação transiente foi bem pequeno, conservando a instantaneidade do processo na solução do problema. Esta segunda prática poupou tempo na codificação do programa, com menos linhas de comando, otimizando o trabalho.

Assim, após a abordagem sobre o termo de reação química, o coeficiente B da Equação 3.88 é determinado pela seguinte equação:

$$B = -A_o \Delta\hat{H} \left(\frac{y_{AP}}{RT} \right)^m \exp\left(\frac{-E_A}{RT_p^0} \right) \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} \Delta\xi \Delta\eta \Delta z \quad (3.139)$$

que é função da temperatura no tempo anterior, T_p^0 , e influencia o cálculo da temperatura no tempo atual, T_p . Lembrando que a formulação para solução da modelagem transiente nesse trabalho foi a totalmente implícita.

3.1.6 Solução do sistema de equações e critérios de convergência

Para obter-se os resultados, foi implementado um código computacional no ambiente *Mathematica*®. O sistema de equações proveniente da Equação 3.88, para cada volume de controle do domínio, foi resolvido iterativamente usando-se o algoritmo Gauss-Seidel. Os

critérios de convergência adotados são apresentados nas Inequações 3.140 e 3.141 e têm de serem satisfeitos em todos os pontos internos do domínio computacional.

- Em cada ponto do domínio computacional num certo instante de tempo:

$$|T^{\hat{n}+1} - T^{\hat{n}}| \leq 10^{-9} \quad (3.140)$$

- Para a equação discretizada em qualquer instante de tempo:

$$\sum \frac{|A_K|}{|A_P|} \leq 1 \text{ para todas as equações} \quad (3.141)$$

onde \hat{n} , na Equação 3.140, representa a \hat{n} -ésima iteração em cada instante de tempo e K, na Equação 3.141, os pontos nodais vizinhos do ponto nodal P. Além de satisfazer os critérios acima mencionados, existe a necessidade de que os coeficientes A_K sejam todos positivos.

3.2 Parâmetros termofísicos e geométricos utilizados nas simulações

Para a geometria do reator, adotou-se os seguintes valores: $L_1 = 0.05$ m, $L_2 = 0.075$ m, 0.1m e 0.15 m; $H = 0.2$, mesmas dimensões geométricas do reator simulado por Oliveira (2004) bem como Silva Filho (2013), são medidas aproximadas para os cilindros de escapamento de veículos, por exemplo, os quais promovem reações catalíticas para emissão menos ofensiva dos gases de exaustão.

O modelo aqui proposto confere versatilidade geométrica ao sistema em estudo, pois a geometria pode ser analisada partindo desde a forma cilíndrico-cilrcular, até a cilíndrico-elíptica com vários valores de excentricidade, também sendo admissível a forma canal retangular quando $L_2 \gg L_1$.

Uma vez que na realidade duas fases estão envolvidas no sistema, as propriedades térmicas denominadas como efetivas, são dependentes da natureza das fases individuais que

formam o leito compactado, contudo, por simplicidade, as propriedades térmicas efetivas do meio poroso foram consideradas iguais a do fluido percolante.

O fluido percolante é o ar atmosférico, cuja temperatura de entrada foi variada da seguinte forma: $T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ \text{C}$, 70°C , 100°C e também um perfil curvo dependente da posição radial. A velocidade do escoamento pistonado u_z , foi variada nos valores $u_z = 0.1$, 0.2 e 0.35 m/s . Ainda, para o ar percolante, utilizou-se as seguintes equações para as suas propriedades termofísicas: condutividade térmica k ; massa específica ρ ; viscosidade μ , e o calor específico c_p , respectivamente (Pakowski et al.,1991; Jumah et al.,1996):

$$k = 2.425 \times 10^{-2} + 7.889 \times 10^{-5} T - 1.907 \times 10^{-8} T^2 - 8.570 \times 10^{-12} T^3 \quad (3.142)$$

$$\rho = \frac{PM_{ar}}{R_{ar}T} \quad (3.143)$$

$$\mu = 1.691 \times 10^{-5} + 4.984 \times 10^{-8} T - 3.187 \times 10^{-11} T^2 - 1.3196 \times 10^{-14} T^3 \quad (3.144)$$

$$c_p = 1.00926 \times 10^3 - 4.0403 \times 10^{-2} T + 6.1759 \times 10^{-4} T^2 - 4.097 \times 10^{-7} T^3 \quad (3.145)$$

O fluido arrefecedor é a água sempre mantida à temperatura $T_w = 30^\circ \text{C}$ e seu coeficiente de transferência de calor convectivo h_w foi analisado de acordo com correlações para o número de Nusselt baseado no diâmetro hidráulico, sendo $h_w = 160 \text{ W/m}^2\text{K}$ para todos os casos estudados.

Por sua vez, o fluido percolante teve o coeficiente de transferência de calor por convecção calculado com as seguintes correlações:

Segundo Beek e Muttzall (1975):

$$Re_p = \frac{2\rho u_z \varepsilon D_p}{3\mu(1-\varepsilon)} \quad (3.146)$$

E segundo Incropera e De Witt (1992):

$$J_H = \frac{2,06 \text{ Re}_p^{-0,575}}{\varepsilon} \quad (3.147)$$

$$S_T = \frac{J_H}{\text{Pr}^{\frac{2}{3}}} = \frac{\text{Nu.Re}}{\text{Pr}} \quad (3.148 - 3.149)$$

Das três equações anteriores tem-se que:

$$h_{\text{win}} = S_T \rho \varepsilon c_p u_z \quad (3.150)$$

Com relação à porosidade em um leito fixo compactado de partículas, a mesma não pode ser constante devido às não homogeneidades no processo de empacotamento, embora vários trabalhos a considere constante para fins de análise. Na realidade, a distribuição das partículas de recheio conferem um caráter estatístico ao perfil de porosidade.

Sólidos quebrados podem ser utilizados como partículas de recheio em um meio poroso, mas a sua utilização pode implicar em porosidade não uniforme e transferência de massa e calor não satisfatória, a única vantagem sendo o baixo custo. E, falando-se em termos de trabalho de simulação, a tarefa seria árdua em estudar um perfil de porosidade para esta configuração de empacotamento. Por este motivo, preferiu-se trabalhar com o modelo de partículas esféricas.

O modelo de porosidade adotado neste trabalho foi adaptado de Mueller (1992). Este perfil foi utilizado também por Silva Filho (2013) e tanto no trabalho desse autor como neste, o modelo foi adaptado para satisfazer o propósito de simular o processo numa geometria cilíndrico-elíptica. O modelo matemático para o parâmetro em questão tem o seguinte perfil:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + (1 - \varepsilon_0) e^{-b \hat{r}} J_0 \left(a \frac{\hat{r}}{D_p} \right) \quad (3.151)$$

Na Equação 3.151, $\varepsilon_0 = 0.4$; J_0 é a função de Bessel de primeira espécie e ordem zero; \hat{r} é a distância de um dado ponto dentro do reator à parede do mesmo, sendo normal a esta, e, por fim, $a = 1$ e $b = 20$. Já para as partículas do recheio considerou-se um diâmetro médio $D_p = 0.004$ m. Na seção 4.3.4 é apresentado o gráfico referente a este perfil de porosidade. Trata-se de um perfil que é função apenas da coordenada radial, sendo independente da posição axial, ou seja, se replica ao longo de qualquer altura do leito. Na Figura 3.12, observa-se, com detalhe, a aplicação da coordenada \hat{r} .

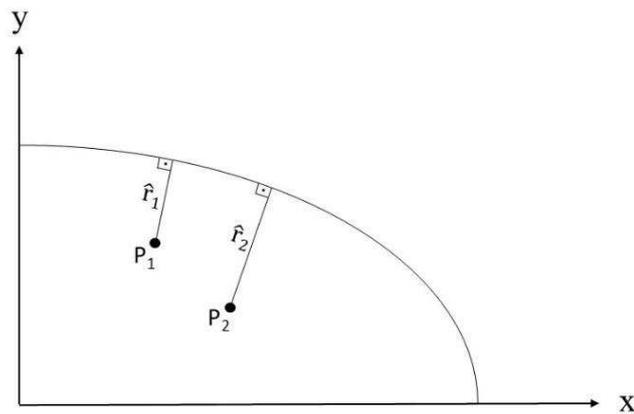


Figura 3.12 - Coordenada \hat{r} do modelo de porosidade

Mueller (2005) também propôs um rearranjo deste modelo, porém, com a determinação de ε em função do posicionamento das partículas no interior do leito. O modelo aqui tratado não teve como trabalhar com esse modelo atualizado pelo fato de ser um pseudo- homogêneo com distribuição aleatória das partículas.

O valor de porosidade média do leito, ε_{med} , também foi considerado em algumas simulações neste trabalho. Este valor é obtido calculando-se a partir do modelo de ε variável (Equação 3.151) resolvendo-se a seguinte integral:

$$\varepsilon_{med} = \frac{\int_V \varepsilon dV}{\int_V dV} = \frac{\int_{z=0}^{z=H} \int_{\eta=0}^{\eta=1} \int_{\xi=1}^{\xi=\frac{L_2}{L}} \varepsilon(\xi, \eta) \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} d\xi d\eta dz}{\int_{z=0}^{z=H} \int_{\eta=0}^{\eta=1} \int_{\xi=1}^{\xi=\frac{L_2}{L}} \frac{L^2(\xi^2 - \eta^2)}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}} d\xi d\eta dz} \quad (3.152)$$

Na forma numérica, a Equação 3.152 assume a forma:

$$\varepsilon_{\text{med}} = \frac{\sum_{k=1}^{\text{npz}} \sum_{j=1}^{\text{npeta}} \sum_{i=1}^{\text{npksi}} \varepsilon(i, j) \frac{L^2 (\xi_i^2 - \eta_j^2)}{\sqrt{(\xi_i^2 - 1)(1 - \eta_j^2)}} \Delta\xi \Delta\eta \Delta z}{\sum_{k=1}^{\text{npz}} \sum_{j=1}^{\text{npeta}} \sum_{i=1}^{\text{npksi}} \frac{L^2 (\xi_i^2 - \eta_j^2)}{\sqrt{(\xi_i^2 - 1)(1 - \eta_j^2)}} \Delta\xi \Delta\eta \Delta z} \quad (3.153)$$

A expressão para $\varepsilon(i, j)$ na Equação 3.153 é aquela dada pela Equação 3.151. Os indexadores i , j e k , na Equação 3.153 referenciam as coordenadas de posição ξ , η e z , respectivamente, de cada volume de controle da malha no sistema de coordenadas cilíndrico elíptico. O parâmetro npksi é o número de pontos nodais na direção da variável ξ ; npeta , o número de pontos nodais na direção da variável η , e npz , por sua vez, é o número de pontos nodais na direção z , tendo o valor de 20 cada um.

Para o material de parede, embora já mencionado que tanto a espessura quanto o material não influenciem significativamente no fenômeno estudado no interior do reator, este pode ser de aços inoxidáveis (AISI 302, 304 e 316) ou o cobre puro, uma vez que os mesmos são inertes a reações e resistentes a corrosão (Silva Filho, 2013).

Discutidos os detalhes dos parâmetros geométricos e termofísicos para as simulações, na Tabela 3.1, encontra-se sumarizado os casos que foram estudados neste trabalho.

Os critérios para a escolha dos 12 (doze) casos constantes na Tabela 3.1 foram os seguintes.

O caso 2 é o que mais se assemelha a um caso analisado em regime permanente por Oliveira (2004), que imputou os seguintes dados: $L_1 = 0.05$ m, $L_2 = 0.1$ m, $H = 0.2$ m, $u_z = 0.11417$ m/s, $T(z = 0 \text{ m}) = 70^\circ\text{C}$, $T_w = 30^\circ\text{C}$, $\varepsilon = 0.4$, $h_f = 0$ W/m²k, $h_w \rightarrow \infty$, com a diferença que o caso 2 deste trabalho considera $u_z = 0.1$ m/s e $h_f = 66.18$ W/m²k e um perfil de porosidade variável com a posição radial no leito. A espessura de parede foi desprezível em ambos os casos e o restante das propriedades termofísicas baseadas nas mesmas correlações.

A simulação dos casos 1 a 12 levou em consideração os seguintes critérios: 1) Efeito da razão de aspecto geométrica L_2/L_1 sobre a distribuição de temperatura. E aqui tem três casos: **caso 1**, com $L_2/L_1 = 1.5$, **caso 2**, com $L_2/L_1 = 2.0$ e **caso 3**, com $L_2/L_1 = 3.0$; 2) Efeito da velocidade de entrada do fluxo de ar (u_z), sendo composta do **caso 4**, com $u_z = 0.2$ m/s e **caso 5**, com $u_z = 0.35$ m/s; 3) Efeito da temperatura do fluxo de ar na entrada ($T(z = 0$ m)), cujos casos analisados foram o **caso 6**, com $T(z = 0$ m) = 40°C, o **caso 7**, com $T(z = 0$ m) = 100°C e também o **caso 8** com um perfil curvilíneo de temperatura, ou seja, variando com a posição radial na entrada; 5) o caso 9, que leva em consideração o efeito de um perfil de porosidade constante em todo o domínio com um valor para ε que é a média para o perfil de porosidade variável proposto para os casos de 1 a 8.

Os casos de 2 a 9 foram todos confrontados com o caso 1 que teve as seguintes variáveis: $L_1 = 0.05$ m, $L_2 = 0.75$ m, $H = 0.2$ m, $u_z = 0.1$ m/s, $T(z = 0$ m) = 70°C, $T_w = 30$ °C, ε com perfil variável ao longo da posição radial do leito, $h_f = 66.23$ W/m²k, $h_w = 160$ W/m² k, $D_p = 0.004$ m. Exceto pela mudança de cada parâmetro específico que caracteriza cada caso, as demais propriedades termofísicas e geométricas foram mantidas as mesmas do caso 1 .

Já os casos 10 a 12 levaram em consideração o efeito de uma reação química global de 1ª ordem, variando-se os parâmetros do termo de reação química a fim de verificar a influência da mesma sobre a distribuição de temperatura no reator, comparando-se especificamente as ocorrências de cada um dos três casos com o caso 7, que possui mesma temperatura de entrada de fluido e demais parâmetros, porém, sem a consideração de uma reação química. Esses três casos levaram em consideração o seguinte.

Caso 10: variação da concentração de reagentes em 3 valores: $C = 0.0008$, 0.08 e 0.8 Kmol/m³; caso 11: variação da temperatura dos reagentes na entrada do reator, de 100°C para 120°C e, caso 12: variação do fator pré-exponencial de Arrhenius de 9.4×10^{19} para 9.4×10^{22} .

Tabela 3.1 - Casos simulados neste trabalho

Caso	Parâmetros													
	T (z = 0 m) (° C)	u _z (m/s)	L ₁ (m)	L ₂ (m)	H (m)	T _w (°C)	h _f (w/m ² K)	h _w (w/m ² K)	ε	D _p (m)	ΔH (Kcal/ Kmol)	E _a (Kcal/ Kmol)	C (Kmol/ m ³)	A _o (s ⁻¹)
1	70	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	-	-	-	-
2	70	0.1	0.05	0.1	0.2	30	67.68	160	variável	0.004	-	-	-	-
3	70	0.1	0.05	0.15	0.2	30	68.72	160	variável	0.004	-	-	-	-
4	70	0.2	0.05	0.075	0.2	30	88.91	160	variável	0.004	-	-	-	-
5	70	0.35	0.05	0.075	0.2	30	112.79	160	variável	0.004	-	-	-	-
6	40	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	-	-	-	-
7	100	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	-	-	-	-
8	variável	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	-	-	-	-
9	70	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	0.466	0.004	-	-	-	-
10 - a	100	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	25000	38000	0.0008	9.4x10 ¹⁹
10 - b	100	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	25000	38000	0.08	9.4x10 ¹⁹
10 - c	100	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	25000	38000	0.8	9.4x10 ¹⁹
11	120	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	25000	38000	0.08	9.4x10 ¹⁹
12	100	0.1	0.05	0.075	0.2	30	66.23	160	variável	0.004	25000	38000	0.0008	9.4x10²²

CAPÍTULO 4

RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Confiabilidade do modelo

O modelo proposto nesta pesquisa é consistente, tendo sido validado em confronto com uma metodologia analítica reportada por Oliveira (2004), que trabalhou em regime permanente, assumindo propriedades termofísicas constantes, um perfil de temperatura constante, fluxo pistonado e geometria cilíndrico-circular com $R = 0.05$ m, ou seja, $L_2 = L_1 = 0.05$ m. O modelo desse autor foi um modelo a dois parâmetros ($k_a - k_r$), o qual ele fez estimativa dos valores dos parâmetros com base em dados experimentais obtidos de um piloto à sua disposição na Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, Brasil. O citado autor verificou ótima concordância entre dados experimentais e dados analíticos proveniente da solução da equação da energia pela técnica de separação de variáveis. Além disso, encontrou erros mínimos ao resolver o problema numericamente com a mesma metodologia deste trabalho e confrontar os resultados obtidos com os analíticos. Maiores detalhes podem ser encontrados em Oliveira (2004).

Para corroborar ainda mais a confiabilidade do modelo, na seção 4.3.3 são discutidos os resultados do perfil de temperatura variável com a posição na entrada do reator com o modelo que foi proposto neste trabalho e que foi validado com base no trabalho de Lucena (2016), o qual também estudou a operação no reator submetido a um perfil de temperatura variável na

entrada, com perfil parabólico. Lucena (2016) resolveu a equação da energia em regime permanente com um modelo bidimensional a três parâmetros ($k_r - k_z - h_w$) resolvido via método de separação de variáveis, propondo um modelo de perfil de temperatura variável na entrada obtido com uma complexa metodologia que envolve função hipergeométrica e funções de Bessel na determinação deste perfil, sendo que a resposta por ele obtida é válida apenas para a geometria cilíndrico-circular. A metodologia proposta neste trabalho foi validada com base no modelo desse autor, porém é abrangente de tal forma que é válida para a geometria cilíndrico-elíptica.

Os detalhes das propriedades geométricas e termofísicas do modelo de Lucena (2016) que obviamente também foram usadas neste trabalho para fins de confronto de resultados e consequente validação, encontram-se em tempo oportuno na seção 4.3.3, quando serão mostrados os detalhes do inovador modelo proposto neste trabalho.

É digno de nota que este trabalho está focado essencialmente no campo teórico, em condições operacionais com variáveis dentro das mesma faixa que o sistema estudado por Oliveira (2004) e Silva filho (2013) e Lucena (2016). Na prática, o ponto de partida para se verificar a acurácia deste modelo transiente são os resultados em regime permanente obtidos por esses autores praticamente nas mesmas condições operacionais que as impostas aqui.

4.2 Refino de malha e passo de tempo computacional

Como sempre, todo trabalho de simulação numérica requer uma análise prévia de qual a melhor malha, que possa gerar o menor tempo de solução, com menor gasto de memória de máquina, e que possui uma quantidade de pontos de tal forma que, a partir de uma quantidade mínima deles, a solução independa do aumento de seu número.

Como se trata de um problema transiente, aqui se faz necessário também refinar a solução numérica em relação ao passo de tempo usado, de tal forma que a solução também fique independente desse elemento. Ou seja, busca-se qual o passo de tempo com máximo valor para o qual os resultados gerados com sua utilização sejam praticamente iguais aos gerados por passos de tempo de menor valor.

Na seção a seguir são apresentados os resultados dessa análise.

4.2.1 Refino de malha

A tarefa de refino de malha realizada aqui neste trabalho praticamente já foi realizada em trabalhos prévios de autores que trabalharam com essa mesma modelagem. Coube aqui confirmar se o mesmo constatado por Oliveira (2004) e Silva Filho (2013) também seria neste trabalho. Assim, a mesma tarefa realizada por esses autores foi refeita neste trabalho.

A tarefa de refino de malha consistiu em trabalhar com um domínio físico com seção transversal com relação $L_2/L_1 = 1$, e foram testadas malhas de 10x10x10, 20x20x20 e 30x30x30 volumes de controle, nas quais avaliou-se os resultados de temperatura em graus Celsius e também na forma adimensional em diversos pontos específicos.

Dessa análise, verificou-se que os resultados praticamente coincidiram em uma mesma posição espacial para várias amostras de pontos, quando se confrontou as malhas 20x20x20 e 30x30x30. Por sua vez, a malha 10x10x10 mostrou uma disparidade acentuada, com resultados de temperatura bastante dependentes de seu tamanho, sendo a mesma inadequada para as simulações e, portanto, descartada.

Uma amostra da análise feita pode ser verificada na Tabela 4.1, na qual, de forma prática, tem-se os resultados deste refino mostrando os resultados na posição espacial (0.15 m, 0.03 m, 0.10554 m).

Tabela 4.1- Teste para escolha da malha e custo computacional. (Fonte: autoria própria)

Malha	z	(x, y)	T*	T(°C)	Tempo de execução do programa (h m s)
10x10x10	0.10554	(0.15, 0.03)	0.912839	66.51	0h0m05s
20x20x20	0.10554	(0.15, 0.03)	0.868115	64.72	0h03m42s
30x30x30	0.10554	(0.15, 0.03)	0.868715	64.74	1h29m50s

Da Tabela 4.1 pode-se observar claramente que a malha 20x20x20 teve resultados que, comparados com a malha de 30x30x30, tiveram diferença de resultado apenas na ordem de dois centésimos na temperatura em °C e 6 décimos de milésimos na temperatura adimensional

quando se analisou esses valores na posição $(x,y,z) = (0.15, 0.03, 0.10554)$. Como a malha de $30 \times 30 \times 30$ volumes teve uma solução em torno de 1 h e 30 minutos de processamento, enquanto que a malha de $20 \times 20 \times 20$ volumes levou em torno de 4 minutos. para produzir praticamente a mesma solução, esta última foi escolhida a melhor malha para se produzir os resultados deste trabalho.

Este trabalho foi feito com um computador com processador Intel Core i7, 2,6 Ghz (8 Núcleos), memória DDR3 1600 MHz com 8Gb e Hd 750 Gb.

4.2.2 Refino do passo de tempo

No tocante ao melhor passo de tempo para a solução numérica, foi realizada uma solução de Oliveira (2004) em regime transiente, com razão de aspecto geométrica $L_2/L_1=1$, a fim de verificar o comportamento dinâmico da mesma. O programa foi executado estabelecendo-se um tempo dilatado para se verificar a resposta de temperatura do reator e foi constatado que o mesmo atinge a condição de operação em regime permanente após 4.5 s.

Nesse sentido, para fins de análise de qual o melhor passo de tempo, a metodologia empregada foi a de acompanhar as respostas de temperatura em três pontos espaciais da malha e em sete instantes de tempo diferentes, a saber, $t = 0.1$ s, $t = 0.2$ s, $t = 0.5$ s, $t = 1$ s, $t = 2$ s, $t = 3$ s, $t = 4$ s.

Foram escolhidos 4 diferentes passos de tempo (Δt) e imputou-se-lhes os seguintes valores: $\Delta t = 0.025$ s, $\Delta t = 0.05$ s, $\Delta t = 0.1$ s e $\Delta t = 0.2$ s. Assim, o programa foi executado 4 vezes, uma para cada Δt , e foram tomados os valores de temperatura nos três pontos espaciais mencionados, em cada um dos sete instantes de tempo $t = 0.1$ s, $t=0.2$ s, $t = 0.5$ s, $t = 1$ s, $t = 2$ s, $t = 3$ s, $t = 4$ s.

A Tabela 4.2 detalha a análise feita, para fins de praticidade, com apenas um dos três pontos espaciais monitorados, a saber, $(x,y,z) = (0.058333$ m, 0.04061 m, 0.10556 m). Tomou-se como passo de tempo padrão, para ser considerado como infinitesimal, o valor de $\Delta t = 0.025$ s, que é aquele que menos produz erros numéricos e que garante a independência entre a malha e os resultados. Daí, executou-se o programa para esse passo de tempo e os demais: $\Delta t = 0.05$

s, $\Delta t = 0.1$ s e $\Delta t = 0.2$ s. Foi comparado, via erro relativo, as respostas dadas pelos 3 últimos passos de tempo em relação ao passo de tempo padrão. É digno de nota que dos sete instantes de tempo avaliados, alguns deles não tiveram como ser comparados, pelo fato de: 1) algum deles ter um valor inferior ao de algum passo de tempo. Exemplo: $t = 0.1$ s $<$ $\Delta t = 0.2$ s), aqui nesse caso, como o primeiro passo de tempo já ultrapassa o instante de tempo, não é possível captar resultado para o referido instante de tempo; 2) haver instante de tempo que não é submúltiplo de algum passo de tempo analisado. Exemplo: $t=0.5$ s não é submúltiplo de $\Delta t = 0.2$ s e, por esse motivo, não teve como captar resultado gerado para o instante de tempo $t=0.5$ s com o esse passo de tempo.

Da Tabela 4.2, pode-se apreender algumas importantes afirmações. O passo de tempo $\Delta t = 0.2$ s produziu valores pouco discrepantes quando o instante de processo foi maior que 2 segundos, porém, quando o tempo é inferior a 2 segundos, há valores com discrepâncias que podem chegar a mais de 6%, implicando em uma discrepância mais de 3°C na determinação da temperatura. Com esse passo de tempo teve-se uma solução em um tempo de 3269.61 s, ou 54 min e 30 s.

Já o passo de tempo $\Delta t = 0.1$ s, também apresentou erros relativos percentuais bastante pequenos tomando como referência o passo de tempo $\Delta t = 0.025$, em qualquer um dos 7 instantes de tempo analisados. O maior erro anotado foi em torno de 4 %, o que implica em um erro cometido na determinação da temperatura em torno de 1.29°C. O tempo computacional gasto nessa solução foi de 3558.08 s ou 59 min e 18 s.

Por sua vez o passo de tempo $\Delta t = 0.05$ s é quem possui as menores discrepâncias para todos os 7 instantes de tempo avaliados, com o erro absoluto não atingindo nem 2 %, implicando em um erro máximo na determinação que foi de 0.68°C. Este passo de tempo gerou um tempo computacional para a solução do programa que foi de 3923.44 s ou 1 h 5 min e 18 s.

Em termos de tempo computacional, o melhor passo de tempo com admissível ônus na determinação da temperatura é o $\Delta t = 0,1$ s. No entanto, a diferença de tempo de solução entre esse passo de tempo e o $\Delta t = 0,05$ s foi de apenas 6 minutos, sendo que, com este último, a

menor discrepância foi obtida para todos os instantes de tempo analisados. Assim sendo, o passo de tempo escolhido como ideal para todas as simulações, $\Delta t = 0,05$ s.

Tabela 4.2 - Obtenção do melhor passo de tempo com base na relação menor erro cometido x menor tempo computacional.

passo de tempo Δt (s)	Instante de tempo de operação do reator (s)														tempo de execução do programa (s)
	0.1		0.2		0.5		1		2		3		4		
	T (°C)	erro (%)	T(°C)	erro (%)	T (°C)	erro (%)									
0.025	30.00	-	30.00	-	30.06	-	33.36	-	50.60	-	59.65	-	59.74	-	4577.47
0.05	30.00	0.01	30.01	0.04	30.16	0.31	33.89	1.60	49.92	1.35	59.57	0.13	59.74	0.00	3923.44
0.1	30.00	0.0	30.08	0.24	30.40	1.13	34.65	3.86	48.87	3.42	59.34	0.51	59.74	0.01	3558.08
0.2			30.84	2.82			34.39	3.1	47.46	6.21	58.70	1.60	59.71	0.06	3269.61

4.3 Análise térmica do reator cilíndrico-elíptico

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos das simulações dos 9 (nove) casos propostos. A apresentação dos mesmos é feita em alguns instantes de tempo do processo transiente que mostrem zonas de transição das principais ocorrências durante a operação. Os planos escolhidos para isso foram $z = 0.00556$ m, 0.05 m, $z = 0.0944$ m, $z = 0.1944$ m, $x = 0$ m e $y = 0$ m. Os resultados consistem em perfis de temperatura adimensional sobre esses planos.

A temperatura adimensional é definida por $T^* = \frac{T - T_w}{T(z = 0 \text{ m}) - T_w}$, onde T é a temperatura em graus Celsius e T_w é a temperatura do fluido arrefecedor na camisa de refrigeração do reator.

A escolha do valor de $h_w = 160$ W/m²K para todos os casos estudados, foi em decorrência de que é em torno desse valor que se alcança o limite para a máxima remoção de calor do sistema, sendo que valores superiores a este, que implicariam no aumento da vazão de água no anular da camisa de refrigeração, apenas aumentariam os custos de operação sem produzir resultados significativos quanto à remoção de calor do sistema. A espessura da parede do reator foi considerada desprezível, como já mencionado.

4.3.1 Influência da razão de aspecto (L_2/L_1) do reator

A fim de verificar a influência do parâmetro L_2/L_1 sobre o processo de transferência de calor no reator, foram simulados três casos variando este parâmetro: $L_2/L_1 = 1.5$ (caso 1), $L_2/L_1 = 2$ (caso 2) e $L_2/L_1 = 3$ (caso 3). A legenda presente na Figura 4.1-a serve para referência em todos os casos estudados (1 a 12).

Caso 1

Para o caso 1 ($L_2/L_1 = 1.5$), foram feitos gráficos para os instantes de tempo, $t = 0.5$, 1.5 , 3 e 4.5 s, este último instante é quando a operação em regime permanente se estabelece.

Para o instante de tempo $t = 0.5$ s, observa-se, das figuras 4.1 e 4.3. elevados gradientes radiais de temperatura concentrados próximos à parede. Percebe-se também, da figura 4.3, que

nesse instante de tempo há a presença de elevados gradientes axiais desde a entrada do reator até uma altura em torno de $z = 0.09$ m. Sendo que após essa posição, praticamente não há perturbação no campo de temperatura em relação ao início da operação. Conforme ilustrado nas Figuras 4.2 e 4.3.

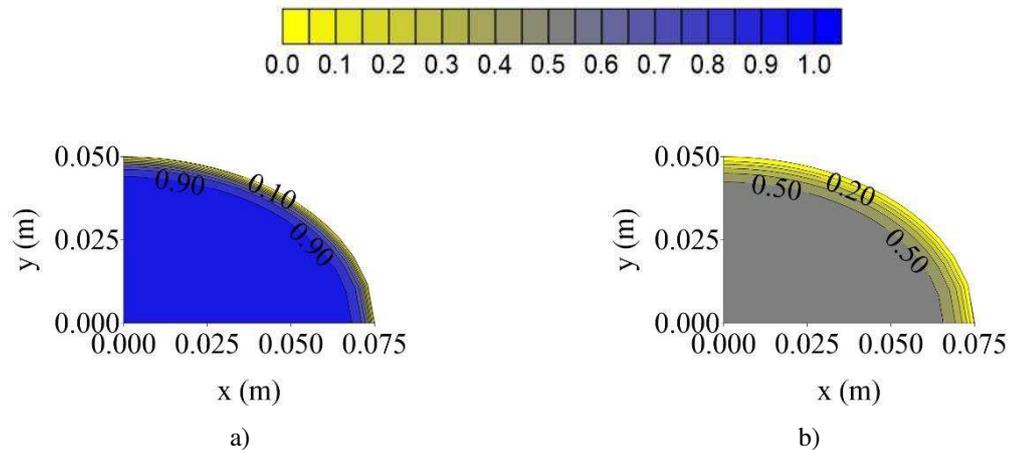


Figura 4.1 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.

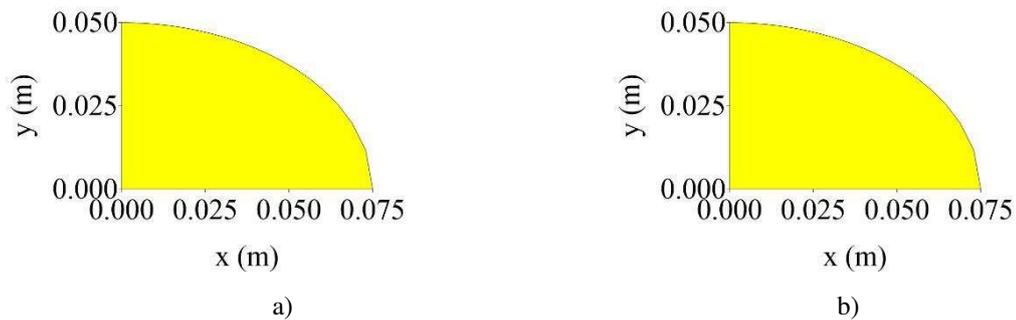


Figura 4.2 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$) a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.

Das Figuras 4.4, 4.5 e 4.6, que representam a distribuição de temperatura sobre planos transversais e longitudinais no reator no instante de tempo $t = 1.5$ s, observa-se que a região com maior variação dos gradientes radiais próxima da parede se estende mais ao longo da posição axial. A partir deste instante de tempo, vê-se que há um deslocamento da região de maiores gradientes axiais, que antes, no instante $t = 0.5$ s, estavam situados aproximadamente na região de entrada, para uma região que compreende metade da altura do reator até a sua saída. A região de saída do reator começa a experimentar alguma variação de temperatura nesse instante, conforme se pode observar na Figura 4.5 - b.

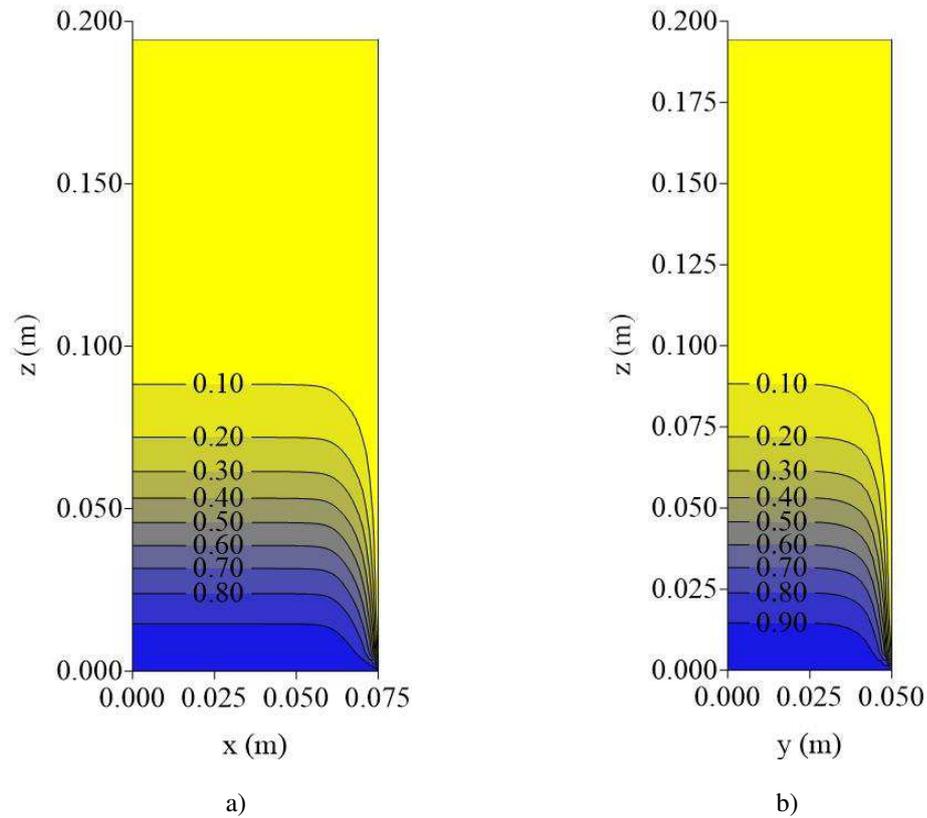


Figura 4.3 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.

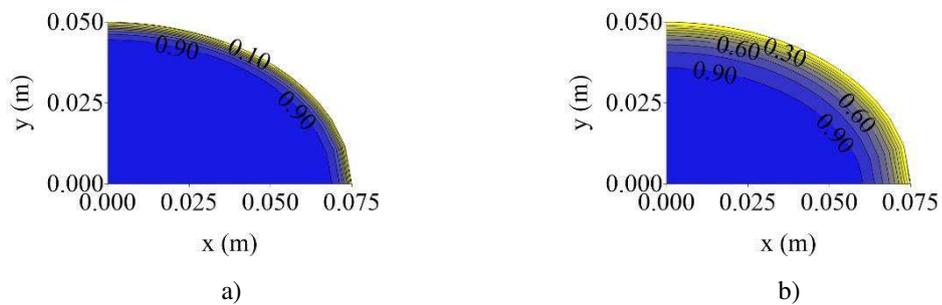


Figura 4.4 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.

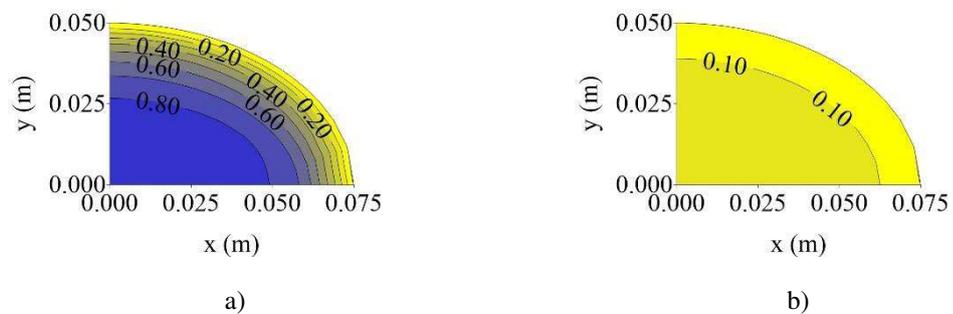


Figura 4.5 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.

No instante de tempo $t = 3$ s, observa-se, nas Figuras 4.7 - 4.9, que a região de maior variação dos gradientes radiais próxima à parede está plenamente presente em qualquer altura do reator, sendo sempre mais intensa na região de entrada. Isto é devido aos efeitos térmicos adversos característicos do escoamento fluido nessa região, na qual ocorre uma transição de escoamento proveniente de uma zona calma sem empacotamento com escoamento bem definido que, agora, encontra o início do empacotamento do leito, gerando uma aleatoriedade no escoamento devido a geração de canais preferenciais no fluxo de ar através nos interstícios do meio poroso, gerando um fluxo de ar mais elevado junto à parede.

Neste instante, a distribuição de temperatura até a metade da altura do reator praticamente já atingiu o regime permanente, fato observado comparando-se a Figura 4.9 com a Figura 4.12.

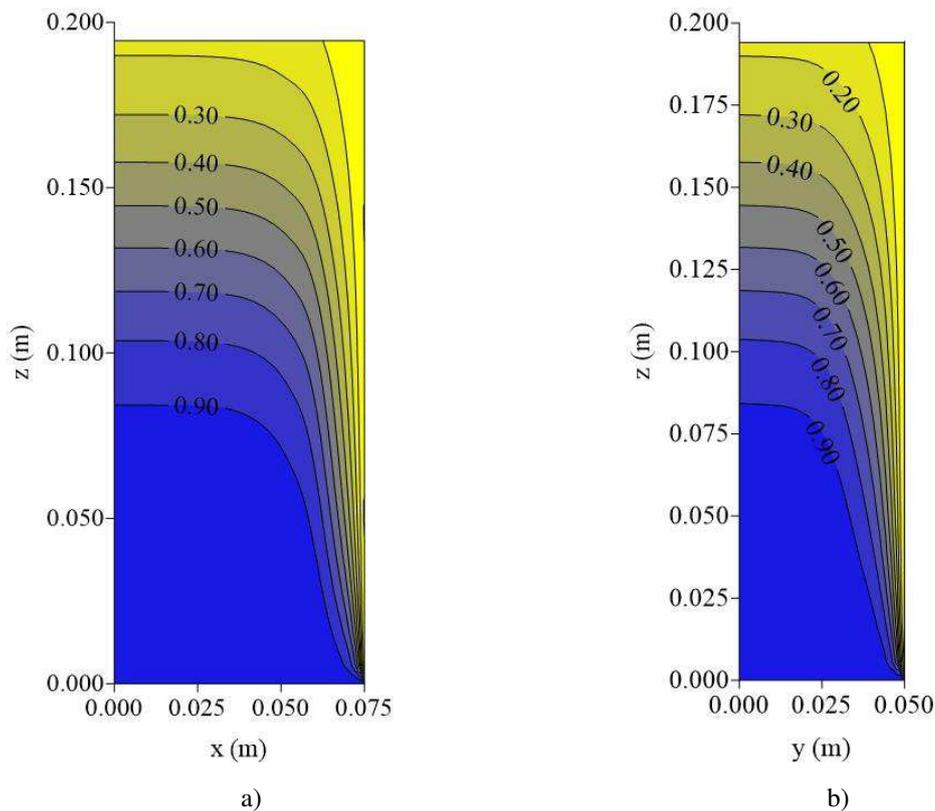


Figura 4.6 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.

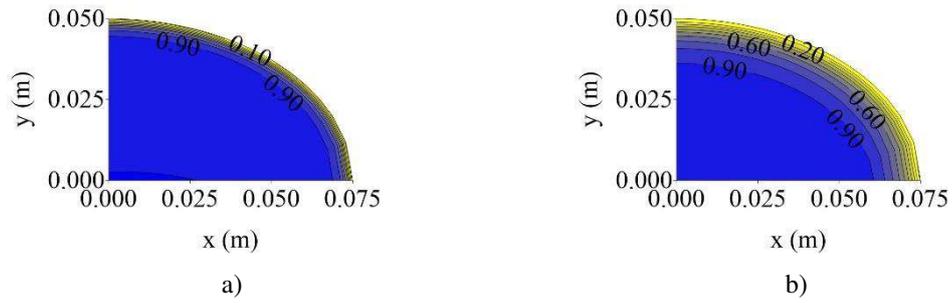


Figura 4.7 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s
($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.

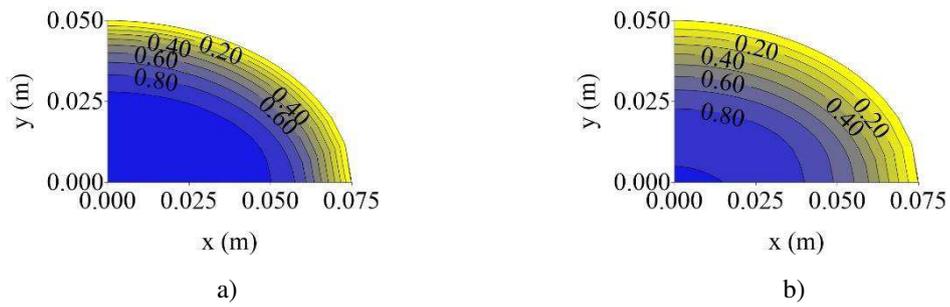


Figura 4.8 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s
($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.

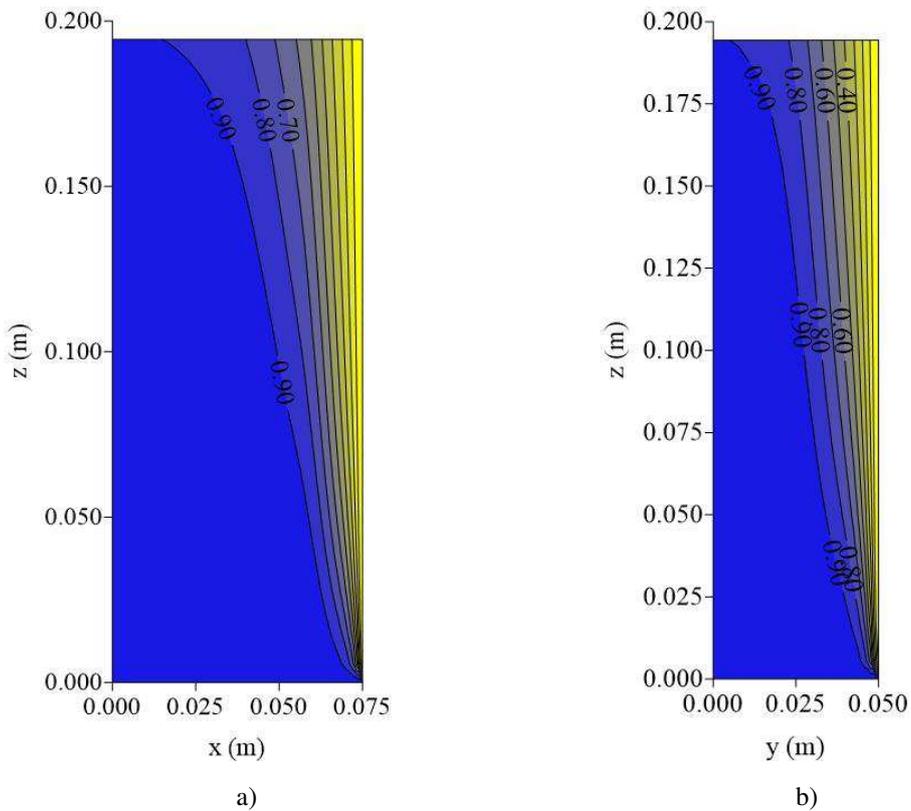


Figura 4.9 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s
($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.

No instante de tempo $t = 4.5$ s é quando a distribuição de temperatura do reator atinge o regime permanente. Confrontando-se as Figuras 4.9 e 4.12, observa-se o deslocamento das isolinhas de maior temperatura adimensional (0.8 e 0.9) para sua posição final. Os gradientes axiais de temperatura praticamente já não influenciam mais no processo de transferência de calor, o qual é governado por predominância de elevados gradientes radiais, principalmente próximos à parede do reator, desde à entrada de fluido até a saída, indicando, dessa forma que, ao atingir-se o regime permanente, há uma predominância de transferência de calor por difusão entre o fluido e as partículas na direção radial.

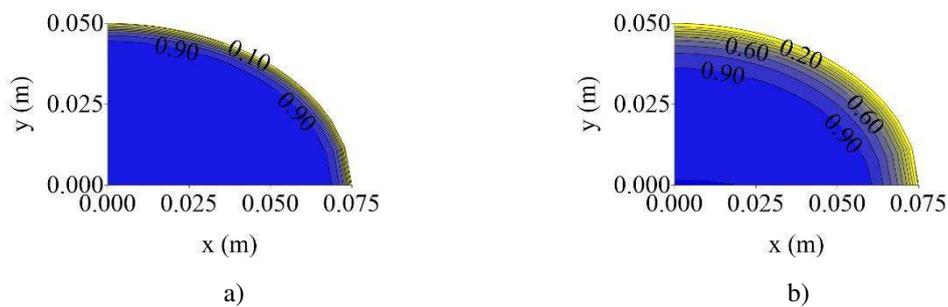


Figura 4.10 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.

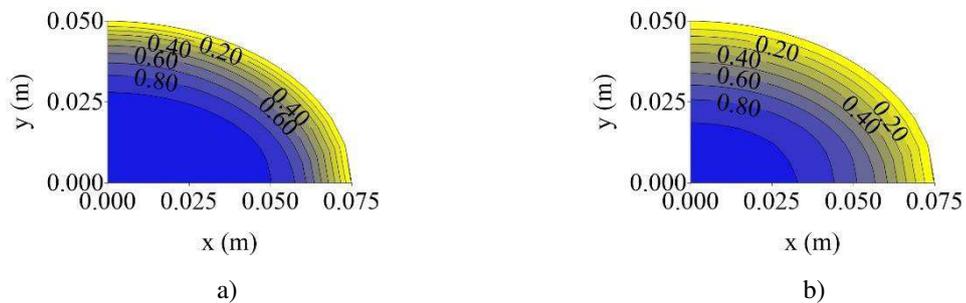


Figura 4.11 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.

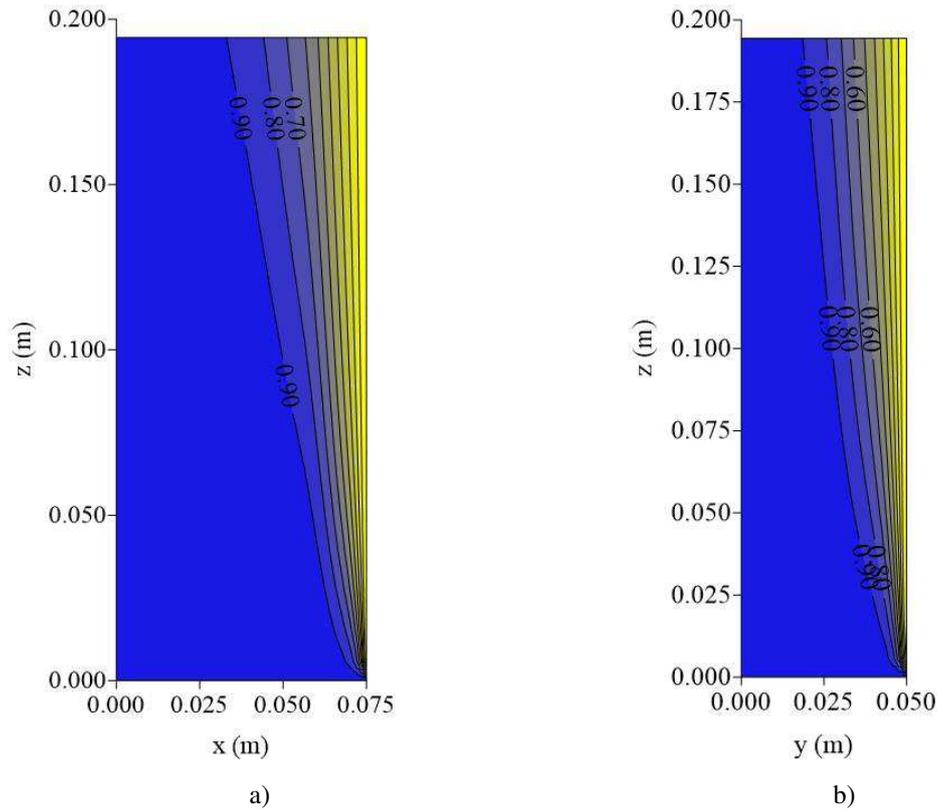


Figura 4.12 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 1.5$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.

Caso 2

Nas Figuras 4.13 - 4.18, estão representados os campos de temperatura para a razão de aspecto $L_2/L_1 = 2$ (caso 2). Optou-se por expor as distribuições seccionais de temperatura apenas nos instantes de tempo $t = 0.5$ e 4.5 s.

Nas Figuras 4.13 a 4.15 estão o campo de temperatura para o tempo $t = 0.5$ s.

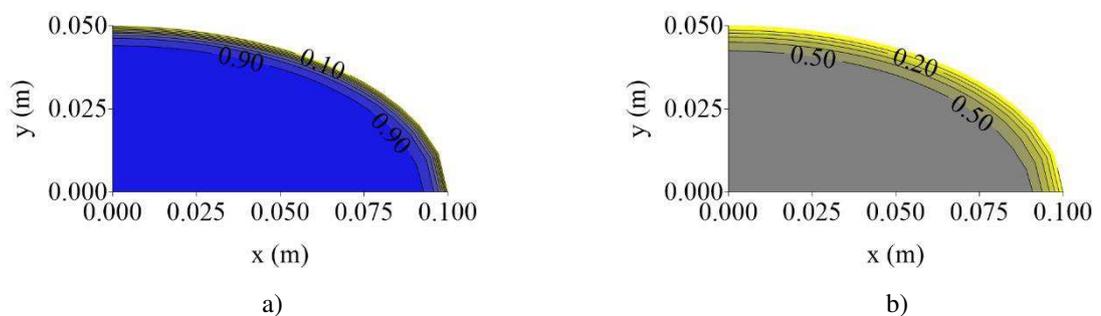


Figura 4.13 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.

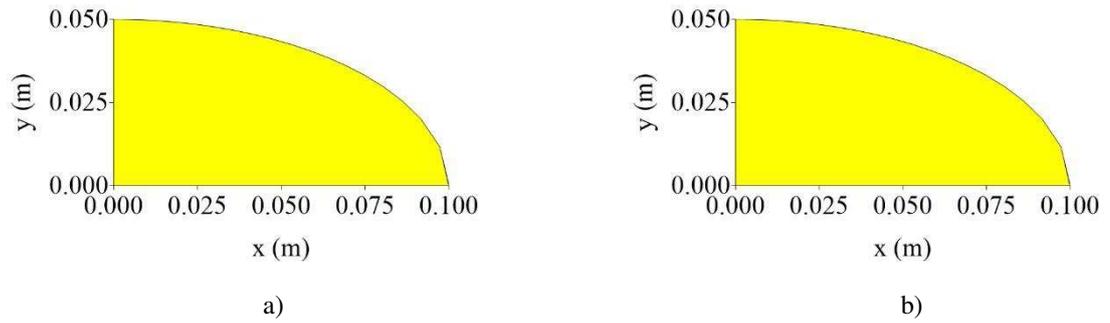


Figura 4.14 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m

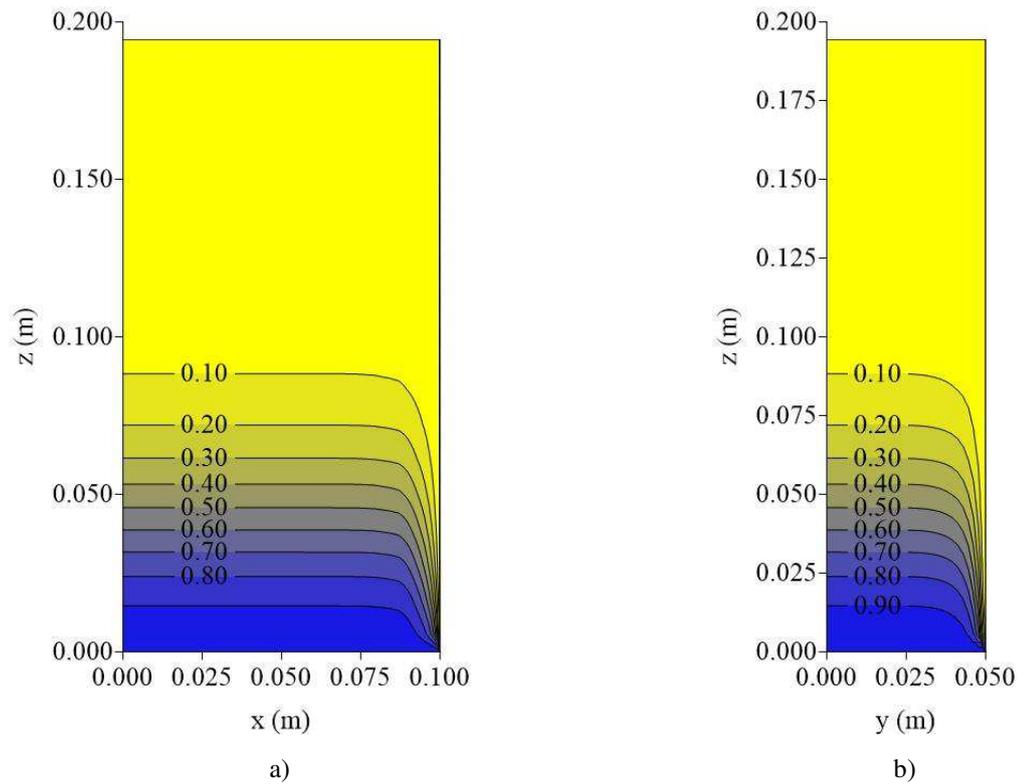


Figura 4.15 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

Nas Figuras 4.16 - 4.18 estão os perfis de temperatura para o instante de tempo $t = 4.5$

s.

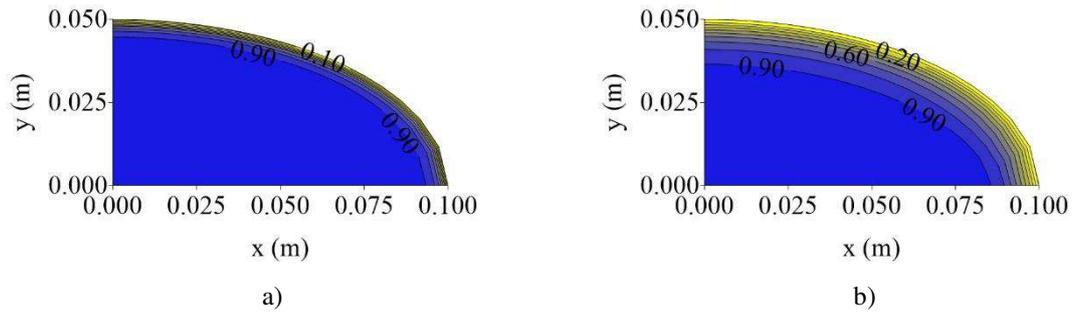


Figura 4.16 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 2$) a) $z = 0.00556$ m, b) $z = 0.03889$ m.

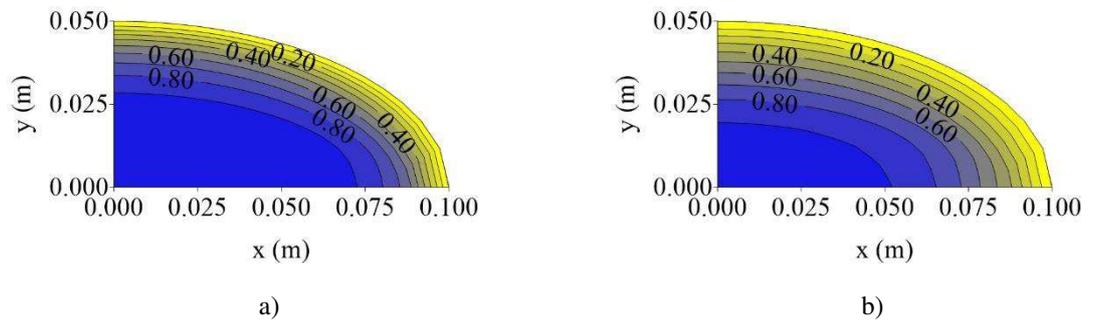


Figura 4.17 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $z = 0.0944$ m, b) $z = 0.1944$ m.

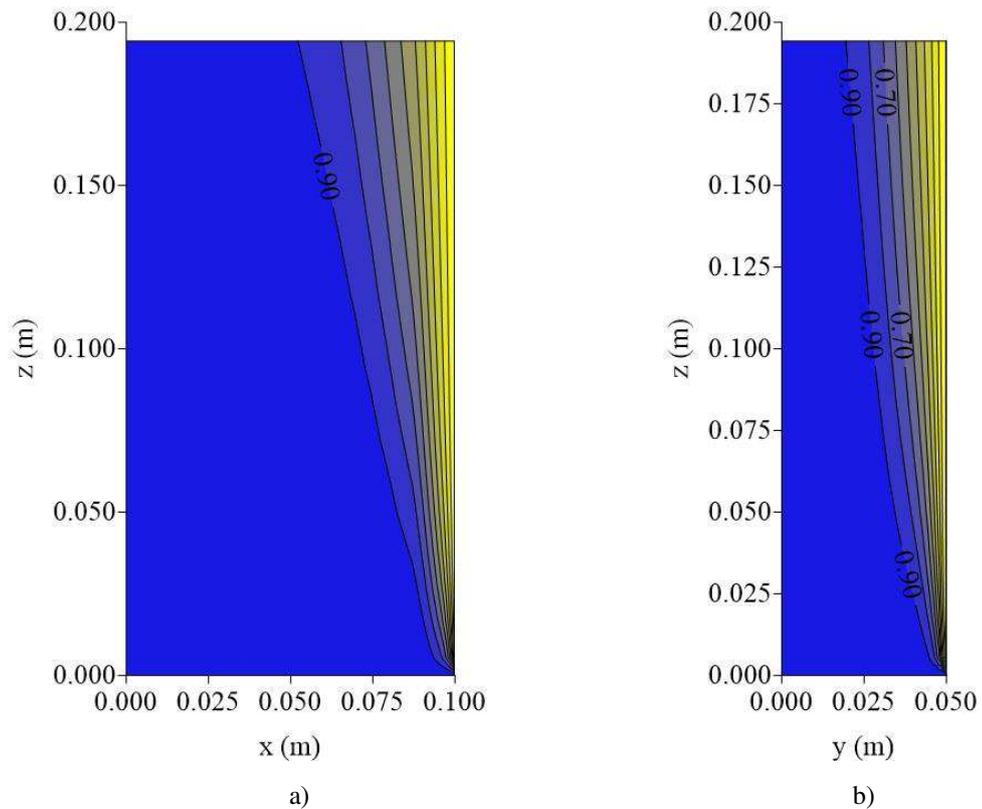


Figura 4.18 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($L_2/L_1 = 2$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

Caso 3

Nas Figuras 4.19 – 4.23 e 4.24 – 4.28 estão representados os campos de temperatura nos instantes de tempo $t = 0.5$ s e $t = 4.5$ s, respectivamente, para $L_2/L_1 = 3$.

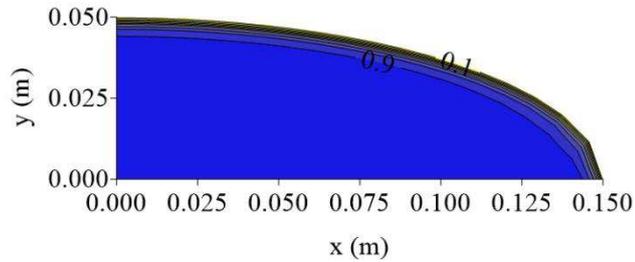


Figura 4.19 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.00556$ m.

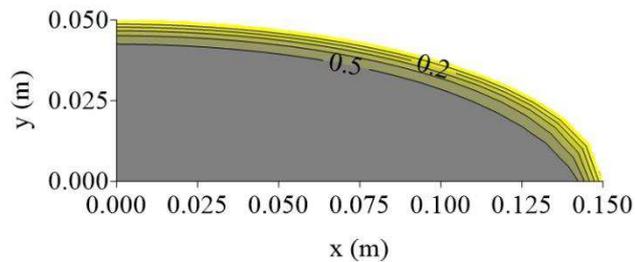


Figura 4.20 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.03889$ m.

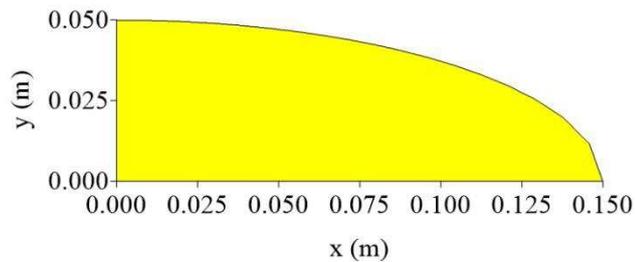


Figura 4.21 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.0944$ m.

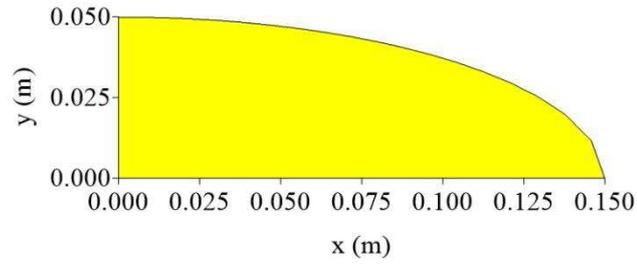


Figura 4.22 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s
($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.01944$ m.

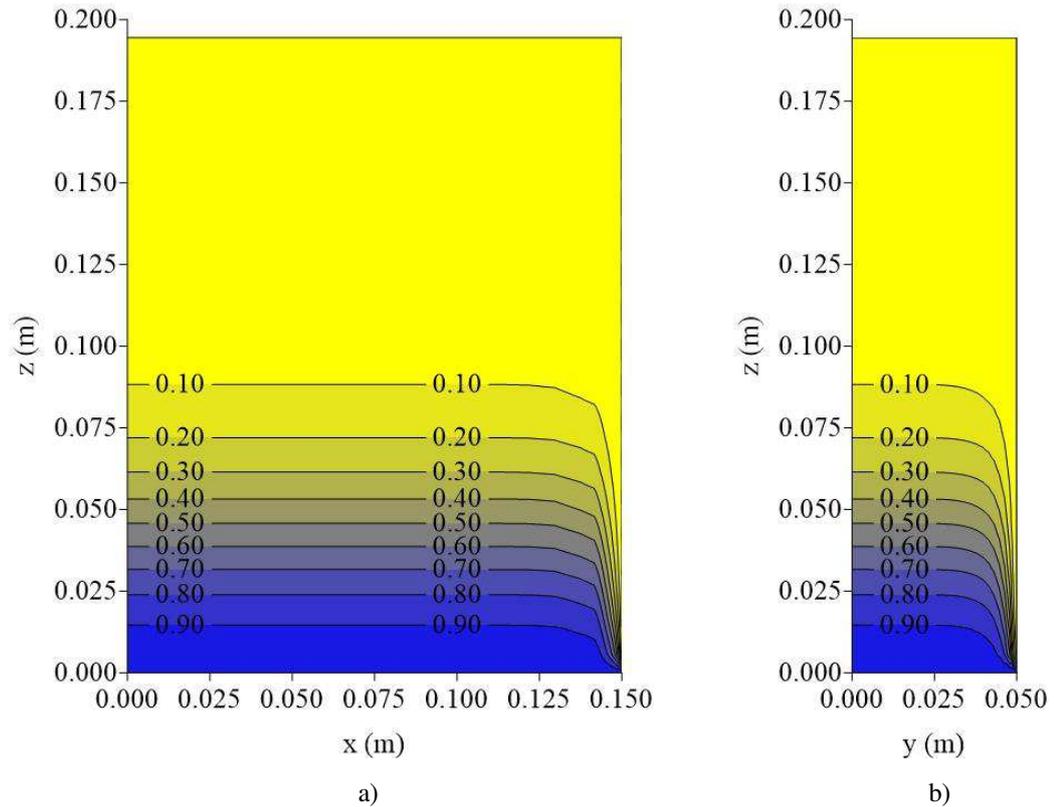


Figura 4.23 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s
($L_2/L_1 = 3$): a) $y = 0$ m, b) $x = 0$ m.

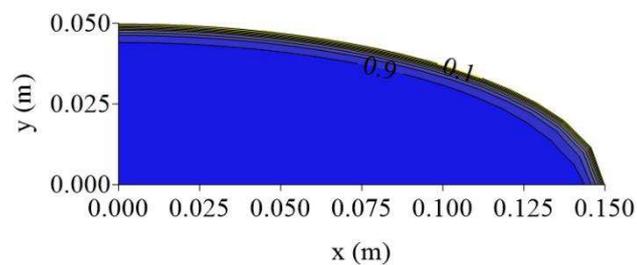


Figura 4.24 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s
($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.00556$ m.

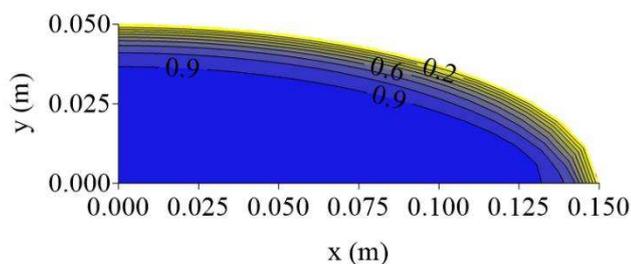


Figura 4.25- Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s
($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.03889$ m.

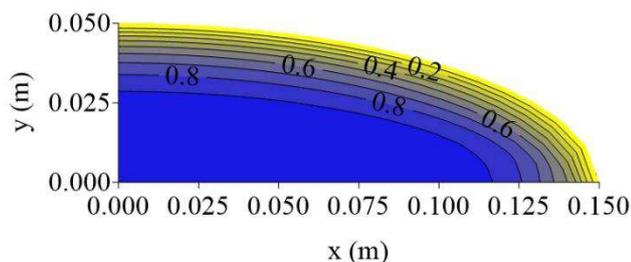


Figura 4.26 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s
($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.0944$ m.

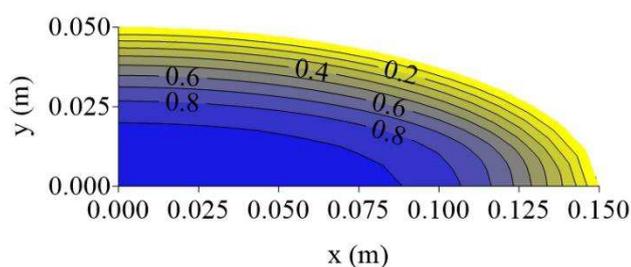


Figura 4.27 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s
($L_2/L_1 = 3$), $z = 0.1944$ m.

Um fato bastante interessante é que para todas as relações de aspecto geométrica ($L_2/L_1 = 1.5, 2$ e 3), o tempo para se atingir o regime permanente é o mesmo, $t = 4.5$ s, e os resultados de campo de temperatura a cada instante de tempo apresentados aqui, mostrou que eles são praticamente imutáveis com a variação dessa relação de aspecto, num sentido em que a distância das isolinhas de temperatura em relação à parede do reator é praticamente a mesma para os três casos, em qualquer tempo de operação do reator, o que pode ser claramente percebido nas Figuras. 4.29 e 4.30 (as linhas de temperatura se sobrepõem nos três casos).

Isto evidencia que a variação deste parâmetro geométrico, dentro da faixa de valores analisada, praticamente não produz mudanças significativas na operação do reator, embora a área de transferência de calor seja aumentada e, de fato, a transferência de calor aumenta com

esse aumento de área, refletido pelas elevações do coeficiente de transferência de calor do lado interno da parede (h_f): $h_f = 66.23 \text{ W/m}^2\text{K}$ para $L_2/L_1 = 1.5$; $h_f = 67.68 \text{ W/m}^2\text{K}$ para $L_2/L_1 = 2.0$ e $h_f = 68.72 \text{ W/m}^2\text{K}$ para $L_2/L_1 = 3.0$, coeficiente este baseado no número de Reynolds de partícula que também é função do diâmetro hidráulico.

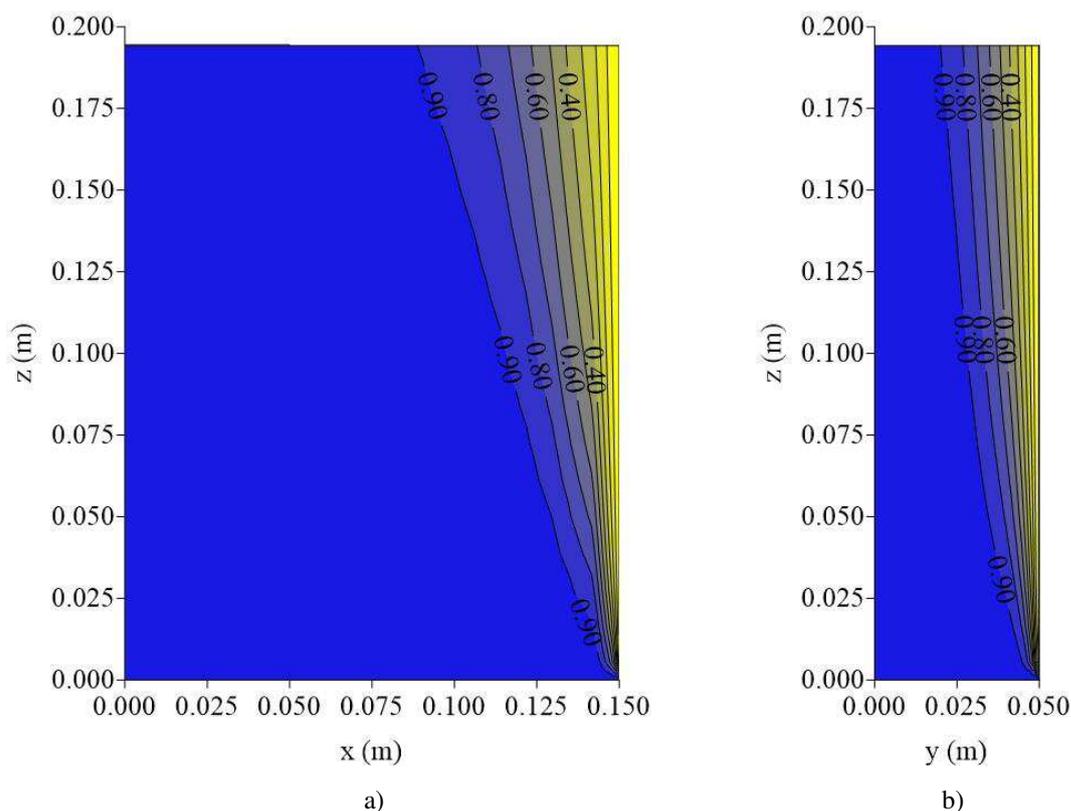


Figura 4.28 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5 \text{ s}$ ($L_2/L_1 = 3$): a) $y = 0 \text{ m}$, b) $x = 0 \text{ m}$.

A porosidade média do leito, ε_{med} , foi estudada para as razões de aspecto $L_2/L_1 = 1.5$, 2.0 e 3.0 e, em cada situação analisada, o valor deste parâmetro foi de 0.466, 0.453 e 0.450, respectivamente (calculado pela média sobre a Equação 3.151). É então perceptível que este parâmetro, com o modelo de porosidade variável proposto, diminui com o aumento da área de seção transversal do reator. Porém, não foram mudanças tão intensas de modo que afetassem de forma significativa o campo de temperatura. A redução no valor da porosidade com o aumento da seção transversal se deve ao fato de que há uma zona maior de valor assintótico para a porosidade quando a seção transversal é maior. Isso é observado na Figura 4.75 (pag. 128) em que constam os perfis de porosidade variável numa seção transversal em qualquer altura do reator para as três razões de aspecto.

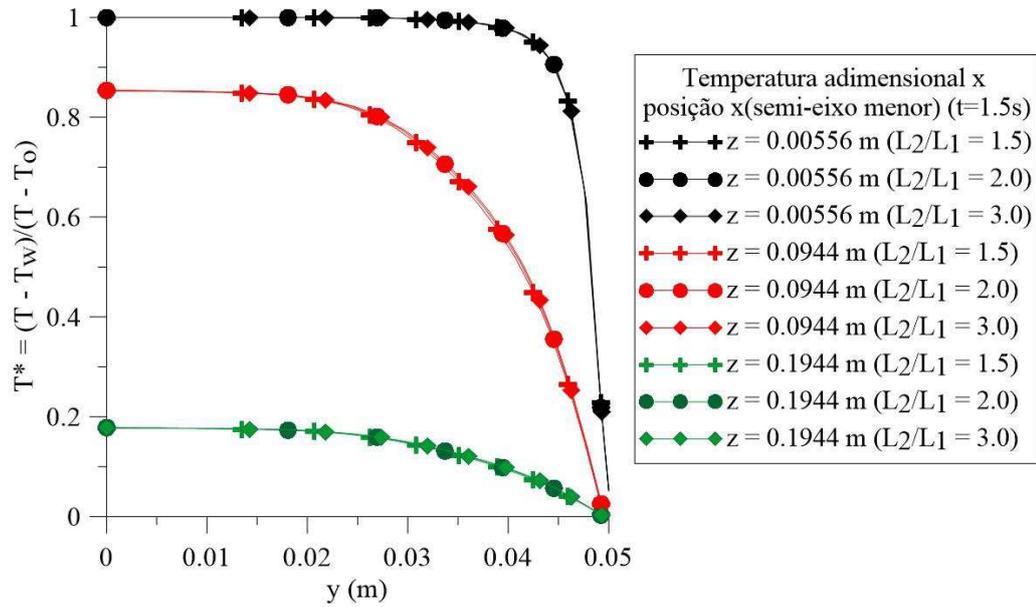


Figura 4.29 – Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da razão de aspecto L_2/L_1 ($t = 1.5$ s).

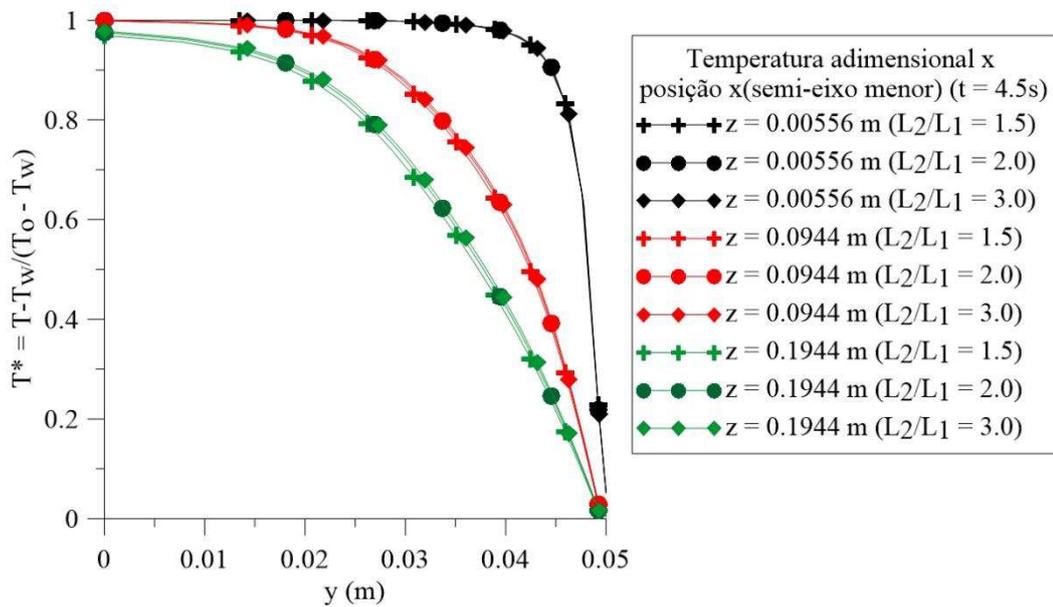


Figura 4.30 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da razão de aspecto L_2/L_1 ($t = 1.5$ s)

Observa - se em todas as distribuições de temperatura em seções transversais que o ponto sobre a superfície do reator com maior taxa de transferência de calor localiza-se em $(0, L_1)$, por ser o ponto onde se registra o maior gradiente de temperatura, e o com menor taxa de transferência de calor está em $(L_2, 0)$, ainda que com uma diferença bem pequena entre ambos. Esta ocorrência sobre o ponto $(L_2, 0)$ é um fato esperado, pois Bergman et al. (2014) afirmam

que regiões de cantos vivos apresentam menor coeficiente de transferência de calor convectiva numa região anular, o que implica numa redução da taxa de transferência de calor na região, por consequência.

Este efeito de canto vivo na adjacência do ponto $(L_2, 0)$, nos trabalhos de Oliveira (2004) e Silva Filho (2013), por sua vez, teve observação contrária à deste trabalho, sendo o ponto com maior aquecimento. Um detalhe importante que reflete mais uma ocorrência diferenciada quando se agrega informações físicas mais realistas ao modelo matemático.

Com relação ao caso 2, no qual $L_2/L_1 = 2.0$, verificou-se um comportamento bem semelhante a um caso simulado por Oliveira (2004) conforme comentado no início dessa seção acerca das semelhanças operacionais entre os casos. O perfil de temperatura em regime permanente obtido pelo citado autor foi bem semelhante ao obtido para o caso 2, uma vez que são poucas as variáveis que diferem em ambos os casos, tendo a maioria delas os mesmos valores.

4.3.2 Influência da velocidade na entrada do reator

O modelo pseudo-homogêneo utilizado nesta pesquisa limita-se ao escoamento laminar do fluido percolante. Com base em cálculos com o número de Reynolds baseado no diâmetro hidráulico ($Re_h = \frac{\rho u_z D_h}{\mu}$), quando este escoamento está na iminência de entrar em contato como meio poroso, a velocidade da corrente aquecida de ar só pode atingir, no máximo, em torno de 0.38 m/s para fins de validade deste modelo. O diâmetro hidráulico para a seção transversal elíptica é dado por:

$$D_h = \frac{4A_{tr}}{P} \quad (4.1)$$

onde A_{tr} é a área de seção transversal elíptica que é calculada por $A_{tr} = \pi L_1 L_2$ e P é o perímetro molhado que foi calculado resolvendo-se, com o auxílio de aproximação por série de Taylor, a seguinte integral, cuja metodologia de obtenção está disponível em livros de cálculo diferencial e integral (Stewart, 2009; Hoffmann, 2010).

$$P=2 \int_{-L_2}^{L_2} \sqrt{1 + \left\{ \frac{d}{dx} \left[L_1 \sqrt{1 - \frac{x^2}{L_2^2}} \right] \right\}^2} dx \quad (4.2)$$

Na seção anterior, todos os casos foram simulados com uma velocidade do fluido na entrada de $u_z = 0.1$ m/s. Nesta seção serão discutidos os efeitos da variação da velocidade do escoamento sobre o processo de transferência de calor no reator. Foram escolhidas, para tal, as velocidades $u_z = 0.2$ m/s (caso 4) e $u_z = 0.35$ m/s (caso 5), para a razão de aspecto $L_2/L_1 = 1.5$, sendo esta razão de aspecto utilizada, doravante, em todos os demais casos, a fim de se estabelecer comparação tomando-se como referência o caso 1 no qual se adotou primeiramente o valor $L_2/L_1 = 1.5$

Caso 4

Para a uma velocidade $u_z = 0.2$ m/s (caso 4), representados os campos de temperatura, que estão ilustradas nas Figuras 4.31 a 4.39, para os tempos de processo de 0.5, 1.5 e 3.0 s.

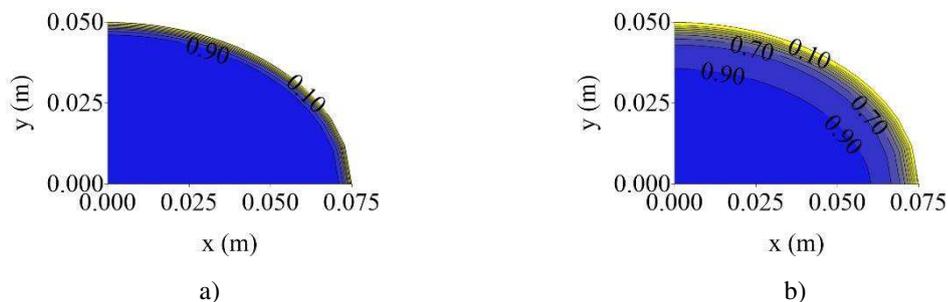


Figura 4.31 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.

Percebe-se, da observação das Figuras 4.31 - 4.33 que, confrontado com a velocidade $u_z = 0.1$ m/s, neste instante de 0.5 s (Figuras 4.1 - 4.3), os gradientes radiais de temperatura próximos à parede são mais elevados afetando rapidamente uma região que vai da entrada até a metade da altura do reator. Os elevados gradientes axiais de temperatura se estendem para um pouco mais além da altura $z = 0.9$ m, onde era a altura limite de atuação deles para a velocidade $u_z = 0.1$ m/s (caso 1). As Figuras 4.46 - 4.49, que ilustram os perfis de temperatura em 3 (três) posições axiais estratégicas, ajudam na observação dessas ocorrências dando mais detalhes comparativos da influência da velocidade do fluxo de ar na entrada do reator.

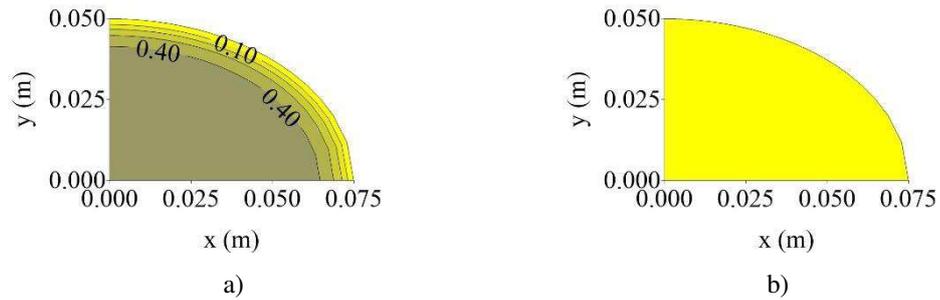


Figura 4.32 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

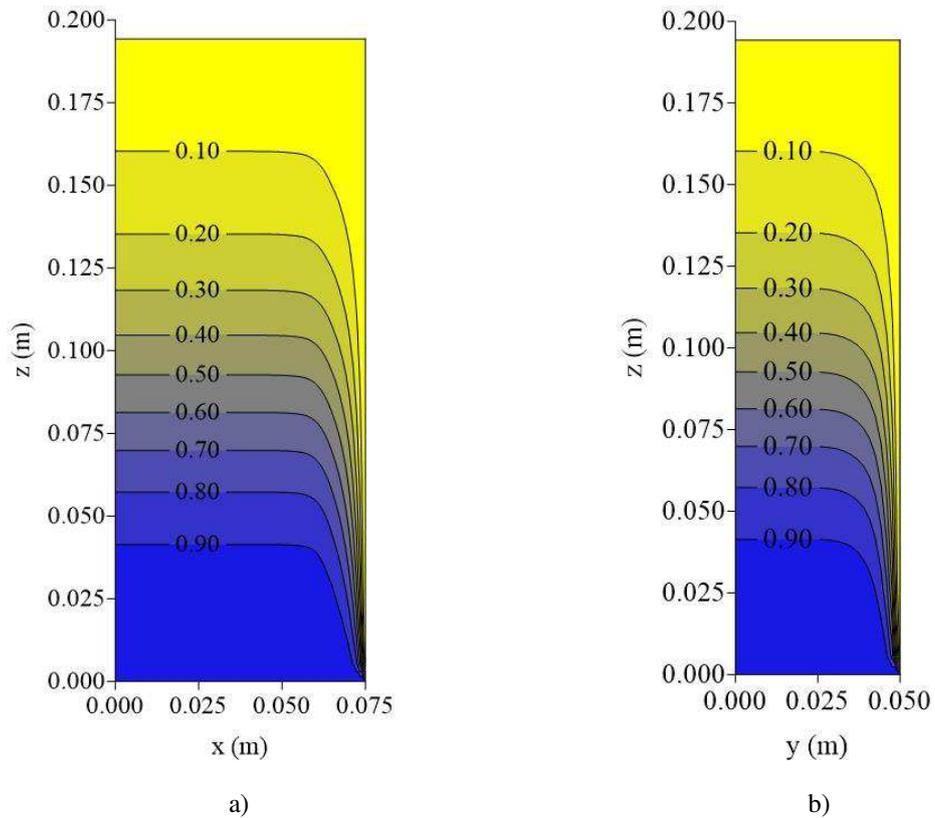


Figura 4.33 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

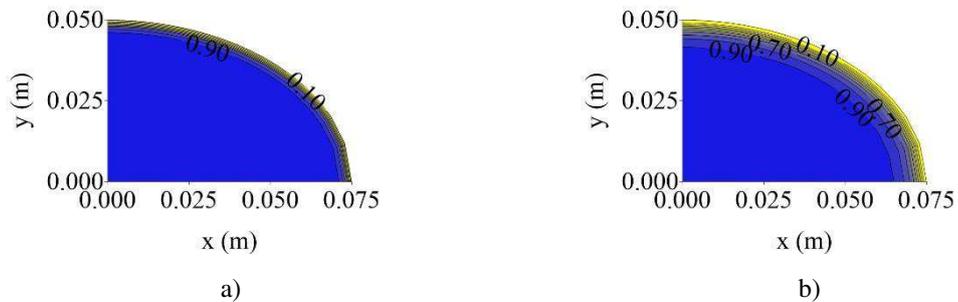


Figura 4.34 - Distribuição de temperatura adimensional interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.00556$ m; b) $x = z = 0.03889$ m.

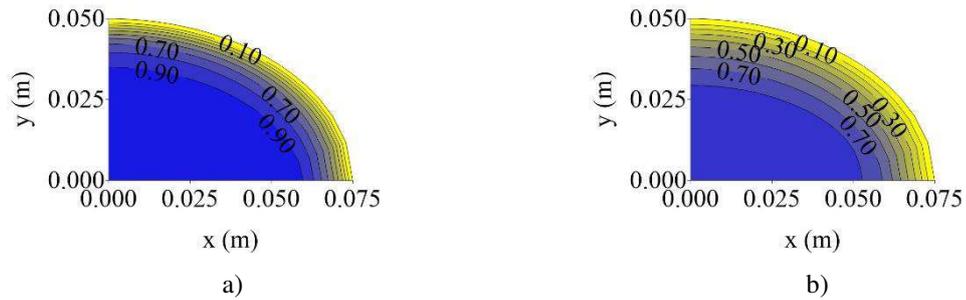


Figura 4.35 - Distribuição de temperatura adimensional interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $x = z = 0.1944$ m.

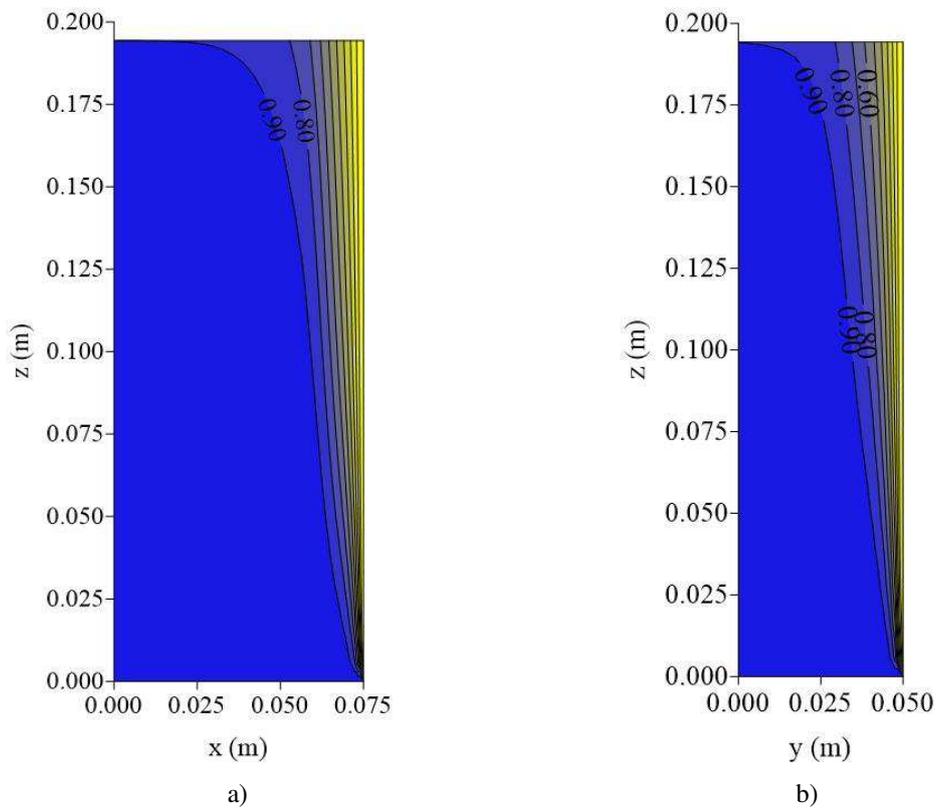


Figura 4.36 - Distribuição de temperatura adimensional interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.



Figura 4.37 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.00556$ m; b) $x = z = 0.03889$ m.

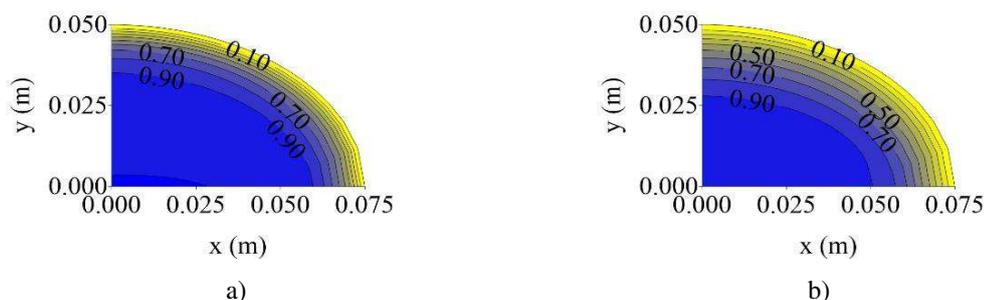


Figura 4.38 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

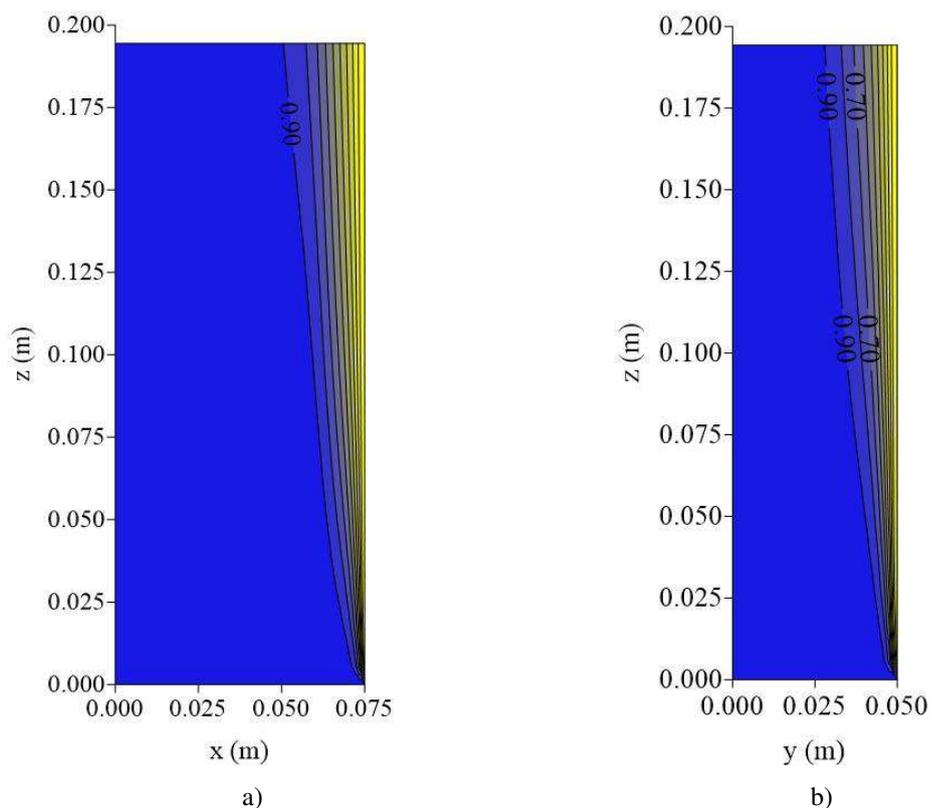


Figura 4.39 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 3$ s ($u_z = 0.2$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

Das Figuras 4.37 – 4.39, percebe-se que, para a velocidade $u_z = 0.2$ m/s, o tempo para se estabelecer o regime permanente é em torno de 3 s. Os gradientes radiais de temperatura para um fluxo de ar nessa velocidade são bem maiores que para $u_z = 0.1$ m/s, próximo à parede do reator, e as isolinhas de maior temperatura também estão mais próximas da parede. Como consequência dessas condições de operação tem-se uma maior zona aquecida no interior do reator ao se atingir o regime permanente e, também, uma maior taxa de transferência de calor na direção radial em comparação com as condições para $u_z = 0.1$ m/s.

Caso 5

Nas Figuras 4.40 - 4.42 e 4.43 - 4.45, são apresentados os perfis de temperatura para a velocidade $u_z = 0.35$ m/s, nos tempos de 0.5 e 1.5 s, respectivamente. Na velocidade $u_z = 0.35$ m/s observa-se, como esperado, uma zona de aquecimento maior e mais abrangente do que para as velocidades $u_z = 0.1$ m/s e $u_z = 2$ m/s. Também são maiores os gradientes radiais de temperatura próximos à parede, o que intensifica ainda mais a taxa de transferência de calor radial nessa região. O tempo para se alcançar o regime permanente é em torno de $t = 1.5$ s, sendo a velocidade de entrada determinante para uma maior rapidez nesse alcance. Assim, verifica-se a predominância do efeito convectivo na transferência de calor e, na medida em que a velocidade de fluxo do ar na entrada aumenta, esse efeito se intensifica.

Nas Figuras 4.46 - 4.49 são representados os perfis de temperatura, o que permite realizar uma síntese comparativa da influência do fluxo de ar na entrada do reator. Nelas observa-se a variação da temperatura adimensional com a posição sobre o eixo-y, nos instantes de tempo $t = 0.5, 1.5, 3.0$ e 4.5 s, em 3 diferentes posições axiais. Nessas figuras nota-se claramente a influência da velocidade na entrada do reator sobre a distribuição de temperatura na posição e no tempo.

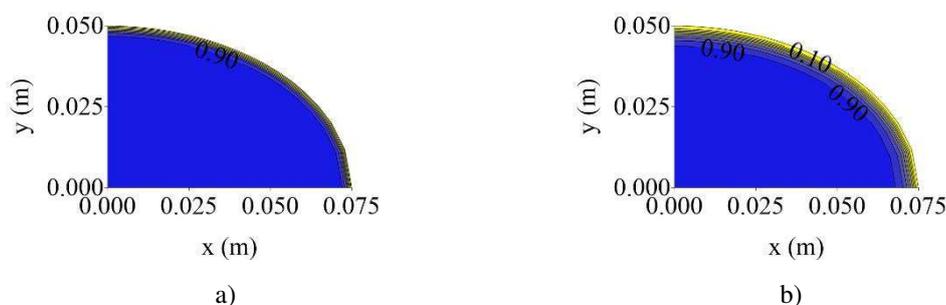


Figura 4.40 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($u_z = 0.35$ m/s): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.

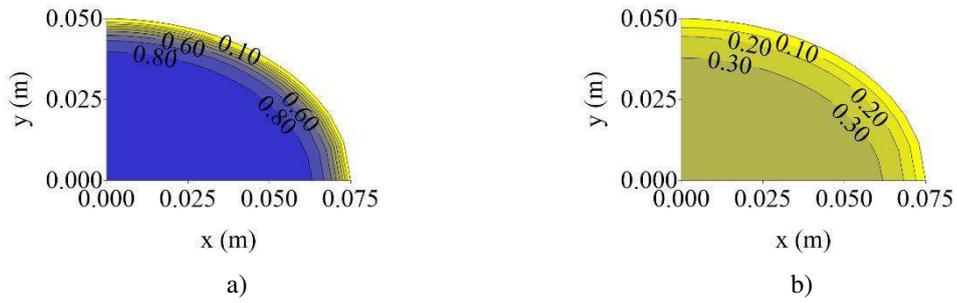


Figura 4.41 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s
($u_z = 0.35$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

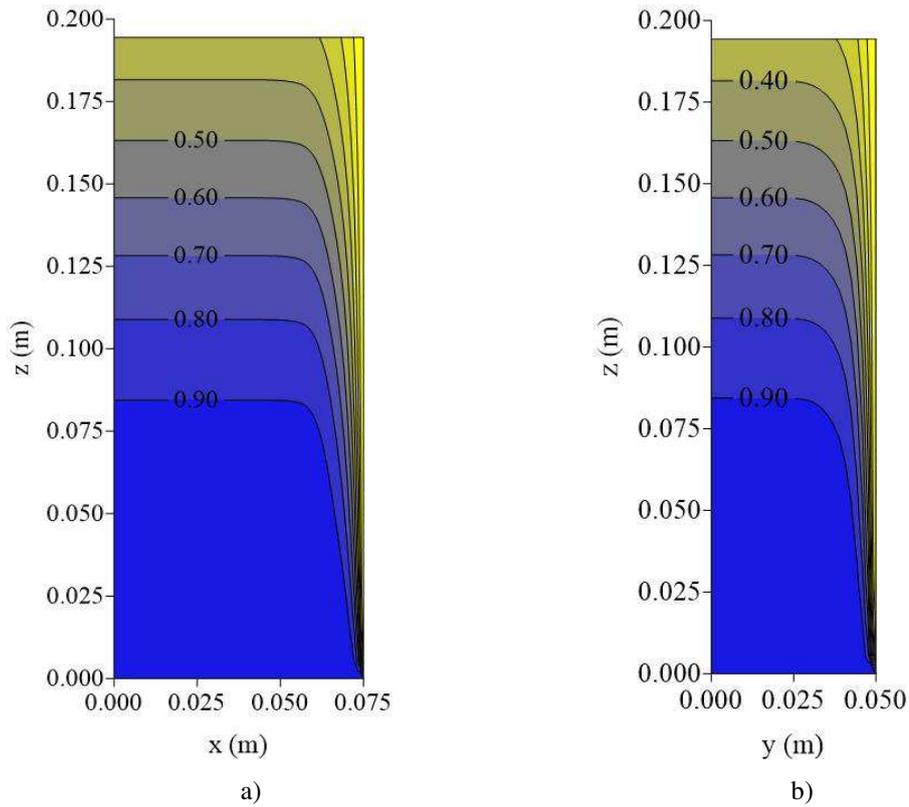


Figura 4.42 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s
($u_z = 0.35$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

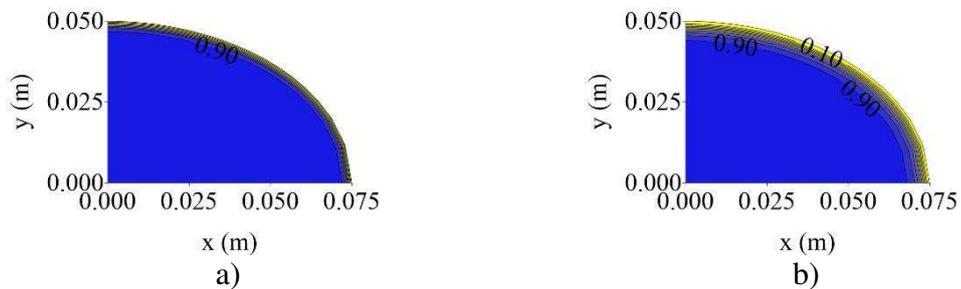


Figura 4.43 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s
($u_z = 0.35$ m/s): a) $z = 0.0556$ m; b) $z = 0.03889$ m.

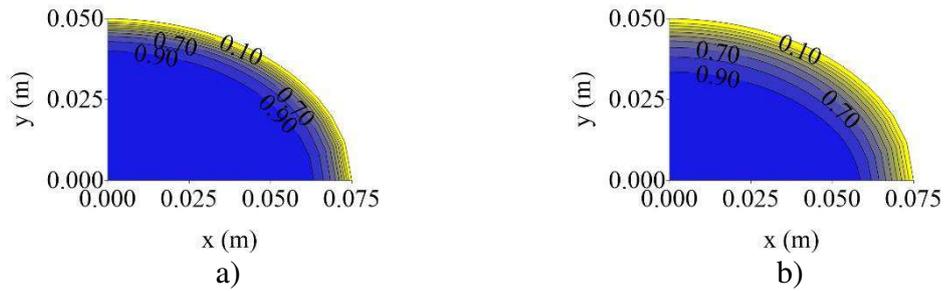


Figura 4.44 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s
($u_z = 0.35$ m/s): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

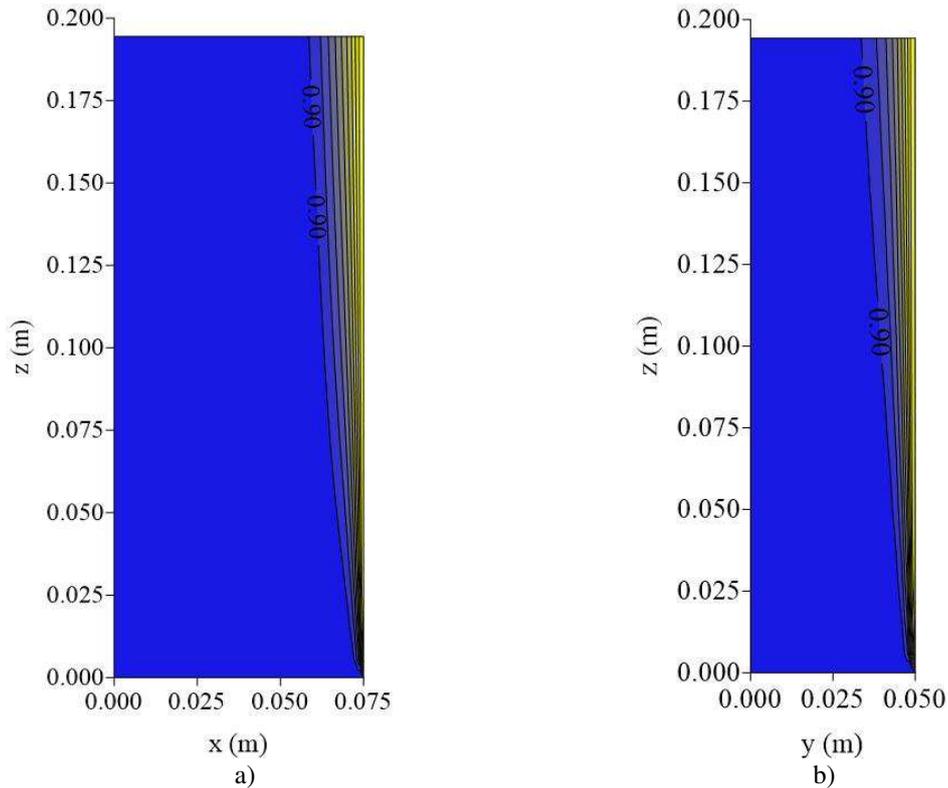


Figura 4.45 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 1.5$ s
($u_z = 0.35$ m/s): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

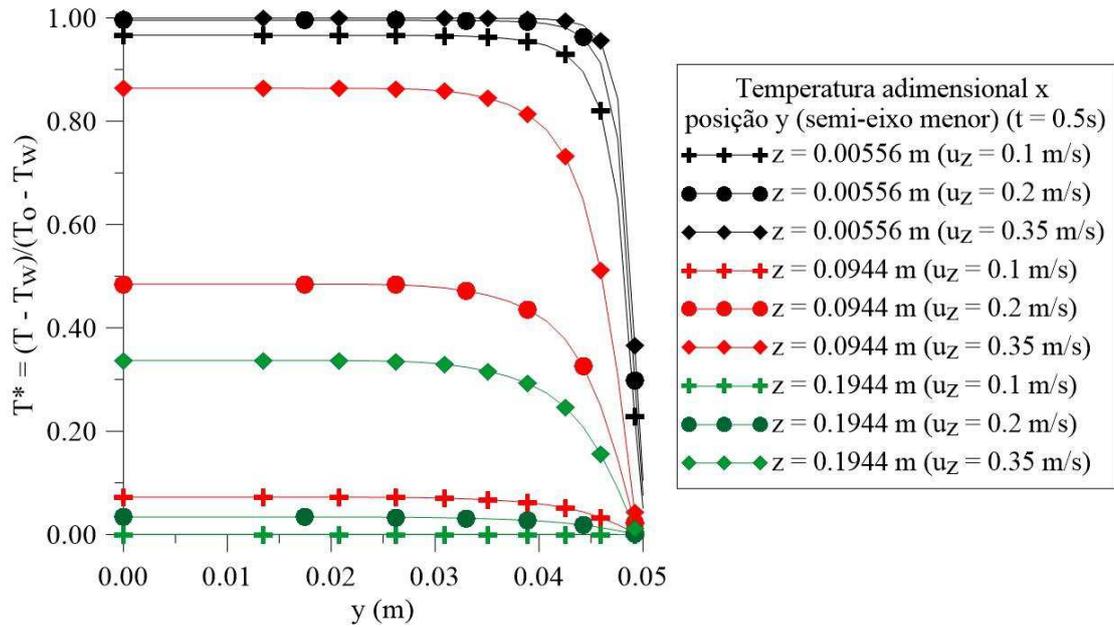


Figura 4.46 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da velocidade do fluxo de ar na entrada ($t = 0.5$ s).

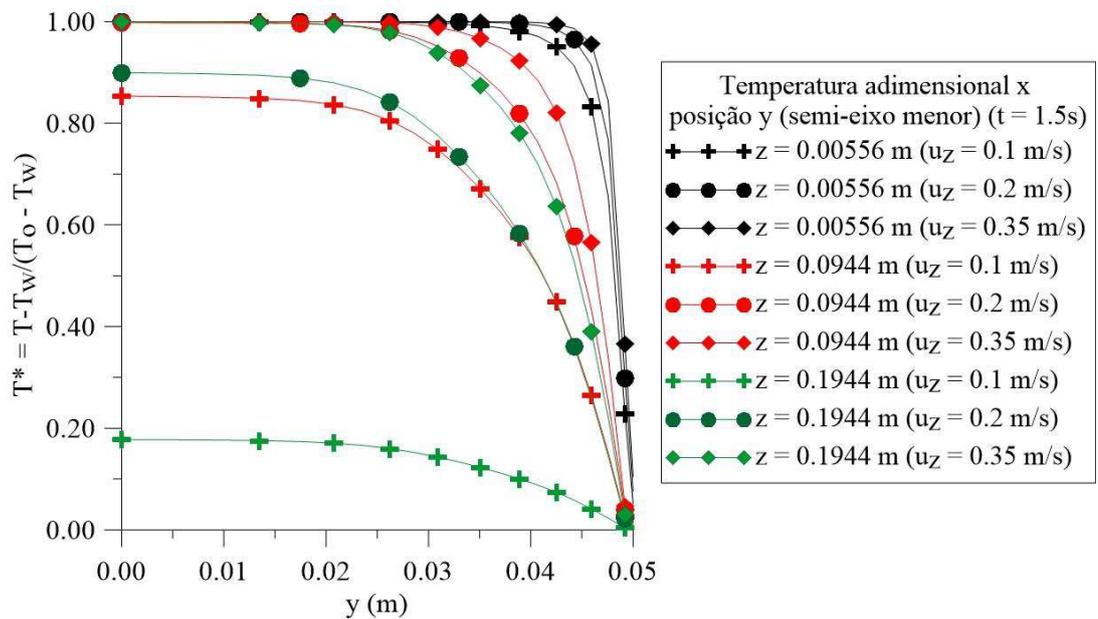


Figura 4.47 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da velocidade do fluxo de ar na entrada ($t = 1.5$ s).

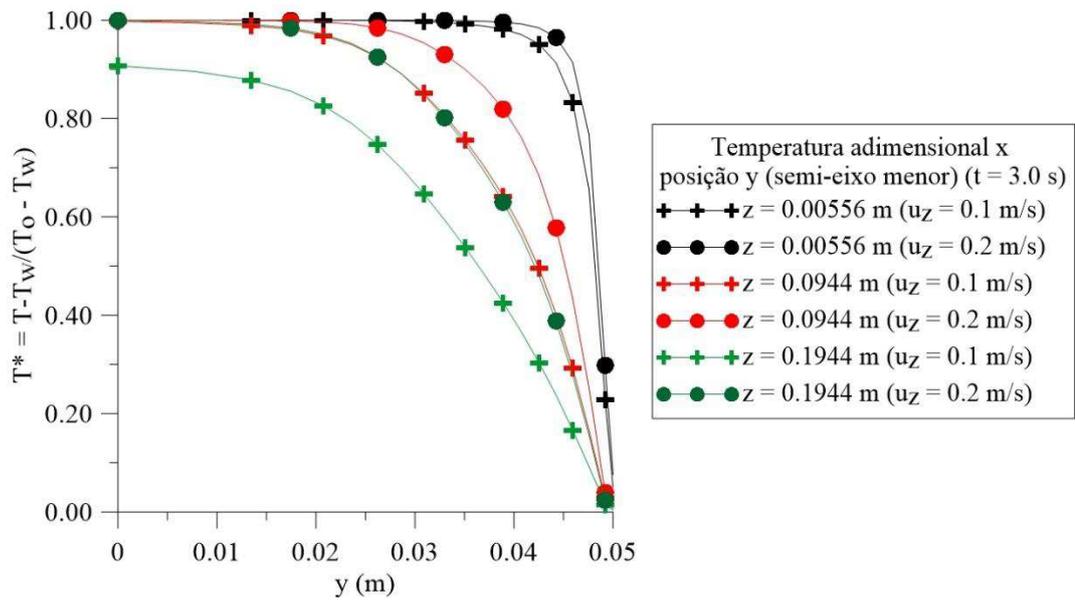


Figura 4.48 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da velocidade do fluxo de ar na entrada (u_z) (t = 3.0 s).

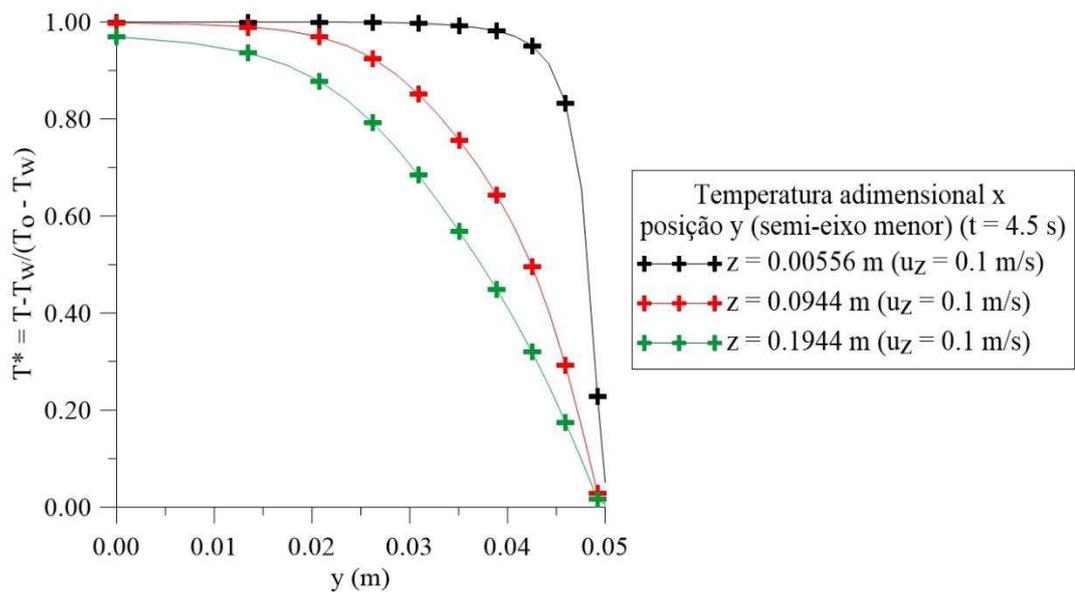


Figura 4.49 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da velocidade do fluxo de ar na entrada u_z (t = 4.5 s).

4.3.3 Influência da temperatura de entrada no reator

4.3.3.1 Perfil de temperatura constante na entrada

Esta seção tem por objetivo ilustrar a influência da variação de temperatura da corrente de ar aquecida $T(z = 0 \text{ m})$ na entrada do reator. Para tal, a operação foi simulada com 3 (três)

valores fixos para a temperatura: 40°C (caso 6) e 100°C (caso 7), 70°C (caso 1). Também foi analisada a distribuição de temperatura no interior do reator submetido a um perfil de temperatura curvilíneo na entrada (caso 8), de tal forma que a temperatura média na seção transversal de entrada teve um valor médio de 70°C. Assim, é possível comparar os resultados obtidos com o caso padrão (caso 1), no qual usou-se um perfil plano com esse mesmo valor de temperatura. Os perfis de temperatura serão apresentados nos instantes de tempo $t = 0.5$ e 4.5 s, para cada um dos casos.

Caso 6

Nas Figuras 4.50 a 4.55, estão representados os campos de temperatura para a temperatura de entrada $T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ \text{ C}$.

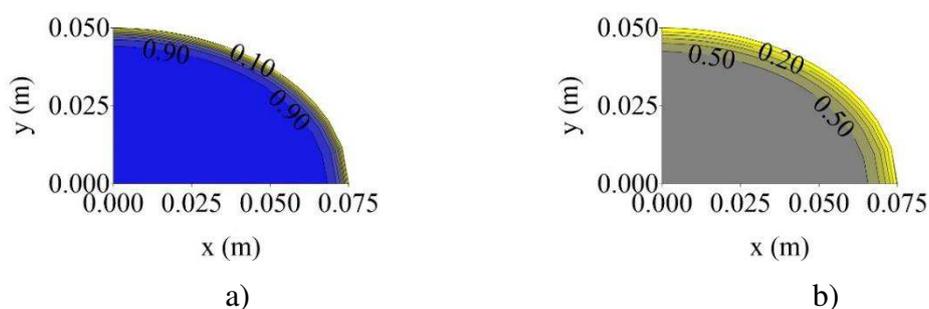


Figura 4.50 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ \text{ C}$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.

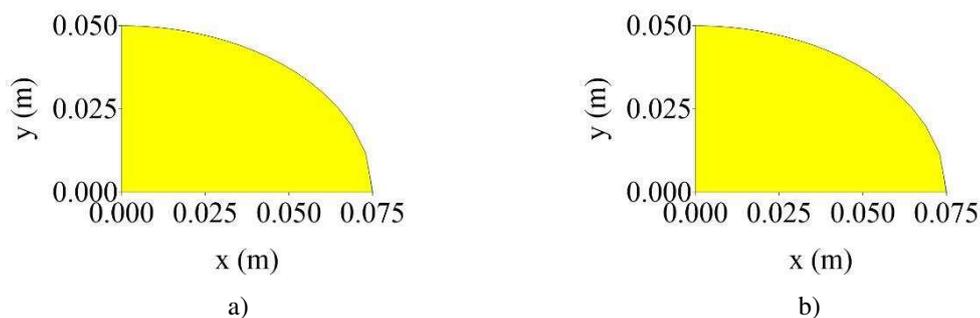


Figura 4.51 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ \text{ C}$): a) $z = 0.944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

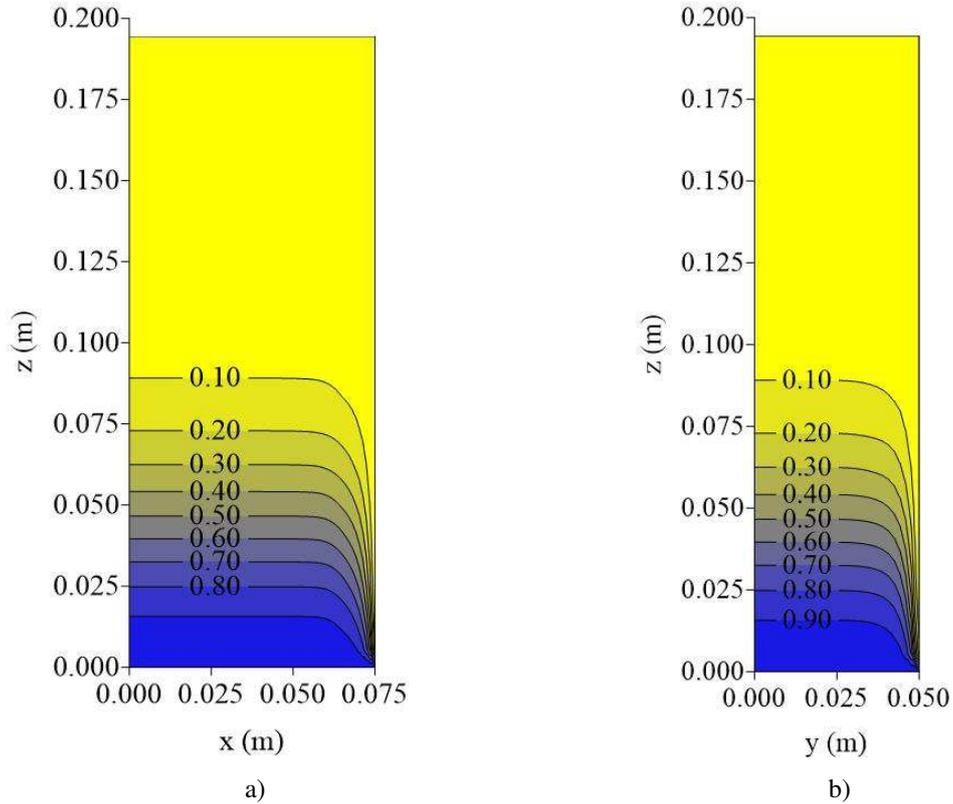


Figura 4.52 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s
($T(z = 0 \text{ m}) = 4 \text{ }^\circ\text{C}$): a) $y = 0 \text{ m}$; b) $x = 0 \text{ m}$.

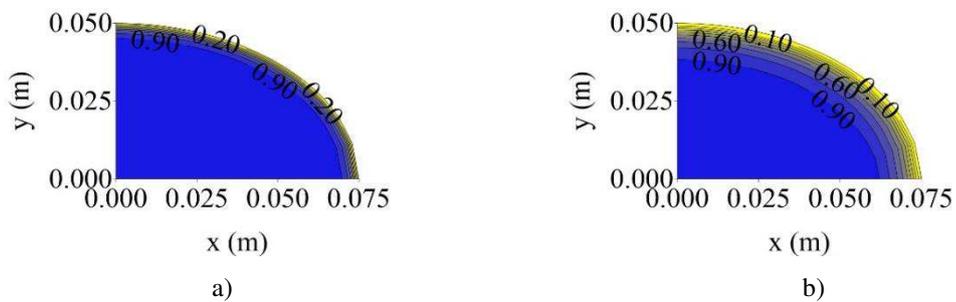


Figura 4.53- Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s
($T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ\text{C}$): a) $z = 0.00556 \text{ m}$; b) $z = 0.3889 \text{ m}$.

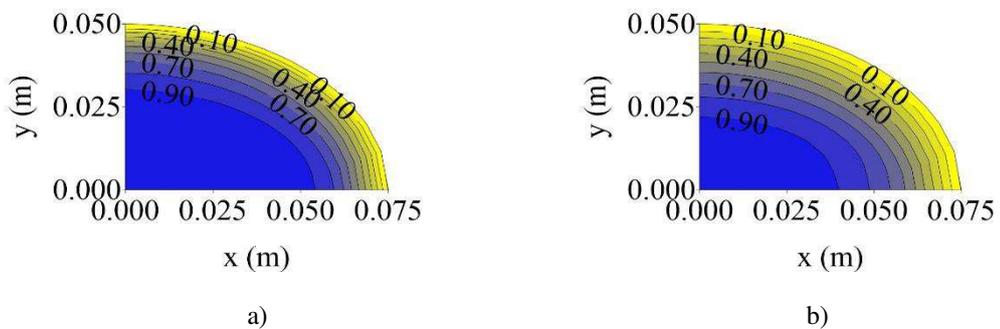


Figura 4.54 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s
($T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ\text{C}$): a) $z = 0.0944 \text{ m}$; b) $z = 0.1944 \text{ m}$.

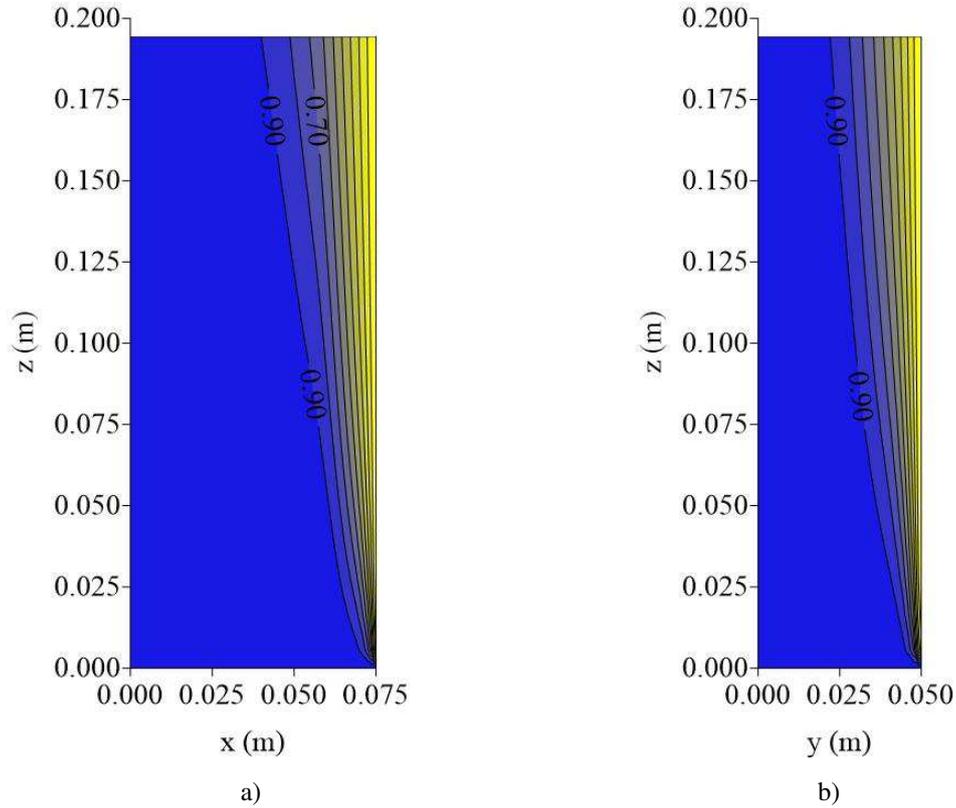


Figura 4.55 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ\text{C}$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

Caso 7

Nas Figuras 4.56 - 4.61, são apresentados os campos de temperatura do reator para o caso $T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$,

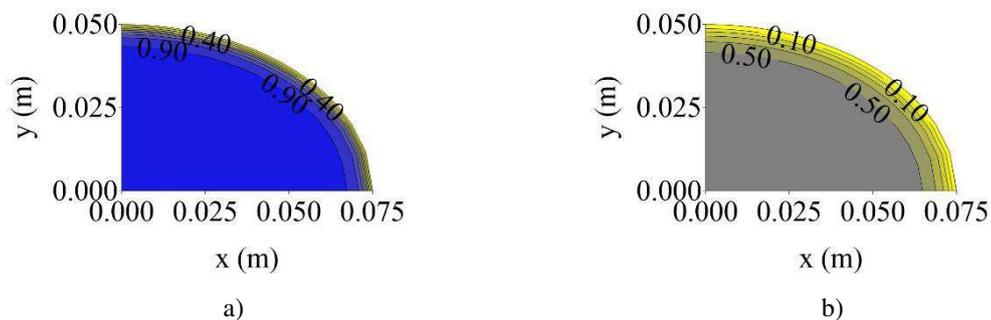


Figura 4.56 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.

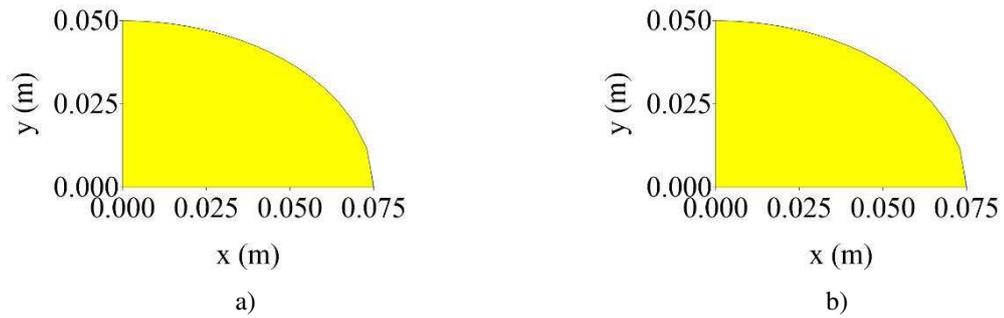


Figura 4.57 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

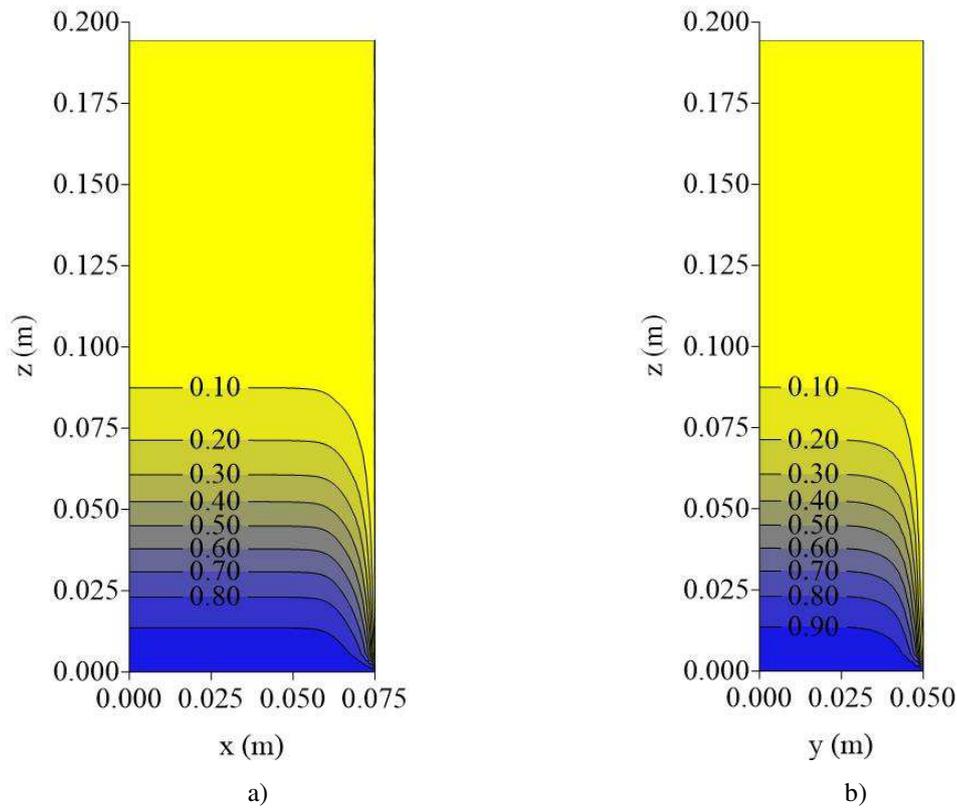


Figura 4.58 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

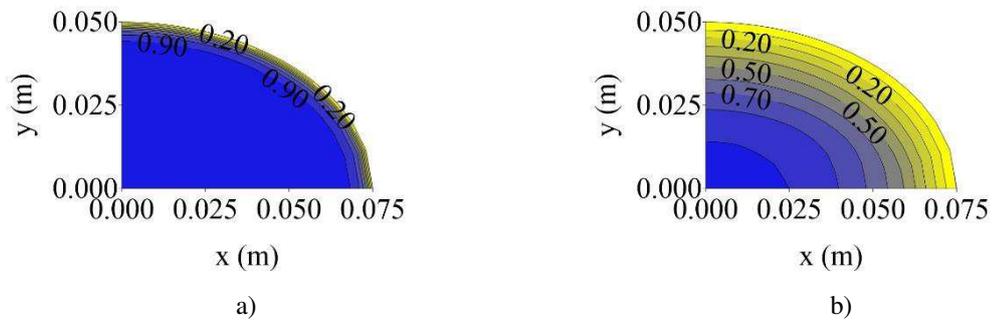


Figura 4.59 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.

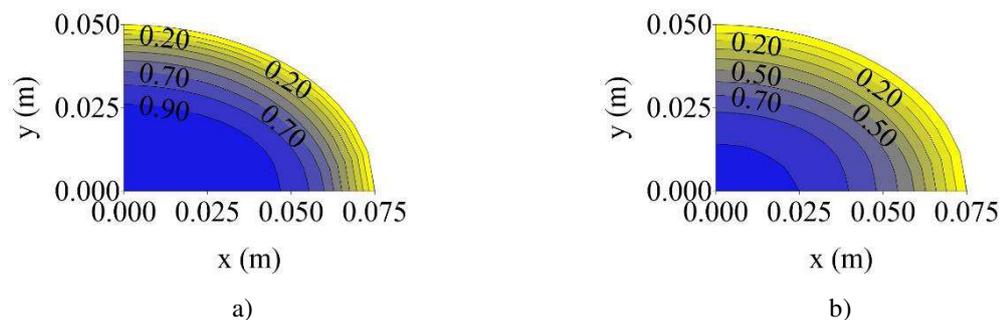


Figura 4.60 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

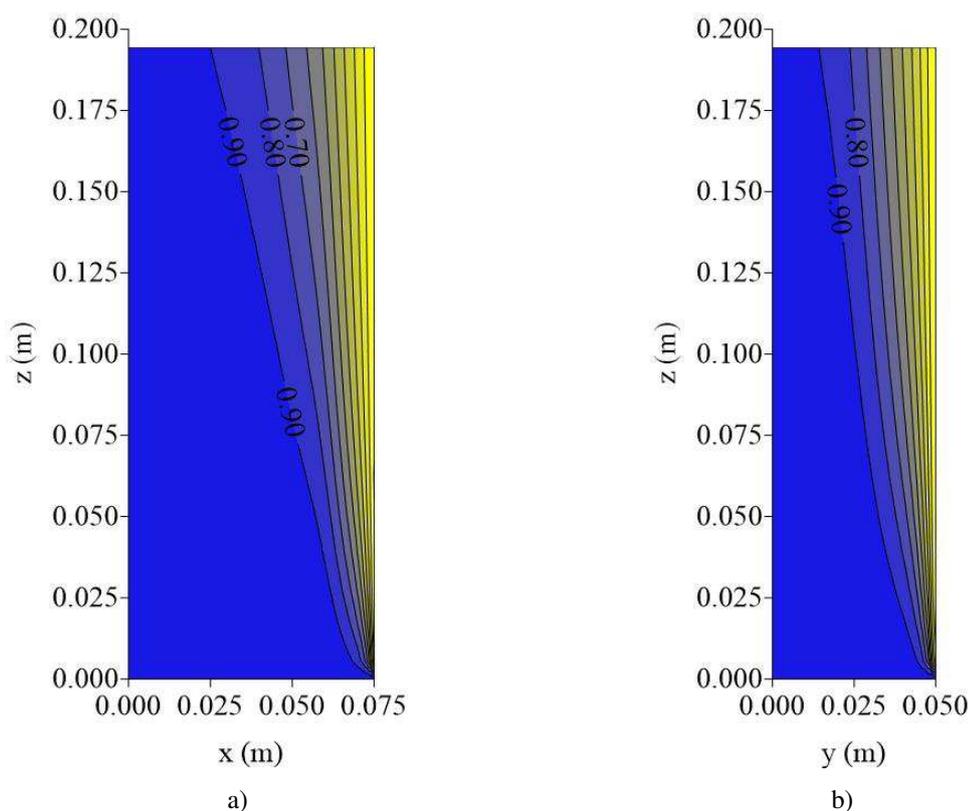


Figura 4.61 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

Observando-se as Figuras 4.50 - 4.55, referentes à temperatura $T(z = 0 \text{ m}) = 40^\circ\text{C}$ na entrada do reator e comparando-as com as Figuras 4.56 - 4.61, essas, por sua vez, referentes à $T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$ e levando em consideração que, no caso 1, também foi simulada a situação para $T(z = 0 \text{ m}) = 70^\circ\text{C}$, verifica-se que, a medida em que a temperatura na entrada do reator aumenta, tem-se um maior deslocamento das isolinhas de maior temperatura no sentido parede-centro do reator, e diminuem-se os gradientes radiais de temperatura, também nesse sentido. Esse fato pode ser melhor observado ao se analisar as Figuras 4.62 e 4.63, as quais dão detalhes da temperatura adimensional em função da posição sobre o eixo-y nos instantes de tempo $t =$

0.5 e 4.5 s, em 3 alturas distintas do reator. Dessas figuras, também percebe-se que os gradientes radiais de temperatura são praticamente os mesmos junto à parede, sempre elevados para os três casos estudados de temperatura na entrada do reator.

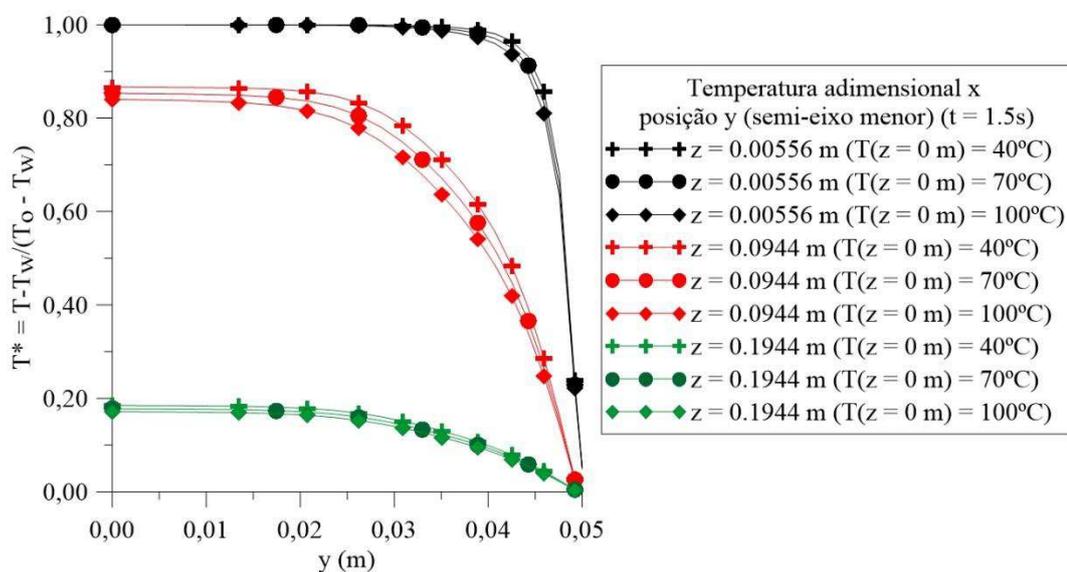


Figura 4.62 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da temperatura do fluxo de ar na entrada $T(z = 0 \text{ m})$ (t = 1.5 s).

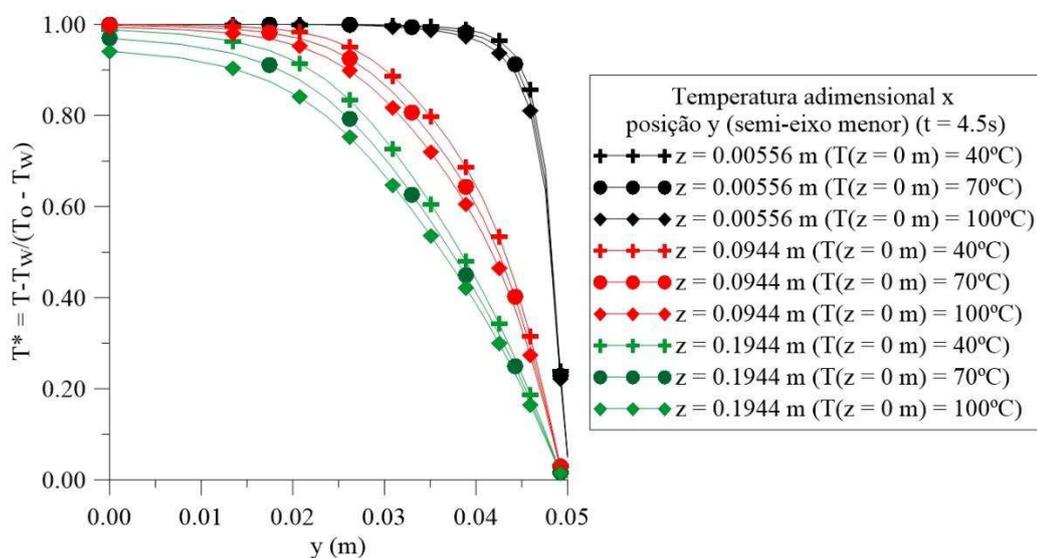


Figura 4.63 - Temperatura adimensional x posição (eixo y) em função da temperatura do fluxo de ar na entrada $T(z = 0 \text{ m})$ (t = 4.5 s).

4.3.3.2 Perfil de temperatura variável na entrada do reator

Na seção 4.1 em que se tratou da confiabilidade do modelo fez-se menção de que o modelo de temperatura variável proposto neste trabalho foi validado com base no modelo de

Lucena (2016). Aqui é apresentada a comparação dos resultados obtidos pelo modelo deste trabalho e os obtidos pelo mencionado autor. As propriedades termofísicas e geométricas usadas em ambos os trabalhos foram $L_2 = L_1 = R = 0.04$ m, $k_r = k_z = 0.5$ W/w²K, $\rho = 1.09488$ kg/m³, $c_p = 1011.3$ J/kg.K, $\varepsilon = 0.3$, $Bi = 16.13$ ($Bi = h_w R/k_r$) e a vazão mássica $G = 0.1$ kg/m²s ($G = \rho \varepsilon u_z$) e altura variando em $H = 0.1, 0.3$ e 0.5 m., sendo que este trabalho foi resolvido em regime transiente, não fugindo à proposta original, apresentando os mesmos resultados que os de Lucena (2016) para um tempo dilatado de processo, ou seja, no regime permanente. A seguir os resultados na Figura 4.64 e 4.65, são mostrados só os casos $H = 0.1$ e 0.3 m.

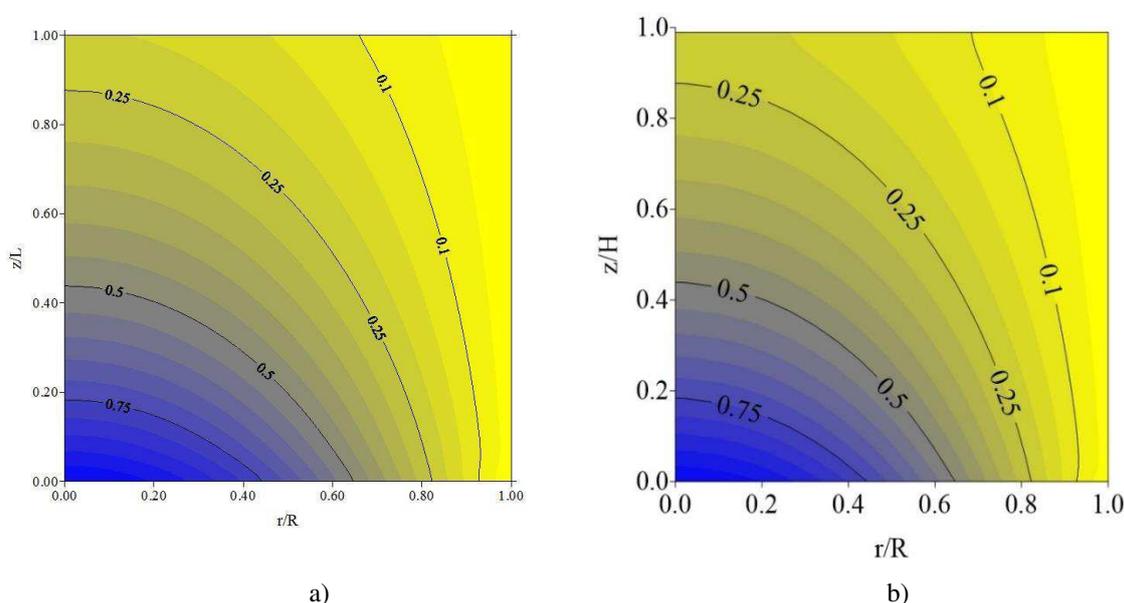


Figura 4.64 - Perfil adimensional de temperatura x posição radial adimensional em função de um perfil de temperatura variável da entrada do reator ($H = 0.1$): a) Lucena (2016), b) presente trabalho.

Pela observação das Figuras 4.64 e 4.65, percebe-se a plena harmonia entre os resultados de Lucena (2016) e os obtidos neste trabalho para um perfil de temperatura variável na entrada do reator, porém, a proposta deste trabalho, como já dito, é mais abrangente e se estende para a geometria cilíndrico-elíptica.

Uma vez verificada a validade do modelo de perfil de temperatura variável na entrada do reator proposto neste trabalho, a seguir serão apresentados os resultados do caso 8.

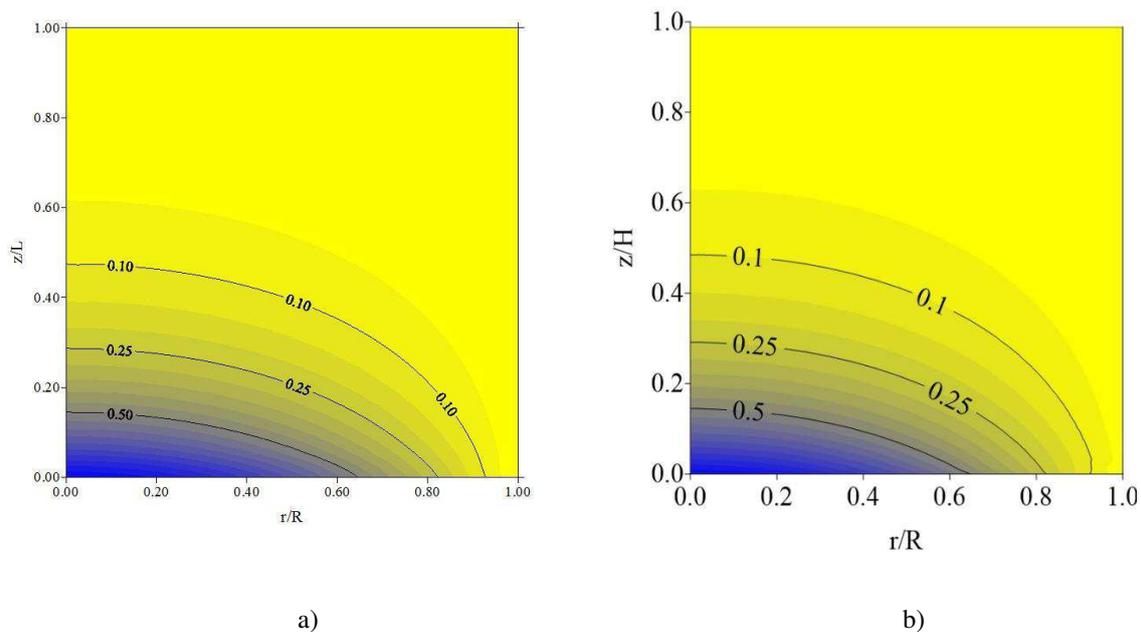


Figura 4.65 - Perfil adimensional de temperatura x posição radial adimensional em função de um perfil de temperatura variável da entrada do reator ($H = 0.3$): a) Lucena (2016), b) presente trabalho

Caso 8

Faz-se necessário verificar a diferença no campo de temperatura quando se trata o perfil de temperatura na entrada do reator como variável com a posição radial, em detrimento da consideração inicial de perfil plano. Para isso, adotou-se um perfil variável cuja temperatura média da seção transversal na entrada do reator corresponde ao mesmo valor imputado para o perfil plano.

O perfil curvilíneo de temperatura na entrada do reator proposto neste trabalho (Equação 3.127) encontra-se a seguir, na Figura 4.66. O mesmo possui uma faixa de variação de 30°C , na superfície do reator, a 95.44°C , no centro, com uma temperatura média da seção transversal de $T_M = 70^{\circ}\text{C}$, que é o mesmo valor para o perfil plano (caso 1).

Em função dessa nova condição na entrada do reator, nas Figuras 4.67 - 4.72, são apresentados os resultados da distribuição de temperatura nos instantes $t = 0.5$ e 4.5 s.

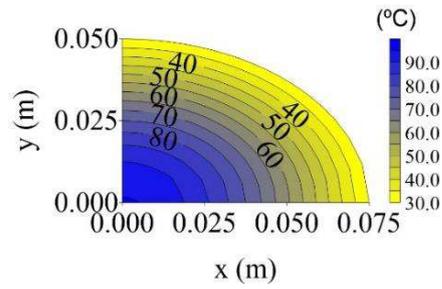


Figura 4.66 - Distribuição de temperatura ($^{\circ}\text{C}$) na entrada do reator ($z = 0$ m).

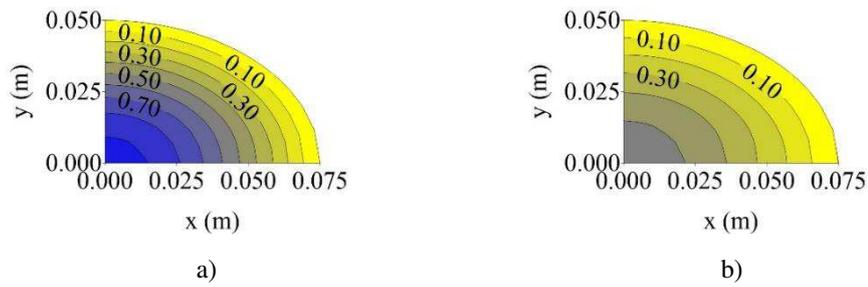


Figura 4.67 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.



Figura 4.68 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

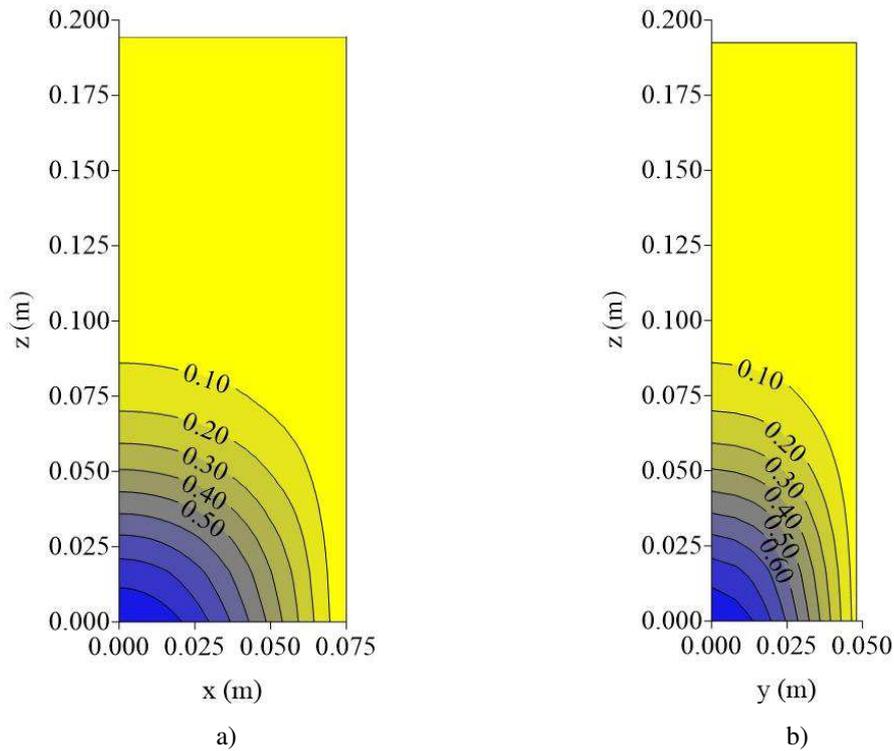


Figura 4.69 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

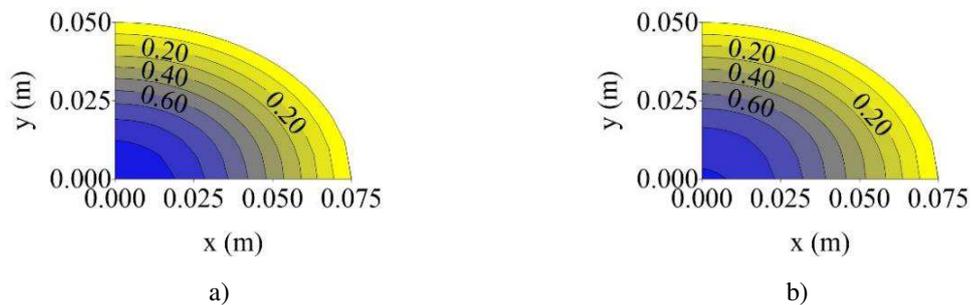


Figura 4.70 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $z = 0.00556$ m; b) $y = 0.03889$ m.

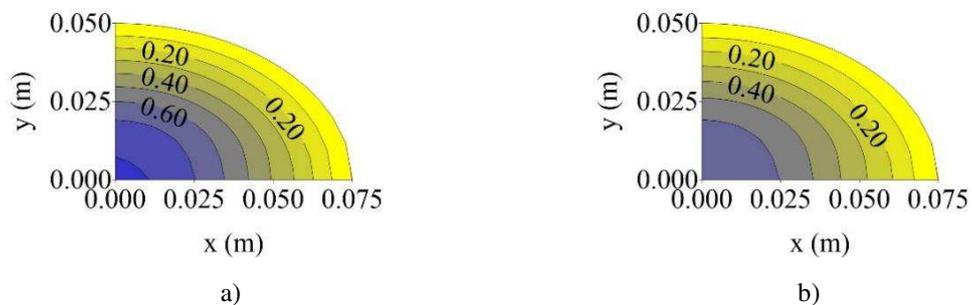


Figura 4.71 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $z = 0.0944$ m; b) $y = 0.1944$ m.

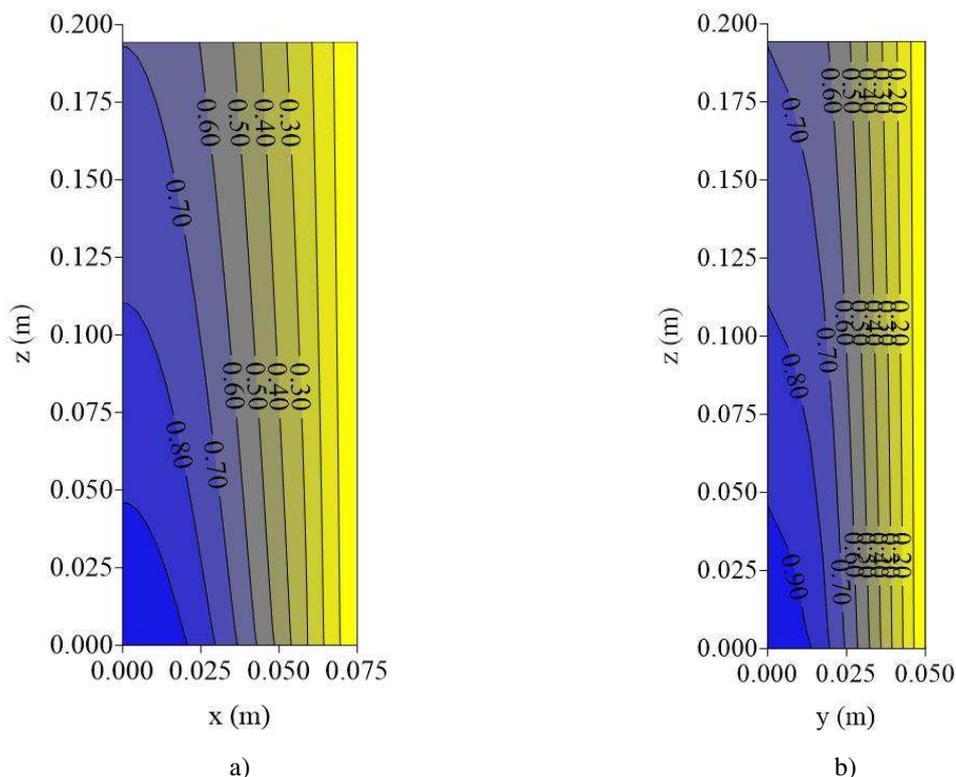


Figura 4.72 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (perfil de temperatura variável na entrada do reator): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

Observando as Figuras 4.67 - 4.72, percebe-se que, atribuir um perfil de temperatura parabólico dependente da posição radial na entrada do reator e com a temperatura na borda em equilíbrio com a temperatura do fluido arrefecedor, mesmo que com uma temperatura média da seção transversal tendo igual valor ao equivalente para um perfil plano, que foi o caso 1, não implica numa dinâmica semelhante para a transferência de calor, embora o tempo de alcance do regime permanente seja o mesmo, $t = 4.5$ s.

Percebe-se que os gradientes radiais de temperatura num perfil plano (caso 1) eram mais elevados em relação ao perfil variável, devido à elevada diferença de temperatura na entrada do reator ($70^\circ - 30^\circ = 40^\circ\text{C}$). Para este caso de perfil variável, os gradientes de temperatura agora são bem menores. Esse efeito é devido a redução dessa diferença de temperatura junto a parede do reator, onde se tem um equilíbrio térmico entre a temperatura da parede e a do fluido arrefecedor. O efeito desses menores gradientes radiais junto à parede é verificado ao longo de qualquer altura do reator e em qualquer tempo de processo.

No instante de tempo 4.5 s, claramente observa-se, na Figura 4.72, que da metade dos semi-eixos maior e menor em direção à parede, não há praticamente a influência de gradientes axiais de temperatura, condição que vinha começando a se consolidar desde o instante de tempo $t = 3$ s.

Também é possível comparar de forma muito pertinente nas Figuras 4.73 e 4.74 a distribuição de temperatura quando o reator está sujeito a um perfil plano ou variável de sua temperatura na entrada, em ambos os casos o valor médio sendo o mesmo (70°C). As figuras apresentam a distribuição adimensional sobre o plano localizado ao longo do eixo-y do domínio físico do reator, e nos instantes de tempo $t = 0.5$ e 4.5 s.

Para o perfil variável de temperatura na entrada, o fenômeno de convecção foi predominante, praticamente até o instante de tempo $t = 1.5$ s, mas após algum tempo, ele deixa de ser tão efetivo e a difusão radial entre as partículas e o ar predomina na operação do reator.

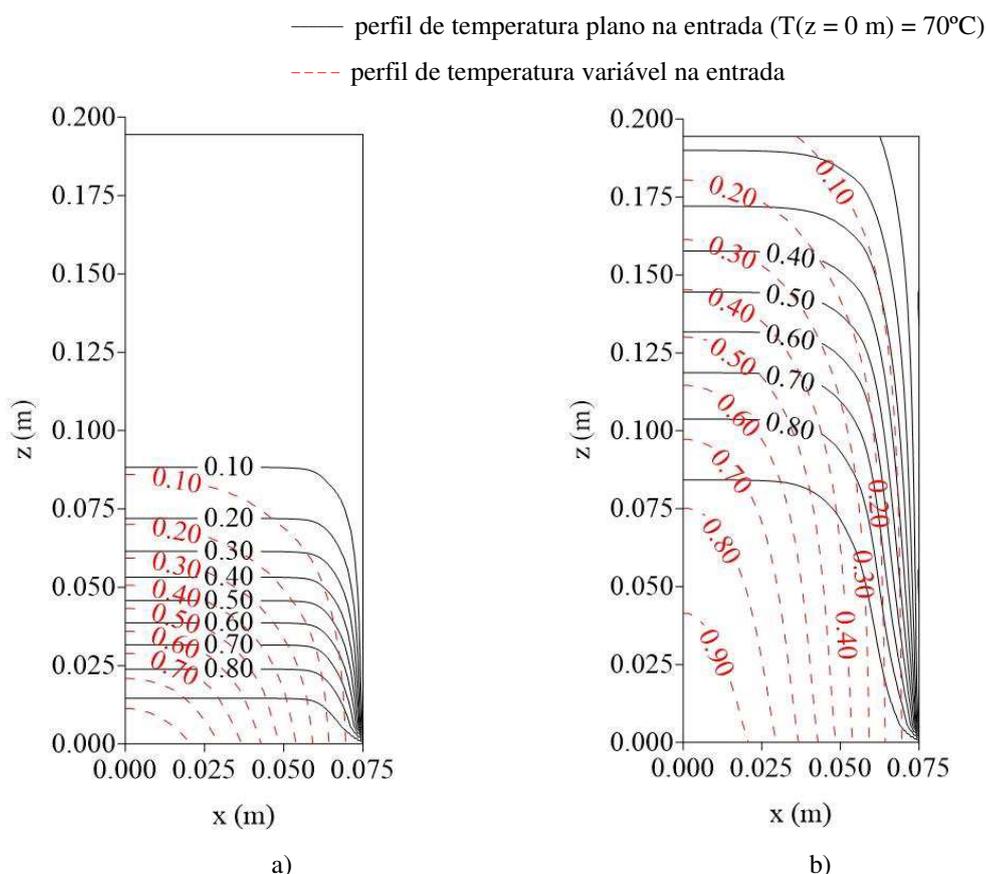


Figura 4.73 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico ($T(z = 0 \text{ m}) = 70^{\circ}\text{C}$) x $T(z = 0 \text{ m})$ variável): a) $t = 0.5$ s; b) $t = 1.5$ s.

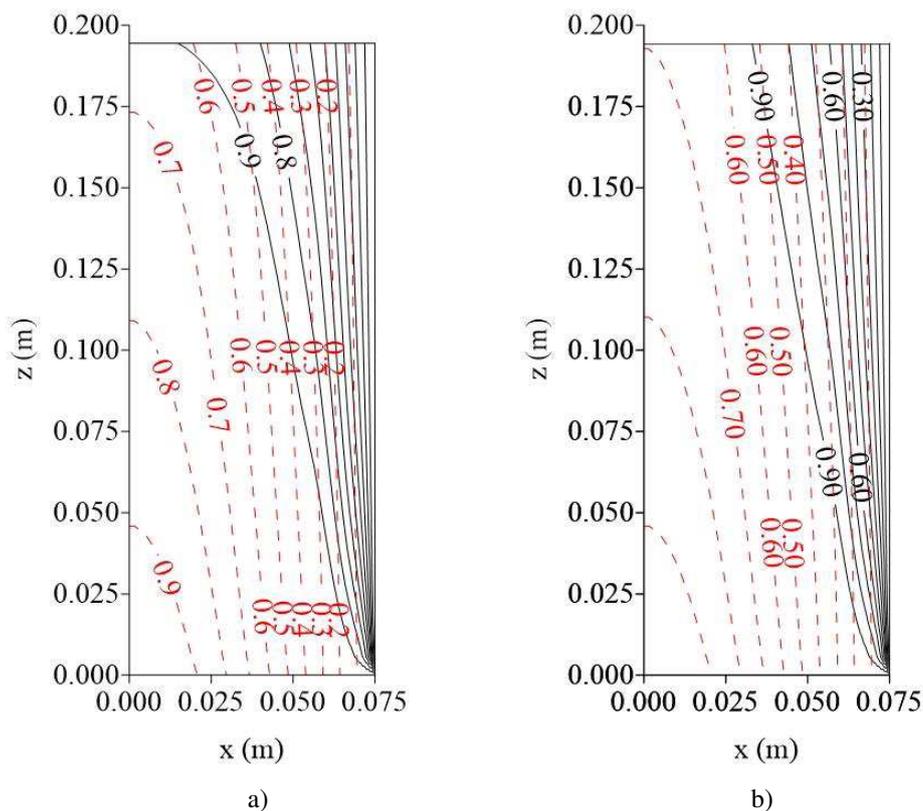


Figura 4.74 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico ($T(z = 0 \text{ m}) = 70^\circ\text{C}$) x $T(z = 0 \text{ m})$ variável): a) $t = 3.0 \text{ s}$; b) $t = 4.5 \text{ s}$.

Pode-se dizer que o perfil de temperatura final no interior do reator praticamente reproduz, ao longo de quase toda a sua altura, o perfil de temperatura na entrada do reator.

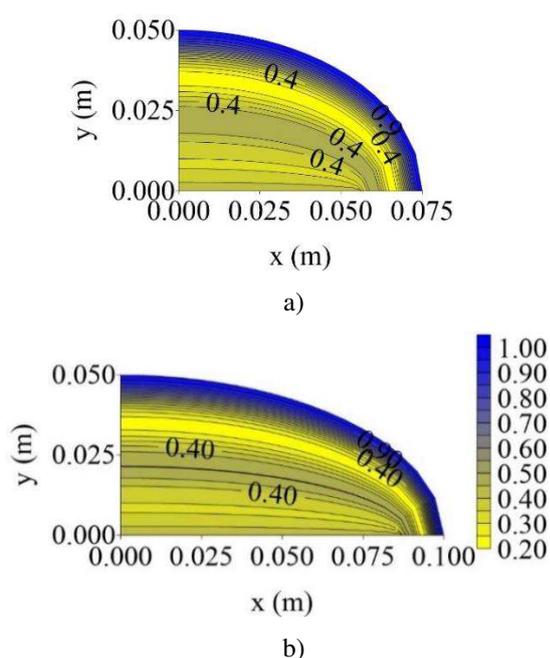
Considerar um perfil curvilíneo de temperatura na entrada do reator realmente modifica os resultados do campo de temperatura em relação à adoção de um perfil plano. Assim, não considerar um perfil de temperatura variável com a posição na entrada do reator pode realmente implicar em graves erros na estimativa dos parâmetros térmicos, principalmente k_r e k_z . Para se ter uma ideia, a temperatura média adimensional no interior do reator quando se considera um perfil plano de temperatura na sua entrada (caso 1) foi de $T_{\text{med}}^* = 0.697$, já para o perfil curvilíneo, aqui discutido, esse valor foi $T_{\text{med}}^* = 0.364$ ao se atingir o regime permanente ($t = 4.5 \text{ s}$), dado que as demais propriedades do sistema são as mesmas em ambos os casos.

4.3.4 Influência da porosidade do leito

Caso 9

A fim de se verificar a distribuição de temperatura no reator quando se considera um perfil de porosidade variável com a posição radial (caso 1), e comparar com o caso em que se considera esse parâmetro constante, simulou-se um caso (caso 9) com esse parâmetro tendo um valor constante sobre todo o leito, visando verificar se um perfil constante, cujo valor é obtido a partir da média dos valores de um perfil variável, poderia substituir este último na modelagem, sem alterações significativas nos resultados.

Assim, o valor obtido para a porosidade média, a partir das Equações 3.151 e 3.153, para $L_2/L_1 = 1.5$ foi de $\varepsilon_{med} = 0.466$, o qual foi imputado para simular o caso 9 que considera a porosidade do leito constante. Nas Figuras 4.76 - 4.78 e 4.79 - 4.81, tem-se os resultados da distribuição de temperatura no interior do reator, para os instantes de tempo $t = 0.5$ e 4.5 s para este caso. Na Figura 4.75-a está apresentado o perfil de porosidade radial usado para simular a situação do caso 9, como também para a maioria dos casos neste trabalho. Já nas Figuras 4.75-b e 4.75-c, tem-se os respectivos perfis de porosidade para as razões de aspecto $L_2/L_1 = 2.0$ e 3.0 , utilizados nas simulações dos casos 2 e 3. A legenda da Figura 4.75-b é válida para as outras duas (a e c).



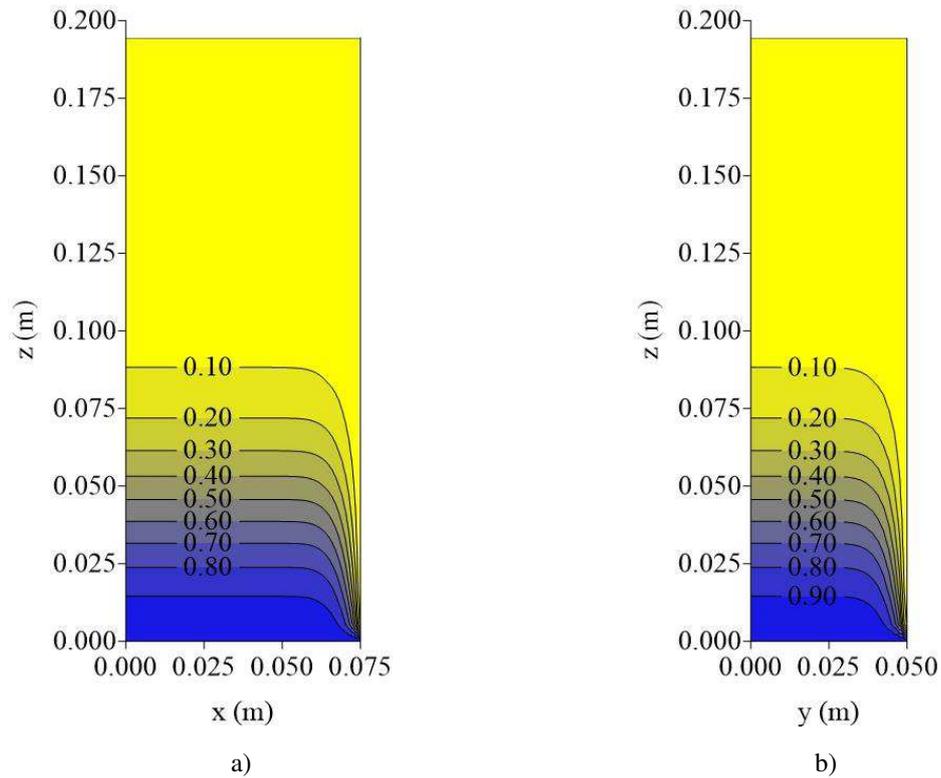


Figura 4.78 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 0.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

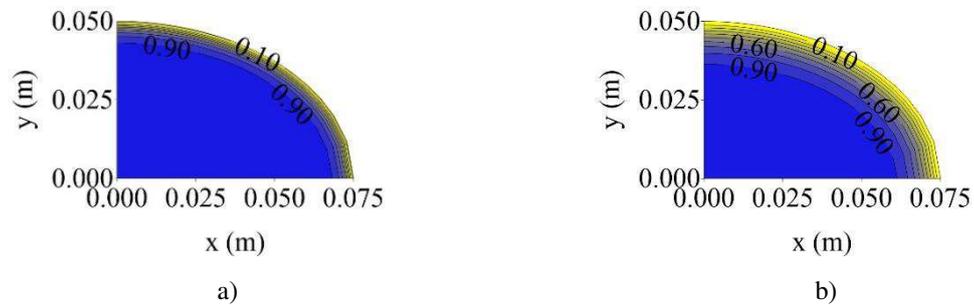


Figura 4.79 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $z = 0.00556$ m; b) $z = 0.03889$ m.

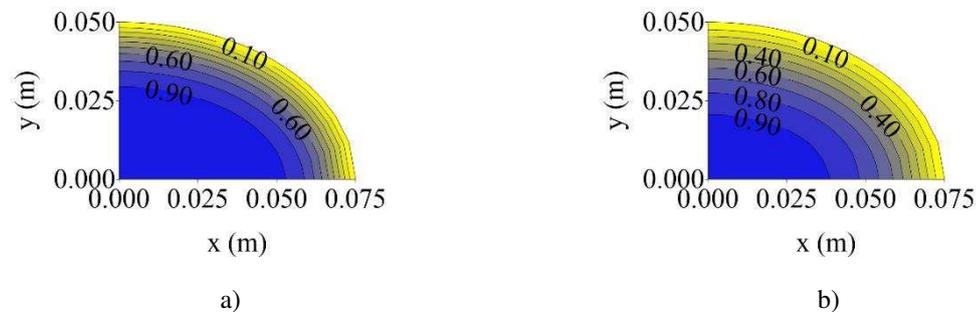


Figura 4.80 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $z = 0.0944$ m; b) $z = 0.1944$ m.

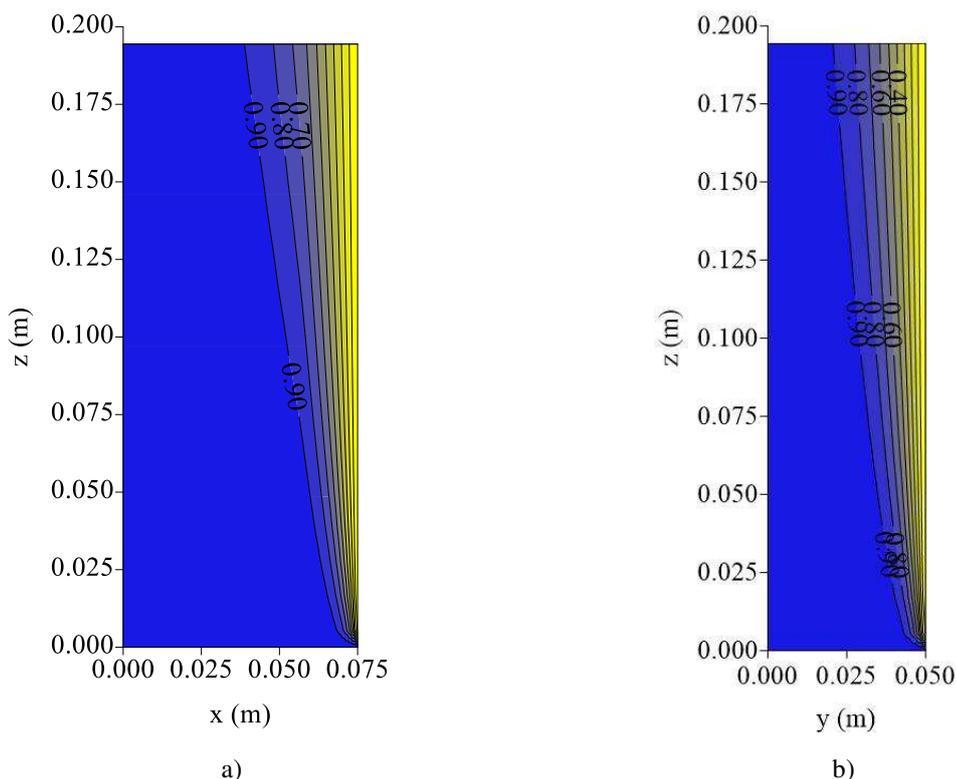


Figura 4.81 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico em $t = 4.5$ s (porosidade constante, $\varepsilon = 0.466$): a) $y = 0$ m; b) $x = 0$ m.

A comparação entre os resultados da porosidade constante (caso 9) e da porosidade variável (caso 1) indica que os perfis de temperatura praticamente não são afetados desde o instante inicial até 1.5 s, conforme ilustrado na Figura 4.82. Também foi observado que o tempo para se alcançar o regime permanente é o mesmo para os dois casos, $t = 4.5$ s.

Contudo, há uma ocorrência interessante que pode ser observada na Figura 4.83. Trata-se que, a medida em que avança o tempo, após 1.5 s, as isolinhas mais internas de maior temperatura se aproximam mais da parede do reator, contrariando a expectativa de o campo de temperatura se manter o mesmo, observado para o caso 1 e o caso 9 até o instante de tempo $t = 1.5$ s. Isso pode ter explicação no fato de que a porosidade nessa região mais próxima ao centro do reator tem um valor mais alto ($\varepsilon = 0.466$) em relação aos valores que apresentou para o modelo de porosidade variável (em torno de 0.4), o que implica numa maior fração de vazios com conseqüente menor resistência à difusão de calor radial, o que gera uma zona mais estendida de aquecimento do centro para a parede do reator.

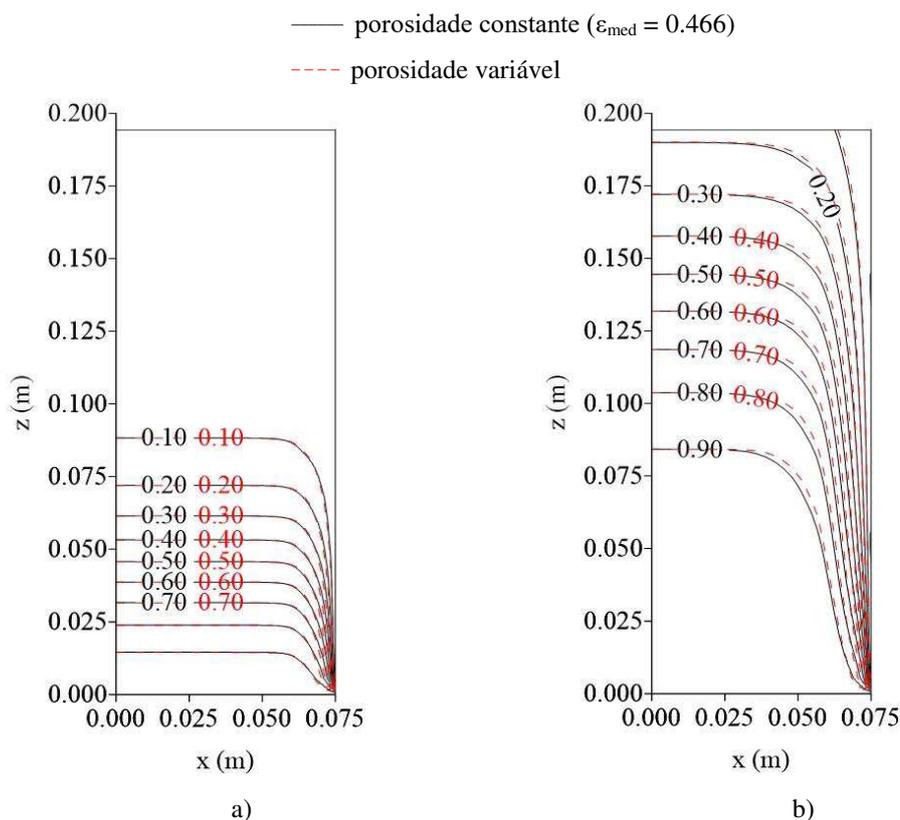


Figura 4.82 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico: a) $t = 0.5$ s; b) $t = 1.5$ s. (porosidade constante x porosidade variável).

O perfil de porosidade proposto nesse trabalho foi adaptado de uma geometria cilíndrico-circular e requer aprimoramentos a partir de investigações experimentais. Porém, a partir de uma abordagem, com uma análise prévia baseada em um provável perfil como foi feita aqui, já é um ótimo ponto de partida, a fim de fazer previsões de comportamento da operação do reator.

No mais, os resultados de distribuição de temperatura comparando-se um modelo à porosidade variável com um à porosidade média constante, não revelaram variações significativa dada a pequena variabilidade dos valores de porosidade entre os dois modelos, só sendo um pouco mais acentuada esta variabilidade na região mais próxima à parede, porém, trata-se de uma zona bem reduzida.

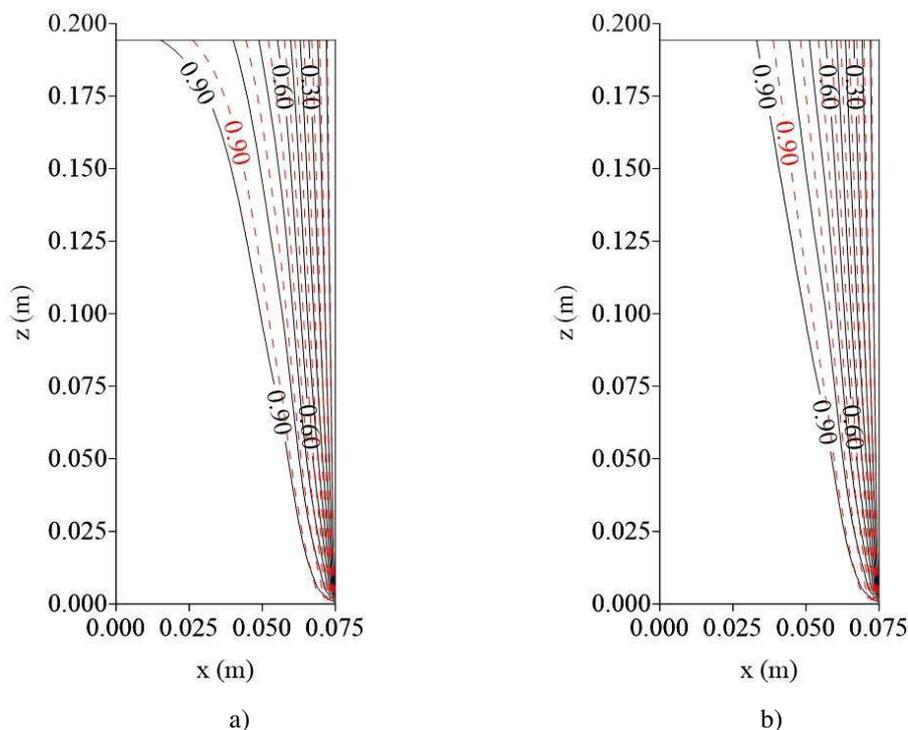


Figura 4.83 - Distribuição de temperatura adimensional no interior do reator cilíndrico-elíptico: a) $t = 3.0$ s; b) $t = 4.5$ s. (porosidade constante x porosidade variável).

4.3.5 Influência de reação química sobre o perfil de temperatura

A operação de transferência de calor no reator de leito-fixo foi considerada com a hipótese da ocorrência de uma reação simples, exotérmica, com as mesmas dimensões e propriedades termofísicas usadas nos casos anteriores.

Nesta análise considerou-se que a parcela de energia gerada devido à ocorrência da reação química global de 1ª ordem foi calculada em cada ponto pelo produto velocidade de reação, dada pela lei da potência e o valor da entalpia associada à reação considerada, conforme descrito na seção 3.1.5.

As distribuições de temperatura são apresentadas nos mesmos planos que para os casos anteriores e a referência para comparação de resultados é o caso 7, cuja diferença entre este e o caso agora estudado, em termos de condições operacionais, é a presença do mecanismo de reação, preservando demais propriedades termofísicas e geométricas. Outra referência também são os casos estudados em regime permanente por Oliveira (2004).

O sistema aqui estudado, quanto a presença do mecanismo de reação química tem praticamente as mesmas condições operacionais usadas por Oliveira (2004), adotando razão de aspecto $L_2/L_1 = 1.5$ ao invés do valor $L_2/L_1 = 2.0$ adotado por esse autor, que também adotou velocidade de entrada $u_z = 0.11417$ m/s, já neste, $u_z = 0.1$ m/s, estando, então, este trabalho em condições geométricas e fluidodinâmicas bem próximas ao de Oliveira (2004). Termicamente, na entrada, a temperatura nos dois casos foi o perfil plano com $T(z = 0 \text{ m}) = 100$ e 120°C , mas neste trabalho continuou a se utilizar as propriedades termofísicas variáveis ao longo do leito, juntamente com o perfil de porosidade variável, em detrimento de Oliveira (2004) que utilizou esses parâmetros como constantes, porém, os valores assintóticos para as propriedades termofísicas variáveis neste trabalho se aproximam bastante dos valores constantes utilizados por aquele autor, sendo possível estabelecer uma boa relação comparativa entre os dois casos.

O estudo foi dividido em três casos: caso 10, no qual se variou a concentração de reagentes no range $C = 0,0008$ a 0.8 Kmol/m^3 , fixando-se o valor da temperatura da concentração de reagentes na entrada do reator ($T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$); caso 11, no qual, fixando-se a concentração de reagentes em $C = 0.08 \text{ Kmol/m}^3$, analisou-se o que acontecia com a distribuição de temperatura no interior do reator quando se eleva a temperatura do fluxo de ar na entrada de 100 para 120°C , e, por fim, o caso 12, onde se variou o fator pré-exponencial de Arrhenius desde $A_0 = 9.4 \times 10^{19}$ a $9.4 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$. Foram também imputados os valores $\Delta H = 25000 \text{ Kcal/kmol}$ e $E_a = 38000 \text{ Kcal/Kmol}$, para o calor de reação e energia de ativação, respectivamente, os quais foram mantidos fixos para todos os casos. Os valores da concentração C , fator pré-exponencial de Arrhenius A_0 , calor de reação ΔH e energia de ativação E_a foram os mesmos valores utilizados por Oliveira (2004).

4.3.5.1 Efeito da concentração do reagente sobre os perfis de temperatura no reator

Caso 10

A diferença os casos 7 e 10 está apenas na presença do mecanismo de reação química e o foco é saber o que ocorre com a variação da concentração molar de reagentes quando se varia $C = 0.0008$ para 0.08 e 0.8 Kmol/m^3 . Um fato interessante observado neste caso 10 é que ao se estabelecer uma reação química simples de ordem global 1, à 100°C de temperatura na entrada do reator, com $C = 0.0008 \text{ Kmol/m}^3$, $m = 1$, $A_0 = 9.4 \times 10^{19}$, de $\Delta H = 25000 \text{ Kcal/kmol}$ e $E_a =$

38000 Kcal/Kmol, permanecendo fixas todas as características em relação ao caso 7, praticamente não se obteve nenhuma mudança no perfil de temperatura em relação, de tal modo que, sobrepondo-se os gráficos de distribuição de temperatura obtidos neste caso aqui sobre os do caso 7, eles ficaram praticamente idênticos para todos os tempos analisados do processo dinâmico, motivo pelo qual não serão aqui expostos e o leitor pode lembrar estes perfis vide caso 7.

A invariabilidade do campo de temperatura do reator em qualquer posição e tempo também foi verificada quando se mantiveram todas as variáveis inalteradas e alterou-se apenas o valor da concentração de reagentes C , de 0.0008 Kmol/m^3 para 0.08 Kmol/m^3 , ou seja, aumentou-se 100 vezes o seu valor. Por esse motivo, também foi preterida a apresentação dos gráficos de distribuição de temperatura para essa situação.

Só quando se modificou o valor da concentração de reagentes para $C = 0.8 \text{ Kmol/m}^3$, ou seja, 1000 (mil) vezes maior que o primeiro valor estabelecido foi que o sistema veio sentir alguma alteração significativa no perfil de temperatura, conforme Figuras 4.85, que ilustra os perfis de temperatura sobre o plano $y = 0 \text{ m}$, para os tempos $t = 1.5$, 3.0 e $t = 4.5 \text{ s}$.

Percebe-se, da Figura 4.84, que para $C = 0.8 \text{ Kmol/m}^3$ tem-se uma grande concentração de moléculas no volume do reator de tal maneira que aumenta o número e a frequência de colisões efetivas entre as moléculas, proporcionando um considerável aumento na taxa de energia gerada na reação química, o que produz um moderado aquecimento na região da entrada até a metade do reator, em relação ao mesmo caso sem reação (caso 7) no instante de tempo $t = 1.5 \text{ s}$, porém, da metade até a saída do reator, praticamente não se altera o perfil de temperatura, ainda nesse instante.

A partir do instante de tempo $t = 3.0 \text{ s}$, vê-se, da Figura 4.84 b – c que até o processo alcançar o regime permanente ($t = 4.5 \text{ s}$), a região de maior aquecimento em relação à condição sem reação química (caso 7) que estava restrita apenas à entrada do reator agora se estende até a saída do reator, aumentando-se os gradientes radiais de temperatura em direção à parede e, conseqüentemente, aumentando-se a taxa de transferência de calor em direção à parede devido a alta energia liberada das colisões das moléculas em alta concentração.

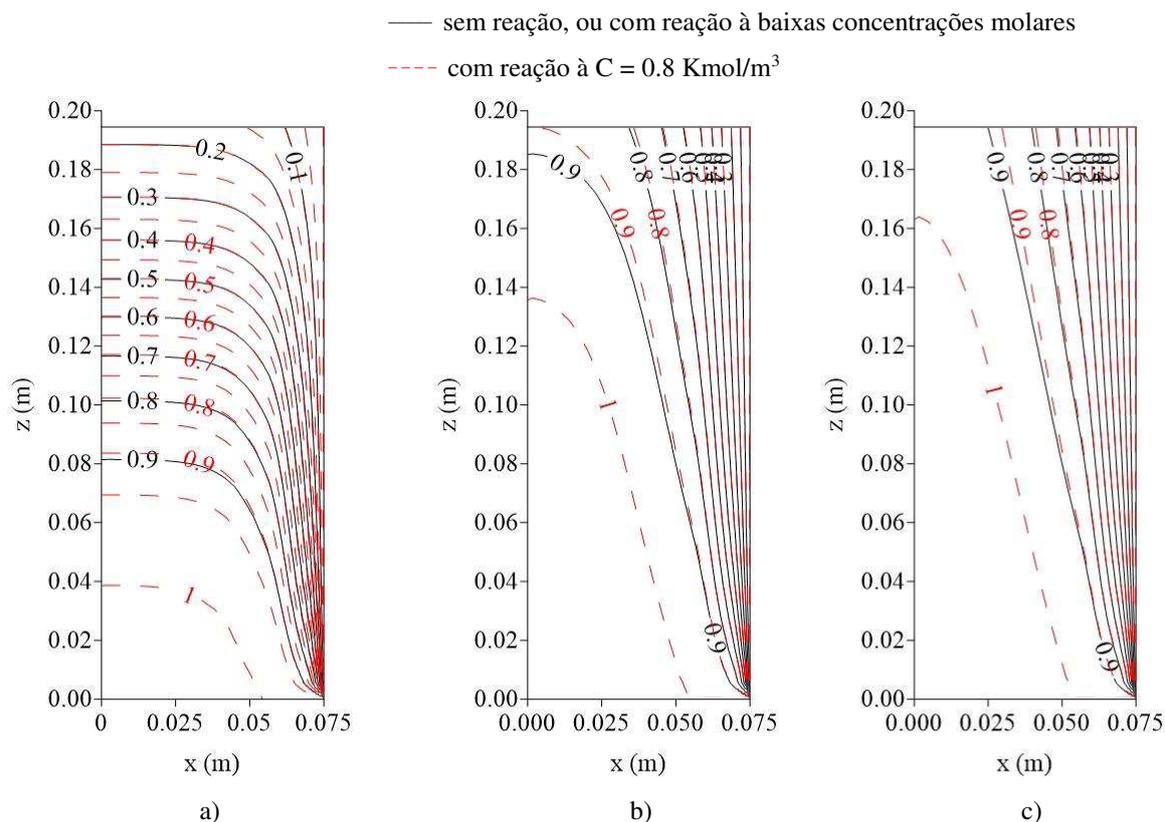


Figura 4.84 - Perfil de temperatura adimensional no reator cilíndrico-elíptico (sem reação x com reação, $C = 0.8 \text{ Kmol/m}^3$) no plano $y = 0 \text{ m}$: a) $t = 1.5 \text{ s}$, b) 3.0 s , c) 4.5 s .

No regime permanente, $t = 4.5 \text{ s}$, quando se compara o caso sem reação química com o caso com reação química com $C = 0.8 \text{ Kmol/m}^3$, o perfil de temperatura até a metade do reator praticamente é o mesmo, porém na zona de saída do reator, há um deslocamento das isolinhas de maior temperatura em direção à parede, fato também constatado por Oliveira (2004) no seu trabalho em regime permanente.

4.3.5.2 Efeito da temperatura do reagente na entrada sobre os perfis de temperatura no reator

Caso 11

No caso 11 é possível analisar o que ocorre com a distribuição de temperatura no reator de leito-fixado quando, se fixa a concentração de reagentes em $C = 0.08 \text{ kmol/m}^3$ e todas as demais variáveis do caso anterior (caso 10) e altera-se a temperatura dos reagentes na entrada do reator de 100°C para 120°C .

Na Figura 4.85, tem-se uma comparação do perfil de temperatura do reator quando $C = 0.08 \text{ Kmol/m}^3$ à 100°C de temperatura na entrada, com o caso em que C permanece fixo, porém, a temperatura na entrada do equipamento é aumentada para 120°C . Dessa figura, percebe-se que é razoavelmente significativo o que o aumento da temperatura nos reagentes em 20°C provoca em toda a distribuição de temperatura do reator. Os gradientes radiais de temperatura não ficam muito alterados, ao longo do tempo, sendo sempre intensos próximo à parede, mas uma região de maior aquecimento se forma junto à entrada do reator a partir de $t = 1.5 \text{ s}$, até ser um pouco mais influente sobre a zona do reator desde a entrada até $z = 0.14 \text{ m}$ e de $x = 0$ até $x = 0.05 \text{ m}$. Isso é perceptível claramente pelo deslocamento da isolinha $T^* = 1$ que se desloca mais intensamente em direção à saída e à parede do reator para o caso em que se tem a temperatura na entrada do reator de 120°C do que para o caso em que se tem a temperatura de entrada de 100°C .

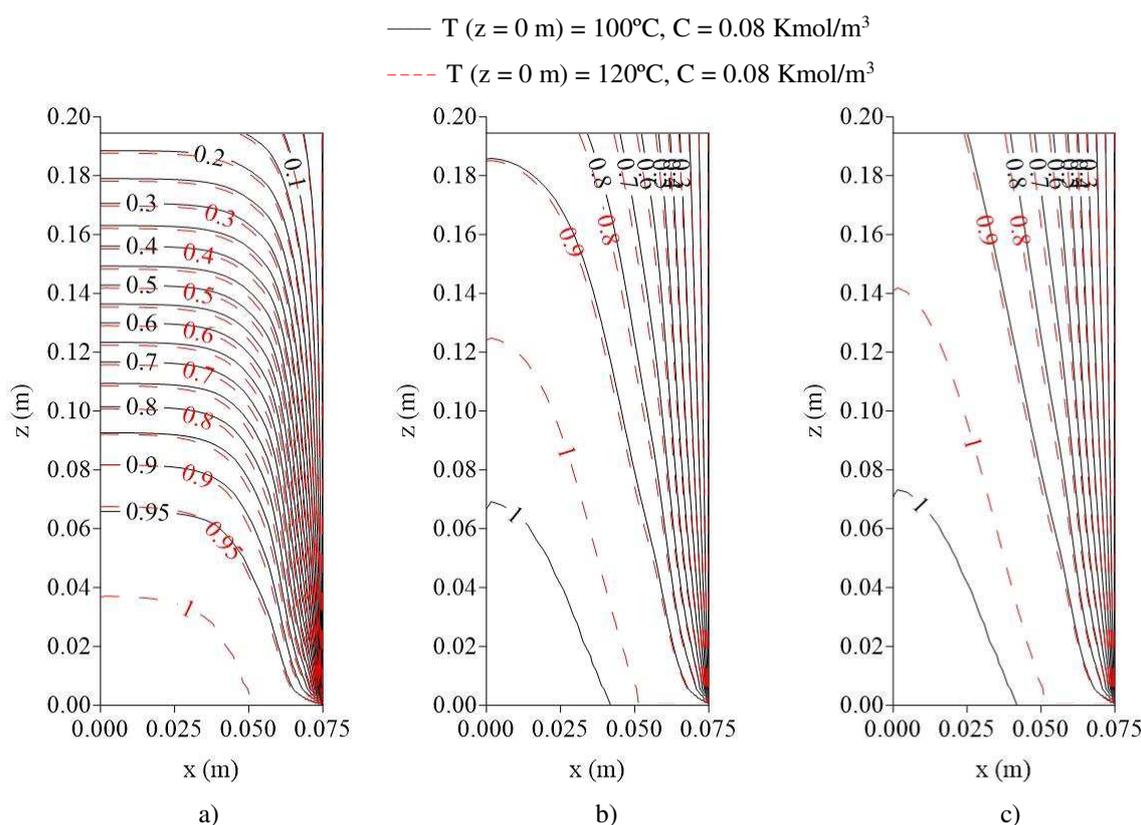


Figura 4.85 - Perfil de temperatura adimensional no reator cilíndrico-elíptico ($T(z = 0) = 100^\circ\text{C}$ x $T(z = 0) = 120^\circ\text{C}$), $C = 0.8 \text{ Kmol/m}^3$, no plano $y = 0 \text{ m}$: a) $t = 1.5 \text{ s}$, b) 3.0 s , c) 4.5 s

Lembrando que uma isolinha de temperatura adimensional para o caso $T(z = 0) = 120^\circ\text{C}$ que tenha mesmo valor que para o caso $T(z = 0) = 100^\circ\text{C}$, tem temperatura em grau

Celsius superior. Por exemplo a isolinha $T^* = 0.9$ para o caso da temperatura de entrada no reator de 120°C possui um maior valor em grau Celsius do que a $T^* = 0.9$ para o caso da temperatura na entrada de 100°C . Os resultados aqui também estão de acordo com Oliveira (2004).

4.3.5.3 Efeito do fator pré-exponencial de Arrhenius sobre os perfis de temperatura do reator

Caso 12:

No caso 12 foi variado o fator pré-exponencial de Arrhenius, A_0 , de 9.4×10^{19} a $9.4 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$, no sentido de se verificar a sua influência da taxa de liberação de energia da reação sobre a distribuição de temperatura do reator de leito-fixado.

Foram analisados três casos, mantendo-se fixas todas as variáveis do caso 10 com $T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$, mantendo-se constante a concentração de reagentes C igual a 0.0008 Kmol/m^3 .

Verificou-se que mudança no campo de temperatura do reator o fator pré-exponencial de Arrhenius promoveria ao se variar seu valor de $9.4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$ para $9.4 \times 10^{20} \text{ s}^{-1}$, ou seja, num fator de aumento de 10 vezes. O resultado foi que não houve mudanças significativas neste campo de temperatura em qualquer posição e qualquer tempo de processo. Assim como, também, aumentando-se mais 10 vezes, para $9.4 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$, continuou quase o mesmo comportamento.

Apenas quando se estabeleceu o valor $A_0 = 9.4 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$ para este parâmetro, 1000 (mil) vezes o primeiro valor considerado, é que o sistema percebeu mudança moderadamente significativa em sua distribuição de temperatura devido a ocorrência da reação química global de 1ª ordem, sob o controle deste parâmetro.

Os perfis de temperatura para $A_0 = 9.4 \times 10^{20}$ e $A_0 = 9.4 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$ não são apresentados, dada a similaridade com o perfil de temperatura para $A_0 = 9.4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$ que, por sua vez, se assemelha bastante com os resultados do caso 7 (sem reação química com $T(z = 0 \text{ m}) = 100^\circ\text{C}$).

A seguir, na Figura 4.86, estão confrontados, num mesmo gráfico, para os instantes de tempo $t = 1.5, 3.0$ e 4.5 s, a distribuição de temperatura para $A_0 = 9.4 \times 10^{19}$ e $9.4 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$, no plano $y = 0$ m. As isolinhas indicam que as curvas se justapõem aos da variação da concentração, caso 11, devido à natureza da expressão linearizada para o termo de reação química na metodologia numérica, que implica que variar x vezes a concentração, mantendo-se fixo o valor do fator pré-exponencial de Arrhenius, significa o mesmo que variar na mesma quantidade, em x vezes, este último parâmetro, mantendo-se fixo o primeiro.

Logo, os comentários que foram feitos para o caso de variação de concentração de reagentes (caso 10) se aplicam da mesma forma para o caso de variação do fator pré-exponencial de Arrhenius, ambos variados na mesma magnitude neste trabalho.

Simulou-se casos com valores maiores para o fator pré-exponencial de Arrhenius no sentido de a análise não ficar tão dependente dos resultados obtidos para a concentração de reagentes e poder analisar uma gama mais abrangente, como fez Oliveira (2004), o qual analisou a influência dos valores $A_0 = 9.4 \times 10^{23}$ e $9.4 \times 10^{25} \text{ s}^{-1}$ em seu trabalho em regime permanente. Estes últimos valores também foram imputados nas simulações feitas neste trabalho, porém, da mesma forma que Oliveira (2004), não se conseguiu êxito com o código computacional utilizado, pelo fato de que gerou *overflow* ou problemas com convergência, quando valores maiores que $9.4 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$ eram estabelecidos para este parâmetro.

Um fato interessante é que com ou sem reação química considerado no modelo, o tempo para se alcançar o regime permanente na operação no reator de leito-fixado foi sempre o mesmo, $t = 4.5$ s.

A similaridade nas distribuições de temperatura quando se varia o fator pré-exponencial de Arrhenius ou a concentração de reagentes, quando se fixa um e altera o outro na mesma ordem de grandeza, está no fato de que o modelo de cinética de primeira ordem é responsável por isso, no sentido em que matematicamente estes dois termos tem atuação de proporcionalidade direta no termo de reação química.

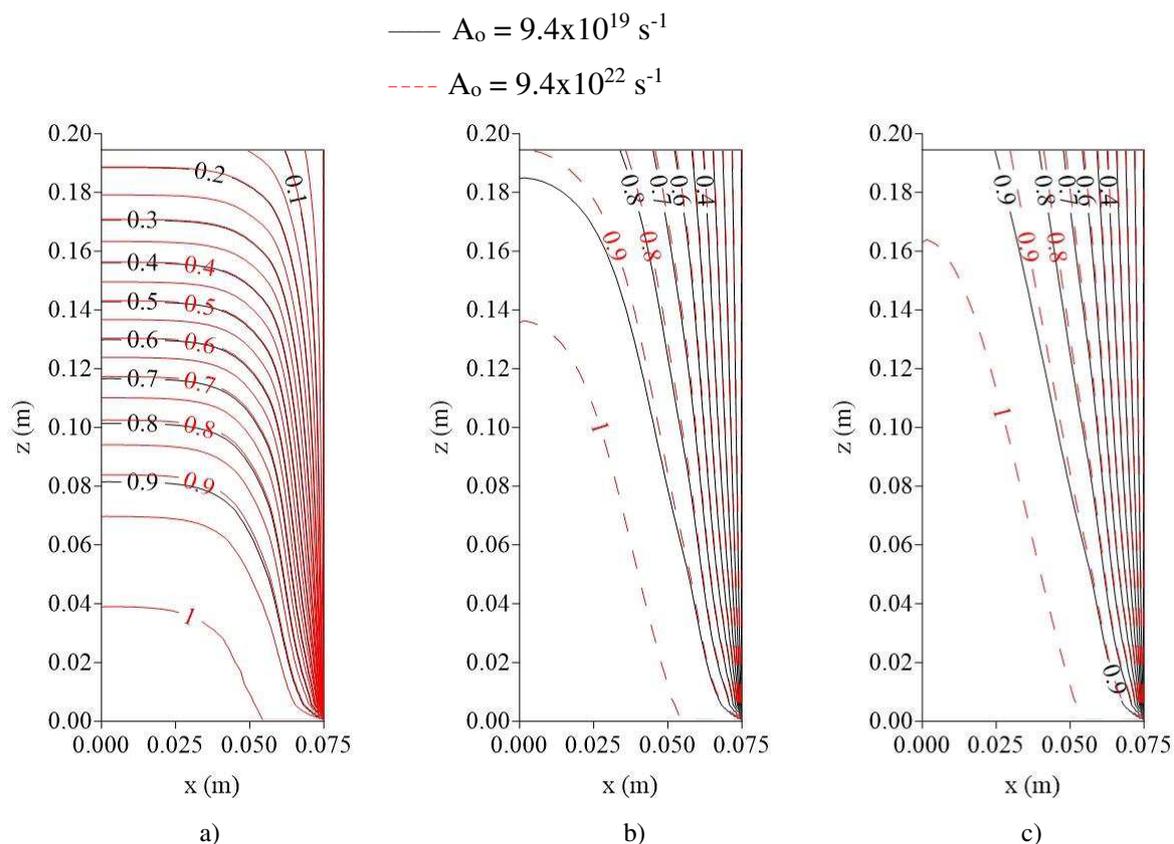


Figura 4.86 - Perfil de temperatura adimensional no reator cilíndrico-elíptico ($A_0 = 9.4 \times 10^{19} \text{ s}^{-1}$ x $9.4 \times 10^{22} \text{ s}^{-1}$) no plano $y = 0$ m: a) $t = 1.5$ s, b) 3.0 s, c) 4.5 s.

Para finalizar, o modelo de reação global de 1ª ordem se mostrou instável numericamente quando as temperaturas na entrada do reator começam a superar os 120°C , fazendo com que o código computacional registrasse *overflow* ou problemas de convergência.

As possíveis explicações podem estar no fato de que, como o termo de reação química, embora linearizado, é avaliado ponto a ponto sobre todo o volume do reator, isso pode implicar em maiores dificuldades de convergência pelo fato de que numericamente esse termo passa a ser dominante na solução das equações. Contudo, este termo não foi tão influente fisicamente no modelo, pois foi visto que, à baixas concentrações de reagentes, os mecanismos de difusão e convecção foram dominantes sobre os efeitos de liberação de energia decorrente da reação química. Apenas a altas concentrações molares que o termo de reação química se mostrou mais influente sobre a distribuição de temperatura no reator de leito fixo.

CAPÍTULO 5

5.1 CONCLUSÕES

A partir dos resultados e discussões descritos neste trabalho, pode-se concluir que:

- Quando se varia a razão de aspecto geométrica (L_2/L_1), embora a área de fluxo de calor aumente com o conseqüente aumento da área superficial do reator, praticamente não se altera as condições operacionais do reator;

- Quando se fixa a velocidade de entrada do fluxo de ar, variando-se quaisquer outros dos parâmetros avaliados neste estudo, o tempo médio para se alcançar o regime permanente é o mesmo para todos os casos simulados.

- O tempo para se alcançar o regime permanente depende exclusivamente apenas da velocidade de entrada no reator, verificando-se predominância do mecanismo de convecção de calor sobre a operação do reator quando uma maior velocidade de fluxo de ar na entrada é imputado.

- Com relação ao diâmetro de partícula de empacotamento, D_p , foi verificado que, variando-se o seu valor entre 0.002 m e 0.006 m, valores correntes na literatura, aqui neste trabalho praticamente não se percebeu nenhuma mudança nos perfis de temperatura em regime transiente.

- Com relação ao perfil de temperatura variável na entrada do reator, observou-se que ele reduziu bastante os gradientes radiais de temperatura junto à parede desde o início até o final do processo e em qualquer altura do reator, alterando-se bastante a dinâmica da operação no equipamento em relação a um perfil plano de mesma temperatura média;

- Foi observado que considerar um perfil plano para a temperatura, em lugar de um perfil variável com a posição na entrada pode gerar discrepâncias na determinação do perfil de temperatura e estimativa de parâmetros, embora o perfil de temperatura variável na entrada aqui proposto necessite de investigações experimentais;

- O perfil de temperatura variável na entrada do reator proposto neste trabalho é válido para a geometria cilíndrico-circular e tem validade estendida para a geometria cilíndrico-elíptica, uma vez que para ambos os casos preserva as características físicas essenciais de menor temperatura ao longo da parede e maior temperatura no centro do tubo.

- O perfil de porosidade utilizado preserva as características bem próximas do que é reportado na literatura para este parâmetro de processo, no interior de meios porosos, embora o mesmo tenha sido proposto teoricamente, carecendo também de investigações experimentais;

- Quando se confronta os resultados de um perfil de porosidade variável no domínio com os de um perfil constante, cujo valor foi obtido da média do perfil variável, verifica-se praticamente o mesmo campo de temperatura ao longo do tempo;

- Um termo de reação química de ordem global 1 só promove modificações significativas de temperatura no interior de reator de leito-fixado quando são verificadas altas concentrações de reagentes, sendo que, à baixas concentrações de reagentes, os mecanismos de difusão e convecção são mais influentes no transporte de calor no reator do que a energia liberada pela reação;

- O fator pré-exponencial de Arrhenius variado nas mesmas proporções que as concentrações produzem praticamente os mesmos resultados de temperatura no reator ao longo do tempo;

- A temperatura na entrada do reator também é um fator importante sobre o aumento da taxa de liberação de energia na reação química, produzindo uma região de aquecimento numa zona mais abrangente do reator e também aumentando - se os gradientes radiais de temperatura em direção à parede;

- O modelo matemático deste trabalho, sem o termo de reação química, tem validade para temperaturas de entrada no reator em faixas elevadas, porém, com a presença do termo de reação química, os limites permissivos para análise de forma que não ocorra *overflow* ou problemas de convergência é de apenas 120°C;

- É necessário um tratamento numérico com base em outros métodos, não testados neste trabalho, para que se possa analisar a influência da presença do termo de reação química sobre o fenômeno de transferência de calor num maior range de temperatura de entrada no equipamento;

- O modelo matemático utilizado neste trabalho possui grande versatilidade para incorporar modificações geométricas e termofluidodinâmicas, a fim de se poder avaliar a interferência de uma ampla gama de variáveis sobre o sistema, de forma individual ou combinada

5.2 SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Como sugestão para futuros trabalhos, propõe-se:

- Utilizar outros tipos de tratamento numérico para o termo de reação química visando ampliar a faixa de temperatura admissível na entrada do reator que não incorra em problemas de convergência da solução;

- Investigar experimentalmente os modelos de porosidade variável com a posição no leito e de temperatura variável com a posição na entrada do reator para esta geometria não convencional, a fim de se poder validar os propostos neste trabalho;

- Simular os mesmos casos aqui estudados considerando resolver as equações da quantidade de movimento, para incorporar também, de forma mais realista, a presença de um perfil de velocidade variável na entrada do reator.

- Resolver este problema empregando o modelo heterogêneo;

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abramowitz, M., Stegun, I, Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables. John Wiley & Sons, New York, 1970.

Akpan, E., Sun, Y., Kumar, P., Hussam, I., Aboudheir, A. Idem, R., Kinetics, experimental and reactor modeling studies of the carbon dioxide reforming of methane (CDRM) over a new Ni/CeO₂-ZrO₂ catalyst in a packed bed tubular reactor. Chemical Engineering Science, vol. 62, n. 15, pp. 4012 – 4024, 2007.

Atkins, P., Jones, L., Princípios de química: Questionando a vida moderna e o meio ambiente. São Paulo: Bookman Companhia Editora, 2001, 1040 p.

Augier, F., Idoux, F., Delenne, J.Y., Numerical simulations of transfer and transport properties inside packed beds of spherical particles. Chemical Engineering Science, vol. 65, n. 03, pp. 1055 – 1064, 2010.

Azevedo, S. F.; Romero, M.A.O.; Wardle, A.P., Modeling of tubular fixed bed catalytic reactor: a brief review. Chemical Engineering Research & Design, vol. 68, p. 483, 1990.

Beek, W. J., Muttzall, k. M. K., Transport Phenomena. London: John Wiley & Sons Ltd, 1975.

Behnam, M., Dixon, A.G., Nijemeisland, M., Stitt, E. H., A New Approach to Fixed Bed Radial Heat Transfer Modeling Using Velocity Fields from Computational Fluid Dynamics Simulations. Industrial & Engineering Chemistry Research, vol. 52, n. 44, pp. 15244–15261, 2013.

Bergman. T.L., Lavine, A.S., Incropera, F.P. and De Witt, D.P., Fundamentos de transferência de calor e massa, 7 ed., Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora S.A (tradução da edição norte-americana), 2014.

Béttega, R., Moreira, M. F. P., Corrêa, R. G., Freire, J.T., Mathematical simulation of radial heat transfer in packed beds by pseudo - homogeneous modeling. *Particuology*, vol. 9, n. 02, pp. 107-113, 2011.

Borkink, J.G.H.; Westerterp, K.R., Determination of effective heat transport coefficients for wall-cooled packed beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 47, n. 9 -11, pp. 2337 - 2342, 1992.

Borkink, J. G. H., Westerterp, K. R., Significance of the radial porosity profile for the description of the heat transport in wall-cooled packed beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 49, n. 6, pp. 863-876, 1994.

Brodkey, R. S. *The phenomena of fluid motions*. London, Addison – Wesley Publishing Company, 1967.

Bunnell, D.G., Irvin, H.B., Olson, R.W., Smith, J.M., Effective thermal conductivities in gas-solid systems. *Industrial and Engineering Chemistry Research & Development*, vol. 41, n. 09, pp. 1977–1981, 1949.

Carbery, J.J., Varma, A., *Chemical Reaction and Reactor Engineering (Chemical Industries/26)*, Marcel Dekker, Inc., New York, New York, 1987.

Colburn, A. P., Heat transfer and pressure drop in empty, baffled and packed tubes: I. heat transfer in packed tubes. *Ind. Eng. Chem.*, vol. 23, pp. 910-913, 1931.

Demirel, Y., Sharma, R.N., Al-Ali, H.H., On the effective heat transfer parameters in a packed bed. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 43, n. 2, pp. 327–332, 2000.

de Klerk, A., Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratio, *AIChE J.*, vol 49, n 08, pp. 2022–2029, 2003

Dixon, A. G., Walls, G., Stanness, H., Nijemeisland, M., Stitt, E. H., Experimental validation of high Reynolds number CFD simulations of heat transfer in a pilot-scale fixed bed tube. *Chemical Engineering Journal*, n 200–202, pp.344–356, 2012

Dixon, A. G., Nijemeisland, M., Stitt, E. H., CFD Study of heat transfer near and at the wall of a fixed bed reactor tube: effect of wall conduction. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 44, n. 16, pp. 6342 - 6353, 2005.

Dixon, A. G., van Dongeren, J. H, The influence of the tube and particle diameters at constant ratio on heat transfer in packed beds. *Chemical Engineering and Processing*, vol. 37, n. 01, pp. 23 - 32, 1998.

Dixon, A. G., An improved equation for the overall heat transfer coefficient in packed beds. *Chemical Engineering Processing*, vol. 35, pp. 323-331, 1996.

Dixon, A. G., Angular temperature variations in fixed beds of spheres. *Proc. Nat. Heat Transfer Conf.*, pp.55, Atlanta, 1993.

Dullien, F.A.L., *Porous Media. Fluid Transport and Pore Structure*. 2 ed, Academic Press, 1992.

Eppinger, T, Seidler, K., Kraume, M., DEM-CFD simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios. *Chemical Engineering Journal*, vol. 166, n. 01, pp. 324–331, 2011.

Ferreira, L. M., Castro, J. A. M., Rodrigues, A. E., An analytical and experimental study of heat transfer in fixed bed. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 45, n. 05, pp. 951 – 961, 2002.

Fogler, H. S., *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. 4ª ed., Rio de Janeiro: LTC Editora, 2009, 888 p.

Freire, J.T., *Transferência de calor em meios porosos*. Tese de doutorado. Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ, 1979, 223 p.

Froment, G. F., Bischoff, K.B., Chemical Reactor Analysis and Design. 3th ed., John Wiley & Sons, NewYork, 2010, 900 p.

Guardo, A., Coussirat, M., Recasens, F., Larrayoz, M.A. , Escaler, X, CFD study on particle-to-fluid heat transfer in fixed bed reactors: Convective heat transfer at low and high pressure. Chemical Engineering Science, vol. 61, n. 13, pp. 4341 - 4353, 2006.

Giudici, R., Nascimento, C. A. O., Transferência de calor em reator catalítico de leito fixo II: modelos. Anais do XVII ENEMP, São Carlos-SP, 1989.

Giudici, R., Nascimento, C. A. O., Analysis of a ring-shaped sensor for use in packed-bed heat transfer studies. Canadian Journal of Chemical Engineering, vol. 72, n. 01, pp. 43-49, 1994.

Happel, J., Brenner, H., Low Reynolds number hydrodynamics with special applications to particulate media. Kluwer Academic Publishers, London, 1991.

Hill, C. G. Jr., Tatcher, W. R., An Introduction to Chemical Engineering Kinetics & Reactor Design, 2nd ed, John Wiley & Sons, NewYork, 2014, 576 p.

Hoffmann, L.; Bradley, G. L., Cálculo: um curso moderno e suas aplicações. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

Incropera, F. P., Witt, D.P. de, Fundamentos de transferência de calor e massa. 3 ed. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A, 1992.

Iordanidis A. A., Annaland M. van Sint, Kronberg A. E. and Kuipers J. A. M., A numerical method for the solution of the wave model and convection dominated diffusion type models for catalytic packed bed reactors. Computers & Chemical Engineering, vol. 28, n. 11, pp. 2337-2349, 2004.

Jumah, R. Y., Mujumdar, A. S., Raghavan, G. S. V., Um modelo matemático para a secagem em batelada constante e intermitente de grãos em um novo leito gerado a jato giratório, *Drying Technology*, vol.14, n. 03 & 04 , pp.765-802, 1996

Koning, G. W., Kronberg, A. E., van Swaaij, W. P. M., Improved one-dimensional model of a tubular packed bed reactor. *Chemical Engineering Science*, vol. 61, n. 10, pp. 3167 -3175, 2006.

Kreyszig, E. *Advanced engineering mathematics*. 9th. ed., New York, John Wiley & Sons, 2006.

Laguerre ,O., Ben Amara, S., Flick ,D., Heat transfer between wall and packed bed crossed by low velocity airflow. *Applied Thermal Engineering*, vol. 26, n. 16, pp. 1951-1960, 2006

Laguerre ,O., Ben Amara, S., Alvarez, G., Flick ,D., Transient heat transfer by free convection in a packed bed of spheres: Comparison between two modelling approaches and experimental results. *Applied Thermal Engineering*, vol. 28, n. 1, pp. 14-24, 2008

Levenspiel, O., *Engenharia das Reações Químicas* (tradução 3ª ed americana). São Paulo: Edgard Blucher Editora LTDA, 2000, 584 p.

Li, C.H., Finlayson, B.A., Heat transfer in packed beds - a reevaluation. *Chemical Engineering Science*, vol. 32, n. 09, pp. 1055-1066, 1977.

Lima, A. G. B., Fenômeno da difusão em sólidos esferoidais prolatos. Caso estudado: secagem de banana. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brasil, 1999, 244 p.

Lucena, I.D., Transferência de calor em reator de leito fixo: modelagem e simulação. XVIII JORNADA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO CURSO - Período 2016.1. Unidade Acadêmica de Engenharia Mecânica – UFCG.

McGreavy, C., Maciel Filho, R., Influence of Flow Distribution on Heat Transfer in Multitubular Catalytic Reactors. 3rd Latin American Cont: Heat and Mass Transfer, Mexico, 1988.

Maciel Filho, R., Domingues, A., A Multitubular Reactor for Obtention of Acetaldehyde by Oxidation of Ethyl Alcohol. Chemical Engineering Science, vol. 47, n. 9 -11, pp. 2571-2576, 1992.

Magnus, W., Oberhettinger, F.; Soni, R. P., Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics. Berlim, Springer - Verlag, 1966.

Maliska, C. R., Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. Rio de Janeiro: LCT-Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 2004, 456 p.

Martins, A. A. A., Fenômenos de transporte em meios porosos. Escoamento monofásico e transporte de massa. Tese de doutorado, Faculdade de engenharia (FEUP) – Universidade do Porto, 2006, 784 p.

McCabe, W.L., Smith, J.C, Harriot, P., Unit Operations of Chemical Engineering. McGraw - Hill International Editions, 4 ed, 1993.

McGreavy, C., Maciel Filho, R., Dynamics and Control of Chemical Reactors. IFAC Dynamic and Control of Chemical Reactors, Maastricht, Holanda, 1989.

MacRobert, T. M., Spherical Harmonics: an elementary treatise on harmonic functions with applications. Oxford, Pergamon Press, 1967.

Moreira, M. F. P., Ferreira, M. C., Freire, J. T., Evaluation of pseudohomogeneous models for heat transfer in packed beds with gas flow and gas-liquid cocurrent downflow and upflow. Chemical Engineering Science, vol. 61, n. 06, pp. 2056 - 2068, 2006.

Morse, P. M., Feshbach, H., Methods of theoretical physics. Part I. New York: Mc Graw-Hill Book Company, Inc., 1953 a, pp. 557-560.

Mueller, G. E., Radial void reaction distributions in randomly packed fixed beds of uniformly sized spheres in cylindrical containers, *Powder Technol.*, vol.72, n. 03, pp. 269-275 1992.

Mueller, G.E., Numerically packing spheres in cylinders, *Powder Technology*, vol.159, n.02, pp. 105–110, 2005.

Natarajan, S., Zhang, C., Briens, C., Numerical simulation and experimental verification of gas flow through packed beds. *Powder Technology*, vol. 152, n. 01, pp. 31- 40, 2005.

Nield, D. A., Bejan, A., *Convection in porous media*. New York, Springer-Verlag, 1992, 408 p.

Nijemeisland, M., Dixon, A. G., Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas–solid fixed bed. *Chemical Engineering Journal*, vol. 82 n. 01, pp. 231–246, 2001.

Oliveira, L. G., *Transferência de calor em reator cilíndrico elíptico de leito fixo: aspectos termofluidodinâmicos e geométricos*. Tese de doutorado, Universidade Federal de Campina Grande –PB, 2004, 172 p.

Pakowski, Z., Bartczak, Z., Strumillo, C., Stenström, S., *Avaliação de equações que aproximam as propriedades termodinâmicas e de transporte da água, vapor e ar para uso em processos de secagem*, *Tecnologia de Secagem*, vol. 09, n. 3, pp 753 -773, 1991.

Patankar, S. V., *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York: Hemisphere Publishing Corporation, 1980, 197 p.

Pirkle jr., J. C., Reyes, S. C., Hagan, P. S., Khesgid, H., Solution of dynamic distributed parameter model of nondiabatic fixed – bed reactor. *Computers and Chemical Engineering*, vol. 11, n. 06, pp. 737-747, 1987.

Ranz, W.E., Marshall Jr., W.R., Evaporation from drops: part 1. *Chemical Engineering Progress*, vol. 48, n. 03, pp. 173–180, 1952.

Rawlings, J.B., Ekerdt, J.G., *Chemical Reactor Analysis and Design Fundamentals*. Madison, WI, USA: Nob Hill Publishing, 2002, 609 p.

Sahimi, M., *Flow and Transport in Porous Media in Fractured Rock. From Classical Methods to Modern Approches*. Springer - Verlag, 1995.

Schröder, E., Andreas, C., Krebs, L., Measurements of heat transfer between particles and gas in packed beds at low to medium Reynolds numbers. *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 30, n. 06, 545-558, 2006.

Schouten, E. P. S., Westerterp, K. R., Angular temperature variations in a wall-cooled packed-bed reactor. *AIChE J.*, vol. 42, n. 9, pp. 2635-2644, 1996

Silva Filho, A. G., *Transpote de calor em reator cilíndrico elíptico de leito fixo recheado de particulas: modelagem, simulação e otimização*. Tese de doutorado, Universidade Federal de Campina Grande –PB, 2013, 170 p.

Stüber, F., Vázquez, A.M., Larrayoz, M.A., Recasens, F., Supercritical fluid extraction of packed beds: external mass transfer in upflow and downflow operation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 35, n. 10, pp. 3618 - 3628, 1996

Stewart, J.: *Cálculo - Vol. 2*, 6 ed, Editora Pioneira Thomson Learning, 2009.

Thoméo, J. C., Freire, J. T., Heat transfer in fixed bed: a model non-linearity approach. *Chemical Engineering Science*, vol. 55, n. 12, pp. 2329 -2338, 2000.

Tsotsas, E., Schlünder, E.U., Heat transfer in packed beds with fluid flow: remarks on the meaning and the calculation of a heat transfer coefficient at the wall. *Chemical Engineering Science*, vol.45, n. 04, pp. 819-837, 1990.

Wakao, N., Kaguei, S., Funazkri, T., Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid heat transfer coefficients in packed beds: correlation of Nusselt numbers. *Chemical Engineering Science*, vol. 34, n. 03, pp. 325 – 336, 1979.

Wash, A. P., Froment, G. F., Heat transfer in packed beds. *Chemical Engineering Science*, vol. 27, n. 03, pp. 567-576, 1972.

Wen, D., Cong, T. N., He, Y., Chen, H., Ding, Y. Heat transfer of gas–solid two-phase mixtures flowing through a packed bed. *Chemical Engineering Science*, vol. 62, n. 16, pp. 4241 -4249, 2007.

Wen, D., Ding, Y., Heat transfer of gas flow through a packed bed, *Chemical Engineering Science*, vol. 61, n. 11, pp. 3532 - 3542, 2006

Wehinger, G.D., Eppinger, T., Kraume, M., Detailed numerical simulations of catalytic fixed-bed reactors: Heterogeneous dry reforming of methane. *Chemical Engineering Science*, vol. 122, n. 13, pp. 197 - 209, 2015.

Wijngaarden, R. J., Westerterp, K. R., The statistical character of packed beds heat transport properties. *Chemical Engineering Science*, vol. 47, n. 12, pp. 3125 - 3129, 1992.

Yang, J., Wang, Q., Zeng, M., Nakayama, A., Computational study of forced convective heat transfer in structured packed beds with spherical or ellipsoidal particles. *Chemical Engineering Science*, vol. 65, n. 02, pp. 726 - 738, 2010.

ANEXO

CÓDIGO COMPUTACIONAL PARA O CASO 1

```
Remove["Global`*"]
```

(* Entrada dos dados iniciais do problema do transporte de calor no leito fixo *)

```
L1=0.05 (*m*);
L2=0.075;
zmax=.2;
L=Sqrt[(L2^2)-(L1^2)];
dp=0.004;
Req=Sqrt[L1 L2];
esp=0.02;
Lext=Sqrt[((L2+esp)^2)-((L1+esp)^2)]
Pint=Pi L2 (2-((L/L2)^2)/2+3 ((L/L2)^4)/16);
Pext=Pi (L2+esp) (2-((Lext/(L2+esp))^2)/2+3 ((Lext/(L2+esp))^4)/16);
Aint= Pi L1 L2;
Aext=Pi (L2+esp) (L1+esp);
Dhint=4 Aint/Pint;
Dhanul=4 (Aext-Aint)/(Pext+Pint);
```

```
a=1;
b=20;
tfinal=4.6;
dt=0.05;
t=dt;
q=0;
To=70;
Tw=30;
tinf=30;
uz=0.1;roini=1.09488;
miini=2.02523*10^(-5);
cpini=1.00*1000;
condini=0.1;
Prdtl=0.707;
porosini=0.40;
mm=tfinal/dt;
rrr=0;
ΔH=0;
Ea=38000;
m=1;
Ca=0.8;
Ao=9.4*10^9;
R=8.314;
0.0642262
npksi=20;
npeta=20;
npz=20;
```

```
ksi=Table[0,{i,1,npksi}];
```

```

eta=Table[0,{j,1,npeta}];
z=Table[0,{k,1,npz}];
ksis=Table[0,{i,1,npksi}];
etaw=Table[0,{j,1,npeta}];
zt=Table[0,{k,1,npz}];
ksin=Table[0,{i,1,npksi}];
etae=Table[0,{j,1,npeta}];
zf=Table[0,{k,1,npz}];
x=Array[0&,{npksi,npeta}];
y=Array[0&,{npksi,npeta}];
erreo=Array[0&,{npksi,npeta}];
aux=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
ap=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
apo=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
ae=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
aw=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
an=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
as=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
at=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
af=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
fhi0=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
fhiold=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
fhiant=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
fhi=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
fhistar=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
cond=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
conde=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
condw=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
condn=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
conds=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
condf=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
condt=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
ro=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
roold=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
roe=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
row=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
ron=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
ros=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
rof=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
rot=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
poros=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
porosold=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
porosf=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
porost=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
cp=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
cpold=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
cpe=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
cpw=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];
cpn=Array[0&,{npksi,npeta,npz}];

```

```

cps=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
cpf=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
cpt=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
mi=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
miold=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
mie=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
miw=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
min=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
mis=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
mif=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
mit=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
uzp=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
uzf=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
uzt=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
reya=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
reyw=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
reyn=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
reys=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
reyf=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
reyt=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
pre=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
prw=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
prn=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
prs=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
prf=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
prt=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
pece=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
pecw=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
pecn=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
pecs=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
pecf=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
pect=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
betae=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
betaw=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
betan=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
betas=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
betaf=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
betat=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
alfaf=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];
alfat=Array[0&,{ npksi,npeta,npz }];

listfhi=Table[0.,{i,1,npksi*npeta*npz}];
z0fhi=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
z0fhcart=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
zeentY=Table[0.,{i,1,npksi}];
zeentX=Table[0.,{i,1,npksi+npeta-1}];
zemetY=Table[0.,{i,1,npksi}];
zemetX=Table[0.,{i,1,npksi+npeta-1}];
zeoutY=Table[0.,{i,1,npksi}];

```

```

zeoutX=Table[0.,{i,1,npksi+npeta-1}];
zL4fhi=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
zL4fhicart=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
zL2fhi=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
zL2fhicart=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
zLfhi=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
zLfhicart=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
distporos=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
perfiltemp=Table[0.,{i,1,npksi*npeta}];
SEx=Table[0.,{i,1,(npeta+npksi-1)*(npz-1)}];
SExcart=Table[0.,{i,1,(npeta+npksi-1)*(npz-1)}];
SEy=Table[0.,{i,1,npksi*(npz-1)}];
SEycart=Table[0.,{i,1,npksi*(npz-1)}];
grafz0fhi=Table[0.,{i,1,mm}];
grafz0fhicart=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzeentY=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzeentX=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzL4fhi=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzL4fhicart=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzL2fhi=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzL2fhicart=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzemetY=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzemetX=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzLfhi=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzLfhicart=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzeoutY=Table[0.,{i,1,mm}];
grafzeoutX=Table[0.,{i,1,mm}];
grafSEx=Table[0.,{i,1,mm}];
grafSExcart=Table[0.,{i,1,mm}];
grafSEy=Table[0.,{i,1,mm}];
grafSEycart=Table[0.,{i,1,mm}];
grafdistporos=Table[0.,{i,1,mm}];
auxgraffhi=Table[0.,{i,1,mm}];
graffhi=Table[0.,{i,1,mm}];
graffhimed=Table[0.,{i,1,mm}];

```

```

dksi=(L2/L-1)/(npksi-2);
deta=1/(npeta-2);
dz=zmax/(npz-2);
(* *)
ksi[[1]]=1;
eta[[1]]=0;
z[[1]]=0;
ksi[[2]]=ksi[[1]]+dksi/2;
eta[[2]]=eta[[1]]+deta/2;
z[[2]]=z[[1]]+dz/2;

```

```

Do[
  Do[
    Do[
      ksi[[i]]=ksi[[i-1]]+dksi;
      eta[[j]]=eta[[j-1]]+deta;
      z[[k]]=z[[k-1]]+dz;
      , {i,3,npksi-1};
      , {j,3,npeta-1};
      , {k,3,npz-1};

ksi[[npksi]]=L2/L;
eta[[npeta]]=1;
z[[npz]]=zmax;
Do[
  Do[
    x[[i,j]]=L ksi[[i]] eta[[j]];
    y[[i,j]]=L Sqrt[(1-eta[[j]]^2) (ksi[[i]]^2-1)];
    (*erreo[[i,j]]=Sqrt[L2^2 (x[[i,j]]^2/(y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)+L1^2
(y[[i,j]]^2/(y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)));*)
    If[i==1&&j==1,erreo[[i,j]]=L1,erreo[[i,j]]=Sqrt[((L1 L2)^2 (x[[i,j]]^2+y[[i,j]]^2))/((L1
x[[i,j]]^2+(L2 y[[i,j]]^2))];

    , {i,1,npksi};
    , {j,1,npeta};

fhio=Array[Tw&,{ npksi,npeta,npz }];
Do[ Do[fhio[[i,j,1]]=To;
  , {i,1,npksi};
  , {j,1,npeta};

mio=Array[miini&,{ npksi,npeta,npz }];
roo=Array[roini&,{ npksi,npeta,npz }];
cpo=Array[cpini&,{ npksi,npeta,npz }];
poroso=Array[porosini&,{ npksi,npeta,npz }];
condo=Array [condini&,{ npksi,npeta,npz }];
Do[Do[Do[
  mio[[i,j,k]]=1.691*10^(-5)-4.984*10^(-8)*fhio[[i,j,k]]+3.187*10^(-
11)*(fhio[[i,j,k]])^2+1.3196 *10^(-14)*(fhio[[i,j,k]])^3;
  roo[[i,j,k]]=(101325*28.966)/(8314.34*(fhio[[i,j,k]]+273.15));
  cpo[[i,j,k]]=1.00926*10^3-(4.0403*10^(-2))*fhio[[i,j,k]]+(6.1759*10^(-
4))*fhio[[i,j,k]]^2-(4.097 *10^(-7))*(fhio[[i,j,k]])^3;
  condo[[i,j,k]]=2.425*10^(-2)+7.889*10^(-5)*fhio[[i,j,k]]-1.907*10^(-8)*(fhio[[i,j,k]])^2-
8.570*10^(-12)*(fhio[[i,j,k]])^3;

```

```

poroso[[i,j,k]]=(1-porosini) Exp[-b(L1 -y[[i,1]])] Jo((a (L1 -y[[i,1]]))/dp)+porosini;
(*poroso[[i,j,k]]=(1-porosini) exp(-20 (L1 Sqrt[1-x[[i,j]]^2/(L2)^2]-y[[i,j]])) Subscript[J,
0]((L1 ( Sqrt[1-x[[i,j]]^2/(L2)^2)-y[[i,j]])/dp)+porosini;*)
, {i,1,npksi}};
, {j,1,npeta}};
, {k,1,npz}};

```

```

emed=Sum [poroso[[i,j,k]] ( L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)]
)*dksi*deta*dz,{i,2,npksi-1},{j,2,npeta-1},{k,2,npz-1}]/Sum[( L^2*(ksi[[i]]^2-
eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)] )*dksi*deta*dz,{i,2,npksi-1},{j,2,npeta-
1},{k,2,npz-1}];

```

```
Rey=8000;
```

```
vel=Rey/(995.6502 Dhanul/(79.8 10^(-5)));
```

```
Reh=(roini uz Dhint)/miini;
```

```
Rep=2 (roini emed uz dp)/(3 miini (1-emed));
```

```
f=(0.79 Log[Rey ]- 1.64)^(-2);
```

```
Nu=((f/8) (Rey-1000) Prdtl)/(1+12.7 (f /8)^(1/2) (Prdtl^(2/3)-1));
```

```

Do[ Do[fhio[[i,j,1]]=To(*Tw-2 uz (erreo[[i,j]]/2)^2/(condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]]
cpo[[i,j,1]]))*((Tw-To) 48 condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]])/(11 uz (erreo[[i,j]]/2)^2))
(3/16+1/16 (Sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)/erreo[[i,j]]^4-1/4
(Sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)/erreo[[i,j]]^2);*)
(*Tw-2 uz (erreo[[i,j]]^2/(condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]]))*((Tw-To) 48
condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]])/(11 uz (erreo[[i,j]]^2)) (3/16+1/16
(Sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)/erreo[[i,j]]^4-1/4 (Sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)/erreo[[i,j]]^2);*)
, {i,1,npksi}};
, {j,1,npeta}};

```

```
fhi=fhio;
```

```
ro=roo;
```

```
cp=cpo;
```

```
mi=mio;
```

```
cond=condo;
```

```
poros=poroso;
```

```
fhimedio=0.1;
```

```
While [t<=tfinal&&fhimedio>0.001,
```

```
dksi=(L2/L-1)/(npksi-2);
```

```
deta=1/(npeta-2);
```

```
dz=zmax/(npz-2);
```

```
(* *)
```

```
ksi[[1]]=1;
```

```
eta[[1]]=0;
```

```
z[[1]]=0;
```

```
ksi[[2]]=ksi[[1]]+dksi/2;
```

```

eta[[2]]=eta[[1]]+deta/2;
z[[2]]=z[[1]]+dz/2;
Do[
  Do[
    Do[
      ksi[[i]]=ksi[[i-1]]+dksi;
      eta[[j]]=eta[[j-1]]+deta;
      z[[k]]=z[[k-1]]+dz;
      , {i,3,npksi-1};
      , {j,3,npeta-1};
      , {k,3,npz-1};
    (* *)
ksi[[npksi]]=L2/L;
eta[[npeta]]=1;
z[[npz]]=zmax;
    (* *)
  Do[
    Do[
      Do[
        ksin[[i]]=ksi[[i]]+dksi/2;
        ksis[[i]]=ksi[[i]]-dksi/2;
        etaw[[j]]=eta[[j]]+deta/2;
        etae[[j]]=eta[[j]]-deta/2;
        zf[[k]]=z[[k]]+dz/2;
        zt[[k]]=z[[k]]-dz/2;
        , {i,2,npksi-1};
        , {j,2,npeta-1};
        , {k,2,npz-1};
      ]
    ]
  ]

Do[
  Do[
    x[[i,j]]=L ksi[[i]] eta[[j]];
    y[[i,j]]=L Sqrt[(1-eta[[j]]^2) (ksi[[i]]^2-1)];
    If[i==1&&j==1,erreo[[i,j]]=L1,erreo[[i,j]]=Sqrt[((L1 L2)^2 (x[[i,j]]^2+y[[i,j]]^2))/((L1
x[[i,j]]^2+(L2 y[[i,j]]^2)))]];
    , {i,1,npksi};
    , {j,1,npeta};
  ]
]

eps =10^(-9);
iter=0;
erro=100.;
fhiold=fhi;
roold=ro;
porosold=poros;
miold=mi;
cpold=cp;
condold=cond;

```

kw=1*10³⁰;
 hf=(2.06/εmed) Rep^{-0.575} Prdt^{1/3} roini uz εmed cpini;
 hw=Nu 0.61/Dhanul;

```

Do [
  Do[
    Do[
      cp[[i,j,k]]=1.00926*103-(4.0403*10(-2))*fhi[[i,j,k]]+(6.1759*10(-4))*(fhi[[i,j,k]])2-
      (4.097 *10(-7))*(fhi[[i,j,k]])3;cond[[i,j,k]]=2.425*10(-2)+7.889*10(-5)*fhi[[i,j,k]]-
      1.907*10(-8)*(fhi[[i,j,k]])2-8.570*10(-12)*(fhi[[i,j,k]])3;
      mi[[i,j,k]]=1.691*10(-5)-4.984*10(-8)*fhi[[i,j,k]]+3.187*10(-11)*(fhi[[i,j,k]])2+1.3196 *10(-14)*(fhi[[i,j,k]])3;
      ro[[i,j,k]]=(101325*28.966)/(8314.34*(fhi[[i,j,k]]+273.15));
      (*porosold [[i,j,k]] =(1-porosini) exp(-20 (L1-Sqrt[y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)) Subscript[J,
      0]((L1-Sqrt[y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)/dp)+porosini;
      poros [[i,j,k]] =(1-porosini) exp(-20 (L1-Sqrt[y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)) Subscript[J,
      0]((L1-Sqrt[y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)/dp)+porosini;*)(*porosold[[i,j,k]]=(1-porosini) exp(-20
      (L1 Sqrt[1-x[[i,j]]2/(L2)2]-y[[i,j]])) Subscript[J, 0]((L1 ( Sqrt[1-x[[i,j]]2/(L2)2)-
      y[[i,j]])/dp)+porosini;
      poros[[i,j,k]]=(1-porosini) exp(-20 (L1 Sqrt[1-x[[i,j]]2/(L2)2]-y[[i,j]])) Subscript[J,
      0]((L1 ( Sqrt[1-x[[i,j]]2/(L2)2)-y[[i,j]])/dp)+porosini;*)
      porosold[[i,j,k]]=(1-porosini) Exp[-b (L1 -y[[i,1]])] J0((a (L1 -y[[i,1]]))/dp)+porosini;

      poros[[i,j,k]]=(1-porosini) Exp[-b (L1 -y[[i,1]])] J0((a (L1 -y[[i,1]]))/dp)+porosini;
      uzp[[i,j,k]]= 2*uz/2;(**(1-(y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)/erreo[[i,j]]2);*)

      ,{i,1,npksi}};
      ,{j,1,npeta}};
      ,{k,1,npz}};

```

```

(*Do[Do[fhio[[i,j,1]]=Tw-2 uz erreo[[i,j]]2/(condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]]))*((Tw-
To) 48 condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]])/(11 uz erreo[[i,j]]2)) (3/16+1/16
(Sqrt[y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)/erreo[[i,j]]4-1/4
(Sqrt[y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)/erreo[[i,j]]2);,{i,1,npksi}};
, {j,1,npeta}};*)

```

```

(*Do[Do[fhiold[[i,j,1]]=Tw-2 uz erreo[[i,j]]2/(condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]]))*((Tw-
To) 48 condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]])/(11 uz erreo[[i,j]]2)) (3/16+1/16
(Sqrt[y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)/erreo[[i,j]]4-1/4
(Sqrt[y[[i,j]]2+(x[[i,j]])2)/erreo[[i,j]]2);,{i,1,npksi}};
, {j,1,npeta}};*)

```

```

Do [
  Do [

```

Do [

$$\text{condw}[[i,j,k]]=(2*\text{cond}[[i,j,k]]*\text{cond}[[i,j+1,k]])/(\text{cond}[[i,j,k]]+\text{cond}[[i,j+1,k]]);$$

$$\text{conde}[[i,j,k]]=(2*\text{cond}[[i,j,k]]*\text{cond}[[i,j-1,k]])/(\text{cond}[[i,j,k]]+\text{cond}[[i,j-1,k]]);$$

$$\text{condn}[[i,j,k]]=(2*\text{cond}[[i,j,k]]*\text{cond}[[i+1,j,k]])/(\text{cond}[[i,j,k]]+\text{cond}[[i+1,j,k]]);$$

$$\text{conds}[[i,j,k]]=(2*\text{cond}[[i,j,k]]*\text{cond}[[i-1,j,k]])/(\text{cond}[[i,j,k]]+\text{cond}[[i-1,j,k]]);$$

$$\text{condf}[[i,j,k]]=(2*\text{cond}[[i,j,k]]*\text{cond}[[i,j,k+1]])/(\text{cond}[[i,j,k]]+\text{cond}[[i,j,k+1]]);$$

$$\text{condt}[[i,j,k]]=(2*\text{cond}[[i,j,k]]*\text{cond}[[i,j,k-1]])/(\text{cond}[[i,j,k]]+\text{cond}[[i,j,k-1]]);$$

$$\text{row}[[i,j,k]]=(2*\text{ro}[[i,j,k]]*\text{ro}[[i,j+1,k]])/(\text{ro}[[i,j,k]]+\text{ro}[[i,j+1,k]]);$$

$$\text{roe}[[i,j,k]]=(2*\text{ro}[[i,j,k]]*\text{ro}[[i,j-1,k]])/(\text{ro}[[i,j,k]]+\text{ro}[[i,j-1,k]]);$$

$$\text{ron}[[i,j,k]]=(2*\text{ro}[[i,j,k]]*\text{ro}[[i+1,j,k]])/(\text{ro}[[i,j,k]]+\text{ro}[[i+1,j,k]]);$$

$$\text{ros}[[i,j,k]]=(2*\text{ro}[[i,j,k]]*\text{ro}[[i-1,j,k]])/(\text{ro}[[i,j,k]]+\text{ro}[[i-1,j,k]]);$$

$$\text{rof}[[i,j,k]]=(2*\text{ro}[[i,j,k]]*\text{ro}[[i,j,k+1]])/(\text{ro}[[i,j,k]]+\text{ro}[[i,j,k+1]]);$$

$$\text{rot}[[i,j,k]]=(2*\text{ro}[[i,j,k]]*\text{ro}[[i,j,k-1]])/(\text{ro}[[i,j,k]]+\text{ro}[[i,j,k-1]]);$$

$$\text{miw}[[i,j,k]]=(2*\text{mi}[[i,j,k]]*\text{mi}[[i,j+1,k]])/(\text{mi}[[i,j,k]]+\text{mi}[[i,j+1,k]]);$$

$$\text{mie}[[i,j,k]]=(2*\text{mi}[[i,j,k]]*\text{mi}[[i,j-1,k]])/(\text{mi}[[i,j,k]]+\text{mi}[[i,j-1,k]]);$$

$$\text{min}[[i,j,k]]=(2*\text{mi}[[i,j,k]]*\text{mi}[[i+1,j,k]])/(\text{mi}[[i,j,k]]+\text{mi}[[i+1,j,k]]);$$

$$\text{mis}[[i,j,k]]=(2*\text{mi}[[i,j,k]]*\text{mi}[[i-1,j,k]])/(\text{mi}[[i,j,k]]+\text{mi}[[i-1,j,k]]);$$

$$\text{mif}[[i,j,k]]=(2*\text{mi}[[i,j,k]]*\text{mi}[[i,j,k+1]])/(\text{mi}[[i,j,k]]+\text{mi}[[i,j,k+1]]);$$

$$\text{mit}[[i,j,k]]=(2*\text{mi}[[i,j,k]]*\text{mi}[[i,j,k-1]])/(\text{mi}[[i,j,k]]+\text{mi}[[i,j,k-1]]);$$

$$\text{cpw}[[i,j,k]]=(2*\text{cp}[[i,j,k]]*\text{cp}[[i,j+1,k]])/(\text{cp}[[i,j,k]]+\text{cp}[[i,j+1,k]]);$$

$$\text{cpe}[[i,j,k]]=(2*\text{cp}[[i,j,k]]*\text{cp}[[i,j-1,k]])/(\text{cp}[[i,j,k]]+\text{cp}[[i,j-1,k]]);$$

$$\text{cpn}[[i,j,k]]=(2*\text{cp}[[i,j,k]]*\text{cp}[[i+1,j,k]])/(\text{cp}[[i,j,k]]+\text{cp}[[i+1,j,k]]);$$

$$\text{cps}[[i,j,k]]=(2*\text{cp}[[i,j,k]]*\text{cp}[[i-1,j,k]])/(\text{cp}[[i,j,k]]+\text{cp}[[i-1,j,k]]);$$

$$\text{cpf}[[i,j,k]]=(2*\text{cp}[[i,j,k]]*\text{cp}[[i,j,k+1]])/(\text{cp}[[i,j,k]]+\text{cp}[[i,j,k+1]]);$$

$$\text{cpt}[[i,j,k]]=(2*\text{cp}[[i,j,k]]*\text{cp}[[i,j,k-1]])/(\text{cp}[[i,j,k]]+\text{cp}[[i,j,k-1]]);$$

$$\text{porosf}[[i,j,k]]=(2*\text{poros}[[i,j,k]]*\text{poros}[[i,j,k+1]])/(\text{poros}[[i,j,k]]+\text{poros}[[i,j,k+1]]);$$

$$\text{porost}[[i,j,k]]=(2*\text{poros}[[i,j,k]]*\text{poros}[[i,j,k-1]])/(\text{poros}[[i,j,k]]+\text{poros}[[i,j,k-1]]);$$

$$\text{deltazf}=z[[k+1]]-z[[k]];$$

$$\text{deltazt}=z[[k]]-z[[k-1]];$$

$$\text{uzf}[[i,j,k]]=\text{uzp}[[i,j,k]]*\text{deltazf};$$

$$\text{uzt}[[i,j,k]]=\text{uzp}[[i,j,k]]*\text{deltazt};$$

pecf[[i,j,k]]=porosf[[i,j,k]]*(rof[[i,j,k]]*cpf[[i,j,k]]*uzf[[i,j,k]])/condf[[i,j,k]];pect[[i,j,k]]=porost[[i,j,k]]*(rot[[i,j,k]]*cpt[[i,j,k]]*uzt[[i,j,k]])/condt[[i,j,k]];

alfaf[[i,j,k]]=pecf[[i,j,k]]^2/(10+2*pecf[[i,j,k]]^2);
 alfat[[i,j,k]]=pect[[i,j,k]]^2/(10+2*pect[[i,j,k]]^2);
 betae[[i,j,k]]=1.;
 betaw[[i,j,k]]=1.;
 betan[[i,j,k]]=1.;
 betas[[i,j,k]]=1.;

betaf[[i,j,k]]=(1+0.005*pecf[[i,j,k]]^2)/(1+0.05*pecf[[i,j,k]]^2);

betat[[i,j,k]]=(1+0.005*pect[[i,j,k]]^2)/(1+0.05*pect[[i,j,k]]^2);

apo[[i,j,k]]=(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)*roold[[i,j,k]]*porosold[[i,j,k]]*cpold[[i,j,k]]*dksi*deta*dz)/(Sqrt((ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2))*dt);
 ae[[i,j,k]]=(Sqrt((1-etae[[j]]^2)/(ksi[[i]]^2-1))*conde[[i,j,k]]*betae[[i,j,k]]*dksi*dz)/(eta[[j]]-eta[[j-1]]);
 aw[[i,j,k]]=(Sqrt((1-etaw[[j]]^2)/(ksi[[i]]^2-1))*condw[[i,j,k]]*betaw[[i,j,k]]*dksi*dz)/(eta[[j+1]]-eta[[j]]);
 an[[i,j,k]]=(Sqrt((ksin[[i]]^2-1)/(1-eta[[j]]^2))*condn[[i,j,k]]*betan[[i,j,k]]*deta*dz)/(ksi[[i+1]]-ksi[[i]]);
 as[[i,j,k]]=(Sqrt((ksis[[i]]^2-1)/(1-eta[[j]]^2))*conds[[i,j,k]]*betas[[i,j,k]]*deta*dz)/(ksi[[i]]-ksi[[i-1]]);
 af[[i,j,k]]=(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt((ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)))*dksi*deta*(-rof[[i,j,k]]*cpf[[i,j,k]]*porosf[[i,j,k]]*uz*(1/2-alfaf[[i,j,k]])+betaf[[i,j,k]]*condf[[i,j,k]]/(z[[k+1]]-z[[k]]));
 at[[i,j,k]]=(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt((ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)))*dksi*deta*(rot[[i,j,k]]*cpt[[i,j,k]]*porost[[i,j,k]]*uz*(1/2+alfat[[i,j,k]])+betat[[i,j,k]]*condt[[i,j,k]]/(z[[k]]-z[[k-1]]));
 ap[[i,j,k]]=(ae[[i,j,k]]+aw[[i,j,k]]+an[[i,j,k]]+as[[i,j,k]]+(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt((ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)))*dksi*deta*(rof[[i,j,k]]*cpf[[i,j,k]]*porosf[[i,j,k]]*uz*(1/2+alfaf[[i,j,k]])+betaf[[i,j,k]]*condf[[i,j,k]]/(z[[k+1]]-z[[k]])))+(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt((ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)))*dksi*deta*(rot[[i,j,k]]*cpt[[i,j,k]]*porost[[i,j,k]]*uz*(1/2-alfat[[i,j,k]])+betat[[i,j,k]]*condt[[i,j,k]]/(z[[k]]-z[[k-1]])))+(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt((ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)))*dksi*deta*dz/dt;
 aaux[[i,j,k]]=0;
 If[i==npksi-1,
 (*Cálculo da Somatória das Resistências ao Transporte de calor, somaR *)
 soma1=1+condf[[i,j,k]]/kw+hf/hw;
 soma2=(hf*(ksi[[i+1]]-ksi[[i]])/kw)/(Sqrt((ksi[[i]]^2-1)/(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2))/L);

```

soma3=condf[[i,j,k]]/(hw*(ksi[[i+1]]-ksi[[i]]))*( Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)/(ksi[[i]]^2-
eta[[j]]^2))/L );
soma4=hf+condf[[i,j,k]]/(ksi[[i+1]]-ksi[[i]])*( Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)/(ksi[[i]]^2-
eta[[j]]^2))/L );
somaR=(soma1+soma2+soma3)/soma4;
(*Cálculo dos coeficientes aks e ap, para a condição de contorno na superfície,ou seja,
quando ksi = L2/L *)
apo[[i,j,k]]=(L^2*(ksi[[i]]^2-
eta[[j]]^2)*roold[[i,j,k]]*porosold[[i,j,k]]*cpold[[i,j,k]]*dksi*deta*dz)/(Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-
eta[[j]]^2)]*dt);
ae[[i,j,k]]=(Sqrt[(1-etae[[j]]^2)/(ksi[[i]]^2-
1))*conde[[i,j,k]]*betae[[i,j,k]]*dksi*dz)/(eta[[j]]-eta[[j-1]]);
aw[[i,j,k]]=(Sqrt[(1-etaw[[j]]^2)/(ksi[[i]]^2-
1))*condw[[i,j,k]]*betaw[[i,j,k]]*dksi*dz)/(eta[[j+1]]-eta[[j]]);
an[[i,j,k]]=0;
as[[i,j,k]]=(Sqrt[(ksis[[i]]^2-1)/(1-
eta[[j]]^2)]*conds[[i,j,k]]*betas[[i,j,k]]*deta*dz)/(ksi[[i]]-ksi[[i-1]]);
af[[i,j,k]]=(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)]*dksi*deta*(-
rof[[i,j,k]]*cpf[[i,j,k]]*porosf[[i,j,k]]*uz*(1/2-
alfaf[[i,j,k]])+betaf[[i,j,k]]*condf[[i,j,k]]/(z[[k+1]]-z[[k]]));
at[[i,j,k]]=(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-
eta[[j]]^2)]*dksi*deta*(rot[[i,j,k]]*cpt[[i,j,k]]*porost[[i,j,k]]*uz*(1/2+alfat[[i,j,k]])+betat[[i,j,
k]]*condt[[i,j,k]]/(z[[k]]-z[[k-1]]));
ap[[i,j,k]]=ae[[i,j,k]]+aw[[i,j,k]]+as[[i,j,k]]+( L^2*(ksi[[i]]^2-
eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)] )*dksi*deta*(
rof[[i,j,k]]*cpf[[i,j,k]]*porosf[[i,j,k]]*uz*(1/2+alfaf[[i,j,k]])
+betaf[[i,j,k]]*condf[[i,j,k]]/(z[[k+1]]-z[[k]]) )+( L^2*(ksi[[i]]^2-
eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)] )*dksi*deta*( -
rot[[i,j,k]]*cpt[[i,j,k]]*porost[[i,j,k]]*uz*(1/2-alfat[[i,j,k]])+betat[[i,j,k]]*condt[[i,j,k]]/(z[[k]]-
z[[k-1]]) )+(L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/(Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-
eta[[j]]^2)]))* (ro[[i,j,k]]*cp[[i,j,k]]*poros[[i,j,k]]*dksi*deta*dz)/dt+L*deta*dz*(Sqrt[(ksi[[i]]
^2-eta[[j]]^2)/(1-eta[[j]]^2)]/somaR);
aaux[[i,j,k]]=L*deta*dz*(Sqrt[(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/(1-eta[[j]]^2)]/somaR)*tinf[,];

,{i,2,npksi-1 }];
,{j,2,npeta-1 }];
,{k,2,npz-1 }];
Print["tempo = ",t," s"];
While[erro>=eps&&iter<=25000&&t>0,

iter=iter+1;
Print[iter," ",erro];
erro=0.0;
fhiant=fhi;

```

```

Do [
  Do [
    Do [

      fhiant[[1,j,k]]=fhiant[[2,j,k]];
      fhiant[[npksi,j,k]]=Tw;
      fhiant[[i,1,k]]=fhiant[[i,2,k]];
      fhiant[[i,npeta,k]]=fhiant[[i,npeta-1,k]];
      fhiant[[i,j,npz]]=fhiant[[i,j,npz-1]];
      fhiant[[i,j,1]]=To;(*Tw-2 uz (erreo[[i,j]]/2)^2/(condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]]
cpo[[i,j,1]]))*((Tw-To) 48 condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]])/(11 uz (erreo[[i,j]]/2)^2))
(3/16+1/16 (Sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)/erreo[[i,j]]^4-1/4
(Sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)/erreo[[i,j]]^2),*)

      fhi[[1,j,k]]=fhi[[2,j,k]];
      fhi[[npksi,j,k]]=Tw;
      fhi[[i,1,k]]=fhi[[i,2,k]];
      fhi[[i,npeta,k]]=fhi[[i,npeta-1,k]];
      fhi[[i,j,npz]]=fhi[[i,j,npz-1]];
      fhi[[i,j,1]]=To;(*Tw-2 uz (erreo[[i,j]]/2)^2/(condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]]))*((Tw-
To) 48 condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]])/(11 uz (erreo[[i,j]]/2)^2)) (3/16+1/16
(Sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)/erreo[[i,j]]^4-1/4 (Sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2)/erreo[[i,j]]^2),*)

      fhi[[i,j,k]]=( ae[[i,j,k]]*fhiant[[i,j-
1,k]]+aw[[i,j,k]]*fhiant[[i,j+1,k]]+an[[i,j,k]]*fhiant[[i+1,j,k]]+as[[i,j,k]]*fhiant[[i-
1,j,k]]+af[[i,j,k]]*fhiant[[i,j,k+1]]+at[[i,j,k]]*fhiant[[i,j,k-1]]+apo[[i,j,k]]*fhiold[[i,j,k]] -
Ao*ΔH*Ca^m*Exp[-Ea/(R*fhiold[[i,j,k]])]*dksi*deta*dz*L^2*(ksi[[i]]^2-
eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)]+aaux[[i,j,k]]/ap[[i,j,k]];
      fhi[[i,j,k]]=Re[fhi[[i,j,k]]];

      ,{i,2,npksi-1 }];
      ,{j,2,npeta-1 }];
      ,{k,2,npz-1 }];

    Do[
      Do[
        Do[
          erro=erro+( (fhiant[[i,j,k]]-tinf)/(fhi[[1,1,1]]-tinf)-( fhi[[i,j,k]]-tinf)/(fhi[[1,1,1]]-tinf))^2;
          ,{i,2,npksi-1 }];
          ,{j,2,npeta-1 }];
          ,{k,2,npz-1 }];
        ];
      ];
    ];
  ];
];

```

```

Do [
  Do [
    Do [
      fhi[[npksi,j,k]]=(tinf+fhi[[npksi-1,j,k]]*(soma1-
1+soma2+soma3))/(soma1+soma2+soma3);
      (* Estimativa dos valores de Temperatura nas regiões de Simetria *)
      (* Para os pontos de simetria em eta = 0 *)
      baux1=conde[[i,2,k]]/(eta[[3]]-eta[[2]]);
      baux2=Sqrt[(1-etae[[2]]^2)/(ksi[[i]]^2-etae[[2]]^2)];
      baux3=cond[[i,2,k]]/(eta[[2]]-eta[[1]]);
      baux4=Sqrt[(1-etaw[[2]]^2)/(ksi[[i]]^2-etaw[[2]]^2)];
      fhi[[i,1,k]]=(1+(baux1*baux2)/(baux3*baux4))*fhi[[i,2,k]]-
(baux1*baux2)/(baux3*baux4)*fhi[[i,3,k]];
      (* Para os pontos de simetria em eta = 1 *)
      baux5=condw[[i,npeta-1,k]]/(eta[[npeta-1]]-eta[[npeta-2]]);
      baux6=cond[[i,npeta-1,k]]/(eta[[npeta]]-eta[[npeta-1]]);
      fhi[[i,npeta,k]]=(1+(baux5*baux4)/(baux6*baux2))*fhi[[i,npeta-1,k]]-
(baux5*baux4)/(baux6*baux2)*fhi[[i,npeta-2,k]];
      (* Para os pontos de simetria em ksi = 1 *)
      baux7=condn[[2,j,k]]/(ksi[[3]]-ksi[[2]]);
      baux8=Sqrt[(ksin[[2]]^2-1)/(ksin[[2]]^2-eta[[j]]^2)];
      baux9=cond[[2,j,k]]/(ksi[[2]]-ksi[[1]]);
      baux10=Sqrt[(ksi[[2]]^2-1)/(ksi[[2]]^2-eta[[j]]^2)];
      fhi[[1,j,k]]=(1+(baux7*baux8)/(baux9*baux10))*fhi[[2,j,k]]-
(baux7*baux8)/(baux9*baux10)*fhi[[3,j,k]];
      (*Para os volumes na saída do reator*)
      baux11=condt[[i,j,npz-1]]/(z[[npz-1]]-z[[npz-2]]);
      baux12=cond[[i,j,npz-1]]/(z[[npz]]-z[[npz-1]]);
      fhi[[i,j,npz]]=(1+baux11/baux12)*fhi[[i,j,npz-1]]-baux11/baux12*fhi[[i,j,npz-2]];

      ,{i,2,npksi-1 }];
    ,{j,2,npeta-1 }];
    ,{k,2,npz-1 }];

Do [(fhi[[npksi,1,k]]=0.5*(3*fhi[[npksi-1,1,k]]-fhi[[npksi-2,1,k]]);*)
fhi[[npksi,1,k]]=fhi[[npksi,2,k]];
fhi[[npksi,npeta,k]]=0.5*(3*fhi[[npksi-1,npeta,k]]-fhi[[npksi-2,npeta,k]]);
fhi[[1,1,k]]=(deta/2*(0.5*(3*fhi[[1,2,k]]-fhi[[1,3,k]]))+dksi/2*(0.5*(3*fhi[[2,1,k]]-
fhi[[3,1,k]])))/(deta/2+dksi/2);
fhi[[1,npeta,k]]=(fhi[[2,npeta,k]]/dksi+fhi[[1,npeta-1,k]]/deta)/(1/dksi+1/deta),
{k,2,npz-1 }];

rrr=rrr+1;
kkk=0;
Do [Do [Do [kkk=kkk+1;
  fhistar[[i,j,k]]=(fhi[[i,j,k]]-tinf)/(fhi[[1,1,1]]-tinf);

```

```

listfhi[[kkk]]={ (ksi[[i]]-1)/(L2/L-1), eta[[j]], z[[k]]/zmax, (fhi[[i,j,k]]-tinf)/(fhi[[1,1,1]]-
tinf)};
, {i,1,npksi};
, {j,1,npeta};
, {k,1,npz};
jjj=0;
Do [Do [jjj=jjj+1;
z0fhi[[jjj]]={ (ksi[[i]]-1)/(L2/L-1), eta[[j]], z[[2]]/zmax, fhistar[[i,j,2]]};
z0fhicart[[jjj]]={ L*ksi[[i]]*eta[[j]], L*Sqrt[(1-eta[[j]]^2)*(ksi[[i]]^2-1)], fhistar[[i,j,2]]};
zL4fhi[[jjj]]={ (ksi[[i]]-1)/(L2/L-1), eta[[j]], z[[8]]/zmax, fhistar[[i,j,5]]};
zL4fhicart[[jjj]]={ L*ksi[[i]]*eta[[j]], L*Sqrt[(1-eta[[j]]^2)*(ksi[[i]]^2-1)], fhistar[[i,j,5]]};
zL2fhi[[jjj]]={ (ksi[[i]]-1)/(L2/L-1), eta[[j]], z[[0.5*npz]]/zmax, fhistar[[i,j,0.5*npz]]};
zL2fhicart[[jjj]]={ L*ksi[[i]]*eta[[j]], L*Sqrt[(1-eta[[j]]^2)*(ksi[[i]]^2-
1)], fhistar[[i,j,0.5*npz]]};
zLfhi[[jjj]]={ (ksi[[i]]-1)/(L2/L-1), eta[[j]], z[[npz-1]]/zmax, fhistar[[i,j,npz-1]]};
zLfhicart[[jjj]]={ L*ksi[[i]]*eta[[j]], L*Sqrt[(1-eta[[j]]^2)*(ksi[[i]]^2-1)], fhistar[[i,j,npz-
1]]};
distporos[[jjj]]={ L*ksi[[i]]*eta[[j]], L*Sqrt[(1-eta[[j]]^2)*(ksi[[i]]^2-1)], poros[[i,j,npz-1]]};
perfiltemp[[jjj]]={ x[[i,j]], y[[i,j]], Tw-2 uz (erreo[[i,j]]/2)^2/(condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]]
cpo[[i,j,1]])) * ((Tw-To) 48 condo[[i,j,1]]/(roo[[i,j,1]] cpo[[i,j,1]])/(11 uz (erreo[[i,j]]/2)^2))
(3/16+1/16 (sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2 /erreo[[i,j]])^4-1/4 (sqrt[y[[i,j]]^2+(x[[i,j]]^2
/erreo[[i,j]])^2)});
, {i,1,npksi};
, {j,1,npeta};

kkkk=0;
Do[kkkk=kkkk+1;
zeentY[[kkkk]]={ L*Sqrt[(1-eta[[1]]^2)*(ksi[[i]]^2-1)], fhistar[[i,1,2]]};
zemetY[[kkkk]]={ L*Sqrt[(1-eta[[1]]^2)*(ksi[[i]]^2-1)], fhistar[[i,1,0.5 npz]]};
zeoutY[[kkkk]]={ L*Sqrt[(1-eta[[1]]^2)*(ksi[[i]]^2-1)], fhistar[[i,1,npz-1]]};
, {i,1,npksi};

kkkk=0;
Do[kkkk=kkkk+1;
zeentX[[kkkk]]={ L*ksi[[1]]*eta[[j]], fhistar[[1,j,2]]};
zemetX[[kkkk]]={ L*ksi[[1]]*eta[[j]], fhistar[[1,j,0.5 npz]]};
zeoutX[[kkkk]]={ L*ksi[[1]]*eta[[j]], fhistar[[1,j,npz-1]]};
, {j,1,npeta-1}};

Do[kkkk=kkkk+1;
zeentX[[kkkk]]={ L*ksi[[i]]*eta[[npeta]], fhistar[[i,npeta,2]]};
zemetX[[kkkk]]={ L*ksi[[i]]*eta[[npeta]], fhistar[[i,npeta,0.5 npz]]};
zeoutX[[kkkk]]={ L*ksi[[i]]*eta[[npeta]], fhistar[[i,npeta,npz-1]]};
, {i,1,npksi};

```

```

jjj=0;
Do [Do [jjj=jjj+1;

SEy[[jjj]]={ (ksi[[i]]-1)/(L2/L-1), eta[[1]], z[[k]]/zmax, fhistar[[i,1,k]] };
SEycart[[jjj]]={ L*sqrt[(1-eta[[1]]^2)*(ksi[[i]]^2-1)], z[[k]], fhistar[[i,1,k]] };
SEx[[jjj]]={ (ksi[[i]]-1)/(L2/L-1), eta[[npeta]], z[[k]], fhistar[[i,npeta,k]] };
SExcart[[jjj]]={ L*ksi[[i]]*eta[[npeta]], z[[k]], fhistar[[i,npeta,k]] };

, {i,1,npksi}];
, {k,1,npz-1}];

Do [Do [jjj=jjj+1;

SEx[[jjj]]={ (ksi[[1]]-1)/(L2/L-1), eta[[j]], z[[k]]/zmax, fhistar[[1,j,k]] };
SExcart[[jjj]]={ L*ksi[[1]]*eta[[j]], z[[k]], fhistar[[1,j,k]] };

, {j,1,npeta-1}];
, {k,1,npz-1}];

auxgraffhi[[rrr]]=Table[listfhi[[i]], {i,1,npksi*npeta*npz}];
grafzeentY[[rrr]]=Table[zeentY[[i]], {i,1,npksi}];
grafzemetY[[rrr]]=Table[zemetY[[i]], {i,1,npksi}];
grafzeoutY[[rrr]]=Table[zeoutY[[i]], {i,1,npksi}];
grafzeentX[[rrr]]=Table[zeentX[[i]], {i,1,npksi+npeta-1}];
grafzemetX[[rrr]]=Table[zemetX[[i]], {i,1,npksi+npeta-1}];
grafzeoutX[[rrr]]=Table[zeoutX[[i]], {i,1,npksi+npeta-1}];
grafz0fhi[[rrr]]=Table[z0fhi[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafz0fhicart[[rrr]]=Table[z0fhicart[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafzL4fhi[[rrr]]=Table[zL4fhi[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafzL4fhicart[[rrr]]=Table[zL4fhicart[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafzL2fhi[[rrr]]=Table[zL2fhi[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafzL2fhicart[[rrr]]=Table[zL2fhicart[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafzLfhi[[rrr]]=Table[zLfhi[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafzLfhicart[[rrr]]=Table[zLfhicart[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafdistporos[[rrr]]=Table[distporos[[i]], {i,1,npksi*npeta}];
grafSEx[[rrr]]=Table[SEx[[i]], {i,1,(npksi+npeta-1)*(npz-1)}];
grafSExcart[[rrr]]=Table[SExcart[[i]], {i,1,(npksi+npeta-1)*(npz-1)}];
grafSEy[[rrr]]=Table[SEy[[i]], {i,1,npksi*(npz-1)}];
grafSEycart[[rrr]]=Table[SEycart[[i]], {i,1,npksi*(npz-1)}];
graffhi[[rrr]]=Table[{ksi[[i]], eta[[j]], z[[k]], fhi[[i,j,k]]}, {i,1,npksi}, {j,1,npeta}, {k,1,npz}];

```

```

fhimedio=Sum [ fhistar[[i,j,k]]*( L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-
eta[[j]]^2)] )*dksi*deta*dz,{i,2,npksi-1},{j,2,npeta-1},{k,2,npz-1}]/Sum[(
L^2*(ksi[[i]]^2-eta[[j]]^2)/Sqrt[(ksi[[i]]^2-1)*(1-eta[[j]]^2)] )*dksi*deta*dz,{i,2,npksi-
1},{j,2,npeta-1},{k,2,npz-1}];
graffhimed[[rrr]]={t,fhimedio};

```

```
t = t+dt]
```